

## Численное исследование динамики циклических процессов адсорбционного разделения атмосферного воздуха

Евгений И. Акулинин	<sup>1</sup>	<a href="mailto:akulinin-2006@yandex.ru">akulinin-2006@yandex.ru</a>
Олег О. Голубятников	<sup>1</sup>	<a href="mailto:golubyatnikov_ol@mail.ru">golubyatnikov_ol@mail.ru</a>
Дмитрий С. Дворецкий	<sup>1</sup>	<a href="mailto:dvoretsky@tambov.ru">dvoretsky@tambov.ru</a>
Станислав И. Дворецкий	<sup>1</sup>	<a href="mailto:sdvoretsky@mail.tstu.ru">sdvoretsky@mail.tstu.ru</a>

<sup>1</sup> Тамбовский государственный технический университет, ул. Советская, 106, г. Тамбов, 392000, Россия

**Аннотация.** Выполнены численные исследования динамики процессов короткоциклового безнагревной адсорбции (КБА) разделения атмосферного воздуха, а именно: влияния изменения температуры, состава и давления исходной газовой смеси на чистоту, степень извлечения кислорода и производительность короткоциклового адсорбционной установки в широком диапазоне изменения режимных параметров ее функционирования (давления на выходе компрессора, длительности цикла «адсорбция-десорбция», коэффициента обратного потока, законов изменения во времени степени открытия регулирующих клапанов). Установлено, что изменение режимных параметров и нагрузки по сырью оказывает существенное влияние на степень извлечения и чистоту кислорода. Установлено, что диапазон значений продолжительности стадии адсорбции и давления на выходе компрессора целесообразно ограничить интервалами 39–43 с и  $2.7\text{--}2.8 \times 10^5$  Па, соответственно. Время выхода установки на периодический стационарный режим в среднем соответствует 20–30 циклам «адсорбция-десорбция». Сформулированы и решены задачи оптимизации режимных параметров циклических процессов адсорбционного разделения атмосферного воздуха, осуществляемых в двухадсорбционной напорной установке с гранулированным цеолитовым адсорбентом NaX, по критерию максимальной степени извлечения кислорода; определены оптимальные режимы функционирования установки для различных условий окружающей среды, при которых обеспечиваются заданные значения чистоты продукционного кислорода (более 45 об. %) и производительности установки (~2 л/мин). Показано, что реализация оптимальных законов изменения во времени степени открытия впускных и сбросных клапанов установки КБА позволяет обеспечить заданные значения скорости потока в «лобовом» слое адсорбента, при которых не наблюдается истирание адсорбента при реализации многократных циклических адсорбционно-десорбционных процессов.

**Ключевые слова:** короткоциклового безнагревная адсорбция, цеолитовый адсорбент NaX, кислород, воздух, динамика, математическое моделирование, вычислительный эксперимент, оптимизация

## Numerical study of the dynamics and optimization of the modes of air adsorption separation and oxygen concentration

Evgeny I. Akulinin	<sup>1</sup>	<a href="mailto:akulinin-2006@yandex.ru">akulinin-2006@yandex.ru</a>
Oleg O. Golubyatnikov	<sup>1</sup>	<a href="mailto:golubyatnikov_ol@mail.ru">golubyatnikov_ol@mail.ru</a>
Dmitry S. Dvoretsky	<sup>1</sup>	<a href="mailto:dvoretsky@tambov.ru">dvoretsky@tambov.ru</a>
Stanislav I. Dvoretsky	<sup>1</sup>	<a href="mailto:sdvoretsky@mail.tstu.ru">sdvoretsky@mail.tstu.ru</a>

<sup>1</sup> Tambov State Technical University, Sovetskaya str., 106, Tambov, 392000, Russia

**Abstract.** Numerical researches of influence of temperature, composition and pressure changes of the initial gas mixture on the purity, recovery and capacity of the pressure swing adsorption (PSA) unit was made. Air separation dynamics was researched in a wide range of control (pressure at the compressor outlet, the duration of the adsorption – desorption cycle, backflow coefficient, programs of control valves opening degree in time) variables. It was found that the change of regime parameters and the inflow on has a significant impact on the purity and recovery of oxygen. Also was founded that the range of the duration of the adsorption stage and the compressor outlet pressure values should be limited to the intervals of 39–43 s and  $2.7\text{--}2.8 \times 10^5$  Pa, respectively. The steady-state of the PSA unit mode output time was amount 20–30 cycles of "adsorption-desorption". Formulated and solved the optimization tasks of regime parameters of air separation cyclic processes by criterion of maximum oxygen recovery in 2-bed PSA unit with granular adsorbent zeolite 13X; the optimal values of the control parameters for differential environmental conditions (when the product oxygen concentration not less than 45% vol. and the PSA unit capacity ~2 l/min) are determined. It is shown that the implementation of the optimal of the inlet and discharge valves opening degree changes program in PSA unit allows to provide the set values of the gas flow rate in the "frontal" layer of the adsorbent, in which there is no abrasion of the adsorbent in the cyclic adsorption-desorption processes

