

变压吸附数值模拟的研究

卜令兵 郜豫川 张剑锋 杨云 李小荣

(四川天一科技股份有限公司变压吸附分离工程研究所,成都 610225)

摘 要 从变压吸附的控制方程入手,分析了瞬时平衡模型、线性推动力模型以及孔扩散模型,并对软件模拟变压吸附系统进行了论述。利用三维流体力学模拟软件,可以模拟并优化吸附塔的气体分布器及其他塔内件,优化程控阀的流体力学性能;利用一维流体力学模拟软件,可以对变压吸附系统管网仿真与优化。利用大型商用软件对变压吸附系统进行从微观的流动细节模拟到宏观的运行状态模拟,是变压吸附数值模拟和系统优化的发展方向。

关键词 变压吸附 数值模拟 流体力学

文章编号:1005-9598(2009)-04-0030-03 中图分类号:TQ028 文献标识码:A

引 言

变压吸附 (Pressure Swing Adsorption, 简称 PSA) 技术,是一种新型的气体分离与净化技术,它通过周期性的压力变换来实现气体的分离或提纯^[1],属于物理过程,在常温下即可实现,同时,变压吸附气体分离与净化技术具有装置规模灵活、自动化程度高、能耗低等优点。因此,变压吸附技术自 20 世纪 60 年代第一套工业装置问世以来,得到了广泛的应用和快速的发展,其应用领域已经从最初的气体干燥逐步发展到各种工业气体的浓缩与净化^[2],应用范围也从单纯的气体分离发展到与其他化工过程有机结合形成不可缺少的化工单元,并成为各种工业尾气治理与综合利用的有效方法。变压吸附在应用领域不断拓展的同时,其装置规模也在不断的扩大。目前在建的变压吸附制氢装置已经达到 280 000m³/h,并且,随着化工装置的大型化,变压吸附设备的规模还将不断地刷新纪录。变压吸附的大型化对其配套的吸附工艺、吸附剂、吸附塔的结构、程控阀门、控制程序以及动力设备等提出了更高的要求。因此对变压吸附系统进行深入的研究,是变压吸附技术发展的源动力和技术保障。

由于变压吸附过程本身复杂性和各种工艺参数之间的耦合特性,变压吸附过程的理论研究远远落后于实际应用。目前变压吸附系统的设计主要根据经验数据和模化实验结果,这会产生两方面的问题:(1)研发费用的升高以及设备开发周期延长,因为要确定吸附床结构参数和过程的工艺参数往往需要大量的实验。(2)有些情况下,由于模化实验的比例太小,不能很好反映实际装置的各种性能和参数情况,实际装置的性能达不到设计要求,造成巨大资金浪费。采用数值模拟和实验研究相结合的手段,可以深入洞悉变压吸附分离过程的内部机理,优化系统的结构参数和过程工艺参数,从而有效降低能耗和投资规模,提高变压吸附技术在气体分离行业的竞争优势。

1 变压吸附工艺数值模拟技术

1.1 变压吸附过程的控制方程

变压吸附过程是一个动态的过程,包括吸附、放压、冲洗、均压和冲压等若干非稳态的循环步骤,此过程中同时进行动量、质量和热量的传递。因此,动态过程的模拟需要用一系列微分方程来描述,这就使得变压吸附过程的操作性能和变量之间的关系不能用显式代数方程表示。在一定的假设条件下,变压吸附过程的控制方程包括以下 3 个方面的子方程^[3]:(1)吸附床流体相质量守恒方程;(2)吸附剂颗粒内部质量守恒方程;(3)吸附平衡等温线方程。吸附床流体相质量守恒方程是关于气相组分浓度以及气相速度沿吸附

收稿日期:2009-04-12

作者简介:卜令兵(1978—),男,2003年毕业于石家庄铁道学院,2006年毕业于北京科技大学热能系,硕士,工程师,主要从事变压吸附的开发和应用研究

床方向变化的方程。该方程可以通过沿吸附床方向的质量平衡方程以及能量平衡方程获得。吸附剂颗粒内部质量守恒方程是关于气相组分在吸附剂颗粒内部扩散的方程。吸附平衡模型是表示吸附量与气相组分分压的关系式,一般通过拟合实验数据得到经验、半经验或具有理论基础的关系式。

