

## ОПТИМИЗАЦИЯ РЕЖИМОВ ЦИКЛИЧЕСКИХ АДсорбЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ И УСТАНОВОК РАЗДЕЛЕНИЯ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

Е. И. Акулинин, Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий

*Кафедра «Технологии и оборудование пищевых и химических производств»,  
topr@topr.tstu.ru; ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия*

**Ключевые слова:** азот; вычислительный эксперимент; газозвдушная смесь; кислород; короткоцикловая безнагревная адсорбция; математическая модель; неопределенности; обогащение воздуха кислородом; оптимизация.

**Аннотация:** Проведен анализ циклического адсорбционного процесса и установки разделения газозвдушных смесей по способу короткоцикловой безнагревной адсорбции как объекта оптимизации. Выявлены: режимные (управляющие) переменные (длительность стадии адсорбции, давление на выходе компрессора, коэффициент обратного потока на регенерацию адсорбента, программы изменения во времени открытия впускных и выпускных клапанов установки); неопределенные параметры (состав, температура и давление исходной газозвдушной смеси); выходные переменные установки (концентрации кислорода, азота в продуктивном потоке газа, производительность установки, степень извлечения и приведенные затраты на производство кислорода с заданной чистотой 40 – 90 и выше об.%).

Сформулирована и решена одноэтапная задача оптимизации режимов стационарного периодического процесса адсорбционного разделения атмосферного воздуха и концентрирования кислорода по способу короткоцикловой адсорбции в условиях частичной неопределенности исходной информации при наличии ограничений по чистоте продуктивного газа, производительности установки и скорости газозвдушного потока в «лобовом слое» адсорбента. Предложен итерационный алгоритм ее решения.

Обозначения	
$B$ – параметр уравнения Дубинина–Радушкевича, $1/K^2$ ;	$d_{gr}$ – диаметр гранулы адсорбента, мм;
$c^{in}, c^{out}$ – составы соответственно исходной газозвдушной смеси и продуктивного газа, об.%;	$G^{out}, \underline{G}^{out}$ – расход продуктивного газа и его заданное значение, нл/мин, соответственно;
$c_1^{out}, c_{O_2}^{out}$ – заданные значения соответственно чистоты продуктивного газа и концентрации кислорода, об.%;	$K_v$ – пропускная способность клапанов, л/мин;
$D_A^{int}$ – внутренний диаметр обечайки адсорбера, м;	$L$ – высота слоя адсорбента, м;
$d, \underline{d}$ – соответственно вектор конструктивных параметров установки КБА и его заданные значения;	$n$ – количество адсорберов в установке КБА, шт.;
	$P_{ads}^{in}, P_{des}^{in}$ – давления на входе в адсорбер на стадиях адсорбции и десорбции, Па, соответственно;

<p><math>P_w</math> – давление на выходе компрессора, Па;</p> <p><math>P_1^{out}</math> – давление на отводном выходе установки, Па;</p> <p><math>\Delta P^+</math> – максимально допустимое значение перепада давления в адсорбционном слое адсорбера на стадиях адсорбции и десорбции, Па;</p> <p><math>Q</math> – производительность установки, нл/мин;</p> <p><math>T_g^{in}, T_g^{out}</math> – температуры соответственно исходной газовой смеси и продуктового газа, К;</p> <p><math>t_{CSS}</math> – время выхода установки КБА на стационарный периодический режим, с;</p> <p><math>u</math> – вектор режимных (управляющих) переменных;</p> <p><math>V_{res}</math> – объем ресивера, л;</p> <p><math>W_0</math> – предельный адсорбционный объем, см<sup>3</sup>/г;</p>	<p><math>x_n, \underline{x}_n</math> – нагрузка по сырью на установку КБА и ее заданное значение соответственно;</p> <p><math>y</math> – вектор выходных переменных установки КБА;</p> <p><math>\eta, \eta^*</math> – соответственно степень извлечения кислорода и ее среднее оптимальное значение, %;</p> <p><math>\theta</math> – коэффициент обратного потока, отн. ед.;</p> <p><math>v_g^+</math> – максимально допустимое значение скорости газовой смеси в слое адсорбента, м/с;</p> <p><math>\xi</math> – вектор неопределенных параметров;</p> <p><math>\tau_{ads}, \tau_c</math> – длительности соответственно стадии адсорбции и цикла «адсорбция – десорбция», с;</p> <p><math>\psi^{inl}(\tau), \psi^{ex}(\tau)</math> – программы изменения во времени степени открытия соответственно впускных и выпускных клапанов установки</p>
--	--

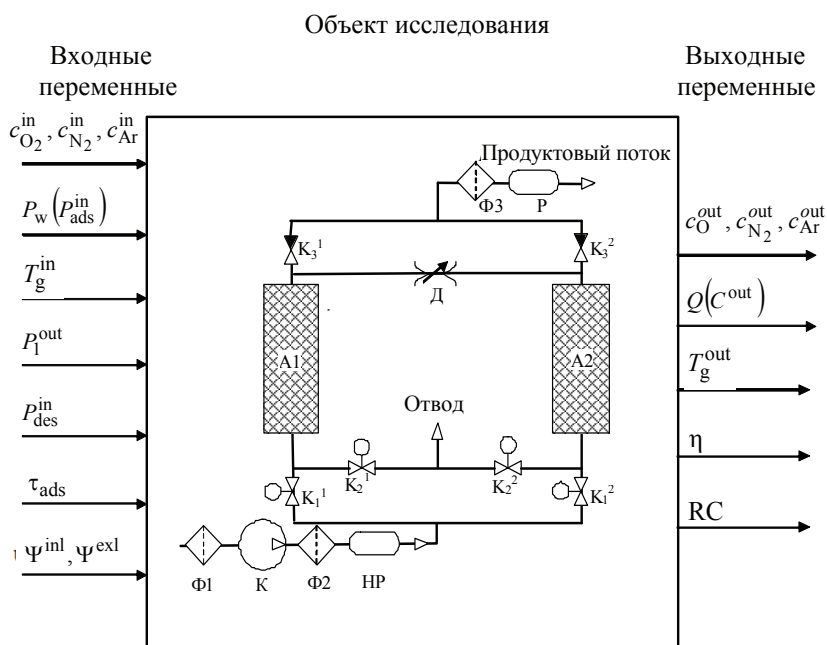
### Введение

Анализ циклического процесса и установки разделения газовых смесей по способу короткоциклового безнагревной адсорбции (**КБА**) как объекта оптимизации предусматривает определение входных (независимых) и выходных (зависимых) переменных объекта, режимных (управляющих) переменных и неопределенных параметров (возмущающих воздействий) [1]. К входным относятся переменные, которые присутствуют в питании установки КБА (нагрузка по сырью, энергии и т.п.), представленной на рис. 1, где А1, А2 – адсорберы; Д – дроссель; К – клапаны; НР – напорный ресивер; Р – ресивер; Ф – фильтры. Входные переменные включают в себя управляющие (которые могут целенаправленно изменяться) переменные и возмущающие воздействия, изменяющиеся случайным образом. Выходные переменные характеризуют состояние объекта оптимизации и зависят от входных режимных (управляющих) переменных и возмущающих воздействий (см. рис. 1).

