

轴向流吸附床内流动特性的模拟研究¹⁾

刘向军²⁾ 刘应书 李永玲 张辉

(北京科技大学热能工程系, 北京 100083)

摘要 变压吸附过程是一个动态变压力变质量多孔介质流动与传热传质过程, 揭示过程的流动特性是深入研究吸附机理的基础. 基于严格质量守恒和动量守恒, 建立了吸附床内的气体流体、吸附传质的数学模型, 以某轴向流快速空分制氧吸附床为研究对象, 对吸附床内全循环过程进行了模拟, 对升压吸附、降压解吸和常压清洗各个阶段的流动特性进行了详细的分析, 并与空床、有料无吸附时的流动特性进行了对比.

关键词 变压吸附, 多孔介质, 流动特性, 模拟研究

中图分类号: TQ028.2, O242 文献标识码: A 文章编号: 0459-1879(2012)01-0088-08

引 言

变压吸附 (pressure swing adsorption, PSA) 技术是目前广泛采用的气体分离技术, 在化工分离技术中占据了重要地位^[1], 近年来其应用领域不断拓展, 应用越来越广泛. 处理规模的日益扩大, 其基础理论研究的薄弱与不足越来越明显. 很多机理性的问题有待于深入研究.

吸附床内的过程是一个动态变压力变质量多孔介质流动与传热传质过程, 揭示循环过程的流动特性是深入研究吸附过程的基础. 典型 PSA 过程是一个动态循环过程, 一般包括加压、吸附、降压解吸和清洗等多个循环步骤, 床内各点的压力都是周期性循环变化的, 吸附过程和解吸过程压差比大, 一般都在 3~5 倍以上. 整个吸附过程床内流动、压强分布变化特性十分复杂, 但由于过程的复杂性, 对其内流动特性的认识还很初步, 理论研究简化程度大. 文献 [2] 最早提出了变压吸附过程理论研究模型, 该理论不考虑床内动量守恒, 假设床内流动为理想一维轴向活塞流, 忽略床层轴向压力降, 文献 [3-4] 对上述理论模型进行的发展, 考虑床层流动阻力, 忽略吸附传质阻力, 床内压降采用 Darcy 公式或 Ergen 经验公式计算, 上述模型在变压吸附广泛应用, 是目前对变压吸附过程进行理论计算和模拟研究的主要基础, 目前对于 PSA 循环的模拟研究, 都是基于上述一维

活塞流模型^[5-7]. 但现有的大量的实验研究表明: 在循环过程中, 床层内压力分布在不同步骤时变化复杂; 在很多情况下, 吸附床内径向传输过程存在明显偏差^[8-9], 原有的一维活塞流模型大大简化了吸附床内传质与流动之间的多场耦合多维传输关系, 已越来越不能满足实际工程需要. 近年来, 随着多孔介质理论、计算机及流动模拟技术的飞速发展, 采用计算流体力学 (CFD) 研究吸附床内的流动特性成为可能, 文献 [10-11] 采用 CFD 软件对二维和三维变压吸附过程进行了模拟研究, 但由于受商业软件的限制, 动量方程中没有考虑吸附变质量的影响, 也没有考虑流体可压缩性的影响, 文献 [12] 等采用计算流体力学方法对吸附循环中的定压吸附阶段进行了模拟研究, 目前采用严格的计算流体力学方法研究动态变压吸附循环过程尚未见报道, 对变压吸附流动特性的详细研究也未见报道.

1 数学模型与计算方法

1.1 数学模型

吸附床内的过程, 是一个动态变压力变质量多孔介质流动与传热传质问题, 已有研究表明, 对于多孔介质内的流动传热传质研究, 气体的可压缩性不可忽略^[13]. 本文选取了一组以密度、速度为基本变量的方程. 另外, 考虑到反应器内的空料区的流动一般是湍流流动, 且实际工程吸附床, 尺度较大, 料层

2010-09-08 收到第1稿, 2011-06-16 收到修改稿.

1) 国家高技术研究发展计划资助项目(2009AA063201).

2) E-mail: liuxj@me.ustb.edu.cn

内也可能存在湍流流动, 因此, 采用多孔介质 $k-\varepsilon$ 方程湍流模型模拟吸附床内的流动. 方程的具体表达形式如下:

(1) 传质速率方程

本文采用吸附传质的线性驱动力方程 (linear driving force, LDF)^[14] 来描述吸附过程的传质速率, 其形式如下

$$\partial \bar{q}_i / \partial t = k_i (\dot{q}_i - \bar{q}_i) \quad (1)$$

式中, $\partial \bar{q}_i / \partial t$ 为气体组分的吸附速率 ($\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$), k_i 为 LDF 模型的传质系数, 吸附平衡量 \dot{q}_i 采用扩展的 Langmuir 方程计算^[15]

$$\dot{q}_i = K_i c_i / \left(1 + \sum_i b_i c_i \right) \quad (2)$$

式中, c_i 为气体摩尔浓度 (mol/m^3), b_i 为 Langmuir 常数 (mol/m^3), $K_i = b_i q_{si}$, q_{si} 为气体的饱和吸附量 (mol/m^3).