根据三类方程的不同,可以将变压吸附过程的数学模型分成很多类别。但一般根据吸附剂颗粒的质量平衡方程的差异,可以将 PSA 过程的数学模型分成 3 种:瞬时平衡模型、线性推动力 (Linear Driving Force, 简称 LDF) 模型以及孔扩散模型 (Pore Diffusion Model)。

(1) 瞬时平衡模型

瞬时平衡模型是描述变压吸附过程最简单的数学模型,该模型不考虑吸附剂颗粒的传质阻力,认为传质速率无限大。为了求解方便,吸附平衡模型一般采用线性吸附等温线 (或 Herry 定律)。而沿吸附床方向则不考虑轴向扩散的影响,认为是活塞流动模型。该模型仅能应用于一些接近于理想条件下的平衡分离过程,而对于需要考虑吸附剂颗粒传质阻力以及动态分离的变压吸附过程,必须采用更为复杂的动态模型来描述。

(2) 线性推动力 (LDF) 模型

线性推动力模型是目前模拟变压吸附过程应用最广的一个模型。在该模型的假设条件下,颗粒子模型中的偏微分方程转变成一个与颗粒尺度方向无关的常微分方程。根据吸附剂的实际情况,吸附平衡子模型采用线性的 Herry 定律、Langmuir 模型或吸附溶液理论模型均可以。而床层子模型采用轴向扩散流模型,同时考虑由于吸附作用而导致的气相流速沿吸附床轴向的变化。

(3) 孔扩散模型

孔扩散模型是目前最复杂的描述变压吸附过程的数学模型,该模型同时考虑了吸附剂颗粒径向方向和吸附床轴向方向两个空间方向的传质和扩散作用,该模型的优点是可以模拟任意组分的平衡和动态分离的变压吸附过程,计算准确度高,缺点是计算量大、占用的存储空间大、数学处理复杂,并且计算的准确程度受到参数选择的影响。

1.2 变压吸附过程模拟的软件化

变压吸附过程中大量参数相互耦合,吸附器内径向的速度和压力的分布受气体分布器的影响很大,且随着吸附器直径的增加,气体分布的均匀性下降,再加上壁面效应的影响,从而使得不考虑气流分布影响

的一维和二维数值模拟结果准确性较差。

变压吸附过程由于遵循质量守恒、动量守恒和能量守恒的基本定律,符合一般的化工过程,而化工过程的模拟有着成熟的理论和商用数值模拟软件,这些软件的建立经历了大量的工业试验和工业装置的检验,其准确性较好,有着广泛的用户。因此,通过对商用化工模拟软件的二次开发,开发出适合于变压吸附过程模拟的模拟单元,成为变压吸附过程模拟研究新的发展方向。

Aspen Plus 是大型通用流程模拟系统,源于美国能源部 20 世纪 70 年代后期在麻省理工学院 (MIT) 组织的会战,开发新型第三代流程模拟软件。该软件经过 20 多年来不断地改进、扩充和提高,已先后推出了十多个版本,成为举世公认的标准大型流程模拟软件,应用案例数以百万计。全球各大化工、石化、炼油等过程工业制造企业及著名的工程公司都是 Aspen Plus 的用户。Aspen Plus 提供了单元操作模型到装置流程模拟,这些模型的可靠性和增强功能已经经过 20 多年经验的验证和数以百万计例子的证实。Aspen Plus 的模型库中没有吸附模型,而可以用 Aspen Plus 的代码语言通过其自带的用户自定义模型工具来实现变压吸附的模拟。基于此,萨尔瓦多 aldreth 等用 Aspen Plus 的自定义模型开发了一个吸附模型,来模拟他们公司设备中的吸附床的吸附行为。该模型包括严格的质量、能量和动量守恒,传质的局限性也被纳入该模型中。成功的模拟或模拟准确性取决于所拥有的吸附等温线数据。利用该模型,可以研究不同类型吸附质的吸附行为,并确定特殊杂质的穿透曲线。

2 流体力学数值模拟技术

变压吸附系统从原料到产品,全部是气体,其设备从阀门、管道、吸附器到动力设备,几乎全部是流体设备,因此,从流体力学的角度研究变压吸附系统,提高每个设备的流体力学性能,是变压吸附研究新的发展方向。

