

Задачи анализа, оптимизации и управления при разделении газовых смесей

Евгений И. Акулинин	¹	akulinin-2006@yandex.ru
Олег О. Голубятников	¹	golubyatnikov_ol@mai.ru
Дмитрий С. Дворецкий	¹	dvoretsky@tambov.ru
Станислав И. Дворецкий	¹	sdvoretsky@mail.tstu.ru

¹ Тамбовский государственный технический университет, ул. Советская, 106, г. Тамбов, 392000, Россия

Реферат. Разработаны математические модели динамики короткоцикловых процессов адсорбционного разделения синтез-газа (на водород, диоксид и оксид углерода) и атмосферного воздуха (на кислород, азот и аргон), позволяющие рассчитывать профили концентраций компонентов и температуры в газовой и твердой фазах, давления и скорости газовой смеси по высоте адсорбента в зависимости от времени. Модели включают дифференциальные уравнения с частными и обыкновенными производными, описывающие: 1) процессы массо- и теплообмена, протекающие при адсорбции (десорбции) сорбтива (H_2 , CO_2 , CO и O_2 , N_2 , Ar) гранулированными цеолитовыми адсорбентами CaA и NaX ; 2) кинетику смешанно-диффузионного переноса адсорбтива и изотермы Ленгмюра-Фрейндлиха (при разделении синтез-газа), кинетики внешней диффузии и изотермы Дубинина-Радушкевича (при разделении воздуха) и уравнение Эргуна для расчета скорости газовой смеси в адсорбенте. Систему дифференциальных уравнений в частных производных решали методом прямых, систему дифференциальных уравнений в обыкновенных производных - методом Рунге-Кутты 4-го порядка точности с автоматическим выбором шага. Анализ точности математической модели процессов адсорбционного разделения синтез-газа и получения водорода проводили с использованием относительной погрешности рассогласования расчетных по модели и экспериментальных значений концентрации продукционного водорода в «установившемся состоянии» (после 15-30 циклов функционирования установки КБА), максимальное значение которой не превышало 11,5%. Выполнены численные исследования влияния изменения температуры, состава и давления исходной газовой смеси на чистоту, степень извлечения и температуру продукционного водорода и кислорода в широком диапазоне изменения времени цикла «адсорбция – десорбция» и давления на стадии адсорбции, связи производительности установки короткоциклового безнагревной адсорбцией с чистотой получаемого продукта (водорода, кислорода). Сформулирована и решена задача адаптивной оптимизации процесса адсорбционного разделения газовой смеси и получения водорода и кислорода с максимальной концентрацией, разработано алгоритмическое и программное обеспечение автоматизированной системы адаптивного управления.

Ключевые слова: короткоцикловая безнагревная адсорбция, цеолитовый адсорбент, синтез-газ, воздух, математическая модель, численный анализ, оптимизация, управление

Problems of analysis, optimization and control in the separation of gas mixtures

Evgenii I. Akulinin	¹	akulinin-2006@yandex.ru
Oleg O. Golubyatnikov	¹	golubyatnikov_ol@mai.ru
Dmitrii S. Dvoretiskii	¹	dvoretsky@tambov.ru
Stanislav I. Dvoretiskii	¹	sdvoretsky@mail.tstu.ru

¹ Tambov State Technical University, Sovetskaya str., 106, Tambov, 392000, Russia

Summary. Mathematical models of dynamics of pressure swing adsorption processes for the separation of synthesis gas (into hydrogen, carbon dioxide and carbon monoxide) and air (into oxygen, nitrogen and argon) have been developed. The models allow calculating the profiles of component concentrations and temperature of gas and solid phases, pressure and velocity of gas mixture along the height of adsorbent in relation to time. The models include the following equations: 1) processes of mass and heat transfer during the adsorption (desorption) of a sorptive (H_2 , CO_2 , CO and O_2 , N_2 , Ar) by granulated zeolite adsorbents $5A$ and $13X$; 2) kinetics of compound diffusion transport of adsorbate and Langmuir-Freundlich isotherm (for the synthesis gas separation), kinetics of external diffusion and Dubinin-Radushkevich isotherm (for the air separation); 3) the Ergun equation for the calculation of pressure and velocity of gas mixture in adsorbent. The system of partial differential equations was solved by method of lines. The system of ordinary differential equations was solved by the fourth-order Runge-Kutta method with automatic step selection. To analyze the accuracy of mathematical models of the adsorption separation of synthesis-gas for recovery hydrogen, the relative error of the mismatch between the calculated values for the model and the experimental values of the concentration of the product (hydrogen, oxygen) in the 'steady state' (after 15-30 operating cycles of the PSA) was calculated. The maximum value of the relative error did not exceed 11.5%. Numerical studies were carried out in a wide range of changes in the time of the cycle "adsorption-desorption" and the pressure at the stage of adsorption to determine the effect of changes in temperature, composition and pressure of the initial gas mixture on the purity, recovery and temperature of production hydrogen and oxygen, as well as the relationship of the PSA unit capacity with the purity of the resulting product (hydrogen, oxygen). The problem of adaptive optimization of the process of adsorption separation of a gas mixture and obtaining hydrogen and oxygen with a maximum concentration was formulated and solved. The algorithmic and software of the automated adaptive control system was developed.

