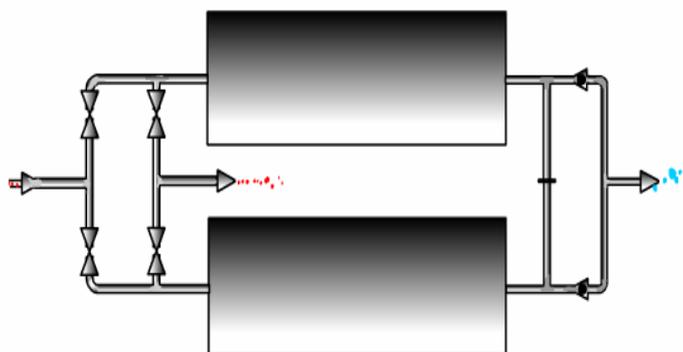


*В.Г. Матвейкин, В.А. Погонин,
С.Б. Путин, С.А. Скворцов*

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И УПРАВЛЕНИЕ ПРОЦЕССОМ КОРОТКОЦИКЛОВОЙ АДСОРБЦИИ



**МОСКВА
"ИЗДАТЕЛЬСТВО МАШИНОСТРОЕНИЕ-1"
2007**

*В.Г. Матвейкин, В.А. Погонин,
С.Б. Путин, С.А. Скворцов*

*МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И УПРАВЛЕНИЕ ПРОЦЕССОМ
КОРОТКОЦИКЛОВОЙ АДСОРБЦИИ*

МОСКВА
«ИЗДАТЕЛЬСТВО МАШИНОСТРОЕНИЕ-1»
2007

УДК 517.935

ББК ←965+л11-1с116+В19

М336

Рецензенты:

Доктор технических наук, профессор,
заведующий кафедрой «Информационные процессы»
Тверского государственного технического университета

Б.В. Палюх

Доктор технических наук, член-корреспондент МАНЭБ,
начальник отдела Первого Центрального
НИИ ВМФ МО РФ (Санкт-Петербург),

Г.А. Родин

Матвейкин, В.Г.

М336 Математическое моделирование и управление процессом короткоцикловой безнагревной адсорбции / В.Г. Матвейкин, В.А. Погонин, С.Б. Путин, С.А. Скворцов. – М. : «Издательство Машиностроение-1», 2007. – 140 с. – 400 экз. – ISBN 978-5-94275-327-6.

Рассмотрены теоретические аспекты математического моделирования процесса короткоцикловой безнагревной адсорбции (КБА), которые являются основой для выбора наилучшей системы управления, оптимальных режимов работы и интегрированного проектирования оборудования и систем управления установками КБА.

Предназначена для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки дипломированных специалистов 657900 «Автоматизированные технологии и производства». Может быть полезна инженерам, магистрам и аспирантам, занимающимся проектированием и эксплуатацией АСУ установок очистки и разделения газов.

Монография подготовлена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, госконтракт № 02.438.11.7012.

УДК 517.935

ББК ←965+л11-1с116+В19

ISBN 978-5-94275-327-6

© Матвейкин В.Г., Погонин В.А.,
Путин С.Б., Скворцов С.А., 2007
© «Издательство Машиностроение-1»,
2007

Научное издание

*Матвейкин ВАЛЕРИЙ ГРИГОРЬЕВИЧ,
Погонин ВАСИЛИЙ АЛЕКСАНДРОВИЧ,
Путин СЕРГЕЙ БОРИСОВИЧ,
Скворцов СЕРГЕЙ АЛЕКСАНДРОВИЧ*

***МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И УПРАВЛЕНИЕ ПРОЦЕССОМ
КОРОТКОЦИКЛОВОЙ АДСОРБЦИИ***

Монография

Редактор Е.С. Мордасова
Компьютерное макетирование Е.В. Кораблевой

Подписано в печать 17.01.2007
Формат 60 × 84/16. 8,14 уч.-изд. л.
Тираж 400 экз. Заказ № 103

«Издательство Машиностроение-1»
107076, Москва, Стромьинский пер., 4

Подготовлено к печати и отпечатано в Издательско-полиграфическом центре
Тамбовского государственного технического университета
392000, Тамбов, Советская, 106, к. 14

ВВЕДЕНИЕ

Адсорбция является универсальным методом, позволяющим практически полностью извлечь примесь из газовой или жидкой среды.

В современных химической, газовой, нефтеперерабатывающей, горнодобывающей, металлургической промышленности, военной технике адсорбционный метод широко используют для глубокой очистки и осушки технологических потоков, улучшения качества сырья, воздуха, получения кислорода и т.д. Адсорбция занимает ведущее место среди способов защиты биосферы от вредных промышленных выбросов.

Адсорбционные процессы очистки, разделения и сепарации газов разносторонни. В настоящее время наиболее широко используются и разрабатываются два метода, называемые в зарубежной литературе методами TSA и PSA.

Метод TSA (temperature swing adsorption) – традиционный метод проведения адсорбционных процессов в циклах адсорбции-десорбции при различных температурах. Полный технологический цикл включает стадии адсорбции, нагрев слоя адсорбента, стадию десорбции и стадию охлаждения перед проведением следующего цикла. Необходимость периодического нагревания и охлаждения слоя адсорбента осложняет использование этого метода и является его главным недостатком.

Метод PSA (pressure swing adsorption, или по-русски – КБА – короткоцикловая безнагревная адсорбция) – новый прогрессивный метод. Главная отличительная особенность этого метода в том, что циклы адсорбции и десорбции проводятся при одной и той же температуре, но парциальное давление адсорбирующихся компонентов при адсорбции больше, чем при десорбции.

Главное преимущество процессов PSA перед TSA – в устранении стадий нагрева и охлаждения адсорбера, требующих больших затрат времени и энергии.

При расчете и выборе технологических схем адсорбционных процессов очистки и разделения газов исследователю или инженеру необходимо учитывать многочисленные и разнообразные аспекты (равновесие, кинетика, динамика, гидравлика и т.д.). Еще сложнее создать оптимальный вариант технологической схемы и системы управления.

Несмотря на все многообразие существующих технических решений организации процессов адсорбционной очистки и разделения газовых смесей, основным этапом в процессе разработки установок КБА является физическое моделирование. Изменение давления, температуры и других параметров оказывает непосредственное влияние на качественные показатели адсорбционного процесса. Полноценный учет перечисленных факторов в условиях физического моделирования приводит к значительным затратам: финансовым, времени и трудовых ресурсов. На практике приходится искать компромисс между себестоимостью производимой установки и уровнем ее эффективности.

Поэтому целесообразным является включение в процесс разработки технологической схемы и системы управления этапа математического моделирования на основе теории адсорбционных и гидромеханических процессов, теории автоматического управления. Наличие адекватной математической модели в широком спектре управляющих и возмущающих воздействий позволит: искать новые пути повышения эффективности установок КБА, сократить время научно-исследовательских и пусконаладочных работ, а также подойти к формированию методики расчета процессов очистки и разделения газовых смесей в условиях короткоцикловой безнагревной адсорбции.

Необходимость и важность управления процессами, протекающими в установках КБА, очевидна. Обеспечение заданных качественных показателей работы установки КБА в широком диапазоне возмущающих воздействий, как зачастую требует практика, невозможно без разработки высокоэффективных систем управления. Кроме того, выбор закона управления и технических средств автоматизации определяет устойчивость показателей эффективности работы установки в течении длительного периода функционирования газоразделительной установки.

1. ОСНОВЫ АДСОРБЦИОННОЙ ТЕХНИКИ

1.1. АДСОРБЦИОННАЯ ТЕРМИНОЛОГИЯ

Адсорбция означает поглощение (точнее – концентрирование) каких-либо компонентов из объема гомогенных сопредельных фаз на поверхности раздела этих фаз. Адсорбированные молекулы взаимодействуют с молекулами или атомами поверхности и снижают как свободную поверхностную энергию конденсированной фазы, так и суммарную энергию системы. Поэтому адсорбция это самопроизвольный процесс, происходящий с выделением тепла. Процесс, обратный адсорбции, называют десорбцией [1, 2].

Введем термины, предложенные Международным союзом чистой и прикладной химии (IUPAC): *адсорбентом* называют вещество, на котором происходит адсорбция; *адсорбатом* называют уже адсорбированное вещество, находящееся на поверхности или в объеме пор адсорбента; *адсорбтивом* называют вещество, способное адсорбироваться, но еще не адсорбированное. Отметим, что допускается использование общих терминов: сорбент, сорбат, сорбтив. Итак, адсорбтив адсорбируется на адсорбенте, превращаясь в адсорбат [1, 2].

Адсорбенты характеризуются следующими основными свойствами [1]:

– *плотность адсорбентов*, для характеристики которой применяют три показателя:

- истинная плотность $\rho_{и}$ – один из методов определения истинной плотности заключается в заполнении герметичной колбы, содержащей навеску адсорбента g , практически не сорбирующим газом – гелием. Разность между объемом газа в пустой колбе V_1 и объемом газа в колбе, содержащей навеску сорбента V_2 , соответствует объему вещества, из которого состоит адсорбент. Отсюда истинная плотность рассчитывается по формуле: $\rho_{и} = g/(V_1 - V_2)$.

- кажущаяся плотность $\rho_{к}$ соответствует массе гранулы адсорбента, отнесенной к ее объему.

- гравиметрическая или насыпная плотность $\rho_{г}$ характеризует массу единицы объема слоя адсорбента;

– *плотность гранул* – под плотностью гранул $\epsilon_{гр}$ понимают долю объема гранулы, не занятую веществом адсорбента, т.е. долю пустот в структуре адсорбента. Ее определяют по соотношению кажущейся и истинной плотности, т.е. $\epsilon_{гр} = 1 - (\rho_{к}/\rho_{и})$;

– *пористость слоя* $\epsilon_{сл}$ – доля объема слоя, не занятая собственно гранулами адсорбента и может быть определена как: $\epsilon_{сл} = 1 - (\rho_{г}/\rho_{и})$;

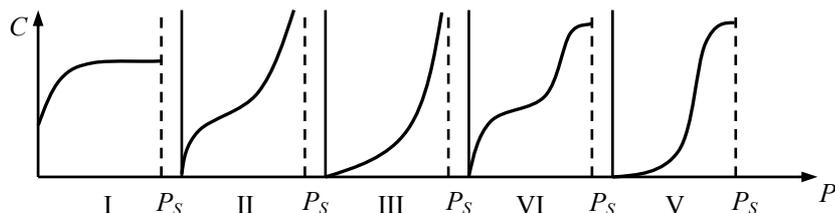


Рис. 1.1. Основные типы изотерм адсорбции

– *гранулометрический состав* характеризуется содержанием фракций, задерживаемых ситами с ячейками номинального размера;

– *изотерма адсорбции* – зависимость адсорбционной способности a от давления P при постоянной температуре T , т.е. $a = f(P)$ при $T = \text{const}$. Изотерма адсорбции является источником информации о структуре адсорбента, тепловом эффекте адсорбции и ряде других физико-химических и технологических характеристик. Различают пять основных типов изотерм адсорбции, которые представлены на рис. 1.1.

Тип I характерен для микропористых адсорбентов, практически не содержащих переходных пор. Начальные выпуклые участки изотерм типов II и IV указывают на присутствие наряду с макропорами более или менее существенного объема микропор. Менее крутой начальный подъем кривых изотерм может быть обязан моно-полимолекулярной адсорбции для адсорбента только переходно-пористого типа. Начальные выгнутой участки редко встречающихся изотерм типов III и V характерны для систем адсорбент–адсорбат, когда взаимодействие адсорбата с адсорбентом много меньше межмолекулярного взаимодействия для молекул адсорбата.

Основное отличие II от IV и III от V типов заключается в том, что объем переходных пор (IV и V типы) в результате капиллярной конденсации заполняется адсорбатом раньше, чем относительное давление приблизится к единице. В результате этого на изотермах появляется почти горизонтальный участок.

1.2. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ АДСОРБЦИОННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ

Адсорбционные процессы очистки и разделения газовых смесей основаны на различных в массе, размерах и строении молекулах, образующих смесь. Молекулярные массы макрокомпонентов воздуха (азот и кислород) близки, составляя 28 и 32 единицы соответственно, и это различие в свойствах указанных веществ при их адсорбционном разделении не используется. В то же время следует отметить, что именно этот фактор в конечном счете определяет эффективность низкотемпературного разделения воздуха [2, 4].

Из анализа литературы [1, 7] следует, что для разделения газовых смесей по методу короткоциклового безнагревной адсорбции в качестве адсорбента наиболее часто используются углеродные молекулярные сита (УМС) и синтетические цеолиты.

Применение УМС в адсорбционной технике основано на различии критического диаметра молекул компонентов газовой смеси (например кинетический или критический диаметр молекулы азота составляет 0,37...0,39, а кислорода 0,32 нм). В однородно-пористой структуре, которую имеют УМС, быстрее адсорбируются молекулы с меньшим критическим размером.

Молекулы азота, в отличие от молекул кислорода, содержат π -электроны. Следовательно, на периферии молекул азота сосредоточен большой отрицательный заряд. Его характеристикой служит квадрупольный момент. Благодаря высокому квадрупольному моменту азот лучше, чем кислород адсорбируется на адсорбентах, поверхность которых заряжена положительно или имеет локальные положительные заряды. Такими адсорбентами являются цеолиты.

Цеолиты – гидратированные кристаллические алюмосиликаты ряда щелочных и щелочноземельных металлов. При нагреве они дегидратируются, но не разрушаются: удаление воды приводит к образованию объемной пористой структуры, которая образована «окнами» (каналами) и «полостями» – пересечениями каналов (рис. 1.2) [16]. На поверхности цеолитов имеется распределенный отрицательный заряд, источником которого служат атомы кислорода, в большом количестве присутствующие в молекулах всех алюмосиликатов. Обменные катионы

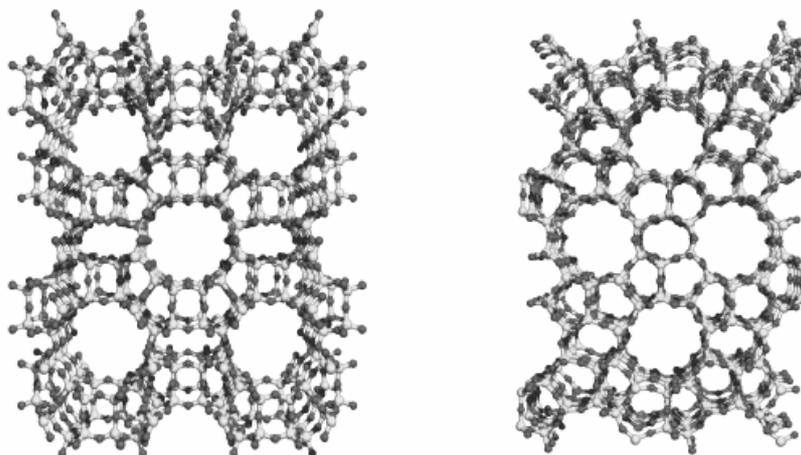


Рис. 1.2. Структура цеолитов

(Na^+ , Ca^+ и др.) нейтрализуют отрицательный заряд каркаса. Они образуют сильные локальные центры положительного заряда и являются местом предпочтительной сорбции молекул с ярко выраженным квадрупольным моментом.

Содержание в цеолитах обменных катионов или катионная плотность цеолитов, а значит и эффективность их применения, в процессе очистки и разделения газовых смесей определяются химическим составом и кристаллографическим типом адсорбента. В настоящее время изготавливаются синтетические цеолиты кристаллографических типов *A*, *X*, *Y*, *M* и др., катионная плотность которых ранжируется следующим образом: $A > X > Y > M$.

Более представительной информацией о равновесной поглотительной способности цеолитов являются изотермы адсорбции. В качестве примера на рис. 1.3 представлены изотермы азота и кислорода на цеолите CaA при $P < 0,1$ МПа [4].

Указанные изотермы почти линейны, что является их положительной особенностью, так как линейность определяет одинаково легкое протекание адсорбции и десорбции, что является основным условием проведения циклических процессов разделения газовых смесей.

Более точная аппроксимация изотерм адсорбции азота и кислорода приводит к уравнению Фрейндлиха:

$$a = Ap^m, \quad (1)$$

где a – величина адсорбции, $\text{нм}^3/\text{г}$; p – равновесное давление, мм рт.ст.; A и m – параметры уравнения.

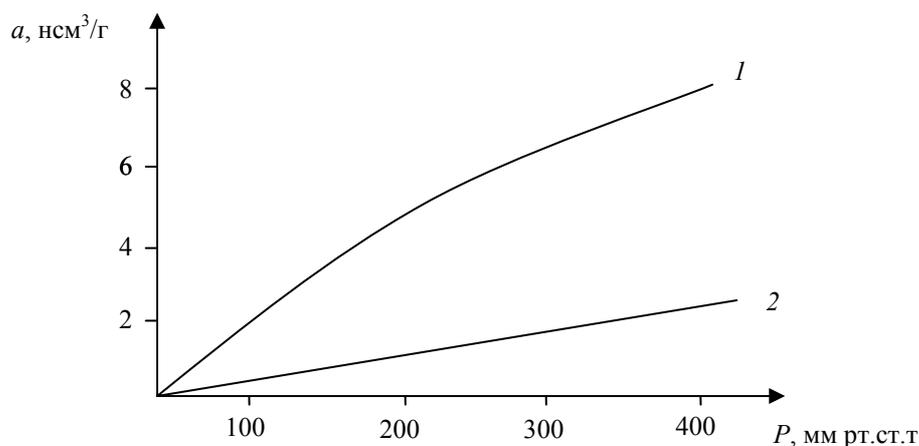


Рис. 1.3. Изотермы адсорбции:
1 – азот; 2 – кислород

С параметрами уравнений изотерм тесно связаны величины теплоты адсорбции. Они меняются в зависимости от типа и партии цеолита и в среднем составляют 2,7...6,3 ккал/моль для азота и 1,8...4,3 ккал/моль для кислорода. Приведенные значения теплоты адсорбции невелики, что обуславливает сравнительно низкую чувствительность адсорбционного процесса

разделения газов к изменениям температуры. Тем не менее, как следует из графиков (рис. 1.4), существует оптимальная температурная область проведения процесса адсорбционного разделения газов с помощью цеолитов [4].

Одним из факторов при выборе между применением цеолитов или УМС является характер разделяемой газовой смеси. Для разделения системы N_2-O_2 углеродные молекулярные сита не получили распространения. Это обусловлено тем, что размеры молекул кислорода и азота близки, а квадрупольный момент значительно отличается $N_2(0,43 \cdot 10^{15}$ Кл·м), $O_2(0,14 \cdot 10^{15}$ Кл·м). Кроме того, способность УМС электризоваться и создавать электрические разряды делает нецелесообразным их применение в установках, функционирующих на ответственных объектах.

Размер пор цеолитов не является постоянной величиной: он возрастает с ростом температуры. Цеолиты обладают упорядоченной системой внутренних пор, адсорбция на них описывается изотермой I типа по классификации Брунауэра (см. рис. 1.1) или изотермой Ленгмюровского типа.

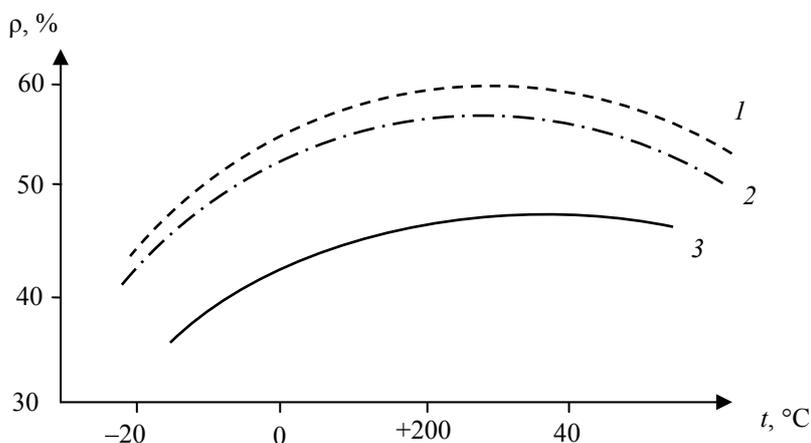


Рис. 1.4. Зависимость степени извлечения кислорода от температуры адсорбции для трех типов цеолитов: 1 – NaA; 2 – NaX; 3 – CaA

Представления об удельной поверхности твердых тел неприменимы к микропористым кристаллам цеолитов, так как адсорбция на них происходит с заполнением всего объема полостей. Удельную поверхность цеолита, измеренную экспериментально, можно рассматривать только как величину, характеризующую адсорбцию данного адсорбата в данных условиях. Термин «монослойный эквивалент» определяет площадь, которую заняли бы все молекулы, заполняющие внутри-кристаллический свободный объем, если бы они расположились в виде плотного монослоя.

В цеолитах адсорбционное поле распространяется на весь свободный внутренний объем. Размеры микропор составляют всего несколько молекулярных диаметров, в результате чего потенциальные поля противоположных стенок перекрываются, а изотермы адсорбции приобретают прямоугольную форму. Для такой изотермы характерен длинный горизонтальный участок.

Изотермы адсорбции на кристаллических цеолитах не имеют гистерезиса, характерного для изотерм адсорбции на аморфных микропористых адсорбентах. Адсорбция и десорбция полностью обратимы, так что десорбционная ветвь изотермы совпадает с адсорбционной.

Алюмосиликатные кристаллы цеолита имеют размер порядка $3 \dots 5$ мкм и для практического использования непригодны. Поэтому цеолитовый порошок (в том числе как правило с добавкой связующего) формируют в гранулы сферической либо цилиндрической формы диаметром $0,5 \dots 5$ мм. В процессе агломерации в таблетках образуются макропоры, в которых при больших относительных давлениях адсорбата может происходить капиллярная конденсация [16].

В цеолитных адсорбентах диффузия в глубь таблетки происходит по макропорам. Основная часть адсорбционной емкости приходится на внутрикристаллический объем, а на внешней поверхности кристаллов цеолита адсорбируется около 1 % вещества. Большие каналы, по которым происходит диффузия внутри кристалла, образованы полостями одинакового размера, соединяющимися через окна, или в некоторых случаях системой параллельных цилиндрических каналов. Стенки каналов, составляющие внутреннюю поверхность, образованы ионами кислорода каркаса. В определенных местах на этих стенках расположены катионы, заряд которых зависит от их координации или экранирования ионами кислорода решетки.

Диффузионные каналы могут образовывать трех-, двух- или одномерную систему цилиндрических каналов, параллельных определенному кристаллографическому направлению. Диффузия в цеолитах с трехмерной сетью каналов протекает более свободно. Имеется несколько цеолитных структур, в которых возможна трехмерная или двухмерная диффузия. При дегидратации вода удаляется из каналов и остающиеся катионы локализируются на стенках или в сечении каналов и сильно затрудняют диффузию большинства молекул.

Высокая селективность цеолитных адсорбентов объясняется тем, что: цеолиты адсорбируют только те молекулы, которые по размерам и конфигурации соответствуют размерам окон каркаса цеолита; большей селективности адсорбции молекул способствует постоянный дипольный момент.

1.3. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ КИНЕТИКИ И ДИНАМИКИ АДсорбЦИИ

Кратко рассмотрим особенности адсорбции из потока в задачах очистки, выделения и концентрирования разных компонентов из газовых смесей. Закономерности таких процессов достаточно полно исследуются в литературе [4, 5]. К кинетике адсорбции и десорбции обычно относят процессы, происходящие на уровне зерна или тонкого слоя зерен, в котором отсут-

ствуется градиент концентраций адсорбтива по толщине слоя и рассматриваются лишь градиенты по радиусу зерна адсорбента. В каталитических исследованиях это соответствует режиму идеального смешения, который реализуется в безградиентных реакторах.

Собственно акт физадсорбции обычно не требует энергии активации, проходит достаточно быстро и лимитируется процессами транспорта в объеме зерна (т.е. внутренней диффузией) или подводом к внешней поверхности зерна (т.е. внешней диффузией). Однако, ввиду экзотермичности адсорбции и зависимости равновесных величин адсорбции от температуры, кинетика адсорбции может лимитироваться отводом тепла. Стадия десорбции практически всегда связана с энергией активации, требуемой для отрыва молекулы адсорбата от адсорбента, поэтому может лимитироваться как собственно актом десорбции (связанным с теплоподводом), так и внутри- или внешнелиффузионными процессами. В остальном кинетика адсорбции и десорбции описывается общими уравнениями массообмена и теплообмена, которые приведены в работах [2, 4, 5].

К динамике адсорбции и десорбции относят процессы, происходящие в слое зерен с градиентом концентрации адсорбтива по длине слоя (в гетерогенном катализе их аналог – режим идеального вытеснения). Основная задача теории динамики адсорбции – моделирование и расчет аппаратов-адсорберов. Процессы адсорбции экзотермичны, а обратные им процессы десорбции эндотермичны.

Рассмотрим модельный случай изотермической адсорбции, не осложненной тепловыми эффектами. Пусть изотерма адсорбции поглощаемого компонента (адсорбтива) имеет выпуклую форму (например, типа изотермы Ленгмюра), которая характерна для тонкопористых адсорбентов. Через слой зерен адсорбента длиной L продувают смесь газа-носителя с адсорбтивом. Концентрацию адсорбтива на входе в слой обозначим C_0 , удельную скорость газа, отнесенную к единице сечения адсорбера, обозначим w , эти значения в ходе эксперимента поддерживаются постоянными. Дополнительно допустим, что концентрация адсорбата в адсорбенте до начала эксперимента равна нулю. Проследим за изменениями концентрации адсорбтива $C(L, \tau)$ и его содержанием в адсорбированном виде $a(L, \tau)$ по длине слоя L в разные моменты времени τ (рис. 1.5).

Исследования таких процессов показывают, что в начальный период времени τ при $\tau < \tau_0$, где τ_0 – некоторое характерное время, происходит насыщение лобового слоя длиной L в нестационарном режиме (позиция 1 на рис. 1.5). При $\tau > \tau_0$ в слое длиной $L > L_\phi$ устанавливается стационарный режим с показанным на рис. 1.5 изменением профиля концентраций, который называют фронтом сорбции. В стационарном режиме этот фронт перемещается по длине слоя с постоянной скоростью $U = C_0 w / (a_0 \Delta)$, где C_0 – концентрация на входе; a_0 – равновесная этой концентрации величина адсорбции; Δ – насыпная плотность адсорбента. На этой стадии в слое сорбента можно выделить три характерные зоны: зону работающего слоя L_0 (обозначенную на рис. 1.3 как МТЗ), в которой простирается фронт адсорбции и концентрация адсорбтива снижается от C_0 до $C = 0$; зону уже отработавшего слоя, в котором концентрация адсорбтива равна C_0 ; и зону, которая еще не участвует в процессе (еще не работающий слой).

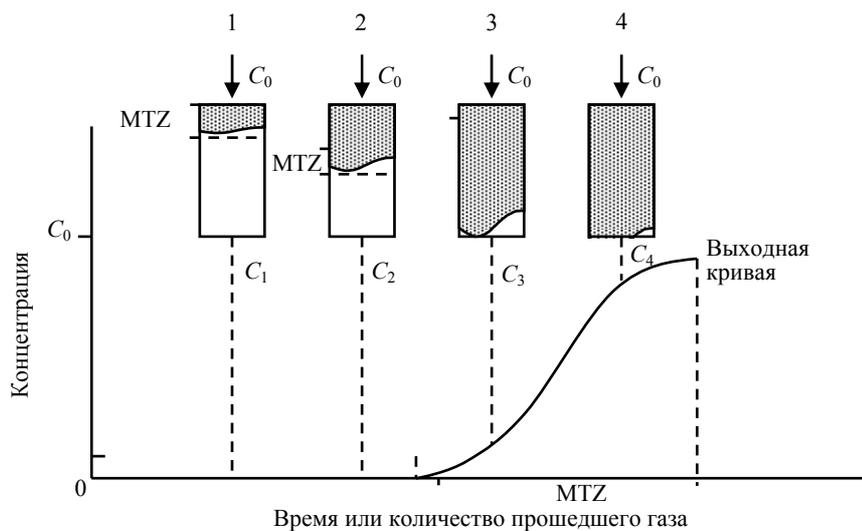


Рис. 1.5. Схема перемещения фронта адсорбции по слою адсорбента при выпуклой изотерме адсорбции

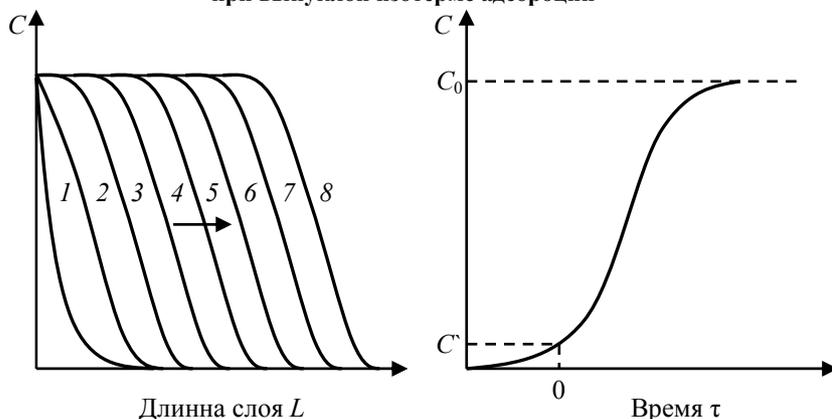


Рис. 1.6. Распределение концентраций в слое в различные моменты времени

На рис. 1.5 и 1.6 показаны последовательные стадии перемещения фронта сорбции по слою адсорбента. В момент, когда этот фронт достигает конца слоя (позиции 3 и 4 на рис. 1.5 или позиции, например, 7 и 8 на рис. 1.6), концентрации адсорбтива в газовом потоке на выходе из слоя начинают увеличиваться от $C = 0$ до C_0 . График изменений концентрации адсорбтива на выходе из слоя в зависимости от времени τ называется выходной кривой (или кривой проскока).

Время до появления заданной концентрации адсорбтива C_n за слоем называется временем до проскока C_n или временем защитного действия $\tau(C_n)$ слоя L данного адсорбента до заданного проскока. Реализуемая за время до проскока величина адсорбционной емкости называется *динамической емкостью*, которая всегда несколько ниже равновесной емкости в статических условиях из-за неполной отработки замыкающего слоя. Зависимость времени защитного действия от длины слоя адсорбента L обычно описывается в хорошем приближении уравнением Н.А. Шилова

$$\tau(C_n) = KL - \tau_0, \quad (1.1)$$

где в современной трактовке $K - a_0\Delta/(C_0w) = U^{-1}$; U – скорость перемещения фронта адсорбции в стационарной области. Параметр τ_0 , который может быть назван *потерей времени защитного действия*, связан с начальным периодом формирования работающего фронта.

Это уравнение Н.А. Шилова, выдающийся русский физикохимик, получил в 1916 г. при испытаниях первых противогазов в условиях фронтальной лаборатории Западного фронта русской армии. В более современной трактовке параметр τ_0 аппроксимируется как

$$\tau_0 = [a_0\Delta/(C_0\beta)]f(C/C_0),$$

в результате $\tau = [a_0\Delta/(C_0w)]L - [a_0\Delta/(C_0\beta)](C/C_0)$

или $\tau = [a_0\Delta/(C_0w)](L - L_\phi)$,

где $L_\phi = L_0 = (w/\beta)f(C/C_0)$ – длина зоны формирования стационарного режима; $f(C/C_0)$ – функция фиксированных значений проскоковых концентраций за слоем.

Более строгие решения основаны на уравнении материального баланса изотермической адсорбции в элементе слоя адсорбента длиной dL в виде

$$\partial(a\Delta)/\partial\tau + \partial C/\partial\tau + \partial(wC)/\partial L = D^*(\partial^2 C/\partial L^2), \quad (1.2)$$

где $\partial(a\Delta)/\partial\tau$ – изменение содержания адсорбированного компонента в единице объема слоя за единицу времени (величина Δ – насыпная плотность, если a – величина адсорбции на единицу массы адсорбента); $\partial C/\partial\tau$ – изменение концентрации адсорбтива в пространстве между зернами, $\partial(wC)/\partial L$ – изменение содержания адсорбтива при прохождении фронта через единицу длины слоя. Правая часть уравнения определяет изменения концентрации из-за продольной диффузии. Здесь D^* – коэффициент продольной диффузии, учитывающий нарушения структуры потока в слое, связанные с неравномерностью упаковки зерен, стеночными эффектами, застойными зонами и т.д.

Для описания суммарного процесса изотермической динамики адсорбции к этому уравнению необходимо добавить выражение для изотермы адсорбции $a = f(C)_T$ и уравнение кинетики адсорбции в слое малой толщины $\partial(a\Delta)/\partial\tau = \psi(a, C)$.

Полученная система уравнений не имеет общего аналитического решения и решается в численном виде. Аналитические решения получены для идеализированных и некоторых частных случаев. Так, в условиях, когда эффект продольной диффузии пренебрежимо мал и допустимо полагать, что $D^* \sim 0$, последний член «зануляется», кроме того, в ряде случаев допускают, что скорость установления равновесия в зерне бесконечно велика. При этих упрощающих условиях оставшаяся система уравнений имеет два решения:

$$U = w/[1 + a_0\Delta/C_0]; \quad (1.3)$$

$$U = w/[1 + f'(C)]. \quad (1.4)$$

Решение (1.3) называется уравнением Вильсона, оно соответствует гипотетическому случаю движения «обрывного» фронта, при котором концентрация адсорбтива изменяется скачкообразно от C_0 до 0. Здесь $a\Delta$ – величина равновесной адсорбции в единице объема слоя при концентрации C_0 . Более реальное решение (1.4) называют законом Зельдовича–Викке. В этом уравнении $f'(C) = \partial(a\Delta)/\partial C|_{C_i}$ – производная изотермы адсорбции при концентрации C_i .

Рассмотрим особенности решения (1.4) для разных видов изотерм адсорбции.

1.3.1. Влияние формы изотермы адсорбции на динамику сорбции

Выпуклая изотерма адсорбции – наиболее распространенный и практически значимый случай. Рассмотрим движение двух точек адсорбционного фронта C_1 и C_2 , причем $C_2 > C_1$ (рис. 1.7, в).

Производная изотермы адсорбции $f'(C_1) > f'(C_2)$, поэтому точка с концентрацией C_2 должна двигаться быстрее точки с концентрацией C_1 . Но насыщению слоя при концентрации C_2 должно предшествовать насыщение при концентрации $C_1 < C_2$. В результате фронт по мере перемещения по слою должен становиться все круче, в пределе превращаясь в обрывной фронт, все точки которого двигаются с постоянной скоростью, определяемой уравнением Вильсона. Но эти решения относятся к модельной ситуации, возникающей в реакторе идеального вытеснения без учета факторов размытия фронта. На практике конечная скорость адсорбции, как и неоднородности слоя, неизбежно приводит к размытию адсорбционного фронта. При этом кинетика адсорбции обычно выражается уравнениями

$$da/d\tau = \beta_{out}(C - C^*) \quad (1.5)$$

или

$$da/d\tau = \beta_{in}(a^* - a), \quad (1.6)$$

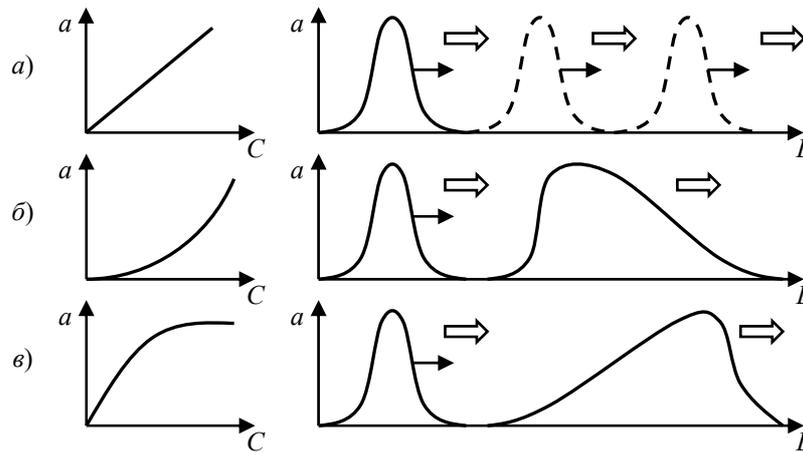


Рис. 1.7. Характерный вид изотермы адсорбции:

a – линейная; *б* – вогнутая; *в* – выпуклая

где уравнение (1.5) соответствует условиям, когда лимитирует внешняя диффузия, а уравнение (1.6) – условиям лимитирующей внутренней диффузии. В этих уравнениях β_{out} и β_{in} – коэффициенты внешнего и внутреннего массообмена; C – концентрация в потоке вне зерна; C^* – концентрация у внешней поверхности, равновесная величине адсорбции в объеме зерна; a^* – величина адсорбции, равновесная концентрации в потоке C ; a – текущее значение величины адсорбции.

Суммарный эффект размытия при выпуклой изотерме адсорбции обычно выражают уравнением Тодеса–Биксона

$$1/\beta = 1/\beta_{out} + 1/\beta_{in} + D^*/w^2, \quad (1.7)$$

где β – суммарный коэффициент массообмена, включающий вклад внешней (β_{out}), внутренней (β_{in}) и продольной (D^*/w^2) диффузии.

Согласно этому уравнению, суммарное диффузионное сопротивление равно сумме сопротивлений как в законе Кирхгоффа для электрических цепей.

В результате положение концентрационных точек адсорбционного фронта при выпуклой изотерме адсорбции определяется двумя противоположно действующими факторами: фактором размытия, стремящимся ускорить перемещение точек с низкой концентрацией, и фактором сжатия, вытекающим из значений производной изотермы адсорбции, стремящимся сдержать перемещение точек с низкой концентрацией. На некотором расстоянии от входа в слой (на длине $L - L_{\phi}$) эти факторы взаимно компенсируются и устанавливается стационарный режим параллельного переноса фронта. Длина слоя $L < L_{\phi}$ соответствует нестационарному режиму или зоне формирования работающего слоя L_0 , причем обычно $L_0 - L_{\phi}$. Эта гипотеза впервые была предложена Я. Зельдовичем и далее развита О. Тодесом.

Скорость перемещения стационарного фронта U определяется уравнением Вильсона (1.3), которое с учетом условия $a\Delta \gg C_0$ записывается в виде

$$U = w/[1 + a\Delta/C_0] = wC_0/[C_0 + a\Delta] = wC_0/(a\Delta). \quad (1.8)$$

Это позволяет обосновать уравнение Шилова (1.1).

Особенности перемещения адсорбционного фронта при другой форме ИА удобно рассмотреть на примере перемещения порции адсорбтива, введенного в слой адсорбента в импульсном газохроматографическом режиме (см. рис. 1.7).

Пусть через слой адсорбента перемещается импульс (порция), проекция которого в исходном положении имеет, например, треугольную форму. Ограничимся изотермическим режимом.

При выпуклой изотерме адсорбции лобовая часть фронта находится, как показано выше, под действием сжимающих и размывающих факторов, в результате на длине слоя $L > L_{\phi}$ формируется режим перемещения с постоянной скоростью. Но на замыкающей части фронта фактор формы изотермы усиливает размытие и поэтому точки фронта с низкой концентрацией должны отставать от точек с более высокой концентрацией. Факторы продольного размытия, обусловленные, например, конечной скоростью десорбции, дополнительно усиливают размытие. В результате по мере перемещения фронта его замыкающая часть прогрессивно размывается (приблизительно пропорционально времени T), образуя «хвост» возрастающей длины. Из-за этого эффекта системы с выпуклой изотермой адсорбции неудобно использовать в аналитической хроматографии.

Интенсивное размытие замыкающей части фронта при выпуклой ИА осложняет осуществление цикловых адсорбционно-десорбционных процессов очистки и разделения с проведением десорбции в изотермическом режиме. Частично этот нежелательный эффект может быть устранен в режиме вытеснительной десорбции, осуществляемой путем дополнительного введения более адсорбируемого компонента 2 с достаточно большой концентрацией, обеспечивающей его перемещение по слою со скоростью $U_2 > U_1$. Это приводит к вытеснению целевого компонента 1, который в отсутствие конкурента движется со скоростью U_1 . В результате зона десорбции целевого компонента принудительно ограничивается участком слоя между фронтами компонентов 1 и 2.

Другой способ борьбы с эффектом размытия десорбционной части фронта при такой форме ИА – проведение десорбции в режиме противотока, т.е. с противоположным направлением потоков при адсорбции и десорбции, что также ограничивает зону распространения десорбируемого компонента.

При линейной ИА (ИА Генри) эффекты, способствующие сжатию адсорбционного фронта, отсутствуют. Диффузионное размывание приводит к симметричному расширению лобовой и замыкающей частей адсорбционного фронта, приблизительно пропорционально $T^{0,5}$. Поведение адсорбционного фронта при вогнутой ИА зеркально обратное поведению фронта при выпуклой изотерме. В этом случае нарастающее размывание лобовой части фронта сочетается с крутым замыкающим фронтом.

Идеальным условием цикловой работы слоя адсорбента, на котором попеременно проводятся стадии адсорбции и десорбции, была бы выпуклая форма изотермы при адсорбции и вогнутая – при десорбции. На практике такая ситуация может быть реализована в режиме прог-раммируемого повышения температуры при десорбции, компенсирующего рост значений производной $f'(C)$.

1.3.2. Динамика неизотермической адсорбции

Реальный процесс адсорбции происходит в условиях выделения теплоты адсорбции. Для учета тепловых эффектов к уравнению материального баланса необходимо добавить уравнения теплового баланса в виде

$$h_a(\partial T_a/\partial \tau) + h_g(\partial T_g/\partial \tau) + wh_g(\partial T_g/\partial L) = \partial Q_a(a)/\partial \tau, \quad (1.9)$$

где h_a, h_g, T_a, T_g – теплоемкость и температура адсорбента и газа соответственно, $Q_a(a)$ – тепловой эффект адсорбции; и уравнение для учета теплообмена между адсорбентом и газом, которое в простейшем случае имеет вид

$$h_a \partial T_a/\partial \tau = K_g(T_a - T_g) + \partial Q_a(a)/\partial \tau, \quad (1.10)$$

где K_g – коэффициент теплообмена.

