

MATHEMATISCHE MODELLIERUNG DES GASTRENNUNGSVERFAHRENS NACH DEM KURZZYKLISCHEN ADSORPTIONSVERFAHREN OHNE ERWÄRMUNG

S. Putin^{1,2}, S. Skwortzow^{1,2}, O. Schejkin²

*Lehrstuhl "Informationsverfahren und Steuerung", TSTU (1)
BSuB "Tambower wissenschaftliches Forschungsinstitut für Chemie", (2)*

*Der Beitrag ist von Mitglied des Redaktionskollegiums
Professor W.I. Konovalov vorgelegt*

Schlüsselwörter und Wendungen: kurzzyklische Adsorption ohne Erwärmung; Adsorptionsabtrennung des Gasgemisches.

Zusammenfassung: In diesem Beitrag wird mathematisches Modell für Verfahren der Adsorptionsabtrennung des Gasgemisches nach kurzzyklischen Adsorptionsverfahren ohne Erwärmung ausgearbeitet. Mittels dieses Modells kann man Vieladsorbersanlagen mit den komplizierten geometrischen Kennzeichnungen der Adsorber projektieren.

Verzeichnis

<p>a – Sorptionsgröße der Komponente im Adsorber, Mol/m³;</p> <p>A – Adsorber;</p> <p>b – Koeffiziente der Lenmürische Isotherme;</p> <p>D – Drossel;</p> <p>G – Molar Verbrauch des Gasgemisches, Mol/sec;</p> <p>K – Klappe;</p> <p>L – Länge der Sorbensschicht, m;</p> <p>N – Zahl der Elemente, St.;</p> <p>$Oxyz$ – Rechtwinkliges Koordinatensystem im Adsorber;</p> <p>p – Partialdruck der Komponente, Pa;</p> <p>P – Druck des Gasgemisches, Pa;</p> <p>R – Universelle Gaskonstante, Pa·m³/(mol·K);</p> <p>RSV – Rückschlagventil;</p> <p>S – Flächeninhalt des Durchgangsquerschnitts, m²;</p> <p>T – Absolute Temperatur, K;</p> <p>V – Volume der Schicht, m³;</p> <p>w – Lineare Geschwindigkeit des Stromes, m/sec;</p> <p>β – Kinetischer Koeffizient der Sorption,</p>	<p>1/sec;</p> <p>J/mol;</p> <p>ε – Summenporigkeit der Schicht;</p> <p>ΔH – Thermischer Effekt der Sorption,</p> <p>τ – Zeit des Verfahrens, sec;</p> <p>τ_{hzz} – Zeit des Halbzyklus, sec;</p> <p>ψ – Grad der Öffnungsbreite der Klappe, %.</p>
Unter- und Oberindexe	
	<p>Aus – Ausgangsgröße;</p> <p>$Auswasch$ – Auswaschgasgemisch;</p> <p>Beh – Größe im Behälter;</p> <p>Eff – Effektivgröße;</p> <p>Ein – Eingangsgröße;</p> <p>Gw – Gleichgewichtswert;</p> <p>kgg – Komponente des Gasgemisches;</p> <p>MSK – Mehr sorbiert Komponente;</p> <p>$Nahrung$ – Ausgangsgasgewichtswert (Nahrung);</p> <p>Vgg – Verbrauchsgasgemisch;</p> <p>WSK – Wenig sorbiert Komponente;</p> <p>∞ – Grenzwert .</p>

Die auf Selektivabsorptionsverfahren der Komponenten von Gasmischungen funktionierenden Gastrennungsanlagen kommen zur umfassenden Verwendung in moderner Entwicklung der Weltindustrie. Die Vorzüge dieser Anlagen sind niedrige Energieaufnahme, Mobil, rasche Arbeitsgeschwindigkeit beim Beginn des Arbeitsablaufes, mögliche Regelung des Verhältnisses der Bestandteile beim Trennungsverfahren. Deshalb sind diese Anlagen mit Erfolg in verschiedenen Bereiche der Lebenstätigkeit, Chemie und Erdölchemie, Stahlindustrie, Energetik, Medizin, Militärtechnik zu verwenden [1].