2.1 计算流体力学

计算流体力学 (Computational Fluid Dynamic, 简称 CFD) 又习惯上称为计算流体力学。计算流体力学就是通过数值方法求解流体力学控制方程,得到流场的离散的定量描述,并以此预测流体运动规律的学科。求解流场的过程是相当复杂的,对于一般的研究人员来说,自己编写程序来计算求解流动过程是相当困难的。对于一些复杂的流动过程甚至是无法实现

的,然而,实际研究过程又需要对流体的流动过程,甚至一些流动的细节进行分析。此时就可以借助计算流体力学软件来实现,即CFD软件^[4]。CFD软件提供非常灵活的网格特性,既可使用结构化网格,也可使用非结构化网格,并可以根据流场的情况,对网格进行局部细化或粗化。同时,结合前处理软件,可降低物理模型建立的难度和工作量。CFD软件可以使得数值模拟的结果可视化,从而得到复杂流场的流动细节,为结构设计和优化提供理论指导。目前,CFD商用软件作为设计工具已经广泛应用于水利工程、土木工程、环境工程、食品工程、海洋结构工程、工业制造等领域。

2.2 吸附器流场模拟

CFD软件中有多孔介质模型,采用该模型可以模拟多孔介质内的流动、传质以及化学反应,而吸附床就是多孔介质。因此,对于变压吸附系统的吸附器而言,吸附床部分可以采用多孔介质模型进行数值模拟,这样,采用两种模型相结合就可以模拟出吸附器内的三维流动结果,从而得到吸附器内的三维速度场和三维压力场,来观察吸附器气体分布器的布气效果,为气体分布器的优化设计提供理论指导,从而优化吸附器的结构。而吸附器是变压吸附各个工艺步骤完成的核心部件,其结构的优劣直接决定吸附剂的利用效率和整个吸附装置分离性能。同时,良好的气体分布效果是变压吸附装置大型化的保证。因此,采用CFD技术研究吸附器内部的流动规律,是变压吸附大型化的一个重要研究方向,笔者目前在采用CFD技术研究吸附器内部的流动规律方面作了很多研究工作,从流体力学的角度优化吸附器的结构,为变压吸附的工艺完成提供一个速度和压力分布均匀、死空间小的吸附器。

2.3 程控阀性能模拟

随着变压吸附装置的大型化,程控阀门的直径也越来越大,对阀门的要求也越来越高。采用先进的技术进行阀门的开发是提高阀门质量、缩短开发周期的必然选择。利用CFD软件,不仅可以模拟阀门在打开和关闭两种工作状态下的流动状况,还可以模拟阀门的开、关过程的流动状况。通过模拟阀门的三维流场,可以观察阀门流道的速度场和压力场,了解阀门内部的流动细节^[5],为开发流动阻力小、密封性能好、流动噪声低的高性能阀门提供理论支持。

2.4 管网模拟

除了对设备的流动细节研究之外,还可以通过专业的商业软件,对整个管网系统在运行时各个管道和吸附塔流量、速度、压力进行精确模拟,从而了解整

个变压吸附系统在运行时各处的压力和速度变化,进而了解管道直径的配合是否合适,并找到最佳的管道直径配置^[6]。对于变压吸附系统而言,管道的配置将影响均压的时间、清洗气的用量等工艺参数。通过管道的优化,选择最佳的管道配比,可以提高整个变压吸附装置的性能。而管道的优化由于其复杂且巨大的计算量,利用手工计算几乎不可能,利用试验的手段又不可能实现全模型的模拟,商业软件是最佳的选择。FLOWMASTER2就是这样一款软件,它是全球领先的一维流体系统仿真解算工具,是面向工程的完备的流体系统仿真软件包,对于各种复杂的流体系统,工程师可以利用FLOWMASTER2快速高效的建立精确的系统仿真模型,并进行完备的分析,其仿真结果已经被许多国防、航空航天、汽车、船舶、核工业、石油、过程控制工业中的企业和研究所验证。利用FLOWMASTER2进行变压吸附管路系统的研究和优化,必将加快变压吸附的发展步伐。

3 结 论

随着计算机软件和硬件的发展,特别是一些大型商用软件和大型计算机工作站的出现,使得利用计算机模拟技术研究变压吸附从理论研究走向实际应用为可能。这些商用软件具有良好的可开发性,利用其二次开发工具研究出适合于变压吸附模拟模块,并对变压吸附装置进行仿真和优化,是变压吸附研究的重要发展方向。