Ограничимся простейшими ситуациями, когда $T_a = T_g$, т.е. тепловое равновесие между адсорбентом и газом устанавливается достаточно быстро, но по слою адсорбента распространяются фронт адсорбции и порождаемая им тепловая волна (тепловой фронт). При этих условиях тепловой фронт движется со скоростью

$$U_T = wh_g/H,$$

где $H = h_g \varepsilon + h_a(1 - \varepsilon)$ – суммарная объемная теплоемкость газа и адсорбента, ε – пористость слоя адсорбента (свободная доля объема между зернами адсорбента). Здесь можно выделить два крайних режима [4]. Сначала рассмотрим простейшую ситуацию, когда скорость тепловой волны $U_T \gg U_c$, где U_c – скорость движения адсорбционного фронта. В этом случае все тепло отводится проходящим потоком газа, и адсорбция проходит в практически изотермических условиях на «холодном» адсорбенте. В этом предельном случае тепловой эффект не влияет на динамику адсорбции. Схема распределения температур и концентраций по длине слоя показана на рис. 1.8, а. Максимальная температура T_{\max} в ядре тепловой волны определяется уравнением

$$T_{\max} = [Q_{a0}/H][U_c/(U_T - U_c)].$$

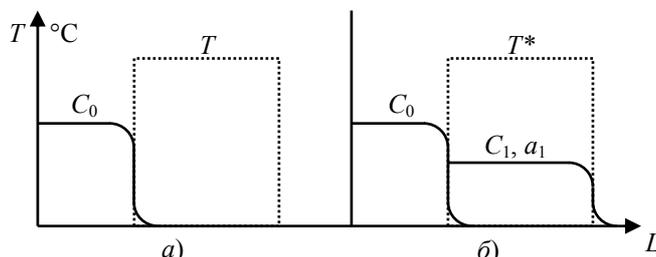


Рис. 1.8. Схема перемещения теплового и адсорбционного фронта

В другом предельном случае скорость тепловой волны $U_T < U_c$, тепло не успевает отводиться и адсорбция происходит на разогретом адсорбенте, что снижает адсорбционную емкость в зоне адсорбции. Но дальнейшее охлаждение зоны отработавшего адсорбента приводит к дополнительной адсорбции. В конечном итоге в этом случае по слою адсорбента распространяются два адсорбционных фронта (рис. 1.8, б).

При $U_T \gg U_c$ расширяющаяся тепловая волна движется перед фронтом сорбции, но не может от него оторваться, так как тепло непрерывно порождается в адсорбционном процессе. При $U_T < U_c$ постепенно расширяющаяся тепловая волна движется вместе с первым тепловым фронтом со скоростью U_{c1} (поскольку также не может оторваться), в холодной зоне движется второй адсорбционный фронт, приводя к дополнительной поглощению адсорбата. В идеализированном случае это «допоглощение» соответствует разнице $a_0 - a_1$, где значения удельной адсорбции a_0 и a_1 соответствуют равновесным концентрациям C_0 и C_1 , при соответственно температуре опыта и $T = T^*$ [4].

1.4. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ СПОСОБОВ ОРГАНИЗАЦИИ БЕЗНАГРЕВНЫХ АДсорбЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

В настоящее время наиболее широко используются и разрабатываются два метода осуществления адсорбционных процессов очистки, разделения и сепарации газов, называемые в зарубежной литературе методами TSA и PSA.

Метод TSA (temperature swing adsorption) – традиционный метод проведения адсорбционных процессов в циклах адсорбции-десорбции при разных температурах, так что $T_s < T_d$ (температуры адсорбции и десорбции, соответственно). Полный технологический цикл включает стадии адсорбции, нагрева слоя адсорбента, стадии десорбции и стадии охлаждения перед проведением следующего цикла. Необходимость периодического нагревания и охлаждения слоя адсорбента осложняет использование этого метода и является его главным недостатком. Стадия нагревания обычно весьма энергоемка, так как

здесь приходится прогревать не только адсорбент, но и весь адсорбер, а далее это тепло необходимо отводить, тепловой КПД такой схемы довольно низок.

Температура нагрева при регенерации T_d определяется адсорбентом и адсорбатом. Так, регенерация цеолитов, используемых для глубокой осушки воздуха, проводится в токе сухого воздуха при температуре 300...400 °С, при тех же температурах обычно регенерируют осушители на основе Al_2O_3 , регенерацию тонкопористых силикагелей проводят при температуре 200...300 °С, крупнопористых – при 150...200 °С. Активные угли обычно регенерируют острым паром при 200...400 °С с последующей отдувкой влаги при 150...200 °С и т.д. Процессы адсорбционной очистки могут проводиться в одно-, двух- или многоадсорберном вариантах. Одноадсорберный вариант обеспечивает периодическую очистку с проведением длительной (десять часов) стадии адсорбции и более кратковременным проведением всех остальных стадий. Полную непрерывность процессов очистки из-за многостадийности часто реализуют в многоадсорберном варианте, включающем четыре – шесть и более адсорберов, в которых последовательно осуществляются все стадии.

В основе безнагревных адсорбционных процессов очистки и разделения газов, как бы сложны ни были их современные реализации, лежит схема, предложенная в 1960 г. американским изобретателем Скарстромом. На рис. 1.9 представлена схема и циклограмма работы установки Скарстрема. Принцип действия подобной установки применительно к процессу разделения газовой смеси заключается в следующем.

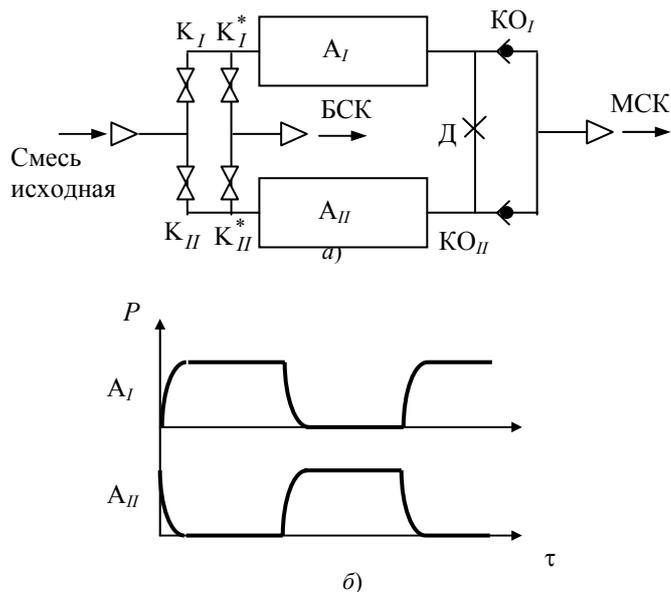


Рис. 1.9. Принципиальная технологическая схема (а) и циклограмма (б) работы установки разделения газовой смеси по Скарстрому

Исходная сжатая смесь вводится в коллектор с помощью клапанов K_I, K_{II} . В момент времени, когда открыты клапаны K_I, K_{II}^*, KO_I , клапаны K_{II}, K_I^*, KO_{II} закрыты. Исходная смесь через клапан K_I поступает в адсорбер A_I , заполненный адсорбентом, который селективно поглощает один (несколько) из компонентов исходной газовой смеси. Через обратный клапан KO_I выходит смесь концентрированная менее сорбирующимся компонентом (МСК). Часть смеси насыщенной МСК дросселируется до атмосферного давления в дросселе D и противоточно выводится в адсорбер A_{II} .

Взаимодействие смеси МСК с адсорбентом, насыщенным более сорбирующимся компонентом (БСК) в течение предшествующей стадии адсорбции, приводит к десорбции БСК и регенерации адсорбента. Через клапан K_{II}^* сбрасывают смесь БСК. Переключение клапанов осуществляется через равные промежутки времени $\tau_{пц}$.

Как следует из рис. 1.9, б процесс разделения газовой смеси адсорбционным методом включает четыре стадии: продуцирование газовой смеси насыщенной МСК; противоточная регенерация адсорбента; сброс давления после продуцирования; набор давления после регенерации.

Рассмотрим суть метода КБА (PSA) на примере разделения воздуха на кислород и азот при 20 °С (рис. 1.10) [7].

Установка включает два адсорбера, автоматический клапан K , дроссель D , и два обратных клапана, пропускающих поток газа только в одном направлении.

Отметим, что при 20 °С кислород и азот очень слабо адсорбируются даже на микропористых адсорбентах и до недавнего времени считались в таких ловушках «несорбирующимися». Так, многие цеолиты при 20 °С и атмосферном давлении сорбируют всего несколько $нсм^3/г$ азота и существенно меньшие количества кислорода. Разница в адсорбируемости азота и кислорода в этом случае объясняется тем, что кроме обычного дисперсионного взаимодействия при адсорбции азота проявляется дополнительный вклад взаимодействия квадруполь азота с катионами решетки цеолита. При адсорбции воздуха на микропористых углеродных системах наблюдается обратная картина – при малом времени контакта кислород адсорбируется лучше, чем азот. Это

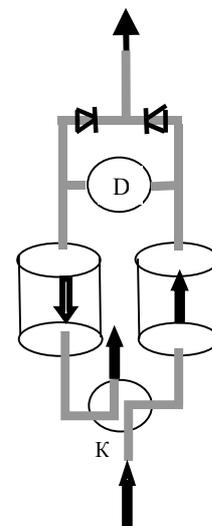


Рис. 1.10. Схема адсорбционной установки, работающей в режиме КБА

объясняется чисто кинетическим эффектом, связанным с тем, что вандерваальсовские размеры молекулы кислорода (0,39...0,28 нм) немного меньше, чем молекулы азота (0,41...0,30 нм).

Пусть для определенности адсорберы заполнены цеолитом CaA (см. рис. 1.5). Воздух при повышенном давлении (3...8 атм) подается в правый адсорбер, работающий в показанном на схеме положении в режиме адсорбции. Происходит преимущественная адсорбция азота, и выходящий из слоя поток обогащается кислородом (до 50...70 % и более). Часть обогащенного кислородом воздуха пропускается через дроссель D , где давление снижается до -1 атм и используется для регенерации левого адсорбера. Регенерация проводится при давлении $P_d < P_a$ противотоком без дополнительного подвода тепла. Выделяющийся десорбат, обогащенный азотом, в такой схеме обычно не используется. Переключение адсорберов с помощью автоматического клапана переводит правый адсорбер в режим десорбции и левый – адсорбции.

Главное преимущество процессов PSA (КБА) перед TSA – в устранении стадий нагрева и охлаждения адсорбера, требующих больших затрат времени и энергии. Стадии повышения и снижения давления в адсорбере осуществляются быстро, что позволяет резко сократить суммарную продолжительность цикла. Количество адсорбента в адсорбере m , которое необходимо для обеспечения производительности W (кг/мин) по поглощаемому компоненту, в первом приближении связано с динамической активностью a_n (кг/кг адсорбента) и продолжительностью стадии адсорбции τ_a соотношением $m = W\tau_a/a_n$, и малые (порядка минут) значения τ_a позволяют обеспечить высокую производительность даже при очень малых величинах динамической активности a_n . Поэтому другая важнейшая отличительная особенность КБА – малая продолжительность цикла, которая лимитируется временем срабатывания клапанов и установления давления в адсорбере. В типовых ситуациях продолжительность полного цикла – несколько минут. Именно поэтому в русскоязычной литературе PSA называют КБА – короткоцикловая безнагревная адсорбция.

Простейший цикл многоциклового работы адсорбера в режиме КБА состоит из четырех стадий: а) селективной адсорбции при парциальном давлении адсорбирующихся компонентов при адсорбции P_a на входе в слой; б) снижения давления десорбции до P_d ; в) безнагревной регенерации адсорбента (десорбции поглощенных компонентов) при давлении десорбции $P_d < P_a$; г) поднятия давления от P_d до P_a для осуществления следующего цикла. Комбинируя число адсорберов и фазы их работы, можно оптимизировать работу КБА системы в целом, настроить процесс на режимы очистки, выделения или полного разделения компонентов газовой смеси. В стационарном режиме работы системы обеспечивается непрерывный поток исходных и продукционных газов.

Величина динамической активности a_d определяется изотермой и кинетикой адсорбции, причем на стадиях адсорбции-десорбции значение имеют факторы размытия адсорбционного фронта, определяемые формой изотермы адсорбции, так как «полезными» (рабочими) являются области с установившейся концентрацией компонентов, а переходная область ухудшает разделение. Эффективность разделения в простейшем процессе скарстромовского типа (очистка менее сорбирующегося компонента с частичной противоточной продувкой продукционным газом при десорбции) равна [4]:

$$\xi = \bar{C}_K / C_0 - (K - 1) \exp(-\xi / [K - \exp(-\xi)]), \quad (1.11)$$

где C_0 и \bar{C}_K — исходная и конечная (продуцируемая при десорбции) концентрации целевого компонента соответственно; K – отношение линейных (не объемных) скоростей потока при десорбции и адсорбции; $\xi = (\pi/8)^{1/2} [(K - 1)/K] \chi L$, $\chi = [DG/\tau_a]^{1/2} (A/V)$ – параметр, характеризующий разделительные свойства слоя; L – длина слоя; D – эффективный коэффициент диффузии в зерне; Γ – константа Генри ИА; A и V – удельная поверхность и объем адсорбента соответственно. При этом предполагается, что D не зависит от концентрации, а распределение адсорбированного компонента в слое в начале каждой стадии идентично распределению в конце предыдущей.

Приведенная на рис. 1.5 одноступенчатая схема приводит к обогащению, а не полному разделению, но двух- или трехступенчатые варианты схемы позволяют получать кислород (или азот) с чистотой 99,99 % и более [4]. В настоящее время в США более 30 % чистого азота и кислорода получают этим методом, а во всем мире функционирует уже несколько тысяч таких установок.

Этот же принцип используется в производстве водорода, для осушки воздуха, выделения CO , CO_a , CH_4 , He , Ar , NO_x , n -алканов

(C_3 – C_5) (процесс Isosiv фирмы Union Carbide) и т.д. Так, фирма Union Carbide разработала установки с несколькими адсорберами для выделения водорода чистотой до 99,9999 % из продуктов риформинга углеводородов мощностью 2,15 млн. м³ H₂/сут. Фирма Air Products реализовала процесс КБА для одновременного выделения H₂ чистотой 99,999 % и CO₂ чистотой 99,4 % и т.д. За этими прогрессивными схемами адсорбционного разделения – большое будущее, хотя им «на пятки» и наступают, например, методы диффузионного разделения на мембранах.

Существует большое многообразие газоразделительных адсорбционных установок, реализующих различные принципы организации безнагревных адсорбционных процессов, отличающихся друг от друга способом проведения каждой из четырех стадий. Стадия продуцирования может протекать при повышенном давлении (0,1...1,1 МПа) в случае напорного варианта организации процесса или при атмосферном давлении (безнапорный). Применение того или иного варианта определяется давлением в системе потребления (0,2...2 МПа). Давление на стадии продуцирования определяет давление на стадии регенерации. Для напорных схем это вакуум или атмосферное давление, для безнапорных – вакуум.

Для обеспечения возможности получения чистой фракции МСК при регенерации используют флегмовое «орошение» адсорбента частью продукционной смеси. В установках, работающих без обратной продувки остаточное содержание примесей в продукционной смеси определяется остаточным давлением в адсорбере в конце стадии регенерации. Комбинирование вышеуказанных способов организации стадий продуцирования и регенерации определяет семь типов безнагревных процессов (табл. 1.1).

1.1. Способы организации процессов КБА

Тип	Давление продуцирования	Давление регенерации	Наличие продувки
I	Избыточное	Атмосферное	Да
II	Избыточное	Вакуум	Нет
III	Избыточное	Вакуум	Да
IV	Избыточное	Атмосферное	Нет
V	Атмосферное	Атмосферное	Да
VI	Атмосферное	Вакуум	Да
VII	Атмосферное	Вакуум	Нет

Как следует из анализа патентной литературы, наиболее популярными являются установки напорного типа с атмосферным давлением регенерации (тип I). Данный тип установок применяется для обеспечения тонкой очистки газов, а также для разделения газовых смесей с высокой частотой целевого компонента. Избыточное давление продуцирования в установках данного типа не требует применения дополнительных устройств для подачи газовой смеси потребителю.

Характерным свойством процессов типа III, VI является небольшой расход продукционной смеси на регенерацию адсорбента. Величина расхода продувочной смеси зависит от отношения давлений на стадиях регенерации и продуцирования. Полное отсутствие продувки адсорбента на этапе десорбции свойственно для процессов типа IV, VII, что позволяет применять их только для не глубокого разделения ГС. Низкая степень разделения характерна для процессов типа II (грубое разделение), а для грубой очистки используют тип V.

В процессе разделения газовой смеси в условиях безнагревной адсорбции важнейшую роль играет характер протекания переходных процессов подъема и сброса давления. Данные стадии могут осуществляться различными способами. Различают прямоточный, противоточный, прямо противоточный способ подъема давления в адсорбере. Прямоточный набор давления осуществляется путем подачи в адсорбер исходной смеси. Противоточный подъем давления реализуется подачей в адсорбер продукционной смеси. В случае прямо противоточного подъема вначале давление повышают до некоторого значения продукционной смесью, а затем подачей исходной смеси давление доводят до верхнего значения.

Противоточный сброс давления осуществляется сбросом газа, заполняющего адсорбер в атмосферу. В процессах вакуумного типа сброс давления совмещается с регенерацией. В этих процессах (III, IV, VI, VII) смесь, находящаяся в адсорбере, вначале сбрасывают в атмосферу, а затем откачивается вакуум-насосом, при этом происходит совмещение стадий сброса и регенерации. Приведем возможные комбинации способов подъема–сброса давления применительно к различным типам процессов (табл. 1.2).

На практике тип процесса определяется его назначением. Выбор способа подъема давления определяется из соображения оптимизации, что и определяет способ сброса давления.

1.2. Способы подъема-сброса давления в адсорберах

Подъем давления	Сброс давления	Типы
Прямоточный	Противоточный	I, II
Противоточный	Противоточный	I
Прямо противоточный	Прямо противоточный	I
Прямоточный	Противоточный с регенерацией	III, IV, VI, VII
Противоточный	Противоточный с регенерацией	III, IV, VI, VII
Прямо противоточный	Прямо противоточный с регенерацией	III, IV

Установки КБА могут иметь произвольное количество адсорберов. При выборе числа адсорберов руководствуются тем, что большему количеству адсорберов соответствует большая степень извлечения, при этом увеличиваются экономические затраты, усложняется система управления, понижается надежность. Согласно [3], для достижения степени извлечения кислорода из воздуха, равной 10...50 % необходимо использовать установку с двумя или тремя адсорберами; при степени извлечения водорода 70 % используют четыре адсорбера; гелия (степень извлечения 90 %) от семи до десяти.

Физическая реализация принципов организации адсорбционного разделения газовых смесей находит отражение в значительном многообразии схемотехнических решений выпускаемых установок КБА. Разработкой газоразделительных адсорбционных установок занято большое число производителей. Специалистами этих фирм постоянно ведется работа по совершенствованию технологии адсорбционного разделения, что сопровождается появлением новых патентных решений по организации и применению технологии.

Основные области применения КБА технологии приведены в табл. 1.3.

1.3. Области применения технологии КБА

Области применения КБА		Продукт потребления		
		Кислород	Азот	Другие
1.	Системы жизнеобеспечения	*		
2.	Авиация и космонавтика	*	*	*
3.	Очистка сточных вод	*		
4.	Химия и нефтехимия	*	*	*
5.	Фармацевтика	*		
6.	Производство бумаги, цемента, пива	*		
7.	Сварка и резка металлов	*		
8.	Медицина	*		
9.	Сталеплавильная промышленность	*		
10.	Сжигание твердых отходов	*		*
11.	Рыборазведение	*		*
12.	Электроника			*
13.	Энергетика			*
14.	Создание защитных сред			*
15.	Осушка			*

*Используемый компонент в этой отрасли.

Широкая область применения установок КБА определяет значительный разброс их характеристик и предъявляемых к ним требованиям.

На рис. 1.11 представлены условные зависимости характеристик установок и требований к ним, предъявляемым по областям применения. В зависимости от области применения различным является и определяющий фактор. Для промышленных установок основным показателем является себестоимость продуктов разделения, который формирует остальные характеристики. Для систем, применяемых в авиации и космонавтике, отвечающим требованиям повышенной надежности, характерна наиболее высокая себестоимость продуктов разделения.

Имеет место ряд тенденций: снижение габаритных размеров при сохранении производительности, как правило, вызывает рост себестоимости; увеличение производительности при сохранении габаритных размеров вызывает уменьшение концентрации целевого продукта и снижение себестоимости.

Рассмотрим ряд газоразделительных установок. На рис. 1.12 представлена принципиальная технологическая схема установки для одновременного получения азота и кислорода из воздушной смеси.

Данная установка разработана и запатентована фирмой «Air Products and Chemicals». Основными конструктивными элементами являются две пары адсорберов, каждая из которых включает вспомогательный адсорбер для осушки и очистки воздуха от CO₂ (1, 2) и основной воздухоразделительный адсорбер (3, 4). Оба адсорбера заполнены цеолитом (NaM, NaX).

На этапе адсорбции воздух, подаваемый воздуходувкой 5 при давлении 0,1...0,12 МПа, последовательно проходит через оба адсорбера, обогащается кислородом и поступает в газгольдер 6. Данная операция продолжается до тех пор, пока концентрация азота в продукционном газе не достигнет максимального уровня. После этого отработавшие адсорберы прямоком продувают азотом, подаваемым при том же давлении, что и исходный воздух из газгольдера 7 воздуходувкой 5.

Образующийся при этом продувочный газ близкий по своему составу к исходному воздуху через газгольдер 8 отводится в линию всасывания воздуходувки 5. По окончании стадии продувки рассматриваемые адсорберы вакуумируются с помощью насоса 9, а получаемый при этом продукционный азот собирается в газгольдере 7. Вакуумирование осуществляется в два этапа: на первом этапе одновременно вакуумируются до достижения заданного значения остаточного давления оба адсорбера, а на втором – только вспомогательный адсорбер с целью более полного выделения из него адсорбированной влаги. В то время как вспомогательный адсорбер подвергается дополнительному вакуумированию, в основном воздухоразделительном адсорбере производится набор давления за счет подачи в него части продукционного кислорода из газгольдера 6. Далее данная операция распространяется и на вспомогательный адсорбер. По завершению набора давления в адсорберах они готовы к проведению нового адсорбционного цикла, общая продолжительность которого составляет 280 с. В данном процессе производится кислород с концентрацией 80...95 % и азот с концентрацией 96...99 %.

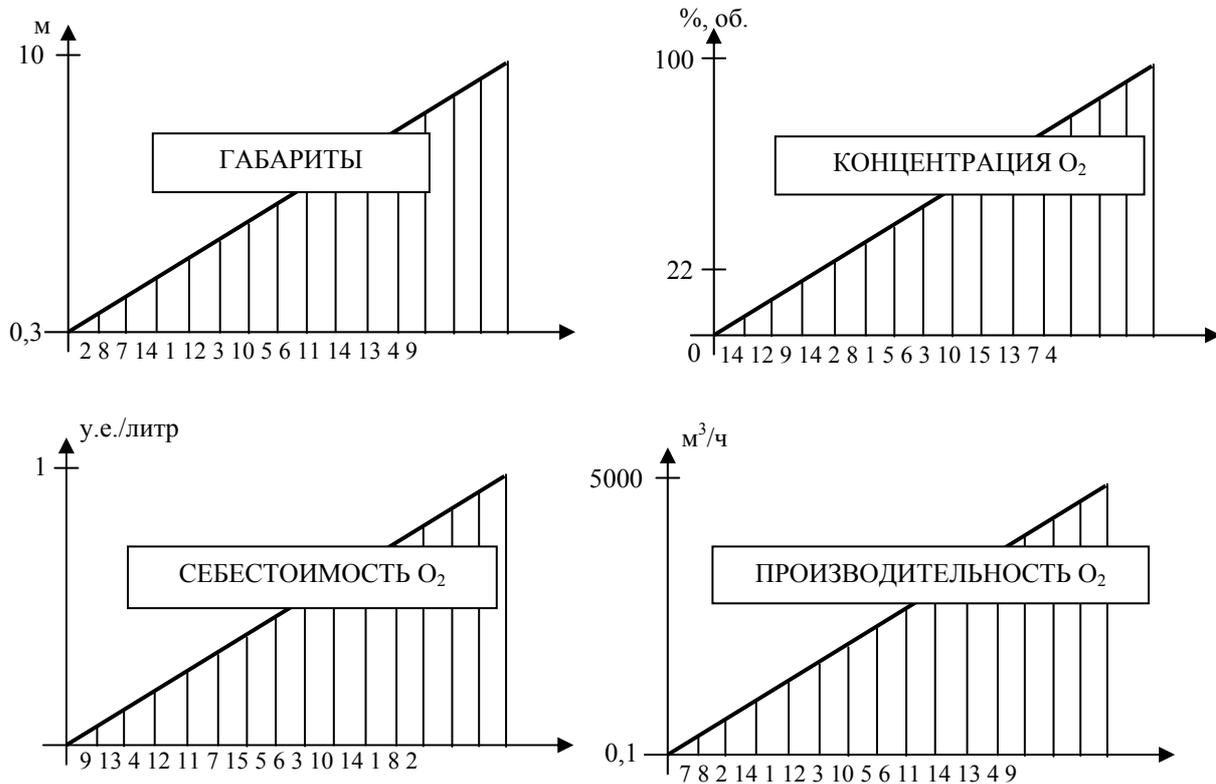
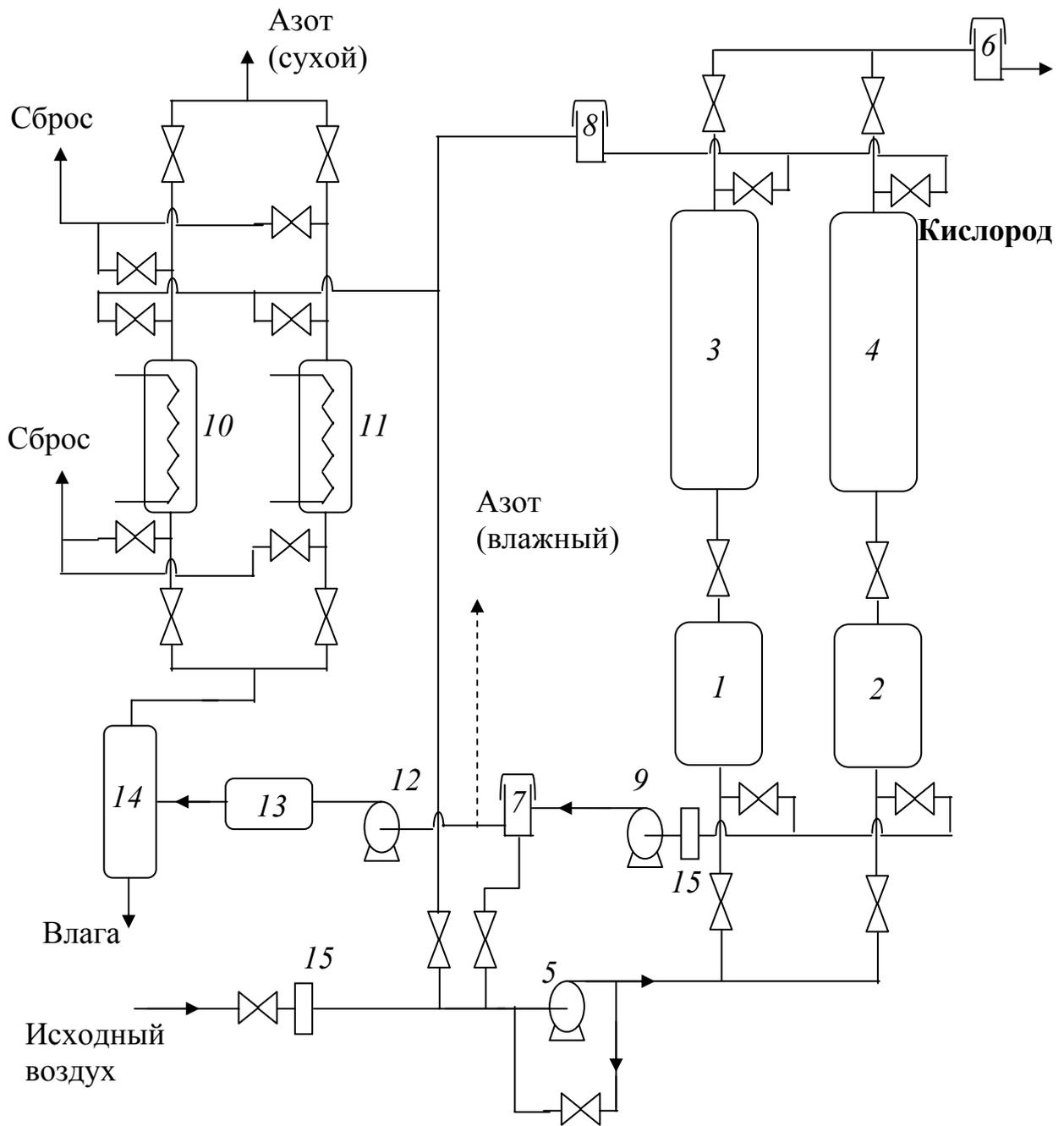


Рис. 1.11. Условно сравнительные характеристики установок КБА по областям применения



**Рис. 1.12. Принципиальная технологическая схема
воздухоразделительной установки КБА:**
 1, 2 – адсорберы для осушки и очистки воздуха от CO_2 ;
 3, 4 – воздухоразделительные адсорберы; 5 – воздуходувка;
 6, 7, 8 – газгольдеры; 9 – вакуум – насос; 10, 11 – адсорберы для осушки
 производственного азота; 12 – компрессор; 13 – теплообменник;
 14 – сепаратор; 15 – фильтр

Кислород практически не содержит примесей воды и CO_2 , концентрация которых в азоте может достигать 3,5 % и 0,05 % соответственно. Азот подвергается дополнительной осушке в специально предназначенном для этого осушительном блоке, в состав которого входят два термически регенерируемых адсорбера 10, 11. Азот подается на осушку из газгольдера 7 при давлении 0,5...1 МПа с помощью компрессора 12.

При максимальных значениях концентрации производционных компонентов (кислород 95 %, азот 99,9 %) степень их извлечения из воздуха в рассматриваемом процессе составляет не менее 50 %. Для наиболее низких концентраций степень извлечения этих компонентов выше. Аналогичный характер носит также зависимость между концентрациями кислорода и азота и производительностью установки. При уменьшении концентрации кислорода с 90 до 80 % его расход возрастает на 25 %. При отсутствии потребления азота установка может работать в режиме продуцирования кислорода. В этом случае технологический процесс упрощается.

Данная установка относится к безнапорно-вакуумному типу. Также имеются установки для одновременного получения азота и кислорода, работающие по напорно-вакуумной схеме [7].

Описанная выше установка является сравнительно сложной. С точки зрения простоты организации особый интерес представляет схема одноадсорберного концентратора кислорода фирмы «Marathon Medical Equipment Corp.» [7]. Принципиальная технологическая схема установки представлена на рис. 1.13.

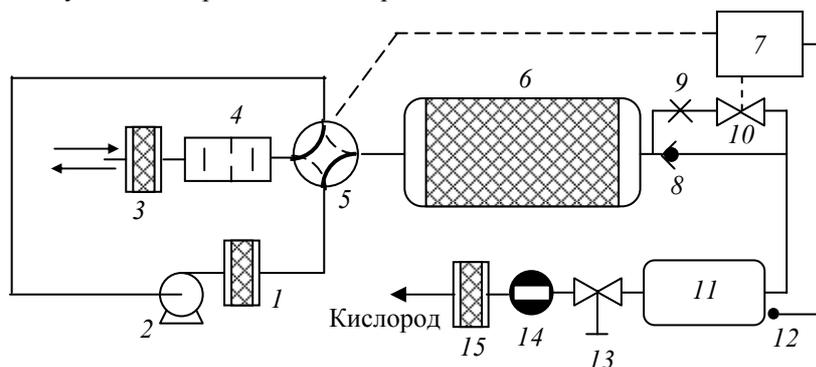


Рис. 1.13. Технологическая схема одноадсорберного концентратора кислорода:

- 1 – угольный фильтр; 2 – газовый насос; 3 – механический фильтр;
 4 – глушитель шума; 5 – газораспределительное устройство; 6 – адсорбер;
 7 – блок управления; 8 – обратный клапан; 9 – дроссель; 10 – клапан;
 11 – ресивер; 12 – датчик давления; 13 – регулятор давления;
 14 – расходомер; 15 – бактерицидный фильтр

Согласно описанию [18] принцип действия установки следующий: атмосферный воздух через механический фильтр 3, глушитель шума 4 и газораспределительное устройство 5, находящееся в положении I (сплошная линия), поступает на всасывающий патрубок газового насоса 2. С выходного патрубка через угольный фильтр 1, для удаления из потока примеси масла, воздух вновь проходит через газораспределительное устройство 5 и под давлением подается в заполненный цеолитом адсорбер 6. Из адсорбера кислородообогащенный поток через обратный клапан 8 поступает далее в ресивер 11, из которого через регулятор давления 13, расходомер 14 и фильтр 15 кислород отводится потребителю. Цикличность адсорбционного процесса осуществляется путем эффективного регулирования давления в ресивере 11. На стадии продуцирования, когда кислородообогащенный воздух по описанному выше контуру поступает в ресивер 11, давление в нем медленно растет. При увеличении давления в ресивере до заданного значения ($P = 0,2$ МПа) газораспределительное устройство 5 посредством блока управления 7, связанного с датчиком давления 12, переходит в положение II (пунктирная линия). При этом в процессе работы насоса 2 производится откачка адсорбера 6 с выводом газов регенерации в атмосферу последовательно через глушитель шума 4 и фильтр 3. Одновременно содержащийся в ресивере 11 кислородообогащенный воздух отводится потребителю, и давление в нем понижается. При уменьшении давления до 0,14 МПа посредством устройства 7 открывается клапан 10 и кислородообогащенный газ из ресивера 11 в количестве, определяемом диафрагмой 9, поступает в адсорбер 6 для продувки, которая является заключительной стадией регенерационного процесса. По завершению указанной стадии клапан 10 закрывается, газораспределительное устройство 5 переходит в положение I, и адсорбер 6 начинает работать в режиме продуцирования кислородобогащенного воздуха.

Особый интерес представляют установки, в которых организуется комбинированный газоразделительный процесс. Технологическая схема подобного процесса представлена на рис. 1.14 [7].

Основными блоками установки являются адсорбционный и мембранный. В первом из указанных блоков производится предварительное концентрирование, а во втором блоке, содержащем диффузионные мембраны из силиконовой резины или полисульфона, осуществляется тонкая доочистка. В состав установки входит дополнительная мембранная ячейка, в которую направляют поток газа, образующийся на стадиях сброса давления и продувки адсорберов. Сконцентрированная в ней ГС после предварительного сжатия подмешивается к исходному сырьевому воздуху, либо используется для набора давления в адсорберах после стадии выравнивания давления. За счет применения диффузионных мембран удельные энергозатраты снижаются на 5...10 %.

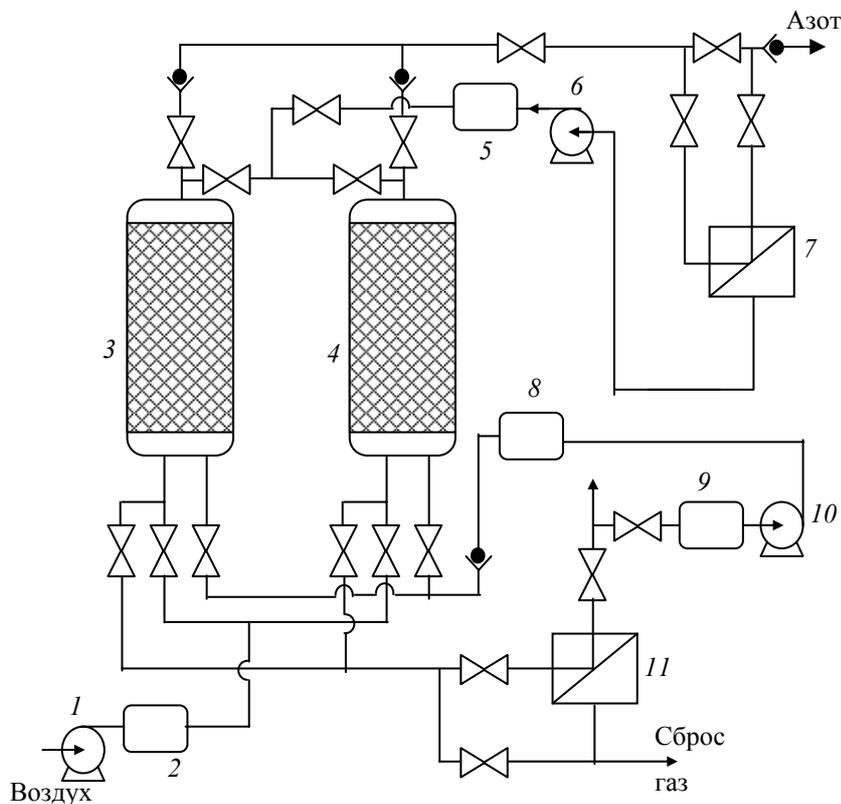


Рис. 1.14. Технологическая схема комбинированной газоразделительной установки:
 1, 6, 10 – компрессоры; 2, 5, 8, 9 – ресиверы; 3, 4 – адсорберы;
 7, 11 – мембраны

В работе [18] приведены сведения о разработке установок сверхкороткоциклового адсорбции. Эти установки заполняют плотным слоем мелкозернистого цеолита, проходя через который поток газа почти полностью теряет избыточное давление. На входе установки имеются быстродействующие клапаны, попеременно соединяющие каждый из адсорберов с источником сжатого газа и с атмосферой. Нижний предел частоты переключения составляет 0,1 с. Разделение газовой смеси в данном случае осуществляется по напорному беспродувочному варианту. Процесс отличается высокой эффективностью и обеспечивает получение газа с предельным для КБА содержанием компонентов.

Несмотря на все многообразие существующих схемотехнических решений организации процессов адсорбционного разделения газовых смесей, основным этапом в процессе разработки установок КБА является физическое моделирование. Изменение давления, температуры и других параметров оказывает непосредственное влияние на качественные показатели процесса. Полноценный учет перечисленных факторов в условиях физического моделирования приводит к значительным затратам финансов, времени и трудовых ресурсов. На практике приходится искать компромисс между себестоимостью производимой установки и ее уровнем ее эффективности.

Актуальной задачей является включение в процесс разработки этапа математического моделирования на основе теории адсорбционных и гидромеханических процессов. Наличие адекватной математической модели в широком спектре управляющих и возмущающих воздействий позволит: искать новые пути повышения эффективности установок КБА, сократить время научно-исследовательских и пусконаладочных работ, а также подойти к формированию методики расчета процессов разделения газовых смесей в условиях короткоциклового безнагревной адсорбции.

Необходимость и важность управления процессами, протекающими в установках КБА, очевидна. Обеспечение заданных качественных показателей работы установки КБА в широком диапазоне возмущающих воздействий, как зачастую требует практика, невозможно без разработки высокоэффективных систем управления. Кроме того, выбор закона управления и технических средств автоматизации определяет устойчивость показателей эффективности работы установки в течении длительного периода функционирования газоразделительной установки.

2. Математическое моделирование процесса разделения газовой смеси

2.1. АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ В ОБЛАСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ АДСОРБЦИОННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ

Математическое моделирование процессов адсорбционного давления может быть осуществлено на четырех уровнях [7].

На первом уровне моделирования установка адсорбционного разделения рассматривается как «черный ящик», имеющий один вход и два выхода. При таком рассмотрении выписываются уравнения энергетического и материального баланса для установки в целом, которые позволяют определить небольшое количество неизвестных при прочих известных характеристиках.

На втором уровне моделирования стадии процесса адсорбционного разделения условно разбиваются на стадии с постоянным и переменным давлением. Такой подход позволяет для каждой из стадий записать уравнения материального баланса и путем их упрощения свести их к некоторым балансовым соотношениям. Это дает возможность сопоставления ряда схем и их отбора, например, по удельной производительности или степени извлечения целевого компонента.

На третьем уровне принимается более строгая модель динамики адсорбционного разделения при сохранении схематизации процесса второго уровня. Главный недостаток подхода – некорректность граничных условий при решении уравнений динамики сорбции в случае, когда поток в рассчитываемый адсорбер поступает из параллельно работающего адсорбера. Невозможность установления в данных моделях, близких к реальным, граничных условий делает несостоятельным усложнение систем дифференциальных уравнений динамики сорбции.

Четвертый уровень моделирования процессов адсорбционного разделения заключается в создании математической модели, позволяющей производить одновременный расчет адсорбционных, гидромеханических и тепловых процессов, протекающих в установке, что позволяет отказаться от разбиения цикла на стадии и производить расчет установок при произвольной структуре потоков между адсорберами с учетом ее динамики.

Существует необходимость введения *пятого уровня* иерархии математических моделей процесса адсорбционного разделения. На этом уровне предполагается создание математической модели с применением принципов феноменологического моделирования. В данных моделях установка адсорбционного разделения рассматривается как объект, взаимодействующий с окружающей средой и обладающий сложным внутренним строением, большим числом составных частей и элементов, между которыми существует материальная, энергетическая и информационная связь. Такое рассмотрение технологического процесса является основой системного подхода при изучении технологических процессов, широко развитого в работах В.В. Кафарова [27]. С позиции системного анализа решаются не только задачи математического моделирования, но и задачи оптимизации, управления и оптимального проектирования.

К элементам такой системы могут быть отнесены: побудитель расхода, управляющая система, потребитель продукционной смеси и т.п. Основная система уравнений математического описания (уровень 4) решается совместно с системой уравнений, описывающей процессы, протекающие во внешних элементах.

Реализация математических моделей 3 – 5 уровней требует использования мощных вычислительных средств при соответствующем алгоритмическом обеспечении. Нередко применяются полуэмпирические аппроксимационные зависимости для проведения инженерных расчетов. Согласно одной из таких методик для инженерных расчетов может быть предложен следующий порядок расчета установки.

Определяется удельная цикловая производительность [27]:

$$q^{\bullet} = \frac{1-c_0}{c_0-c}(\Delta a_1) + \frac{c_0}{c_0-c}(\Delta a_2),$$

где q^{\bullet} – цикловая производительность установки, $\text{нл}_{\text{продукта}}/\text{л}_{\text{сорбента}}$; c_0 , c – содержание БСК во входном потоке и в продуктом; Δa_1 , Δa_2 – разность значений адсорбции БСК и МСК при максимальном и минимальном давлениях, $\text{нл}/\text{л}_{\text{сорбента}}$.

С учетом кинетических факторов выражение для реальной цикловой производительности записывается в виде:

$$q_{\Sigma} = q^{\bullet} - \frac{\Delta V_{\Phi}}{2V},$$

где q_{Σ} – реальная цикловая производительность, $\text{л}/\text{л}_{\text{сорбента}}$; ΔV_{Φ} – ширина размытия адсорбционного фронта, л; V – объем слоя адсорбента, л.

