

# 固定床气体吸附过程温升的计算模型

张学伟 刘伟 徐明厚

(华中科技大学能源与动力工程学院, 湖北 武汉 430074)

**摘要** 本文采用等温模型、非等温绝热模型和非等温定壁温模型对二氧化碳占 10% 的二氧化碳氮气双组分气体在吸附剂沸石 13X 上吸附过程进行了数值模拟, 并对结果进行了分析。结果表明三种模型计算的结果差别很大, 非等温非绝热模型的分离效果, 温升幅度均处于另两种模型之间, 温度对吸附过程有着巨大的影响, 必须考虑边界条件和吸附剂热物性的影响。采用非等温非平衡模型进行吸附过程模拟是最合理的。

**关键词** 吸附; 传热; 传质; 二氧化碳; 多孔介质

**中图分类号:** TK124 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2008)07-1202-03

## THE THERMAL MODEL OF GAS ADSORPTION IN FIXED BED

ZHANG Xue-Wei LIU Wei XU Ming-Hou

(School of Energy and Power Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

**Abstract** The heat transfer in two dimensional fixed-bed adsorption of mix gas with 10% carbon dioxide and nitrogen was analyzed by three models. Temperature is a crucial parameter in the adsorption process. The non-isothermal non-equilibrium model is the best model.

**Key words** adsorption; heat transfer; mass transfer; carbon dioxide; porous media

## 0 引言

吸附分离是提纯和高含量气体分离重要的单元操作, 近年来吸附操作向着大型化的方向发展。对于大含量气体的变压吸附分离操作过程, 温度的升高是很大的, 对吸附分离效率的影响是显著的。前人<sup>[1]</sup>建立了固定床大含量气体吸附的非绝热非等温模型, 此模型是一维的, 无法表征吸附剂以及气体的热物性对流动和温度浓度的影响。本文采用等温, 绝热和定壁温三种模型对大含量气体的吸附过程进行了数值模拟, 并对模型的适用性进行了评价。

## 1 固定床吸附过程流动传热传质的数学模型

本文计算了直径为 257 mm, 长度为 1 m 的圆筒形的固定吸附床内的吸附过程, 其示意图如图 1 所示。筒内填充均匀各向同性的球形分子筛 13X。文献 [2] 列出了多孔介质内质量守恒、动量、能量和浓度的控制方程。

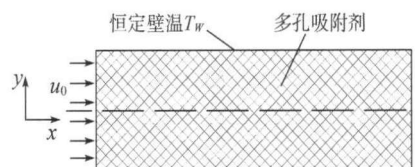


图 1 固定吸附床的几何模型示意图

Fig.1 Schematic diagram of the packed bed

### 1.1 连续方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \rho_b \sum_{k=1}^n \frac{\partial q_k}{\partial t} = 0$$

### 1.2 动量方程

$$\rho_f \left( \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \cdot \nabla \vec{V} \right) = -\nabla p + \mu_{eff} \nabla^2 \vec{V} - \frac{\mu_f}{k} \vec{V} - \rho_f \frac{F \phi}{\sqrt{k}} |\vec{V}| \vec{V}$$

$$\text{其中, } k = \frac{\varphi^3 d_p^2}{150(1-\varphi)^2}, \quad F = \frac{1.75}{150\varphi^{3/2}}$$

### 1.3 能量方程

气相的控制方程为:

收稿日期: 2008-01-03; 修订日期: 2008-05-19

基金项目: 国家重点基础研究发展计划资助项目 (No.2007CB206900); 华中科技大学“985 工程”建设项目

作者简介: 张学伟 (1978-), 男, 山东潍坊人, 博士, 主要从事气体吸附分离以及传热传质研究。

$$\frac{\partial[\varphi C_f \rho_f T_f]}{\partial t} + \frac{\partial(\varphi C_f \rho_f u_f T_f)}{\partial x} + \frac{\partial(\varphi C_f \rho_f v_f T_f)}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \lambda_e \frac{\partial T_f}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \lambda_e \frac{\partial T_f}{\partial y} \right) + \alpha_v (T_s - T_f)$$

固相的控制方程为:

$$\frac{\partial[(1-\varphi)C_s \rho_s T_s]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \lambda_s (1-\varphi) \frac{\partial T_s}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \lambda_s (1-\varphi) \frac{\partial T_s}{\partial y} \right] - \alpha_v (T_s + T_f) + H_{ad} \frac{\partial q}{\partial t}$$