Из анализа результатов численного исследования свойств и режимов функционирования технологического процесса и установки разделения атмосферного воздуха и концентрирования кислорода по способу КБА следует [1], что входными переменными для установки КБА обогащения воздуха кислородом являются:

$c^{in} = (c_{O_2}^{in}, c_{N_2}^{in}, c_{Ar}^{in})$  и  $T^{in}$ ;  $P_w$  или  $P_{ads}^{in}$ ;  $P_1^{out}$ ;  $\tau_{ads}$ ;  $\psi^{inl}(\tau)$ ,  $\tau \in [0, \tau_{ads}]$   $\psi^{ex}(\tau)$ ,  $\tau \in [\tau_{ads}, \tau_c]$ .

Выходные переменные для технологического процесса и установки адсорбционного извлечения кислорода из атмосферного воздуха:  $c^{out} = (c_{O_2}^{out}, c_{N_2}^{out}, c_{Ar}^{out})$ ; производительность установки или  $G^{out}$  с заданной чистотой 40 – 90 об.% и выше;  $T^{out}$ ;  $\eta$ ; приведенные затраты RC на производство или прибыль от производства обогащенного кислородом воздуха.



**Рис. 1. Результаты анализа циклического адсорбционного процесса и установки разделения газовых смесей как объекта оптимизации**

Эффективность функционирования технологического процесса и установки адсорбционного разделения и очистки газовых смесей может оцениваться различными технико-экономическими показателями  $\varphi(x_n, u, d, y(\xi), \xi)$ , (критериями оптимальности) функционирования установки, например,  $\eta$  целевого продукта [2 – 5]; приведенными затратами RC на производство продуктового газа [6 – 10]; прибылью от эксплуатации установки КБА за определенный период времени [11] и др. Вычисление значений критериев оптимальности осуществляется в режиме стационарного периодического процесса, то есть интегрированием дифференциальных уравнений в частных и обыкновенных производных, описывающих динамику процесса адсорбционного разделения и очистки газовых смесей, на отрезке времени  $[0, t_{CSS}]$ ,  $\xi \in \Xi = \{ \xi_p : \xi_p^- \leq \xi_p \leq \xi_p^+ \}$ ,  $p = \overline{1, n_\xi}$ .

Поскольку критерий оптимальности  $\varphi(x_n, u, d, y(\xi), \xi)$ , например, технологический или экономический показатель, включает вектор случайных неопределенных параметров  $\xi$ ; в этом случае в качестве целевой функции в задаче оптимизации будем использовать среднее значение  $M_\xi(\varphi(x_n, u, d, y(\xi), \xi))$  критерия, где  $M_\xi(\cdot)$  – символ математического ожидания.

При фиксированных значениях  $d, u$  и  $\xi$  можно рассматривать уравнения математической модели динамики технологического процесса разделения и очистки газовых смесей как систему нелинейных дифференциальных уравнений с частными и обыкновенными производными с начальными и граничными условиями, а также конечных уравнений [12] для определения вектора  $y$ . Следовательно,  $y$  – неявная вектор-функция переменных  $d, u$  и  $\xi$ :  $y = y(d, u, \xi)$ . Явный вид данной функции, как правило, неизвестен, поэтому для каждой совокупности  $d, u, \xi$  выходные координаты  $y$  технологического процесса и установки адсорбционного разделения и очистки газовых смесей будем находить численным решением уравнений математической модели [12] в течение времени переходного процесса  $t = t_{CSS}$  до установления режима стационарного периодического процесса [13].

Предположим, что во время эксплуатации установки КБА неопределенные параметры  $\xi$  либо постоянны, либо меняются достаточно медленно. Поэтому задача оптимизации режимов функционирования будет ставиться как аргументная задача оптимизации управляющих переменных установки КБА в режиме стационарного периодического процесса, а оптимальный режим, найденный решением такой оптимизационной задачи, может быть реализован с помощью системы автоматической стабилизации.

Цель статьи – разработка основных подходов к формализации (математической постановке) задачи интенсификации циклических адсорбционных процессов получения высокочистых газов с учетом интервальной неопределенности исходной информации, численное исследование задачи оптимизации режимов функционирования циклических процессов адсорбционного обогащения воздуха кислородом.

### Постановка задачи оптимизации режимов функционирования установки КБА в условиях частичной неопределенности информации

Постановка задачи оптимизации режимов технологического процесса и установки разделения и очистки газовых смесей в условиях частичной неопределенности исходной информации заключается в определении режимных переменных  $u^*$  таких, при которых достигается среднее значение целевой функции (критерия оптимальности)  $\varphi(u, d, y(t_{CSS}), \xi)$ :

$$I(u^*) = \min_{d, u} \left\{ M_{\xi}(\varphi(u, d, y(t_{CSS}), \xi)) \approx \sum_{j \in J_1} \omega_j \varphi(u, d, y(t_{CSS}), \xi^j) \right\}$$

и обеспечивается сохранение работоспособности установки (выполнение ограничений технологического регламента), несмотря на случайные изменения вектора  $\xi$  в пределах области неопределенности  $\Xi$ ;  $\omega_i$  – весовые коэффициенты квадратурной формулы, аппроксимирующей  $M_{\xi}(\varphi(u, d, y(t_{CSS}), \xi))$ .

Характерной особенностью одноэтапной задачи оптимизации режимов функционирования установки КБА является невозможность уточнения информации относительно неопределенных параметров  $\xi = \xi_p, p = \overline{1, n_{\xi}}$  в процессе ее эксплуатации. Для решения задачи одноэтапной оптимизации будем применять эвристический итерационный подход, позволяющий свести исходную задачу оптимизации в условиях интервальной неопределенности исходных данных к решению последовательности детерминированных задач нелинейного программирования с использованием высокоэффективного метода последовательного квадратичного программирования (*англ.* Sequential Quadratic Programming – SQP) [14].