Ширина размытия фронта может быть оценена по уравнению типа Ван-Деемтера:

$$\Delta V_{\Phi} = \left(\frac{AS^2}{G_{\text{прод}}} + BS + CG_{\text{прод}} \right) P,$$

где A, B, C – экспериментальные константы; $G_{\text{прод}}$ – расход продукта при нормальных условиях; S – сечение адсорбционного аппарата; P – давление.

Определяется объем слоя адсорбента из соотношения:

$$V = \frac{2Q_{\text{прод}}\tau_{\text{пц}} + \Delta V_{\Phi}}{2q^{\bullet}},$$

где $\tau_{\text{пц}}$ – время полуцикла. Выражение (4.1) применимо для расчета двухадсорберной установки.

Далее определяется необходимая масса адсорбента и расход продуктового газа через компрессор:

$$M_{\text{сорбента}} = n \left(\frac{\pi}{4} D^2 L \right) \rho_{\text{нас}};$$

$$Q_0 = \chi \frac{M_{\text{сорбента}}}{2\tau_{\text{пц}} \rho_{\text{нас}}} \left[q_{\Sigma} + (\Delta a_1 + \Delta a_2) + \varepsilon \frac{P}{P_0} \right],$$

где χ – коэффициент, обычно $\chi = 1, 2, 3$; P, P_0 – максимальное и нормальное давление газа, ата; $M_{\text{сорбента}}$ – масса сорбента в установке; $\rho_{\text{нас}}$ – насыпная плотность адсорбента, кг/л, обычно $\rho_{\text{нас}} = 0,7$.

Недостатками данной методики расчета являются: невозможность расчета параметров установки для разделения многокомпонентных смесей ($N_{\text{кс}} > 2$); неясность методики расчета многоадсорберных установок $N_A > 2$; расчет установок с постоянным проходным сечением адсорберов; невозможность учета динамического изменения возмущающих и управляющих воздействий.

В ряде работ, посвященных математическому моделированию процессов адсорбционного разделения в целом (Уровень 3,4) [28, 29] принимались равновесные изотермические модели сорбции. Равновесные состояния в системе газ – адсорбент описывались линейным уравнением вида:

$$a^P = \Gamma p. \quad (2.1)$$

Допущение (2.1) позволило получить и проанализировать аналитические решения задачи динамики сорбции. В результате чего были установлены закономерности распределения концентраций в ходе процесса и получены выражения для интегральных характеристик некоторых схем разделения бинарных смесей.

Рассмотрение изотермических равновесных моделей на основе нелинейных изотерм сорбции [30, 31] позволило изучить характер влияния нелинейности изотерм на развитие процесса, также установить наличие оптимальных величин давления адсорбции и объема продувочного газа.

Основной характеристикой приведенных выше работ является ориентированность на моделирование процессов разделения бинарных смесей в установках, состоящих, как правило, из двух цилиндрических адсорберов.

При разработке математической модели адсорбционного разделения одним из важнейших этапов является выбор приближенного уравнения изотермы, которое в динамических условиях определяет равновесную емкость адсорбента по отношению к данной примеси.

$$a^P = Ap^m, \quad a^P = \frac{Abp}{bp+1}. \quad (2.2)$$

Наиболее простым решением задачи описания изотерм сорбции для многокомпонентных смесей является использование изотерм адсорбции чистых компонентов при соответствующих парциальных давлениях. В качестве таких уравнений применяется уравнение (2.1) или, например, соотношения (2.2). Имеется также ряд более сложных приближенных уравнений изотерм [8].

Данный подход правомерен в том случае, когда молекулы компонентов сорбируются на отдельных «активных центрах». В большинстве случаев многокомпонентная сорбция носит сложный характер [4, 5]. Сорбция одного компонента снижает или повышает сорбцию других компонентов. В работе [5] описаны случаи, когда изотермы сорбции носят катастрофический характер, т.е. скачкообразно изменяется величина сорбции при незначительном изменении парциального давления компонента в смеси.

Для описания многокомпонентной сорбции применяется ряд графических и аналитических методик получения изотерм совместной сорбции на основе изотерм чистых компонентов (М.М. Дубинин, О.М. Тодес и др.).

В последнее время наиболее часто для получения изотерм совместной сорбции пользуются теорией адсорбционного раствора [33] или методикой [7]. Использование последних методик даже для бинарной смеси в интервале давлений и представляет значительные трудности [34].

В работе [7] для бинарных смесей предлагается использовать систему модифицированных уравнений типа Маркгема–Бентона:

$$a_1 = a_{1\infty} \frac{b_1 p_1}{1 + b_1 p_1 + b_2 (P - p_1)};$$

$$a_2 = a_{2\infty} \frac{b_2 (P - p_1)}{1 + b_1 p_1 + b_2 (P - p_1)} + (a_{2\infty} - a_{1\infty}) \frac{b_2 (P - p_1)}{1 + b_2 (P - p_1)}.$$

Таким образом, в настоящее время не существует адекватной методики учета равновесных свойств многокомпонентных смесей при математическом моделировании процессов адсорбционного разделения.

Математическое моделирование на основе равновесных моделей является лишь некоторым приближением к реальным процессам, протекающим в установке КБА. Равновесные модели тем точнее, чем ниже давление адсорбции и концентрации извлекаемых компонентов.

Для учета ударных волн, возникающих в установках с короткими циклами, в работе [38] рекомендуется в математическое описание вводить уравнения Дарси и неразрывности потока.

Многие исследователи вводят в математическое описание дифференциальные уравнения, описывающие кинетику адсорбции-десорбции, тем самым, уходя от важного допущения о равновесии в системе газ – адсорбент.

В качестве уравнения кинетики наиболее часто принимается уравнение вида [45, 46]:

$$\frac{da}{d\tau} = \beta (a^p - a). \quad (2.3)$$

Уравнение (2.3) является одним из типов приближенных уравнений кинетики (прил. 6). В работе [8] приведен анализ уравнений кинетики различной структуры. Показано что, уравнение типа (2.3) с достаточной точностью аппроксимирует уравнение нестационарной диффузии при незначительно выпуклых изотермах.

Значение кинетического коэффициента β может быть получено на основе экспериментальных данных (методом интегрирования выходной кривой для сорбционного слоя) или рассчитано на основе полуэмпирических соотношений [45].

Использование кинетических уравнений с постоянным значением коэффициента β не позволяет в достаточной мере учитывать ряд важнейших факторов: запаривание в гранулах одного компонента другим; наличие гистерезиса при процессах сорбция – десорбция; процессы в многослойных адсорберах; взаимовлияние кинетических процессов для различных компонент.

Большинство исследователей используют для математического описания чисто диффузионный механизм, который описывается нестационарным уравнением диффузии. В работе [7] показано, что при больших концентрациях такая модель может привести к противоречию. Ряд исследователей предлагают для описания использовать уравнения внутридиффузионной кинетики вида:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + \frac{1}{r^{h-1}} \frac{\partial}{\partial r} (j r^{h-1}) = 0. \quad (2.4)$$

В уравнении (2.4) величина j задается соотношением вида; $c(r)$ – парциальное давление компонента в грануле адсорбента; D – коэффициент взаимодиффузии; $k = 1, 2, 3$ для пластины, цилиндра, сферы соответственно.

$$j = -D \frac{\partial c}{\partial r} - \frac{(1-\mu)cD}{P-(1-\mu)c} \frac{\partial c}{\partial r} - \frac{\mu r c}{k[P-(1-\mu)c]} \frac{dP}{d\tau}. \quad (2.5)$$

Первое слагаемое в уравнении (2.5) носит диффузионный характер. Второе является конвективной составляющей, обусловленной различием в сорбируемости компонентов (аналог потока Стефана). Третье также носит конвективный характер и является результатом переменности давления.

В настоящее время имеется значительное количество работ, особенно в иностранной литературе, посвященных математическому моделированию процессов адсорбционного разделения, в которых:

1. Основное внимание уделяют математическому описанию сорбционных процессов в отдельно взятом слое, оставляя без внимания математическое описание взаимодействия адсорберов между собой, что особое значение приобретает при моделировании многоадсорберных установок КБА.

2. В большинстве своем рассматриваются бинарные газовые смеси.

3. Моделируются установки с двумя цилиндрическими адсорберами с однотипной загрузкой адсорбента.

4. Параметры внешней среды считаются неизменными, что не позволяет использовать математические модели в ряде случаев, например для расчета установок, работающих на летательных аппаратах, когда на установку действуют возмущающие воздействия по влажности, входному и выходным давлениям и т.п.

Таким образом, в настоящее время весьма актуальным является разработка математических моделей, позволяющих адекватно учитывать: многоадсорберный вариант построения установки; более двух компонент в разделяемой смеси; сложную геометрию адсорберов; нестационарные нагрузки на установку по давлениям на входах – выходах, составу разделяемой смеси и т.д.

2.2. РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ СОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

Для проведения имитационных исследований процесса разделения газовой смеси по методу короткоциклового безнагревной адсорбции (КБА), решения задач управления процессом в заданном спектре входных и возмущающих воздействий необходимо разработать адекватную математическую модель процесса.

На рис. 2.1 представлена технологическая схема процесса разделения с использованием N_A адсорберной установки КБА.

На рис. 2.1 использованы следующие обозначения: $A_I, A_{II}, \dots, A_{N_A}$ – адсорберы; $K_I, K_{II}, \dots, K_{N_A}, K_I^*, K_{II}^*, \dots, K_{N_A}^*$ – управляемые клапаны; $KO_I, KO_{II}, \dots, KO_{N_A}$ – клапаны обратные; $D_I, D_{II}, \dots, D_{N_A}$ – дроссели (дюзы).

Согласованная работа адсорберов обеспечивается переключением клапанов $K_I, K_{II}, \dots, K_{N_A}$ в соответствии с циклограммой, представленной на рис. 2.2. При открытии или закрытии клапана $K_i, i = \overline{I, N_A}$ осуществляется закрытие или открытие соответствующего клапана $K_i^*, i = \overline{I, N_A}$. Если клапан $K_i, i = \overline{I, N_A}$ находится в открытом состоянии, то происходит продувка i -го адсорбера исходной газовой смесью, иначе идет обратная продувка промывочной смесью.

Одной из основных характеристик режима функционирования установки КБА является время полуцикла $\tau_{пц}$, задающее длительность прямой и обратной продувки. Минимальная величина времени $\tau_{пк}$ между переключениями клапанов определяется соотношением:

$$\tau_{пк} \approx \frac{\tau_{пц}}{2 N_A}, \quad (2.1)$$

где $\tau_{пц}$ – полное время одного цикла адсорбции-десорбции.

Текущее время процесса определяется выражением:

$$\tau = \tau_{пц} N_{пц} + \tau_{пц}, \quad (2.2)$$

где $N_{пц}$ – номер текущего цикла; $\tau_{пц}$ – время от начала текущего цикла.

Для разработки математической модели (ММ) процесса КБА необходимо построить взаимосопряженные математические модели сорбционных, тепловых, гидромеханических процессов, протекающих в установке, а также дополнить математическим описанием внешних возмущений (рис. 2.3).

После формирования структуры математического описания (структурная идентификация) необходимо разработать алгоритм расчета математической модели. В рамках последней задачи необходимо провести качественный анализ решений подобных математических моделей, обоснованно выбрать численные методы, разработать методику контроля точности получаемых численных решений.

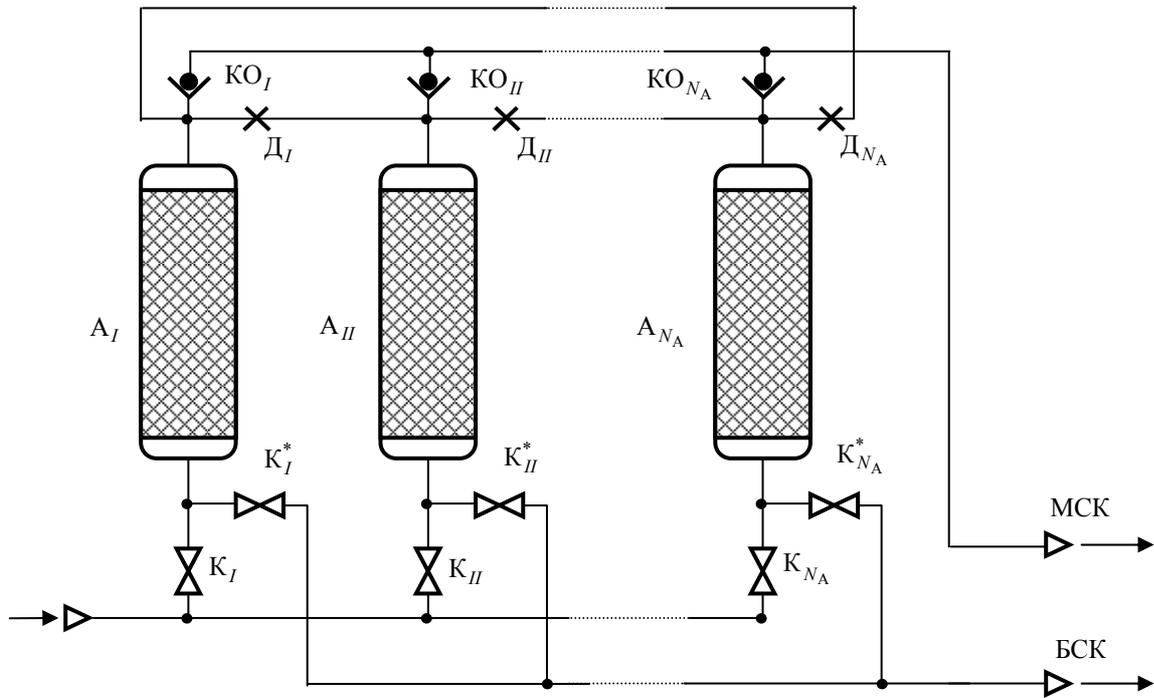


Рис. 2.1. Технологическая схема процесса разделения газовой смеси по методу КБА

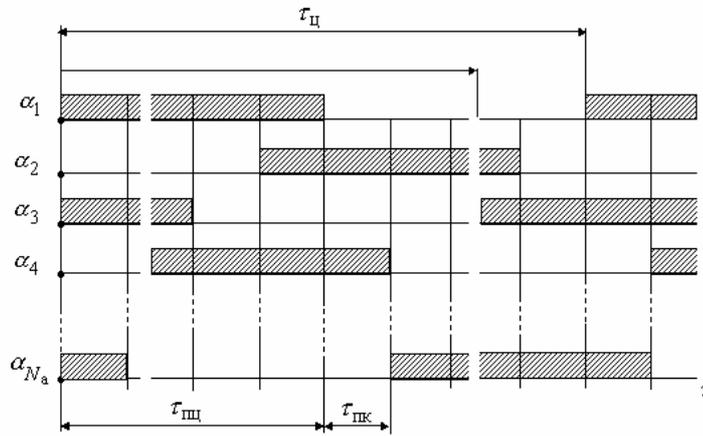


Рис. 2.2. Цикрограммы работы клапанов:

▨ – подача газовой смеси; □ – сброс смеси

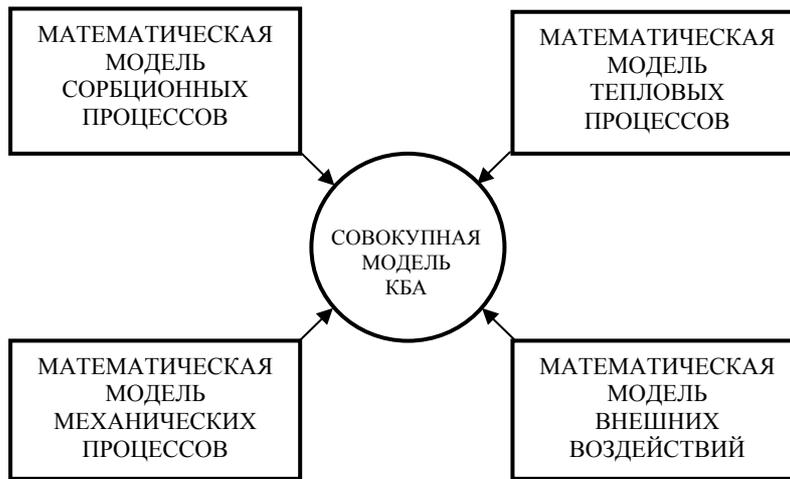


Рис. 2.3. Структура совокупной математической модели процесса КБА

Для надления математического описания количественными характеристиками конкретного процесса необходимо провести параметрическую идентификацию неизвестных параметров математической модели. Проверка адекватности расчетных значений экспериментальным будет являться завершающим этапом процесса разработки ММ.

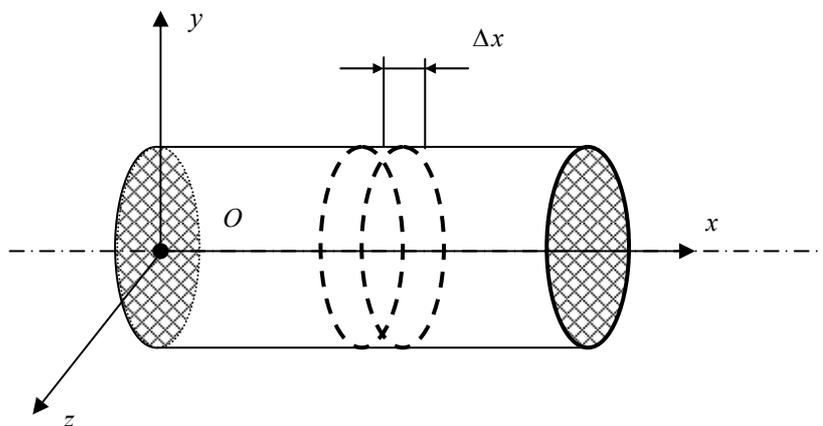


Рис. 2.4. Прямоугольная система координат $Oxyz$ в адсорбере

Сорбционные процессы, протекающие в адсорберах установки КБА, являются основой процесса адсорбционного разделения. Поэтому адекватное математическое описание сорбционных процессов в адсорберах является приоритетной задачей математического моделирования процесса КБА в целом.

Адсорбер может представлять собой довольно сложный объект, имеющий по длине различное проходное сечение, смену направления потока. Кроме того, в адсорбере могут располагаться слои различных типов поглотителей, имеющих разный гранулометрический состав. На основе любого адсорбера сложной формы можно выделить последовательное соединение

адсорберов более простого типа. Поэтому первичное моделирование процессов, протекающих в адсорбере, проведем на основе слоя по длине одинаковое направление потока и форму, близкую к цилиндрической.

Выберем прямоугольную систему координат и поместим ее начало в точке, соответствующей лобовому слою адсорбента так, чтобы ось Ox совпала с осью цилиндрического корпуса адсорбера, как показано на рис. 2.4.

2.2.1. Материальный баланс. Феноменологическая модель адсорбции

Для случая неравновесной термодинамики, когда система из $N_{\text{кс}}$ компонент находится в большом объеме V , баланс массы представляет собой соотношение между входящими и выходящими через всю поверхность потоками вещества. Эти потоки обусловлены наличием регулярного потока со скоростью w , молекулярным диффузионным переносом вещества и в общем случае зависит от изменения количества вещества вследствие адсорбции (химических реакций, каталитических процессов).

Для разработки математической модели процессов, протекающих в адсорбере, воспользуемся феноменологической моделью физической адсорбции [1]. Согласно этой модели материальный баланс для многокомпонентной газовой смеси имеет вид:

$$\frac{\partial c_k}{\partial \tau} + \frac{\rho_b}{\varepsilon_b} \frac{\partial a_k}{\partial \tau} = -\text{div}[\mathbf{u}c_k - \overline{(\mathbf{v}_k c_k)}] + D \nabla^2 c_k, \quad k = \overline{1, N_{\text{кс}}}. \quad (2.3)$$

Величины c_k и a_k являются локальными термодинамическими параметрами, зависящими от координат и времени. Величина ε_b определяется отношением суммарного объема гранул к общему объему элементарного слоя адсорбента V . В модели действительная скорость потока w представляется в виде суммы средней скорости u и скорости случайных пульсаций v .

Описание динамики адсорбции проводится обычно с учетом лишь одного или двух кинетических параметров: эффективной продольной диффузии, массопереноса из газового потока к гранулам адсорбента, диффузии внутри гранул адсорбента. Расчет математической модели с учетом всех указанных кинетических процессов является сложной задачей. Пренебрежение тем или иным кинетическим процессом в каждом конкретном случае требует строгого обоснования. Поэтому необходимо обоснованно сформулировать базовую систему допущений, и указать условия протекания процесса, при которых принятые допущения наиболее правомерны.

2.2.2. Основные допущения математической модели адсорбции

При разработке математических моделей сорбционных процессов примем следующие допущения:

1. Изотермы сорбции не имеют гистерезиса. Согласно [2], на кристаллических цеолитах адсорбция и десорбция полностью обратимы, так что десорбционная ветвь изотермы совпадает с адсорбционной. В случае применения аморфных микропористых адсорбентов отклонение равновесных данных адсорбции и десорбции выражено более значительно.
2. В процессе функционирования установки КБА физикомеханические свойства гранул и геометрические размеры не меняются. Согласно [3], ресурс работы установки при однократной загрузке адсорбента 10^5 часов.
3. Скорость процессов массопереноса вдоль продольной оси Ox слоя значительно превышает скорость процессов массопереноса вдоль поперечных осей. Это обусловлено тем, что вдоль оси Ox происходит конвективный перенос.
4. Наличие одного компонента в газовой смеси приводит к снижению величины сорбции других компонентов. В работах [4], [5] показано, что обратное имеет место при полимолекулярной диффузии, когда сорбция на молекулах сорбированного вещества энергетически выгоднее сорбции на поверхности адсорбента.
5. Компоненты газовой смеси с процентным содержанием менее 0,1 % не рассматриваются. Поглощение компонента с низким парциальным давлением и высокой сорбируемостью происходит в лобовом слое. Если сорбируемость низкая, то компонент «размывается» по слою не оказывая значительного влияния на продвижение сорбционного фронта.
6. Сорбционный слой считается сплошным пористым телом с изоморфными свойствами. Допущение правомерно при значительном отличии диаметра гранул от геометрических размеров сорбционного слоя.

2.2.3. Одномерная неизотермическая модель динамики сорбции

С учетом допущений, сделанных в п. 2.1.2 имеем систему $N_{\text{кс}}$ уравнений, выражающую покомпонентный материальный баланс, где $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$:

$$\frac{\partial c_k}{\partial \tau} + \frac{\rho_b}{\varepsilon_b} \frac{\partial a_k}{\partial \tau} + \frac{\partial (w c_k)}{\partial x} = D_k^{\text{эф}} \frac{\partial^2 c_k}{\partial x^2}, \quad 0 < x < L, \quad \tau > 0. \quad (2.4)$$

Концентрация c_k связывается с парциальным давлением p_k и функцией температуры $T(\tau, x)$ уравнением:

$$c_k = \frac{p_k}{RT(\tau, x)}. \quad (2.5)$$

Начальные условия для системы (2.4) имеют вид:

$$a_k(x, \tau) = a_{k_0}(x), \quad c_k(x, \tau) = c_{k_0}(x), \quad 0 < x < L, \tau = 0 \quad (2.6)$$

Функции $a_{k_0}(x)$, $c_{k_0}(x)$ представляют собой профиль концентраций k -го компонента по длине слоя в начальный момент времени в адсорбенте и в межгранулярном пространстве.

Граничные условия на стадии адсорбции

$$c_k(0, \tau) = c_k^{\text{вх}} + \frac{D_k^{\text{эф}}}{w(0, \tau)} \frac{\partial c_k(0, \tau)}{\partial x}; \quad \frac{\partial (wc_k(L, \tau))}{\partial x} = 0; \quad (2.7)$$

на стадии десорбции

$$c_k(L, \tau) = c_k^{\text{вх}} + \frac{D_k^{\text{эф}}}{w(L, \tau)} \frac{\partial c_k(L, \tau)}{\partial x}; \quad \frac{\partial (wc_k(0, \tau))}{\partial x} = 0, \quad (2.8)$$

где $w(0, \tau)$, $w(L, \tau)$ – скорость потока на входе и на выходе из слоя, соответственно. Работу лобового слоя адсорбента можно рассматривать как обработку слоя в одно зерно. Граничное условие для a_k можно определить из решения дифференциального уравнения кинетики сорбции, которое в общем случае имеет вид:

$$\frac{\partial a_k(x, \tau)}{\partial \tau} = f_k(\beta_k, a_k, a_k^{\text{п}}), \quad (2.9)$$

где f_k – функциональная зависимость, определяющая вид уравнения кинетики, для k -го компонента на данном типе сорбента.

В уравнении (2.9) равновесные величины сорбции $a_k^{\text{п}}$ определяются из системы уравнений:

$$a_k^{\text{п}} = a_k^{\text{п}}(p_1, p_2, \dots, p_k, T). \quad (2.10)$$

Уравнения (2.4) – (2.10) представляют собой неполное математическое описание сорбционных процессов. Это обусловлено тем, что представленные уравнения необходимо дополнить уравнениями для расчета динамики общего давления P , скорости w , температуры T .

Вид уравнений (2.9) и (2.10) определяется спецификой процесса адсорбционного разделения и в каждом конкретном случае требует обоснования.

2.2.4. Изотермическая модель динамики сорбции

С учетом допущений сделанных в п. 2.1.2 имеем систему $N_{\text{кс}}$ уравнений, выражающую покомпонентный материальный баланс, где $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$:

$$\frac{\partial c_k}{\partial \tau} + \frac{\rho_b}{\varepsilon_b} \frac{\partial a_k}{\partial \tau} + \frac{\partial (wc_k)}{\partial x} = D_k^{\text{эф}} \frac{\partial^2 c_k}{\partial x^2}, \quad 0 < x < L, \tau > 0. \quad (2.11)$$

Концентрация c_k связывается с парциальным давлением p_k и температурой $T = \text{const}$ уравнением:

$$c_k = \frac{p_k}{RT}. \quad (2.12)$$

Начальные условия для системы (2.11) имеют вид:

$$a_k(x, \tau) = a_{k_0}(x), \quad c_k(x, \tau) = c_{k_0}(x), \quad 0 < x < L, \tau = 0. \quad (2.13)$$

Граничные условия на стадии адсорбции

$$c_k(0, \tau) = c_k^{\text{вх}} + \frac{D_k^{\text{эф}}}{w(0, \tau)} \frac{\partial c_k(0, \tau)}{\partial x}; \quad \frac{\partial (wc_k(L, \tau))}{\partial x} = 0; \quad (2.14)$$

на стадии десорбции

$$c_k(L, \tau) = c_k^{\text{вх}} + \frac{D_k^{\text{эф}}}{w(L, \tau)} \frac{\partial c_k(L, \tau)}{\partial x}; \quad \frac{\partial (wc_k(0, \tau))}{\partial x} = 0. \quad (2.15)$$

Уравнение кинетики поглощения:

$$\frac{\partial a_k(x, \tau)}{\partial \tau} = f_k(\beta_k, a_k, a_k^{\text{п}}). \quad (2.16)$$

Изотермы сорбции:

$$a_k^{\text{п}} = a_k^{\text{п}}(p_1, p_2, \dots, p_k, T = \text{const}). \quad (2.17)$$

Уравнения (2.11) – (2.17), в совокупности с уравнениями для расчета скорости, температуры, давления, внешних воздействий определяют полное математическое описание процесса разделения.

2.2.5. Математическая модель без учета продольного перемешивания

С учетом допущений, сделанных в п. 2.1.2, имеем систему $N_{\text{кс}}$ уравнений, выражающую покомпонентный материальный баланс, где $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$:

$$\frac{\partial c_k}{\partial \tau} + \frac{\rho_b}{\varepsilon_b} \frac{\partial a_k}{\partial \tau} + \frac{\partial (wc_k)}{\partial x} = 0, \quad 0 < x < L, \quad \tau > 0, \quad (2.18)$$

где

$$c_k = \frac{p_k}{RT}. \quad (2.19)$$

Начальные условия для системы (2.18) имеют вид:

$$a_k(x, \tau) = a_{k_0}(x), \quad c_k(x, \tau) = c_{k_0}(x), \quad 0 < x < L, \quad \tau = 0. \quad (2.20)$$

Граничные условия на стадии адсорбции

$$c_k(0, \tau) = c_k^{\text{вх}}; \quad \frac{\partial (wc_k(L, \tau))}{\partial x} = 0; \quad (2.21)$$

на стадии десорбции

$$c_k(L, \tau) = c_k^{\text{вх}}; \quad \frac{\partial (wc_k(0, \tau))}{\partial x} = 0. \quad (2.22)$$

Уравнение кинетики поглощения:

$$\frac{\partial a_k(x, \tau)}{\partial \tau} = f_k(\beta_k, a_k, a_k^{\text{п}}). \quad (2.23)$$

Изотермы сорбции:

$$a_k^{\text{п}} = a_k^{\text{п}}(p_1, p_2, \dots, p_k). \quad (2.24)$$

Уравнения (2.18) – (2.24) определяют модель сорбции без учета фактора продольного перемешивания.

2.2.6. Равновесная изотермическая модель сорбции

С учетом допущений, сделанных в п. 2.1.2 имеем систему $N_{\text{кс}}$ уравнений, выражающую покомпонентный материальный баланс, где $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$:

$$\frac{\partial c_k}{\partial \tau} + \frac{\rho_b}{\varepsilon_b} \frac{\partial a_k^{\text{п}}}{\partial \tau} + \frac{\partial (wc_k)}{\partial x} = 0, \quad 0 < x < L, \quad \tau > 0; \quad (2.25)$$

$$c_k = \frac{p_k}{RT}. \quad (2.26)$$

Начальные условия для системы (2.25) имеют вид:

$$a_k^p(x, \tau) = a_{k_0}^p(x), \quad c_k(x, \tau) = c_{k_0}(x), \quad 0 < x < L, \quad \tau = 0. \quad (2.27)$$

Граничные условия на стадии адсорбции

$$c_k(0, \tau) = c_k^{bx}; \quad \frac{\partial (wc_k(L, \tau))}{\partial x} = 0; \quad (2.28)$$

на стадии десорбции

$$c_k(L, \tau) = c_k^{bx}; \quad \frac{\partial (wc_k(0, \tau))}{\partial x} = 0. \quad (2.29)$$

Характерной особенностью равновесной модели является то, что в математическое описание не входит система уравнений кинетики сорбции.

$$a_k^p = a_k^p(p_1, p_2, \dots, p_k). \quad (2.30)$$

Равновесные величины сорбции определяются изотермами (2.30).

2.2.7. Равновесная изотермическая модель при линейной изотерме

С учетом допущений, сделанных в п. 2.1.2 имеем систему N_{kc} уравнений, выражающую покомпонентный материальный баланс, где $k = \overline{1, N_{kc}}$:

$$\left(1 + \frac{\rho_b}{\varepsilon_b} \Gamma_k\right) \frac{\partial c_k}{\partial \tau} + \frac{\partial (wc_k)}{\partial x} = 0, \quad 0 < x < L, \quad \tau > 0; \quad (2.31)$$

$$c_k = \frac{p_k}{RT}. \quad (2.32)$$

Начальные условия для системы (2.31) имеют вид:

$$c_k(x, \tau) = c_{k_0}(x), \quad 0 < x < L, \quad \tau = 0. \quad (2.33)$$

Граничные условия на стадии адсорбции

$$c_k(0, \tau) = c_k^{bx}; \quad \frac{\partial (wc_k(L, \tau))}{\partial x} = 0; \quad (2.34)$$

на стадии десорбции

$$c_k(L, \tau) = c_k^{bx}; \quad \frac{\partial (wc_k(0, \tau))}{\partial x} = 0. \quad (2.35)$$

Равновесные величины сорбции определяются системой изотерм:

$$a_k^p = a_k^p(p_1, p_2, \dots, p_k, \Gamma_k), \quad (2.36)$$

где Γ_k – константы Генри.

Модель сорбции при линейной изотерме является наиболее упрощенной моделью данного спектра.

2.3. РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МЕХАНИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Спектр математических моделей сорбционных процессов необходимо дополнить уравнениями для расчета скорости и давления газовой смеси, которые отражают характер гидромеханических процессов.

2.3.1. Основные допущения математической модели механических процессов

1. Перепад общего давления смеси по длине зернистого слоя адсорбента незначителен. Скорость распространения волны возмущений давления вследствие адсорбции сопоставима со скоростью звука [7]; при незначительных соотношениях длины слоя к диаметру; размером гранул сопоставимым с межгранулярным пространством; скоростях газа в слое до 50 м/с перепад давления пренебрежимо мал.

2. Снижение эффективной скорости потока за счет обратных газовых пульсаций, вызванных случайной структурой слоя адсорбента, мало. Допущение правомерно в случае регулярного расположения гранул сорбента.

3. Разделяемая газовая смесь обладает свойствами идеального газа.

4. Влияние пристеночных эффектов в сорбционном слое на профиль скорости газовой смеси незначительно.

2.3.2. Уравнение динамики давления в адсорбере

Характер изменения давления в адсорбере определяется входными и выходными материальными потоками, а также интенсивностью протекающих сорбционных и тепловых процессов.

Получим дифференциальное уравнение относительно давления N_{kc} компонентной смеси в адсорбере произвольной формы с объемом пустот, доступных для газовой смеси, равным:

$$V^{\text{эф}} = \varepsilon V + V^{\text{пт}}. \quad (2.37)$$

Изменение количества вещества $\Delta\Theta$ в адсорбере за промежуток времени $\Delta\tau$ равно разнице входящих и выходящих потоков

$$\frac{\Delta\Theta}{\Delta\tau} = \Delta G. \quad (2.38)$$

Количество вещества газа в адсорбере по уравнению состояния идеального газа определяется соотношением:

$$\Theta = \frac{PV^{\text{эф}}}{RT}. \quad (2.39)$$

Подставляя выражение (2.38) в (2.39) и осуществив предельный переход ($\Delta\tau \rightarrow 0$) получим следующее дифференциальное уравнение:

$$\frac{d}{d\tau} \left(\frac{PV^{\text{эф}}}{RT} \right) = G^{\text{вх}} - G^{\text{вых}}. \quad (2.40)$$

Величины $G^{\text{вх}}$, $G^{\text{вых}}$ определяют мольный расход газовой смеси на входе и выходе адсорбера. Приход и уход вещества из газовой фазы также возникает вследствие адсорбции и десорбции. Уравнение динамики давления с учетом сорбционных процессов запишется в виде:

$$\frac{d}{d\tau} \left(\frac{PV^{\text{эф}}}{RT} \right) = G^{\text{вх}} - G^{\text{вых}} + \int_0^L \frac{\partial(a_1 + a_2 + \dots + a_{N_{kc}})}{\partial\tau} S(x) dx. \quad (2.41)$$

В выражении (2.41) интегральная составляющая определяет количество вещества газовой смеси адсорбированного и десорбированного по длине L слоя в данный момент времени. Функция $S(x)$ представляет собой зависимость площади поперечного сечения адсорбера от координаты x .

Уравнение (2.41) представляет собой уравнение динамики давления в адсорбере для одномерной неизотермической модели. В случае изотермичности процесса уравнение преобразуется к виду:

$$\frac{V^{\text{эф}}}{RT} \frac{dP}{d\tau} = G^{\text{вх}} - G^{\text{вых}} - \int_0^L \frac{\partial(a_1 + a_2 + \dots + a_{N_{kc}})}{\partial\tau} S(x) dx. \quad (2.42)$$

Для равновесной изотермической модели уравнение (2.37) примет вид:

$$\frac{V^{\text{эф}}}{RT} \frac{dP}{d\tau} = G^{\text{вх}} - G^{\text{вых}} - \int_0^L \frac{\partial(a_1^p + a_2^p + \dots + a_{N_{kc}}^p)}{\partial\tau} S(x) dx. \quad (2.43)$$

При линейных изотермах уравнение динамики давления имеет вид:

$$\frac{V^{\text{эф}}}{RT} \frac{dP}{d\tau} = G^{\text{вх}} - G^{\text{вых}} - \int_0^L \frac{\partial (\Gamma_1 p_1 + \Gamma_2 p_2 + \dots + \Gamma_{N_{\text{кс}}} p_{N_{\text{кс}}})}{\partial \tau} S(x) dx. \quad (2.44)$$

Наиболее простой вид уравнение динамики давления принимает для адсорбера с постоянным проходным сечением:

$$\frac{dP}{d\tau} = \frac{1}{L \varepsilon} \left[P (w^{\text{вх}} - w^{\text{вых}}) - RT \int_0^L \frac{\partial (a_1 + a_2 + \dots + a_{N_{\text{кс}}})}{\partial \tau} dx \right]. \quad (2.45)$$

Уравнение динамики давления в адсорбере дополняет ММ и рассчитывается совместно с уравнениями материального и теплового баланса.

2.3.3. Уравнение скорости потока по длине слоя сорбента

Характер изменения скорости по длине слоя адсорбента определяется входными и выходными материальными потоками, интенсивностью протекающих сорбционных и диффузионных процессов.

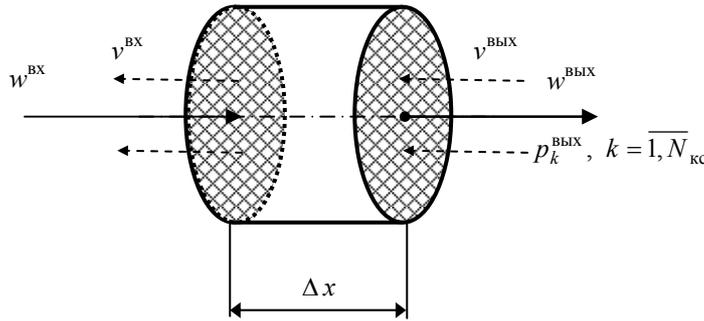


Рис. 2.5. Элемент слоя адсорбента

Получим уравнение скорости потока w по длине слоя для $N_{\text{кс}}$ компонентной смеси в адсорбере произвольной формы. Допущения, принятые в п. 2.2.1 сохраняются.

Рассмотрим некоторый участок слоя адсорбента длиной Δx .

Уравнение материального баланса для участка сорбционного слоя, длиной Δx , имеет вид:

$$\frac{d}{d\tau} \left(\frac{P \Delta x S \varepsilon}{RT} \right) = G^{\text{вх}} - G^{\text{вых}} - G^{\text{сорб}} + G^{\text{диф}}. \quad (2.46)$$

Входной поток $G^{\text{вх}}$ и выходной $G^{\text{вых}}$ определяются:

$$G^{\text{вх}} = w(0) S(0) \frac{P}{RT}, \quad G^{\text{вых}} = w(\Delta x) S(\Delta x) \frac{P}{RT}. \quad (2.47)$$

Материальный поток $G^{\text{сорб}}$ сорбции вычисляется как:

$$G^{\text{сорб}} = \int_0^{\Delta x} \left(\frac{\partial a_1}{\partial \tau} + \frac{\partial a_2}{\partial \tau} + \dots + \frac{\partial a_{N_{\text{кс}}}}{\partial \tau} \right) S(x) dx_f. \quad (2.48)$$

Диффузионная составляющая в уравнении (2.42) определяется:

$$G^{\text{диф}} = \sum_{k=1}^{N_{\text{кс}}} \left[D_k^{\text{эф}} \frac{\partial p_k^{\text{вых}}}{\partial x} \frac{S(\Delta x)}{RT} - D_k^{\text{эф}} \frac{\partial p_k^{\text{вх}}}{\partial x} \frac{S(0)}{RT} \right]. \quad (2.49)$$

Величина Δx выбиралась произвольно, поэтому полученное уравнение будет справедливо для любого значения координаты x в слое.

Пусть входному сечению соответствует координата 0, а выходному сечению координата x . Выразим из уравнения (2.46), учитывая (2.47) – (2.49), величину скорости потока в сечении x :

$$w(x) = w(0) \frac{S(0)}{S(x)} - \frac{RT}{S(x)P} \frac{d}{d\tau} \left(\frac{PV(x)\varepsilon}{RT} \right) - \frac{RT}{PS(x)} \int_0^x \frac{\partial(a_1 + a_2 + \dots + a_{N_{\text{кк}}})}{\partial\tau} dx + \sum_{k=1}^{N_{\text{кк}}} \left[D_k^{\text{эф}} \frac{\partial p_k^{\text{ввых}}}{\partial x} \frac{1}{P} - D_k^{\text{эф}} \frac{\partial p_k^{\text{вк}}}{\partial x} \frac{S(0)}{S(x)P} \right]. \quad (2.50)$$

Для изотермической модели при постоянном сечении слоя уравнение запишется в виде:

$$w(x) = w(0) - \frac{x\varepsilon}{P} \frac{dP}{d\tau} - \frac{RT}{P} \int_0^x \frac{\partial(a_1 + a_2 + \dots + a_{N_{\text{кк}}})}{\partial\tau} dx_f + \sum_{k=1}^{N_{\text{кк}}} \left[\frac{D_k^{\text{эф}}}{P} \left(\frac{\partial p_k^{\text{ввых}}}{\partial x} - \frac{\partial p_k^{\text{вк}}}{\partial x} \right) \right].$$

Для модели без учета фактора продольного перемешивания:

$$w(x) = w(0) - \frac{x\varepsilon}{P} \frac{dP}{d\tau} - \frac{RT}{P} \int_0^x \frac{\partial(a_1 + a_2 + \dots + a_{N_{\text{кк}}})}{\partial\tau} dx_f. \quad (2.51)$$

Для равновесной изотермической модели:

$$w(x) = w(0) - \frac{x\varepsilon}{P} \frac{dP}{d\tau} - \frac{RT}{P} \int_0^x \frac{\partial(a_1^p + a_2^p + \dots + a_{N_{\text{кк}}}^p)}{\partial\tau} dx_f. \quad (2.52)$$

При линейных изотермах уравнение скорости принимает вид:

$$w(x) = w(0) - \frac{x\varepsilon}{P} \frac{dP}{d\tau} - \frac{RT}{P} \int_0^x \frac{\partial(\Gamma_1 p_1 + \Gamma_2 p_2 + \dots + \Gamma_{N_{\text{кк}}} p_{N_{\text{кк}}})}{\partial\tau} dx_f. \quad (2.53)$$

Интегрирование от 0 до x по переменной x означает, что рассматривается суммарное количество поглощенного вещества на участке от 0 до x и его влияния на изменение величины скорости в сечении x по отношению к сечению 0.

В уравнениях (2.46) – (2.53) величины скорости $w(x)$ и давления P одновременно учитывают сорбционные процессы (п. 2.2.2). Поэтому вопрос совместного расчета уравнений пп. 2.2.2 и 2.2.3 требует специального рассмотрения при разработке алгоритма расчета математической модели.