**Keywords:** pressure swing adsorption, zeolite adsorbent 13X, oxygen, air, dynamic, mathematical modeling, numerical experiment, optimization

Для цитирования

Акулинин Е.И., Голубятников О.О., Дворецкий Д.С., Дворецкий С.И. Численное исследование динамики циклических процессов адсорбционного разделения атмосферного воздуха // Вестник ВГУИТ. 2019. Т. 81. № 1. С. 310–317. doi:10.20914/2310-1202-2019-1-310-317

For citation

Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretsky D.S., Dvoretsky S.I. Numerical study of the dynamics and optimization of the modes of air adsorption separation and oxygen concentration. *Vestnik VGUIT* [Proceedings of VSUET]. 2019. vol. 81. no. 1. pp. 310–317. (in Russian). doi:10.20914/2310-1202-2019-1-310-317

### Введение

В последние десятилетия наиболее распространенным способом разделения газовых смесей и концентрирования в них целевых продуктов являются циклические процессы короткоциклового безнагревной адсорбции (КБА или в англоязычной литературе PSA – Pressure Swing Adsorption), представляющие особый класс адсорбционных процессов с циклически изменяющимся давлением. В промышленности КБА – процессы широко применяют для безнагревного разделения углеводородов, извлечения метана, концентрирования водорода, кислорода, азота и других газов [1–4].

**Цель работы** – численное исследование динамики циклических процессов адсорбционного разделения атмосферного воздуха, постановка задачи и оптимизация режимов функционирования установки КБА.

### Математическое описание циклических процессов адсорбционного разделения атмосферного воздуха

Технологический процесс концентрирования кислорода методом адсорбционного разделения воздуха осуществляется в двухадсорберной установке КБА с гранулированным адсорбентом – синтетическим цеолитом NaX и конструктивными параметрами:  $D_A$  – внутренний диаметр адсорбера,  $L$  – высота насыпного слоя адсорбента,  $d_{gr}$  – диаметр гранул адсорбента [5]. Входными переменными в установке КБА являются: 1) нагрузка по сырью  $G^{in}$  – расход исходной газовой смеси (атмосферного воздуха); 2) возмущающие воздействия – температура  $T_g^{in}$ , давление  $P_1^{out}$  и покомпонентный состав  $y^{in}$  исходной газовой смеси, поступающей на разделение в адсорберы. Режимные переменные  $u$  установки КБА включают:  $P^{in}$  – давление на выходе компрессора,  $t_{ads}$  – продолжительность стадии адсорбции (длительность полупериода адсорбция-десорбция),  $\theta$  – коэффициент обратного потока, степени открытия  $\psi_{вп, K_1}(t), \psi_{сбр, K_4}(t), t \in [0, t_{ads}], \psi_{вп, K_2}(t), \psi_{сбр, K_3}(t), t \in [t_{ads}, t_{des}]$  регулирующих «впускных»  $K_1, K_2$  и «сбросных»  $K_3, K_4$  клапанов как функции времени  $t \in [0, t_c]$ , т. е.  $u = \{P^{in}, t_{ads}, \theta, \psi(t)\}$ .

В состав выходных переменных входят концентрации  $y_1^{out}$  продукционного кислорода и сопутствующих веществ, степень извлечения кислорода  $\eta$ , производительность  $Q$  установки КБА.

Математическое моделирование проводили при следующих допущениях: 1) атмосферный воздух (состав: 1 –  $O_2$  с концентрацией  $20,8 \pm 1,0$  об.%, 2 –  $N_2$  с концентрацией 78,2 об.%, 3 – Ar и другие примеси с концентрацией  $1,0 \pm 1,0$  об.%) является 3-компонентной газовой смесью (примеси не превышают 0,001 об.%) и рассматривается как идеальный газ, что вполне допустимо при давлении в адсорбере до  $200 \cdot 10^5$  Па [6]; 2) диффузия  $O_2, N_2$  и распространение теплоты в газовой и твердой фазах осуществляются только в аксиальном направлении движения потока газовой смеси в адсорбере (по длине адсорбента) [7–9]; 3) в качестве адсорбента используется гранулированный цеолит NaX с диаметром гранул 1,6 мм; 4) адсорбционное равновесие (изотерма адсорбции) описывается уравнением Дубинина-Радушкевича [10]; 5) тепловые потери в окружающую среду пренебрежимо малы [11].

Математическое описание процесса разделения воздуха и концентрирования кислорода включает следующие уравнения [12]: 1) покомпонентного материального баланса компонентов  $O_2, N_2$  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 использовали метод прямых в программной среде Matlab [13].

Анализ точности математической модели процесса адсорбционного разделения воздуха проводили с использованием относительной погрешности рассогласования расчетных по модели и экспериментальных значений концентрации продукционного кислорода в стационарном периодическом режиме (после 20–30 циклов функционирования установки КБА). Максимальная погрешность рассогласования не превышала 15%, что вполне сопоставимо с погрешностью определения экспериментальных данных и позволяет использовать математическую модель

для технологического расчета, оптимизации циклических процессов адсорбционного разделения атмосферного воздуха и проектирования установок КБА.