Задача оптимизации технологического процесса и установки для извлечения продуктового газа по способу КБА может быть сформулирована следующим образом: при заданных  $x_H, d$  установки КБА и диапазонах изменения  $\xi = \{c^{in}, T_g^{in}, P_1^{out}\}$  требуется определить режимные переменные  $u^* = \{\tau_{ads}, \tau_{des}, P_w, P_{des}^{in}, \theta, \psi_{\lambda}^{inl}, \psi_{\lambda}^{ex}, \lambda = 1, 2, 3, \dots\}$  технологического оборудования установки КБА такие, при которых достигается экстремальное (минимальное или максимальное) значение целевой функции (критерия оптимальности)  $M_{\xi}(\varphi(u, d, y(t_{CSS}), \xi)) \approx \sum_{j \in J_1} \omega_j \varphi(u, d, y(t_{CSS}), \xi^j)$  ( $\eta$ , приведенных затрат RC, прибыли, чистоты продуктового газа, энергетических затрат на осуществление процесса разделения газовой смеси и извлечения продуктового газа и др.) в режиме стационарного периодического процесса, то есть при  $t = t_{CSS}$ :

$$I(u^*) = \sum_{j \in j_1} \omega_j \varphi(u^*, d, y(t_{CSS}), \xi^j) = \min_{u \in U} \sum_{j \in j_1} \omega_j \varphi(u, d, y(t_{CSS}), \xi^j) \quad (1)$$

выполняются связи в форме уравнений математической модели [12] и ограничения:

– по чистоте  $c_1^{\text{out}}$  продуктового газа

$$\max_{\xi \in \Xi} (g_1(u, y(t_{CSS}), \xi) = c_1^{\text{out}} - c_1^{\text{out}}(u, y(t_{CSS}), \xi) \leq 0); \quad (2)$$

– производительности  $G^{\text{out}}(u, y(t_{CSS}), \xi)$  установки КБА

$$\max_{\xi \in \Xi} (g_2(u, y(t_{CSS}), \xi) = G^{\text{out}} - G^{\text{out}}(u, y(t_{CSS}), \xi) \leq 0); \quad (3)$$

– скорости газовой смеси в «лобовом» слое адсорбента

$$\max_{\xi \in \Xi} (g_3(u, \xi) = \max_{\tau \in [0, \tau_c]} (v_g(u, \xi)) - v_g^+ \leq 0); \quad (4)$$

– перепаду давления в слое адсорбента на стадиях адсорбции и десорбции:

$$\max_{\xi \in \Xi} (g_4(u, \xi) = \max_{\tau \in [0, \tau_{\text{ads}}]} (\Delta P_{\text{ads}}(u, \xi)) - \Delta P^+ \leq 0); \quad (5)$$

$$\max_{\xi \in \Xi} (g_5(u, \xi) = \max_{\tau \in [0, \tau_{\text{des}}]} (\Delta P_{\text{des}}(u, \xi)) - \Delta P^+ \leq 0); \quad (6)$$

– диапазонам изменения режимных  $u \in U$  переменных и неопределенных  $\xi \in \Xi$  параметров:

$$u^- \leq u \leq u^+; \quad \xi^- \leq \xi \leq \xi^+. \quad (7)$$

### Обоснование алгоритма решения оптимизационных задач в условиях частичной неопределенности информации

Опишем один из возможных алгоритмов решения одноэтапной задачи оптимизации режимов технологического процесса адсорбционного разделения и очистки газовых смесей по способу КБА в постановке (1) – (7).

Априори введем множества аппроксимационных  $S_1 = \{\xi^l : \xi^l \in \Xi, l \in j_1\}$  и «критических»  $S_2 = \{\xi^l : \xi^l \in \Xi, l \in j_2\}$  точек, в которых могут нарушаться ограничения одноэтапной задачи оптимизации. Поскольку функции  $g_j(\cdot)$ ,  $j = \overline{1, p}$ , выпуклы, то в начальное множество критических точек  $S_2^{(0)}$  целесообразно включить угловые точки  $\xi_p^-, \xi_p^+ = \overline{1, n_\xi}$  области неопределенности (многогранника)  $\Xi \subset E^{n_\xi}$ .

Сформулируем вспомогательную задачу (А) нелинейного программирования: при заданных значениях нагрузки  $\underline{x}_H$  по сырью и конструктивных параметров  $\underline{d}$  установки КБА требуется определить векторы режимных параметров  $\hat{u} \in U$ , такие что

$$I(\hat{u}) = \min_{u \in U} \sum_{j \in j_1} \omega_j \varphi(u, y, \xi^j) \quad (\text{А})$$

при связях в форме уравнений математической модели динамики функционирования установки КБА при обогащении воздуха кислородом [12] и ограничениях:

$$g_{\lambda}(u, y, \xi^j) \leq 0, \lambda = \overline{1, p}; \quad \xi^j \in S_1, j \in J_1;$$

$$g_{\lambda}(u, y, \xi^l) \leq 0, \lambda = \overline{1, p}; \quad \xi^l \in S_2, l \in J_2.$$

Алгоритм решения задачи одноэтапной оптимизации состоит из следующих шагов.

**Шаг 1.** Задать начальный номер итерации  $k = 1$ , совокупность аппроксимационных точек  $\xi^j, j \in J_1; \xi^j \in S_1$ , начальную совокупность критических точек  $S_2^{(0)} = \{\xi^l : \xi^l \in \Xi, l \in j_2^{(k-1)}\}$ , режимных переменных  $u^{(0)}$ .

**Шаг 2.** Найти решение вспомогательной задачи (А): требуется определить векторы режимных переменных  $\hat{u}^{(k)} \in U$ , такие что

$$I(\hat{u}^{(k)}) = \min_u \sum_{j \in j_1} \omega_j \varphi(u, y(t_{CSS}), \xi^j)$$

при связях в форме уравнений математической модели динамики функционирования установки КБА при обогащении воздуха кислородом [12] и ограничениях:

$$g_{\lambda}(u, y(t_{CSS}), \xi^j) \leq 0, \lambda = \overline{1, p}; \quad \xi^j \in S_1, j \in J_1;$$

$$g_{\lambda}(u, y(t_{CSS}), \xi^l) \leq 0, \lambda = \overline{1, p}; \quad \xi^l \in S_2^{(k-1)}, l \in J_2,$$

и определить значения вектора  $\hat{u}^{(k)}$  и целевой функции  $I(\hat{u}^{(k)})$ .

**Шаг 3.** Проверить выполнение ограничений: решить  $p$  экстремальных задач:  $\max_{\xi \in \Xi} (g_{\lambda}(\hat{u}^{(k)}, y(t_{CSS}), \xi))$ ,  $\lambda = \overline{1, p}$ , и определить  $p$  точек  $\hat{\xi}^{(k), \lambda}, j = \overline{1, p}$ .