其中,  $h_v = 6h(1-\varphi)/d_p$ <sup>[3]</sup>。式中,  $h$  由下式确定:

$$Nu = \alpha d_p / \lambda_f = \left[ \left( 1.18 Re^{0.58} \right)^4 + 10.23 Re_h^{0.75} \right]^{1/4}$$

$$Re = \varphi \rho u_p d_p / \mu, \quad Re_h = Re / (1-\varphi)$$

#### 1.4 组分方程

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (u C_i) + \frac{\partial}{\partial y} (v C_i) - D_b \left( \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_i}{\partial y^2} \right) + \rho_b \frac{\partial q_i}{\partial t} = 0$$

#### 1.5 吸附非等温 LDF 模型<sup>[3]</sup>

$$\rho_b \frac{\partial q_i}{\partial t} = h_i (C_i^* - C_i)$$

假定吸附过程中吸附质传递的阻力以气膜阻力为主, 不考虑吸附质在吸附颗粒内部的阻力, 气体膜传质系数<sup>[4]</sup>  $Sh = \frac{D_i h_i}{D_m}$  可由下式确定:

$$Sh = 2.0 + 0.6 Sc^{1/3} Re^{1/2}$$

$$Sc = \frac{\mu}{\rho_p D_m} \quad Re = \frac{\rho_f V \varphi d_p}{\mu}$$

假定二氧化碳的吸附等温线符合与温度有关的 Languir 等温线<sup>[5]</sup>:

$$q_i = \frac{q_{\max,i} b_i p C_i^*}{1 + \sum_{k=1}^n b_k p C_k^*}$$

$$q_{\max,i} = B_{1,i} \exp(B_{2,i} T), \quad b_i = B_{3,i} \exp(B_{4,i} T)$$

表 1 Languir 沸石 13X PSA 等温线的参数

Table 1 The parameters of Languir adsorption profile

Languir 变量	二氧化碳	氮气
$B_1$ (mol/kg)	50	10
$B_2$ (1/K)	-0.01	-0.01
$B_3$ (1/Pa)	0.005	0.0006
$B_4$ (1/K)	-0.01	-0.02

## 2 计算方法与结果

本文采用控制体积有限差分法进行计算。温度为 300 K, 二氧化碳体积含量为 10% 的二氧化碳与氮气的混合气体以 0.2 m/s 的速度从左端入口均匀的流入, 气流渗透通过吸附剂颗粒时发生吸附, 最后从右侧出口流出。假定吸附剂的颗粒为球形颗粒, 固相的导热系数为 1.2 W/(m<sup>2</sup>K), 网格为长度方向为 0.01, 宽度方向为 0.05 m, 时间步长为 1 s。分别采用三种模型对吸附过程进行了模拟:

**等温模型:** 假定吸附过程温度保持恒定, 即 300 K, 不求解能量方程, 并且假定 Languir 等温线中的温度保持恒定的 300 K。

**非等温绝热模型:** 假定边界保温良好, 并且不考虑壁面金属的热容量的影响。

**非等温定壁温模型:** 假定边界处冷却很充分, 温度保持恒定。

图 2 给出了吸附过程出口速度随时间的变化。从图上可以看到吸附初始阶段混和气体中强吸附组分二氧化碳完全被吸附, 从而引起气体的质量减少, 在压力不变的情况下, 流速减小, 此值对应的是弱吸附组分氮气的流速。随着吸附过程的进行, 吸附逐渐达到饱和状态, 二氧化碳的吸附量逐渐减少, 但是气体温度升高, 体积膨胀, 所以气体的流速又逐渐增加。在等温条件下, 吸附剂的平衡吸附量比较强, 到 2000 s 时强吸附的二氧化碳仍能被完全吸附下来, 其出口速度保持 0.18 m/s, 没有升高, 而非等温模型计算的结果表明, 在 1300 s 左右气体的出口速度开始增大, 并且绝热模型的增大更快, 在 2000 s 时达到了 2.15 m/s, 高于入口速度。这是因为温度的升高引起的体积膨胀导致出口流速增大, 温升越大速度增高得越快。

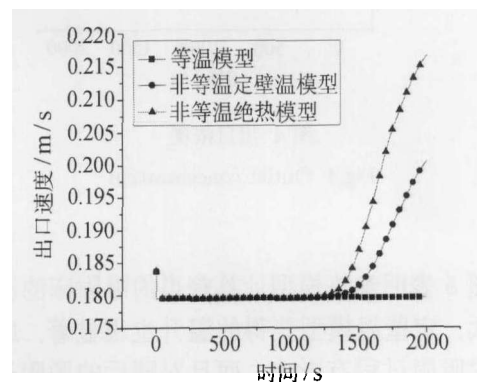


图 2 出口速度

Fig.2 Outlet velocity

图 3 给出了出口温度随时间的变化。非等温模型计算可知吸附过程伴随着吸附热的产生, 从而导

致温度有显著的升高。出口气体的温度在 1300 s 时开始升高, 绝热模型的出口温度升高非常快, 到 2000 s 时温升高达 45 K, 如此巨大的温升, 对吸附过程的影响是巨大的。