**Численное исследование динамики циклических процессов адсорбционного разделения атмосферного воздуха**

На первом этапе проводили численные эксперименты по оценке влияния возмущающих и режимных переменных на выходные координаты процесса адсорбционного разделения воздуха в двухадсорберной установке КБА с гранулированным цеолитовым адсорбентом NaX и конструктивными параметрами:  $D_A = 0,04$  м,  $L = 0,2$  м,  $d_{gr} = 1,6$  мм (таблица 1).

Таблица 1. Исходные данные для вычислительного эксперимента

Table 1. Source data for Computational experiment

Варьируемые переменные Variable variables	Номинальные значения Nominal value	Диапазон изменения Range of variation
$t_{ads}$ , с	5	0.5–20
$\theta$ , отн. ед.	1.7	–
$P^{in}$ , $\cdot 10^5$ Па	4	2–6
$d_{gr}$ , мм	1.6	–
$y^{in}$ , об. %	20.8, 78.2, 1	19.8–20.8, 78.2, 1–2
$T_g^{in}$ , К	293	243–303
$\psi_\lambda^j$ , отн. ед.	1	0–1
$P_1^{out}$ , $\cdot 10^5$ Па	1	0.25–1

Из анализа зависимостей на рисунке 1 следует, что для каждого значения давления на выходе компрессора  $P^{in}$  существует значение продолжительности  $t_{ads}$  стадии адсорбции, при которой достигается максимальное значение концентрации  $y_1^{out}$  продукционного кислорода (например, для  $P^{in} = 2 \cdot 10^5$  Па и  $t_{ads} = 5$  с –  $y_1^{out} = 80$  об. % (кривая 1). При длительности стадии адсорбции менее 5 с наблюдается недостаточная регенерация адсорбента (например, для  $P^{in} = 2 \cdot 10^5$  Па на отрезке времени  $t_{ads}$  от 0,5 до 5 с (кривая 1), а при большей длительности концентрация продукционного кислорода  $y_1^{out}$  уменьшается из-за проскока части газовой воздушного потока в слое адсорбента (например, при  $P^{in} = 2 \cdot 10^5$  Па и продолжительности  $t_{ads}$  стадии адсорбции

от 5 до 20 с (кривая 1), что приводит к снижению эффективности работы установок КБА.

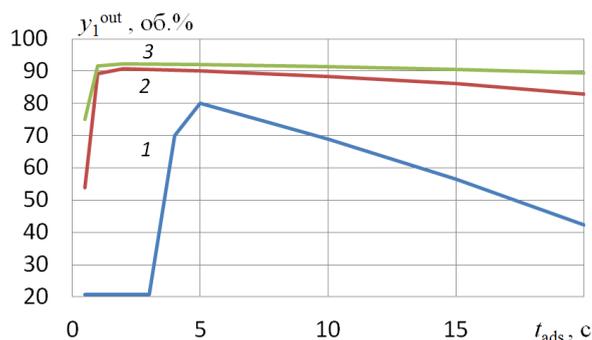


Рисунок 1. Зависимость концентрации продукционного кислорода  $y_1^{out}$  от продолжительности  $t_{ads}$  стадии адсорбции при давлении на выходе компрессора: 1–  $P^{in} = 2 \cdot 10^5$  Па; 2–  $P^{in} = 4 \cdot 10^5$  Па; 3–  $P^{in} = 6 \cdot 10^5$  Па

Figure 1. Dependence of the concentration of production oxygen  $y_1^{out}$  From Duration  $t_{ads}$  Adsorption stage At the compressor outlet pressure: 1 –  $P^{in} = 2 \cdot 10^5$  Pa; 2 –  $P^{in} = 4 \cdot 10^5$  Pa; 3 –  $P^{in} = 6 \cdot 10^5$  Pa

Следует отметить, что увеличение давления на выходе компрессора  $P^{in}$  с  $2 \cdot 10^5$  до  $6 \cdot 10^5$  Па приводит к уменьшению продолжительности  $t_{ads}$  стадии адсорбции от 5 до 2 с (кривые 1, 3) и повышению концентрации  $y_1^{out}$  продукционного кислорода от 80,0 до 92,3 об. %, а также к повышению степени извлечения  $\eta$  от 11,9% до 69,5% (на рисунках не показано) и производительности установки КБА от 0,25 до 4,9 л/мин (на рисунках не показано).

Анализ зависимостей на рисунке 2 показывает, что для наихудшего случая эксплуатации установки КБА (при повышении температуры окружающей среды и снижении концентрации кислорода в атмосферном воздухе) максимальное значение концентрации продукционного кислорода  $y_1^{out}$  уменьшается по сравнению с номинальным режимом от 90 до 60 об. %, и наблюдается резкое снижение степени извлечения кислорода  $\eta$  от 69,5 до 11,0% (рисунок 2). Таким образом, при неблагоприятных условиях функционирования установки КБА для поддержания заданной чистоты  $y_1^{out}$  и степени извлечения  $\eta$  кислорода следует повышать давление на выходе компрессора  $P^{in}$  до  $6 \cdot 10^5$  Па и уменьшать продолжительность  $t_{ads}$  стадии адсорбции до 2–3 с (рисунок 1, кривые 2, 3).