Man sieht bei der Analyse der modernen Technologien und Erforschungen im Bereich der Modellierung und Steuerung der Adsorptionsverfahren, daß das Schaffen der Zalenimitationssysteme für Adsorptionsverfahren auf kurzzyklischen Adsorptionsverfahren ohne Erwärmung sehr aktuell ist.

Das technologische Schema des Adsorptionsverfahrens für Luftgasmischung ist an der Abb. 1 dargestellt.

Die komprimierte Gasmischung tritt in Kollektor mittels der Klappen K_i (bei $i=1, N_A$) ein. Wenn die Klappe K_i geöffnet ist, so ist die Klappe K_i^* entsprechend geschlossen. Die Gasmischung tritt mittels der Klappe K_i in Adsorber A_i ein. Das Adsorbens adsorbiert ein oder ein paar Komponenten selektiv von der Gasmischung. Die mit der weniger sorbierten Komponente (WSK) konzentrierte Gasmischung tritt mittels des Rückschlagventils RSV_i aus. Der Teil von der mit WSK gesättigten Gasmischung wird bis atmosphärischen Druck in Drossel D gedrosselt und in Adsorber A_{i+1} rückläufig ausgetreten. Die Wechselwirkung zwischen WSK und der mehr sorbierten Komponente (MSK) löst Desorption der MSK und Regeneration des Adsorbens aus. MSK wird mittels der Klappe K_{i+1}^* ausgetreten. Die Klappen werden in gleiche Zeitabschnitte $\tau_{h\text{zyk}}$ umgeschaltet.

In der Anlage, die an Abb. 1 dargestellt ist, werden die Adsorber mit dem wechselnden Durchgangsquerschnitt der Schicht und mit der wechselnden Strömung der Gasmischung verwendet. An Abb. 2 ist die Änderung des Durchgangsquerschnitts der Schicht in der Strömung der Gasmischung dargestellt.

Nehmen wir an, daß rechtwinkliges Koordinatensystem im Adsorber untergebracht wird. Dabei wird Ox -Achse als Längsachse der Schicht gerichtet, und werden Oy - Oz -Achsen als Querachsen gerichtet.

Im mathematischen Modell der Verfahren, die im Adsorber verlaufen, gibt es die folgende Annahme:

1. Die Wärmefaktoren wirken sehr wenig auf Sorptions- und Hydromechanischverfahren, die in Anlage verlaufen.
2. Der Druckabfall der Gasmischung ist entlang der körnigen Schicht des Adsorbens gering [2].
3. Die Geschwindigkeit des Massendurchflusses entlang der Ox -Achse ist größer, als die Geschwindigkeit des Massendurchflusses entlang der Oy - Oz -Achsen.
4. Die Adsorptionsisotherme stimmt mit Desorptionsisotherme überein [3, 4].
5. Das Vorhandensein einer Komponente vermindert die Sorptionsfähigkeit der anderen.
6. Die Granula der Adsorptionsschicht haben gleiche Abmessungen und gleiche Sorptionsfähigkeiten.
7. Die physikalisch-mechanischen Eigenschaften der Granula und Konstruktionsdaten der Anlage verändern sich bei Funktion der Anlage nicht.

Endsprechend diesen Annahmen kann man mathematische Beschreibung der Verfahren, die im Sauerstoffkonzentrator verlaufen, so formulieren.