Keywords: pressure swing adsorption, zeolite adsorbent, synthesis gas; air, mathematical model, numerical analysis, optimization, controlling

Введение

В последние десятилетия наиболее распространенным способом разделения газовых смесей и концентрирования в них целевых продуктов становятся циклические адсорбционные процессы и, в частности, короткоцикловая безнагревная адсорбция (КБА или в англоязычной литературе *PSA – Pressure Swing Adsorption*),

представляющая особый класс адсорбционных процессов с циклически изменяющимся давлением. КБА – процессы широко применяют в промышленности для безнагревного разделения углеводородов, извлечения метана, концентрирования водорода, кислорода, азота и других газов. Одной из актуальных задач в области адсорбционного разделения является получение

Для цитирования

Акулинин Е.И., Голубятников О.О., Дворецкий Д.С., Дворецкий С.И. Задачи анализа, оптимизации и управления при разделении газовых смесей // Вестник ВГУИТ. 2018. Т. 80. № 2. С. 93–100. doi:10.20914/2310-1202-2018-2-93-100

For citation

Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretiskii D.S., Dvoretiskii S.I. Problems of analysis, optimization and control in the separation of gas mixtures. *Vestnik VGUET* [Proceedings of VSUET]. 2018. vol. 80. no. 2. pp. 93–100. (in Russian). doi:10.20914/2310-1202-2018-2-93-100

водорода из водородсодержащих технологических потоков (газов конверсии и окисления углеводородов, нефтезаводских газов, синтез-газа и др.) [1, 2] и обогащение воздуха кислородом в медицинских концентраторах и бортовых кислороддобывающих установках [3, 4].

Целью данной работы является: 1) исследование динамики процесса адсорбционного разделения газовой смеси (или атмосферного воздуха) с циклически изменяющимся давлением и концентрирования продукционного газа (водорода, кислорода) с применением технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента; 2) численное исследование влияния изменения температуры, состава и давления исходной газовой смеси на чистоту, степень извлечения и температуру продукционного газа в широком диапазоне изменения длительности цикла "адсорбция-десорбция" и давлений на стадиях адсорбции и десорбции; связи производительности установки КБА с чистотой продукционного газа (водорода, кислорода); 4) оптимизация и управление циклическими режимами функционирования установок КБА при разделении многокомпонентных газовых смесей (или воздуха) и концентрировании продукционного газа (водорода, кислорода).

Математическое описание процесса адсорбционного разделения газовой смеси

Технологический процесс концентрирования водорода методом адсорбционного разделения газовой смеси осуществляется

в 4-х адсорберной установке КБА с гранулированным адсорбентом – синтетическим цеолитом CaA (рисунок 1) [2, 5], а обогащения воздуха кислородом – в 2-х адсорберной установке с адсорбентом NaX [3] (на рисунке не показана).

Технологическая установка (рисунок 1) предназначена для получения водорода с концентрацией до 99,99% из газовой смеси, содержащей водород в количестве 65 ±2% об., диоксид углерода ~34 ±2% об. и оксид углерода ~1 ±0,5% об. Исходная газовая смесь (синтез-газ) подается в установку после осушки с избыточным давлением $P_{ads}^{in} = 21 \times 10^5$ Па и температурой $T_g^{in} = 30^\circ\text{C}$.

Подъем давления в адсорберах A1÷A4 производится открытием управляемых клапанов (v2, v4, v6 и v8), через которые газ подводится к слою насыпного гранулированного адсорбента CaA. Продукционный водород выводится из адсорберов через управляемые клапаны (v10, v12, v13 и v15) и направляется потребителю через ресивер R. Противоточная регенерация адсорбента в адсорберах производится открытием клапанов (v11, v14, v16 и v18), через которые обогащенная водородом газовая смесь подводится к слою адсорбента для десорбции адсорбтива (преимущественно CO2 и CO), а через клапаны v3, v5, v7 и v9 производится вывод газовой смеси, обедненной водородом, со стадии десорбции.

Аналогичным образом осуществляется технологический процесс разделения атмосферного воздуха и концентрирования кислорода в 2-х адсорберной установке КБА.