(2) 组分方程

考虑上述吸附传质对各个组分的影响, 组分方程守恒为

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{V}) = \nabla \cdot [\rho D_{ie} \nabla (\rho_i / \rho)] + R_i \quad (3)$$

式中, D_{ie} 为有效扩散系数; $R_i = \frac{1-\phi}{\phi} w_i \frac{\partial \bar{q}_i}{\partial t}$, ϕ 为床层的孔隙率, w_i 为气体组分子量.

(3) 质量守恒方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V}) = \sum R_i \quad (4)$$

(4) 动量方程

多孔介质区^[16]

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \cdot \mathbf{V}) = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \\ \nabla \left(\frac{2}{3} \rho k \right) - \frac{\mu \phi}{K} \mathbf{V} - \\ \frac{\rho \phi^2 c_F}{\sqrt{K}} |\mathbf{V}| \mathbf{V} - \sum R_i \mathbf{V} \end{aligned} \quad (5)$$

其中, $\boldsymbol{\tau} = \mu_e [(\nabla \mathbf{V}) + (\nabla \mathbf{V})^T] + \lambda \nabla \cdot \mathbf{V} \mathbf{I}$, μ_e 和 λ 为黏性系数, \mathbf{I} 为单位二阶张量; $K = D_p^2 \phi^3 / [180(1-\phi)^2]$ 为多孔介质的渗透率, D_p 为颗粒直径.

非多孔介质区

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{V})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \cdot \mathbf{V}) = -\nabla P + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \nabla \left(\frac{2}{3} \rho k \right)$$

(5) $k-\varepsilon$ 方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho k)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} k) = -\frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \mathbf{V} + \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{V} + \\ \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu_e}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] - \rho \varepsilon + S_{\phi k} \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho \varepsilon)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{V} \varepsilon) = -\left(\frac{2}{3} C_1 - C_3 \right) \cdot \rho \varepsilon \nabla \cdot \mathbf{V} + \\ \nabla \left(\frac{\mu_e}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} [C_1 \boldsymbol{\tau} \cdot \nabla \mathbf{V} - C_2 \rho \varepsilon] + S_{\phi \varepsilon} \end{aligned} \quad (7)$$

在多孔介质区, 根据文献[17], 取

$$\begin{aligned} S_{k\phi} = -2 \frac{\mu \phi}{K} k - \frac{8 \rho \phi^2 c_F}{3 \sqrt{K}} 2 |\mathbf{V}| k \\ S_{\phi \varepsilon} = -2 \frac{\mu \phi}{K} \varepsilon - 2 \phi \frac{c_F}{\sqrt{K}} \frac{4}{3} |\mathbf{V}| \rho \varepsilon \end{aligned}$$

在非多孔介质区, 采用一般的 $k-\varepsilon$ 模型, 取

$$S_{k\phi} = 0, S_{k\varepsilon} = 0$$

(6) 状态方程

$$p = RT \sum_i (\rho_i / w_i) \quad (8)$$

式中, R 为通用气体常数.

1.2 计算方法

采用上述模型与定解条件, 方程的离散化采用有限体积法, 时间项的离散化采用向前差分, 对流项采用上风格式, 流场的计算方法采用计算非定常可压缩流场的 ALE 算法^[18]. 为保证计算精度, 在计算初始阶段, 时间步长一般在 10^{-6} 以下, 计算过程中的最大时间步长不大于 5.0×10^{-4} s.

采用上述模型与算法, 使用 Fortran 语言编制程序, 开发了变压吸附过程模拟软件, 本文以某快速空分制氧吸附床为研究对象, 对吸附床内全循环过程进行了模拟研究.

2 研究对象与计算工况

2.1 研究对象

本课题以某轴向流空分制氧吸附床为例, 对床内的流动传质过程进行了研究, 图 1 为本文所模拟的实验系统吸附循环图, 实际过程中两床交替吸附和解吸, 每个吸附循环周期分 8 步, 本文以其中的床 A 为研究对象, 吸附床各部分尺寸见图 2, 吸附柱尺寸为 $\Phi 230 \text{ mm} \times 248 \text{ mm}$, 气体介质为 O_2 和 N_2 混合气体, 体积比为 21:79, 升压吸附阶段入口空气气体流量为 $60 \text{ Nm}^3/\text{hr}$, 平均入口流速为 2.18 m/s , 床

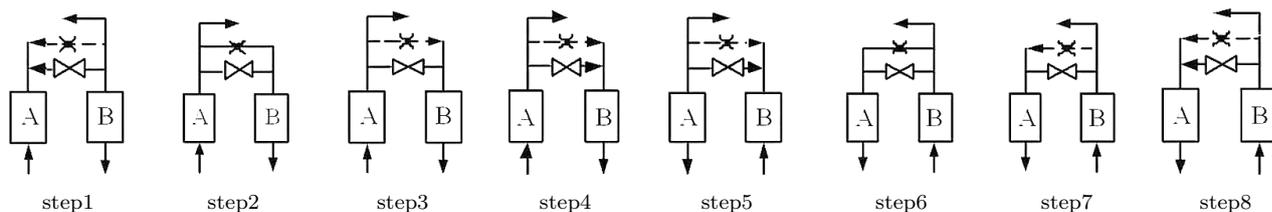


图 1 循环步骤分解图

Fig.1 Schematic of Cyclic Sequence

内表观流速为 0.148 m/s. 对于本文的模拟工况, 取单个吸附剂颗粒直径为 0.6 mm, 颗粒的堆积密度为 650 kg/m³, 床层孔隙率为 0.4, 吸附剂的主要参数见表 1.

