

*Е. И. Акулинин**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОГО ПРОЦЕССА
КОРОТКОЦИКЛОВОЙ БЕЗНАГРЕВНОЙ
АДСОРБЦИИ С ПРЕДЕЛЬНО КОРОТКИМИ ЦИКЛАМИ**

Целью работы является разработка математического описания нестационарного процесса короткоциклового безнагревной адсорбции (КБА) с предельно короткими циклами [1]. Принципиальная схема

установки и циклограмма ее работы представлены на рис. 1.

Установка работает следующим образом. Исходный поток подается компрессором в адсорбер 2а, где осуществляется адсорбция при давлении 1,5 атм. Процесс регенерации адсорбента проводится при давлении 0,5 атм с целью десорбции азота в поток отходящего газа. Регенерация проводится частью очищенного потока, подаваемого через дросселирующий вентиль 5 из адсорбера 2б, в котором в это время осуществляется процесс адсорбции.

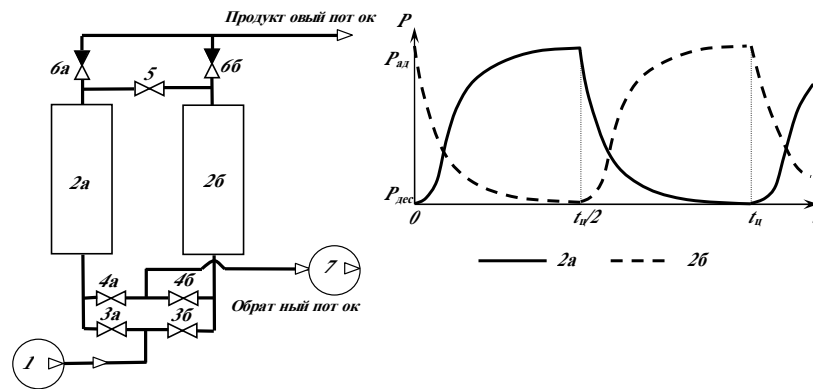


Рис. 1. Схема установки КБА и циклограмма ее работы

1 – компрессор; 2а, 2б – адсорберы;
3а, 3б, 4а, 4б – управляемые клапаны; 5 – дросселирующий вентиль;
6а, 6б – обратные клапаны; 7 – вакуум-насос

Выпишем уравнения материального и теплового балансов адсорбера:

– по газовой фазе

$$\frac{\partial c_{N_2}}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_{N_2}^* \frac{\partial c_{N_2}}{\partial x} + w c_{N_2} \right) = \beta_{N_2} (c_{N_2} - c_{sN_2});$$

$$\frac{\partial c_{O_2}}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_{O_2}^* \frac{\partial c_{O_2}}{\partial x} + w c_{O_2} \right) = \beta_{O_2} (c_{O_2} - c_{sO_2});$$

$$C_{Pg} \rho_g \frac{\partial T_g}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-k_g \frac{\partial T_g}{\partial x} + w C_{Pg} \rho T_g \right) = -\alpha_g (T_a - T_g); \quad (1)$$

– по твердой фазе

* Под руководством канд. техн. наук, доц. ТГТУ Д.С. Дворецкого, канд. техн. наук ОАО «Корпорация «Росхимзащита» С.И. Симаненкова.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial a_{N_2}}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_{N_2}^a \frac{\partial a_{N_2}}{\partial x} \right) &= \beta_{N_2} (a_{sN_2} - a_{N_2}); \\
\frac{\partial a_{O_2}}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_{O_2}^a \frac{\partial a_{O_2}}{\partial x} \right) &= \beta_{O_2} (a_{sO_2} - a_{O_2}); \\
C_{pa} \rho_a \frac{\partial T_a}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial x} \left(-k_a \frac{\partial T_a}{\partial x} \right) &= Q(a_{N_2}) \beta_{N_2} (a_{sN_2} - a_{N_2}) + \\
&+ Q(a_{O_2}) \beta_{O_2} (a_{sO_2} - a_{O_2}) + \alpha_g (T_a - T_g), \quad (2)
\end{aligned}$$

где c_{N_2} , c_{O_2} – текущие концентрации азота и кислорода в газовой фазе; a_{N_2} , a_{O_2} – текущие величины адсорбции азота и кислорода в адсорбенте; c_{sN_2} , c_{sO_2} – равновесные концентрации азота и кислорода в газовой фазе; a_{sN_2} , a_{sO_2} – равновесные величины адсорбции в твердой фазе; $D_{O_2}^* = D_{N_2}^*$ – коэффициенты диффузии кислорода и азота в газовой фазе; β_{N_2} , β_{O_2} – коэффициенты массоотдачи по азоту и кислороду соответственно из газовой в твердую фазу; $D_{N_2}^a$, $D_{O_2}^a$ – коэффициенты диффузии молекул азота и кислорода в адсорбенте; ρ – плотность воздуха; ρ_a – плотность адсорбента; C_{pg} , C_{pa} – теплоемкости воздуха и адсорбента, соответственно.