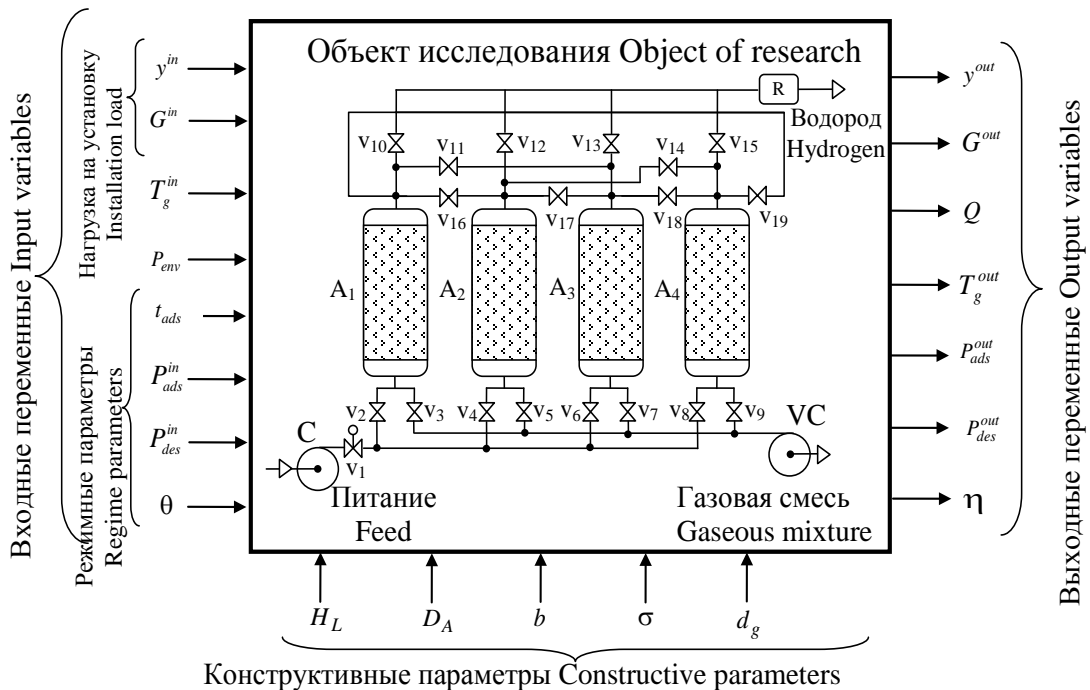


Рисунок 1. Схема 4-адсорберной установки КБА для концентрирования водорода: A1-A4 - адсорберы, v – управляемые клапаны, R – ресивер

Figure 1. Scheme 4- adsorber PSA unit for hydrogen concentration: A1-A4-adsorbers, v-controlled valves, R-receiver

Циклограмма изменения давления в адсорберах $A_1 \div A_4$ с помощью системы клапанов $v_1 \div v_{19}$ приведена на рисунке 2.

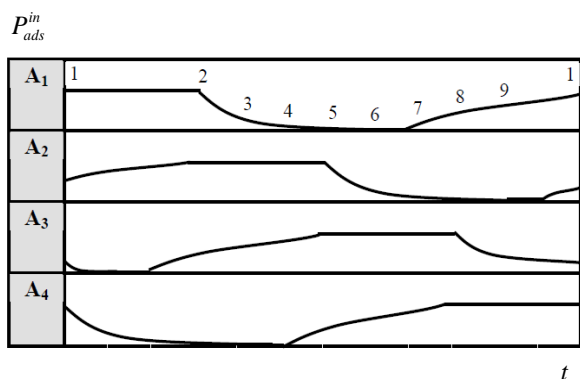


Рисунок 2. Циклограмма изменения давления в адсорберах

Figure 2. Cyclogram of pressure changes in the adsorbers

Входные переменные в установках КБА включают нагрузку по сырью $x_n = \{y^{in}, G^{in}\}$, y^{in}, G^{in} – состав и расход исходной газовой смеси (или атмосферного воздуха); вектор управлений $u = \{P_{ads}^{in}, P_{des}^{in}, t_{ads}, t_{des}, \theta\}$, $P_{ads}^{in}, P_{des}^{in}$, t_{ads}, t_{des} – давления на стадиях адсорбции, десорбции и продолжительности стадий адсорбции и десорбции; θ – коэффициент обратного потока, $0 < \theta < 1$; температуру T_g^{in} и давление P_{env} исходной газовой смеси, поступающей на разделение в адсорберы. В состав выходных переменных входят концентрации y_1^{out} продукционного газа (водорода, кислорода) и сопутствующих веществ; степень извлечения η адсорбтива (преимущественно диоксида и окиси углерода, азота); производительность Q установки КБА; температура T_g^{out} и расход G^{out} продукционного газа (водорода, кислорода).

При адсорбции H_2, CO_2, CO и O_2, N_2 цеолитовыми адсорбентами в адсорберах установки КБА протекают следующие массо- и теплообменные процессы: а) диффузия H_2, CO_2, CO и O_2, N_2 в потоке газовой смеси; 2) массообмен H_2, CO_2, CO, O_2, N_2 и теплообмен между газовой фазой и адсорбентом; 3) адсорбция преимущественно CO_2, CO и N_2 на поверхности и в микропорах гранул цеолитового адсорбента с выделением тепла и десорбция CO_2, CO и N_2 из микропор и с поверхности гранул с поглощением тепла. Анализ результатов физического моделирования этих процессов показал, что диффузия H_2, CO_2, CO, O_2, N_2 и распространение тепла газовой и твердой фазах осуществляются в основном в аксиальном

направлении относительно движения потока газовой смеси в адсорбере (т. е. по высоте адсорбента). При этом процесс обогащения газовой смеси водородом при адсорбции CO_2 и CO гранулированным цеолитовым адсорбентом осуществляется в смешанно-диффузионной области (определяется общим коэффициентом массопередачи), а обогащение воздуха кислородом при адсорбции N_2 – во внешне-диффузионной области (определяется коэффициентом внешней массоотдачи), а также равновесными соотношениями концентраций H_2, CO_2, CO и O_2, N_2 в фазах.