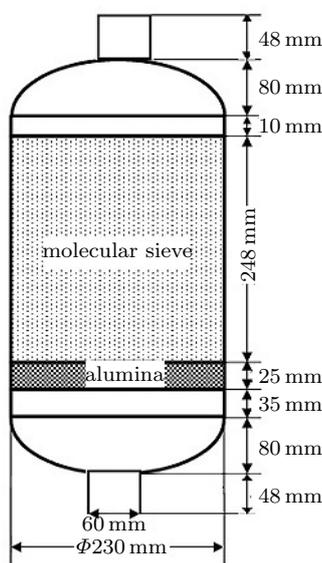


图 2 吸附床简图

Fig.2 Schematic of the adsorber

表 1 吸附剂参数^[20]

Table 1 Adsorbent parameters^[20]

Parameters	Value
LDF constant for oxygen k_A/s^{-1}	62.0
LDF constant for nitrogen k_B/s^{-1}	19.7
saturation constant for oxygen $q_{As}/(mol \cdot m^{-3})$	5 260
saturation constant for nitrogen $q_{Bs}/(mol \cdot m^{-3})$	5 260
equilibrium constant for oxygen K_A	4.7
equilibrium constant for nitrogen K_B	14.8

2.2 边界条件

本文以实验系统中的床 A 为研究对象, 图 3 所示为一个周期上下压强实验曲线, 如图 1 所示, 每个吸附循环周期分 8 步, 将 8 个步骤分为升压吸

附 (step 1~4)、降压解吸 (step 5~6) 和常压清洗 (step 7~8) 3 大步, 各步骤的边界条件如下:

(1) 升压吸附: 初始气体组分为 1.01×10⁵ Pa 纯氧, 待流场计算稳定后, 开始升压吸附过程计算, 下部采用速度入口条件 $w = w_{feed}$, 温度为 20℃, 气体组分为 N₂ 和 O₂, 体积比为 79:21. 根据图 3 中下塔压强曲线按理想气体状态方程计算入口密度. 在前 1 s, 上部也为气体入口, 入口条件如下部入口相同, 根据图 3 中上塔压强曲线按理想气体状态方程计算入口密度. 1 s 以后, 上部为气体出口, 采用充分流速度出口, 出口温度为 20℃, 外部环境浓度为上一时刻出口浓度.

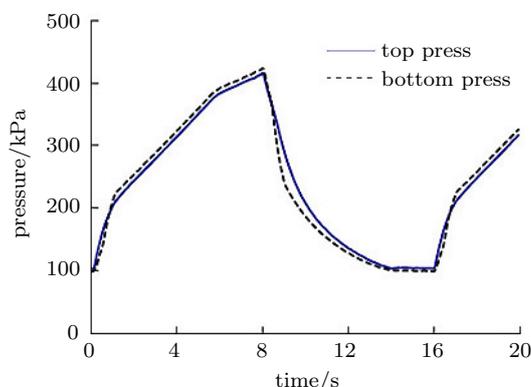


图 3 上下压强实验曲线

Fig.3 Operating pressure of the adsorber

(2) 降压解吸: 降压解吸阶段床压降为 3.54×10⁵ Pa 之前, 气体从上、下口同时流出, 上下出口均采用压力出口条件, 根据图 3 中压强曲线拟和上下部环境压强 $p = p(t)$, 出口速度的大小随计算过程而变化, 出口温度为 20℃, 外部环境浓度为上一时刻出口浓度. 床内瞬时压强采用状态方程计算. 床压降至 3.54×10⁵ Pa 之后, 上部阀门关闭, 气体只从下部解吸排出, 出口采用压力出口条件, 根据图 3 中压强曲线拟和下部环境压强 $p = p(t)$, 出口温度为 20℃, 外部环境浓度为上一时刻出口浓度.

(3) 常压清洗: 环境压强为 1.01×10⁵ Pa, 上部为

速度入口条件 $w = -w_{\text{purge}}$, 入口温度为 20°C , 气体组分为纯氧, 下部为出口, 出口温度为环境温度, 出口速度浓度为充分发展流.

另外, 各阶段床壁均取速度无滑移条件.