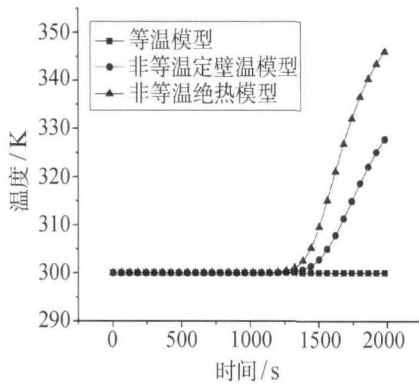


图 3 出口温度

Fig.3 Outlet temperature

图 4 给出的是吸附床的穿透曲线, 从图上可以看到非等温模型计算得到的结果均于 1300 s 左右出口开始出现二氧化碳气体, 但是绝热时出口浓度升高最快, 其性能最差, 而等温模型计算的结果表明到 2000 s 时出口仍然没有出现二氧化碳气体, 其性能最好。所以温度对吸附量和吸附分离效率的影响非常大。改善吸附床的传热性能, 尽量使吸附床的温度保持不变对变压吸附性能的提高是有效的途径。

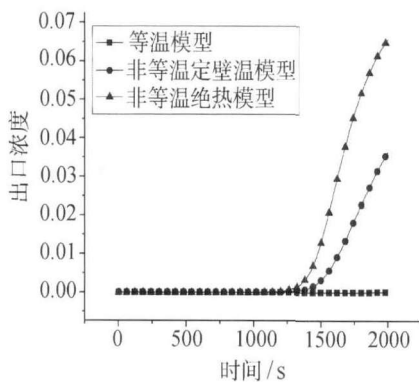


图 4 出口浓度

Fig.4 Outlet concentration

图 5 表明绝热模型计算获得的吸附床的温度升高最大, 定壁温模型获得的温升也很显著。此温升不但对吸附过程有影响, 而且对随后的脱附过程也

产生不良的影响。

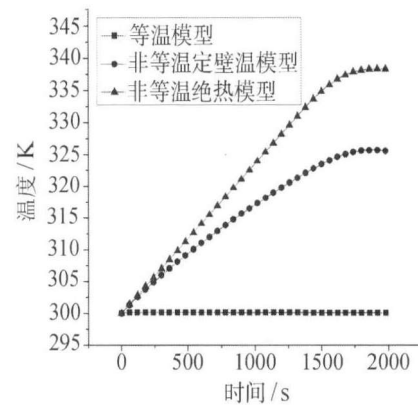


图 5 平均温度

Fig.5 Average temperature

### 3 结 论

本文从传热传质角度分析固定床双组分吸附过程, 借助控制体积有限差分法进行了数值计算。结果表明吸附过程中的温度变化是显著的, 对吸附过程的传质影响巨大。必须采用传热传质耦合的非等温模型进行计算, 并且充分地考虑边界条件和吸附剂热物性的影响是提高大含量气体吸附分离性能的有效途径。

### 参 考 文 献

- [1] Kusong Dong, Yusung Gu, Taejeon and Korea. Fixed-bed Adsorption for Bulk Component System. Non-equilibrium, Non-isothermal and Non-adiabatic Model. Chem. Eng., 1995, 50(5): 813-825
- [2] A Amiri, K Vafai. Analysis of Dispersion Effects and Non-Thermal Equilibrium, Non-Darcian, Variable Porosity Incompressible Flow Through Porous Media. Int. J. Heat Mass Transfer, 1994, 11: 939-954
- [3] T W Cochran, R L Kabel, R Pdanner. The Vacancy Solution Model of Adsorption-improvements and Recommendations. AIChE J., 1985, 31(12): 2075-2082
- [4] L 柯斯乐. 扩散 - 流体系统中的传质. 王宇新, 姜忠义, 译. 北京: 化学工业出版社, 2002  
L kesile. Diffusion-Mass Transfer in Fluids. WANG Yuxin, JIANG Zhongyi, Translates. Beijing: Press of Chemic Industry, 2002
- [5] P J E Harlick, F H Tezel. CO<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> and CO<sub>2</sub>-CH<sub>4</sub> Binary Adsorption Isotherms with H-ZSM-5: the Importance of Experimental Data Regerssion with the Concentration Pulse Method. Can. J. Chem. Eng., 2001, 79: 236-245