При математическом описании процессов обогащения газовой смеси водородом и воздуха кислородом принимали следующие допущения: 1) исходная газовая смесь (содержит 1 – водород H_2 с концентрацией $65 \pm 2\%$ об., 2 – диоксид углерода CO_2 с концентрацией $34 \pm 2\%$ об., 3 – окись углерода CO с концентрацией $1 \pm 0,5\%$ об.) и воздух (содержит 1 – кислород O_2 с концентрацией $20,8 \pm 1\%$ об., 2 – азот N_2 с концентрацией $78,2\%$ об.; 3 – аргон Ar и примеси с концентрацией $1,25 \pm 0,5\%$ об.) являются 3-х компонентными и рассматриваются как идеальный газ, что вполне допустимо при давлении в адсорбере до $P_{ads}^{in} = 200 \times 10^5$ Па [6]; 2) диффузия H_2, CO_2, CO, O_2, N_2 и распространение тепла в газовой и твердой фазах осуществляются только в аксиальном направлении движения потока газовой смеси в адсорбере (по высоте адсорбента); 3) в качестве адсорбентов используются гранулированные цеолиты CaA (для разделения синтез-газа) и NaX (для разделения воздуха) с диаметром гранул 1,6 мм и 2,0 мм, коэффициентом пористости 0,375 и 0,394, соответственно [1,7–9]; 4) адсорбционное равновесие (изотермы адсорбции) описывается уравнениями Ленгмюра-Фрейндлиха (при разделении синтез-газа и концентрировании водорода) и Дубинина-Радушкевича (при разделении воздуха и концентрировании кислорода); 5) десорбционные ветви изотерм адсорбции H_2, CO_2, CO на цеолите CaA и O_2, N_2 на цеолите NaX совпадают с адсорбционными [8]; 6) температура газа в ресивере R равна температуре газа на выходе из адсорбера, тепловые потери в окружающую среду пренебрежимо малы.

В соответствии с принятыми допущениями математическое описание процесса разделения 3-х компонентной газовой смеси (синтез-газа) и концентрирования водорода включает следующие уравнения [2]: 1) покомпонентного материального баланса компонентов (H_2, CO_2, CO, O_2, N_2) в потоке газовой фазы с учетом продольного перемешивания в слое адсорбента (нелинейное

дифференциальное уравнение в частных производных параболического типа); 2) кинетики адсорбции–десорбции (нелинейное дифференциальное уравнение в обыкновенных производных); 3) распространения тепла в газовой и твердой фазах с учетом конвективной составляющей и теплопроводности (нелинейные дифференциальные уравнения в частных производных параболического типа); 4) изменения скорости потока газовой смеси (нелинейное дифференциальное уравнение в частных производных) и давления газовой смеси (дифференциальное уравнение Эргуна в обыкновенных производных) по высоте адсорбента.

Для решения системы дифференциальных уравнений в частных производных с соответствующими начальными и граничными условиями [2] использовали различные методы: метод конечных элементов в программной среде Matlab и метод прямых. В соответствии с методом прямых производные по пространственной координате заменяли конечно-разностными формулами и решение краевой задачи (системы дифференциальных уравнений в обыкновенных производных) искали методом Рунге-Кутты 4-го порядка точности с автоматическим выбором шага вдоль некоторого семейства прямых.

Анализ точности математических моделей процессов адсорбционного разделения газовых смесей и воздуха проводили с использованием относительной погрешности рассогласования расчетных по модели y_1^{out} и экспериментальных значений $y_1^{out,e}$ концентрации продукционного водорода в «установившемся состоянии» (после 10–15 циклов функционирования установки КБА). Максимальная погрешность рассогласования

$$\delta_{max} = \max_t \left(\left| y_1^{out}(t) - y_1^{out,e}(t) \right| / y_1^{out,e}(t) \right) 100\% \text{ не}$$

превышала 11,5%, что позволило использовать математическую модель для технологического расчета, оптимизации циклических режимов и проектирования установок КБА для разделения синтез-газа (воздуха) и концентрирования водорода (кислорода).

Численное исследование адсорбционных процессов с циклически изменяющимся давлением

Проведен численный анализ зависимости концентрации y_1^{out} продукционного водорода от длительности стадии адсорбции при температуре исходной смеси 10, 30 и 50°C, коэффициенте обратного потока $\theta = 0.5$ и отношении длительности стадий десорбции t_{des} и адсорбции

$t_{ads} : t_{des} / t_{ads} = 0.2, 0.5, \text{ и } 0.8$, соответственно. Из анализа графиков (на рисунке не показаны) следует, что при всех значениях t_{des} / t_{ads} графики имеют максимумы, находящиеся в диапазоне $t_{ads} = 35 \div 75$ с. При большей длительности стадии адсорбции адсорбент регенерируется в неполной степени, что приводит к снижению чистоты продукционного водорода, при меньшей длительности давление в адсорбере не достигает рабочего значения, что также приводит к уменьшению чистоты продукционного водорода на выходе установки. Установлено, что температура исходной смеси в наибольшей степени влияет на чистоту продукта и его температуру (не превышает 317 К) при величине $t_{des} / t_{ads} = 0.5$.

На рисунках 3, 4 представлены зависимости концентрации продукционного кислорода y_1^{out} от длительности стадии адсорбции t_{ads} при различных значениях концентрации CO_2 в исходной смеси y_2^{in} (рисунок 3) и давления на стадии адсорбции P_{ads}^{in} (рисунок 4).

Из анализа зависимостей на рисунке 3 следует, что для каждого значения концентрации CO_2 в исходной газовой смеси существует диапазон значений длительности стадии адсорбции $[t_{ads}; \overline{t_{ads}}]$, при котором достигается максимальное значение концентрации y_1^{out} (например, для $y_2^{in} = 34\%$ об. на участке от 38 до 46 с (кривая 2)). При меньшей длительности стадии адсорбции $t < \overline{t_{ads}}$ не обеспечивается достаточная регенерация адсорбента (например, для $y_2^{in} = 34\%$ об. на участке от 25 до 37 с (кривая 2)), а при большей длительности $t > \overline{t_{ads}}$ концентрация водорода на выходе установки уменьшается в результате исчерпания адсорбционной емкости адсорбента (например, для $y_2^{in} = 34\%$ об. на участке от 47 до 200 с (кривая 2)), что приводит к снижению эффективности работы установки КБА. Следует отметить, что увеличение концентрации CO_2 в исходной газовой смеси в ~1,8 раза (с 25 до 45% об.) приводит к смещению диапазона $[t_{ads}; \overline{t_{ads}}]$, при котором достигается максимальное значение концентрации y_1^{out} , в сторону увеличения длительности стадии адсорбции t_{ads} и к его уменьшению в 4 раза (для кривой 1 диапазон равен 16 с –

участок с 35 по 50 с, для кривой 3 – диапазон равен 4 с участок с 72 по 75 с).