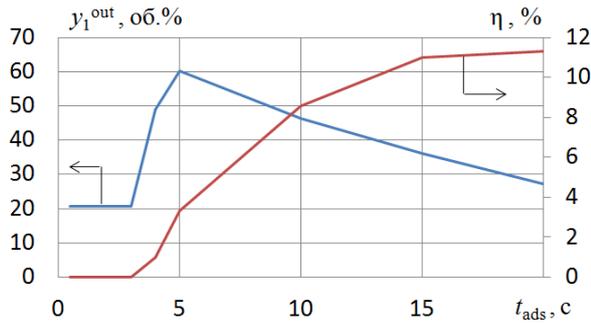


Рисунок 2. Зависимость концентрации продукционного кислорода  $y_1^{out}$  и степени извлечения  $\eta$  от длительности полуцикла  $t_{ads}$  при наихудшем случае эксплуатации установки

Figure 2. Dependence of the concentration of production oxygen  $y_1^{out}$  and the degree of extraction  $\eta$  From the duration of the half-cycle  $t_{ads}$  In the worst case operation of the installation

### Оптимизация циклических процессов адсорбционного разделения атмосферного воздуха

Целью функционирования установки КБА при разделении воздуха является достижение максимальной степени извлечения кислорода и его концентрирования до заданной чистоты  $y_{1,зад}^{out}$  в стационарном периодическом режиме при  $t = t_{st}$  (как правило, после определенного количества циклов работы установки КБА, предшествовавших «установившемуся» режиму) и в заданном количестве (производительность  $Q$  установки КБА должна быть не ниже заданной  $Q_{зад}$ ). При этом необходимо обеспечить минимальные энергетические затраты на стадиях адсорбции и десорбции и выполнение ограничений по скорости газовой фазы  $v_g$  при наборе и сбросе давления на стадиях адсорбции  $P_{ads}^{in}(t)$  и десорбции  $P_{ads}^{in}(t)$ ,  $t \in [0, t_c / 2]$ . В этом случае в качестве целевой функции оптимального управления целесообразно использовать среднее значение степени извлечения  $\eta(u(t), z(t))$  кислорода на отрезке времени  $[0, t_{st}]$ .

Будем считать, что случайные изменения возмущений  $z(t)$ ,  $t \in [0, t_\phi]$  происходят на интервалах времени  $[t_i, t_{i+1}]$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots$ , намного превышающих отрезков времени  $[0, t_{st}]$ , на котором осуществляется решение задачи оптимизации циклических режимов работы установки КБА. Таким образом, возмущения  $z(t)$  на интервале времени  $[0, t_\phi]$  будем описывать кусочно-постоянными функциями  $z(t_i) = z^i = \text{const}$ ,  $i = 1, 2, 3, \dots$  Аналогично непрерывные функции управлений

$$\{\psi_{вп, K_1}(t), \psi_{сбр, K_4}(t), \psi_{вп, K_2}(t), \psi_{сбр, K_3}(t)\}, t \in [0, t_c]$$

на отрезке времени  $[0, t_c]$  будем аппроксимировать кусочно-постоянными функциями

$$\psi_1^j = \psi_{вп, K_1}^{j,i} = \psi_{вп, K_1}(t_j, z^i), t_j \in [0, t_c / 2],$$

$$\psi_4^j = \psi_{сбр, K_4}^{j,i} = \psi_{сбр, K_4}(t_j, z^i), j = \overline{1, m},$$

$$\psi_2^j = \psi_{вп, K_2}^{j,i} = \psi_{вп, K_2}(t_j, z^i), t_j \in [t_c / 2, t_c],$$

$$\psi_3^j = \psi_{сбр, K_3}^{j,i} = \psi_{сбр, K_3}(t_j, z^i), j = \overline{1, m}.$$

Сформулируем задачу оптимизации циклических режимов работы установки КБА при разделении атмосферного воздуха: при фиксированных значениях возмущающих воздействий  $\underline{z}^i \leq z(t_i) = z^i \leq \bar{z}^i$  и нагрузки по сырью  $\underline{G}^{in} \leq G^{in} \leq \bar{G}^{in}$  требуется определить режимные переменные (управления)  $u^*$  (время  $t_{ads}^* = t_c^* / 2$  полуцикла, давление на выходе компрессора  $P^{in*}$ , коэффициент обратного потока  $\theta^*$ , степени открытия  $\psi_1^{j*} = \psi_{вп, K_1}^{j,i*}$ ;  $\psi_2^{j*} = \psi_{вп, K_2}^{j,i*}$  на отрезке времени  $[0, t_c / 2]$  впускных  $K_1, K_2$  и  $\psi_3^{j*} = \psi_{сбр, K_3}^{j,i*}$ ;  $\psi_4^{j*} = \psi_{сбр, K_4}^{j,i*}$  на отрезке времени  $[t_c / 2, t_c]$  сбросных клапанов  $K_3, K_4$ ) такие, что среднее значение степени извлечения кислорода  $\eta(u)$  на отрезке времени  $[0, t_{st}]$  достигает максимума  $\eta^*$ , т. е.