**Шаг 4.** Образовать множество точек  $\xi^{(k)}$ , в которых нарушаются ограничения:

$$R^{(k)} = \{\xi^{(k)} : g_{\lambda}(u^{(k)}, y(t_{CSS}), \xi^{(k), \lambda}) > 0, \lambda = \overline{1, p}\}.$$

Если это множество пустое, то решение задачи получено, то есть  $u^* = \hat{u}^{(k)}$  и алгоритм заканчивает свою работу; в противном случае перейти к шагу 5.

**Шаг 5.** Сформировать новое множество критических точек  $S_2^{(k)} = S_2^{(k-1)} \cup R^{(k)}$ , положить  $k := k + 1$ , задать  $u^{(k)} = \hat{u}^{(k-1)}$  и перейти к шагу 2.

Определенным недостатком представленного алгоритма решения задачи одноэтапной оптимизации (1) – (7) является увеличение числа критических точек на каждой итерации и, соответственно, числа учитываемых ограничений. Однако число итераций при решении задачи оптимизации при использовании данного алгоритма, как правило, не превышает 3 – 5, что делает его применение вполне эффективным.

### **Исследование задачи оптимизации режимов работы циклического адсорбционного процесса обогащения воздуха кислородом**

Исходные данные для проведения вычислительных экспериментов по исследованию задачи оптимизации режимов работы циклического адсорбционного процесса обогащения воздуха кислородом, осуществляемого в двухадсорберной установке КБА [1], приведены в табл. 1.

**Исходные данные для проведения вычислительных экспериментов  
в постановке (1) – (7)**

Исходные данные задачи	Значения
Состав исходной газовой смеси, $k = 1, 2, 3$	1 – O <sub>2</sub> , 2 – N <sub>2</sub> , 3 – Ar
Тип адсорбента	NaX
$W_0$ , см <sup>3</sup> /г	0,262
$B \times 10^{-6}$ , 1/К <sup>2</sup>	2,2
Конструктивные параметры:	
$n$ , шт.	2
$D_A^{\text{int}}$ , м	0,04
$L$ , м	0,2
$d_{\text{gr}}$ , мм	1,6
$K_v$ , л/мин	15
$V_{\text{res}}$ , л	2
Предельные значения ограничений:	
по $c_{\text{O}_2}^{\text{out}}$	40; 50; 60; 70; 80; 90; 95,5
$G^{\text{out}}$ , нл/мин	0,5; 1; 1,5; 2
$v_g^+$ , м/с	0,22
Режимные переменные:	
$\tau_{\text{ads}}$ , с	0,5...30
$P_w$ , Па	$(2...6) \times 10^5$
$P_{\text{des}}^{\text{in}}$ , Па	$1 \times 10^5$
$\theta$ , отн. ед.	0...6
$\Psi_{\lambda}^{\text{inl}}, \Psi_{\lambda}^{\text{ex}}$ , отн. ед.	0...1
Неопределенные параметры:	
концентрации $c^{\text{in}}$ компонентов исходной газовой смеси, об. %:	
кислорода $c_{\text{O}_2}^{\text{in}}$	$20 \pm 1$
азота $c_{\text{N}_2}^{\text{in}}$	$78 \pm 1$
аргона и примесей $c_{\text{Ar}}^{\text{in}}$	1
Температура $T_g^{\text{in}}$ исходной газовой смеси, К	293...303
Давление $P_1^{\text{out}} \times 10^{-5}$ на отводном выходе установки, Па	0,75...1

Вычислительные эксперименты по исследованию задачи оптимизации режимов циклического адсорбционного процесса обогащения воздуха кислородом проводились для различных предельных значений чистоты  $\underline{c}_{O_2}^{out}$  кислорода и производительности  $\underline{G}^{out}$  установки КБА (см. табл. 1).

На рисунке 2 представлены графики зависимости оптимальных средних значений степени извлечения  $\bar{\eta}^*$  и режимных переменных  $u^* = \{\tau_{ads}^*, P_w^*, \theta^*\}$  от предельных значений чистоты кислорода  $\underline{c}_{O_2}^{out}$  и производительности  $\underline{G}^{out}$  установки КБА.

Анализ графиков на рис. 2, а, показывает, что при увеличении предельного значения чистоты производяемого кислорода  $\underline{c}_{O_2}^{out}$  от 40 до 60 об.% оптимальное среднее значение степени извлечения  $\bar{\eta}^*$  составляет  $\sim 78\%$ , коэффициент  $\theta^*$

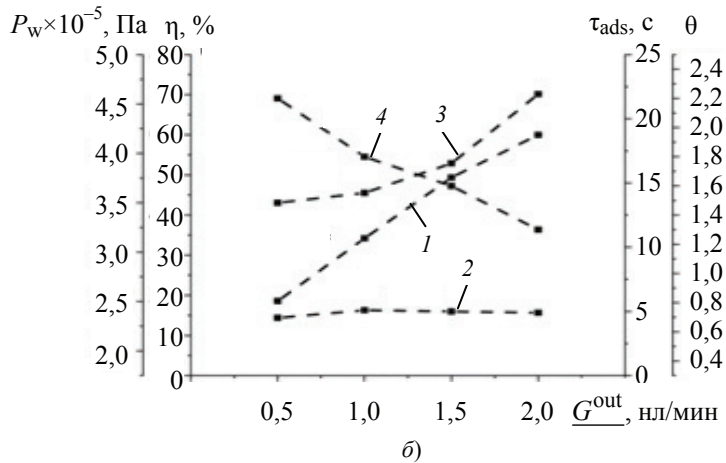
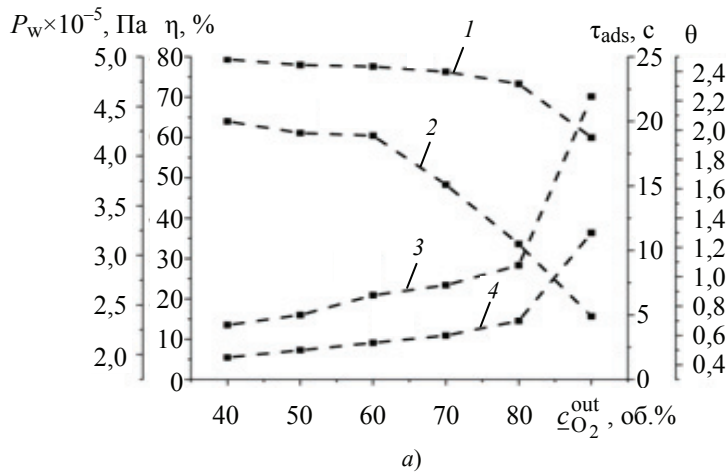


Рис. 2. Результаты решения задачи оптимизации (1) – (7) при различных значениях предельной чистоты кислорода  $\underline{c}_{O_2}^{out}$  и производительности  $\underline{G}^{out}$  установки КБА:

а – при  $\underline{G}^{out} = 2$  нл/мин; б – при  $\underline{c}_{O_2}^{out} = 90$  об.%; 1 –  $\bar{\eta}^*$ ; 2 –  $\tau_{ads}^*$ ; 3 –  $P_w^*$ ; 4 –  $\theta^*$



обратного потока увеличивается от 0,4 до 0,6, давление  $P_w^*$  на выходе компрессора увеличивается от  $2,3 \times 10^5$  до  $2,6 \times 10^5$  Па, а длительность стадии адсорбции  $\tau_{ads}^*$  уменьшается от 20 до 19 с; в диапазоне изменения  $c_{O_2}^{out} \in [60 - 80]$  об.% величина  $\bar{\eta}^*$  составляет  $\sim 75\%$ , давление на выходе компрессора  $P_w^*$  и коэффициент обратного потока  $\theta^*$  увеличиваются от  $2,6 \times 10^5$  до  $2,9 \times 10^5$  Па и от 0,55 до 0,7 отн. ед. соответственно, а длительность стадии адсорбции  $\tau_{ads}^*$  уменьшается от 19 до 10 с. Для обеспечения заданной чистоты продуктового кислорода  $c_{O_2}^{out} = 90$  об.% и производительности  $\underline{G}^{out} = 2$  нл/мин установки КБА (см. рис. 2, б) необходимо увеличить  $P_w^*$  до  $4,6 \times 10^5$  Па и  $\theta^*$  до 1,3, а  $\tau_{ads}^*$  уменьшить до 5 с; при этом среднее значение степени извлечения  $\bar{\eta}^*$  кислорода составит  $\sim 60\%$ .

Результаты других вычислительных экспериментов по исследованию задачи оптимизации режимов циклического адсорбционного процесса обогащения воздуха кислородом в постановке (1) – (7) представлены в табл. 2 и 3.

Из анализа результатов решения задачи оптимизации режимов циклического адсорбционного процесса обогащения воздуха в постановке (1) – (7), представленных в табл. 2, следует, что при увеличении заданного значения  $c_{O_2}^{out}$  чистоты

Таблица 2

**Результаты решения задачи оптимизации режимов работы циклического адсорбционного процесса обогащения воздуха кислородом в постановке (1) – (7) при  $\underline{G}^{out} = 2$  нл/мин**

Варьируемые параметры	$c_{O_2}^{out}$ , об.%						
	40	50	60	70	80	90	95,5
$\tau_{ads}^*$ , с	20,0	19,1	18,9	15,1	10,5	4,9	2,2
$P_w^* \times 10^{-5}$ Па	2,3	2,4	2,6	2,7	2,9	4,6	6
$\theta^*$ , отн. ед.	0,45	0,5	0,55	0,6	0,7	1,3	2,8
$\Psi_{\lambda}^{inl*}$ , $\lambda = 1, 2, 3, \dots$ , отн. ед.	0,26; 0,83; 1	0,24; 0,71; 1	0,21; 0,54; 1	0,19; 0,47; 1	0,17; 0,39; 0,95; 1	0,11; 0,19; 0,33; 0,56; 1	0,05; 0,18; 0,34
$\Psi_{\lambda}^{ex*}$ , $\lambda = 1, 2, 3, \dots$ , отн. ед.	1; 1; 0,75; 0,52	1; 1; 0,81; 0,51	1; 1; 0,88; 0,74; 0,54	1; 1; 1; 0,84; 0,64	1; 1; 1; 0,82; 0,67	1; 1; 1; 0,64; 0,42	1; 0,91; 0,82
$\bar{\eta}^*$ , отн. ед.	79,4	78,0	77,6	76,3	73,3	60,0	5,5
$c_{O_2}^{out}$ , об.%	40	50	60	70	81,3	91,5	95,5
$\underline{G}^{out}$ , нл/мин	4,1	3,2	2,6	2,3	2	2	1,3

Таблица 3

Результаты решения задачи оптимизации (1) – (7) при  $c_{O_2}^{out} = 90 \text{ об.}\%$

Варьируемые параметры	$G^{out}$ , нл/мин			
	0,5	1,0	1,5	2,0
$\tau_{ads}^*$ , с	4,5	5,1	5,0	4,9
$P_w^* \times 10^{-5}$ Па	3,5	3,6	3,9	4,6
$\theta^*$ , отн. ед.	2,2	1,8	1,6	1,3
$\Psi_\lambda^{inl*}$ , $\lambda = 1, 2, 3, \dots$ , отн. ед.	0,13; 0,27; 0,56; 1	0,13; 0,26; 0,52; 1	0,11; 0,22; 0,42; 0,81; 1	0,11; 0,19; 0,33; 0,56; 1
$\Psi_\lambda^{ex*}$ , $\lambda = 1, 2, 3, \dots$ , отн. ед.	1; 1; 0,45; 0,33	1; 1; 0,61; 0,44	1; 1; 0,78; 0,53; 0,41	1; 1; 1; 0,64; 0,42
$\bar{\eta}^*$ , отн. ед.	18,6	34,2	49,4	60,0
$c_{O_2}^{out}$ , об. %	90,0	90,0	90,1	91,5
$G^{out}$ , нл/мин	0,6	1,0	1,5	2,0

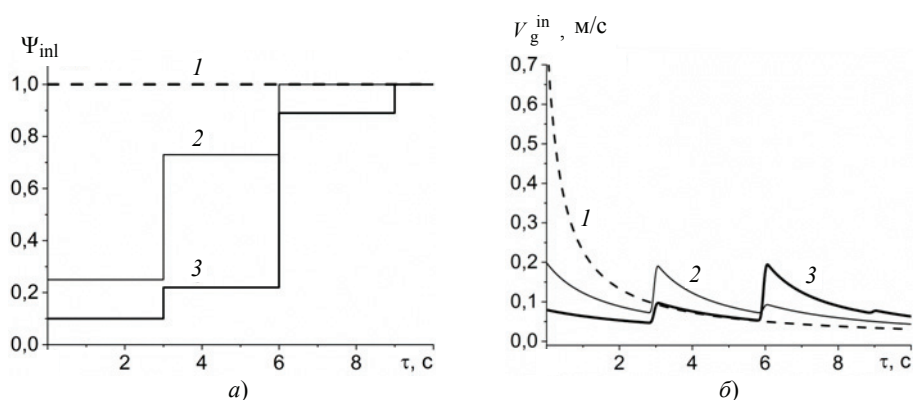
продуктового газа от 40 до 95,5 об.% среднее значение степени извлечения  $\bar{\eta}^*$  уменьшается от 79,4 до 5,5 %; в свою очередь давление  $P_w^*$  на стадии адсорбции и коэффициент обратного потока  $\theta^*$  возрастают от  $2,3 \times 10^5$  до  $6,0 \times 10^5$  Па и от 0,45 до 2,8 отн. ед. соответственно. Следует также отметить уменьшение продолжительности стадии адсорбции  $\tau_{ads}^*$  от 20 до 2,2 с и тот факт, что при увеличении требуемой концентрации кислорода до 95,5 об.% заданная производительность  $G^{out} = 2$  нл/мин двухадсорберной установки КБА не обеспечивается (достигается всего лишь  $G^{out} = 1,3$  нл/мин) из-за сокращения длительности стадии адсорбции  $\tau_{ads}^*$  до 2,2 с и необходимости обеспечения ограничения по скорости  $v_g^+ = 0,22$  м/с (впускные клапаны не успевают полностью открыться), а среднее значение степени извлечения  $\bar{\eta}^*$  уменьшается до 5,5 %. Очевидно, для обеспечения заданной производительности  $G^{out} = 2$  нл/мин двухадсорберной установки КБА необходимо увеличивать конструктивные размеры  $d$  адсорберов установки КБА и/или диапазон давлений  $P_w$  (выше  $6 \times 10^5$  Па) на выходе компрессора.