2.3.4. Расчет материальных потоков на концевых участках адсорбера

Рассмотрим участок трубопровода, предшествующий адсорберу (рис. 2.6).

На рис. 2.6 сплошными стрелками обозначены потоки на стадии адсорбции, а пунктирными стрелками потоки на стадии десорбции. $P_{\text{пит}}$ – давление исходной газовой смеси; $P_{\text{вск}}$ – давление на выходе БСК; P_k – давление в k -м адсорбере ($k = \overline{I, N_A}$).

Расход газовой смеси $G_k^{\text{вк}}$ поступающей в k -й адсорбер определим как:

$$G_k^{\text{вк}}(\tau) = G_{K_k}(\tau) - G_{K_k^*}(\tau), \quad k = \overline{I, N_A}.$$

Расход вещества, проходящего через клапан G_K является функцией вида:

$$G_K = G_K(S, T, M, \Delta P_K, \xi), \quad (2.54)$$

где S – площадь проходного сечения; ΔP_K – разность давлений до и после клапана; M – молярная масса газа; ξ – коэффициент гидравлического сопротивления клапана.

$$G_K = \sqrt{\frac{1}{RTM\xi}} S \frac{T_0}{T} \sqrt{P_K^{\text{вк}^2} - P_K^{\text{ввых}^2}}. \quad (2.55)$$

Расходные характеристики конкретного клапана могут быть взяты из паспортных данных или из справочной литературы [15]. Для приближенных расчетов величины расхода газа через клапан можно воспользоваться уравнением (2.55).

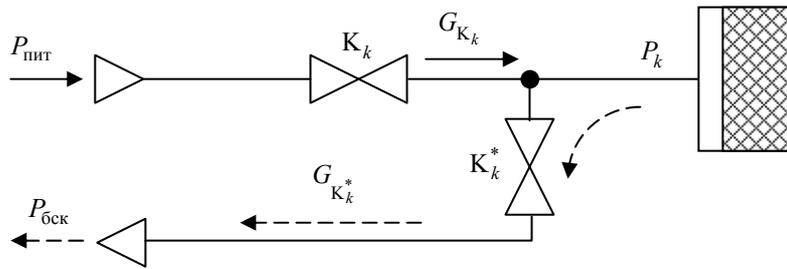


Рис. 2.6. Участок предшествующий адсорберу

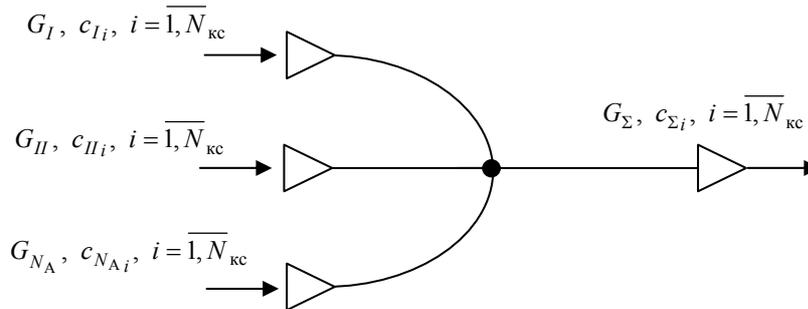


Рис. 2.7. Схема слияния газовых потоков

Получим зависимость для расчета концентраций компонентов в газовой смеси, образующейся в результате слияния потоков с различным концентрационным составом. На рис. 2.7 представлена схема процесса слияния газовых потоков.

Расход i -го компонента по выходному потоку определяется соотношением:

$$G_{\Sigma} c_{\Sigma i} \frac{RT}{P_{\Sigma}} = G_I c_{I_i} \frac{RT}{P_{\Sigma}} + G_{II} c_{II_i} \frac{RT}{P_{\Sigma}} + \dots + G_{N_A} c_{N_A i} \frac{RT}{P_{\Sigma}}. \quad (2.56)$$

Поделим (2.56) на RT и выразим суммарную концентрацию компонента:

$$c_{\Sigma i} = \frac{G_I c_{I_i} + G_{II} c_{II_i} + \dots + G_{N_A} c_{N_A i}}{G_{\Sigma}}. \quad (2.57)$$

Выражение (2.57) используется для расчета концентраций компонентов в продукционной, сбросовой и промывочной газовой смеси в многоадсорберной установке КБА ($N_A > 2$).

Рассмотрим участок схемы последующий адсорберу (рис. 2.8).

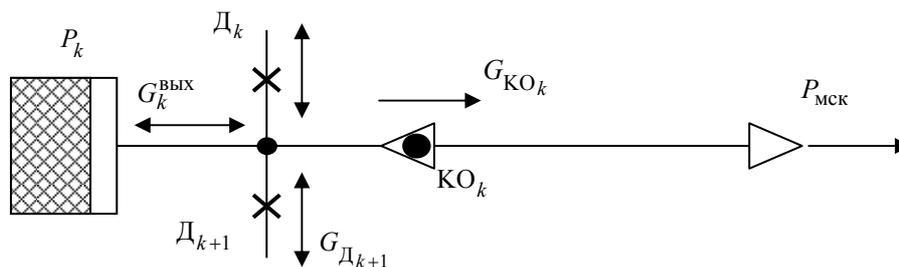


Рис. 2.8. Участок трубопровода последующий за адсорбером

Алгебраическая сумма величин потоков, сходящихся в узле, равна нулю, поэтому имеет место выражение:

$$G_k^{\text{ВЫХ}}(\tau) = G_{D_k}(\tau) + G_{D_{k+1}}(\tau) + G_{KO_k}(\tau), \quad k = \overline{1, N_A}. \quad (2.58)$$

Значение индекса k определяется из условия: «если $(k+1) > N_A$, то $k=1$ ».

Физический смысл последнего условия заключается в том, что промывочная смесь из N_A -го адсорбера поступает в первый адсорбер.

В качестве дросселирующего устройства D_k в установке может быть использован либо капилляр постоянного сечения, либо управляемый клапан.

В случае использования стандартного клапана целесообразно применение в расчете паспортных характеристик клапана, иначе можно воспользоваться уравнением (2.53). Если в качестве дросселя применяется капилляр постоянного сечения и длиной обеспечивающей ламинарный режим течения, то для расчетов воспользуемся формулой Пуазейля:

$$G_{\text{Д}} = \frac{\pi d_{\text{д}}^2}{256RTl_{\text{д}}\eta} (P_I^2 - P_{I+1}^2), \quad (2.59)$$

где P_I, P_{I+1} – давление газовой смеси в I и $I+1$, Па; $l_{\text{д}}, d_{\text{д}}$ – длина, диаметр капилляра, м; η – вязкость газовой смеси.

В газоразделительной установке также используются обратные клапаны. Характерной особенностью обратного клапана является то, что расход газа, пропускаемый обратным клапаном, зависит от перепада давления $\Delta P_{\text{КО}}$ на входе и выходе обратного клапана:

$$G_{\text{КО}k} = \begin{cases} 0, & P_k \leq P_{\text{МСК}} + \Delta P_{\text{нечув}}; \\ G_{\text{КО}}(P_k - P_{\text{МСК}}), & P_k > P_{\text{МСК}} + \Delta P_{\text{нечув}}; \end{cases} \quad k = 1, \overline{N_{\Lambda}}, \quad (2.60)$$

где $\Delta P_{\text{нечув}}$ – давление нечувствительности обратного клапана, определяемое жесткостью силового элемента (пружина, ниппель и т.п.).

2.4. РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ТЕПЛОВЫХ ПРОЦЕССОВ

Для учета неизоэнтальпических факторов необходимо ввести в рассмотрение уравнение энергетического баланса, которое имеет вид:

$$C \frac{\partial T}{\partial \tau} = -\varepsilon C_p \nabla(\rho \mathbf{u} T) - \varepsilon C_p \nabla(\overline{\rho \mathbf{v}_l T_l}) + \lambda \nabla^2 T + \sum_{k=1}^{N_{\text{КС}}} (1 - \varepsilon) \Delta H_k \frac{\partial a_k}{\partial \tau} + Q_{\text{тр}} + Q_{\text{тд}}, \quad \left[\frac{\text{Дж}}{\text{м}^3 \cdot \text{с}} \right] \quad (2.61)$$

В уравнении (2.61) помимо основных обозначений использованы: $Q_{\text{тр}}$ – теплота выделяющаяся за счет трения; $Q_{\text{тд}}$ – количество теплоты, передаваемое за счет термодиффузии; T – средняя температура слоя; T_l – локальная температура в слое; λ – суммарная теплопроводность слоя.

В уравнение (2.61) входят операторы ∇, ∇^2 , которые приводят уравнения к трехмерному виду. В прямоугольных декартовых координатах для рассматриваемых переменных оператор градиента записываются как:

$$\nabla(\mathbf{u} T) = \frac{\partial(uT)_x}{\partial x} + \frac{\partial(uT)_y}{\partial y} + \frac{\partial(uT)_z}{\partial z}; \quad (2.62)$$

оператор Лапласа

$$\lambda \nabla^2 T = \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}. \quad (2.63)$$

Уравнение (2.61) представляет собой громоздкое дифференциальное уравнение. Совместный расчет уравнения теплового баланса (2.61) и, например, уравнений покомпонентного материального баланса представляет собой значительную трудность. Поэтому целесообразно рассматривать факторы, наиболее влияющие на характер тепловых процессов в адсорбере, к ним относятся:

- а) теплообмен с окружающей средой;
- б) теплота сорбции;
- в) адиабатическое сжатие или расширение газа.

2.5. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ВНЕШНИХ ВОЗДЕЙСТВИЙ

Характер функционирования установки адсорбционного разделения во многом определяется по отношению к ней внешними воздействиями.

В первую группу внешних воздействий необходимо отнести параметры подаваемой на разделение газовой смеси: давление, температуру, состав.

$$P_{\text{пит}} = P_{\text{пит}}(\tau), \quad T = T(\tau), \quad \mathbf{p}_{\text{пит}} = \mathbf{p}_{\text{пит}}(\tau). \quad (2.61)$$

Вид функций (2.61) определяется спецификой организации конкретного адсорбционного процесса и может быть задан в виде аналитических выражений или в виде таблицы экспериментальных значений.

В рассматриваемом типе установок выходные состав и температура на характер протекающих в установке процессов влияния не оказывают, поэтому в качестве внешних воздействий будем также рассматривать динамику изменения давления на выходе смеси МСК и БСК.

$$P_{\text{БСК}} = P_{\text{БСК}}(\tau), P_{\text{МСК}} = P_{\text{МСК}}(\tau). \quad (2.62)$$

К внешним воздействиям необходимо отнести возмущения, вносимые целенаправленно управляющим техническим устройством или оператором. Данные воздействия выражаются вектором управляющих воздействий, компоненты которого зависят от времени:

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}(\tau). \quad (2.63)$$

Вектор управляющих воздействий определяется на основе анализа технологического процесса адсорбционного разделения как объекта управления проведенных литературных, физических или численных исследований. До проведения данных исследований возможные управляющие воздействия будем рассматривать как дополнительные внешние воздействия. Характер влияния возможных управляющих будет изучен при проведении численных имитационных исследований, после чего будет сделан окончательный вывод о возможности использования определенных внешних воздействий в качестве управляющих.

2.6. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КОНЦЕНТРАТОРА КИСЛОРОДА

Рассмотрим технологическую схему бортовой кислорододобывающей установки (БКДУ), применяемую для концентрирования дыхательной газовой смеси кислородом (рис. 2.9).

Принцип действия концентратора кислорода аналогичен принципу действия установки адсорбционного разделения. Для концентратора характерны более высокие пропускаемые расходы воздуха, поэтому высокая степень разделения на выходе установки не достигается (15...60 % об. кислорода в МСК).

Переключение клапанов осуществляется по циклограмме рис. 2.2.

В данной установке применены адсорберы с переменным проходным сечением шихты и с переменным направлением течения газовой смеси.

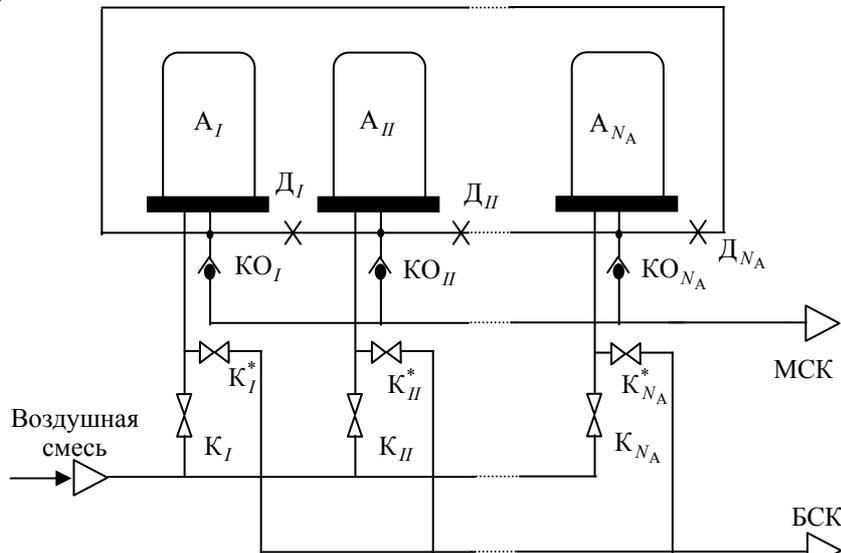


Рис. 2.9. Технологическая схема процесса концентрирования

Зависимость проходного сечения $S = S(x)$ адсорбера по длине слоя приведена в прил. 4.

Поместим прямоугольную систему координат в адсорбере, чтобы ось Ox совпала с продольной осью слоя, а направления Oy и Oz с поперечными осями.

Расположение системы координат в адсорбере показано на рис. 2.10.

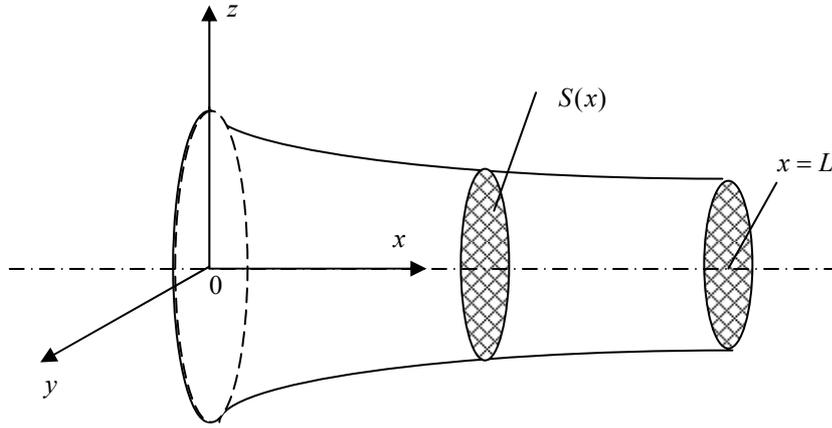


Рис. 2.10. Система координат $Oxyz$ в адсорбере с переменным сечением

Система допущений математической модели концентратора кислорода принимается на основе возможных допущений, описанных в пп. 2.1 – 2.4 и формулируется следующим образом:

1. Влияние термических факторов на протекающие в установке сорбционные и гидромеханические процессы мало.
2. Перепад общего давления смеси по длине зернистого слоя адсорбента незначителен.
3. Скорость процессов массопереноса вдоль продольной оси Ox слоя значительно превышает скорость процессов массопереноса вдоль поперечных осей Oy , Oz .
4. Адсорбционная ветвь изотермы совпадает с десорбционной.
5. Наличие одного компонента уменьшает сорбцию другого.
6. Адсорбционный слой составлен из гранул одинакового размера с одинаковыми сорбционными свойствами.
7. В процессе функционирования установки физико-механические свойства гранул и конструкционные характеристики установки не меняются.

В соответствии с принятыми допущениями математическое описание процессов, протекающих в концентраторе кислорода имеет следующий вид, где $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$, $j = \overline{1, N_A}$.

Покомпонентный материальный баланс в адсорберах выражается уравнением вида:

$$\frac{\partial p_k^j}{\partial \tau} + RT \frac{\rho_b}{\varepsilon_b} \frac{\partial a_k^j}{\partial \tau} + \frac{\partial (w^j p_k^j)}{\partial x} = 0, \quad 0 < x < L, \quad \tau > 0. \quad (2.64)$$

Начальные условия для уравнений материального баланса (2.64) имеют вид:

$$a_k^j(x, \tau) = a_{k_0}^j(x), \quad p_k^j(x, \tau) = p_{k_0}^j(x), \quad 0 < x < L, \quad \tau = 0. \quad (2.65)$$

Граничные условия для уравнений (2.64):

– на стадии адсорбции:

$$\frac{\partial (w^j p_k^j)}{\partial x}(L, \tau) = 0, \quad p_k^j(0, \tau) = p_{k_{\text{внт}}}^j; \quad (2.66)$$

– на стадии десорбции:
$$\frac{\partial (w^j p_k^j)}{\partial x}(0, \tau) = 0, \quad p_k^j(L, \tau) = p_{k_{\text{пром}}}^j. \quad (2.67)$$

Закон Дальтона:
$$P_j = p_1^j + p_2^j + \dots + p_{N_{\text{кс}}}^j, \quad j = \overline{1, N_A}. \quad (2.68)$$

Уравнения кинетики сорбции выбраны на основе анализа литературных источников [19] – [25], посвященных подробному описанию кинетических уравнений различной структуры, а также сравнительного анализа в качестве приближенного уравнения кинетики выбираем уравнение вида:

$$\frac{\partial a_k^j}{\partial \tau} = \beta_k (a_k^{j\text{п}} - a_k^j). \quad (2.69)$$

Изотермы сорбции представляют собой модифицированные уравнения Ленгмюра, которые в динамических условиях определяют равновесную емкость адсорбента по отношению к данной примеси

$$a_k^{j_p} = \frac{a_{k_{\infty}} b_k p_k^j}{1 + b_1 p_1^j + \dots + b_{N_{\text{кк}}} p_{N_{\text{кк}}}^j}, \quad (2.70)$$

где $a_{k_{\infty}}$ – емкость сорбента по k -му компоненту.
Коэффициенты b_k определяются соотношением:

$$b_k = b_{k_0} \exp\left(\frac{\Delta H_k}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\right)\right), \quad (2.71)$$

где T_0 – температура при которой известны равновесные величины. Коэффициенты b_{k_0} определяются из уравнения (2.69) при $T = T_0$.

Уравнения для расчета давления в адсорберах имеют вид:

$$\frac{V^{\text{эф}}}{RT} \frac{dP_j}{d\tau} = G_j^{\text{вх}} - G_j^{\text{вых}} - \rho_b \int_0^L \frac{\partial (a_1^j + a_2^j + \dots + a_{N_{\text{кк}}}^j)}{\partial \tau} S(x) dx. \quad (2.72)$$

Начальные условия для уравнений динамики давления:

$$P_j(\tau) = P_{j_{\text{бск}}}, \quad \tau = 0. \quad (2.73)$$

Уравнение скорости по длине сорбционного слоя имеет вид:

$$w(x) = w(0) \frac{S(0)}{S(x)} - \frac{V(x)\varepsilon}{S(x)P} \frac{dP}{d\tau}, \quad (2.74)$$

где $w(0)$, $w(x=L)$ – скорость газовой смеси на входе и на выходе задаются в виде:

Краевые условия для уравнения (2.73):

$$w^j(x) = G_j^{\text{вх}} \frac{RT}{P_j S(x)}, \quad x = 0; \quad (2.75)$$

$$w^j(x) = G_j^{\text{вых}} \frac{RT}{P_j S(x)}, \quad x = L.$$

Для связи материальных потоков между собой в математическое описание необходимо ввести дополнительные уравнения.

Уравнения связи материальных потоков:

Величина расхода и направление потока в лобовом сечении слоя адсорбента определяется условием:

$$G_j^{\text{вх}} = \begin{cases} -G_{K_j^*}(\psi_{K_j^*}(\tau), P_j, P_{\text{бск}}), & \psi_{K_j^*} > 0; \\ G_{K_j}(\psi_{K_j}(\tau), P_{\text{пит}}, P_j), & \psi_{K_j^*} = 0. \end{cases} \quad (2.76)$$

Расход сбросовой газовой смеси (БСК) согласно схеме 2.9 определяется суммой расходов, пропускаемых клапанами K_j^* , $j = \overline{1, N_A}$.

$$G_{\text{бск}} = \sum_{j=1}^{N_A} G_{K_j^*}(\psi_{K_j^*}(\tau), P_j, P_{\text{бск}}). \quad (2.77)$$

Величина парциального давления j -го компонента в БСК находится:

$$P_{i_{\text{бск}}} = \frac{1}{G_{\text{бск}}} \sum_{j=1}^{N_A} G_{K_j^*} p_i^j(0, \tau), \quad i = \overline{1, N_{\text{кк}}}. \quad (2.78)$$

Расход потребляемой установкой газовой (питающей) смеси:

$$G_{\text{пит}} = \sum_{j=1}^{N_A} G_{K_j} (\psi_{K_j} (\tau), P_{\text{пит}}, P_j). \quad (2.79)$$

Расход смеси на выходе, насыщенной кислородом (МСК):

$$G_{\text{мск}} = \sum_{j=1}^{N_A} G_{\text{КО}_j} (\psi_{\text{КО}_j} (P_j, P_{\text{мск}}, \tau), P_j, P_{\text{мск}}). \quad (2.80)$$

Величина парциального давления j -го компонента в МСК находится:

$$p_{i_{\text{мск}}} = \frac{1}{G_{\text{мск}}} \sum_{j=1}^{N_A} G_{\text{КО}_j} p_{i_{\text{КО}_j}}. \quad (2.81)$$

Расход смеси, пропускаемой обратным клапаном, определяется как:

$$G_{\text{КО}_j} = G_{\text{КО}_j} (\psi_{\text{КО}_j} (P_j, P_{\text{мск}}, \tau), P_j, P_{\text{мск}}). \quad (2.82)$$

Парциальное давление i -го компонента в смеси, проходящей через j -й обратный клапан:

$$p_{i_{\text{КО}_j}}^j = \frac{1}{G_{\text{КО}_j}} \left(G_{\text{Д}_j} p_{i_{\text{Д}_j}}^j + G_{\text{Д}_{j+1}} p_{i_{\text{Д}_{j+1}}}^{j+1} + G_j^{\text{ввых}} p_{i_{\text{Д}_j}}^j \right). \quad (2.83)$$

Расход в конечном сечении j -го адсорбера:

$$G_j^{\text{ввых}} (\tau) = G_{\text{Д}_j} (\tau) + G_{\text{Д}_{j+1}} (\tau) + G_{\text{КО}_j} (\tau). \quad (2.84)$$

Расход смеси через дроссель определяется функцией:

$$G_{\text{Д}_j} (\tau) = G_{\text{Д}_j} (\zeta_{\text{Д}_j}, P_j, P_{j+1}). \quad (2.85)$$

Значение индекса k определяется из условия: «если $(j+1) > N_A$, то $j=1$ ».

Зависимости в уравнениях 2.75 – 2.84, пропускаемых дроссели-рующим элементом расходов G_K , G_{K^*} , $G_{\text{КО}}$, $G_{\text{Д}}$ от перепада давления, и степени их открытия могут быть рассчитаны по приближенным уравнениям (2.53), (2.57). Для наиболее точного расчета необходимо воспользоваться паспортными расходными характеристиками конкретных клапанов или результатами лабораторных испытаний.

Для математического описания внешних воздействий задается характер изменения входного давления $P_{\text{пит}} (\tau)$. Побудитель расхода обычно соединяется с системой клапанов через редуктор, который обеспечивает давление, близкое к постоянному:

$$P_{\text{пит}} (\tau) = \text{const}. \quad (2.86)$$

Температура и состав исходной смеси для концентратора кислорода считаются постоянными во времени:

$$T(\tau) = \text{const}, \quad \mathbf{p}(\tau) = \text{const}. \quad (2.87)$$

Сбросовая (БСК) и продукционная (МСК) газовая смесь поступают в ресивер (атмосфера может рассматриваться как ресивер с бесконечным объемом). Динамика давления газовой смеси в ресивере, определяющая вид функций $P_{\text{БСК}} (\tau)$ и $P_{\text{МСК}} (\tau)$, описывается дифференциальным уравнением вида:

$$\frac{V_{\text{рес1}}}{RT} \frac{dP_{\text{рес1}}}{d\tau} = G_1 - G_{\text{потр}} (\zeta_{\text{потр}}, P_{\text{рес1}}, P_{\text{потр}}), \quad 1 \approx \text{МСК} \vee \text{БСК}, \quad (2.88)$$

где $V_{\text{рес1}}$, $P_{\text{рес1}}$ – объем и давление в ресивере; G_1 – расход БСК или МСК, поступающий в ресивер от установки; $G_{\text{потр}}$ – расход газовой смеси, отбираемый потребителем; $P_{\text{потр}}$ – давление в линии потребителя; $\zeta_{\text{потр}}$ – проводимость участка трубопровода ресивер–потребитель.

Начальное условие для уравнения (2.88): $P_{\text{рес}_1}(0) = P_{\text{потр}}$.

Рассмотрим ресивер как объект со средоточенными параметрами. Парциальное давление k -го компонента на выходе будет равно парциальному давлению внутри аппарата. Для расчета динамики концентраций на выходе ресивера имеет место следующая система дифференциальных уравнений:

$$\frac{d p_{k \text{ вых}}^{\text{рес}}}{d \tau} = \frac{1}{V_{\text{рес}_1}} \left(G_1 p_{k \text{ вх}}^{\text{рес}} - G_{\text{потр}} p_{k \text{ вых}}^{\text{рес}} \right), \quad k = \overline{1, N_{\text{КС}}}, \quad 1 \approx \text{МСК} \vee \text{БСК}. \quad (2.89)$$

Начальные условия для системы (2.89) имеют вид:

$$p_{k \text{ вых}}^{\text{рес}}(\tau) = p_{k \text{ вых}_0}^{\text{рес}}, \quad \tau = 0. \quad (2.90)$$

Величины расходов G_1 , $G_{\text{потр}}$ являются функциями перепада давления и проводимости предшествующего и последующего ресиверу участков установки.

Внешние управляющие воздействия вносятся, как правило, на задвижки распределительных и отборных клапанов.

Цель управления отборными клапанами заключается, как правило, в обеспечении заданного значения расхода на его выходе. Величина расхода продукционной смеси зависит от ряда априори неизвестных величин (давление на выходах, динамика давления и т.п.), поэтому для ее обеспечения используется автоматическое регулирующее устройство. В качестве закона управления будем рассматривать закон управления в виде:

$$\Psi_{\text{прод}} = \Psi_{\text{прод}}^{\text{НОМ}} + U(G_{\text{прод зад}}(\tau), G_{\text{прод}}(\tau), \mathbf{a}_u),$$

где \mathbf{a}_u – параметры настройки управляющего устройства; $\Psi_{\text{прод}}$, $\Psi_{\text{прод}}^{\text{НОМ}}$ – фактическое и номинальное значение степени открытия клапана для отбора продукционной смеси.

Математическое описание режима переключения клапанов определяется циклограммой (рис. 2.2), на основании которой в ходе расчета определяются зависимости $\psi = \psi(\tau)$ для каждого распределительного клапана.

2.7. АЛГОРИТМ РАСЧЕТА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

Целью данного раздела является формирование алгоритма расчета математической модели, разработанной в п. 2.5.

Вследствие разнородности уравнений математической модели одновременный расчет всех ее уравнений является сложной задачей. Необходимо принять ряд допущений, которые позволяют осуществить последовательный расчет блоков ММ. Будем считать, что на малом промежутке времени:

- сорбционные процессы являются следствием изменения давления газовой смеси над слоем адсорбента;
- влияние сорбционных процессов на динамику давления определяется скоростью сорбции в предшествующий момент времени.

Разрабатываемый алгоритм должен обеспечивать контроль точности расчета и обеспечивать ее значение не ниже заданного.

Для расчета математической модели п. 2.5 разработан следующий алгоритм:

Шаг 1. Задаются исходные данные:

а) количество компонент в газовой смеси $N_{\text{кс}}$; количество адсорберов в установке N_A ; порозность слоя ε ; молекулярная масса газовой смеси M ; зависимости величин от времени $P_{\text{пит}} = P_{\text{пит}}(\tau)$, $P_{\text{мск}} = P_{\text{мск}}(\tau)$, $P_{\text{бск}} = P_{\text{бск}}(\tau)$, $T = T(\tau)$; вектор входных концентраций $\mathbf{c}_{\text{пит}} = \mathbf{c}_{\text{пит}}(\tau)$;

б) геометрические характеристики адсорбера в зависимости от типа адсорбера.

Для адсорбера с конической вставкой задаются: общий внутренний объем; внутренний диаметр шихты; меньший внутренний диаметр вставки; толщина стенки вставки; высота прямого участка вставки; объем загружаемого цеолита.

Для цилиндрического адсорбера: внутренний диаметр шихты; длина адсорбционного слоя; общий внутренний объем адсорбера;

в) свойства сорбента: кинетические коэффициенты по каждому компоненту β_k , $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$; теплоты сорбции компонентов ΔH_k , $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$; параметры уравнений Ленгмюра $a_{k\text{с}}$, b_k ;

г) пневматические характеристики установки: максимальные условные диаметры впускного – выпускного, отборного, обратного клапана и дросселя; объемы ресиверов на выходах установки;

д) управляющие воздействия: время полуцикла $\tau_{\text{пц}}$, время открытия и закрытия безударного клапана;

е) параметры расчета: конечное время расчета $\tau_{\text{пц}}$; максимальный шаг дискретизации по времени $\Delta\tau_{\text{max}}$; максимальный шаг по длине слоя Δh_{max} .

Шаг 2. Определяется вид зависимости проходного сечения шихты и объема от координаты $S = S(x)$, $V = V(x)$, $0 \leq x \leq L$.

Шаг 3. Формализация начальных условий:

– начальное давление газа в адсорбере: $P_j(0) = P_{\text{бск}}(0)$, $j = \overline{1, N_A}$;

– начальное распределение в газовой фазе компонент по адсорберам: $p_k^j(x, 0)$ и в твердой фазе $a_k^j(x, 0)$ вычисляется в зависимости от $p_k^j(x, 0)$ по выражению (2.69).

Шаг 4. Формализация циклограммы переключения клапанов: для заданного времени полуцикла, времени открытия и закрытия безударного клапана, количества адсорберов в схеме. Для каждого клапана вычисляется зависимость степени открытия от времени в пределах одного цикла $\psi_{K_i} = \psi_{K_i}(\tau)$, $\psi_{K_i^*} = \psi_{K_i^*}(\tau)$, $0 \leq \tau \leq \tau_{\text{пц}}$.

Шаг 5. Решается система уравнений (2.72) – (2.73) одним из методов решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений [26]. Величины интеграла сорбции в выражении (2.72) вычисляются по значениям скоростей сорбции для времени $\tau - \Delta\tau_{\text{max}}$.

Шаг 6. Рассчитываются значения скорости по длине сорбционного слоя по уравнению (2.74), с учетом скоростей поглощения, рассчитанных для времени $\tau - \Delta\tau_{\text{max}}$. В зависимости от полученных значений определяется характер поступления смеси в адсорбер (рис. 2.11).

Для случаев 2) и 4) (рис. 2.11) определяются такие значения координаты $0 \leq x \leq L$ внутри адсорбера, при которых линейная скорость равна нулю, т.е. «меняет знак».)

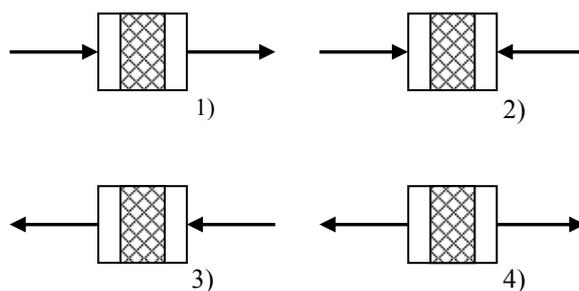


Рис. 2.11. Характер поступления смеси в адсорбер

Шаг 7. Вычисляются значения концентраций на границах сорбционного слоя в зависимости от структуры потоков в установке.

Шаг 7.1. Для каждого адсорбера определяется один из типов распределения потоков на выходе ($x = L$) (рис. 2.12) по значениям величин расходов, рассчитываемых при решении системы (2.72), (2.73).

Шаг 7.2. Для адсорберов с типом поступления смеси 1) и 2) (рис. 2.11) рассчитываются значения парциального давления компонентов по известным значениям состава разделяемой смеси $c_{пит}$ и полученным на шаге 5 значениям давления в адсорберах:

$$p_k^j(0, t + \Delta t_{\max}) = c_{питk}^j P_j(t + \Delta t_{\max}), \quad j = \overline{1, N_A}, \quad k = \overline{1, N_{кс}}.$$

Шаг 7.3. Рассчитываются концентрации компонентов в потоках (с учетом слияния потоков с различными концентрациями компонентов), проходящих через дроссели, обратные клапаны, а также в потоках, поступающих в адсорбер $c(L, t + \Delta t_{\max})_k^j$, $j = \overline{1, N_A}$, $k = \overline{1, N_{кс}}$ со стороны соответствующей $x = L$, в соответствии с типом распределения потоков (рис. 2.12), используя соотношения п. 2.2.4.

По полученным значениям концентраций $c(L, t + \Delta t_{\max})_k^j$ вычисляем парциальные давления компонентов по адсорберам при $x = L$

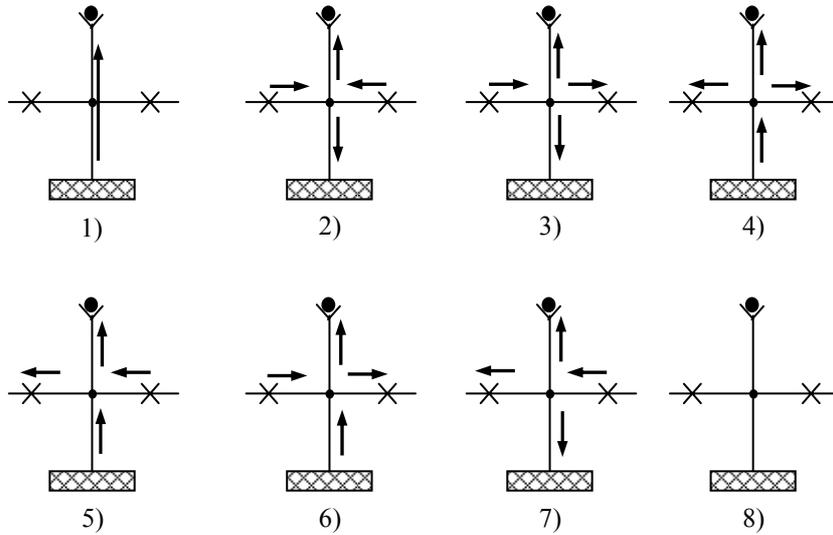


Рис. 2.12. Типы распределения потоков на выходе адсорбера

$$p_k^j(L, t + \Delta t_{\max}) = c(L, t + \Delta t_{\max})_k P_j(t + \Delta t_{\max}), \quad j = \overline{1, N_A}, \quad k = \overline{1, N_{кс}}.$$

Шаг 8. Для времени $t + \Delta t_{\max}$ рассчитываются парциальные давления компонентов по адсорберам в твердой и газовой фазе.

Шаг 8.1. Для полученных в п. 7 значений парциальных давлений, используемых для граничных условий, вычисляются величины сорбции по выражению:

$$a(t + \Delta t_{\max}) = a^p(\mathbf{p}) + (a(t) - a^p(\mathbf{p})) e^{-\beta \Delta t_{\max}}.$$

Последнее выражение является аналитическим решением уравнения кинетики $\frac{da(t + \Delta t_{\max})}{d\tau} = \beta(a^p(\mathbf{p}) - a(t + \Delta t_{\max}))$ при начальном условии $a_0 = a(t)$. Величины $a^p(\mathbf{p})$ находятся из системы уравнений изотерм (2.70) – (2.71).

Вычисляются значения скоростей поглощения компонентов по уравнениям кинетики (2.69).

Шаг 8.2. В соответствии с разностной схемой уравнения материального баланса вида:

$$\varepsilon \frac{P_{k_l, m}^j - P_{k_{l-1}, m}^j}{\Delta t_{\max}} + RT \frac{a_{k_l, m}^j - a_{k_{l-1}, m}^j}{\Delta t_{\max}} + \frac{w_m^j P_{k_l, m}^j - w_{m-1}^j P_{k_l, m-1}^j}{\Delta h_{\max}} = 0$$

вычисляются значения парциальных давлений $p_{k_l,m}^j$. Значения величин $a_{k_l,m}^j$ находят из аналитического решения дифференциального уравнения кинетики: $a_{k_l,m}^j = a_{k_l,m}^{p_j} (p_{k_{l-1},m}^j) + (a_{k_{l-1},m}^j - a_{k_l,m}^{p_j} (p_{k_{l-1},m}^j)) e^{-\beta \cdot \Delta t_{\max}}$.

В результате последних расчетов для адсорберов с типом течения 1 и 4 определяются значения парциальных давлений на выходах из адсорберов.

Шаг 9. По уравнениям связи материальных потоков (2.76 – 2.85) вычисляются значения концентраций компонентов продукционной, сбросовой, промывочной газовой смеси.

Шаг 10. Вычисляется значение невязки расчетных данных из условия, что изменение количества вещества компонента, находящегося в адсорбере, по отношению к начальному, равно количеству поступившего вещества в адсорбер и вышедшего из него за данный промежуток времени.

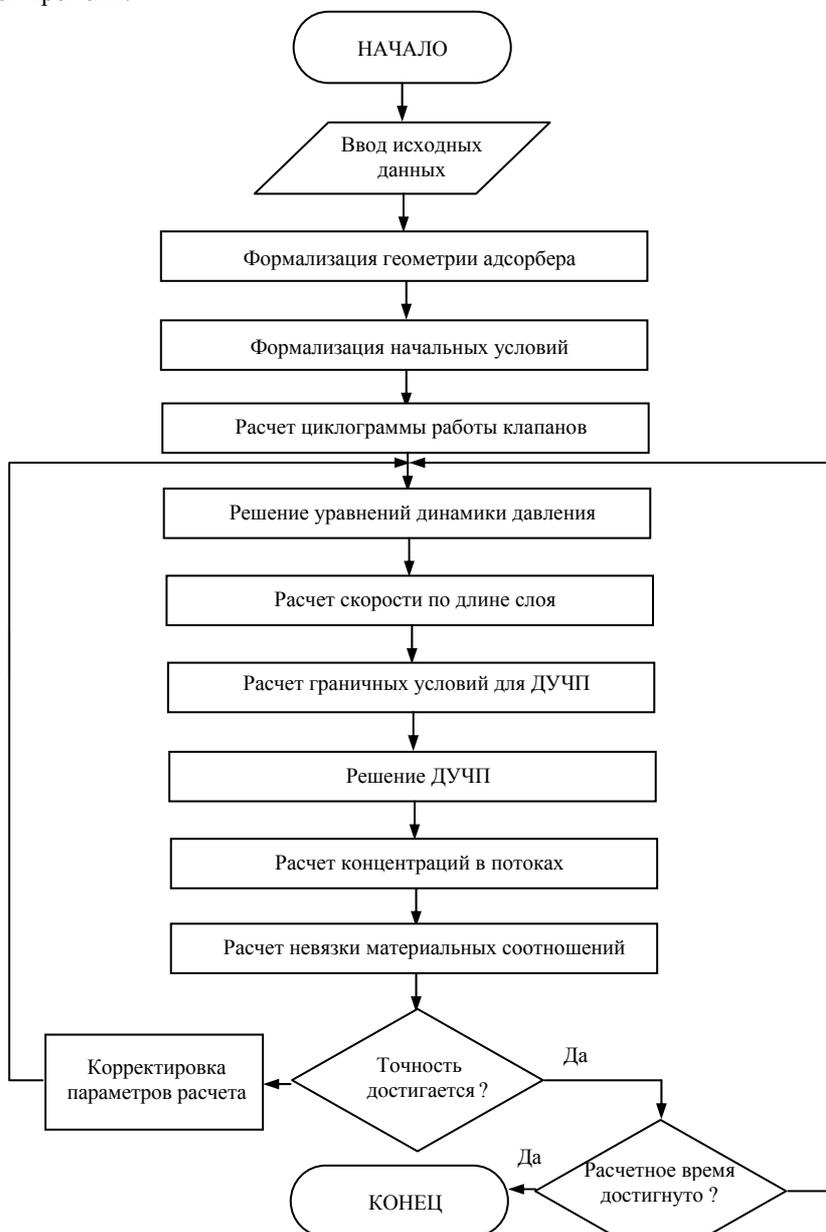


Рис. 2.13. Упрощенная блок-схема алгоритма расчета математической модели

$$E = \int_0^{\Delta t_{\max}} G^{\text{ВХ}} c^{\text{ВХ}} d\tau - \int_0^{\Delta t_{\max}} G^{\text{ВЫХ}} c^{\text{ВЫХ}} d\tau =$$

$$= \int_0^L (a(x, \Delta t_{\max}) + c(x, \Delta t_{\max})) d\tau - \int_0^L (a(x, 0) + c(x, 0)) d\tau.$$

Вычисляется оценка точности по выражению:

$$\xi = \frac{|E|}{\int_0^{\Delta t_{\max}} G^{\text{вх}} c^{\text{вх}} d\tau} \cdot 100 \% .$$

При выполнении условия $\xi < \xi_{\text{зад}}$ расчет продолжается с шага 5, иначе выполняется происходит уменьшение шага Δt_{\max} и расчет продолжается с шага 5.

Упрощенная блок схема алгоритма расчета математической модели представлена на рис. 2.13.

2.8. ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ И ОЦЕНКА АДЕКВАТНОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССА АДсорбЦИОННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ

Разработка математического описания установки КБА, приведенная выше, представляет собой этап структурной идентификации – качественное описание процесса с помощью тех или иных операторов.

Для сопоставления разработанного математического описания реальному технологическому процессу необходимо ввести в модель количественную информацию в виде параметров модели, отвечающих данному процессу. Процедура определения (оценивания) входящих в структурную математическую модель неизвестных величин носит название параметрической идентификации.

Решение обратной задачи параметрической идентификации (ОЗПИ) с использованием дополнительных условий в виде экспериментальных данных определяет неизвестные параметры, входящие в математическое описание.

Согласно классификации, приведенной в работе [39], выделяют следующие типы обратных задач: ретроспективные, граничные, коэффициентные, геометрические.

В данной работе необходимо определить неизвестные коэффициенты уравнений математического описания процесса адсорбционного разделения воздушной смеси, поэтому будем рассматривать коэффициентную обратную задачу.