$$I(u^*, z^i) = \max_{u \in U} \frac{1}{t_{st}(u)} \int_0^{t_{st}(u)} \eta(u, y_1^{out}(t), z^i) dt \quad (1)$$

при связях в форме уравнений математической модели динамики процесса обогащения воздуха кислородом [12] и ограничениях на концентрацию продуктового кислорода

$$g_1(z^i, u, y_{1,st}^{out}) = y_{1,зад}^{out} - y_{1,st}^{out}(z^i, u) \leq 0; \quad (2)$$

на производительность установки КБА

$$g_2(z^i, u, y_{1,st}^{out}) = Q_{зад} - Q(z^i, u, y_{1,st}^{out}) \leq 0, \quad (3)$$

на скорость газовой смеси в слое адсорбента

$$g_3(z^i, u) = \max_{t \in t_c} |v_g(z^i, u)| - v_g^+ \leq 0, \quad (4)$$

$$g_4(z^i, u) = \Delta P_{ads, cn} = \max_{t \in [0, t_c / 2]} [P_{ads}^{out}(z^i, u, L, t) - P_{ads}^{in}(z^i, u, 0, t)] \leq \Delta P_{ads}^+, \quad (5)$$

$$g_5(z^i, u) = \Delta P_{des, cn} = \max_{t \in [0, t_c / 2]} [P_{des}^{out}(z^i, u, L, t) - P_{des}^{in}(z^i, u, 0, t)] \leq \Delta P_{des}^+, \quad (6)$$

на управления

$$t_{ads} \leq \bar{t}_{ads} \leq t_{ads}^* \leq \underline{t}_{ads}; \quad \underline{\theta} \leq \theta \leq \bar{\theta};$$

$$\underline{P}^{in} \leq P^{in}(t) \leq \bar{P}^{in}, \quad (7)$$

$$0 \leq \psi_\lambda^j \leq 1, \lambda = 1, 2, 3, 4; j = \overline{1, m}$$

где  $v_g^+$  – максимально допустимая (критическая с точки зрения разрушения адсорбента) скорость воздуха в лобовом слое адсорбента;  $t_{ads}^-, t_{ads}^+$  – минимальное и максимальное время полуцикла;  $P^{in}, \bar{P}^{in}$  – минимальное и максимальное давление на выходе компрессора;  $\underline{\theta}, \bar{\theta}$  – минимальное и максимально допустимые значения коэффициента обратного потока.

Ограничения  $g_i(z^i, u, y_{1,st}^{out}), i=1, 2$  следует вычислять через решение уравнений динамики циклического процесса обогащения воздуха кислородом [12] до наступления нового стационарного периодического режима работы установки КБА, вызванного действием возмущения  $z^i, i=1, 2, 3, \dots$ , т. е. при  $y_1^{out}(t) = y_{1,st}^{out} \approx const$ , а ограничения (4)–(6) – на отрезке времени  $[0, t_c]$ . Ограничение максимального значения скорости воздуха в лобовом слое адсорбента необходимо учитывать при решении задачи оптимизации для предохранения гранулированного адсорбента от разрушения вследствие аэродинамического удара при резком (скачкообразном) открытии управляющих клапанов  $K_1, K_2, K_3, K_4$  установки КБА.

Сформулированная аргументная задача оптимизации (1)–(7) при допущении об аппроксимации непрерывных функций режимных переменных  $\{\psi_{вп, K_1}(t), \psi_{вп, K_2}(t), \psi_{сбр, K_3}(t), \psi_{сбр, K_4}(t)\}$ , на отрезке времени  $[0, t_c]$  кусочно-постоянными функциями относится к классу задач нелинейного программирования, для решения которой использовали метод последовательного квадратичного программирования [14] в программной среде MatLab. Исходные данные, диапазоны возможного изменения режимных (управляющих) переменных и результаты решения задачи оптимизации приведены в таблице 2.

Порядок решения был следующий. Для номинальных значений возмущающих воздействий решалась задача оптимизации (1)–(7) и находились оптимальные значения режимных (управляющих) параметров  $u$  (таблица 2). Динамика скорости, расхода и давления газового потока в лобовом слое адсорбента при ступенчатом открытии впускных клапанов  $K_1, K_2$  представлена на рисунках 3–5. Закон изменения во времени степени  $\psi_\lambda^j \leq 1, \lambda = 1, 2, 3, 4; j = \overline{1, m}$  открытия клапана подбирали из условия того, что скорость потока в лобовом слое адсорбента не превышает критического значения  $v_g^+ = 0,08$  м/с, при этом шаг по времени при ступенчатом управлении составлял 6 с.