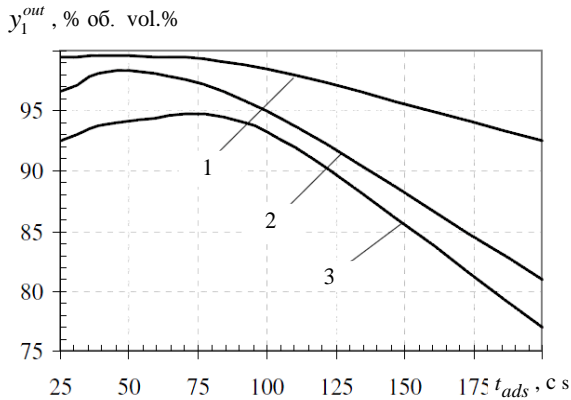


Рисунок 3. Зависимости концентрации y_1^{out} продукционного водорода от длительности стадии адсорбции t_{ads} при концентрации CO_2 в исходной смеси: 1 – $y_2^{in} = 25\%$ об.; 2 – $y_2^{in} = 34\%$ об.; 3 – $y_2^{in} = 45\%$ об.

Figure 3. Dependence of the production hydrogen concentration y_1^{out} on the adsorption time t_{ads} at CO_2 concentration in the initial mixture: 1 – $y_2^{in} = 25$ vol.% ; 2 – $y_2^{in} = 34$ vol.% ; 3 – $y_2^{in} = 45$ vol.%.

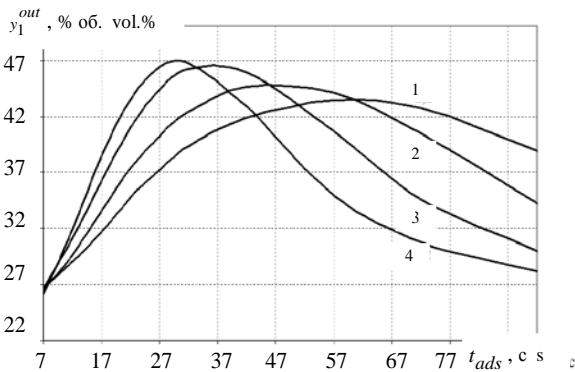


Рисунок 4. Зависимости концентрации y_1^{out} продукционного водорода от длительности стадии адсорбции t_{ads} при давлении на стадии адсорбции: 1– $P_{ads}^{in} = 2.2 \times 10^5$ Па; 2– $P_{ads}^{in} = 2.7 \times 10^5$ Па; 3– $P_{ads}^{in} = 3.7 \times 10^5$ Па; 4– $P_{ads}^{in} = 5.2 \times 10^5$ Па

Figure 4. Dependence of the production hydrogen concentration y_1^{out} on the adsorption time t_{ads} at adsorption pressure: 1– $P_{ads}^{in} = 2.2 \times 10^5$ Pa; 2– $P_{ads}^{in} = 2.7 \times 10^5$ Pa; 3– $P_{ads}^{in} = 3.7 \times 10^5$ Pa; 4– $P_{ads}^{in} = 5.2 \times 10^5$ Pa

Из анализа зависимостей на рисунке 4 следует, что для каждого значения давления

адсорбции P_{ads}^{in} существует длительность стадии адсорбции t_{ads} такая, при которой достигается максимальное значение концентрации продукционного кислорода y_1^{out} . Увеличение давления адсорбции с 2,2 до $5,2 \times 10^5$ Па приводит к увеличению расхода от $8,34 \times 10^{-5}$ м³/с до $16,67 \times 10^{-5}$ м³/с, и уменьшению (от 64 с до 30 с) длительности стадии адсорбции при достижении максимальной концентрации продукционного кислорода. Кроме того, при увеличении давления адсорбции от 2,2 до $5,2 \times 10^5$ Па, максимальная концентрации кислорода на выходе установки повышается на 4% (от 43 до 47%(об.)) из-за увеличения равновесной концентрации азота на стадии адсорбции.

Оптимизация адсорбционных установок для разделения газовых смесей

Сформулируем аргументную задачу оптимизации режимов функционирования установки КБА для разделения синтез-газа и концентрирования водорода: для заданного варианта технологической схемы, типа применяемого адсорбента и заданных значений конструктивных параметров установки требуется определить режимные параметры (управления) $u^* = \{t_{ads}^*, P_{ads}^{in*}\}$ такие, что среднее значение концентрации продукционного водорода y_1^{out} на отрезке времени $[0, t_{st}]$, соответствующем выводу установки КБА на "установившийся" режим работы (примерно после 15–30 циклов "адсорбция-десорбция"), достигает максимального значения, т. е.

$$I(u^*) = \max_{u=\{t_{ads}, P_{ads}^{in}\}} \left(\frac{1}{t_{st}} \int_0^{t_{st}} y_1^{out}(u) dt \right) \quad (1)$$

при связях в форме уравнений математической модели динамики процесса адсорбционного разделения газовой смеси и концентрирования водорода [2] и ограничениях на степень извлечения η адсорбтива (диоксида и окиси углерода) и концентрирования водорода

$$\eta_{зад} - \eta(u) \leq 0, \quad (2)$$

производительность установки КБА

$$Q_{зад} - Q(u) \leq 0 \quad (3)$$

и условия физической реализуемости управления (режимных параметров)

$$u_j^- \leq u_j \leq u_j^+, \quad j = 1, 2, \quad (4)$$

где u_j^-, u_j^+ – нижняя и верхняя границы диапазона изменения j -го управляющего воздействия u_j .

