

การจำลองการแยกอากาศโดยระบบดูดซับความดันสลับในคอลัมน์เดี่ยว



นางสาว วรรณกุล คุตติอาชีวะ

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาเทคโนโลยีปิโตรเคมี

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. 2533

ISBN 974-577-774-9

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

016726

i1741488x

SIMULATION OF AIR SEPARATION IN A SINGLE COLUMN PRESSURE
SWING ADSORPTION SYSTEM

MISS WANNAKUL KUTTIJEWAN

A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT OF THE REQUIREMENTS
FOR THE DEGREE OF MASTER OF ENGINEERING
PROGRAM OF PETROCHEMICAL TECHNOLOGY
GRADUATE SCHOOL
CHULALONGKORN UNIVERSITY

1990

ISBN 974-577-774-9



Thesis Title SIMULATION OF AIR SEPARATION IN A SINGLE COLUMN
PRESSURE SWING ADSORPTION SYSTEM
By Miss wannakul kuttiajewa
Department Program of Petrochemical Technology
Thesis Advisor Associate Professor Woraphat Arthayukti, D.Ing.

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in
Partial Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree.

Thavorn Vajrabhaya
..... Dean of Graduate School
(Professor Thavorn Vajrabhaya, Ph.D.)

Thesis Committee

Pattarapan Prasassarakich
..... Chairman
(Associate Professor Pattarapan Prasassarakich, Ph.D.)

Woraphat Arthayukti
..... Thesis Advisor
(Associate Professor Woraphat Arthayukti, D.Ing.)

Phol Sagetong
..... Member
(Associate Professor Phol Sagetong, D.Ing.)

Piyasan Prasertdham
..... Member
(Associate Professor Piyasan Prasertdham, D.Ing.)

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อวิทยานิพนธ์ภายในกรอบสี่เหลี่ยมนี้เพียงแผ่นเดียว

วรรณกุล คุณดีอาชีวะ : การจำลองการแยกอากาศโดยระบบดูดซับความดันสลับในคอลัมน์เดี่ยว
(SIMULATION OF AIR SEPARATION IN A SINGLE COLUMN PRESSURE SWING
ADSORPTION SYSTEM) อ.ที่ปรึกษา : รศ.ดร.วราพัฒน์ อรรถยุกติ, 79 หน้า. ISBN
974-577-774-9

งานวิจัยนี้เป็นการพัฒนาสมการทางคณิตศาสตร์ เพื่อใช้จำลองระบบดูดซับความดันสลับในคอลัมน์เดี่ยว เพื่อแยกออกซิเจนจากอากาศ การทำงานของระบบประกอบด้วยสองขั้นตอนในหนึ่งวงจร ขั้นตอนแรกคือ ช่วงเวลาการปล่อยอากาศเข้าไปในคอลัมน์ สลับกับขั้นตอนที่สอง ได้แก่การลดความดันในคอลัมน์สู่ความดันบรรยากาศ ซึ่งขั้นตอนที่สองใช้เวลามากกว่าขั้นตอนที่หนึ่ง ส่วนผลิตภัณฑ์ที่ได้ คืออากาศที่มีความเข้มข้นของออกซิเจนสูง ผลิตภัณฑ์นี้ผลิตได้จากกระบวนการอย่างต่อเนื่อง เข้าสู่ถึงเก็บผลิตภัณฑ์ ในการจำลองระบบการแยกอากาศ จะศึกษาถึงอิทธิพลของเวลาที่ใช้ในการป้อนอากาศ เวลาที่ใช้ในการลดความดัน และขนาดของตัวดูดซับ หลักการสำคัญที่พบจากผลการจำลองคือ การเกิดความดันลดภายในคอลัมน์มากจะทำได้ผลิตภัณฑ์ที่มีความเข้มข้นของออกซิเจนสูงขึ้น



ภาควิชา สหสาขาวิชาปิโตรเคมี-โพลีเมอร์
สาขาวิชา เทคโนโลยีปิโตรเคมี
ปีการศึกษา 2532

ลายมือชื่อนิสิต อ.วราพัฒน์ อรรถยุกติ
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา วราพัฒน์ อรรถยุกติ