Представим ОЗПИ в операторной форме. Пусть ϑ – искомая величина, рассматриваемая как элемент некоторого нормированного пространства Y ; y – переменная состояния процесса, принадлежащая нормированному пространству Y , y является функцией от $x = [x_1, \dots, x_n]^T \in \Omega$, где Ω – область пространственных переменных), таким образом, математическая модель рассматриваемого процесса в общем виде может быть представлена соотношением $y = \Lambda(x, \vartheta)$. Λ – заданный оператор, порожденный принятой моделью процесса $\Lambda: Y \rightarrow Y$; f – известные входные величины, рассматриваемые как элементы нормированного пространства F ; связаны с переменными состояния процесса через оператор $B: f = By$, что $B: Y \rightarrow F$.

Задача заключается в нахождении такого ϑ , приводящего функционал невязки

$$J(\vartheta) = \frac{1}{2} \|\Lambda\vartheta - f\|_F^2 \quad (2.93)$$

к минимуму, при точно заданных входных величинах $\Lambda = By$ и f . При этом в качестве f принимаются значения переменной состояния процесса в некоторых точках области Ω . Эти точки могут быть фиксированными или изменять свое положение с течением времени.

Однако такой метод решения ОЗПИ непосредственно применить нельзя в связи с тем, что задача (2.93) обычно неустойчива (обратный оператор Λ^{-1} неограничен) и вместо точных данных Λ и f на практике известны лишь некоторые приближения к ним Λ_h и f_g .

Неточность задания исходных данных может быть, в частности, обусловлена приближенным количественным описанием известных параметров и наличием случайных и систематических ошибок, имеющих место при измерении f . Кроме того, переход к приближенным исходным данным связан с тем, что для численного решения (2.93) строится соответствующий вычислительный алгоритм, в котором оператор Λ обычно аппроксимируется некоторым конечноразностным оператором, а функции f заменяются конечномерными аналогами.

С учетом сделанных замечаний задача идентификации сводится к определению $\{\Lambda_h, f_g\}$ по совокупности некоторого приближения $\vartheta_{h\delta}$, к искомому решению, которое при стремлении погрешностей в задании оператора и правой части к нулю обеспечивало бы лучшие в некотором смысле приближения к точному решению задачи (2.93). Процесс параметрической идентификации схематически показан на рис. 2.13. Сравнение f_g и результатов решения прямой задачи $\Lambda_h \vartheta$ для заданного приближения к варьируемой величине ϑ позволяет сделать заключение о правильности «настройки» математической модели под числовые значения ϑ , т.е. о количественной адекватности физическому процессу.

Применительно к процессу адсорбционного разделения газовой смеси вычислительная модель будет содержать ряд предварительных этапов:

а) Формализация экспериментальных данных.

В качестве экспериментальных данных для математической модели процесса концентрирования кислорода целесообразно использовать: зависимость концентрации кислорода в продукционной смеси от ее расхода $C_{O_2}(G_{\text{мск}})$; зависимость концентрации кислорода в сбросовой смеси от ее расхода $C_{O_2}(G_{\text{бск}})$.

Зависимости $C_{O_2}(G_{\text{мск}})$ и $C_{O_2}(G_{\text{бск}})$ изначально представляют собой таблично заданные функции. Табличные данные аппроксимируются аналитической функцией $\phi(G)$. В результате получаем две аналитически заданные функции $\phi_1(G_{\text{мск}})$ и $\phi_2(G_{\text{бск}})$.

б) Формализация начального вектора идентифицируемых параметров.

Для процесса концентрирования кислорода к идентифицируемым параметрам отнесем: кинетические коэффициенты β_k , $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$; параметры изотерм сорбции $a_{k_{\infty}}$, b_k , $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$. Число идентифицируемых параметров в зависимости от числа компонент смеси определяется как $3N_{\text{кс}}$. Таким образом, для смеси N_2 – O_2 необходимо идентифицировать 6 параметров.

В качестве начальных значений β_k , $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$ приняты значения $\beta_{O_2} = 64 \text{ с}^{-1}$, $\beta_{N_2} = 40 \text{ с}^{-1}$ (по данным [3]). Начальные значения коэффициентов $a_{k_{\infty}}$, b_k , $k = \overline{1, N_{\text{кс}}}$ принимаются в соответствии с изотермами чистых компонентов (прил. 3).

в) Формализация минимизируемого критерия.

Для решения задачи параметрической идентификации методами безусловной оптимизации необходимо формализовать критерий оптимизации, экстремум которого обеспечивается при «истинном» значении идентифицируемых параметров. В качестве критерия оптимизации выберем функционал вида:

$$\Psi(\varpi, \mathbf{a}) = I_1 + I_2, \quad (2.94)$$

где ϖ – вектор идентифицируемых параметров; \mathbf{a} – вектор определенных параметров математического описания; I_1 , I_2 – интегралы вида:

$$I_1 = \int_0^{\overline{G}_{\text{мск}}} (C_{O_2}^{\text{расч}}(G_{\text{мск}}) - C_{O_2}^{\text{эксп}}(G_{\text{мск}}))^2 dG_{\text{мск}}; \quad (2.95)$$

$$I_2 = \int_0^{\overline{G}_{\text{бск}}} (C_{O_2}^{\text{расч}}(G_{\text{бск}}) - C_{O_2}^{\text{эксп}}(G_{\text{бск}}))^2 dG_{\text{бск}}. \quad (2.96)$$

Для получения расчетных зависимостей $C_{O_2}^{\text{расч}}(G_{\text{мск}})$ и $C_{O_2}^{\text{расч}}(G_{\text{бск}})$ необходимо провести ряд расчетов математической модели для различной производительности установки.

Функционал (2.94 – 2.96) заменим выражением вида:

$$\Psi(\varpi, \mathbf{a}) = \sum_{k=1}^{N_{\text{рт}}} (C_{O_2k}^{\text{расч}}(G_{\text{мск}k}^{\text{расч}}) - \phi_1(G_{\text{мск}k}^{\text{расч}}))^2 + (C_{O_2k}^{\text{расч}}(G_{\text{бск}k}^{\text{расч}}) - \phi_2(G_{\text{бск}k}^{\text{расч}}))^2.$$

Последнее выражение представляет собой сумму квадратичных отклонений расчетных концентраций от значений концентраций, полученных при соответствующих расходах аппроксимацией экспериментальных данных (рис. 2.11).

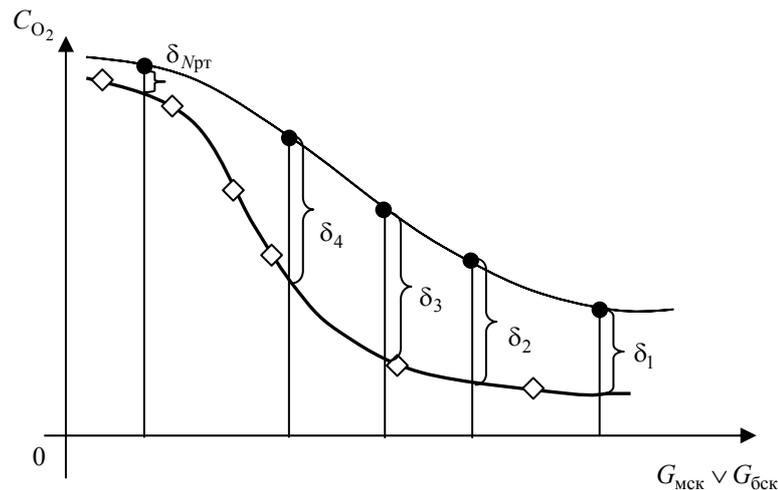


Рис. 2.11. Формализация критерия оптимизации:

● – расчетные данные; ◇ – экспериментальные

г) Идентификация неопределенных параметров.

Поиск вектора идентифицируемых параметров, при которых достигается минимум функционала (2.94 – 2.96), произведем методами безусловной оптимизации. Вычислительную оптимизационную процедуру построим на основе метода Нелдера–Мида.

Упрощенная блок-схема параметрической идентификации представлена на рис. 2.12.



Рис. 2.12. Блок-схема параметрической идентификации

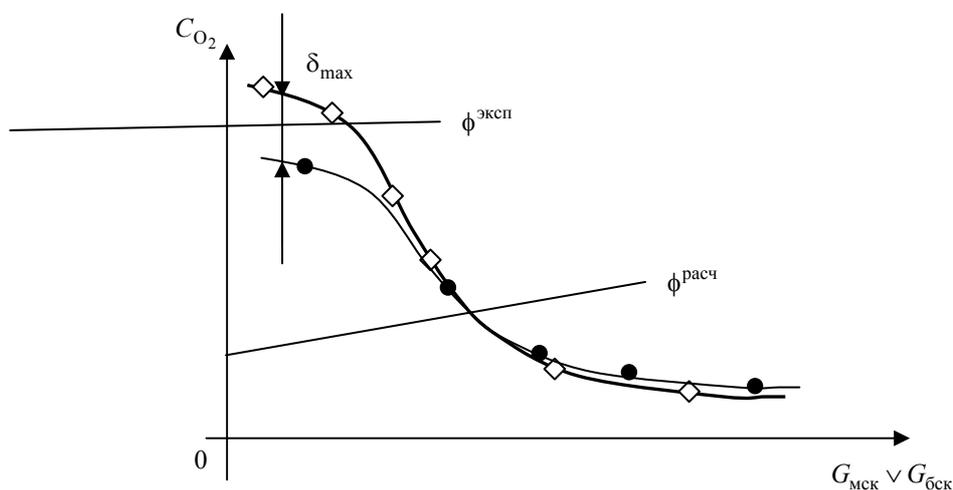


Рис. 2.13. Расчет точности математической модели

Завершающим этапом разработки математической модели является проверка адекватности расчетных данных экспериментальным.

Для оценки точности расчетных данных целесообразно использовать экспериментальные данные, отличные от тех, которые были использованы на этапе параметрической идентификации.

Для анализа точности воспользуемся функцией вида:

$$\delta(G) = \left(\frac{\phi_{\text{эксп}} - \phi_{\text{расч}}}{\phi_{\text{эксп}}} \right)^2 \cdot 100 \% . \quad (2.98)$$

Таким образом, для немонотонной функции $\delta(G)$ минимальная точность расчетных данных по отношению к экспериментальным достигается при условиях:

$$\frac{d\delta}{dG} = 0, \quad \frac{d^2\delta}{dG dG} < 0. \quad (2.99)$$

Если условия (2.99) не выполняются для внутренних точек диапазона варьирования величины G , то исследуются граничные значения функции $\delta(G)$.

3. ИМИТАЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА РАЗДЕЛЕНИЯ ГАЗОВОЙ СМЕСИ МЕТОДОМ КОРОТКОЦИКЛОВОЙ БЕЗНАГРЕВНОЙ АДсорбЦИИ

Основной целью имитационных исследований является определение влияния различных параметров на характер протекания процесса адсорбционного разделения газовой смеси.

Основные параметры и диапазоны их изменения приведены в табл. 3.1.

Таблица 3.1

Параметры	Диапазон изменения
Изменения внешнего давления	–
Время полуцикла	5...40 с
Число адсорберов в схеме	2...5 шт.
Влажность разделяемой смеси	0...8 % об.
Величина обратной продувки	0...60 %
Отбор дыхательной смеси	30...80 нл/мин
Скорость подъема давления в адсорбере	0,1...1,1 атм/с
Периодическое изменение внешнего давления	0,002...0,04 Гц
Сопротивление дыхания человека	В соответствии с экспериментальными данными с аппарата «искусственные легкие»
Тип сорбента	NaX, CaX, LiLSX
Эквивалентный диаметр гранул сорбента	1...2,5 мм
Соотношение длины слоя к диаметру	2...6

3.1. ИМИТАЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ И АНАЛИЗ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 3.1 представлена зависимость сопротивления от времени, создаваемого дыханием человека. Данные получены на аппарате «искусственные легкие» и используются при имитационном моделировании.

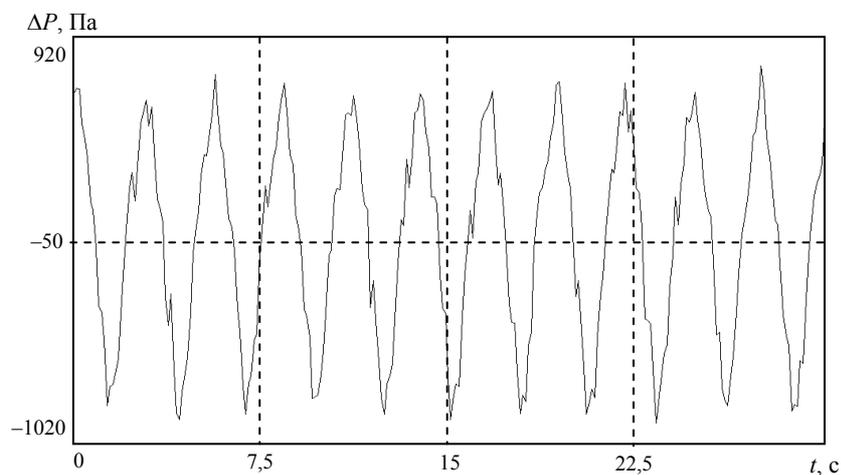


Рис. 3.1. Сопротивление, создаваемое дыханием человека

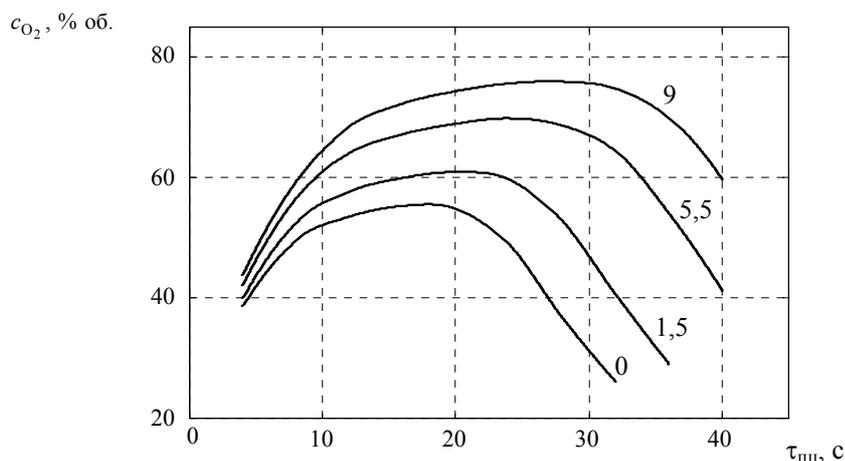


Рис. 3.2. Зависимость концентрации кислорода от времени полуцикла: высота полета – 0; 1,5; 5,5; 9 км

На рис. 3.2 представлены зависимости концентрации кислорода от времени полуцикла для различных полетных высот. Из анализа рис. 3.2 следует, что зависимость продукционной концентрации кислорода от времени полуцикла при некотором значении достигает максимального значения. При увеличении высоты полета происходит смещение максимума в сторону увеличения времени полуцикла, а также снижается

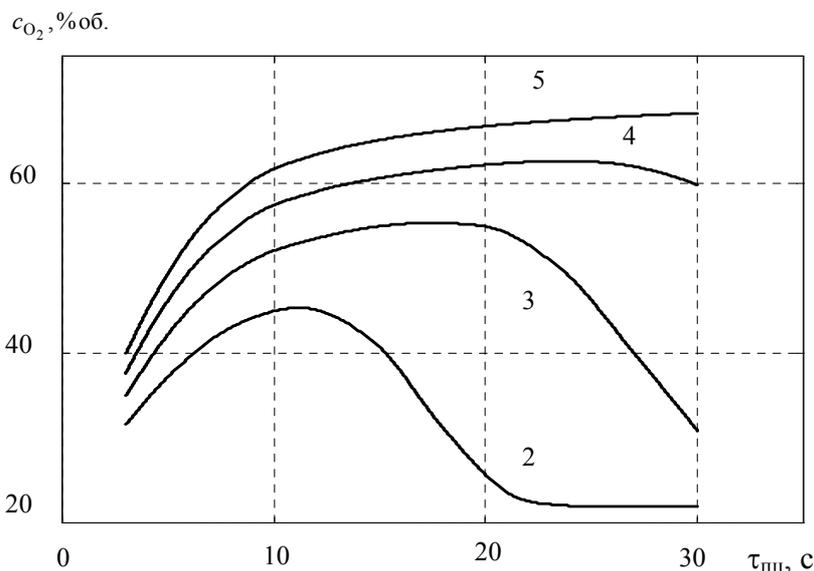


Рис. 3.3. Зависимость концентрации кислорода от времени полуцикла: число адсорберов – 2; 3; 4; 5 шт.

чувствительность концентрации к изменению времени полуцикла в области максимума характеристик. Наибольшая чувствительность и линейность характеристик фиксируется в области больших проскоковых концентраций азота.

На рис. 3.3 представлены зависимости концентрации кислорода от времени полуцикла для схем с различным числом адсорберов. Из анализа рис. 3.3 следует, что оптимальное время полуцикла для числа адсорберов 2, 3, 4, 5 приближенно кратно числам 1, 1,5, 2, 2,5 (рис. 3.3).

На рис. 3.4 представлены зависимости концентрации продукционного кислорода от концентрации паров воды в исходной смеси для различного времени полуцикла. Из анализа рис. 3.4 следует, что наличие паров воды в разделяемой смеси во всех случаях снижает выходную концентрацию кислорода. С ростом влажности исходной смеси, выходная концентрация кислорода снижается тем быстрее, чем выше время полуцикла. При определенных соотношениях влажности и времени полуцикла установка практически полностью теряет способность адсорбционного разделения. Это объяснено невозможностью полной десорбции воды при данных условиях, что вызывает потерю активности сорбента по кислороду и азоту.

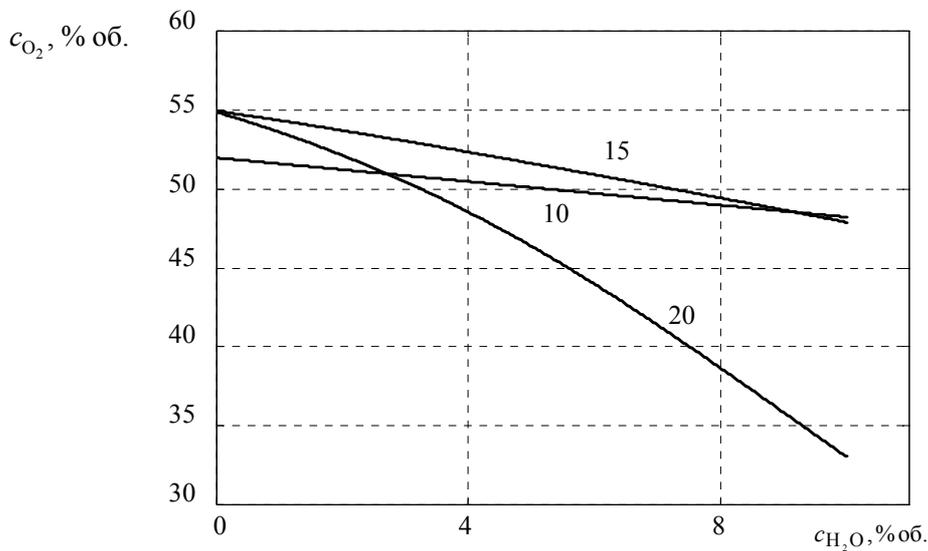


Рис. 3.4. Зависимость концентрации производного кислорода от концентрации паров воды в исходной смеси: время полуцикла – 10; 15; 20 с

На рис. 3.5 представлены зависимости концентрации производного кислорода от величины обратной продувки для различного времени полуцикла. Из анализа рис. 3.5 следует, что зависимость выходной концентрации кислорода от величины обратной продувки носит экстремальный характер. При уменьшении времени полуцикла кривые стремятся к виду характеристик с насыщением.

На рис. 3.6 представлены зависимости концентрации производного кислорода от величины производительности установки для различного времени полуцикла. Из анализа рис. 3.6 следует, что концентрация кислорода по отношению к производительности установки обладает высокой чувствительностью. Максимальной концентрации (при постоянной производительности) соответствует некоторое оптимальное значение времени полуцикла.

На рис. 3.7 представлена зависимость концентрации производного кислорода от скорости подъема давления в адсорбере. Из анализа рис. 3.7 следует, что существует оптимальная скорость подъема давления в адсорбере. Оптимальная скорость составляет приблизительно

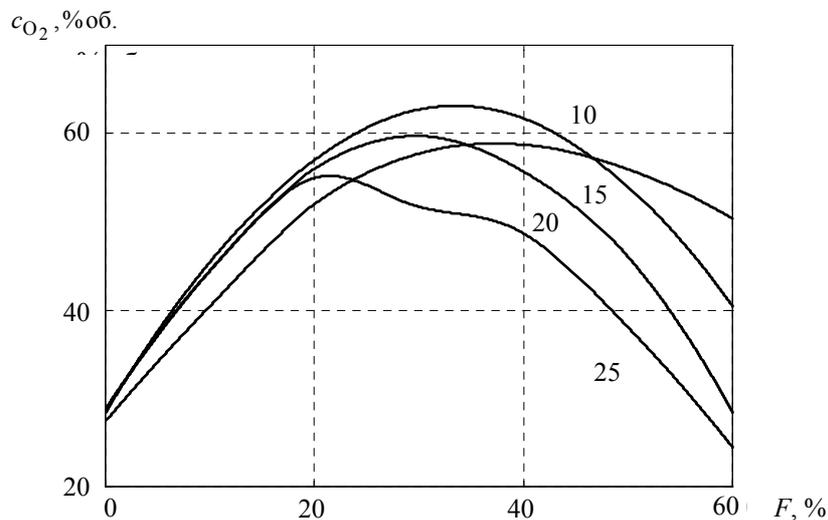


Рис. 3.5. Зависимость концентрации производного кислорода от величины обратной продувки: время полуцикла – 10; 15; 20; 25 с

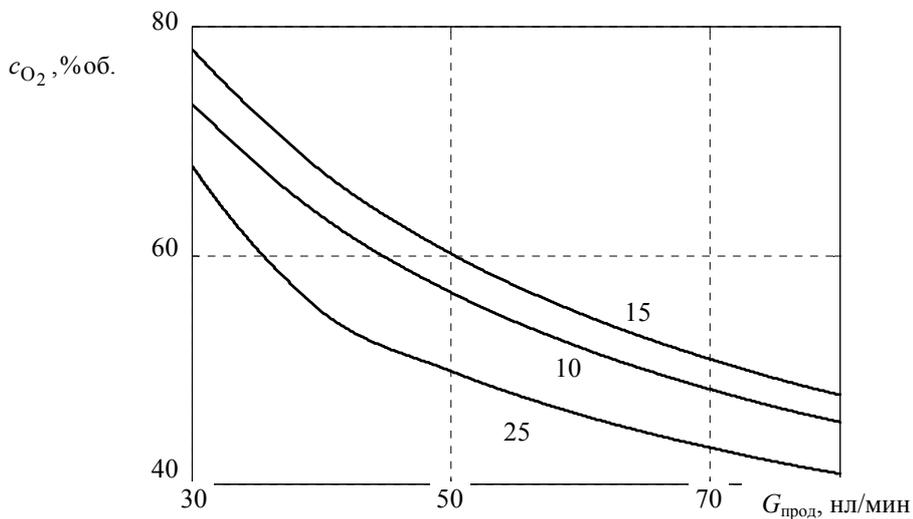


Рис. 3.6. Зависимость концентрации производного кислорода от производительности: время полуцикла – 10; 15; 25 с

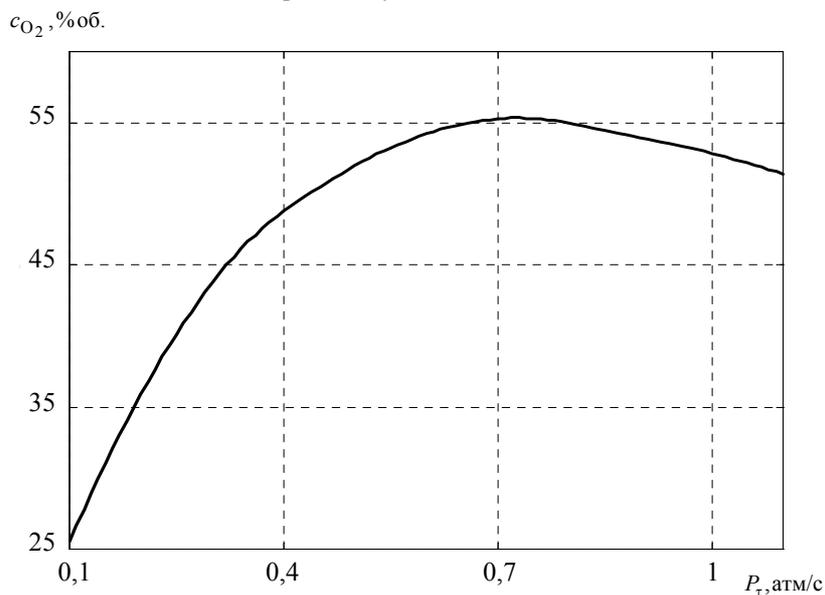


Рис. 3.7. Зависимость концентрации производного кислорода от скорости подъема давления в адсорбере

0,7 атм/с. Данное значение превышает рекомендуемое 0,5 атм/с. Значение 0,5 атм/с установлено из условия механической сохранности сорбента. Для экспериментальных зависимостей $c_{\text{O}_2}(P_{\text{т}})$ характерны наиболее низкие значения концентраций в правой части, что связано с явлением «запирания» кислорода в сорбенте.

На рис. 3.8 представлена зависимость изменения концентрации кислорода в производной смеси от частоты колебания барометрического давления на различных высотах. Основой эксперимента является получение отклика системы адсорбционного разделения на гармоническое изменение полетной высоты (рис. 3.7). Методика основана на предположении, что различным полетным режимам соответствуют различные частоты изменения барометрического давления. Из анализа рис. 3.8 видно, что для системы адсорбционного разделения характерны свойства фильтра высоких частот, а также существенная нелинейность, связанная с невоспроизводимостью характеристик при различных начальных условиях.

На рис. 3.9 представлены зависимости соотношения средних расходов производной и промывочной к питающей газовой смеси в зависимости от разности давлений исходной смеси и барометрического

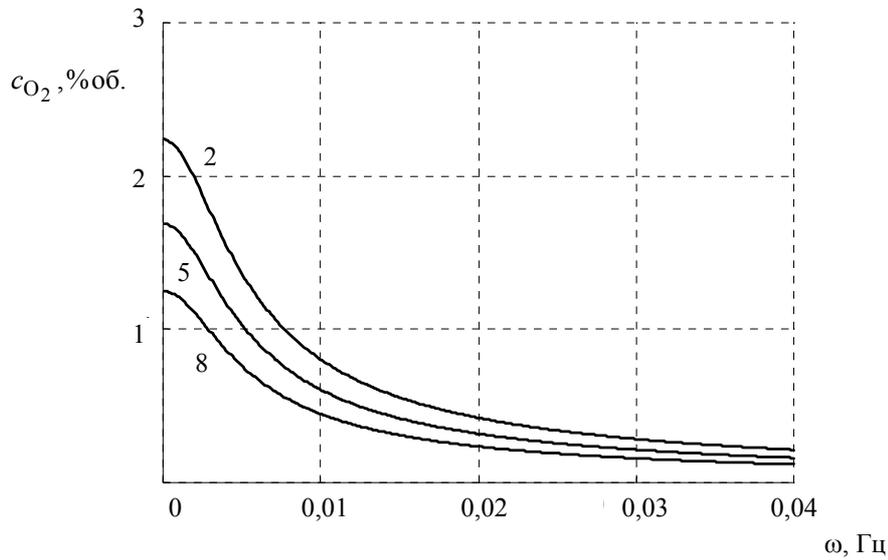


Рис. 3.8. Зависимость амплитуды колебаний выходной концентрации кислорода от частоты изменения полетной высоты: полетная высота – 2; 5; 8 км

давления (давления за бортом). Из анализа рис. 3.9 следует, что изменение перепада давления сорбция–десорбция более чем на $\approx 1,5$ атм не оказывает значительного влияния на величину относительных средних расходов продукционной и промышленной смеси. Данное свойство приобретает особое значение при реализации управления выходной концентрацией изменением объема обратной продувки, так как обеспечивается линейность статических характеристик.

На рис. 3.10 представлена зависимость выходной концентрации кислорода от потери активности лобового слоя сорбента. Потеря активности может возникать по причине избыточного поглощения воды слоем сорбента и механического разрушения. Из анализа рис. 3.10 следует, что потеря активности лобового слоя сорбента приводит к почти равномерному уменьшению выходной концентрации. В правой части кривой обнаруживается нелинейность. Наличие нелинейности может быть объяснено уменьшением соотношения длины сорбционного слоя к его диаметру и возрастанием эффектов, связанных с шириной размытия сорбционного фронта. Из данных условий опыта установлено, что данные эффекты начинают проявляться при достижении отношения активной длины слоя к диаметру величины 1,5 – 2.

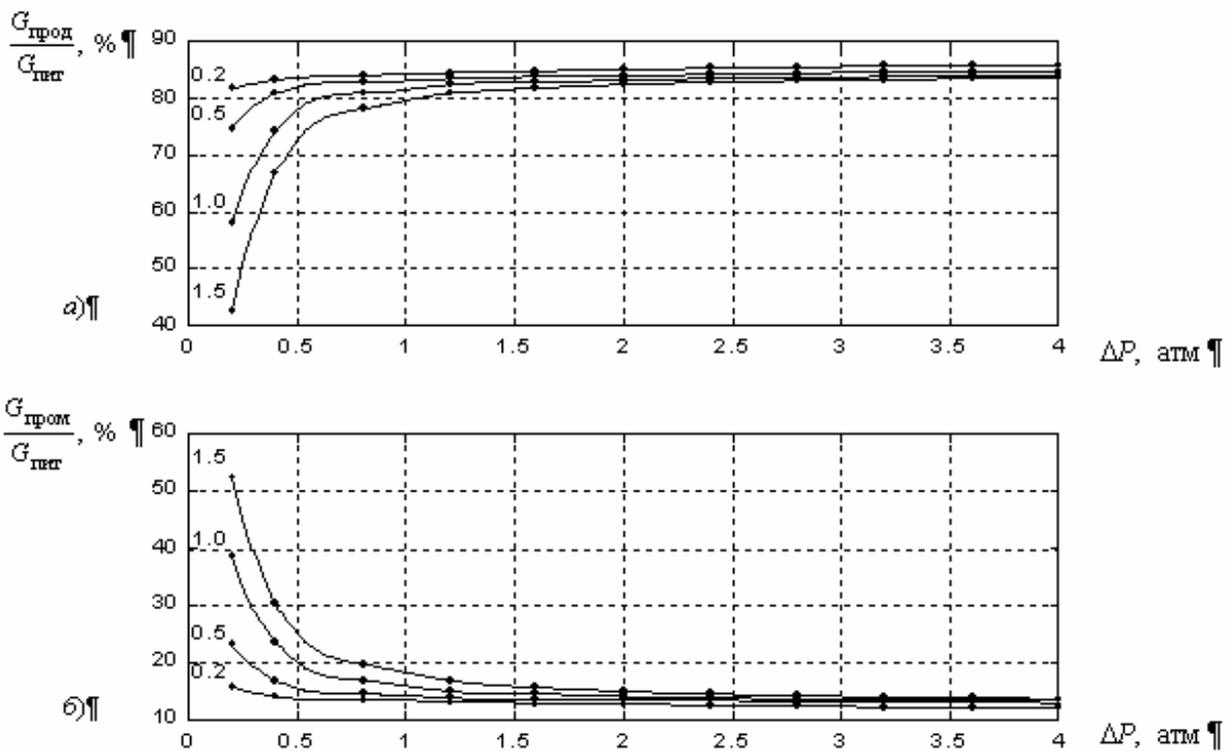


Рис. 3.9. Соотношение средних расходов:
 а – продукционной; б – промышленной и питающей газовой смеси в зависимости от величины $\Delta P = P_{\text{пит}} - P_{\text{бск}}$ для величин $P_{\text{бск}}: 0,2; 0,5; 1,0; 1,5$ атм

c_{O_2} , % об.

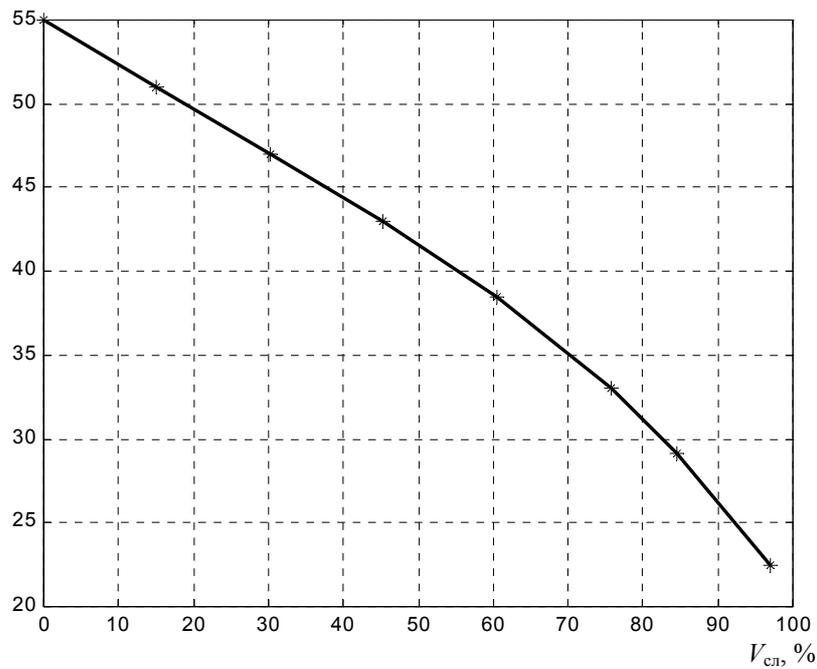


Рис. 3.10. Зависимость выходной концентрации кислорода от потери активности лобового слоя сорбента

На рис. 3.11 показана зависимость парциального давления кислорода в продукционной смеси от высоты подъема при разгерметизированной кабине. Режим разгерметизации соответствует состоянию равенства давлений на выходе продукционной и сбросовой смеси. Из анализа рис. 3.11 следует, что на малых высотах при нарушении герметизации наблюдается повышенное парциальное давление кислорода в дыхательной смеси. На высоте 3,5 км кривая $p_{O_2}(h_{пл})$ пересекает верхний предел физиологических норм и достигает нормальной концентрации 22 кПа на высоте 9 км. Таким образом, при разгерметизированной кабине необходима корректировка параметров процесса на малых высотах и целесообразна на высотах более 3,5 км.

На рис. 3.12 показана зависимость парциального давления кислорода в продукционной смеси от высоты подъема при герметичной кабине. Режим герметизации соответствует состоянию, где давление на выходе сбросовой смеси равно барометрическому давлению, а давление в кабине превышает барометрическое. Из анализа рис. 3.12 следует,

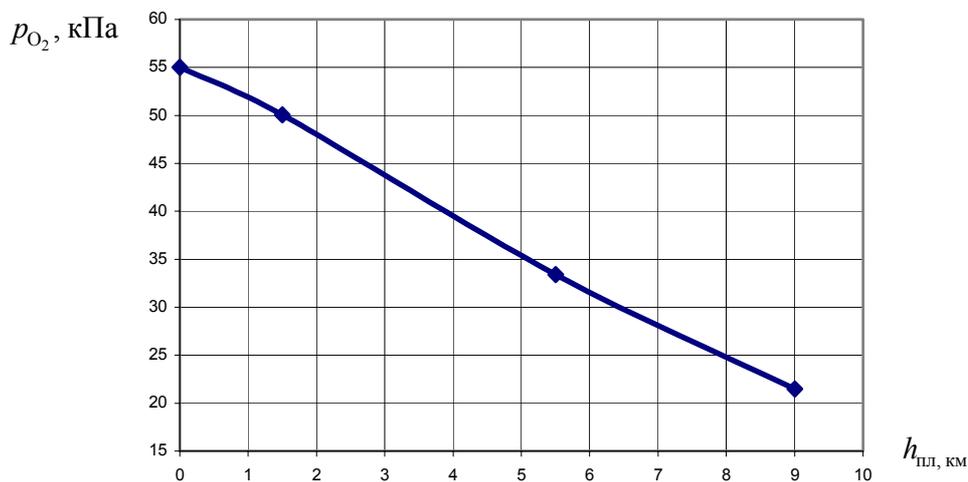


Рис. 3.11. Зависимость парциального давления кислорода в продукционной смеси от высоты подъема (разгерметизированная кабина)

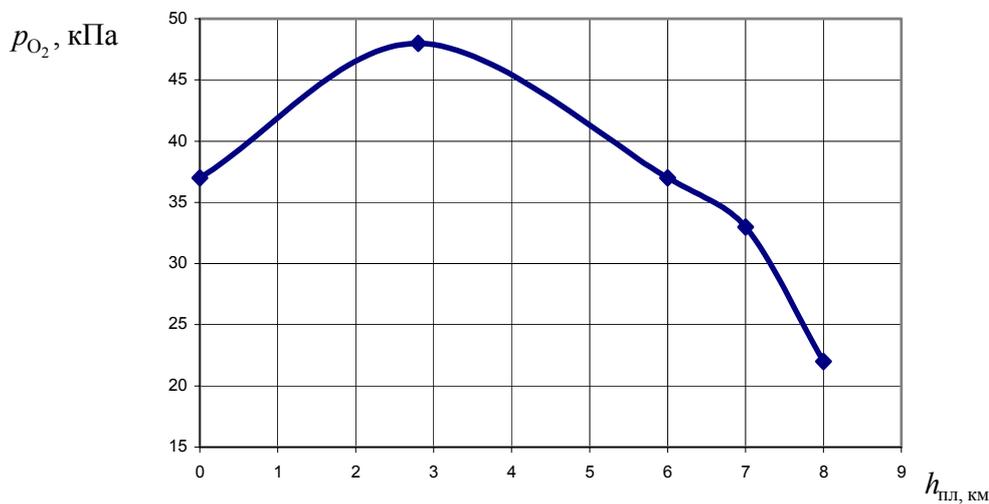


Рис. 3.12. Зависимость парциального давления кислорода в производственной смеси от высоты подъема (герметичная кабина)

что на кривой $p_{O_2}(h_{плл})$ имеются две характерные точки. Первая соответствует максимуму парциального давления по высоте и проявляется на высоте, приблизительно равной 3 км. Вторая определяет начало резкого уменьшения парциального давления кислорода в дыхательной смеси и находится в области 7 км.

На рис. 3.13 представлены зависимости средней за цикл производственной концентрации кислорода от времени. Из анализа рис. 3.13 следует, что начальный этап продуцирования характеризуется повышением концентрации кислорода в производционном потоке. Количество циклов, требуемое для стабилизации концентрации, приблизительно составляет 40...70. Количество циклов, требуемых для стабилизации средней концентрации, уменьшается с ростом длительности стадии адсорбции. В правой части кривых наблюдается низкочастотная составляющая. Таким образом, при выходе установки адсорбционного разделения на режим необходимо компенсировать повышенную концентрацию производционного кислорода.

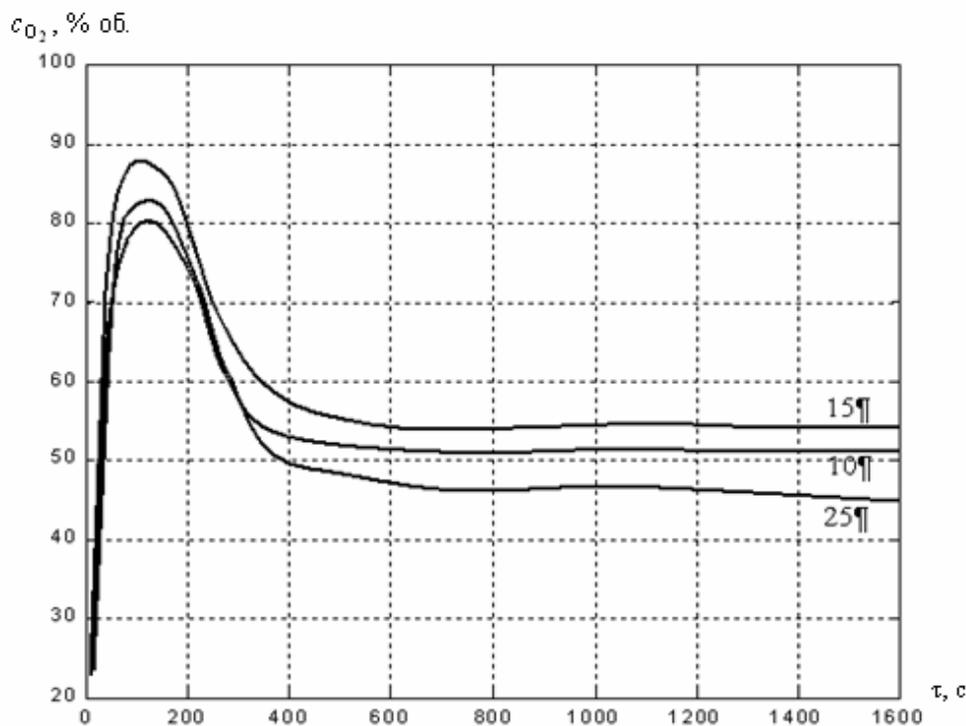


Рис. 3.13. Зависимость средней за цикл концентрации кислорода от времени: время полуцикла 10; 15; 25 с

На рис. 3.14 представлена зависимость средней за цикл производственной концентрации кислорода от времени, при скачкообразном изменении времени полуцикла на 1000-й с. Время полуцикла изменяется от 10 до 18 с. Таким образом, переходный процесс можно охарактеризовать постоянной времени ($\approx 40\tau_{плл}$), т.е. имеет место высокая инерционность и динамическая линейность. Повышение концентрации кислорода относительно установившегося значения не является характерной особенностью начала протекания процесса адсорбционного разделения.