Сформулированная задача оптимизации (1) – (4) относится к классу задач нелинейного программирования, для решения которой использовали метод штрафных функций (внутренней точки) и последовательного квадратичного программирования [10]. В качестве номинального (рабочего) режима функционирования установки КБА при разделении синтез-газа и концентрировании водорода принимали следующие значения технологических параметров: $y_2^{in} = 34\%$ об., $G^{in} = 20.4 \times 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$, $T_g^{in} = 30^\circ\text{C}$, $t_{ads} = 42.5 \text{ с}$, $P_{ads}^{in} = 15.8 \times 10^5 \text{ Па}$, $t_{des} / t_{ads} = 0.5$, $\theta = 0.5$.

Оперативное решение задачи оптимизации (1)–(4) процесса адсорбционного получения водорода выполняется в 2-х уровненой системе управления, осуществляющей непрерывный контроль за текущими значениями возмущающих воздействий. При их отклонении от номинальных значений на верхнем уровне системы решалась задача оптимизации и определялись текущие оптимальные значения режимных параметров $u^* = \{P_{ads}^{in*}, t_{ads}^*\}$, поступающие в качестве задания ПИД – регулятору давления и программному задатчику циклограммы переключения отсечных клапанов.

Так при ступенчатом уменьшении концентрации диоксида углерода с $y_2^{in} = 34\%$ об. до $y_2^{in} = 25\%$ об. в установке КБА протекают переходные процессы и через 10–15 циклов «адсорбция-десорбция» за счет свойств самовыравнивания объекта устанавливается новый режим функционирования установки КБА с чистотой продукта на уровне 96,5% об. В случае адаптивной оптимизации определяются новые оптимальные технологические параметры $t_{ads}^* = 34.5 \text{ с}$, $P_{ads}^{in*} = 21 \times 10^5 \text{ Па}$, при реализации которых через 10–15 циклов «адсорбция-десорбция» функционирования установки КБА достигаются более высокая концентрация $y_1^{out} = 99,7\%$ продукционного водорода и производительность установки КБА $Q_{зад} = 15 \times 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$. При ступенчатом повышении доли CO_2 в исходной газовой смеси до 45% об. чистота продукта $\sim 89.5\%$ об. достигается за счет свойств самовыравнивания объекта, а адаптивная оптимизация циклических режимов установки КБА позволяет определить новые значения технологических параметров $t_{ads}^* = 38 \text{ с}$, $P_{ads}^{in*} = 15.85 \times 10^5 \text{ Па}$, реализация которых обеспечивает более высокие

значения концентрации $y_1^{out} = 95.7\%$ об. продукционного водорода и производительности $Q = 11.7 \times 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$ установки КБА.

Сформулируем теперь аргументную задачу оптимизации циклических режимов работы установки КБА для разделения воздуха и концентрирования кислорода: для заданного варианта технологической схемы, типа применяемого адсорбента и заданных значений конструктивных параметров установки требуется определить вектор $u^* = (t_{ads}^*, t_{des}^*, P_{ads}^{in*}, P_{des}^{in*}, \theta^*)$ режимных переменных таких, что степень извлечения азота

$$I_1(u) = \left(\frac{1}{t_{st}} \int_0^{t_{st}} \eta(u) dt \right)$$
 из атмосферного воздуха

$$\text{или производительность } I_2(u) = \left(\frac{1}{t_{st}} \int_0^{t_{st}} Q(u) dt \right)$$

установки достигают максимального значения,

$$\text{т. е. } I_\lambda(u^*) = \max_{u = \{t_{ads}, t_{des}, P_{ads}^{in}, P_{des}^{in}, \theta\}} I_\lambda(u), \lambda = 1, 2, \text{ при}$$

связях в форме уравнений математической модели [5] и ограничениях на концентрацию продукционного кислорода, производительность установки (для критерия максимального извлечения азота) и допустимые диапазоны изменения технологических (варьируемых) параметров $u = \{t_{ads}, t_{des}, P_{ads}^{in}, P_{des}^{in}, \theta\}$.

В качестве номинального (рабочего) режима функционирования установки КБА при разделении атмосферного воздуха и концентрировании кислорода принимали следующие значения конструктивных (предельный адсорбционный объем адсорбента – $W_0 = 0,17 \text{ см}^3/\text{г}$, параметр термического уравнения Дубинина – Радускевича $B = 6.55 \times 10^{-6} \text{ 1/K}^2$, высота насыпного слоя адсорбента – $H_L = 0.3 \text{ м}$, диаметр адсорбера – $D_A = H / 6 \text{ м}$, диаметр гранул адсорбента – $d_g = 10^{-3} \text{ м}$, объем ресивера – $V_R = 0.2405 \times 10^{-3} \text{ м}^3$) и технологических параметров (состав атмосферного воздуха в питании установки КБА – концентрации кислорода $y_1^{in} = 20.8\%$ об., азота – $y_2^{in} = 78.2\%$ об., аргона – $y_3^{in} = 1.0\%$ об.; нагрузка по расходу $G^{in} = 17 \times 10^{-5} \text{ м}^3/\text{с}$ и температура атмосферного воздуха $T_g^{in} = 20^\circ\text{C}$; заданные значения концентрации продукционного кислорода $y_1^{out} \geq 90\%$ об. и производительности установки $Q \geq 1.7 \times 10^{-5} \text{ м}^3/\text{с}$).

