

Μαθηματική μοντελοποίηση και προσομοίωση διεργασιών προσρόφησης με εναλλαγή πίεσης/κενού (PSA/VSA) για την παραγωγή οξυγόνου υψηλής καθαρότητας από τον ατμοσφαιρικό αέρα

A. Χαραλαμπους¹, Ε. Σ. Κικκινίδης¹

¹ Αριστοτέλειο Πανεπιστήμιο Θεσσαλονίκης, Τμήμα Χημικών Μηχανικών, 54124, Θεσσαλονίκη

Λέξεις κλειδιά: Διεργασίες προσρόφησης με εναλλαγή πίεσης / κενού (P/VSA), μαθηματική μοντελοποίηση, προσομοίωση, παραγωγή οξυγόνου από τον αέρα

Περίληψη

Τις τελευταίες δεκαετίες παρατηρείται μια σημαντική αύξηση σε εφαρμογές τεχνολογιών διαχωρισμού αερίων με φυσικές διεργασίες προσρόφησης, όπως η προσρόφηση με εναλλαγή πίεσης/κενού (Pressure/Vacuum Swing Adsorption -P/VSA) αλλά και στη έρευνα γύρω από αυτές. Η συγκεκριμένη διεργασία βρίσκει πολύ μεγάλη εφαρμογή σε βιομηχανική κλίμακα για το διαχωρισμό αερίων μιγμάτων σε διάφορες τιμές πίεσης και θερμοκρασίας και για μέτριες παροχές τροφοδοσίας όπου και πλεονεκτεί έναντι πιο παραδοσιακών αλλά ενεργοβόρων μεθόδων διαχωρισμού όπως είναι η απόσταξη και η απορρόφηση. Για παράδειγμα κατά την παραγωγή οξυγόνου υψηλής καθαρότητας (>95%) από τον ατμοσφαιρικό αέρα η μέθοδος P/VSA πλεονεκτεί της κρυογενικής απόσταξης για απαιτήσεις σε παραγωγή οξυγόνου έως και 60 tn ημερησίως. Σύμφωνα με το μηχανισμό που περιγράφει τη διεργασία, ένα ή περισσότερα αέρια του μίγματος προσροφώνται εκλεκτικά στους νανοπόρους του προσροφητικού υλικού σε μία στήλη προσρόφησης, με αποτέλεσμα να παράγεται ένα αέριο μίγμα εμπλουτισμένο με το ασθενές προσροφημένο συστατικό του αερίου τροφοδοσίας. Στην συνέχεια η στήλη προσρόφησης αναγεννάται μέσω εκρόφησης των προσροφημένων συστατικών σε μία πίεση χαμηλότερη από αυτή της τροφοδοσίας. Έτσι η συνολική πίεση του συστήματος μεταβάλλεται μεταξύ της υψηλής πίεσης στη τροφοδοσία της στήλης και της χαμηλής πίεσης κατά το στάδιο της αναγέννησης της στήλης [1].

Το μαθηματικό δυναμικό μοντέλο προσομοίωσης της διεργασίας P/VSA αντιπροσωπεύει ένα λεπτομερές μοντέλο στήλης προσρόφησης το οποίο βασίζεται σε ένα πεπλεγμένο σύστημα από μερικές διαφορικές εξισώσεις των ισοζυγίων μάζας, ενέργειας και ορμής, καθώς επίσης και εξισώσεις ισόθερων καμπυλών ισορροπίας, προσεγγιστικές εξισώσεις μεταφοράς μάζας στο προσροφητικό υλικό, εξισώσεις θερμοφυσικών ιδιοτήτων του αερίου μίγματος και εξισώσεις οριακών συνθηκών που αναφέρονται στα λειτουργικά στάδια της διεργασίας [2]. Το μαθηματικό μοντέλο επιλύεται με χρήση του λογισμικού MATLAB. Το μαθηματικό μοντέλο έχει εφαρμοστεί στη δέσμευση αζώτου σε ατμοσφαιρικό αέρα με σκοπό την παραγωγή αερίου μίγματος υψηλής καθαρότητας σε οξυγόνο (~95%) σε ένα σύστημα δύο κλινών.

Αρχικά γίνεται ένας έλεγχος του μαθηματικού μοντέλου με δεδομένα από την βιβλιογραφία. Ένας απλός κύκλος PSA ή κύκλος Skastrom αποτελείται από τέσσερα στάδια, το στάδιο προσρόφησης, το στάδιο της εκρόφησης, το στάδιο καθαρισμού κλίνης και το στάδιο της συμπίεσης [1]. Για τη βελτίωση των αποτελεσμάτων τα οποία καθορίζουν την αποτελεσματικότητα της διεργασίας όπως η καθαρότητα και η ανάκτηση του ασθενές προσροφημένου συστατικού, της ενέργειας και της μάζας του προσροφητικού υλικού που χρησιμοποιείται προστέθηκαν στο κύκλο άλλα δύο στάδια εξισορρόπησης πίεσης μεταξύ των δύο κλινών κατά αντιροή και κατά ομορόη. Στην συνέχεια γίνεται μια σύγκριση μεταξύ των τριών αυτών διαφορετικών κύκλων και μία σύγκριση μεταξύ δύο διαφορετικών προσροφητικών υλικών του NaX και του LiX τα οποία θεωρούνται ως τα πλέον κατάλληλα για το συγκεκριμένο διαχωρισμό [3, 4]. Στους κύκλους όπου έχουμε τα στάδια της εξισορρόπησης της πίεσης η τελική πίεση εξισορρόπησης υπολογίζεται με χρήση μίας επαναληπτικής μεθόδου σκόπευσης.

Τέλος γίνεται μείωση κλίμακας της κλίνης και μεταβάλλοντας διάφορες παραμέτρους όπως το μέγεθος των σωματιδίων του προσροφητικού υλικού και τον χρόνο του κάθε κύκλου μελετάται η μεταβολή της πτώσης πίεσης μέσα στην κλίνη και την επίπτωση που έχει στις μεταβλητές που χαρακτηρίζουν την διεργασία.

Από τα παραπάνω καθίσταται φανερή η ανάγκη λεπτομερούς και αξιόπιστης μοντελοποίησης και προσομοίωσης μιας διεργασίας P/VSA με σκοπό την καλύτερη αξιολόγηση τόσο των προτεινόμενων προσροφητικών υλικών όσο και των προτεινόμενων σταδίων σε ένα κύκλο της διεργασίας.

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Yang, R. T., 1987, "Gas Separation by Adsorption Processes Gas", Butterworth, Boston. Reprinted by Imperial College Press, London and World Scientific Publishing Co., River Edge, NJ 1997a.
- [2] Nikolic, D., Giovanoglou, A., Georgiadis, M. C., Kikkinides, E. S., 2008, "Generic modeling framework for gas separations using multibed pressure swing adsorption processes", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Vol. 47, No. 9, pp.3156-3169.
- [3] Rege, S. U., and R. T. Yang, 1997, "Limits for Air Separation by Adsorption with LiX Zeolite", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, Vol. 36, No.12, pp. 5358-5365
- [4] Nick D. Hutson, Salil U. Rege, and Ralph T. Yang, 1999, "Mixed Cation Zeolites Li_xAg_y-X as a Superior Adsorbent for Air Separation", *AIChE Journal*, Vol. 45, No. 4, pp. 724-734.