Система уравнений (1), (2) должна быть дополнена уравнением, учитывающим изменение давления в адсорбере в течение цикла параллельно с расчетом динамики адсорбции [2]:

$$\frac{\partial P}{\partial \tau} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} (wP) = \frac{RT}{M} (\beta_{N_2} (c_{N_2} - c_{sN_2}) + \beta_{O_2} (c_{O_2} - c_{sO_2})), \quad (3)$$

где d – диаметр частиц адсорбента; ε – порозность слоя, и граничными условиями:

- в случае адсорбционного процесса:
– при $x=0$

$$\begin{aligned}
c_{N_2}(0, \tau) = 0,78; \quad c_{O_2}(0, \tau) = 0,21; \quad a_{N_2}(0, \tau) = a_{N_2}|_{x=0}; \\
a_{O_2}(0, \tau) = a_{O_2}|_{x=0}; \quad T_g(0, \tau) = T_0|_{x=0}; \quad T_a(0, \tau) = T_a; \quad P(0, \tau) = P|_{x=0}; \quad (4)
\end{aligned}$$

- при $x=L$

$$\begin{aligned}
-D_{N_2}^* \frac{\partial c_{N_2}(L, \tau)}{\partial \tau} + w c_{N_2} &= \beta_{N_2} (c_{sN_2} - c_{N_2}); \quad c_{O_2}(L, \tau) = 0,99 - c_{N_2}(L, \tau); \\
a_{N_2}(L, \tau) &= a_{N_2}|_{x=L}; \quad a_{O_2}(L, \tau) = a_{O_2}|_{x=L}; \\
-k_g \frac{\partial T_g(L, \tau)}{\partial x} + w C_{pg} \rho T_g &= \alpha_g (T_a - T_g); \\
T_a(L, \tau) = T_a|_{x=L}; \quad \varepsilon w \frac{\partial P}{\partial x} &= \frac{RT}{M} (\beta_{N_2} (c_{sN_2} - c_{N_2}) + \beta_{O_2} (c_{sO_2} - c_{O_2}))|_{x=L}; \quad (5)
\end{aligned}$$

- в случае десорбционного процесса:
– при $x=0$

$$\begin{aligned}
-D_{N_2}^* \frac{\partial c_{N_2}(0, \tau)}{\partial \tau} + w c_{N_2} &= \beta_{N_2} (c_{sN_2} - c_{N_2}); \quad c_{O_2}(0, \tau) = 0,99 - c_{N_2}(0, \tau); \\
a_{N_2}(0, \tau) &= a_{N_2}|_{x=0}; \quad a_{O_2}(0, \tau) = a_{O_2}|_{x=0}; \\
-k_g \frac{\partial T_g(L, \tau)}{\partial x} + w C_{pg} \rho T_g &= \alpha_g (T_a - T_g); \quad T_a(0, \tau) = T_a|_{x=0};
\end{aligned}$$

$$\varepsilon w \frac{\partial P}{\partial x} = \frac{RT}{M} (\beta_{N_2} (c_{sN_2} - c_{N_2}) + \beta_{O_2} (c_{sO_2} - c_{O_2})) \Big|_{x=0}; \quad (6)$$

– при $x=L$

$$\begin{aligned} c_{N_2}(L, \tau) &= c_{N_2}(L, \tau_{ad}); \quad c_{O_2}(L, \tau) = 0,99 - c_{N_2}(L, \tau); \\ a_{N_2}(L, \tau) &= a_{N_2} \Big|_{x=L}; \quad a_{O_2}(L, \tau) = a_{O_2} \Big|_{x=L}; \\ T_g(L, \tau) &= T_g(L, \tau_{ad}) \Big|_{x=L}; \quad T_a(L, \tau) = T_a \Big|_{x=L}; \quad P(L, \tau) = P \Big|_{x=L}. \end{aligned} \quad (7)$$

Начальные условия задаются в следующем виде:

- для первого адсорбционного цикла:

$$c_{N_2}(x, 0) = 0; \quad c_{O_2}(x, 0) = 0; \quad a_{N_2}(x, 0) = 0;$$

$$a_{O_2}(x, 0) = 0; \quad T_g(x, 0) = T_0; \quad T_a(x, 0) = T_0; \quad P(x, 0) = P_0; \quad (8)$$

- для последующих циклов:

$$c_{N_2}(x, 0) = c_{N_2}(x, \tau_{ad}); \quad c_{O_2}(x, 0) = c_{O_2}(x, \tau_{ad});$$

$$a_{N_2}(x, 0) = a_{N_2}(x, \tau_{ad}); \quad a_{O_2}(x, 0) = a_{O_2}(x, \tau_{ad});$$

$$T_g(x, 0) = T_g(x, \tau_{ad}); \quad T_a(x, 0) = T_a(x, \tau_{ad}); \quad P(x, 0) = P(x, \tau_{ad}). \quad (9)$$

Уравнения (1) – (9) образуют замкнутую систему, описывающую закономерности адсорбционно-десорбционных процессов, протекающих при обогащении газовой смеси кислородом в установке КБА с предельно короткими циклами.

Адекватность построенной математической модели проверялась сравнением расчетного значения, полученного решением системы дифференциальных уравнений (1) – (3) с начальными и граничными условиями (4) – (9) Методом Гира [3], и экспериментального значения концентрации кислорода на выходе из адсорбера установки КБА (рис. 1). Максимальное рассогласование в течение цикла адсорбции не превышало 15 %.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kopyagorodsky, E.M. Mathematical modeling of ultra – rapid PSA : dissertation for the degree of master of science / E.M. Kopyagorodsky. – University of Cincinnati, 2001. – 112 p.
2. Акулов, А.К. Моделирование разделения бинарных газовых смесей методом адсорбции с колеблющимся давлением : дис. ... д-ра тех. наук : 05.17.08 защищена 22.02.96 : утв. 08.11.96 / А.К. Акулов. – СПб., 1996. – 304 с.
3. Дворецкий, Д.С. Расчет и оптимизация процессов и аппаратов химических производств в среде Матлаб : учебное пособие / Д.С. Дворецкий, А.А. Ермаков, Е.В. Пешкова. – Тамбов : Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2005. – 80 с.