Из анализа результатов решения задачи оптимизации режимов циклического адсорбционного процесса обогащения воздуха в постановке (1) – (7), представленных в табл. 3, следует, что при увеличении заданного значения  $G^{out}$  произво-

длительности установки КБА от 0,5 до 2 нл/мин среднее значение степени извлечения  $\bar{\eta}^*$  и давление  $P_w^*$  на стадии адсорбции увеличиваются от 18,6 до 60 % и от  $3,5 \times 10^5$  до  $4,6 \times 10^5$  Па соответственно; при этом длительность стадии адсорбции  $\tau_{ads}^*$  не изменяется и остается на уровне 5 с, а коэффициент обратного потока  $\theta^*$  уменьшается от 2,2 до 1,3 отн. ед.

Еще одним важным (с точки зрения ресурсосбережения гранулированного адсорбента) управляющим ресурсом установки КБА является программа изменения во времени степени открытия впускных (выпускных) управляющих клапанов. При скачкообразном полном открытии впускного/выпускного клапана (кривая 1, рис. 3, а) скорость газового потока в «лобовом» слое адсорбента (кривая 1, рис. 3, б) может превышать некоторую критическую скорость  $v_g^+$  (в данном случае  $v_g^+ = 0,22$  м/с), при достижении которой на гранулы действуют боковые силы Кармана, вызывающие осциллирующие смещения гранул относительно друг друга [15]. Этот деструктивный эффект с большой вероятностью проявляется при смене стадий, когда возникают большие градиенты давления; поэтому важно регулировать скорости газовых потоков в переходных периодах процесса. Такое регулирование можно обеспечить с помощью программы ступенчатого (осторожного) открытия впускных (выпускных) управляющих клапанов, при этом количество и шаг ступеней до полного открытия могут быть различными. На рисунке 3, а, (кривые 2, 3) представлены два варианта программ ступенчатого открытия впускных клапанов, которые не допускают наступление критической скорости  $v_g^+ = 0,22$  м/с и предохраняют адсорбент от истирания.

Анализ графиков на рис. 3, а, (программы 2, 3) показывает, что при реализации программы 2 ступенчатого открытия впускного клапана достигается более высокая скорость газового потока в «лобовом» слое адсорбента по сравнению с программой 3 (кривые 2, 3, рис. 3, б). Таким образом, при предохранении гранул адсорбента от истирания должна быть определена такая программа ступенчатого («осторожного») открытия впускных и выпускных клапанов, при которой скорость в «лобовом» слое адсорбента не должна превышать  $v_g^+ = 0,22$  м/с. Поиск такой программы ступенчатого открытия клапанов должен



**Рис. 3. Программа изменения во времени степени открытия впускных клапанов (а) и динамика изменения скорости газового потока (б) в «лобовом» слое адсорбента на стадии адсорбции:**

1 – скачкообразное открытие; 2, 3 – ступенчатое открытие

быть предусмотрен при постановке задач оптимизации режимов функционирования и оптимального проектирования установок КБА; при этом программы ступенчатого открытия клапанов должны входить в состав поисковых переменных оптимизационной задачи наряду с другими режимными переменными и конструктивными параметрами.

### Заключение

Анализ результатов исследования решения задачи оптимизации режимов функционирования установки КБА показал:

1) при требуемых значениях производительности 2 нл/мин установки КБА и чистоты 40 – 60 об.% продуктового кислорода среднее значение степени извлечения кислорода составляет ~ 78 %, а при 60 – 80 об.% – ~ 75 %;

2) в случае необходимости обеспечения чистоты кислорода ~ 90 об.% при заданной производительности  $G^{\text{out}} = 2$  нл/мин среднее значение степени извлечения уменьшается до 60 %;

3) в случае увеличения заданной чистоты  $c_{\text{O}_2}^{\text{out}}$  продуктового газа выше  $c_{\text{O}_2}^{\text{out}} > 90$  об.% резко снижаются среднее значение степени извлечения  $\eta^{-*}$  и производительность  $G^{\text{out}}$  установки КБА, например, при  $c_{\text{O}_2}^{\text{out}} = 95,5$  об.% имеем  $\eta^{-*} = 2$  нл/мин и  $G^{\text{out}} = 1,3$  нл/мин.

### Список литературы

1. Numerical Study of the Dynamics of Air Separation Process by Pressure Swing Adsorption / E. Akulinin, O. Golubyatnikov, D. Dvoretzky, S. Dvoretzky // Вестн. Южно-Уральского гос. ун-та. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2019. – Т. 12, № 4. – С. 95 – 103. doi: 10.14529/mmp190407

2. Nikolic, D. Modelling and Optimization of Hybrid PSA/Membrane Separation Processes / D. Nikolic, E. S. Kikkindes // Adsorption. – 2015. – Vol. 21, No. 4. – P. 283 – 305. doi: 10.1007/s10450-015-9670-z

3. Agarwal, A. Superstructure-Based Optimal Synthesis of Pressure Swing Adsorption Cycles for Precombustion CO<sub>2</sub> Capture / A. Agarwal, L. Biegler, S. Zitney // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2010. – Vol. 49, No. 11. – P. 5066 – 5079. doi: 10.1021/ie900873j

4. Optimal Synthesis of Periodic Sorption Enhanced Reaction Processes with Application to Hydrogen Production / A. Arora, I. Bajaj, S. Iyer, M. Hasan // Computers & Chemical Engineering. – 2018. – Vol. 115. – P. 89 – 111. doi: 10.1016/j.compchemeng.2018.04.004