3 计算结果与流动分析

3.1 稳定空床与无吸附流场流动特性

本文首先对常压下稳定空料床和无吸附流场特性进行了模拟研究, 根据本文的研究工况, 在空料和无吸附情况, 取入口流速为 2.17 m/s , 床内表观流速为 0.148 m/s . 图 4 所示为反应器内无床料、为空床时计算工况下的速度分布和湍动能分布. 如图 4(a) 所示, 由于底部入口速度较大, 底部为漏斗形结构, 在射流的两侧, 由于气流引射, 对称出现低压回流区, 回流区的长度达 28 mm , 到出口附近, 流速仍未达均匀. 近壁处流速低. 对于本计算工况, Re 为 2270 , 流动为湍流, 如图 4(b) 所示, 反应器入口和出口附近湍流程度较强, 中心处的湍动能达到 $0.16\text{ m}^2/\text{s}^2$.

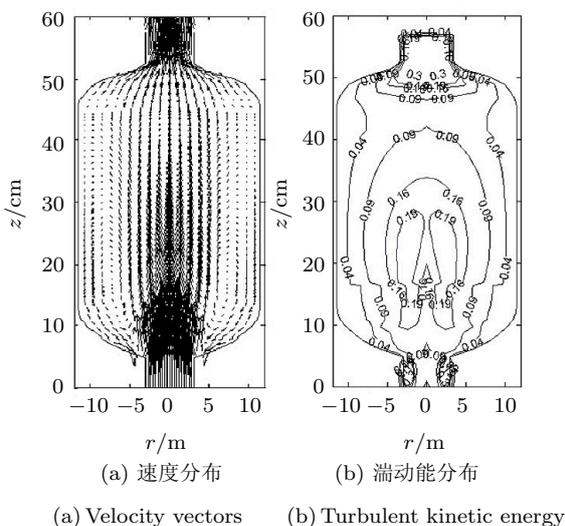


图 4 空料床流场

Fig.4 Flow field in an empty bed

图 5(a) 所示为常压稳定情况下反应器内有床料但无吸附时计算所得的速度分布, 由于床料的阻挡, 气流的引射受限, 回流区变小, 只在空床区存在, 但回流程度加剧. 在料层区, 由于多孔介质的整流作用, 速度在径向上很快均匀, 图 5(b) 所示为反应器内常压稳定情况下无吸附时计算所得的湍动能分布, 下部空床区湍流程度较强, 但到料层区, 湍动能迅速减小, 流动表现为层流.

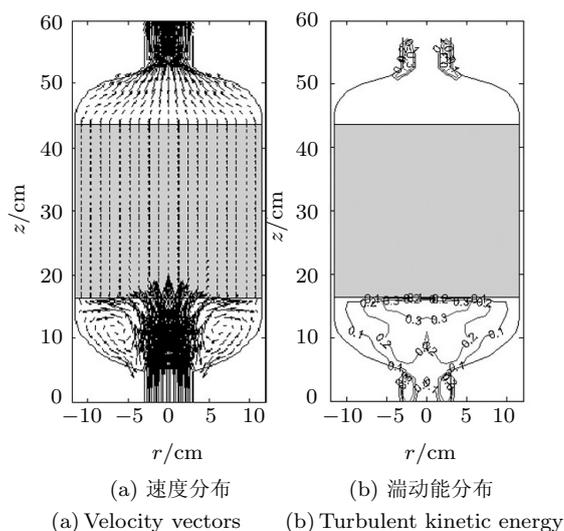


图 5 有床料无吸附流场

Fig.5 Flow field in a no-adsorption bed

图 6 所示为气体进入床料段轴向速度分布图. 由图中可看出, 在 $z = 15.6\text{ cm}$ 处, 气流尚未进入料层, 中心处速度最高达 0.76 m/s , $r = 0.85\text{ cm}$ 处速度最低, 仅为 0.088 m/s , 速度相差 75 倍, 到 $z = 16.3\text{ cm}$, 气流进入床料层, 中心处速度最高达 0.32 m/s , $r = 0.85\text{ cm}$ 处速度为 0.12 m/s , 速度相差 1.7 倍, 随着气流在料层向上运动, 流场进一步均匀, 到 $z = 16.8\text{ cm}$, $z = 17.8\text{ cm}$, $z = 18.8\text{ cm}$ 和 $z = 19.8\text{ cm}$ 高度处, 截面上最大速度差分别为 0.1 m/s , 0.06 m/s , 0.032 m/s 和 0.02 m/s , 可见对于本文的计算工况, 经过 3.5 cm 的料层, 径向流速的不均匀性基本可忽略.

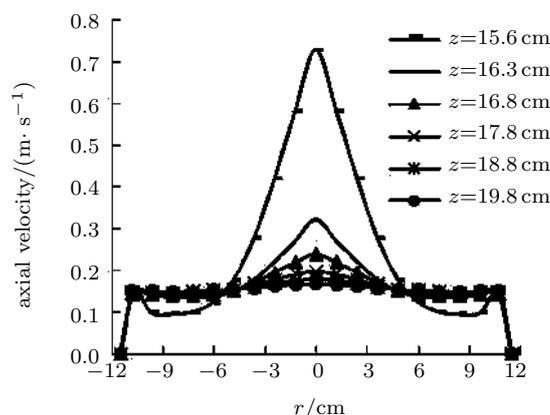


图 6 气体进料段轴向速度分布图

Fig.6 Axial velocity at different bed heights

图 7 所示为沿吸附器床高平均压降分布. 上下空床区压降很小; 在床层区, 对于本文的计算工况, 由于分子筛颗粒小 (直径仅为 0.6 mm), 空隙率为 0.4 ,

床内渗透率仅为 $5.9 \times 10^{-10} \text{m}^2$, 床层压降明显, 且呈线性降低, 满足达西规律.