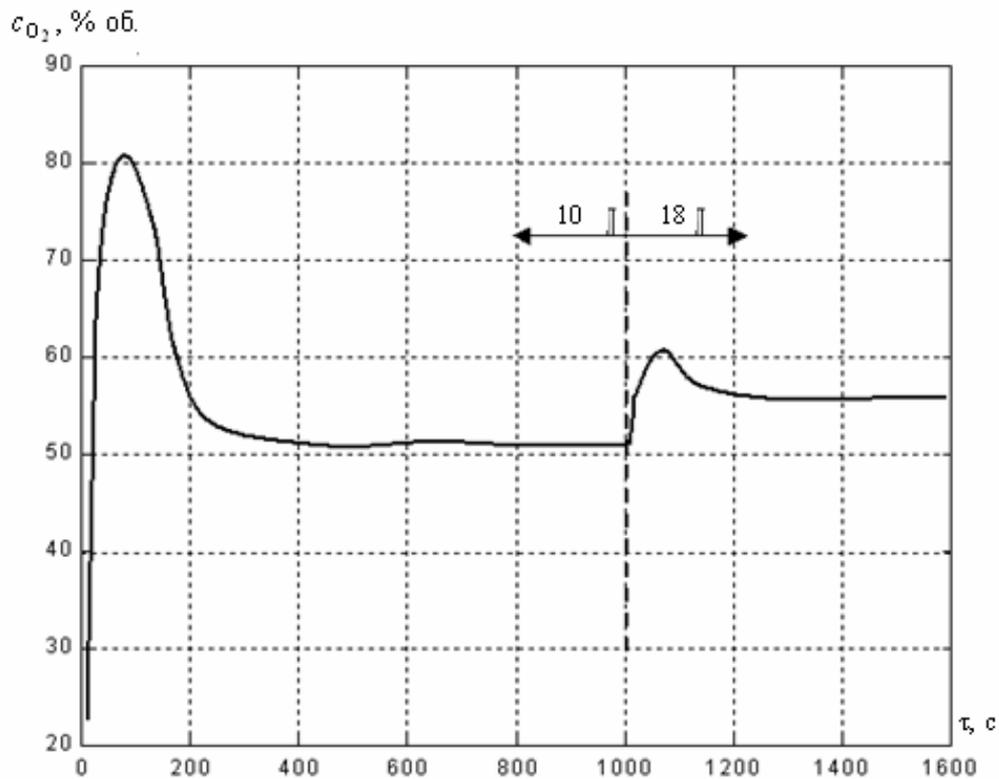


Рис. 3.14. Зависимость средней за цикл концентрации кислорода от времени при скачкообразном изменении времени полуцикла от 10 до 18 с.

На рис. 3.15 представлена зависимость средней за цикл продукционной концентрации кислорода от времени, при скачкообразном изменении величины обратной продувки на 1000-й с. Величина обратной продувки изменяется от 20 до 35 % от продукционной смеси. Таким образом, переходный процесс можно охарактеризовать постоянной времени ($\approx 10\tau_{\text{пц}}$), т.е. имеет место высокая инерционность и динамическая линейность.

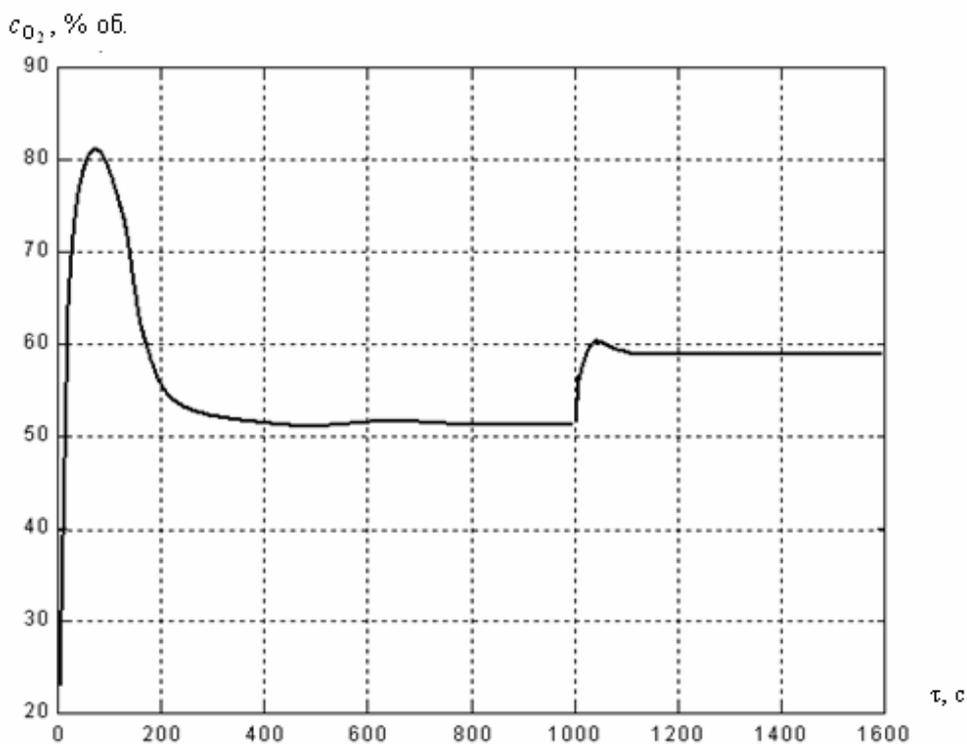


Рис. 3.15. Зависимость средней за цикл концентрации кислорода от времени при скачкообразном изменении величины обратной продувки от 20 до 35 %

На рис. 3.16 показаны зависимости скорости потока в адсорбере от времени для различных сечений «адсорбера». Графики соответствуют моделированию безударных клапанов. Из анализа рис. 3.16 следует, что для стадии десорбции характерны более низкие значения, чем для стадии адсорбции. Во всех сечениях имеются характерные участки с постоянной скоростью потока во времени.

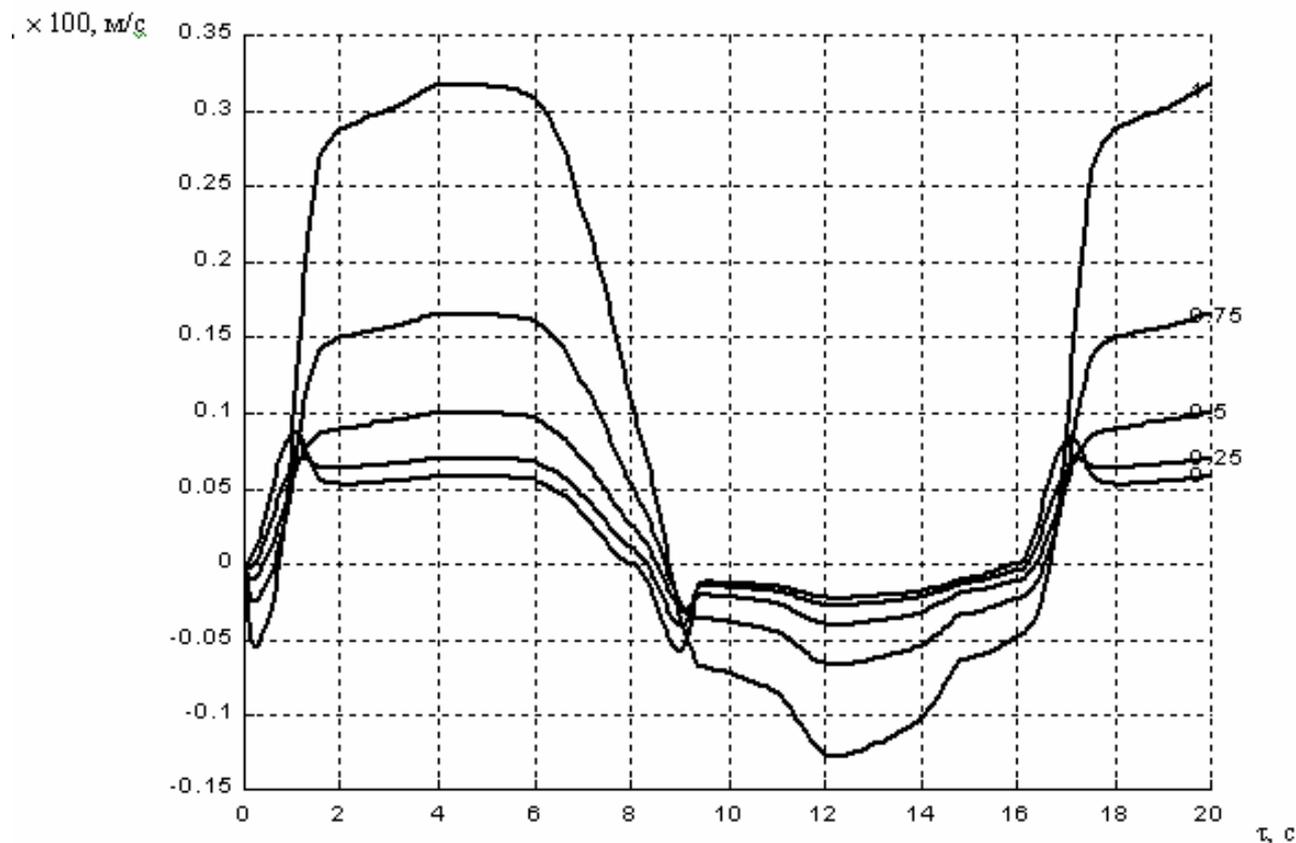


Рис. 3.16. Зависимость скорости потока в адсорбере от времени: сечение адсорбера 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1

На рис. 3.17, показаны зависимости концентрации кислорода в продукционном потоке от производительности установки. Кривые соответствуют различным типам сорбентов. Цеолиты типа NaX, CaX позволяют получать сравнительно низкие производственные концентрации кислорода. Таким образом, применение цеолитов NaX, CaX в БКДУ (без изменения конструктивных характеристик) возможно для получения малоконцентрированных кислородом дыхательных смесей, пригодных для дыхания на малых высотах. При легочной вентиляции 60 нл/мин (2 пилота) рекомендуемая высота полета до 2,5...3 км. При легочной вентиляции 30 нл/мин (1 пилот) высота может быть увеличена до 4 км.

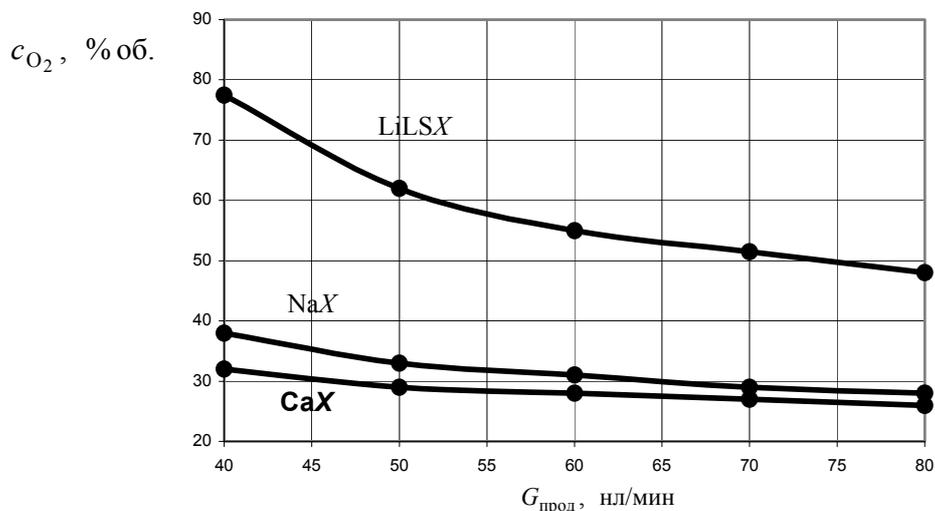


Рис. 3.17. Зависимости концентрации продукционного кислорода от производительности установки: цеолит LiLSX, NaX, CaX

На рис. 3.18 представлена зависимость давления в адсорберах от времени. Из анализа рис. 3.18 следует, что для процесса адсорбционного разделения в БКДУ характерно наличие длительного участка с постоянным давлением в адсорберах. Согласно работе [7] постоянство давления обеспечивает равномерное движение сорбционного фронта. Имеется запас на увеличение скорости подъема и сброса давления.

На рис. 3.19 представлена зависимость изменения расхода промывочной смеси во времени для постоянного проходного сечения дросселя. Положительное значение расхода соответствует потоку через дюзу на выходе из адсорбера. Из анализа рис. 3.19 следует, что изменение расхода носит волнообразный характер. Полученные характеристики не отличаются сложностью, что подтверждает возможность эффективного управления расходом промывочной смеси.

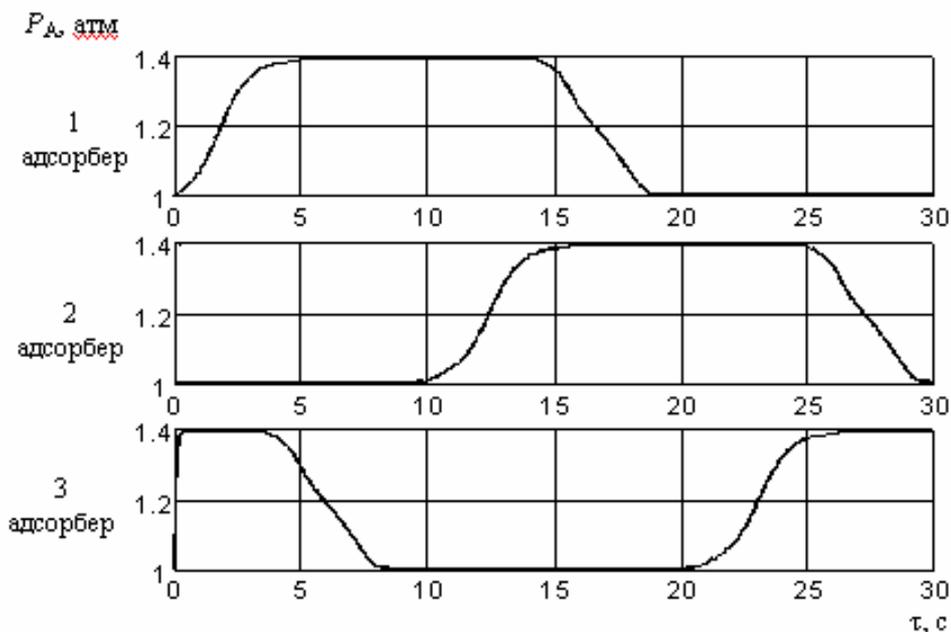


Рис. 3.18. Изменение давления в адсорберах во времени

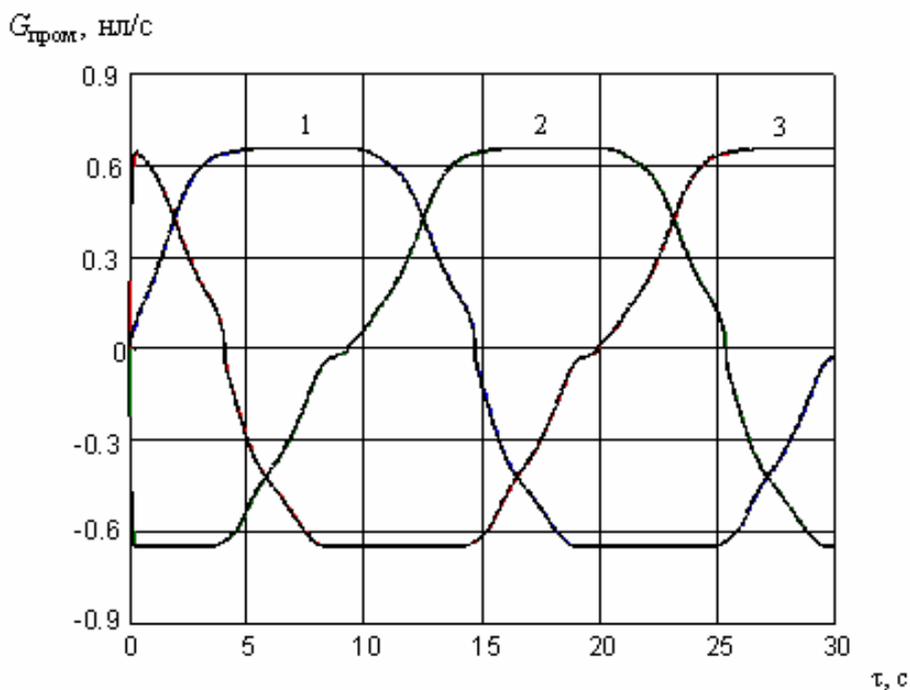


Рис. 3.19. Изменение расхода промывочной смеси во времени для постоянного проходного сечения дросселя: адсорберы 1, 2, 3

3.2. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ИМИТАЦИОННЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

В результате проведенных имитационных исследований было определено влияние различных параметров (см. табл. 3.1) на характер протекания процесса разделения газовой смеси методом КБА.

1. Оптимальное по концентрации значение времени полуцикла для различных высот подъема и схем с различным числом адсорберов.
2. Оптимальное значение скорости подъема давления в адсорбере.
3. Оптимальные значения объема обратной продувки для различного времени полуцикла.
4. Характеристики процесса при разделении смеси с высокой влажностью.
5. Реакция системы на гармоническое изменение барометрического давления.

Полученные результаты позволили выявить характерные особенности процесса концентрирования кислорода в БКДУ и использовать новые знания в разработке теоретических и практических аспектов проектирования систем автоматического управления.

4. СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССА АДСОРБЦИОННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ ГАЗОВОЙ СМЕСИ

В данном разделе рассматриваются вопросы построения алгоритмов и систем управления процессом адсорбционного разделения газовой смеси по методу короткоциклового безнагревной адсорбции.

4.1. АНАЛИЗ СОВРЕМЕННОГО СОСТОЯНИЯ В ОБЛАСТИ УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССАМИ АДСОРБЦИОННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ

В большинстве работ [13, 31, 47], посвященных исследованию процесса адсорбционного разделения газовой смеси по методу КБА, как правило, рассматриваются его технологические и конструкционные особенности, а вопросам разработки систем управления (СУ) уделяется второстепенная роль.

Несмотря на многообразие способов организации процесса адсорбционного разделения, остается открытым вопрос разработки систем управления процессом адсорбционного разделения в условиях динамического изменения параметров окружающей среды, свойств сорбента, потребления производственного газа, энерго-ресурсосбережения, отсутствия возможности оперативной оценки режима функционирования установок КБА.

Одним из важнейших этапов разработки алгоритмов и систем управления является анализ процесса КБА как объекта управления. Для решения этой задачи могут быть применены известные алгоритмы исследования, приводимые в работах [60 – 70]. Базовым при этом становится выявление и исследование свойств объекта, влияния возмущающих воздействий, выделение из них контролируемых, регулируемых и других, проведение выбора СУ и алгоритма управления на основе технико-экономических и технологических ограничений, проведения анализа запаздываний в системах контроля и СУ, а также формулировка целей функционирования на основе состояний, в которых может находиться объект, и соответствующих им задач управления.

Основа решения поставленных задач управления заключается в выборе алгоритма и системы управления. Этот выбор из бесконечного множества систем и алгоритмов является самостоятельной задачей, решение которой определяет класс алгоритмов управления, а затем и ряд систем управления на основе технико-экономических и технологических ограничений [71, 72].

В [71 – 72] рассматриваются вопросы выбора целесообразного класса алгоритмов управления и систем управления из одного класса. Совместное использование результатов этих работ позволит провести полный цикл выбора искомой системы и алгоритма управления. При этом указывается, что невозможно выполнить полный поиск с рассмотрением всех возможных систем управления, поэтому предлагается получать улучшающуюся последовательность СУ, последняя из которых будет наиболее близка по заданным критериям к идеальной.

В соответствии с классификацией, проведенной в работе [72], для управления процессом адсорбционного разделения газовой смеси может быть применен широкий класс систем управления. На рис. 4.1, а рассмотрена пассивная система управления. Особенностью, которой является отсутствие в ее составе математической модели. Такая система, получая от объекта сигнал о значении выходных параметров Y и возмущений f , формирует вектор управляющие воздействия U , которые подаются на вход объекта управления.

На рис. 4.1, б показана активная система управления, т.е. система, использующая математическую модель для выработки управляющего воздействия. Система получает лишь сведения о значении возмущающего воздействия f . В результате взаимодействия поискового алгоритма и математической модели вырабатываются управляющие воздействия, которые подаются на вход объекта управления.

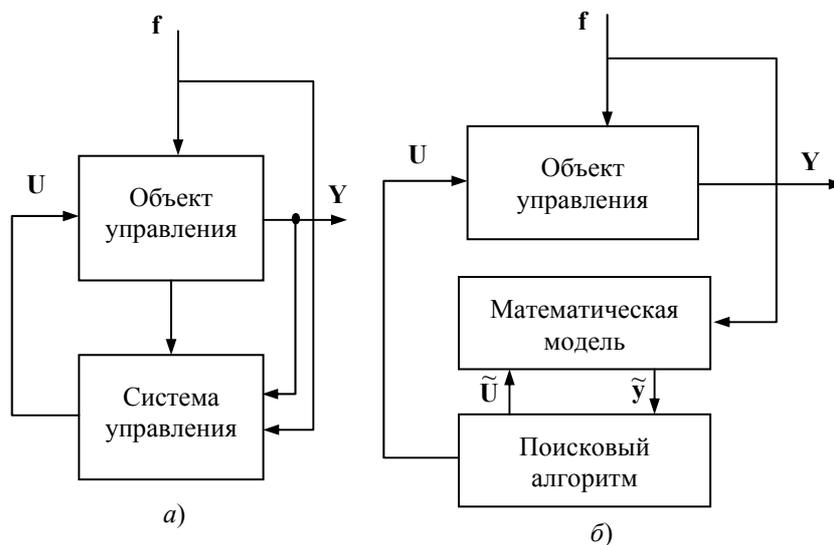


Рис. 4.1. Принципиальная схема:
a – пассивной; *б* – активной системы управления

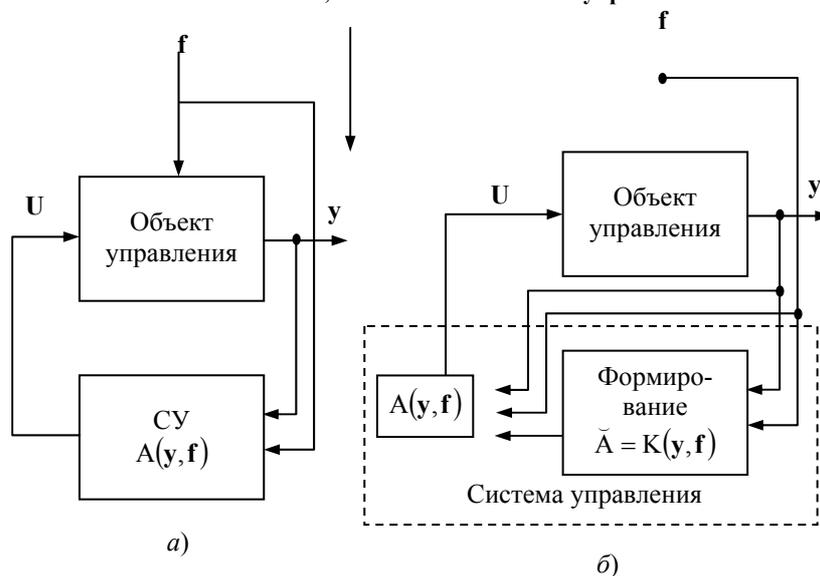


Рис. 4.2. Блок схема жесткой (*a*) и адаптивной (*б*) пассивной системы управления

Пассивные и активные системы подразделяются на системы жесткие и системы с адаптацией.

Жесткая пассивная система имеет неизменяемый оператор, устанавливающий связь между векторами $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ – выходных параметров, возмущений $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_m)$ и управляющих воздействий $\mathbf{U} = (u_1, u_2, \dots, u_k)$ (рис. 4.2, *a*).

Адаптивная пассивная система имеет оператор A , меняющийся в зависимости от значений выходных параметров y и (или) возмущающих воздействий f (рис. 4.2, *б*).

Активные системы разделяются на жесткие и адаптивные. Жесткой активной является система, у которой имеется неизменная в процессе управления модель. Оператор M устанавливает связь между расчетными значениями управления \tilde{U} , возмущения f и выходными параметрами \tilde{Y} (рис. 4.3, *a*).

Адаптивная активная система управления имеет в своем составе математическую модель M , которая меняется в зависимости от значения выходных переменных y и (или) возмущающего воздействия f (рис. 4.3, *б*).

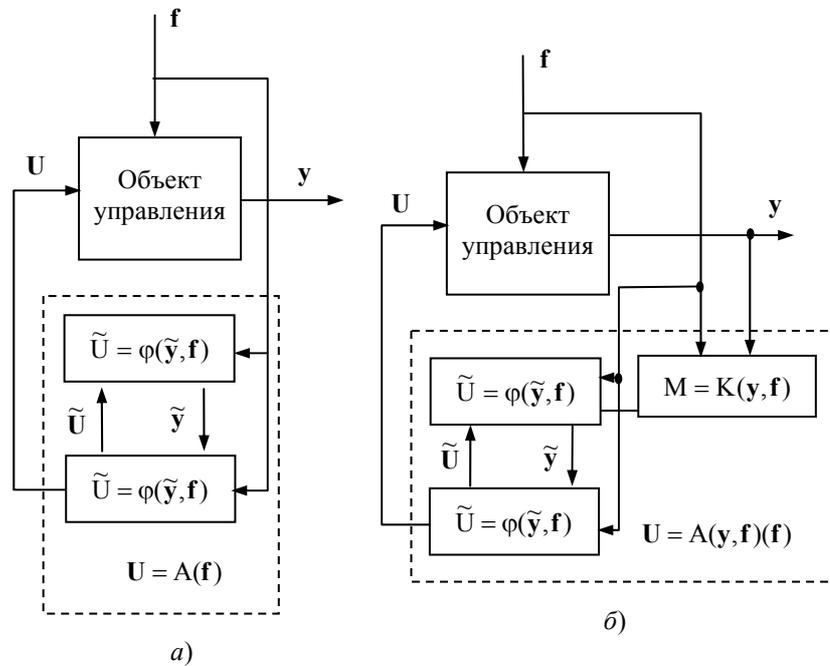


Рис. 4.3. Блок-схема жесткой (а) и адаптивной (б) активной системы управления

Исследование СУ осуществляется в рамках теории систем автоматического управления технологическими процессами. При этом существует два основных класса систем управления, первый охватывает управление детерминированными объектами (процессами) [73 – 78], второй – нечеткими [79, 80]. На сегодняшний день наиболее исследованными являются системы первого класса. Практические же результаты применения таких систем показывают, что их эффективное применение может осуществляться при наличии достаточной априорной информации об объекте, но, даже в случае хорошо известных объектов, получение полной информации – неосуществимая задача.

Неполнота, стохастичность и неопределенность информации, поступающей с объекта, приводит к необходимости использования второго класса СУ. Здесь могут реализовываться как методы адаптивного управления, так и подходы, основанные на аналитико-лингвистических моделях.

Если режим функционирования установки адсорбционного разделения может изменяться, то существует вероятность появления необходимости корректировать не только настройки и задания регуляторов, но и систему управления, функционально и структурно. Реализация СУ с возможностью проведения таких изменений позволяет приблизиться к системам адаптивного управления.

Системы управления, в зависимости от цели и задачи управления, подразделяются на статические, квазистатические, динамические, оптимизации и удовлетворения (гарантированного управления).

В табл. 4.1 представлена классификация СУ, которые можно использовать для управления процессом КБА. Условные обозначения СУ следующие: С – статические; К – квазистатические; Д – динамические; О – оптимизационные; У – удовлетворения (гарантированного управления); Ж – жесткая; А – адаптивная; П – пассивная; А_к – активная.

Таким образом, управление процессом КБА можно осуществлять различными системами управления. Эти системы различаются по сложности, стоимости, требуемой квалификации обслуживающего персонала, времени проектирования и внедрения, технической и экономической эффективности.

На современном этапе развития науки и техники становится необходимым использовать методы имитационного моделирования для объективной оценки целесообразности использования той или иной СУ.

Блок-схема алгоритма выбора технической и экономической целесообразности СУ представлена на рис. 4.4. Целью этого алгоритма является построение последовательности СУ, способных решать поставленную задачу управления процессом КБА.

Сопоставим каждой системе управления S_i вектор $R(S_i)$ – технических требований (требования выполнения технологических условий, надежности системы, быстродействия алгоритма и т.п.) и вектор $Q(S_i)$ – экономических показателей (стоимость системы управления, стоимость монтажно-наладочных работ, сложность в эксплуатации, срок окупаемости и т.п.), $i = \overline{1, m}$, где m – число возможных СУ процессом КБА.

На множества векторов Q введем упорядочение, при этом будем обозначать знаком «w» соотношения между векторами Q в смысле введенного порядка таким образом, что

$$Q(S_i)wQ(S_{i+1}). \quad (4.1)$$

Выражение (4.1) означает, что система S_i по экономическим показателям «не хуже» системы S_{i+1} .

Будем последовательность систем S_1, S_2, \dots, S_m называть улучшающей последовательностью, если для каждой S_i , выполняются технические требования

$$R(S_i) \leq R_{\text{доп}}; \quad Q(S_i)wQ(S_{i-1}), \quad (4.2)$$

где $R_{\text{доп}}$ – вектор допустимых технических требований и знак \leq в (4.2) относится к каждой из составляющей векторов $R(S_i)$ и $R_{\text{доп}}$.

4.1. КЛАССИФИКАЦИЯ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ

Классы систем управления		Пассивная система управления		Активная система управления		Система гарантирующего управления	
		система оптимизации	система удовлетворения	система оптимизации	система удовлетворения	оптимальная гарантийная система	гарантийная система удовлетворения
Нечеткая	Жесткая	СОЖП	СУЖП	СОЖА _к	СОЖА _к	СОЖД	СОЖД
	Адаптивная	СОАП	СУАП	СОАА _к	СОАА _к	СОАД	СУАД
Квазистатическая	Жесткая	–	–	КОЖА _к	КУЖА _к	КОЖД	КУЖД
	Адаптивная I	–	–	КОАА _к ¹	КУАА _к ¹	КОАД ¹	КУАД ¹
	Адаптивная II	–	–	КОАА _к ²	КУАА _к ²	КОАД ²	КУАД ²
	Адаптивная I, II	–	–	КОАА _к ¹⁺²	КУАА _к ¹⁺²	КОАД ¹⁺²	КУАД ¹⁺²
Динамическая	Жесткая	–	ДУЖП	ДОЖА _к	ДУЖА _к	ДОЖД	ДУЖД
	Адаптивная	–	ДУАП	ДОАА _к	ДУАА _к	ДОАД	ДУАД

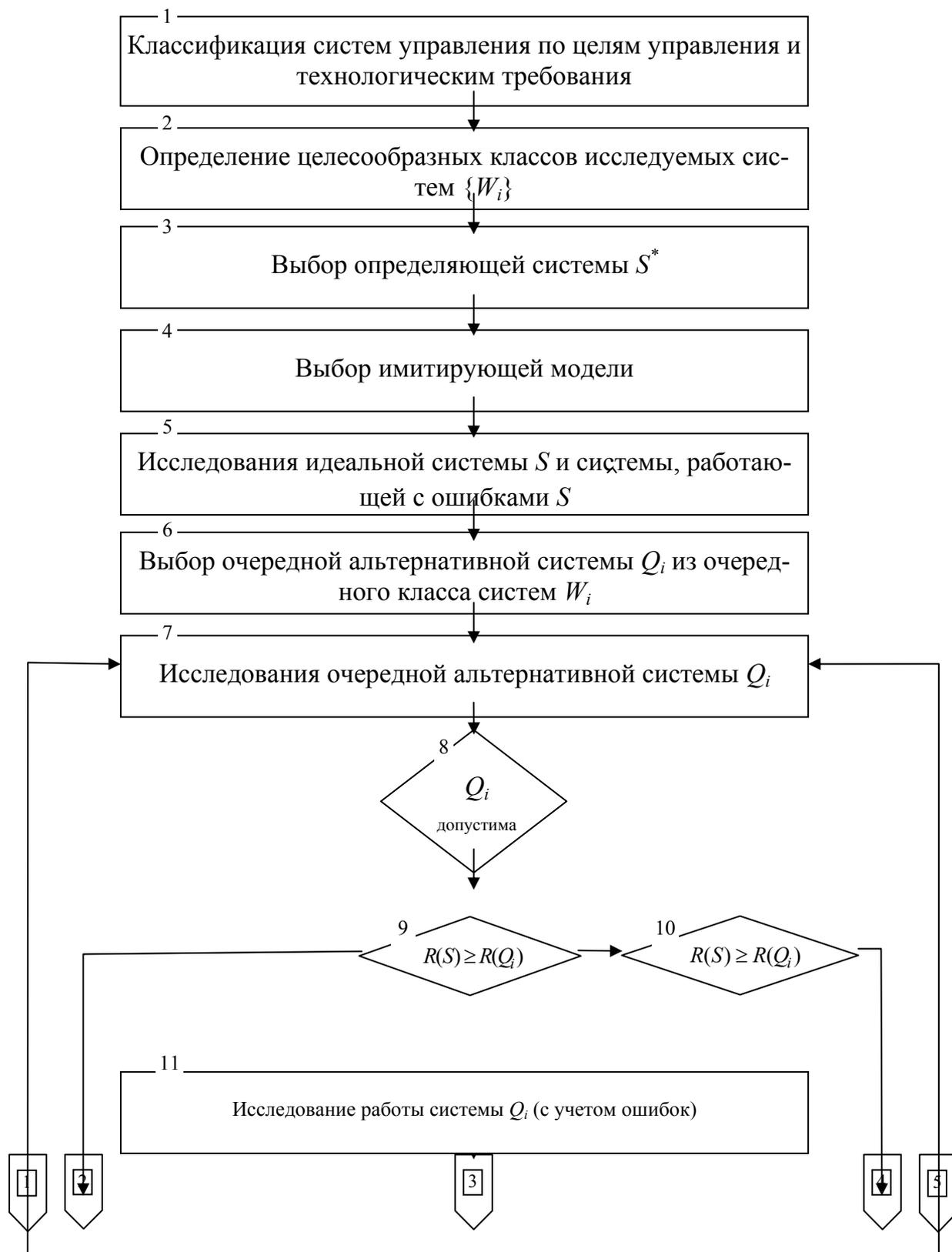


Рис. 4.4. Алгоритм выбора целесообразной системы управления

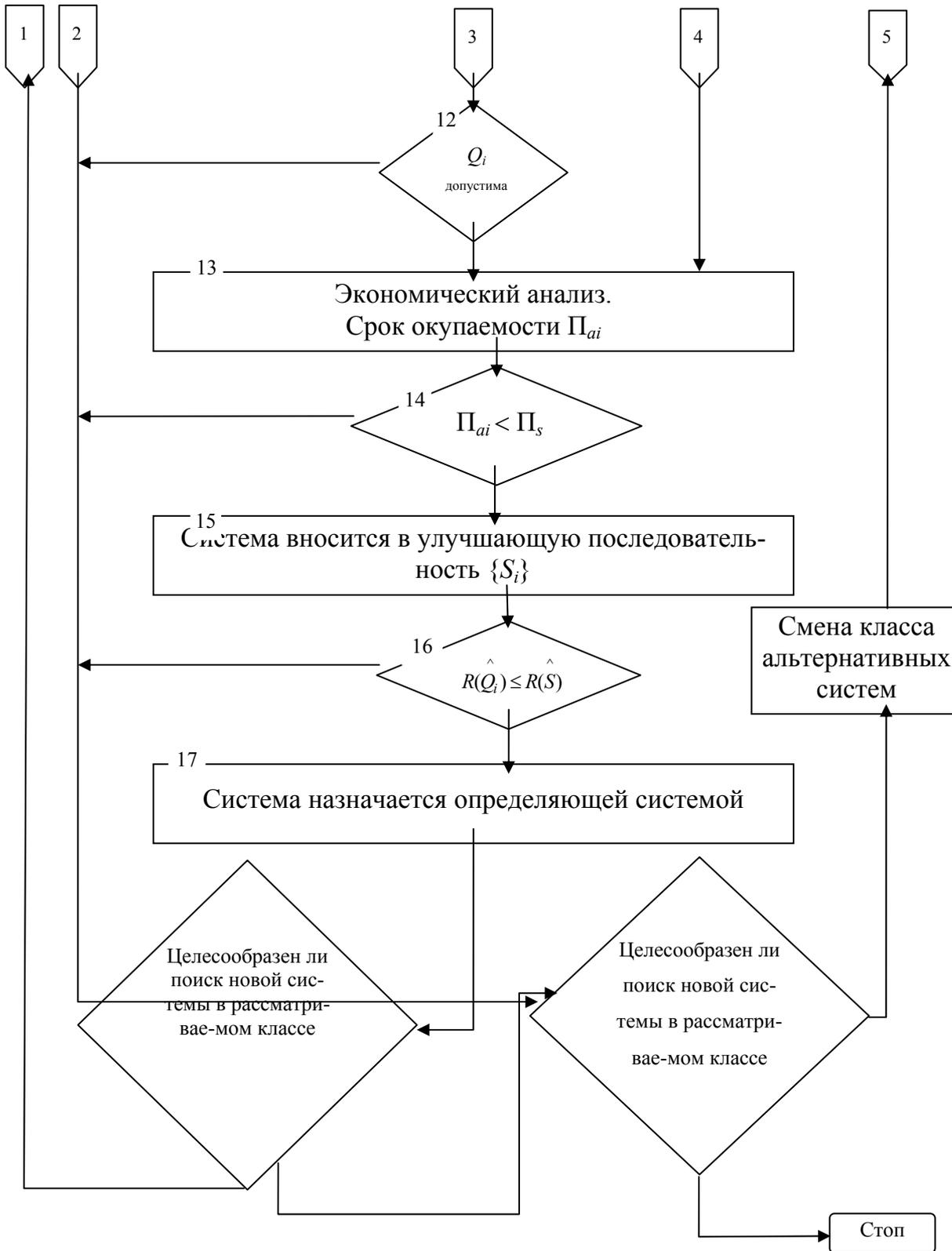


Рис. 4.4. (Продолжение)

Работа алгоритма выбора целесообразной системы управления начинается с блока 1, в котором ЛПР (лицо принимающее решение) классифицирует задачу управления по ее типу и техническим требованиям. В соответствии с табл. 4.1 в блоке 2 автоматически назначаются целесообразные классы исследуемых систем (а именно те классы, которые принципиально способны решать задачу); назначается определяющая система S , относительно которой сравнивается эффективность всех других автоматических систем управления и назначается имитационная модель.

Процесс классификации пояснен на рис. 4.5. Классификация начинается с разделения задач на задачи оптимизации либо на задачи удовлетворения. Задачи оптимизации далее более подробно классифицируются в блоках 5 – 26, а задачи удовлетворения аналогично в блоках 28 – 49.

Рассмотрим классификацию задач оптимизации. Эти задачи подразделяются на задачи статические (блок 6), квазистатические (блок 7), динамические (блок 8). Наконец, каждая из этих градаций делится в свою очередь на задачи, в которых не требуется выполнение технологических условий с заданной точностью (задачи без гарантийного управления) и на задачи, в которых технологические условия должны выполняться с точностью не ниже заданной (задачи с требованием гарантийного управления).

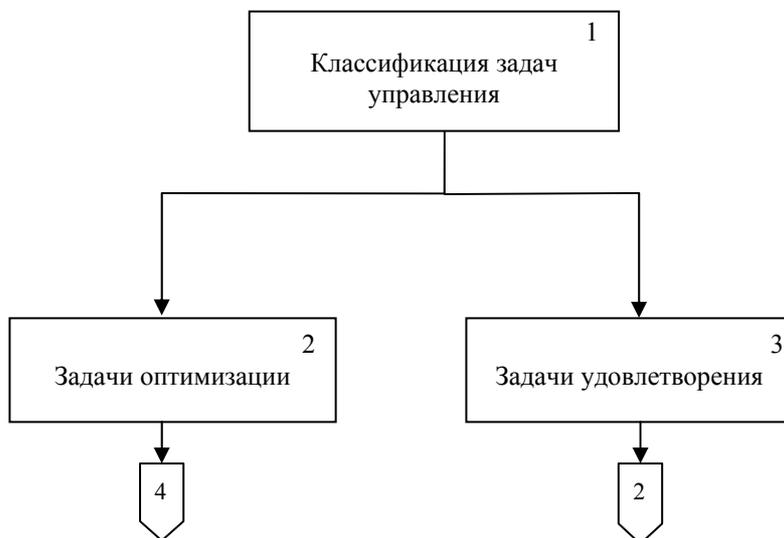


Рис. 4.5. Классификация задач управления

На этом классификация задач заканчивается и в блоках 15 – 20 представлены классы систем управления, имеющие принципиальные возможности решения поставленных задач. Рамкой в этих блоках выделены определяющие классы.

Так для статических оптимизационных задач без требований гарантированного управления естественным классом является класс задач статической оптимизации с моделью СОЖА. Однако близкие результаты можно получить с помощью систем оптимизации без модели СОЖА и с помощью адаптивных систем СОАП поиска на объекте и даже с помощью систем стабилизации параметров СУЖП и особенно систем стабилизации с оптимальными заданиями регуляторам. Все эти системы (или большинство из них) значительно дешевле и проще системы оптимизации с моделью, более быстродействующие и в ряде случаев могут дать режимы, не значительно уступающие по технико-экономическим показателям. Необходимо также помнить, что погрешность в ряде систем СОЖА (неточность знания возмущающих воздействий, погрешность модели, используемой для управления, погрешность установки «оптимального» управляющего воздействия) может значительно уменьшить эффект оптимизации и тем самым увеличить целесообразность использования более дешевых систем.

В качестве имитатора объекта для сравнения работы систем СОЖП, СУЖП, СУАП, СОАП достаточно использовать математическую модель статических режимов (блок 21).

Для статических режимов с требованиями гарантированного управления естественной определяющей системой является двухмодельная оптимальная гарантированная система управления статическими режимами СОЖД. Эта система относительно сложная и дорогая и альтернативными системами могут являться системы классов СОЖП, СОАП, СОЖА, СОАА, СУЖП, СУАП. В качестве имитатора объекта здесь должны использоваться вероятностные имитационные математические модели.

Для квазистатических систем без требования гарантированного управления естественной определяющей системой является система класса КОЖА, т.е. квазистатические системы оптимизации, использующие математическую модель квазистатических режимов.

Однако система статической оптимизации с адаптивной перестраивающейся моделью Соаа может дать результат сравнимый или даже превосходящий результат системы Кожа, причем потому, что система Кожа для успешной работы требует точного прогноза изменения возмущающих воздействий на всем периоде компании $[0, T]$ [1].

Более эффективными по сравнению с Кожа, но и более дорогими будут системы КоАА, входящие в альтернативные классы систем управления (блок 17).