พิมพ์ต้นฉบับบทคัดย่อ วิทยานิพนธ์ภายในกรอบสี่เหลี่ยมนี้เพียงฉบับเดียว

WANNAKUL KUTTIAJEW : SIMULATION OF AIR SEPARATION IN A SINGLE COLUMN PRESSURE SWING ADSORPTION SYSTEM. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. WORAPHAT ARTHAYUKTI, D.Eng. 79 PP. ISBN 974-577-774-9

This study develops a mathematical model that can be used to simulate the operation of single column pressure swing adsorption system for the purification of air. The system is equipped with a product surge tank and operates on a two-step cycle, a feed introduction step alternating with a longer gas exhaust step, with a continuous gas product stream of enriched oxygen. Parameters studied in the simulation were feed time, exhaust time, and adsorbent particle size. An important feature found during simulation is the pressure drop in the column. When the pressure drop increases, the oxygen concentration in the product gas also increases .



ภาควิชา สหสาขาวิชาปิโตรเคมี-โพลีเมอร์
สาขาวิชา เทคโนโลยีปิโตรเคมี
ปีการศึกษา 2532

ลายมือชื่อผู้สมัคร Wannakul Kuttiajewa
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา Assoc. Prof. Woraphat Arthayukti



ACKNOWLEDGEMENTS

The author wishes to sincerely thank and express her gratitude to her advisor , Associate Professor Dr. Woraphat Arthayukti , for his supervision , guidance and encouragement during this project.

She also wishes to take this opportunity to express her gratitude to Associate Professor Dr. Pattarapan Prassarakich, Associate Professor Dr.Piyasan Prasertdham and Associate Professor Dr.Phool Sagetong for kindly serving as the thesis committee.She would like to thank the engineering computer center at the faculty of engineering Chulalongkorn University for allowing her to use the computing facilities and the good services they offered.

Furthermore , she wishes to convey her most sincere gratitude to her parents for their moral support. Also to Mr. Somnuk Bumlongsali for his encouragement and assistance during the completion phase of this thesis .

Thanks go towards her friends for their spiritual support.



CONTENTS

	page
THAI ABSTRACT.....	IV
ENGLISH ABSTRACT	V
ACKNOWLEDGEMENTS.....	VI
LIST OF TABLES	XI
LIST OF FIGURES	X
NOTATIONS	XIII
CHAPTER	
1 INTRODUCTION	1
2 PRESSURE SWING ADSORPTION SYSTEM	
2.1 Historical perspective of pressure swing adsorption processes.	5
2.2 Use of pressure swing adsorption.	7
2.3 PSA cyclic operation.....	12
2.4 Operation of a single column PSA system.....	13
3 DERIVATION OF EQUATIONS USED IN THE SIMULATION	
3.1 Basic assumptions.....	20
3.2 Determination of pressure drop equation.....	21
3.3 Determination of the adsorption equation.....	22
3.4 Boundary conditions.....	28
3.5 Method of calculation.....	31
4 SIMULATION RESULTS AND DISCUSSIONS	
4.1 Comparative study of the model developed in this study within the model proposed by Sundaram and Wankat.....	39

CHAPTER	page
4.2 Simulation with variation of molar ratios.....	44
4.3 Simulation of the effect of feed time	47
4.4 Simulation of the effect of exhaust time.....	49
4.5 Simulation of the effect of particle diameter.....	49
4.6 Pressure ,mole fraction and velocity profiles as a function of bed length and cycle time	53
5 CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS	
5.1 Conclusions.....	61
5.2 Recommendations.....	62
REFERENCES	63
APPENDICES	
A Derivation of pressure drop equation.....	65
B The finite difference method.....	68
C Computer program	72
BIOGRAPHY.....	79



LIST OF TABLES

Table	Page
2.1 Historical account of PSA commercialization	6
2.2 System geometry and operating conditions of Jones et al's 1980 patent	16
3.1 Physical parameters used in the simulation.....	35
4.1 Effect of molar ratio variation on oxygen concentration for simulation	43
4.2 Effect of feed time variation on oxygen concentration for simulation.....	43
4.3 Effect of exhaust time variation on oxygen concentration for simulation.....	46
4.4 Effect of particle diameter variation on oxygen concentration for simulation.....	46