Допустимые диапазоны изменения технологических (варьируемых) переменных:

1) для напорной схемы: $1 \leq t_{ads} \leq 15$, $1 \leq t_{des} \leq 15$, $2 \times 10^5 \leq P_{ads}^{in} \leq 6 \times 10^5$, $P_{des}^{in} = 1 \times 10^5$, $0 \leq \theta \leq 1$;

2) для вакуум-напорной схемы: $1 \leq t_{ads} \leq 15$, $1 \leq t_{des} \leq 15$, $2 \times 10^5 \leq P_{ads}^{in} \leq 6 \times 10^5$, $0,5 \times 10^5 \leq P_{des}^{in} \leq 1 \times 10^5$, $0 \leq \theta \leq 1$.

Максимальное значение средней степени извлечения $\eta^* = 99,93\%$ азота достигается при следующих значениях режимных переменных:

1) для напорной схемы: $t_{ads}^* = 3.1$ с, $t_{des}^* = 4$ с, $P_{ads}^{in*} = 4.2 \times 10^5$ Па, $\theta^* = 0.82$; выход установки на «установившийся режим» работы осуществляется за $n_{st}^* = 17$ циклов адсорбции–десорбции;

2) для вакуум-напорной схемы: $t_{ads}^* = 3.1$ с, $t_{des}^* = 3.5$ с, $P_{ads}^{in*} = 6 \times 10^5$ Па, $P_{des}^{in*} = 0.99 \times 10^5$ Па, $\theta^* = 0.7$, $n_{st}^* = 35$.

Максимальные значения производительности установки КБА достигается при следующих значениях режимных переменных:

1) для напорной схемы: $Q^* = 1.6 \times 10^{-5}$ м³/с, $t_{ads}^* = 4.3$ с, $t_{des}^* = 3.8$ с, $P_{ads}^{in*} = 6 \times 10^5$ Па, $\theta^* = 0.61$, $n_{st}^* = 22$;

2) для вакуум-напорной схемы: $Q^* = 1.8 \times 10^{-5}$ м³/с, $t_{ads}^* = 4.16$ с, $t_{des}^* = 4.16$ с, $P_{ads}^{in*} = 5.93 \times 10^5$ Па, $P_{des}^{in*} = 0.99 \times 10^5$ Па, $\theta^* = 0.48$, $n_{st}^* = 29$.

Заключение

На основе современных методов системного анализа, математического моделирования и теории управления получены новые научные

ЛИТЕРАТУРА

1. Ruthven D.M., Farooq S., Knaebel K.S. Pressure swing adsorption. New York, 1993. 376 с.
2. Akulinin E.I., Ishin A.A., Skvortsov S.A., Dvoretzkiy D.S. et al. Mathematical modeling of hydrogen production process by pressure swing adsorption method // Advanced Materials and Technologies. 2017. № 2. P. 38–49. doi: 10.17277/amt.2017.01
3. Акулинин Е.И., Дворецкий Д.С., Дворецкий С.И. Динамика циклических адсорбционных процессов обогащения воздуха кислородом: моделирование и оптимизация // Вестник Технологического университета. 2016. Т.19. № 17. С. 108–114.
4. Ko D., Siriwardane R., Biegler L. Optimization of pressure swing adsorption and fractionated vacuum pressure swing adsorption processes for CO₂ capture // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2005. V. 44 (21). P. 8084–8094.
5. Baksh M.S.A., Ackley M.W. Pressure swing adsorption process for the production of hydrogen. Pat. 6340382 USA. 2002.

результаты для теории и практики создания автоматизированных технологических процессов адсорбционного разделения газовых смесей с циклически изменяющимся давлением. На основании численного анализа системных связей и закономерностей процессов адсорбционного концентрирования водорода и кислорода, определены наиболее опасные возмущения – состав и температура исходной газовой или воздушной смеси, давление на производственном выходе установки КБА. Их необходимо измерять в автоматическом режиме и в соответствии с ними корректировать оптимальные управления (время цикла "адсорбция-десорбция", давления на стадиях адсорбции и десорбции, коэффициент обратного потока) установкой КБА. Сформулированы и решены задачи адаптивной оптимизации технологических процессов адсорбционного разделения газовых смесей с циклически изменяющимся давлением. Методом имитационного моделирования получены оценки эффективности алгоритма адаптивной оптимизации и управления процессом адсорбционного концентрирования водорода и кислорода (прирост чистоты продукта за счет адаптивной оптимизации составил 2.5–6.3% об.). Математическое, информационное и алгоритмическое обеспечение системы управления с высокой эффективностью может быть использовано при проектировании новых автоматизированных адсорбционных процессов и технологических установок с циклически изменяющимся давлением для очистки и разделения многокомпонентных газовых смесей.

Благодарности

Авторы выражают благодарность к.т.н. А.А. Ишину за содействие в проведении вычислительных экспериментов, а также Министерству образования и науки РФ за предоставленное финансирование в рамках проектной части государственного задания № 10.3533.2017/ПЧ.