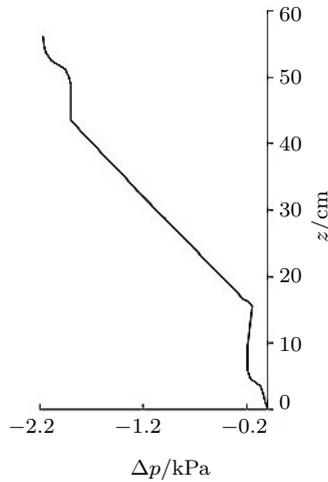


图7 沿吸附器床高平均压降分布

Fig.7 Pressure drop along the bed height

3.2 升压吸附阶段的流动特性分析

对于本文的研究工况,如图1和图3所示,升压吸附为每个周期的0~8s. 图8所示为升压吸附阶段 $t=0.698 \text{s}$, $t=2.1 \text{s}$ 和 $t=7.2 \text{s}$ 流场速度分布. 当 $t=0.698 \text{s}$ 时, 处于图1中 step1 阶段, 上塔高压的氧气和下塔高压空气向塔内流入, 床内压强升高, 由于吸附和流动叠加的影响, 料层区气流速度很低. 到 $t=2.1 \text{s}$, A-B 两床之间的阀门关闭, 上部氧气不再流入, 空气从下部流入, 由于初始场吸附剂只是在 $1.01 \times 10^5 \text{Pa}$ 下达到饱和, 此时床内压强升高, 平均床压达 $2.53 \times 10^5 \text{Pa}$, 氮氧的平衡吸附量都增大, 气体从下部流入后, 氮气全部被吸附, 部分氧气也被吸附, 只有很少量的氧气流出, 上部出口流速很低, 氧气产量很低. 随着气体的不断流入, 床内流速增大, 到 $t=7.2 \text{s}$, 上部出口流速达 1.27m/s . 图9所示为3个时刻床内瞬时压差分布, $t=0.698 \text{s}$ 时, 床内压强上下两端高, 中间低. 3个时刻的瞬时压差分布与图8中的流场相应, 说明本文的计算结果是合理的. 另外, 由图9可看出, 在吸附升压阶段, 由于吸附变质量的影响, 吸附床内的压降与图7的无吸附情况完全不同, 此时并不满足 Darcy 或 Eurgen 等经验公式.

表2为升压吸附阶段上部开口出流后各时刻床内上下压差计算值与实验值的比较, 计算值与测量值均在 $8.0 \times 10^5 \sim 9.5 \times 10^5 \text{Pa}$ 范围内变化, 最大误差为 10.86%, 与测量值符合较好. 对比研究表明, 若采用 Darcy 或 Eurgen 经验公式, 只考虑流动阻力

对压降的影响, 计算所得床层压差将在 $1.24 \times 10^5 \sim 2.01 \times 10^5 \text{Pa}$ 之间, 远小于实验测量值.

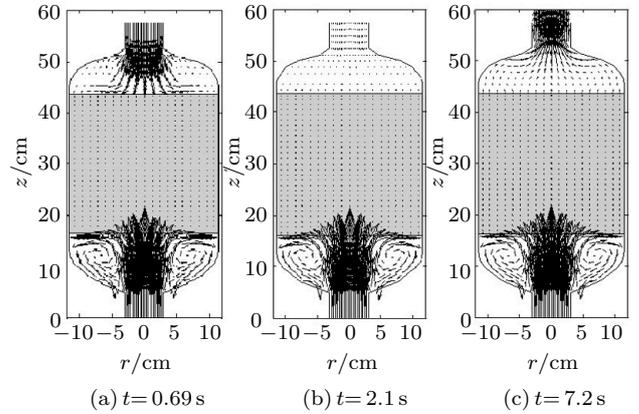


图8 升压吸附阶段流场速度分布

Fig.8 Velocity vectors during the pressurization and adsorption steps

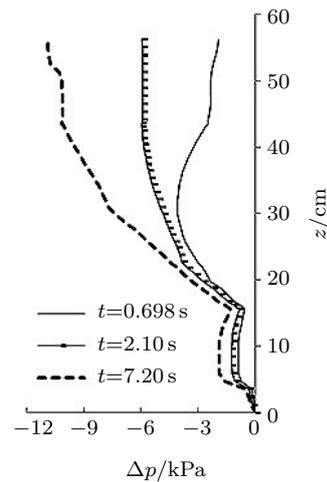


图9 升压吸附阶段床内瞬时压差分布

Fig.9 Pressure drop along the bed during the pressurization and adsorption steps

表2 升压吸附阶段床内压差计算值与实验值的比较
Table 2 Comparison of experimental and calculated pressure drop during the pressurization and adsorption steps