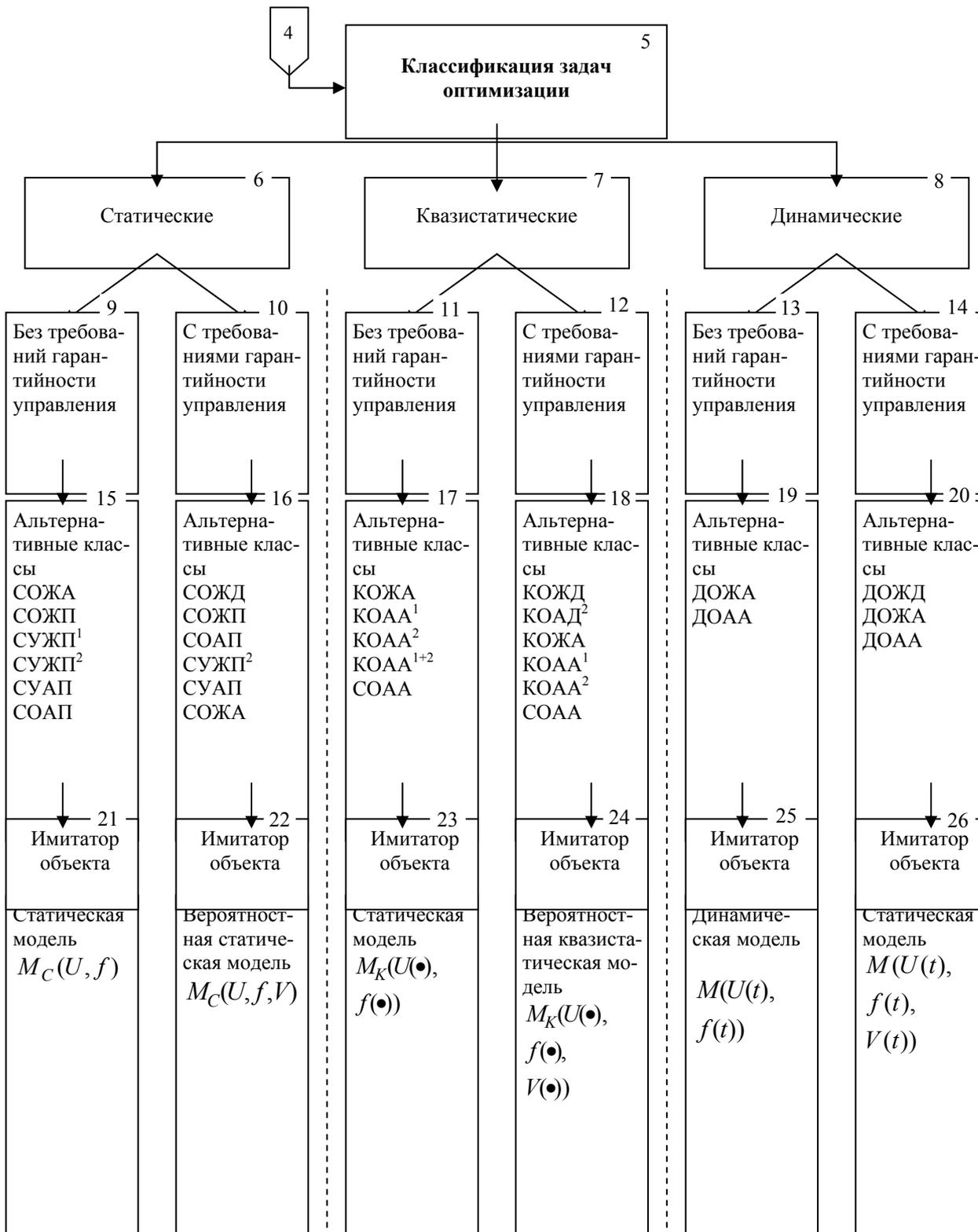


Рис. 4.5. Продолжение

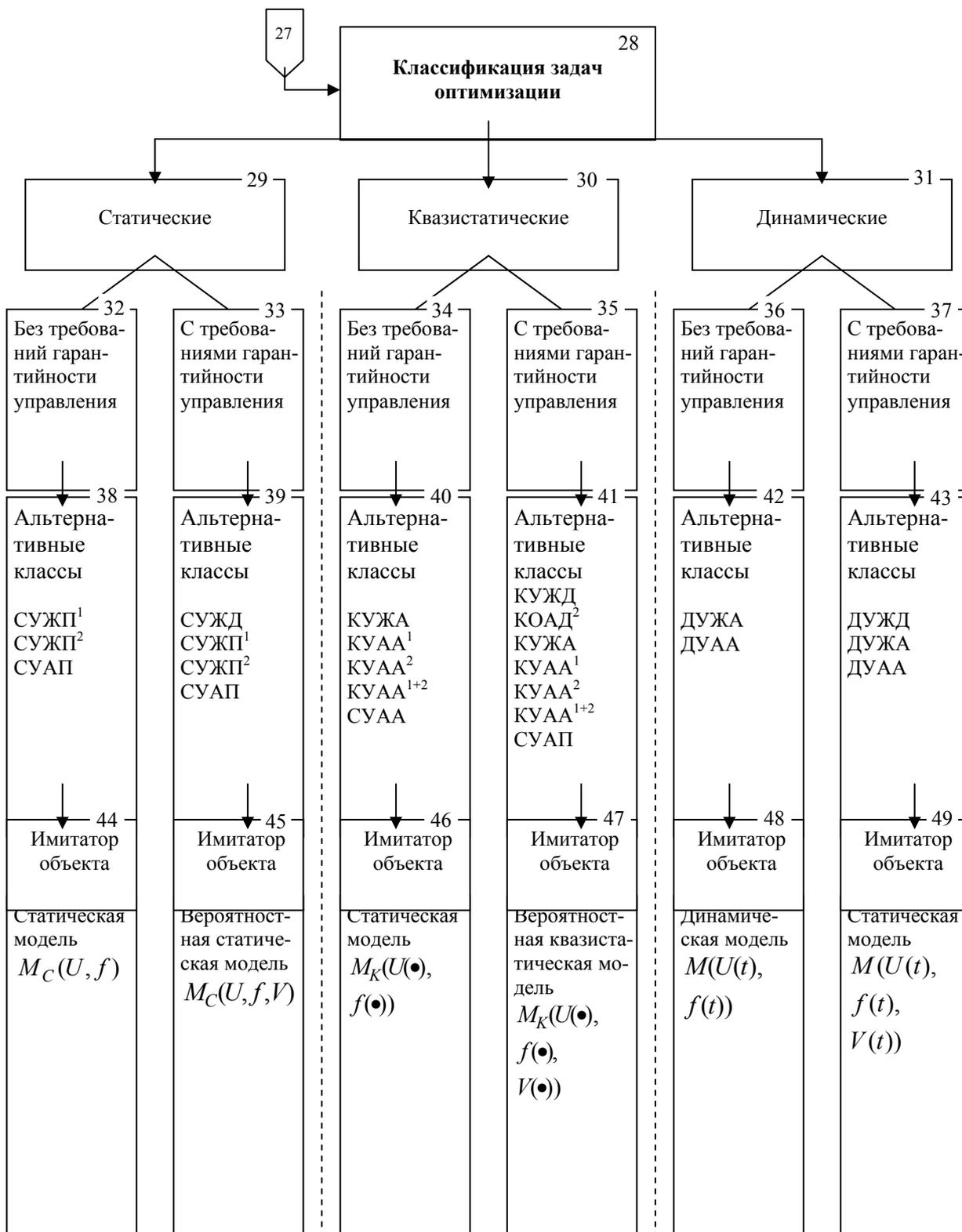


Рис. 4.5. Продолжение

В качестве имитационной модели для исследования систем КОЖА, КОАА, СОАА должны использоваться квазистатистические модели.

Для квазистатистических систем требованием выполнения технологических условий с вероятностью не ниже заданной, естественной определяющей системой служит двухмодельная оптимальная гарантированная система управления квазистатистическим режимом КОЖД. Альтернативными системами являются КОЖА, КОАД, КОАА, СОАА. В качестве имитационной модели используются вероятностные квазистатистические модели.

Аналогично на рис. 4.5 показаны альтернативные классы моделей для динамических систем (блоки 19 и 20) и имитационные модели, необходимые для исследования этих систем (блоки 25 и 26). А также альтернативная система для исследования задач удовлетворения (блоки 38 – 43) и соответствующие имитационные модели (блоки 44 – 49), необходимые для исследования этих систем.

Вернемся к рассмотрению работы блоков (рис. 4.4). После того, как в блоке 1 – 4 проведена классификация модели управления, определены классы исследуемых систем, выбрана определяющая система и имитационная модель, управление передается блоку 5.

Блок 5 вызывает из банка знаний или посылает с монитора имитационную модель и определяющую систему управления и проводит исследования этой системы, вначале считает ее идеальной системой (работающей без погрешностей), затем учитываются реальные погрешности в работе системы (систему, работающую с погрешностями будем означать \hat{S}).

В блоке 6 выбирается очередная система из рассматриваемого класса систем. При этом классы систем из множества альтернативных классов, выбранных в блоке 2, назначаются либо автоматически с использованием экспертных знаний, либо в порядке, определенном оператором. Конструкции системы могут отличаться используемыми моделями, алгоритмами поиска оптимальных режимов, алгоритмами адаптации, алгоритмами соотношения регулирующих величин и регулируемых воздействий в системах автоматической стабилизации и т.д.

Множество систем, принадлежащих одному и тому же классу, может храниться в интеллектуальном банке системы, однако, как правило, в банке хранятся отдельные модели системы (передаточные функции регуляторов и объектов управления по различным каналам, алгоритмы решения экстремальных задач, математические модели процессов и т.п.) и оператор в блоке 6 генерирует очередную альтернативную систему Q_i .

В блоке 7 система Q_i исследуется как идеальная, работающая без ошибок.

В блоке 8 проверяется, допустима ли «идеальная» система по технологическим показателям, т.е. возможно ли достигнуть цели управления, используя систему A_i .

Если A_i допустима, то в блоке 9 сравниваются технологические показатели определяющей системы S и альтернативной A_i . Если технические показатели $R(S_i)$ значительно превосходят технические показатели $R(A_i)$, то в блоке 10 проверяется, насколько технические показатели $R(A_i)$ близки к допустимым $R_{\text{доп}}$. Если технические показатели $R(A_i)$ достаточно близки к допустимым, в блоке 11 исследуется работа системы \hat{A}_i в условиях реальных погрешностей ее работы. Затем в блоке 12 проверяется допустимость «реальной» системы \hat{A}_i . В блоке 13 определяются экономические показатели системы \hat{A}_i частности, срок окупаемости этой системы.

Если срок окупаемости Π_a системы A_i больше срока окупаемости системы \hat{S} , то блок 14 отбрасывает систему A_i и передает управление блоку 18.

В противном случае в блоке 15 решается вопрос о внесении системы A_i в улучшающую последовательность систем, т.е. проверяются условия (4.76) для системы \hat{A}_i и находится ее место (номер i) в ряду уже построенных систем.

Может оказаться, что рассматриваемая система \hat{A}_i с учетом ошибки в ее работе покажет технические показатели лучше, чем технические показатели определяющей системы, а также с учетом в ошибок ее работе. Проверкой этого «казуса» занимается блок 16.

Если действительно окажется, что $R(\hat{A}_i) \leq R(\hat{S})$, то в качестве определяющей системы выбирается система A_i как система, поддерживающая наилучшие режимы по технологическим показателям (блок 17).

В блоке 13 определяется в диалоге с оператором целесообразность поиска новой системы в том же классе систем.

В блоках 19-20 автоматически или в диалоге с оператором выбирается новый класс из списка пригодных альтернативных классов.

После окончания работы алгоритм (рис. 4.38) выдает список систем управления, способных решить поставленную задачу с той или иной точностью. Список выдается ранжированным в порядке улучшения экономических показателей. При этом в качестве системы для внедрения рекомендуется последняя система в ряду улучшающей последовательности систем, как самая дешевая. Одновременно для каждой системы улучшающей последовательности выдаются показатели технические и экономические. Таким образом, последнее решение остается за оператором, который может выбрать систему по каким-либо своим соображениям (качеству режимов, надежности, простоты обслуживания), несколько ухудшая при этом экономические показатели.

При анализе процесса КБА, как объекта управления, одним из важнейших этапов является выбор управляющих воздействий. Из анализа патентной литературы [50 – 57] следует, что в зависимости от цели и задачи управления в качестве входных управляющих переменных наиболее часто используются:

1) *Расход продукционной и (или) сбросовой газовой смеси.*

Применяется в процессах, где величина расхода продукционной смеси строго не регламентируется и допускается ее изменение в диапазоне, достаточном для решения задач управления (например, системы жизнеобеспечения в больницах, где величина потребления может изменяться до нуля, а целью является поддержание определенного давления в буфере продукционной смеси).

2) *Частота переключения впускных–выпускных клапанов (длительность цикла адсорбция–десорбция).*

Для определенных условий функционирования имеет оптимальное значение [7]. В качестве управляющей переменной используется в системах управления процессами адсорбционного разделения, где наблюдается значительное изменение условий функционирования во времени.

3) Синхронизация клапанов в пределах одного цикла.

Изменение синхронизации клапанов в пределах одного цикла в целях управления процессом адсорбционного разделения применяется в многоадсорберных установках при наличии значительного числа управляемых клапанов с использованием микропроцессорных систем управления [3].

4) Расход промывочной смеси.

Варьирование величины расхода промывочной смеси применяется в целях управления в большинстве установок адсорбционного разделения. Это определяется тем, что основные качественные показатели процесса (степень извлечения, состав продукционной смеси, производительность) напрямую зависят от расхода промывочной смеси (флегмового числа). Изменение расхода промывочной смеси достигается изменением сопротивления дросселирующего устройства между адсорберами и не требует сложных конструкторских решений.

5) Давление адсорбции и десорбции (максимальное значение для адсорбции и минимальное для десорбции).

В системах управления, как правило, подлежат стабилизации и являются основными возмущающими воздействиями. Применяются в качестве управляющих переменных в системах, где давление подачи и сброса заведомо нельзя изменить и необходимо применять дополнительные устройства (редукторы давления и другие дополнительные устройства). Примером является летательный аппарат, где давление подачи определяется давлением в турбине, а давление сброса определяется разрежением атмосферы на полетной высоте.

6) Интенсивность протекания массообменных процессов (адсорберы с подвижным слоем адсорбента).

Один из самых новых подходов к управлению процессом адсорбционного разделения газовой смеси. Широко распространение получил к концу 90-х гг. XX столетия в установках, относящихся к типу сверхкороткоциклового адсорбции (RPSA – Rapid Pressure Swing Adsorption), время полуцикла достигает 0,1 секунды). Интенсивность протекания массообменных процессов изменяется скоростью вращения специальных пластин в адсорбере, на которых напылен адсорбент.

Несмотря на все многообразие рассмотренных способов управления процессом адсорбционного разделения и классов систем управления ХТП, остается открытым вопрос управления процессом адсорбционного разделения в условиях динамического изменения параметров окружающей среды, свойств сорбента, потребления продукционного газа, отсутствия возможности оперативной оценки режима функционирования установки, что делает данную проблему новой и перспективной областью научного исследования.

Можно сделать вывод, что исследование процесса адсорбционного разделения как объекта управления, постановка задач управления, а также выбор и реализация системы управления являются актуальными, так как:

- очевидна необходимость управления процессом для обеспечения необходимых показателей функционирования установки в условиях динамического изменения свойств окружающей среды, характера потребления продуктов разделения;
- отсутствуют доступные комплексные работы, посвященные вопросам управления процессами адсорбционного разделения в условиях динамического изменения свойств окружающей среды.

Реализация систем и алгоритмов управления на объекте может осуществляться с применением специализированных контроллеров или программно-технических комплексов. Существует широчайший спектр контроллеров, применяемых при управлении химико-технологически-ми процессами [67, 68], их выбор должен производиться исходя из экономических соображений и достаточности функциональных характеристик. Информацию о современных контроллерах, о их характеристиках и цене можно узнать из специальной литературы или с применением современных информационных технологий. Разработкой программно-технических комплексов занимается значительное количество компаний по всему миру [67]. Эти комплексы ориентированы как на управление специальными процессами, так и на широкий спектр процессов вообще, они могут работать с применением специальных технических средств и/или персональных компьютеров.

4.2. Процесс адсорбционного разделения как объект управления

Разработанная (см. главу 2), математическая модель в первую очередь предназначалась для проведения имитационных исследований процесса адсорбционного разделения, как объекта управления и синтеза на ее основе эффективных алгоритмов и систем управления им. Проведем анализ параметров, влияющих на процесс адсорбционного разделения с целью выяснения входных и выходных переменных, а также диапазонов их изменения.

Входными переменными объекта следует считать те переменные, значения которых можно непосредственно изменять на объекте. Входные воздействия подразделяются на управляющие и возмущающие. Управляющие воздействия определяются входными переменными, значения которых можно непосредственно изменять на объекте. Возмущающие воздействия определяются внешними по отношению к объекту условиями.

Входными переменными для процесса адсорбционного разделения, как объекта управления, являются: время полуцикла $\tau_{\text{пнт}}$; условный диаметр дюз (флегмовое число F); давление исходной сжатой смеси $P_{\text{пнт}}$; степень открытия клапана на выходе продукционной смеси из ресивера $\psi_{\text{прод}}$; теплофизические свойства исходной газовой смеси: температура $T_{\text{пнт}}$, концентрации компонентов $c_{\text{пнт}}$; давление на выходе смеси из ресивера $P_{\text{мск}}$; давление на выходе сбросовой смеси $P_{\text{бск}}$.

При решении задач проектирования установок адсорбционного разделения к входным переменным можно отнести: тип цеолита (сорбционные свойства, эквивалентный диаметр гранул $d_{\text{гр}}$), количество адсорберов N_A , профиль проходного сечения шихты $S(x)$, объем ресивера $W_{\text{рес}}$, объем загрузки сорбента V .

Выходные переменные объекта – это те переменные, значения которых меняются вследствие изменения входных переменных. Для рассматриваемого процесса выходными переменными являются: состав газовой смеси на выходах установки $c_{\text{мск}}$, $c_{\text{бск}}$; расход сбросовой $G_{\text{бск}}$, производственной $G_{\text{мск}}$, промывочной $G_{\text{д}}$, исходной $G_{\text{пит}}$ газовой смеси; динамика давление в адсорберах $P(\tau)$, $i = \overline{1, N_A}$.

На рис. 4.6 представлен процесс адсорбционного разделения газовой смеси как объект управления.

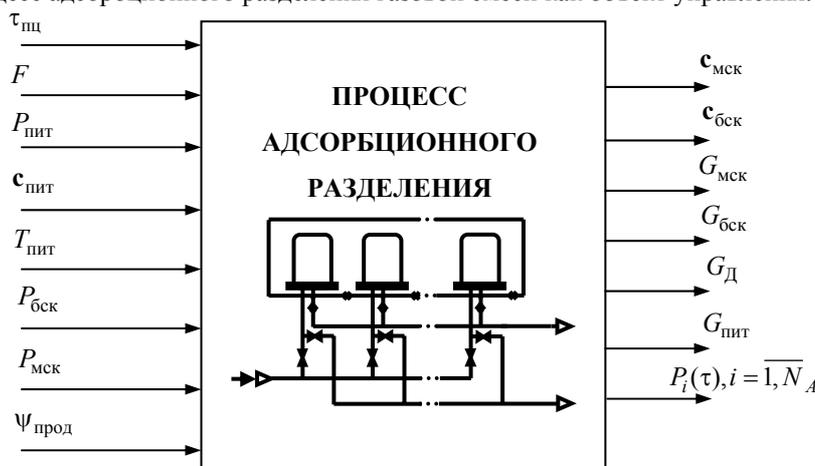


Рис. 4.6. Процесс адсорбционного разделения как объект управления

На основе результатов имитационных исследований, экспертной информации и литературных источников проведем анализ чувствительности выходных переменных к изменению входных.

На основе анализа чувствительности и вида зависимостей вход-выход по различным каналам объекта управления выделим среди входных переменных те, которые могут быть выбраны в качестве управляющих.

Рассмотрим принцип деления каналов вход-выход на каналы управления и возмущения. При выборе управляющих воздействий изначально необходимо учесть возможность непосредственного изменения входной переменной в достаточном диапазоне. С данных позиций в качестве управляющих переменных могут быть выбраны: $\tau_{\text{пц}}$, F , $P_{\text{пит}}$, $\Psi_{\text{прод}}$, $T_{\text{пит}}$, $P_{\text{мск}}$, $P_{\text{бск}}$.

При выборе управляющих переменных должно учитываться их влияние не только на выходные переменные объекта управления, а также влияние на предшествующие и последующие стадии технологического процесса, в который включен процесс адсорбционного разделения. Таким образом, можно исключить $P_{\text{пит}}$, $P_{\text{мск}}$, $P_{\text{бск}}$, изменение которых оказывает непосредственное влияние на побудитель входного потока и на приемники выходных расходов.

Анализ чувствительности и качественный анализ вида характеристики вход-выход являются завершающими этапами в формировании множества возможных управляющих воздействий.

Рассмотрим следующие каналы объекта управления: $\tau_{\text{пц}} \rightarrow c_{\text{мск}}$, $F \rightarrow c_{\text{мск}}$, $\Psi_{\text{прод}} \rightarrow c_{\text{мск}}$, $T_{\text{пит}} \rightarrow c_{\text{мск}}$.

Проведенные имитационные исследования (см. главу 3) позволяют сделать вывод, что выходная переменная (концентрация МСК (кислород)) не обладает достаточной чувствительностью к изменению входной переменной $T_{\text{пит}}$ в допустимом диапазоне ее варьирования. Таким образом, управление величиной $c_{\text{мск}}$ по каналу $T_{\text{пит}} \rightarrow c_{\text{мск}}$ нецелесообразно.

Результаты анализа каналов вход-выход сведены в табл. 4.2.

4.2. Характеристика каналов объекта управления

Вход \ Выход	$\Psi_{\text{прод}}$	$P_{\text{мск}}$	F	$P_{\text{пит}}$	$P_{\text{бск}}$	$\tau_{\text{пц}}$	$T_{\text{пит}}$	$c_{\text{пит}}$
$c_{\text{мск}}$	У	В	У	В	В	У	В	В
$c_{\text{бск}}$	У	В	У	В	В	У	В	В
$G_{\text{бск}}$	У	В	У	В	В	В	В	В
$G_{\text{мск}}$	У	В	У	В	В	В	В	В
$G_{\text{д}}$	В	В	У	В	В	У	В	В
$G_{\text{пит}}$	У	В	У	В	В	В	В	В
$P(\tau)$	В	В	У	В	В	В	В	В

В табл. 4.2 на пересечении строк и столбцов соответствующих выходным и входным переменным обозначена характеристика канала: У – возможный канал управления; В – канал возмущения.

Из анализа таблицы видно, что наиболее универсальным управляющим воздействием является изменение флегмового числа F . Кроме того, в качестве управляющих воздействий могут быть применены время полуцикла $\tau_{\text{пц}}$, степень открытия клапана для отбора продукционной смеси $\psi_{\text{прод}}$.

Способы внесения управляющих воздействий следующие: для времени полуцикла $\tau_{\text{пц}}$ – изменение частоты переключения впускных – выпускных клапанов; для флегмового числа F – изменение степени открытия дросселирующих устройств, пропускающих промывочную газовую смесь; для степени открытия $\psi_{\text{прод}}$ – изменение степени открытия клапана для отбора продукционной газовой смеси.

Вывод: проведен анализ процесса адсорбционного разделения как объекта управления; выявлены входные и выходные переменные; на основе анализа каналов вход-выход определены возможные управляющие переменные и способы их внесения в объект управления.

4.3. Классификация режимов функционирования установки КБА

В главе 1 показано, что область применения установок КБА весьма широка. В зависимости от целей и задач, решаемых с применением процессов адсорбционного разделения, доминирующими могут являться различные характеристики.

С учетом основного назначения установок КБА – продуцирования газовых смесей с заданным составом в течении определенного интервала времени – можно ввести в рассмотрение следующую классификацию режимов их функционирования.

I. Классификация по диапазону концентраций целевых компонентов в продукционных потоках. Данная классификация рассмотрена в ряде работ [48, 49]:

- нормальное состояние – концентрации компонентов в продукционной и сбросовой газовой смеси изменяются в заданных диапазонах;
- экстремальное состояние – концентрации компонентов выходят за границы допустимых диапазонов;
- идеальное состояние – концентрации компонентов изменяются не более чем на величину Δ , относительно заданных характеристик выходов, где Δ – некоторая малая величина.

Компоненты в продукционных потоках делятся на две группы:

К первой группе отнесем «целевые компоненты». Концентрации данных веществ должны иметь определенные значения или изменяться в заданных пределах. Для процесса концентрирования кислорода в воздушной смеси к таким компонентам относятся: кислород, азот, водяной пар.

Во вторую группу входят «нецелевые компоненты». Концентрации этих веществ в продукционных потоках не имеют существенного значения, т.е. содержание в воздухе водорода, аргона, углекислого газа и т.п. незначительно.

Основной недостаток приведенной классификации (I) состоит в том, что она не отражает потребления ресурсов ТП для поддержания того или иного режима функционирования. Под ресурсами процесса адсорбционного разделения понимается: механическая сохранность сорбента и стабильность сорбционных свойств на длительном интервале; энергопотребление.

II. Классификация режимов функционирования с позиции эффективности использования ресурсов системы адсорбционного разделения:

- нормальное состояние. Для обеспечения нормального режима функционирования необходимо обеспечить изменение ряда величин технологического процесса в заданных диапазонах. К ним относятся: скорости подъема и сброса давления в адсорберах, влажность исходной газовой смеси и т.п.;
- идеальное состояние – определяется режимами функционирования, при которых поддерживаются априори наилучшие (оптимальные) значения выходных переменных;
- экстремальное состояние – определяется режимами, при которых значения выходных переменных выходят из диапазонов, определяемых технологическими ограничениями.

Таким образом, провели классификацию режимов функционирования установки адсорбционного разделения по двум признакам: по диапазону концентраций целевых компонентов в продукционных потоках; по эффективности использования ресурсов.

4.4. Классификация задач управления процессом адсорбционного разделения

Проведенная в п. 4.2 классификация режимов функционирования позволяет сформировать класс задач управления, которые могут решаться в тех или иных условиях.

Класс 1. Задачи, относящиеся к поддержанию среднезаданных концентраций целевых компонентов в выходных потоках.

а) Задача удовлетворения: состоит в отыскании значений компонент вектора управляющих величин U , при которых выполняется соотношение:

$$I = \left| \frac{1}{\tau_{\text{проц}}} \int_0^{\tau_{\text{проц}}} c(\mathbf{U}) d\tau - c_{\text{ср}} \right| < eps, \quad (4.3)$$

где c , $c_{\text{ср}}$ – фактическая и среднезаданная концентрация целевого компонента в выходном потоке, соответственно; $\tau_{\text{проц}}$ – время протекания процесса; eps – заданная величина невязки.

При решении задачи (4.1) должно выполняться ограничение:

$$\underline{c} \leq c \leq \bar{c}, \quad (4.4)$$

где \underline{c} , \bar{c} – определяют допустимый диапазон изменения концентрации целевого компонента.

б) Задача на экстремум: необходимо найти такой вектор управляющих воздействий, при котором:

$$I = \left| \frac{1}{\tau_{\text{проц}}} \int_0^{\tau_{\text{проц}}} c(\mathbf{U}) d\tau - c_{\text{ср}} \right| \rightarrow \min. \quad (4.5)$$

При решении задач управления на основе математической модели процесса адсорбционного разделения должны выполняться уравнения связи, определяемые ММ.

Класс 2. Задачи, относящиеся к поддержанию концентраций целевых компонентов в выходных потоках в заданных диапазонах.

Необходимо найти такой вектор управления \mathbf{U} , при котором:

$$c \in [\underline{c}, \bar{c}]. \quad (4.6)$$

Класс 3. Задачи, решение которых обеспечивает изменение концентраций целевых компонентов в выходных потоках по заданному закону.

Необходимо найти такой вектор управления \mathbf{U} , при котором:

$$I = \frac{1}{\tau_{\text{проц}}} \int_0^{\tau_{\text{проц}}} (c(\mathbf{U}) - c_{\text{зад}}(\tau))^2 d\tau < eps, \quad (4.7)$$

где $c_{\text{зад}}(\tau)$ – заданный закон изменения концентрации компонента.

При решении задачи (4.5) необходимо ограничить моментные колебания концентрации:

$$c(\tau) - \Delta \leq c(\tau) \leq c(\tau) + \Delta, \quad (4.8)$$

где Δ – допустимая величина ошибки слежения.

Класс 4. Задачи, относящиеся к нахождению вектора управления \mathbf{U} для целей эффективного использования ресурсов системы.

а) Задача удовлетворения: необходимо найти такой вектор управления \mathbf{U} , при котором:

$$I = \left| \frac{1}{\tau_x} \int_0^{\tau_x} \iota(\mathbf{U}) d\tau - \iota_{\text{ср}} \right| < eps, \quad (4.9)$$

где ι , $\iota_{\text{ср}}$ – фактическая и среднезаданная величина показателя эффективности использования ресурса; τ_x – величина характерного интервала времени.

При решении задачи (4.5) должно выполняться ограничение:

$$\underline{\iota} \leq \iota \leq \bar{\iota}, \quad (4.10)$$

где $\underline{\iota}$, $\bar{\iota}$ – определяют допустимый диапазон изменения показателя эффективности, для интервала времени $[0, \tau_x]$.

Величина ι может выражать: удельную цикловую производительность установки, степень насыщения сорбента парами воды за время τ_x , электроэнергию потребляемую в ходе процесса адсорбционного разделения и т.п.

Величина τ_x выбирается в зависимости от показателя эффективности. Для удельной цикловой производительности $\tau_x = 2\tau_{\text{пц}}$; для затрат электроэнергии $\tau_x = \tau_{\text{проц}}$ и т.д.

б) Задача на экстремум: необходимо найти такой вектор управления U , при котором:

$$I = \left| \frac{1}{\tau_x} \int_0^{\tau_x} u(U) d\tau - u_{cp} \right| \rightarrow \min . \quad (4.11)$$

Решение задачи (4.9) позволяет выявить управления, при которых величина отклонения показателя эффективности от среднезаданного значения минимальна.

в) Задачи, относящиеся к поддержанию показателя эффективности u в заданных диапазонах:

$$u \in [u, \bar{u}], \quad (4.12)$$

где u, \bar{u} – нижний и верхний предел возможного диапазона изменения величины u .

г) Задачи, относящиеся к поддержанию показателя эффективности u в окрестности заданного закона изменения: Необходимо найти такой вектор управления U , при котором:

$$I = \frac{1}{\tau_x} \int_0^{\tau_x} (u(U) - u_{зад}(\tau))^2 d\tau < eps , \quad (4.13)$$

где $u_{зад}(\tau)$ – заданный закон изменения показателя эффективности.

При решении задачи (4.13) необходимо ограничить моментные колебания величины u :

$$u(\tau) - \Delta \leq u(\tau) \leq u(\tau) + \Delta , \quad (4.14)$$

где Δ – допустимая величина ошибки слежения.

Класс 5. Комбинированные задачи, возникающие при совместном решении управления задач из классов 1 – 4. Формирование множества комбинированных задач управления представлено в табл. 4.3.

4.3. Комбинированные задачи управления

Класс задач управления	Класс 1	Класс 2	Класс 3	Класс 4
$c_{мск}$	⊗			⊗
$c_{бск}$		⊗		
$G_{бск}$		⊗		
$G_{мск}$	⊗			
G_D		⊗		⊗
$G_{пит}$		⊗		
$P(\tau)$			⊗	⊗

Каждой выходной переменной ставится в соответствие класс задач управления (класс 1 – 3). Задача управления из класса 4 ставится в соответствие группе выходных воздействий, так как показатели эффективности, как правило, вычисляются по их совокупности.

В табл. 4.3 показан пример формирования комбинированной задачи управления для установки адсорбционного разделения, в которой обеспечивается: постоянная производительность по целевому компоненту, при сохранении технологических ограничений на $c_{бск}, G_{бск}, G_D, G_{пит}$; давление в адсорбере изменяется по заданному закону $P(\tau)$.

Таким образом, на рассматриваемом множестве выходных переменных с учетом классов задач управления 1 – 3 в общем случае может быть сформулировано $3^7 = 2187$ различных комбинированных задач управления.

Таким образом были сформированы пять классов задач управления процессом адсорбционного разделения, показан принцип формирования множества комбинированных задач управления.

4.5. Формализация ограничений и допущений в задачах управления

При разработке системы управления процессом адсорбционного разделения необходимо учитывать ограничения, накладываемые на параметры процесса требованиями технологического регламента (технического задания заказчика).

Рассмотрим последовательно входные переменные объекта управления $T(\tau_{пц}), F, P_{пит}, \Psi_{прод}, T_{пит}, P_{мск}, P_{бск}$.

1. Время полуцикла $\tau_{пц}$: техническим заданием ограничения не накладываются. Минимальное значение $\tau_{пц}$ опреде-

ляется быстройдействием элементов системы управления:

$$\tau_{\text{пц}} \leq \tau_{\text{пц}}. \quad (4.13)$$

2. Флегмовое число F : ограничения накладываются косвенно требованиями к расходу исходной и продукционной газовой смеси, величины которых однозначно определяют предельно возможное значение \bar{F} :

$$0 \leq F \leq \bar{F}. \quad (4.14)$$

3. Давление смеси на входе $P_{\text{пит}}$ имеет верхнее и нижнее ограничение:

$$\underline{P}_{\text{пит}} \leq P_{\text{пит}} \leq \bar{P}_{\text{пит}}. \quad (4.15)$$

4. Степень открытия продукционного клапана $\Psi_{\text{прод}}$: ограничения возможны в тех случаях, когда задаются значения $\underline{\Psi}_{\text{прод}}$ и $\bar{\Psi}_{\text{прод}}$ с целью использования специальных свойств расходной характеристики клапана (линейность, экстремальность и т.п.).

$$\underline{\Psi}_{\text{прод}} \leq \Psi_{\text{прод}} \leq \bar{\Psi}_{\text{прод}}. \quad (4.16)$$

5. Температура исходной газовой смеси $T_{\text{пит}}$: накладывается двустороннее ограничение.

$$\underline{T}_{\text{пит}} \leq T_{\text{пит}} \leq \bar{T}_{\text{пит}}. \quad (4.17)$$

6. Давления на выходах продукционной $P_{\text{мск}}$ и сбросовой смеси $P_{\text{бск}}$ ограничены верхним и нижним значениями:

$$\underline{P}_{\text{мск}} \leq P_{\text{мск}} \leq \bar{P}_{\text{мск}}, \quad \underline{P}_{\text{бск}} \leq P_{\text{бск}} \leq \bar{P}_{\text{бск}}. \quad (4.18)$$

Рассмотрим выходные переменные объекта управления: $\mathbf{c}_{\text{мск}}, \mathbf{c}_{\text{бск}}, G_{\text{бск}}, G_{\text{мск}}, G_{\text{д}}, G_{\text{пит}}, P(\tau)$.

1. Состав продукционной газовой смеси $\mathbf{c}_{\text{мск}}$ является, как правило, целью управления. В зависимости от поставленной задачи управления на компоненты вектора $\mathbf{c}_{\text{мск}}$ могут накладываться ограничения различной степени жесткости.

2. Состав сбросовой $\mathbf{c}_{\text{бск}}$ смеси, как правило, не регламентируется.

3. Расход сбросовой смеси $G_{\text{бск}}$, однозначно связан с ограниченными величинами $G_{\text{пит}}$ и $G_{\text{мск}}$, т.е. является также ограниченной величиной.

4. Величина расхода продукционной смеси $G_{\text{мск}}$ является, как правило, целью управления и ограничена диапазоном Δ возможных отклонений от заданного значения $G_{\text{мск}}$.

5. Расходы промывочной газовой смеси $G_{\text{д}}$ и исходной $G_{\text{пит}}$ ограничиваются сверху.

6. Динамика давления газовой смеси в адсорбере $P(\tau)$ характеризуется рядом величин (максимальная скорость сброса и подъема давления), которые определяют характер протекания гидромеханических процессов в адсорбере. Опыт эксплуатации показывает, что необходимо учитывать ограничения на величину производной давления:

$$\dot{P}_{\text{min}} \leq \dot{P}(\tau) \leq \dot{P}_{\text{max}}. \quad (4.19)$$

Рассмотрим допущения, которые необходимо учитывать при постановке и решении задач управления процессом адсорбционного разделения:

1. Отсутствуют ошибки измерения и задания.
2. При работе установки гидравлическое сопротивление слоя в адсорбере не изменяется.
3. Допущение, связанное с преимущественным управлением по какому-либо компоненту в продукционной смеси.
4. Все адсорберы в установке имеют одинаковые химико-технологические характеристики.
5. Принятие функционально заданного характера возмущающих воздействий.

Таким образом, по техническому заданию для процесса концентрирования кислорода (п. 2.5) необходимо обеспечить следующие требования:

1. Реализация требуемого техдокументацией адсорбера алгоритма управления процессом осуществляется механизмами БКДУ, не входящими в состав адсорбера.
2. В адсорбер должен подаваться чистый воздух (размеры микрочастиц не более 40 мкм), не содержащий масла, имеющий рабочую температуру от 10 до 30 °С и массовую концентрацию влаги не более 10 г/м³.
3. Потребляемый расход воздуха должен быть не более 20 кг/ч под избыточным давлением от 0,2 до 0,3 МПа (от 2 до 3 кгс/см²).
4. При работе двух адсорберов в циклическом режиме «сорбция-десорбция» должна продуцироваться обогащенная

кислородом дыхательная газовая смесь с объемной концентрацией кислорода, регулируемой при изменении абсолютного давления окружающего воздуха.

5. Диапазон изменения объемной концентрации кислорода от 30 % при атмосферном давлении 100 кПа до 60 % при атмосферном давлении 40 кПа.

6. Избыточное давление дыхательной газовой смеси в ресивере должно быть не менее 100 кПа при избыточном давлении воздуха на входе в адсорбер не менее 200 кПа.

7. Атмосферное давление на выходе из адсорбера при десорбции (продувке) должно быть не более 100 кПа при объемной концентрации кислорода в дыхательной газовой смеси 30 % и не более 40 кПа при объемной концентрации кислорода в дыхательной газовой смеси 60 %.

8. Производительность двух адсорберов должна обеспечивать возможность потребления продуцируемой дыхательной газовой смеси с расходом 60 л/мин при атмосферном давлении от 40 до 110 кПа.

9. Время выхода адсорбера на рабочий режим не более 2 мин с момента включения БКДУ.

10. Время одного сеанса работы БКДУ – до 10 часов.

На основе проведенного анализа процесса как объекта управления классификацией режимов функционирования определены технологические ограничения и принимаемые допущения. Для математической постановки и решения конкретных задач управления требуется выбрать тип системы автоматического управления, найти алгоритм ее функционирования учитывая результаты предыдущих разделов.

4.6. Построение системы управления процессом адсорбционного разделения

Целью данного раздела является построение системы управления процессом адсорбционного разделения в БКДУ.

4.6.1. Выбор и решение задачи управления процессом адсорбционного разделения в бортовой кислорододобывающей установке

Из условий технического задания, а также технологических ограничений следует, что необходимо решить комбинированную задачу управления.

Задача управления: необходимо в заданном диапазоне возмущающих воздействий найти такой вектор управления $U = \{\tau_{\text{проц}}, F\}$, при котором:

$$I = \left(\frac{1}{\tau_{\text{проц}}} \int_0^{\tau_{\text{проц}}} p_{\text{O}_2}(U) dt - p_{\text{O}_2, \text{сп}} \right) \rightarrow \min, \quad (4.20)$$

где p_{O_2} , $p_{\text{O}_2, \text{сп}}$ – фактическое и среднезаданное значение (физ. норма $\approx 22\ 000$ Па) парциального давления кислорода в производственной газовой смеси, Па;

с учетом ограничений на:

а) на отклонение фактического значения p_{O_2} от физиологической нормы:

$$\bar{p}_{\text{O}_2} \leq p_{\text{O}_2} \leq \underline{p}_{\text{O}_2}, \quad (4.21)$$

где \bar{p}_{O_2} , $\underline{p}_{\text{O}_2}$ – величины предельно допустимого верхнего и нижнего парциального давления кислорода в дыхательной смеси;

б) производительность установки по производственной смеси:

$$\underline{G}_{\text{мск}} \leq G_{\text{мск}} \leq \bar{G}_{\text{мск}}; \quad (4.22)$$

в) потребление исходной газовой смеси:

$$\frac{1}{\tau_{\text{проц}}} \int_0^{\tau_{\text{проц}}} G_{\text{пит}} dt < \bar{G}_{\text{пит}} \quad (4.23)$$

и выполнении соответствующих уравнений связи в виде математической модели (п. 2.5). При этом принимаются допущения п. 4.4 и используется трехадсорберная установка с прямоточным подъемом и с противоточным сбросом давления в адсорберах с переменным сечением шихты.

Компоненты вектора управляющих воздействий $U = \{\tau_{\text{пц}}, F\}$ можно разделить на два типа: $F_i(d_{L_i})$ – параметры, изменение которых может осуществляться непрерывно; $T(\tau_{\text{пц}})$ – время полуцикла параметр имеющий дискретный характер.

Рассматриваемая задача не может быть решена в представленном виде, так как неизвестны заранее: характер потребления продукционной смеси (интенсивность дыхания) $G_{\text{мск}}(\tau)$; характер изменения барометрического давления $P_{\text{бск}}(\tau)$ (различные режимы полета: кабрирование, пикирование, планирование); давления в кабине летательного аппарата $P_{\text{потр}}(\tau)$ (режим разгерметизации); влажность разделяемой газовой смеси $\mathbf{c}_{\text{питг}}(\tau)$ (полет над морем и сушей). Поэтому исходную задачу необходимо декомпозировать на две – внешнюю и внутреннюю.

Внешняя задача. Необходимо найти такую величину времени полуцикла $\tau_{\text{пц}}$, при некоторых наиболее вероятных $\hat{G}_{\text{мск}}(\tau)$, $\hat{P}_{\text{бск}}(\tau)$, $\hat{P}_{\text{потр}}(\tau)$, $\hat{\mathbf{c}}_{\text{питг}}(\tau)$ и заданных \hat{F} чтобы выполнялись условия (4.20) – (4.23) при уравнениях связи в виде математической модели (п. 2.5).

Внутренняя задача.

$$\text{Для } G_{\text{мск}}(\tau) = \hat{G}_{\text{мск}}(\tau) + \Delta G_{\text{мск}}(\tau), \quad P_{\text{бск}}(\tau) = \hat{P}_{\text{бск}}(\tau) + \Delta P_{\text{бск}}(\tau),$$

$P_{\text{потр}}(\tau) = \hat{P}_{\text{потр}}(\tau) + \Delta P_{\text{потр}}(\tau)$, $\mathbf{c}_{\text{питг}}(\tau) = \hat{\mathbf{c}}_{\text{питг}}(\tau) + \Delta \mathbf{c}_{\text{питг}}(\tau)$ и найденного времени $\tau_{\text{пц}}$ необходимо найти значения $\Delta \hat{F}$, корректирующие решение внешней задачи, такие, что:

$$I = \left(\frac{1}{\tau_{\text{проц}}} \int_0^{\tau_{\text{проц}}} p_{\text{O}_2}(F) d\tau - p_{\text{O}_2\text{ср}} \right)^2 \rightarrow \min \quad (4.25)$$

с учетом ограничений (4.21) – (4.23).