Таблица 2.  
Результаты решения задачи оптимизации  
Table 2.  
Results of optimization problem solving

Наименование переменных задачи Name of task variables	Диапазон варьирования Range of variation	Начальные приближения Initial approximation
Управления: Managements: $t_{ads}, c$ $\theta$ , отн. ед. $P^{in}, \cdot 10^5 Pa$ $\psi_\lambda^j$ , отн. ед.	6–100 0–5 2–5 0–1	40 1.7 3.5 0.5
Конструктивные параметры Construction parameter $L$ , м $D_A$ , м $d_{gr}$ , мм	– – –	0.5 0.05 2
Ограничения: Restrictions: $y_1^{out}$ , об.% $Q$ , л/мин $v_g$ , м/с		$y_1^{out} \geq 45$ $Q \geq 2$ $v_g \leq 0.08$
Возмущения: Perturbations:	Номинальные значения возмущений The nominal value of the disturbances	Наихудший случай Worst case
$y^{in}$ , об.% $T_g^{in}$ , К $P_1^{out}$ , $\cdot 10^5 Pa$	20.8; 78.2; 1 293 1	20.3, 78.2, 1.5 303 1
Оптимальные значения параметров The optimal values of the parameters		
$t_{ads}^*$ , с $\theta^*$ , отн. ед. $P^{in*}$ , $\cdot 10^5 Pa$ $\psi_\lambda^j$ , отн. ед. $y_1^{out*}$ , об.% $Q^*$ , л/мин $\eta^*$ , отн. ед.	53 1.5 3 0.2618, 0.314, 0.3785, 0.455, 0.548, 0.658, 0.792, 0.955, 1	41 1.7 2.75 0.2992, 0.363, 0.445, 0.542, 0.663, 0.807, 0.985 45.1 2 53.4

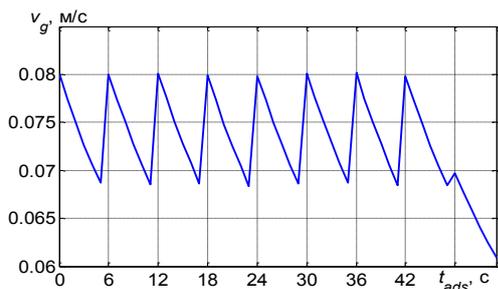


Рисунок 3. Динамика скорости газозвдушного потока в лобовом слое адсорбента при оптимальном законе изменения во времени степени открытия впускных клапанов  $K_1, K_2$

Figure 3. Dynamics of the gas-air flow velocity in the adsorbent frontal layer under the optimal law of change in time of the degree of opening of inlet valves  $K_1, K_2$

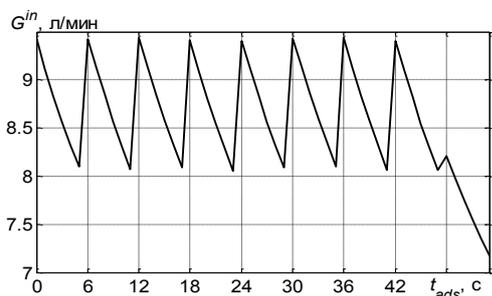


Рисунок 4. Динамика расхода газозвдушного потока в лобовом слое адсорбента при оптимальном законе изменения во времени степени открытия впускных клапанов  $K_1, K_2$

Figure 4. The dynamics of gas-air flow in the frontal layer of adsorbent under the optimal law of change in time of the degree of opening of inlet valves  $K_1, K_2$

Исходя из анализа физических условий осуществления циклического адсорбционного процесса было выбрано сочетание возмущающих воздействий, характеризующих наиболее неблагоприятные условия проведения процесса (таблица 2, наихудший случай). Расчеты показали, что при неблагоприятных условиях осуществления процесса найденные ранее оптимальные значения управляющих параметров не позволяют обеспечить заданную концентрацию  $y_{1,зад}^{out} = 45$  об.% производяемого кислорода ( $y_1^{out} = 40,18$  об.%).

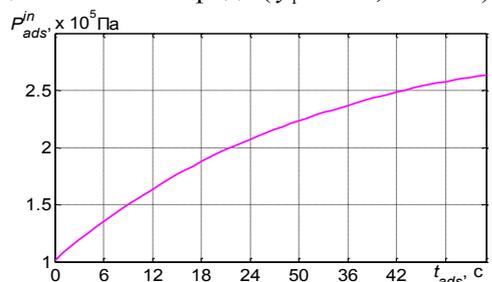


Рисунок 5. Динамика давления в адсорбере при оптимальном законе изменения во времени степени открытия впускных клапанов  $K_1, K_2$

Figure 5. Dynamics of pressure in adsorbent under the optimal law of change in time of the degree of opening of inlet valves  $K_1, K_2$

Анализ результатов решения для наихудшего случая по сравнению с решением, полученным при номинальных значениях возмущений, показал, что степень извлечения кислорода уменьшилась на 14,4% (что объясняется уменьшением значения равновесной концентрации при повышении температуры исходной смеси), продолжительность стадии адсорбции и давление уменьшились на 12 с и  $0,25 \cdot 10^5$  Па, соответственно, а коэффициент обратного потока увеличился на 45,5%.