Time/s	Experimental data/kPa	Calculated data/kPa
2.5	9.11	8.12
2.9	9.08	8.52
3.8	9.31	8.85
5.2	8.87	8.89
6.0	9.02	9.05
7.0	8.72	9.41

图 10 所示为升压吸附阶段上部出口流速随时间的变化曲线, 前 2s 内基本没有氧气流出, 2~6s 流量较低, 6~8s 流量大, 这一计算结果与实验结果相符。

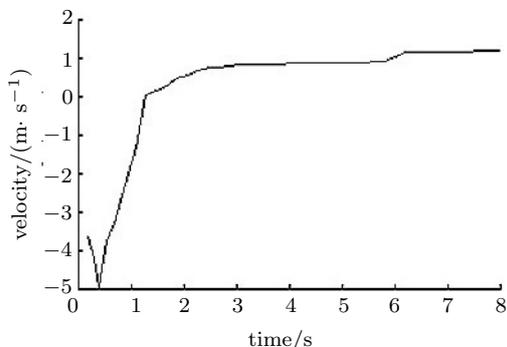


图 10 升压吸附阶段上部出口流速

Fig.10 Upper outlet velocity during the pressurization and adsorption steps

3.3 降压解吸过程的流动特性分析

降压解吸阶段为每个周期的 8~14s, 图 11 所示为 $t=8.34s$ 和 $t=12.0s$ 流场速度分布. 在降压初期, 上下阀门开启, 气体从上下两端流出, 床内压强迅速降低, 到床内压强降到 $3.5 \times 10^5 Pa$ 时, 上部出口关闭, 气体边解吸边从下部流出。

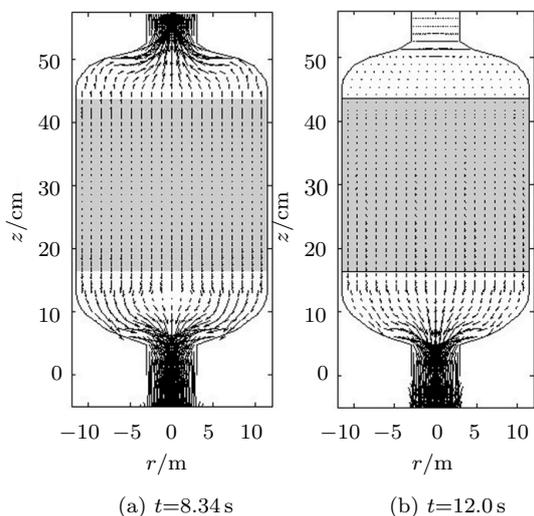


图 11 降压解吸阶段流场速度分布

Fig.11 Velocity vectors during the depressurization and desorption steps

图 12 所示为 $t=8.34s$, $t=12.0s$ 和 $t=13.2s$ 3 个时刻床内瞬时压差分布. $t=8.34s$ 时, 床内中间压强高, 两端低, 气体从两端流出. 而到 $t=12.0s$ 和 $t=13.2s$, 上部关闭, 气体从下部解吸流出, 因而在图 11 中, 上部流速基本为零, 压差很小, 气流在床下

部流速逐渐增大, 压强逐渐降低. 由图 12 也可看出, 在降压解吸阶段, 由于解吸变质量影响大, 吸附床内的压降也不满足 Eurgen 经验公式。

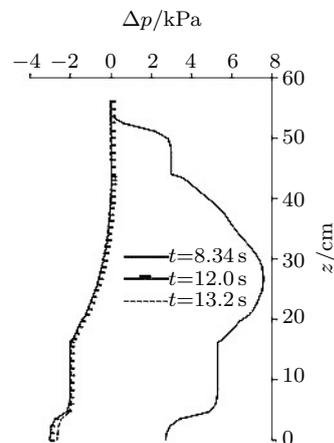


图 12 降压解吸阶段床内瞬时压差分布

Fig.12 Pressure drop along the bed during the depressurization and desorption steps

表 3 所示为降压解吸阶段上部出口关闭后, 各时刻床层上下压差计算值与实验值的比较, 在降压解吸阶段上部出口关闭后, 初始阶段, 由于床内压强高, 气体解吸量很大, 床层上下压差开始很大, 随后随着床内压强的降低和气体解吸量的减小, 床层上下压差很快减小, 计算值与实验值变化趋势符合很好, 定量误差最大为 18.6%. 产生误差的主要原因在于线性驱动力模型对吸附速率模拟的误差。

表 3 降压解吸阶段床层压差计算值与实验值的比较

Table 3 Comparison of experimental and calculated pressure drop during the depressurization and desorption steps

Time/s	Experimental data/kPa	Calculated data/kPa
9.8	28.13	23.71
10.5	14.78	16.72
11.2	10.81	9.89
12.2	4.07	3.31
13.2	3.61	3.07
14	2.50	2.13

图 13 所示为降压解吸阶段下部出口流速随时间的变化曲线, 在 $t=8.0s$ 时, 处于吸附周期末, 下端外部压强高, 流速为正, 到 8.0s 以后, 根据图 3 的操作压力曲线, 外部压强降低, 气流开始反向流出, 流速增大, 到 $t=8.7s$, 瞬时出口流速达 $-30 m/s$, 随着

气体的快速流出, 床内压强迅速降低, 内外压差减小, 出口流速度降低, 到 $t = 14\text{ s}$, 出口流速仅为 -1.5 m/s .