5. Simulation and Optimization for Hydrogen Purification Performance of Vacuum Pressure Swing Adsorption / W. Tao, S. Ma, J. Xiao [et al.] // Energy Procedia. – 2019. – Vol. 158. – P. 1917 – 1923. doi: 10.1016/j.egypro.2019.01.441

6. Optimized Hollow Fiber Sorbents and Pressure Swing Adsorption Process for H<sub>2</sub> Recovery / B. Ohs, J. Lohaus, D. Marten [et al.] // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2018. – Vol. 57, No. 14. – P. 5093 – 5105. doi: 10.1021/acs.iecr.7b05368

7. Dowling, A. Large-Scale Optimization Strategies for Pressure Swing Adsorption Cycle Synthesis / A. Dowling, S. Vetukuri, L. Biegler // AIChE Journal. – 2012. – Vol. 58, No. 12. – P. 3777 – 3791. doi: 10.1002/aic.13928

8. Ohs, B. Optimizing Hybrid Membrane–Pressure Swing Adsorption Processes for Biogenic Hydrogen Recovery / B. Ohs, M. Falkenberg, M. Wessling // *Chemical Engineering Journal*. – 2019. – Vol. 364. – P. 452 – 461. doi: 10.1016/j.cej.2019.01.136
  9. Operating Optimization and Economic Evaluation of Multicomponent Gas Separation Process Using Pressure Swing Adsorption and Membrane Process / H. Kim, J. Lee, S. Lee [et al.] // *Korean Chemical Engineering Research*. – 2015. – Vol. 53, No. 1. – P. 31 – 38. doi: 10.9713/kcer.2015.53.1.31
  10. Boukoulava, F. Global Optimization of General Constrained Grey-Box Models: New Method and Its Application to Constrained PDEs for Pressure Swing Adsorption / F. Boukoulava, M. Hasan, C. Floudas // *Journal of Global Optimization*. – 2015. – Vol. 67, No. 1-2. – P. 3 – 42. doi: 10.1007/s10898-015-0376-2
  11. Simulation and Optimization of Small Oxygen Pressure Swing Adsorption Units / J. C. Santos, A. F. Portugal, F. D. Magalhaes, A. Mendes // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 2004. – Vol. 43, No. 26. – P. 8328 – 8338. doi: 10.1021/ie0497011
  12. Оптимальное проектирование короткоцикловых адсорбционных установок для концентрирования кислорода / Е. И. Акулинин, О. О. Голубятников, Д. С. Дворецкий, С. И. Дворецкий // *Известия Санкт-Петербургского гос. технол. ин-та (техн. ун-та)*. – 2017. – № 41 (67). – С. 119 – 127.
  13. Biegler, L. Recent Advances in Simulation and Optimal Design of Pressure Swing Adsorption Systems / L. Biegler, L. Jiang, V. Fox // *Separation & Purification Reviews*. – 2004. – Vol. 33, No. 1. – P. 1 – 39. doi: 10.1081/SPM-120039562
  14. Optimization and Analyses of Pressure Swing Adsorption Processes for Oxygen Production From Air under Uncertainty / E. Akulinin, O. Golubyatnikov, D. Dvoretzky, S. Dvoretzky // *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly*. – 2020. – Vol. 26, No. 1. – P. 89 – 104. doi: 10.2298/CICEQ190414028A
  15. The Optimal Design of Pressure Swing Adsorption Process of Air Oxygen Enrichment Under Uncertainty / E. Akulinin, O. Golubyatnikov, D. Dvoretzky, S. Dvoretzky // *Вестн. Южно-Уральского гос. ун-та. Серия: Математическое моделирование и программирование*. – 2020. – Vol. 13, No. 2. – P. 5 – 16. doi: 10.14529/mmp200201
- 

## **Optimization of Cyclic Adsorption Processes and Gas Mixture Separation Plants**

**E. I. Akulinin, D. S. Dvoretzky, S. I. Dvoretzky**

*Department of Technologies and Equipment for Food and Chemical Production,  
topt@topt.tstu.ru; TSTU, Tambov, Russia*

**Keywords:** nitrogen; computational experiment; gas-air mixture; oxygen; pressure swing adsorption; mathematical model; uncertainty; air enrichment with oxygen; optimization.

**Abstract:** The analysis of the cyclic adsorption process and the installation of separation of gas mixtures by the method of pressure swing adsorption as an object of optimization have been carried out. The study found operating (control) variables (the duration of the adsorption stage, the pressure at the compressor outlet, the coefficient of reverse flow for the regeneration of the adsorbent, the program

of changes in the opening time of the inlet and outlet valves of the installation); undefined parameters (composition, temperature and pressure of the initial gas-air mixture); output variables of the installation (concentration of oxygen, nitrogen in the product gas flow, the productivity of the installation, the degree of extraction and reduced costs for the production of oxygen with a given purity of 40 - 90 and higher vol.%). A one-stage problem of optimization of the regimes of a stationary periodic process of adsorption separation of atmospheric air and oxygen concentration was formulated and solved by the method of short-cycle adsorption under conditions of partial uncertainty of the initial information in the presence of restrictions on the purity of the product gas, the productivity of the installation and the rate of gas flow in the "frontal layer" of the adsorbent. An iterative algorithm for its solution is proposed.

### References

1. Akulinin E., Golubyatnikov O., Dvoretzky D., Dvoretzky S. Numerical Study of the Dynamics of Air Separation Process by Pressure Swing Adsorption, *Vestnik Yuzhno-Ural'skogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Matematicheskoye modelirovaniye i programirovaniye* [Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software], 2019, vol. 12, no. 4, pp. 95-103, doi: 10.14529/mmp190407
2. Nikolic D., Kikkindes E.S. Modelling and Optimization of Hybrid PSA/Membrane Separation Processes, *Adsorption*, 2015, vol. 21, no. 4, pp. 283-305, doi: 10.1007/s10450-015-9670-z
3. Agarwal A., Biegler L., Zitney S. Superstructure-Based Optimal Synthesis of Pressure Swing Adsorption Cycles for Precombustion CO<sub>2</sub> Capture, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2010, vol. 49, no. 11, pp. 5066-5079, doi: 10.1021/ie900873j
4. Arora A., Bajaj I., Iyer S., Hasan M. Optimal Synthesis of Periodic Sorption Enhanced Reaction Processes with Application to Hydrogen Production, *Computers & Chemical Engineering*, 2018, vol. 115, pp. 89-111, doi: 10.1016/j.compchemeng.2018.04.004
5. Tao W., Ma S., Xiao J., Bénard P., Chahine R. Simulation and Optimization for Hydrogen Purification Performance of Vacuum Pressure Swing Adsorption, *Energy Procedia*, 2019, vol. 158, pp. 1917-1923, doi: 10.1016/j.egypro.2019.01.441
6. Ohs B., Lohaus J., Marten D. [et al.] Optimized Hollow Fiber Sorbents and Pressure Swing Adsorption Process for H-2 Recovery, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2018, vol. 57, no. 14, pp. 5093-5105, doi: 10.1021/acs.iecr.7b05368
7. Dowling A., Vetukuri S., Biegler L. Large-Scale Optimization Strategies for Pressure Swing Adsorption Cycle Synthesis, *AIChE Journal*, 2012, vol. 58, no. 12, pp. 3777-3791, doi: 10.1002/aic.13928
8. Ohs B., Falkenberg M., Wessling M. Optimizing Hybrid Membrane-Pressure Swing Adsorption Processes for Biogenic Hydrogen Recovery, *Chemical Engineering Journal*, 2019, vol. 364, pp. 452-461, doi: 10.1016/j.cej.2019.01.136
9. Kim H., Lee J., Lee S., Han J., Lee I. Operating Optimization and Economic Evaluation of Multicomponent Gas Separation Process Using Pressure Swing Adsorption and Membrane Process, *Korean Chemical Engineering Research*, 2015, vol. 53, no. 1, pp. 31-38, doi: 10.9713/kcer.2015.53.1.31