6. Кириллин В.А., Сычев В.В., Шейндлин А.Е. Техническая термодинамика. М.: Издательский дом МЭИ, 2016. 496 с.

7. Шумяцкий Ю.И. Промышленные адсорбционные процессы. М.: КолосС, 2009. 183 с.

8. Кельцев Н.В. Основы адсорбционной техники. М.: Химия, 1984. 592 с.

9. Shokroo E., Farsani D., Meymandi H., Yadoliahi N. Comparative study of zeolite 5A and zeolite 13X in air separation by pressure swing adsorption // Korean Journal of Chemical Engineering. 2016. V. 33 (4), P. 1391–1401.

10. Реклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгсдел К. Оптимизация в технике. М.: Мир, 1986. 320 с.

REFERENCES

1. Ruthven D.M., Farooq S., Knaebel K.S. Pressure swing adsorption. New York, 1993. 376 p.
2. Akulinin E.I., Ishin A.A., Skvortsov S.A., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. Mathematical modeling of hydrogen production process by pressure swing adsorption method. Advanced Materials and Technologies. 2017. no. 2. pp. 38–49. doi: 10.17277/amt.2017.01.

3. Akulinin E.I., Dvoretzkiy D.S., Dvoretzkiy S.I. Dynamics of cyclic adsorption processes for the enrichment of air with oxygen: simulation and optimization. *Vestnik Tekhnologicheskogo universiteta* [Journal of Technology University] 2016. vol.19. no. 17. pp.108–114. (in Russian)

4. Ko D., Siriwardane R., Biegler L. Optimization of pressure swing adsorption and fractionated vacuum pressure swing adsorption processes for CO₂ capture. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2005. vol. 44 (21). pp. 8084–8094.

5. Baksh M.S.A., Ackley M.W. Pressure swing adsorption process for the production of hydrogen. Pat. 6340382 USA. 2002.

6. Kirillin V.A., Sychev V.V., Sheindlin A.E. *Tekhnicheskaya termodinamika* [Technical thermodynamics] Moscow, Publishing house MEI, 2008. 496 p. (in Russian).

7. Sumyatskiy Y.I. [Promyshlennye adsorbtsionnye protsessy] Industrial adsorption processes. Moscow, KolosS, 2009. 183p. (in Russian).

8. Keltsev N.V. *Osnovy adsorbtsionnoi tekhnologii* [Basics of adsorption technology] Moscow: Chemistry, 1984. 592 p. (in Russian).

9. Shokroo E., Farsani D., Meymandi H., Yadoliahi N. Comparative study of zeolite 5A and zeolite 13X in air separation by pressure swing adsorption. *Korean Journal of Chemical Engineering*. 2016. vol. 33 (4), pp. 1391–1401.

10. Reclitis G., Reivindrane A., Regsdaile C. Optimization in engineering. Moscow, World, 1986. 320 p. (in Russian).

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

Евгений И. Акулинин к.т.н., доцент, кафедра «Технологии и оборудование пищевых и химических производств», Тамбовский государственный технический университет, ул. Советская, 106, г. Тамбов, 393200, Россия, akulinin-2006@yandex.ru

Олег О. Голубятников к.т.н., ассистент, кафедра «Технологии и оборудование пищевых и химических производств», Тамбовский государственный технический университет, ул. Советская, 106, г. Тамбов, 393200, Россия, golubyatnikov_ol@mai.ru

Дмитрий С. Дворецкий д.т.н., профессор, кафедра «Технологии и оборудование пищевых и химических производств», Тамбовский государственный технический университет, ул. Советская, 106, г. Тамбов, 393200, Россия, dvoretzkiy@tambov.ru

Станислав И. Дворецкий д.т.н., профессор, кафедра «Технологии и оборудование пищевых и химических производств», Тамбовский государственный технический университет, ул. Советская, 106, г. Тамбов, 393200, Россия, sdvoretzkiy@mail.tstu.ru

КРИТЕРИЙ АВТОРСТВА

Все авторы в равной степени принимали участие в написании рукописи и несут ответственность за плагиат

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

ПОСТУПИЛА 01.03.2018

ПРИНЯТА В ПЕЧАТЬ 02.04.2018

INFORMATION ABOUT AUTHORS

Evgenii I. Akulinin Cand. Sci. (Engin.), associate professor, Technologies and equipment of food and chemical industries” department, Tambov State Technical University, Sovetskaya str., 106, Tambov, 393200, Russia, akulinin-2006@yandex.ru

Oleg O. Golubyatnikov Cand. Sci. (Engin.), associate professor, Technologies and equipment of food and chemical industries” department, Tambov State Technical University, Sovetskaya str., 106, Tambov, 393200, Russia, golubyatnikov_ol@mai.ru

Dmitrii S. Dvoretzkiy Dr. Sci. (Engin.), professor, “Technologies and equipment of food and chemical industries” department, Tambov State Technical University, Sovetskaya str., 106, Tambov, 393200, Russia, dvoretzkiy@tambov.ru

Stanislav I. Dvoretzkiy Dr. Sci. (Engin.), professor, Technologies and equipment of food and chemical industries” department, Tambov State Technical University, Sovetskaya str., 106, Tambov, 393200, Russia, sdvoretzkiy@mail.tstu.ru

CONTRIBUTION

All authors equally took part in writing the manuscript and are responsible for plagiarism

CONFLICT OF INTEREST

The authors declare no conflict of interest.

RECEIVED 1.3.2018

ACCEPTED 2.4.2018