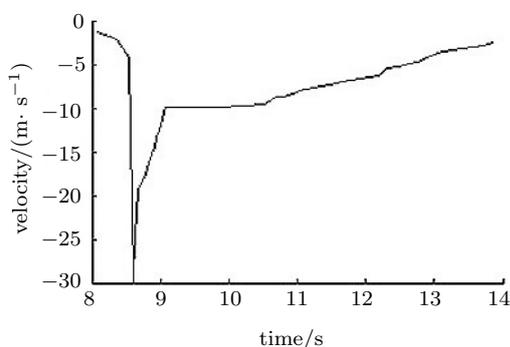


图 13 降压解吸阶段下部出口流速

Fig.13 Lower outlet velocity during the depressurization and desorption steps

3.4 常压逆流清洗阶段的流动特性

降压解吸后, 在每个周期内还有持续 2s 的常压逆流清洗阶段, 图 14 所示分别为 $t=15.5\text{ s}$ 时床内的速度分布和压差分布, 在整个 2s 的常压逆流清洗阶段, 床内气体质量变化相对较小, 各个时刻床内流速和压差的分布差别不大. 由于质量变化小, 床层区压强基本呈线性降低, 可认为满足达西规律. 实验测量得到在常压逆流清洗阶段床层上下压差变化不大, 在 2.8 kPa 到 3.5 kPa 之间波动, 计算得到压差值在 2.4 kPa 到 3.3 kPa 之间变化, 与测量值符合较好.

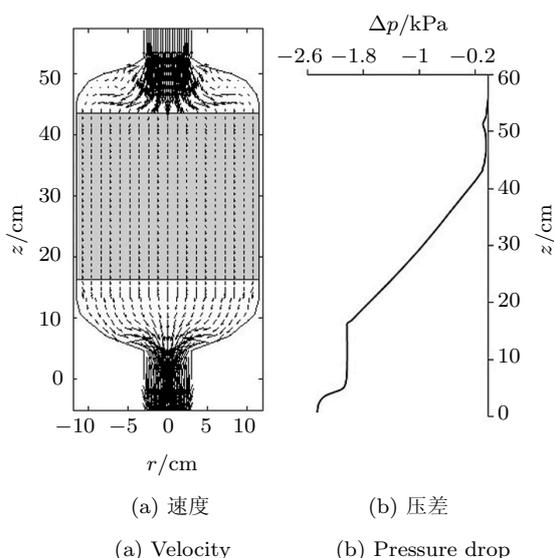


图 14 $t=15.5\text{ s}$ 时床内的速度分布和压差分布

Fig.14 Velocity vectors and pressure drop at $t=15.5\text{ s}$

4 结 论

本文基于严格质量守恒和动量守恒, 建立了吸

附床内的气体流体流动、吸附传质的数学模型, 以某快速空分制氧吸附床为研究对象, 对吸附床内全循环过程进行了模拟, 对吸附过程的流动特性进行了详细的分析, 计算结果详细合理, 与实验测量结果符合较好, 说明本文的模型和算法是正确的.

同时, 结果分析表明:

(1) 对于本文的计算工况, 空床时, 由于入口不均匀性的影响, 床内存在较大回流区, 床内流动不均匀, 流体为湍流. 有料无吸附时, 经过 3.5 cm 的距离, 床内径向速度基本均匀, 料层区流动为层流. 床层区压强线性降低.

(2) 在升压吸附阶段, 升压初期, 气体从上下流入, 床压迅速升高, 此时床内上下两端床压高, 中心床压低; 上端不充气后, 初始阶段由于吸附速率大, 床内流速很低, 出口流量低, 到 2s 以后流量明显升高. 在吸附升压阶段, 由于吸附变质量的影响, 吸附床内的压降大小和分布与无吸附情况完全不同, 不满足 Darcy 或 Eurgen 经验公式.

(3) 在降压解吸阶段, 降压初期床内中间压强高, 两端低, 气体从两端流出, 床压迅速降低. 上部关闭后, 气体从下部解吸流出, 上部流速基本为零, 气流在床下部流速逐渐增大, 压强逐渐降低. 另外, 由于解吸变质量影响大, 吸附床内的压降也不满足 Darcy 或 Eurgen 经验公式.

(4) 常压逆流清洗阶段, 床内气体质量变化较小, 各个时刻床内流速和压差的分布差别不大. 床层区压强基本呈线性降低.