参考文献:

- [1] Ruthven D M, Farooq S, Knaebel K S. Pressure Swing Adsorption [M]. USA: VCH Publishers Inc, 1993.
- [2] 魏玺群,陈 健.变压吸附气体分离技术的应用和发展[J].低温与特气,2002(3):1-4.
- [3] Rajasree R, Moharir A S. Simulation Based Synthesis, Design and Optimization of Pressure Swing Adsorption Processes [J]. Comp & Chem Eng, 2000, 24: 2 493-2 505.
- [4] 王福军.计算流体动力学分析 - CFD 软件原理与应用 [M].北京:清华大学出版社,2004.
- [5] 诸葛伟林,刘光临,蒋 劲,等.蝶阀三维分离流动的数值模拟研究[J].流体机械,2003,31(6):14-16.
- [6] 魏丽婷,赖喜德,杨炯波,等.PSA制氢工艺管网中均压过程的仿真[J].西华大学学报(自然科学版),2006(7):52-54.

(下转第40页)

能耗,对生产不利,因此,合适的粒度组成对型煤成型有重要作用。

4.2 成型过程中,压力过小时不能满足成型要求,压力过大时也可能引起型煤强度的下降,较好的成型压力能提高生产效率,为企业带来效益。

4.3 成型时的水分含量会影响到脱模以及后续的烘干过程,应根据不同的煤种选择添加不同的水分,使生产过程更加稳定。

参考文献:

[1] 赵玉兰,常鸿雁,吉登高,等.粉煤成型机理研究进展

[J].煤炭转化,2001,24(3):12-19.

[2] 常鸿雁.粉煤成型机理研究[D].太原:太原理工大学,2002.

[3] 吕玉庭,杨立茹,孙 健,等.工业型煤成型工艺的研究[J].煤炭技术,2001,20(4):57-58.

[4] 吉登高,王祖训,张丽娟,等.粉煤成型原料粒度组成的试验研究[J].煤炭学报,2005,30(1):100-103.

[5] 周国江,吕玉庭,许占贤.影响工业型煤强度的因素分析[J].选煤技术,2001(3):16-17.

[6] 王卫东,刘 虎.型煤技术基础理论总结与探讨[J].煤炭加工与综合利用,2004(5):38-41.

Experiment and Study on the Factors Impacting the Forming of Briquettes

Yang Fengling¹, Gao Yujie¹, Zhang Yuanyuan¹, Gao Lisheng² and Cheng Fangqin¹

(1.Shanxi University, Taiyuan 030006;

2.Shanxi Tianyu Environmental Protection Technology Co., Ltd., Taiyuan 030006)

Abstract This paper shows such factors as grain size composition of the feedstock, forming pressure and the moisture content that impact the forming of the briquettes through analysis and research. The experiments indicated that with the increase of the amount of fine coal of which the size is below 0.5mm, the strength of briquettes is also improved. But if the amount of fine coal is too much, it is disadvantageous to the forming of the briquettes. Optimum strength can be obtained when the proportion of fine coal whose size is below 0.9mm is around 80%. For best forming of the briquettes, it is advisable to have the pressure of 25MPa and the moisture addition of 10%.

Key words fine coal briquetting, grain size composition, forming pressure, forming moisture



(上接第 32 页)

Study on the Numerical Simulation of Pressure Swing Adsorption

Bu Lingbing, Gao Yuchuan, Zhang Jianfeng, Yang Yun and Li Xiaorong

(PSA Business Group, Sichuan Tianyi Science and Technology Co., Ltd., Chengdu 610225)

Abstract Based on the control equation of Pressure Swing Adsorption (PSA), the instant balance model, the linear driving force model and the pore diffusion model were analyzed, and the system of software simulate pressure swing adsorption was also discussed. Using of the 3D Fluid Dynamics simulation software can simulate and optimize the gas spreader and the internals of the column, and optimize the fluid dynamics capability of the program control valve. Using of the 1D Fluid Dynamics simulation software can simulate and optimize the piping of the PSA system. To simulate the microcosmic flow details and the macroscopical operation status of the PSA system with large commercial software is the development trend of the PSA numerical simulation and the system optimization.

Key words pressure swing adsorption, numerical simulation, fluid dynamics