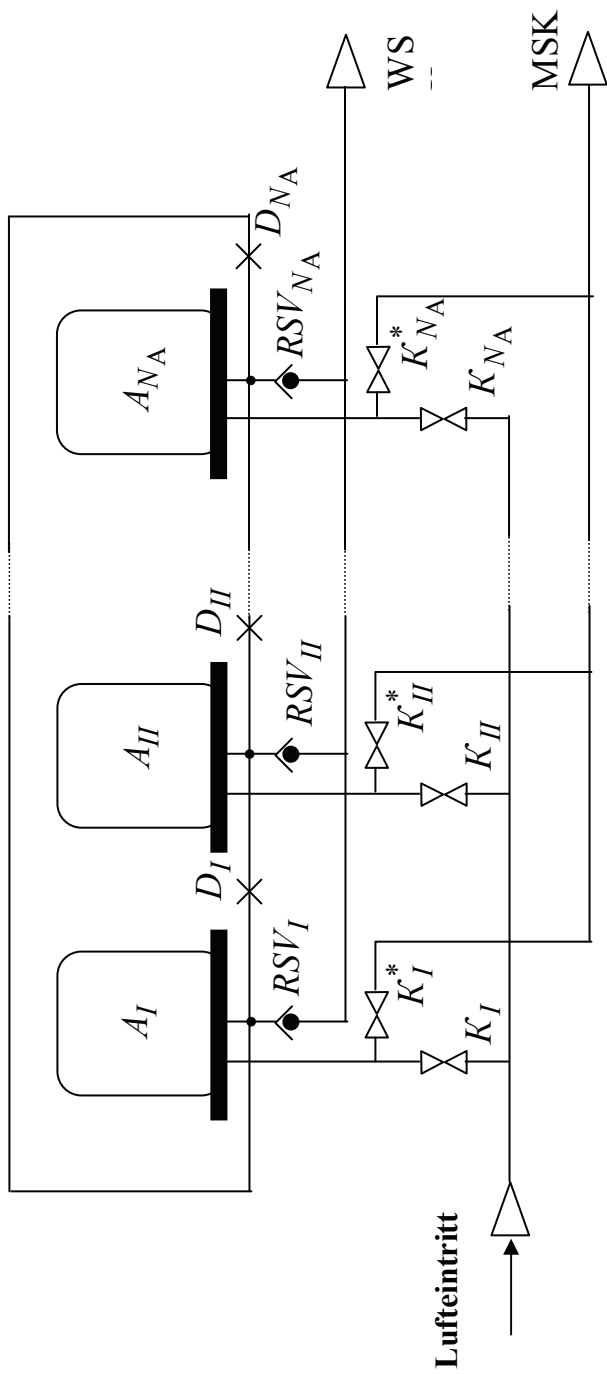


Abb. 1. Das technologische Schema des Adsorptionsverfahrens

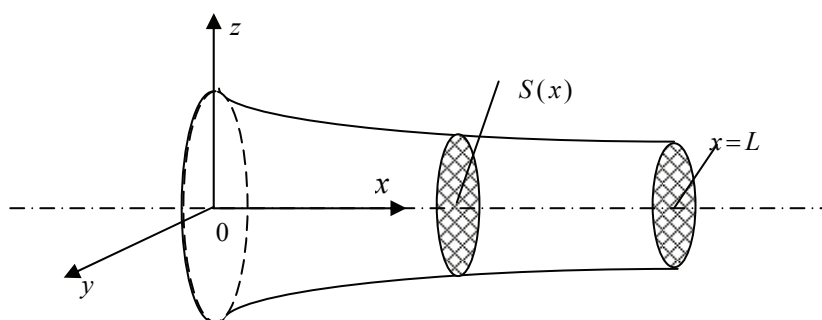


Abb. 2. Oxyz – Koordinaten im Adsorber mit dem wechselnden Durchgangsquerschnitt

Dabei $k=1, N_{k_{gg}}, j=1, N_{A}, j=1, N_A$.

Die Materialbilanz der Komponenten im Adsorber wird mittels der Gleichung dargestellt:

$$\varepsilon \frac{\partial p_k^j}{\partial \tau} + RT \frac{\partial a_k^j}{\partial \tau} + \frac{\partial (w^j p_k^j)}{\partial x} = 0, \quad 0 < x < L, \tau > 0. \quad (1)$$

Die Anfangsbedingungen werden für Gleichung der Materialbilanz auf solche Weise dargestellt:

$$a_k^j(x, \tau) = a_{k_0}^j(x), \quad p_k^j(x, \tau) = p_{k_0}^j(x), \quad 0 < x < L, \tau = 0. \quad (2)$$

Die Begrenzungsbedingungen werden für Gleichungen (2) auf solche Weise dargestellt:

Bei Adsorption:

$$\frac{\partial (w^j p_k^j)}{\partial x}(L, \tau) = 0, \quad p_k^j(0, \tau) = p_{k_{\text{шт}}}^j. \quad (3)$$

Bei Desorption:

$$\frac{\partial (w^j p_k^j)}{\partial x}(0, \tau) = 0, \quad p_k^j(L, \tau) = p_{k_{\text{пром}}}^j. \quad (4)$$