参 考 文 献

- 1 叶振华. 化工吸附分离过程. 北京: 中国石化出版社, 1992 (Ye Zhenhua. Adsorption and Separation Process in Chemical Engineering. Beijing: Chinese Petrochemical Industry Press, 1992 (in Chinese))
- 2 Yang RT, Doong SJ. Gas separation by pressure swing adsorption: a pore-diffusion model for bulk separation. *AIChE J*, 1985, 31(11): 1829-1842
- 3 Mendes AMM, Costa CAV, Rodrigues AE. Oxygen separation from air by PSA: modelling and experimental results Part I: isothermal operation. *Separation and Purification Technology*, 2001, 24(2): 173-188
- 4 Grande CA, Rodrigues AE. Biogas to fuel by vacuum pressure swing adsorption I: behavior of equilibrium and kinetic-based adsorbents. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2007, 46(13): 4595-4605
- 5 王啸, 马正飞, 周汉涛等. 两床变压吸附空分制氧过程的模拟. *天然气化工*, 2003, 28(1): 50-56 (Wang Xiao, Ma Zhengfei, Zhou

- Hantao, et al. Simulation of a two-bed pressure swing adsorption process for O₂ product from air. *Natural Gas Chemical Engineering*, 2003, 28(1): 50-56 (in Chinese))
- 6 Todd RS, Webley PA. Limitations of the LDF/equimolar counter diffusion assumption for mass transport within porous adsorbent pellets. *Chemical Engineering Science*, 2002, 57: 4227-4242
- 7 Delgado JA, Rodrigues AE. Analysis of the boundary conditions for the simulation of the pressure equalization step in PSA cycles. *Chemical Engineering Science*, 2008, 63: 4452-4463
- 8 Cohen Y, Metzner AB. Wall effects in laminar flow of fluids through packed beds. *AIChE J.* 1981, 27(10): 705-710
- 9 Salem K, Tsotsas E, Mewes D. Tomographic measurement of breakthrough in a packed bed adsorber. *Chemical Engineering Science*, 2005, 60(2): 517-522
- 10 Wu YX, Yu HW, Ching CB. A computational fluid dynamics study of binary adsorption separation in chromatography. *Chem Eng Technol*, 2004, 27: 955-964
- 11 Augier F, Laroche C, Brehon E. Application of computational fluid dynamics to fixed bed adsorption calculations: effect of hydrodynamics at laboratory and industrial scale. *Sep Purif Technol*, 2008, 63(2): 466-474
- 12 张学伟, 刘伟, 徐明厚. 固定床气体吸附过程温升的计算模型. *工程热物理学报*, 2008, 29(7): 1202-1204 (Zhang Xuewei, Liu Wei, Xu Minghou. The thermal model of gas adsorption in fixed bed. *Journal of Engineering Thermophysics*. 2008, 29(7): 1202-1204 (in Chinese))
- 13 Ingham DB. Pop I. *Transport Phenomena in Porous Media*. Oxford: Elsevier Science, 1998
- 14 Glueckauf E, Coates JI. Theory of chromatography: V. the influence of incomplete equilibrium on the front boundary of chromatograms and an effectiveness of separation. *Journal of Chemical Society*, 1947, 2: 1315-1329
- 15 Yang RT. *Gas Separation by Adsorption Processes*. New York: Butterworth Publishers, 1987
- 16 Alkam MK, Nimr MAAI. Transient non-Darcian forced convection flow in a pipe partially filled with a porous material. *Int J Heat Mass Transfer*, 1998, 41(2): 347-356
- 17 Getachew D, Minkowycz WJ, Lagec JL. A modified form of the $k-\varepsilon$ model for turbulent flows of an incompressible fluid in porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2000, 43: 2909-2915
- 18 Tian BL, Shen WD, Jiang S, et al. An arbitrary Lagrangian-Eulerian method based on the adaptive Riemann solvers for general equations of state. *Inter J Numerical Methods in Fluids*, 2009, 59 : 1217-1240
- 19 Francis H Harlow, Anthony A Amsden. A numerical fluid dynamics calculation method for all flow speeds. *Journal of Computational Physics*, 1971, 8: 197-213
- 20 Ruthven DM, Farooq S, Knaebel KS. *Pressure Swing Adsorption*. New York: VCH Publishers, Inc, 1994

(责任编辑: 刘俊丽)

MODELING OF THE FLOW CHARACTERISTIC IN AN AXIAL-FLOW RAPID PRESSURE SWING ADSORPTION BED¹⁾

Liu Xiangjun²⁾ Liu Yingshu Li Yongling Zhang Hui

(Thermal Engineering Department, University of Science & Technology Beijing, Beijing 100083, China)

Abstract The gas flow characteristic in an adsorbent bed is a vital problem for further studying the mechanics of gas separation process. In this paper, a comprehensive mathematical model of gas flow and adsorption in an adsorbing bed, which based on mass and momentum conservation law, is established. A typical cyclic process of an axial-flow rapid pressure swing adsorption is numerically studied. The flow patterns in different cyclic period for pressurization, adsorption, depressurization, desorption and purge, are obtained. The flow characteristics and their difference from the gas flow in an empty bed and a no-adsorption bed are also studied.

Key words pressure swing adsorption, porous medium, gas flow, numerical simulation

Received 8 September 2010, revised 16 June 2011.

1) The project was supported by the National High Technology Research and Development Program of China (2009AA063201).

2) E-mail: liuxj@me.ustb.edu.cn