### Заклучение

Методом вычислительного эксперимента установлено, что наибольшее влияние на эффективность функционирования установки КБА оказывают: давление на выходе компрессора, закон изменения во времени степени открытия регулирующих клапанов, продолжительность стадии адсорбции и коэффициент обратного потока. Диапазон значений, включающий оптимальное значение продолжительности стадии адсорбции давления на выходе компрессора, целесообразно ограничить интервалами 39–43 с и  $2,7-2,8 \cdot 10^5$  Па соответственно. Время выхода установки на периодический стационарный режим в среднем соответствует 20–30 циклам «адсорбция-десорбция».

Показано, что реализация оптимальных законов изменения во времени степени открытия впускных и сбросных клапанов установки КБА позволяет обеспечить заданные значения скорости газового потока в «лобовом» слое адсорбента, при которых не наблюдается истирание адсорбента при реализации многократных циклических адсорбционно-десорбционных процессов. При этом влияние ограничения скорости газового потока на чистоту производяемого кислорода, степень извлечения и производительность установки КБА требует проведения дальнейших исследований.

Полученные результаты численного анализа, математическое и алгоритмическое обеспечение функционирования двухадсорберной установки КБА могут быть использованы при проектировании новых автоматизированных процессов и адсорбционных технологических установок с циклически изменяющимся давлением для разделения и очистки многокомпонентных газовых смесей.

### Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки России в рамках проектной части Государственного задания № 10.3533.2017/ПЧ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Moran A., Talu O. Limitations of portable pressure swing adsorption processes for air separation // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2018. V. 57. № 35. P. 11981–11987.
2. Li J.H. The experimental study of a new pressure equalization step in the pressure swing adsorption cycle of a portable oxygen concentrator // *Bio-medical Materials and Engineering.* 2014. V. 24. № 5. P. 1771–1779.
3. Wu C., Vemula R., Kothare M., Sircar S. Experimental Study of a Novel Rapid Pressure-Swing Adsorption Based Medical Oxygen Concentrator: Effect of the Adsorbent Selectivity of N<sub>2</sub> over O<sub>2</sub> // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2016. V. 55. № 16. P. 4676–4681.
4. Xu M., Wu H.-C., Lin Y.S., Deng S. Simulation and optimization of pressure swing adsorption process for high-temperature air separation by perovskite sorbents // *Chemical Engineering Journal.* 2018. № 354. P. 62–74.
5. Ding Z., Han Z., Fu Q., Shen Y. et al. Optimization and analysis of the VPSA process for industrial-scale oxygen production // *Adsorption.* 2018. V. 24. № 5. P. 499–516.
6. Кириллин В.А., Сычев В.В., Шейндлин А.Е. Техническая термодинамика. Москва: Издательский дом МЭИ, 2016. 496 с.
7. 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.
8. Beeyani A.K., Singh K., Vyas R.K., Kumar S. et al. Parametric studies and simulation of PSA process for oxygen production from air // *Polish Journal of Chemical Technology.* 2010. V. 12. № 2. P. 18–28.
9. Hosseinzadeh Hejazi S.A., Estupinan Perez L., Rajendran A., Kuznicki S. Cycle Development and Process Optimization of High-Purity Oxygen Production Using Silver-Exchanged Titanosilicates // *Industrial and Engineering Chemistry Research.* 2017. V. 56. № 19. P. 5679–5691.
10. Ягодовский В.Д. Адсорбция М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. 219 с.
11. Skvortsov S.A., Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretzky D.S. et al. Mathematical modelling of cyclic pressure swing adsorption processes // *Journal of Physics: Conference Series.* 2018. V. 1015.
12. Акулинин Е.И., Голубятников О.О., Дворецкий Д.С., Дворецкий С.И. Оптимальное проектирование короткоцикловых адсорбционных установок для концентрирования кислорода // *Известия СПбГТИ(ТУ).* 2017. № 41. С. 103–111.
13. Rice R.G., Do D.D. *Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers: 2 ed.* New Jersey, 2012.
14. Гольдштейн А.Л. Оптимизация в среде MATLAB. Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2015. 192 с.