Dalton'sches Gesetz:

$$P_j = p_1^j + p_2^j + \dots + p_{N_{kc}}^j, \quad j = I, N_A. \quad (5)$$

Die Gleichungen der Sorptionskinetik wurden aus der Quellen mit ausführlichen Beschreibungen den Kinetikgleichungen mit verschiedener Struktur und aus der Vergleichsanalyse ausgesucht. Deshalb wird die folgende Gleichung als annähernde Kinetikgleichung ausgesucht:

$$\frac{da_k^j}{d\tau} = \beta_k (a_k^{j_p} - a_k^j). \quad (6)$$

Die Sorptionsisothermen sind modifizierte Lengmürsche Gleichungen, die die Gleichgewichtskapazität des Sorbens in bezug auf entsprechende Beimischung bei dynamischen Bedingungen bestimmen.

$$a_k^{j_p} = \frac{a_{k_{\infty}} \cdot b_k \cdot p_k^j}{1 + b_1 p_1^j + \dots + b_{N_{kc}} p_{N_{kc}}^j}. \quad (7)$$

Dabei a_k ist Sorbenskapazität in bezug auf Komponente k .

Die Koeffizienten b_k werden mittels des Verhältnisses ausgerechnet:

$$b_k = b_{k_0} \exp\left(\frac{\Delta H_k}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right). \quad (8)$$

Dabei T_0 ist Temperatur, bei der die Gleichgewichtsgrößen bekannt sind.

Die Koeffizienten b_{k_0} werden mittels der Gleichung (9) ausgerechnet.

Dabei $T \equiv T_0$.

Die Gleichungen für Berechnung des Druckes im Adsorber werden auf solche Weise dargestellt:

$$\frac{V^{\text{eff}}}{R \cdot T} \frac{dP_j}{d\tau} = G_j^{\text{ein}} - G_j^{\text{aus}} - \int_0^L \frac{\partial(a_1^j + a_2^j + \dots + a_{N_{\text{kc}}}^j)}{\partial \tau} S(x) dx. \quad (9)$$

Die Anfangsbedingungen für Gleichung der Dynamik des Druckes werden auf solche Weise dargestellt:

$$P_j(\tau) = P_{j_{\text{MSK}}}, \quad \tau = 0. \quad (10)$$

Die Gleichung der Geschwindigkeit entlang der Sorptionsschicht wird auf solche Weise dargestellt:

$$w(x) = w(0) \frac{S(0)}{S(x)} - \frac{V(x) \cdot \varepsilon}{S(x) \cdot P} \frac{dP}{d\tau}. \quad (11)$$

Dabei $w(0)$, $w(x=L)$ sind Geschwindigkeiten der Gasmischung im Eingang und im Ausgang. Sie werden auf solche Weise dargestellt:

Die Begrenzungsbedingungen werden für Gleichungen (11) auf solche Weise dargestellt:

$$w^j(x) = G_j^{\text{ein}} \frac{R T}{P_j S(x)}, \quad x = 0. \quad (12)$$

Um die materiellen Strömungen miteinander zusammenzubinden, muß man zusätzliche Gleichungen in mathematisches Modell einführen.

Die Gleichung der Bindung für materielle Strömungen.

Verbrauch und Richtung der Strömung im Stirnquerschnitt der Adsorbenschicht werden mittels Verhältnisses gerechnet:

$$G_j^{\text{ein}} = \begin{cases} -G_{K_j^*}(\psi_{K_j^*}(\tau), P_j, P_{\text{MSK}}), \psi_{K_j^*} > 0 \\ G_{K_j}(\psi_{K_j}(\tau), P_{\text{Nahrung}}, P_j), \psi_{K_j^*} = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Verbrauch der Gasmischung wird als Summe des durch die Klappen K_j^* , $j=1, N_A$ durchgeführten Verbrauchs gerechnet:

$$G_{\text{MSK}} = \sum_{j=1}^{N_A} G_{K_j^*}(\psi_{K_j^*}(\tau), P_j, P_{\text{MSK}}). \quad (14)$$

Der Partialdruck der j -Komponente im MSK wird auf solche Weise gerechnet:

$$P_{i_{MSK}} = \frac{1}{G_{MSK}} \sum_{j=1}^{N_A} G_{K_j^*} \cdot p_i^j(0, \tau), i=1, N_{k_{gg}}. \quad (15)$$