LIST OF FIGURES

Figure	Page
2.1 Isotherms showing pressure swing , thermal swing and combined pressure-temperature swing operation for an adsorption process	3
2.2 The basic two-bed pressure swing adsorption system	4
2.3 The sequence of steps in the basic PSA cycle	4
2.4 PSA adsorption-desorption sequence for a two columns system	11
2.5 Isotherms on 5A zeolites	13
2.6 Diagram of the single column PSA system	14
3.1 Material balance in adsorption column.....	22
3.2 Schematic diagram for 2 step cycle of single column PSA	26
3.3 Schematic diagram of feed gas introduction period	29
3.4 Schematic diagram of reverse outward flow period	30
4.1 Comparison between pressurization step of the Sundaram and Wankat system with this system with V_g approaching zero	37
4.2 Comparison between blowdown step of the Sundaram and Wankat system with this system with V_g approaching zero.	37
4.3 Comparison of concentration profile from this simulation and from Sundaram and Wankat system at blowdown.....	38
4.4 Comparison of concentration profile from this simulation and from Sundaram and Wankat system at pressurization...	38

Figure	Page
4.5 Simulation of variation of concentration of oxygen in product stream as a function of input/output ratio in molar terms	42
4.6 Simulation of variation of oxygen recovery (%) as a functions of input/output ratio in molar terms	42
4.7 Simulation of variation of oxygen concentration in product gas as a function of feed time	45
4.8 Simulation of variation of oxygen recovery as a function of feed time	45
4.9 Simulation of variation of oxygen concentration in product gas as a function of exhaust time	48
4.10 Simulation of variation of oxygen recovery as a function of exhaust time	48
4.11 Simulation of variation of influence of particle diameter on oxygen concentration of product	50
4.12 Simulation of pressure profile within the adsorber as a function of column length at end of feed gas time..	50
4.13 Simulation of oxygen concentration profile within the adsorber as a function of column length at end of feed gas time	51
4.14 Simulation of gas velocity profile within the adsorber as a function of column length at end of feed gas time..	51
4.15 Simulation of pressure profile within the adsorber as a function of column length at end of gas exhaust time..	52
4.16 Simulation of oxygen concentration profile within the adsorber as a function of column length at end of gas exhaust time	52



NOTATION

A	cross sectional area of column , cm^3
c	concentration in gas phase , mole/cm^3
C	constant in equation (3.1) related to permeability and porosity
d_p	bed particle diameter , cm
E	constant molar flow rate of product gas , mole/s
k	linear adsorption coefficient
K'	permeability of bed , cm^2
K_1	adsorption coefficient for component 1
K_2	adsorption coefficient for component 2
K	constant from integral in equation (3.25)
L	column length , cm
m	constant in equation (A.6)
n	concentration of sorbate in solid phase , moles/cm^3
p	gas pressure , atm
R	gas constant , $82.06 \text{ cm}^3 - \text{atm} / (\text{gm-mole})^\circ\text{K}$
t	time , sec
T	temperature , $^\circ\text{K}$
V_s	volume of product surge tank , cm^3
v	velocity , cm/s
v_0	superficial velocity , cm/s
y	gas phase mole fraction of oxygen
z	distance along bed , cm
ε	bed porosity

Figure		Page
4.17	Simulation of gas velocity profile within the adsorber as a function of column length at end of exhaust time..	55
4.18	Simulation of pressure profile within the adsorber as a function of column length during feed gas time....	55
4.19	Simulation of oxygen concentration profile within the adsorber as a function of column length during feed gas time	56
4.20	Simulation of gas velocity profile within the adsorber as a function of column length during feed gas time....	56
4.21	Simulation of pressure profile within the adsorber as a function of column length during gas exhaust time.....	58
4.22	Simulation of oxygen concentration profile within the adsorber as a function of column length during gas exhaust time	58
4.23	Simulation of gas velocity profile within the adsorber as a function of column length during gas exhaust time.	59
B.1	Diagram illustration how to fill the vectors using the finite difference method.....	68

μ	viscosity of air , N.s/m ²
β	constant in equation (A.6)
ρ	density, gm/cm ³
ρ_0	fluid density at unit pressure , gm/cm ³

Subscripts

i	component i
1	weakly adsorbed component (oxygen)
2	strongly adsorbed component (nitrogen)
exh	exhaust condition
feed	feed condition
L	low pressure
press	pressurization