REFERENCES

- 1 Moran A., Talu O. Limitations of portable pressure swing adsorption processes for air separation. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2018. vol. 57. no. 35. pp. 11981–11987.
- 2 Li J.H. The experimental study of a new pressure equalization step in the pressure swing adsorption cycle of a portable oxygen concentrator. *Bio-medical Materials and Engineering.* 2014. vol. 24. no. 5. pp. 1771–1779.
- 3 Wu C., Vemula R., Kothare M., Sircar S. Experimental Study of a Novel Rapid Pressure-Swing Adsorption Based Medical Oxygen Concentrator: Effect of the Adsorbent Selectivity of N<sub>2</sub> over O<sub>2</sub>. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2016. vol. 55. no. 16. pp. 4676–4681.
- 4 Xu M., Wu H.-C., Lin Y.S., Deng S. Simulation and optimization of pressure swing adsorption process for high-temperature air separation by perovskite sorbents. *Chemical Engineering Journal.* 2018. no. 354. pp. 62–74.
- 5 Ding Z., Han Z., Fu Q., Shen Y. et al. Optimization and analysis of the VPSA process for industrial-scale oxygen production. *Adsorption.* 2018. vol. 24. no. 5. pp. 499–516.
- 6 Kirillin V.A., Sychev V.V., Sheindlin A.E. *Tekhnicheskaya termodinamika [Technical thermodynamics].* Moscow, Publishing house MEI, 2016. 496 p. (in Russian).
- 7 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. no. 4. pp. 1391–1401.
- 8 Beeyani A.K., Singh K., Vyas R.K., Kumar S. et al. Parametric studies and simulation of PSA process for oxygen production from air. *Polish Journal of Chemical Technology.* 2010. vol. 12. no. 2. pp. 18–28.
- 9 Hosseinzadeh Hejazi S.A., Estupinan Perez L., Rajendran A., Kuznicki S. Cycle Development and Process Optimization of High-Purity Oxygen Production Using Silver-Exchanged Titanosilicates. *Industrial and Engineering Chemistry Research.* 2017. vol. 56. no. 19. pp. 5679–5691.
- 10 Yagodovskiy, V.D. *Adsorbtsiya [Adsorption].* Moscow, BINOM. Laboratoriya znaniy, 2015. 219 p (in Russian).
- 11 Skvortsov S.A., Akulinin E.I., Golubyatnikov O.O., Dvoretzky D.S. et al. Mathematical modelling of cyclic pressure swing adsorption processes. *Journal of Physics: Conference Series.* 2018. vol. 1015.
- 12 Akulinin EI, Golubyatnikov O.O., Dvoretzky DS, Dvoretzky S.I. Optimal design of short-cycle adsorption plants for the concentration of oxygen. *Izvestiya SPbGTI(TU)* [Bulletin of St PbSIT(TU)]. 2017. no. 41. pp. 103–111. (in Russian).
- 13 Rice R.G., Do D.D. *Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers: 2 ed.* New Jersey, 2012.
- 14 Gol'dshteyn A.L. *Optimizatsiya v srede MATLAB [Optimization in the MATLAB environment].* Perm, PNRPU, 2015. 192 p. (in Russian).

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**Евгений И. Акулинин** к.т.н., доцент, кафедра технологии и оборудования 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., ст. преподаватель, кафедра технологии и оборудования пищевых и химических производств, Тамбовский государственный технический университет, ул. Советская, 106, г. Тамбов, 393200, Россия, golubyatnikov\_ol@mail.ru

**Дмитрий С. Дворецкий** д.т.н., профессор, кафедра технологии и оборудования пищевых и химических производств, Тамбовский государственный технический университет, ул. Советская, 106, г. Тамбов, 393200, Россия, dvoretsky@tambov.ru

**Станислав И. Дворецкий** д.т.н., профессор, кафедра технологии и оборудования пищевых и химических производств, Тамбовский государственный технический университет, ул. Советская, 106, г. Тамбов, 393200, Россия, sdvoretsky@mail.tstu.ru

#### КРИТЕРИЙ АВТОРСТВА

**Евгений И. Акулинин, Олег О. Голубятников** обзор литературных источников по исследуемой проблеме, провели эксперимент, выполнили расчёты

**Дмитрий С. Дворецкий** консультация в ходе исследования

**Станислав И. Дворецкий** написал рукопись, корректировал её до подачи в редакцию и несёт ответственность за плагиат

#### КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

ПОСТУПИЛА 26.12.2018

ПРИНЯТА В ПЕЧАТЬ 07.02.2019

#### INFORMATION ABOUT AUTHORS

**Evgeny 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.), senior lecturer, technologies and equipment of food and chemical industries department, Tambov State Technical University, Sovetskaya str., 106, Tambov, 393200, Russia, golubyatnikov\_ol@mail.ru

**Dmitry S. Dvoretsky** Dr. Sci. (Engin.), professor, technologies and equipment of food and chemical industries department, Tambov State Technical University, ul. Sovetskaya, 106, Tambov, 393200, Russia, dvoretsky@tambov.ru

**Stanislav I. Dvoretsky** Dr. Sci. (Engin.), professor, technologies and equipment of food and chemical industries department, Tambov State Technical University, Sovetskaya str., 106, Tambov, 393200, Russia, sdvoretsky@mail.tstu.ru

#### CONTRIBUTION

**Evgeny I. Akulinin, Oleg O. Golubyatnikov** review of the literature on an investigated problem, conducted an experiment, performed computations

**Dmitry S. Dvoretsky** consultation during the study

**Stanislav I. Dvoretsky** wrote the manuscript, correct it before filing in editing and is responsible for plagiarism

#### CONFLICT OF INTEREST

The authors declare no conflict of interest.

RECEIVED 12.26.2019

ACCEPTED 2.7.2019