Der Verbrauch der Gasmischung (Nahrungsmischung), die durch Anlage verbraucht wird, wird auf solche Weise gerechnet:

$$G_{Nahrung} = \sum_{j=1}^{N_A} G_{K_j} (\Psi_{K_j}(\tau), P_{Nahrung}, P_j). \quad (16)$$

Der Verbrauch der mit dem Sauerstoff sättigenden Gasmischung (*WSK*) wird auf solche Weise gerechnet:

$$G_{WSK} = \sum_{j=1}^{N_A} G_{RSV_j} (\Psi_{RSV_j}(P_j, P_{WSK}, \tau), P_j, P_{WSK}). \quad (17)$$

Der Partialdruck der *j*-Komponente im WSK wird auf solche Weise gerechnet:

$$P_{i_{WSK}} = \frac{1}{G_{WSK}} \sum_{j=1}^{N_A} G_{RSV_j} \cdot p_{i_{RSV_j}}. \quad (18)$$

Der Verbrauch der durch Rückschlagventil gehenden Gasmischung (*WSK*) wird auf solche Weise gerechnet:

$$G_{RSV_j} = G_{KO_j} (\Psi_{KO_j}(P_j, P_{WSK}, \tau), P_j, P_{WSK}). \quad (19)$$

Der Partialdruck der durch *j*-Rückschlagventil gehenden *i*-Komponente wird auf solche Weise gerechnet:

$$P_{i_{RSV_j}}^j = \frac{1}{G_{RSV_j}} \left(G_{D_j} \cdot p_{i_{D_j}}^j + G_{D_{j+1}} \cdot p_{i_{D_{j+1}}}^{j+1} + G_j^{aus} \cdot p_{i_{D_j}}^j \right). \quad (20)$$

Der Verbrauch der durch Endschnitt des *j*-Adsorbers gehenden Gasmischung wird auf solche Weise gerechnet:

$$G_j^{aus}(\tau) = G_{D_j}(\tau) + G_{D_{j+1}}(\tau) + G_{RSV_j}(\tau). \quad (21)$$

Der Verbrauch der durch Drossel gehenden Gasmischung wird als Funktion bestimmt:

$$G_{D_j}(\tau) = G_{D_j}(\zeta_{D_j}, P_j, P_{j+1}). \quad (22)$$

Der Wert des *k*-Indexes wird aus der Bedingung bestimmt: wenn $(k+1) > N_A$, so $k=1$.

Die Abhängigkeit des durch Drossel gehenden Verbrauches G_K , G_{K^*} , G_{RSV} , G_D von Druckänderung und die Größen ihren Öffnungen sind mittels der annähernden Gleichungen zu bestimmen. Um die genaue Rechnung zu machen, muß man die Verbrauchsscharakteristiken der Klappen und die Ergebnisse der Laborprüfungen ausnutzen.

Für mathematische Beschreibung der äußeren Wirkung muß man Eingangsdruckänderung $P_{Nahrung}(\tau)$ zugeben. Das verwirklicht sich gewöhnlich mittels Reduzierventil.

$$P_{Nahrung}(\tau) = \text{const}. \quad (23)$$

Temperatur und chemischer Bestand des Ausgangsgasgemisches für Sauerstoffkonzentrator sind konstant in bezug auf der Zeit:

$$T(\tau) = \text{const}, \quad p(\tau) = \text{const}. \quad (24)$$

MSK und *WSK* werden in Behältern eingetreten. Dabei kann man annehmen, daß die Atmosphäre ein Behälter mit unendlichen Volumen ist. Der Druck des Gasgemisches im Behälter, der die Funktionen $P_{MSK}(\tau)$ und $P_{WSK}(\tau)$ bestimmt, wird mittels Differentialgleichung beschrieben:

$$\frac{V_{beh_1}}{R \cdot T} \frac{d P_{beh_1}}{d \tau} = G_1 - G_{v_{gg}}(\zeta_{v_{gg}}, P_{beh_1}, P_{v_{gg}}), \quad 1 \approx WSK \vee MSK. \quad (25)$$

Dabei V_{beh_1} , P_{beh_1} - Volume und Druck im Behälter, G_1 - Verbrauch *MSK* oder *WSK*, der zur Behälter von Anlage eingetreten wird, $G_{v_{gg}}$ - Verbrauch des Gasgemisches, den der Verbraucher annimmt, $P_{v_{gg}}$ - Druck im Verbrauchersystem, $\zeta_{v_{gg}}$ - Durchlässigkeit des Behälter – Verbraucher – Systems.