10. Boukoulava F., Hasan M., Floudas C. Global Optimization of General Constrained Grey-Box Models: New Method and Its Application to Constrained PDEs for Pressure Swing Adsorption, *Journal of Global Optimization*, 2015, vol. 67, no. 1-2, pp. 3-42, doi: 10.1007/s10898-015-0376-2

11. Santos J.C., Portugal A.F., Magalhaes F.D., Mendes A. Simulation and Optimization of Small Oxygen Pressure Swing Adsorption Units, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2004, vol. 43, no. 26, pp. 8328-8338, doi: 10.1021/ie049701l

12. Akulinin Ye.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. [Optimal design of short-cycle adsorption plants for oxygen concentration], *Izvestiya Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo tekhnologicheskogo instituta (tekhnicheskogo universiteta)* [Bulletin of the St. Petersburg State Technological Institute (Technical University)], 2017, no. 41 (67), pp. 119-127. (In Russ., abstract in Eng.)

13. Biegler L., Jiang L., Fox V. Recent Advances in Simulation and Optimal Design of Pressure Swing Adsorption Systems, *Separation & Purification Reviews*, 2004, vol. 33, no. 1, pp. 1-39, doi: 10.1081/SPM-120039562

14. Akulinin E., Golubyatnikov O., Dvoretzkiy D., Dvoretzkiy S. Optimization and Analyses of Pressure Swing Adsorption Processes for Oxygen Production From Air under Uncertainty, *Chemical Industry and Chemical Engineering Quarterly*, 2020, vol. 26, no. 1, pp. 89-104, doi: 10.2298/CICEQ190414028A

15. Akulinin E., Golubyatnikov O., Dvoretzkiy D., Dvoretzkiy S. The Optimal Design of Pressure Swing Adsorption Process of Air Oxygen Enrichment Under Uncertainty, *Vestnik Yuzhno-Ural'skogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Matematicheskoye modelirovaniye i programmirovaniye* [Bulletin of the South Ural State University. Series: Mathematical Modelling, Programming and Computer Software], 2020, vol. 13, no. 2, pp. 5-16.

---

## **Optimierung der Modi der zyklischen Adsorptionsprozesse und Trennanlagen von Gasgemischen**

**Zusammenfassung:** Es ist die Analyse des zyklischen Adsorptionsprozesses und der Installation der Trennung von Gasgemischen nach der Methode der Druckwechseladsorption als Optimierungsobjekt durchgeführt. Festgestellt sind: Betriebs-(Regel-) Variablen (Dauer der Adsorptionsstufe, Druck am Ausgang des Kompressors, Gegenstromkoeffizient für die Regeneration des Adsorbers, Wechselprogramme in der Öffnungszeit der Einlass- und Auslassventile der Anlage); undefinierte Parameter (Zusammensetzung, Temperatur und Druck des anfänglichen Gas-Luft-Gemisches); Ausgangsgrößen der Anlage (Konzentration von Sauerstoff, Stickstoff im Produktgasstrom, Anlagenproduktivität, Extraktionsgrad und reduzierte Kosten für die Sauerstoffherzeugung bei einer gegebenen Reinheit von 40 - 90 und höher Vol.%).

Formuliert und gelöst ist das einstufige Problem der Optimierung der Regime eines stationären periodischen Prozesses der Adsorptionstrennung der atmosphärischen Luft- und Sauerstoffkonzentration durch die Methode der Kurzzyklusadsorption unter Bedingungen teilweiser Unsicherheit der Anfangsinformationen in Gegenwart von Einschränkungen der Reinheit des Produktgases, der Produktivität der Anlage und der Geschwindigkeit des Gasstroms in der "Frontschicht" des Adsorbers. Es ist ein iterativer Algorithmus für seine Lösung vorgeschlagen.

## Optimisation des régimes des processus d'adsorption cyclique et des installations de la séparation des mélanges de gaz

**Résumé:** Est effectuée une analyse du processus d'adsorption cyclique et de l'installation de la séparation des mélanges gazeux selon le procédé d'adsorption à cycle court sans chauffage en tant qu'objet d'optimisation. Sont démontrés: les variables de régime (de contrôle) (durée de l'étape d'adsorption, pression à la sortie du compresseur, coefficient de retour sur la régénération de l'adsorbant, programmes de changement de temps); paramètres non spécifiés (composition, température et pression du mélange air-gaz de départ); paramètres variables de sortie (concentrations d'oxygène, d'azote dans le flux de production de gaz, capacité de l'installation, taux d'extraction et coûts de production d'oxygène avec une pureté donnée 40 - 90 et plus vol.%).

Est formulé le problème à une seule étape pour optimiser les régimes du processus périodique standard de la séparation par adsorption de l'air atmosphérique et de la concentration en oxygène selon la méthode d'adsorption à cycle court. Est proposé l'algorithme itératif pour sa résolution.

---

**Авторы:** *Акулинин Евгений Игоревич* – кандидат технических наук, доцент кафедры «Технологии и оборудование пищевых и химических производств»; *Дворецкий Дмитрий Станиславович* – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Технологии и оборудование пищевых и химических производств»; *Дворецкий Станислав Иванович* – доктор технических наук, профессор кафедры «Технологии и оборудование пищевых и химических производств», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.

**Рецензент:** *Соколов Михаил Владимирович* – доктор технических наук, профессор кафедры «Компьютерно-интегрированные системы в машиностроении», ФГБОУ ВО «ТГТУ», г. Тамбов, Россия.