Алгоритм нахождения F независим от алгоритма нахождения времени $\tau_{\text{пц}}$. Такой подход позволяет переносить результаты решения внутренней задачи на системы, где внешняя задача отсутствует ($G_{\text{мск}}(\tau)$, $P_{\text{бск}}(\tau)$, $P_{\text{потр}}(\tau)$, $\mathbf{c}_{\text{питг}}(\tau)$ – постоянные функции).

Исходя из того, что в ходе процесса величина возмущающих воздействий может отклоняться от рассмотренных при решении внутренней задачи, а также из-за того, что технические средства контроля и управления обладают ошибками, то для коррекции решения внешней и внутренней задач в реальном времени необходимо определить целесообразный класс систем управления, обеспечивающий лучшие динамические, технико-экономические характеристики. Для этого требуется определить класс алгоритмов управления с учетом технико-экономических ограничений. Задача выбора целесообразного класса ставилась в работах [71, 72] и может быть сформулирована следующим образом: из совокупности заданных классов управления $\{P_i\}$ выбрать класс, наиболее удовлетворяющий набору заданных технико-экономических ограничений:

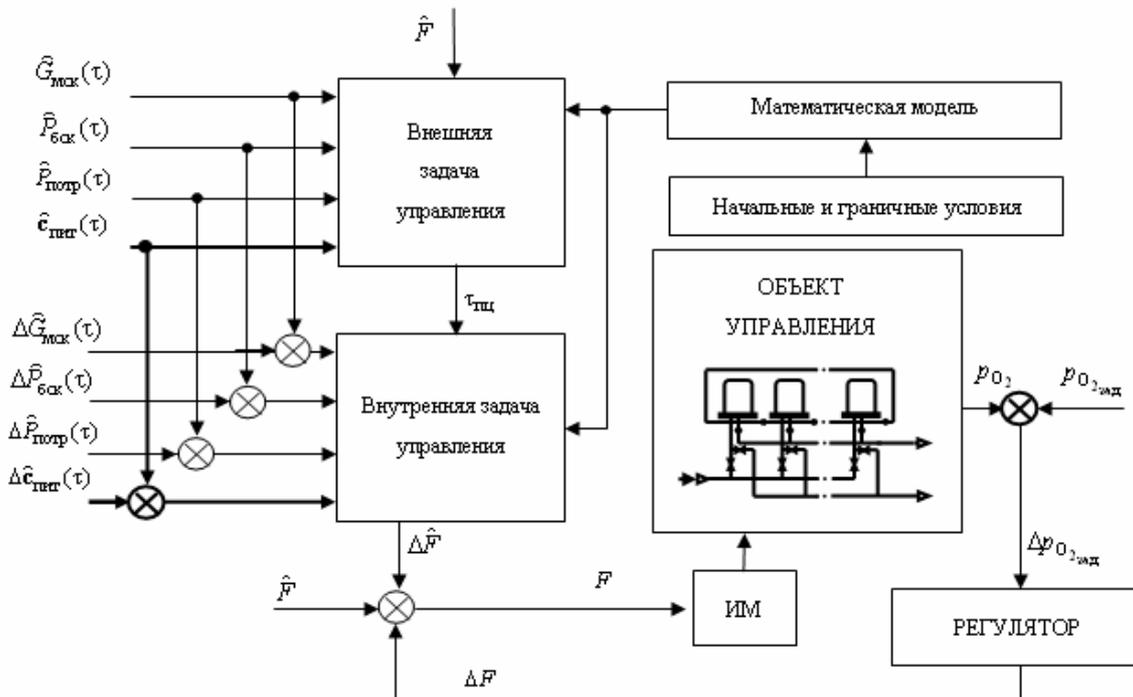


Рис. 4.7. Функционально-структурная схема решения общей задачи управления

Φ , $\bar{\Phi}$, σ_0 , δ , $\sigma_{\text{и}}$, где Φ – стоимость общего исследования классов систем управления; $\bar{\Phi}$ – стоимость исследования отдельного класса и физической реализации на его основе системы управления; σ_0 – время окупаемости системы управления; $\delta(\tau)$ – динамические свойства; $\sigma_{\text{и}}$ – суммарное заданное время исследования всех классов систем управления. Алгоритм выбора класса систем управления показан на рис. 4.8.

Были рассмотрены класс систем автоматической стабилизации (САС), систем статической и динамической оптимизации (ССО, СДО).

Блок-схема системы управления, реализующая САС, ССО и СДО изображена на рис. 4.8, а. более подробная реализация этой системы управления, использующая возможности построения адаптивных структур на основе применения разработанной математической модели, приведена на рис. 4.8, б.

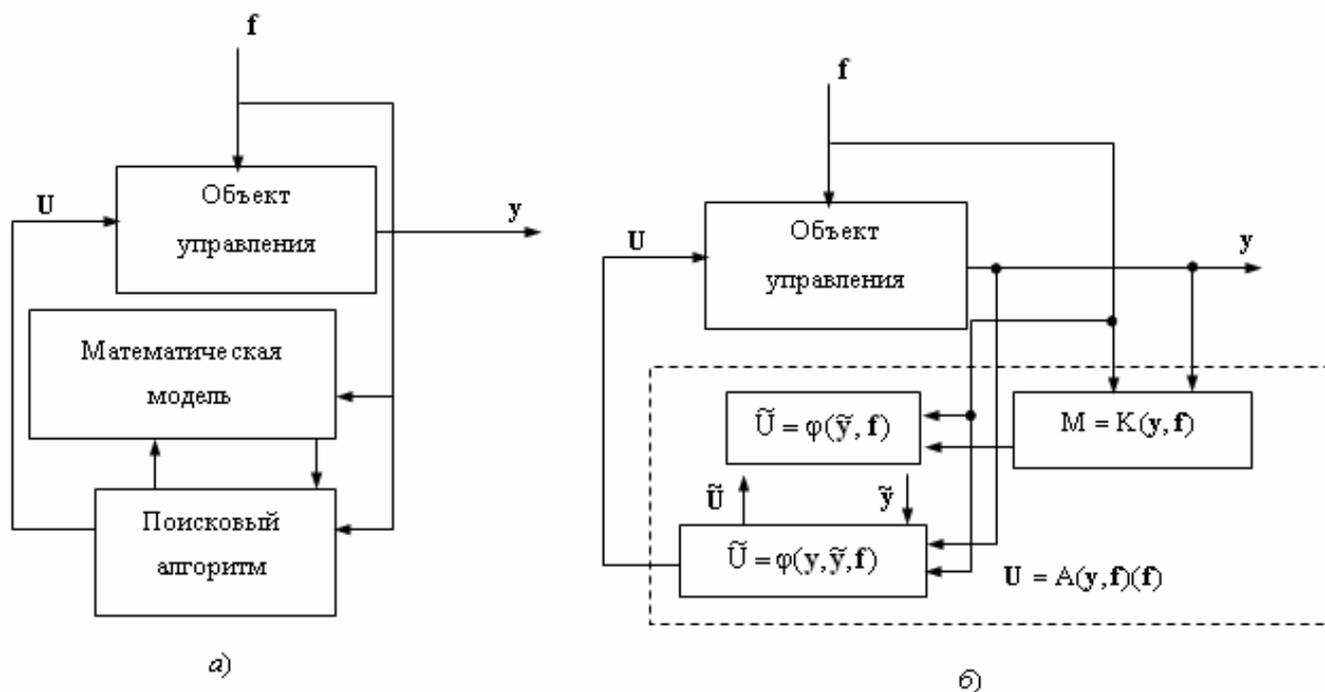


Рис. 4.8. Блок-схема системы управления для САС, ССО, СДО

Исследования проводились в два этапа. На первом этапе рассматривались режимы идеального функционирования процесса адсорбционного разделения с абсолютно точным исполнением прогноза по возмущающим воздействиям. На втором этапе рассматривалось функционирование системы с возмущающим отклонением в прогнозирующих воздействиях.

Результаты исследования показали, что после первого этапа для последующих исследований были оставлены два класса САС и ССО, а СДО отброшен из-за экономических соображений. На втором этапе целесообразным оказался САС, так как ССО не обеспечила динамических показателей. Выбор САС также определен тем, что такие системы управления характеризуются невысокой стоимостью, надежностью, простотой в обращении и в отсутствии необходимости в высококвалифицированном персонале при их обслуживании по сравнению с другими САУ.

На рис. 4.9 приняты обозначения – \mathbf{f} , \mathbf{U} , \mathbf{y} – векторы возмущений, найденных управлений и фазовых координат; $\tilde{\mathbf{U}}$ – поисковое управление; $\tilde{\mathbf{y}}$ – вектор рассчитанных по модели фазовых координат; $\mathbf{M}(\tilde{\mathbf{U}}, \mathbf{f})$ – математическая модель; $\varphi(\mathbf{y}, \tilde{\mathbf{y}}, \mathbf{f})$ – поисковый алгоритм управления; $K(\mathbf{y}, \mathbf{f})$ – оператор, меняющий свойства математического описания.

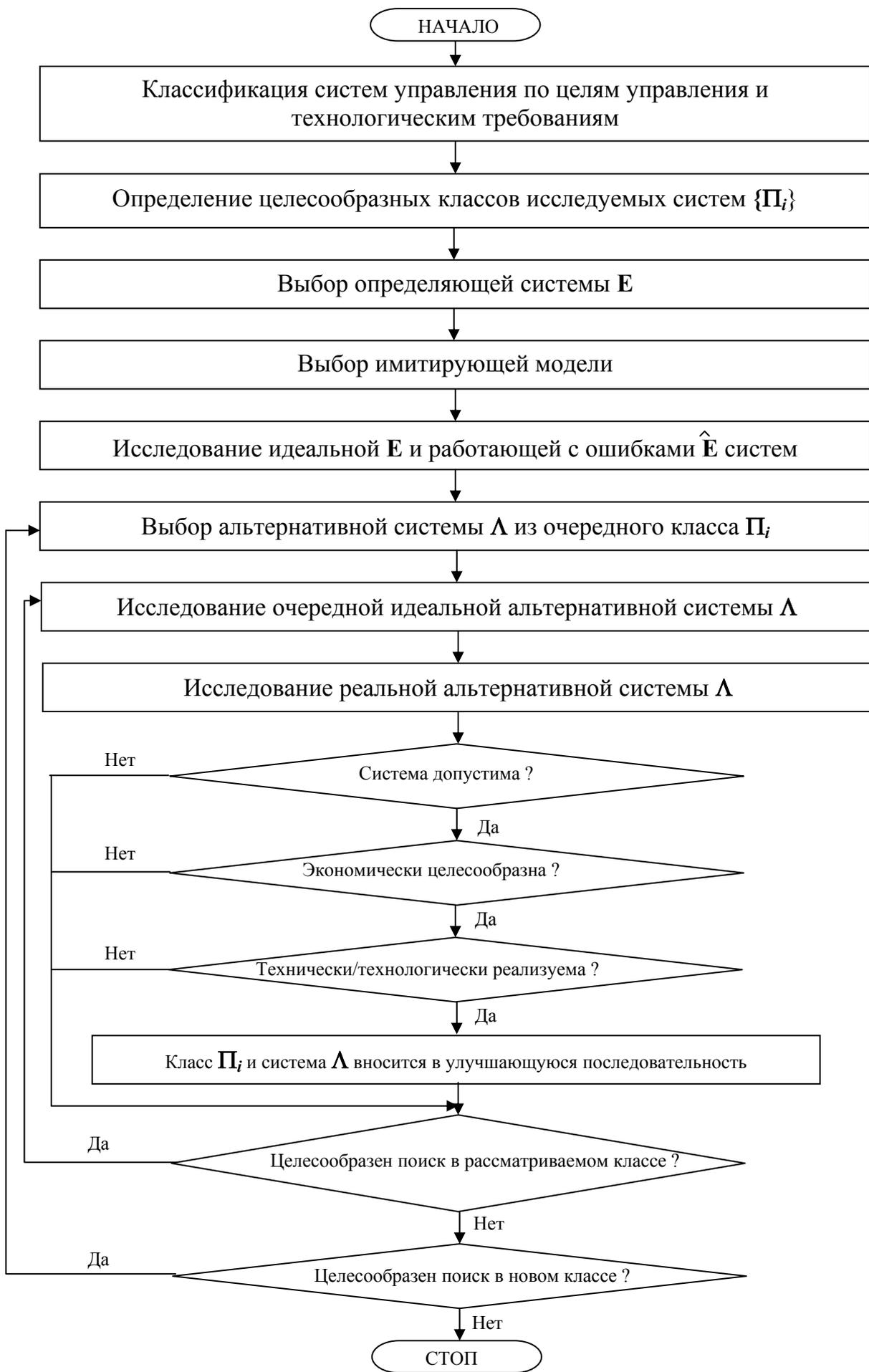


Рис. 4.9. Алгоритм выбора класса систем управления

4.6.2. Алгоритм решения внутренней и внешней задачи управления

После решения задач выбора целесообразной структуры системы управления из САС, ССО и СДО необходимо найти такую топологию САС, при которой достигались бы наилучшие значения функционала качества.

Алгоритм выбора целесообразной САС представлен на рис. 4.10.

Он представляет собой взаимодействие подсистем экономической оценки возможности и проверки динамических характеристик систем.

Алгоритм реализует интерактивный интерфейс, где лицу, принимающему решение, предлагается возможность либо задавать топологические образы каждой из САС, либо поручить алгоритму выбора из базы данных.

Имеется два типа систем. Первый тип представляет собой аналоги, имеющие или имевшие место при управлении подобными объектами, второй – типовые решения, принимаемые на основе анализа имитационных исследований объекта управления, либо экспертной информации. Алгоритм выбора целесообразных топологий САС имеет возможность функционировать и в автоматическом режиме. Этот режим отрабатывается в ON-LINE при условии, что нестационарность объекта настолько существенно изменила его параметры, что функционирующая система оказывается неспособной обработать требуемые топологические задания путем параметрической оптимизации алгоритма управления. В этом случае осуществляется поиск новой топологии.

Для решения общей задачи управления структурная схема системы управления будет иметь вид (см. рис. 4.2), где проводится корректировка программы управления с целью стабилизации выходной величины в окрестности задания.

Для алгоритма (4.5) были выбраны следующие одноконтурные системы управления – САС: с позиционным, пропорциональным, пропорционально-интегральным, пропорционально-интегрально-дифференцирующим регулированием.

Вектор весовых коэффициентов принимаем в виде $\mathbf{W} = \{1; 0,01; 0,01\}$. Вектор примет вид $\Xi = \{0,62; 0,63; 0,532; 0,516\}$. Таким образом, реализации подлежит система управления с ПИД регулятором.

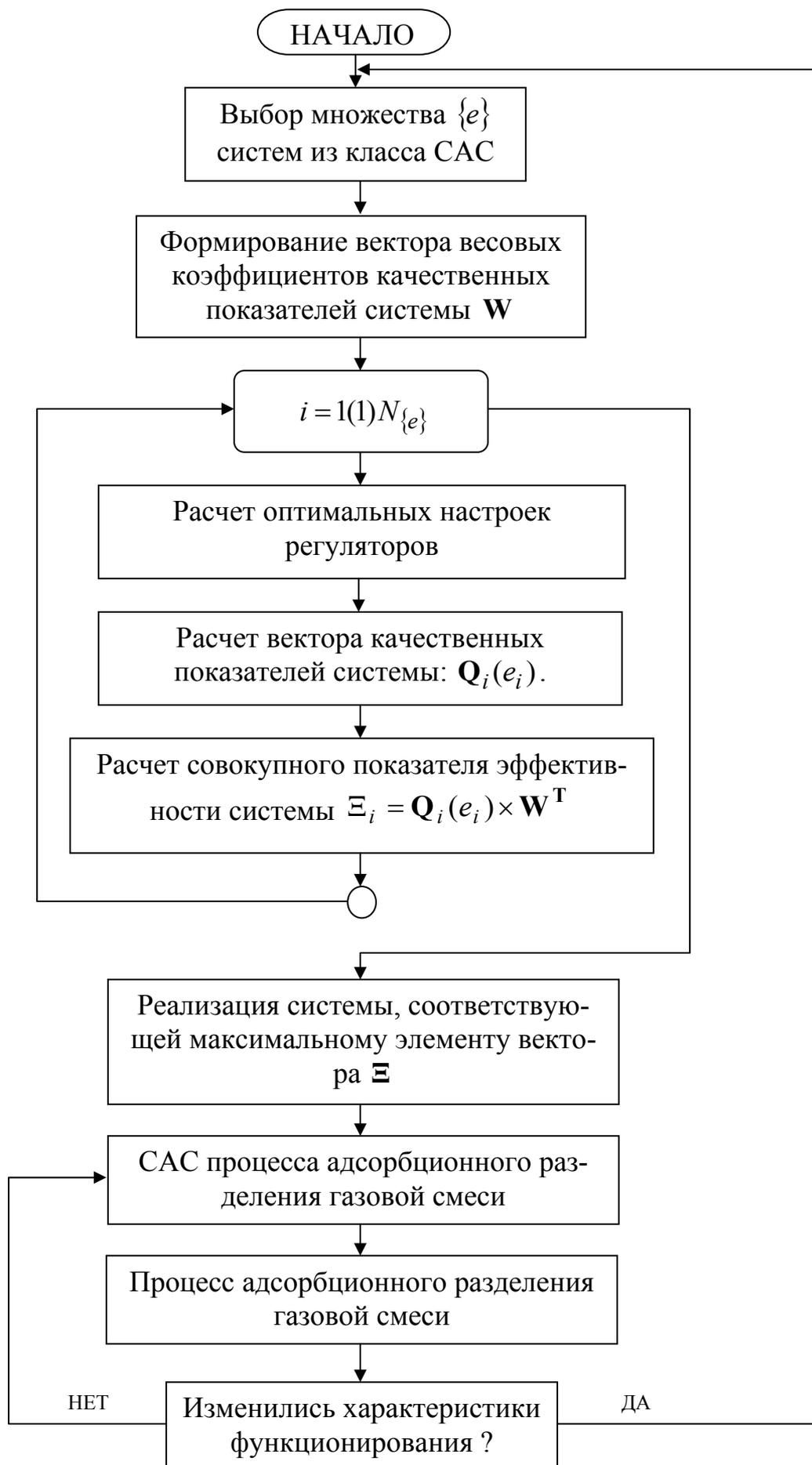


Рис. 4.10. Алгоритм выбора целесообразной САС

4.4. Характеристика САС

Показатели САС	Тип регулятора			
	Позиционный	П	ПИ	ПИД
Максимальная динамическая ошибка	0,6	0,6	0,5	0,48
Относительная стоимость исследования и реализации	1	1,5	1,5	1,7
Время на исследование и реализацию	1	1,5	1,7	1,9

Внутренняя задача управления рассматривается между двумя моментами времени, в которых происходит решение внешней задачи. Таким образом, величина времени полуцикла уже определена до момента решения внутренней задачи. Принимаем, что ошибки измерения и задания могут не учитываться. Времена запаздывания, характеризующие информационные и функциональные задержки в соответствующих элементах САС, рассмотрим через суммарное время запаздывания по каналу управления. Суммарное запаздывание определяют запаздывания в каналах измерения, в каналах передачи управляющих воздействий, инерционность исполнительного механизма и объекта.

Рассмотрим алгоритм решения внешней задачи управления. В начальный момент функционирования установки адсорбционного разделения должна быть определена величина времени полуцикла $\tau_{\text{пц}}$. Это время определяется исходя из средних величин возмущающих воздействий, задаваемых на основе анализа функционирования БКДУ.

Время полуцикла может быть задано жестко извне, исключая необходимость решения внешней задачи управления. Жесткое начальное задание алгоритма вполне приемлемо при возможности его коррекции в реальном времени.

На рис. 4.11 представлена блок-схема алгоритма решения внешней задачи управления.

На рис. 4.12 приведена структурная схема одного из возможных вариантов реализации замкнутой системы управления нижнего уровня.



Рис. 4.11. Блок-схема алгоритма решения внешней задачи управления

РО – регулирующий орган; ДД – датчик давления. На верхний уровень системы управления поступают данные по парциальному давлению кислорода в производственной смеси; по текущему потреблению дыхательной смеси; по давлениям в кабине пилота $P_{\text{потр}}$ и за бортом $P_{\text{бск}}$. Сигнал управления, поступающий с регулятора P_1 на исполнительный механизм ИМ1, подается с запаздыванием на исполнительные механизмы ИМ2 и ИМ3, тем самым реализуется циклограмма переключения клапанов.

Такая реализация возможна в случае идентичности процессов протекающих в адсорберах. Аналогично функционирует контур управления обратной продувкой.

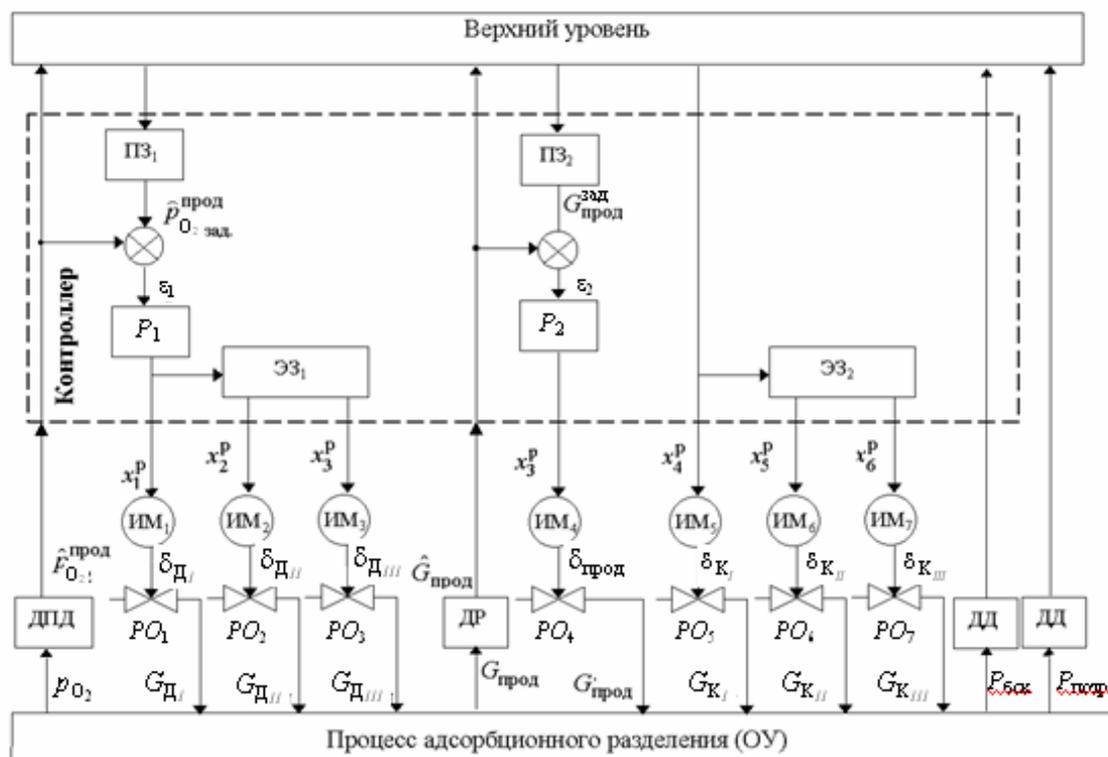


Рис. 4.12. Структурная схема замкнутой СУ нижнего уровня АСУТП

Заключение

Моделирование стало эффективным средством исследования и проектирования систем жизнеобеспечения. Актуальность математических моделей непрерывно возрастает из-за их гибкости, адекватности реальным системам, невысокой стоимости реализации на базе современных ЭВМ. Особенно эффективно применение моделирования на этапах проектирования изделий, технологического оборудования и систем управления, когда особо высока цена ошибочных решений.

Использование ресурсов современной вычислительной техники позволило увеличить сложность моделей при исследовании систем жизнеобеспечения, учитывающих многообразие факторов, имеющих место в реальных технологических системах.

На основе фундаментальных закономерностей процесса адсорбции в данной работе рассмотрено математическое моделирование процесса короткоциклового безнагревной адсорбции (КБА), которое является основой для выбора наилучшей системы управления, оптимальных режимов работы и интегрированного проектирования оборудования и систем управления установок КБА.

Принимая во внимание тенденции развития технического прогресса и возрастающие возможности вычислительной техники дальнейшее развитие моделирования систем жизнеобеспечения следует ожидать в направлении создания интеллектуальных самосовершенствующихся моделей, способных без участия разработчика изменять свою структуру и подстраиваться под требования вновь возникающих задач.

Список Литературы

1. Кельцев, Н.В. Основы адсорбционной техники / Н.В. Кельцев. – М. : Химия, 1984. – 512 с.
2. Фенелонов, В.Б. Введение в физическую химию формирования супрамолекулярной структуры адсорбентов и катализаторов / В.Б. Фенелонов. – Новосибирск : Изд-во СО РАН, 2004. – 442 с.
3. Тимофеев, Д.П. Кинетика адсорбции / Д.П. Тимофеев. – М. : Изд-во АН СССР, 1962. – 387 с.
4. Ruthven, D.M. Pressure Swing Adsorption / D.M. Ruthven, S. Farooq, K. Knaebel. – N.Y. : VCH, 1994. – 387 p.
5. Глупанов, В.Н. Получение кислорода и азота адсорбционным разделением воздуха / В.Н. Глупанов, Ю.И. Шумяцкий, Ю.А. Серегин. Сер. ХМ-4. – М. : ЦИНТИНЕФТЕМАШ, 1991. – 47 с.
6. Радушкевич, Л.В. Связь теории динамики адсорбции с термодинамикой неравновесных процессов / Л.В. Радушкевич // Труды третьей Всесоюзной конференции по теоретическим вопросам адсорбции. – М. : Наука, 1973. – С. 73 – 82.
7. Глупанов, В.Н. Получение кислорода и азота адсорбционным разделением воздуха / В.Н. Глупанов, Ю.И. Шумяцкий, Ю.А. Серегин, С.А. Брехнер // Промышленная и санитарная очистка газов. Обзорная информация. – М. : ЦИНТИХИМ-НЕФТЕМАШ, 1991.
8. Брунауэр, С. Адсорбция газов и паров / С. Брунауэр. – М. : Издательство, 1948.
9. Де Бур, Я. Динамический характер адсорбции / Я. Де Бур. – М. : Издательство, 1962.
10. Корн, Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн. – М. : Наука, 1984. – 831 с.
11. Акулов, А.К. Моделирование разделения бинарных газовых смесей методом адсорбции с колеблющимся давлением / А.К. Акулов. Дис. д-ра техн. наук. – СПб. : ГТУ, 1996. – С. 304.
12. Цеолиты, их синтез, свойства и применение : материалы II Всесоюзного совещания по цеолитам. – Л.-М. : Наука, 1965.
13. Миронова, В.А. Математические методы термодинамики при конечном времени / В.А. Миронова, С.А. Амелин, А.М. Цирлин. – М. : Химия, 2000. – 384 с.
14. Опыт проектирования и эксплуатации адсорбционных установок : сб. ст. АН СССР. – М., 1971. – 243 с.
15. Лукин, В.Д. Циклические адсорбционные процессы / В.Д. Лукин, А.В. Новосельский. – Л. : Химия, 1989. – 254 с.
16. Aviation, Space and Environmental Medicine, 1985. – № 1. – P. 35 – 42.
17. Грег, С. Адсорбция. Удельная поверхность. Пористость / С. Грег, К. Синг. – М. : Мир, 1970. – 408 с.
18. Миркин, А.З. Трубопроводные системы : справочник / А.З. Миркин, В.В. Усиныш. – М. : Химия, 1991. – 256 с.
19. Брек, Д. Цеолитовые молекулярные сита / Д. Брек. – М. : Мир, 1976.
20. Гурвич, Л.Г. // ЖРФХО. – 1915 (47). – С. 805.
21. Устинов, Е.А. // Журнал прикладной химии. 1987 (60). – № 1. – С. 74 – 78.
22. Лезин, Ю.С., Дубинин М.М. // ДАН СССР, 1966. – Т. 171. – № 2. – С. 382 – 384.
23. Дубинин, М.М., Тодес О.М., Лезин Ю.С. // Изв. АН СССР. Серия хим. – 1970. – № 4. – С. 767 – 772.
24. Gluckauf F., Trans // Faraday Soc. – 1955. – V. 51. – N 11. – P. 1540 – 1551.
25. Vermeulen T., Ind // Eng. Chem. – 1953. – V. 45. – N 8. – P. 1664 – 1670.
26. Geser J., Ganjar L. // AIChE Journal. – 1962. – V. 8. – N 4. – P. 491 – 497.
27. Трепвел, Б. Хемосорбция / Б. Трепвел. – М. : Издательство, 1958. – С. 327.
28. Хайрер, Э. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи / Э. Хайрер, С. Нерсетт, Г. Ваннер. – М. : Мир, 1990. – 512 с.
29. Акулов, А.К. Динамика адсорбции бинарной смеси газов в случае стационарного слоя / А.К. Акулов, Е.А. Устинов // Журнал прикладной химии. – 1986. – № 6. – С. 1245 – 1248.
30. Кафаров, В.В. Системный анализ процессов химической технологии / В.В. Кафаров, И.Н. Дорохов. – М. : Наука, 1976 – 499 с.
31. Устинов, Е.А. Моделирование циклических адсорбционных процессов разделения газов / Е.А. Устинов // Журнал прикладной химии – 1980. – Т. 53. – № 1. – С. 136 – 141.
32. Устинов, Е.А. Закономерности динамики циклических адсорбционных процессов разделения бинарных газовых смесей / Е.А. Устинов // Журнал прикладной химии. – 1980. – Т. 53. – № 9. – С. 2015 – 2021.
33. Kauser, J.C. Pressure swing adsorption: Experimental Study of equilibrium theory / J.C. Kauser, K.S. Knaebel. Chem. Eng. Sci. – 1986. – V. 41. – N 11. – P. 2931 – 2360.
34. Pressure swing adsorption for a system with a Freundlich isotherms / X. Lu, R. Madey, D. Rothstein, M. Jaroniec, J.C. Huang // Separation science and technology. – 1987. – V. 22. – N 6. – P. 1547 – 1556.
35. Дейч, М.Е. Газодинамика двухфазных сред / М.Е. Дейч, Г.А. Филиппов. – М. : Энергия, 1968. – 424 с.

36. Архаров, А.М. Криогенные системы / А.М. Архаров, И.В. Марфенина, Е.И. Микулин. – М. : Машиностроение, 1996. – Т. 1. – 576 с.
37. Горбунов, М.Б. Создание экспериментальных установок и разработка методики исследования термодинамического равновесия в системе N_2-O_2 – цеолит NaX применительно к задаче проектирования адсорбционных аппаратов разделения воздуха : дис. ... канд. техн. наук / М.Б. Горбунов. – М. : МВТУ, 1984.
38. Вяхирев, Д.А. Руководство по газовой хроматографии / Д.А. Вяхирев, А.Ф. Шушунова. – М. : Высшая школа, 1975. – 304 с.
39. Прибылов, А.А. Адсорбционные явления при высоких давлениях и температурах / А.А. Прибылов, С.М. Калашников, В.В. Серпинский // Изв. АН СССР. – Сер. Хим. – 1990. – № 6. – С. 1233 – 1238.
40. Никифоров, Ю.В. Получение обогащенного кислородом воздуха методом безнагревной адсорбции / Ю.В. Никифоров, А.Н. Слыщенко // Вестник МГТУ. – 1996. – Вып. Криогенная и холодильная техника. – С. 27 – 33.
41. Sandaram, N. Pressure drop effects in the pressurization and blowdown steps of pressure swing adsorption / N. Sandaram, P.C. Wankat. Chem. Engn. Sci, 1988. – V. 43. – N 1. – P. 123.
42. Путин, С.Б. Математическое моделирование, алгоритмы и системы управления процессом регенерации воздуха в биотехническом комплексе : дис. ... канд. техн. наук. – Тамбов, 1999. – 191 с. ДСП.
43. Тихонов, А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. – М. : Гостехиздат. 1953. – 143 с.
44. Торочешников, Н.С. Динамика изотермической адсорбции в режиме параллельного переноса фронта сорбции / Н.С. Торочешников, Н.В. Кельцев, Ю.И. Шумяцкий // Труды третьей всесоюзной конференции по теоретическим вопросам адсорбции. – М. : Наука, 1973. – С. 110 – 115.
45. Колбанцев, А.В. Математическое моделирование сорбционных процессов с обратными связями в системах, содержащих несколько аппаратов / А.В. Колбанцев, В.А. Колин и др. // Деп. в ВИНТИ. – 1983. – № 4228-83. – С. 1.
46. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс // Б. Банди; пер. с англ. – М. : Радио и связь, 1988. – 128 с.
47. Nilchan, S. On the Optimisation of Periodic Adsorption Processes / S. Nilchan, C.C. Pantelides. Adsorption. – 1998. – N 4. – P. 113 – 147.
48. Salil U. Rege, Ralph T. Yang Limits for Air Separation by Adsorption with LiX Zeolite, Ind. Eng. Chem.Res. – 1997. – N 36. – P. 5358 – 5365.
49. Ravi Kumar Vacuum Swing Adsorption Process for Oxygen Production – A Historical Perspective, Separation science and technology. – 1996. – N 31(7). – P. 877 – 893.
50. Громов, Ю.Ю. Моделирование и управление процессом регенерации воздуха в герметически замкнутом объеме / Ю.Ю. Громов, В.Г. Матвейкин, Б.В. Путин. – М. : ТОХТ, 1997. – Т. 3. – № 6. – С. 638 – 648.
51. Путин, С.Б. Вопросы математического моделирования и управления процессом регенерации воздуха / С.Б. Путин // Математические методы в химии и химической технологии : тез. докл. Междунар. конф. – Новомосковск, 1997. – Т. 2. – Сек. 1. – С. 87.
52. Keefer, G. Modular pressure swing adsorption apparatus Pat / G. Keefer. USA 20030070550, 2003.
53. Keefer, G. PSA with adsorbents sensitive to contaminants Pat / G. Keefer. USA 20020134246, 2002.
54. Keefer, G. Life support oxygen concentrator Pat / G. Keefer. USA 20010023640, 2001.
55. Hunter, Donald W. Valve device for P.S.A. or R.P.S.A. systems Pat / W. Hunter Donald USA 4877429, 1989.
56. Keefer, G. High frequency pressure swing adsorption Pat / G. Keefer. USA 6176897, 2001.
57. McCombs; Norman R. Capacity control system for pressure swing adsorption apparatus and associated method Pat. USA 5474595, 1995.
58. Frederick W. Vacuum pressure swing adsorption process Pat. USA 5415683, 1995.
59. Kulish, Stanley, Swank, Robert P. Rapid cycle pressure swing adsorption oxygen concentration method and apparatus Pat. USA [5827358](#), 1998.
60. Серпионова, Е.Н. Промышленная адсорбция газов и паров / Е.Н. Серпионова. – М. : Высшая школа, 1969. – 416 с.
61. Тарасов, В.С. Моделирование технологических процессов с распределенными параметрами : учебное пособие / В.С. Тарасов. – Л. : Химия, 1963. – 243 с.
62. Автоматизированное проектирование систем управления / под ред. М. Джемшиди и Дж.Ч. Хергета. – М. : Машиностроение, 1989. – 340 с.
63. Изерман, Р. Цифровые системы управления / Р. Изерман. – М. : Мир, 1984. – 542 с.
64. Проектирование систем автоматизации технологических процессов / А.С. Клюев, Б.В. Глазов, А.Х. Дубровский и др. – М. : Энергоатомиздат, 1990. – 464 с.
65. Лионс, Ж.Л. Оптимальное управление системами, описываемыми дифференциальными уравнениями в частных производных / Ж.Л. Лионс. – М. : Мир. 1975. – 349 с.
66. Месарович, М. Общая теория систем / М. Месарович, Я. Такахара. – М. : Мир, 1978. – 314 с.
67. Первозванский, А.А. Курс теории автоматического управления / А.А. Первозванский. – М. : Наука, главная редакция физ.-мат. литературы, 1986. – 616 с.
68. Рей, У. Методы управления технологическими процессами / У. Рей. – М. : Мир, 1983. – 386 с.

69. Трофимов, А.И. Автоматика, телемеханика и вычислительная техника в химических производствах / А.И. Трофимов. – М. : Энергоатомиздат, 1985. – 216 с.
70. Туищев, А.И. Методы и средства компьютерного управления радиационным нагревом / А.И. Туищев. – М. : ГАСБУ, 1998. – 317 с.
71. Хасмамедов, Ф.И. Автоматизация управления трубчатыми печами / Ф.И. Хасмамедов. – М. : Химия, 1980. – 214 с.
72. Юревич, Е.И. Теория автоматического управления / Е.И. Юревич. – Л. : Энергия, 1969. – 376 с.
73. Бодров, В.И. Об имитационном исследовании и выборе систем автоматической стабилизации химико-технологических процессов / В.И. Бодров, В.Г. Матвейкин. – М. : ТОХТ, 1986. – С. 712.
74. Матвейкин, В.Г. Методы, алгоритмы и системы гарантированного оптимального управления химико-технологическими процессами: дис. ... д-ра техн. наук / В.Г. Матвейкин. – М., 1991. – 535 с.
75. Беллман, Р. Динамическое программирование и уравнения в частных производных / Р. Беллман, Э. Энджел. – М. : Мир, 1974. – 208 с.
76. Бояринов, А.И. Методы оптимизации в химической технологии / А.И. Бояринов, В.В. Кафаров. – М. : Химия, 1975. – 298 с.
77. Варга, Дж. Оптимальное управление дифференциальными и функциональными уравнениями / Дж. Варга. – М. : Наука, 1977. – 622 с.
78. Квакернаак, Х. Линейные оптимальные системы управления / Х. Квакернаак, Р. Сиван. – М. : Мир, 1977. – 656 с.
79. Справочник по теории автоматического управления / под. ред. А.А. Красовского. – М. : Наука, 1992. – 424 с.
80. Янг, Л. Лекции по вариационному исчислению и теории оптимального управления / Л. Янг. – М. : Мир, 1974 – 490 с.
81. Венцель, Е.С. Теория вероятности / Е.С. Венцель. – М. : Физ.-мат. литература, 1962. – 564 с.
82. Поспелов, Д.А. Нечеткие множества в моделях управления и искусственного интеллекта / Д.А. Поспелов. – М. : Наука. 1974. – 486 с.
83. Путин, С.Б. Математическое моделирование процесса газоформирования в биотехническом комплексе с использованием процесса адсорбционного разделения воздуха / С.Б. Путин, С.А. Скворцов. – Тамбов : Вестник Тамбовского университета, 2001. – Т. 6. – Вып. 4. – С. 434 – 437
84. Путин, С.Б. Разработка математической модели процесса адсорбционного разделения газовой смеси. Проблемы параметрической идентификации / С.Б. Путин, С.А. Скворцов // Труды ТГТУ : сб. науч. тр. – Тамбов : Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2002. – Вып. 11. – С. 65 – 69.
85. Путин, С.Б. Математическое моделирование процесса разделения газовой смеси по методу короткоциклового безнагревной адсорбции / С.Б. Путин, О.В. Шейкин, С.А. Скворцов // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2003. – Т. 9. – № 1. – С. 50 – 57.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
1. ОСНОВЫ АДСОРБЦИОННОЙ ТЕХНИКИ	5
1.1. Адсорбционная терминология	5
1.2. Физико-химические основы адсорбционного разделения	6
1.3. Основные понятия кинетики и динамики адсорбции	11
1.3.1. Влияние формы изотермы адсорбции на динамику сорбции	15
1.3.2. Динамика неизотермической адсорбции	18
1.4. Схемы адсорбционно-десорбционных циклов с термической регенерацией	19
1.5. Краткое описание способов организации безнагревных адсорбционных процессов разделения газовых смесей (метод PSA)	20
2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАЗДЕЛЕНИЯ ГАЗОВОЙ СМЕСИ	34
2.1. Анализ современного состояния в области математического моделирования процессов адсорбционного разделения	34
2.2. Разработка математической модели сорбционных процессов	39
2.2.1. Материальный баланс. Феноменологическая модель адсорбции	43
2.2.2. Основные допущения математической модели адсорбции	44
2.2.3. Одномерная неизотермическая модель динамики сорбции	45
2.2.4. Изотермическая модель динамики сорбции	46
2.2.5. Математическая модель без учета продольного перемешивания	47
2.2.6. Равновесная изотермическая модель сорбции	48
2.2.7. Равновесная изотермическая модель при линейной изотерме	49
2.3. Разработка математической модели механических процессов	49
2.3.1. Основные допущения математической модели механических процессов	49
2.3.2. Уравнение динамики давления в адсорбере	50
2.3.3. Уравнение скорости потока по длине слоя сорбента	51
2.3.4. Расчет материальных потоков на концевых участках адсорбера	54
2.4. Разработка математической модели тепловых процессов	56
2.5. Математическое описание внешних воздействий	57
2.6. Математическая модель концентратора кислорода	58
2.7. Алгоритм расчета математической модели	65
2.8. Параметрическая идентификация и оценка адекватности математической модели процесса адсорбционного разделения	70
3. ИМИТАЦИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССА РАЗДЕЛЕНИЯ ГАЗОВОЙ СМЕСИ МЕТОДОМ КОРОТКОЦИКЛОВОЙ БЕЗНАГРЕВНОЙ АДСОРБЦИИ	76
3.1. Имитационные исследования и анализ результатов	76
3.2. Основные результаты имитационных исследований	93
4. СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССА АДСОРБЦИОННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ ГАЗОВОЙ СМЕСИ	94
4.1. Анализ современного состояния в области управления процессами адсорбционного разделения	94
4.2. Процесс адсорбционного разделения как объект управления	110
4.3. Классификация режимов функционирования установки КБА	113
4.4. Классификация задач управления процессом адсорбционного разделения	114
4.5. Формализация ограничений и допущений в задачах управления	117
4.6. Построение системы управления процессом адсорбционного разделения	120

4.6.1. Выбор и решение задачи управления процессом адсорбционного разделения в бортовой кислорододобывающей установке	120
4.6.2. Алгоритм решения внутренней и внешней задачи управления	127
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	132
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	133