Die Anfangsbedingung für Gleichung (25) ist $P_{beh_1}(0) = P_{Nahrung}$. Nehmen wir an, daß Behälter ein Objekt bei beständigen Parameter ist. Partialdruck der k -Komponente bei Ausgang ist Partialdruck im Apparat. Um die Dynamik der Konzentrationen bei Ausgang des Behälters zu berechnen, muß man folgende Differentialgleichungen ausnutzen:

$$\frac{d p_{k_{aus}}^{beh}}{d \tau} = \frac{1}{V_{beh_1}} (G_1 \cdot p_{k_{ein}}^{beh} - G_{v_{gg}} \cdot p_{k_{aus}}^{beh}), \quad (26)$$

dabei $k=1, N_{kgm}$, $1 \approx WSK \vee MSK$.

Die Anfangsbedingungen für System (26) sind $p_{k_{aus}}^{beh}(\tau) = p_{k_{aus_0}}^{beh}$, $\tau=0$.

Die Verbrauchsgrößen G_1 , $G_{v_{gg}}$ sind Funktionen des Druckabfalles und der Durchflüssigkeit, die es vor – und – nach Behälter gibt.

Die äußere Wirkungen beziehen sich, in der Regel, auf die Schieber der Verteilungs- und Auswahlklappen.

Literatur

1. Глупанов В.Н., Шумяцкий Ю.И., Серегин Ю.А., Брехнер С.А. Получение кислорода и азота адсорбционным разделением воздуха // Промышленная и санитарная очистка газов. Обзорная информация, ЦИНТИХИМНЕФТЕМАШ, 1991.
2. Акулов А.К. Моделирование разделения бинарных газовых смесей методом адсорбции с колеблющимся давлением // Докторская диссертация. С.-Пб.:ГТУ, 1996. С. 304.
3. Salil U. Rege, Ralph T. Yang Limits for Air Separation by Adsorption with LiX Zeolite, Ind. Eng. Chem. Res. 1997, 36, 5358-5365
4. Ravi Kumar Vacuum Swing Adsorption Process for Oxygen Production – A Historical Perspective, Separation science and technology, 31(7), pp. 877-893, 1996.

Математическое моделирование процесса разделения газовой смеси по методу короткоциклового безнагревной адсорбции

С.Б. Путин^{1,2}, С.А. Скворцов^{1,2}, О.В. Шейкин²

*Кафедра “Информационные процессы и управление”, ТГТУ (1);
ФГУП “ТамбовНИХИ” (2)*

Ключевые слова и фразы: адсорбционное разделение; безнагревные короткоцикловая адсорбция; газовые смеси.

Аннотация: Разработана математическая модель процесса адсорбционного разделения многокомпонентной газовой смеси по методу короткоциклового безнагревной адсорбции. Полученная модель позволяет рассчитывать многоадсорберные установки со сложной геометрией адсорберов.

Mathematical Modeling of the Process of Gas Mixture Separation Using the Method of Short-Cycle without Heating Adsorption

S.B. Putin^{1,2}, S.A. Skvortsov^{1,2}, O.V. Sheikin²

*Department “Information Processes and Control”, TSTU (1);
FGUP “Tambov Research Chemical Institute” (2)*

Key words and phrases: adsorption separation; non-heating short-cycle adsorption; gas mixtures.

Abstract: Mathematical model of the adsorption separation process of multi-component gas mixture using the method of short-cycle adsorption without heating is developed. The obtained model allows calculating multi-adsorbent sets with complex geometry of adsorbers.

Modélage mathématique du processus de la séparation du mélange par la méthode de l'adsorption sans chauffage à court cycle

Résumé: Est élaboré le modèle mathématique du processus de la séparation adsorptive du mélange gazeux par la méthode de l'adsorption sans chauffage à court cycle. Le modèle reçu permet de calculer les dispositifs multiadsorbants avec la géométrie complexe des adsorbants.