

DOI: 10.11949/0438-1157.20250892

径向流真空变压吸附制氧模拟与分析

王进昊, 李子易, 唐忠利, 李文彬, 张东辉

(天津大学化工学院, 化学工程与低碳技术全国重点实验室, 天津 300350)

摘要: 氧气是维持生命的基础物质, 也是重要的工业原料。变压吸附技术能耗低、设备简单、装置灵活, 被广泛用于空分制氧过程。随着制氧规模的扩大, 径向流吸附器床层压降低、占地面积小、易于扩大生产规模等优势凸显, 受到国内外用氧企业的普遍关注。然而, 目前径向流制氧工艺的设计严重依赖经验, 缺乏详细的分析研究。因此, 建立了严格的径向流真空变压吸附系统数学模型。基于2塔8步工艺, 以空气 ($N_2/O_2/Ar=78\%/21\%/1\%$) 为原料气、LiLSX分子筛为吸附剂, 考察了吸附时长、均压时长、吹扫进料比以及进料量对工艺性能的影响。重点分析了工艺达到循环稳态时吸附器出口端压力以及床层内温度、浓度的时空分布。模拟结果表明, O_2 纯度与回收率分别为92.74%与61.88%时, 生产能力高达 $121.10\text{ m}^3\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{t}^{-1}$ 、能耗低至 $0.327\text{ kWh}\cdot\text{m}^{-3}\text{ O}_2$ 。相较于已有的轴向流工艺, 生产能力提升 $33.44\text{ m}^3\cdot\text{h}^{-1}\cdot\text{t}^{-1}$ 、能耗降低 $0.017\text{ kWh}\cdot\text{m}^{-3}\text{ O}_2$ 。本研究可以为径向流制氧工艺的设计与改进提供参考。

关键词: 径向流吸附器; 真空变压吸附; 空气分离; 制氧; 数值模拟

中图分类号: TQ 028.1

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (2026) 01-0218-10

Simulation and analysis of radial flow vacuum pressure swing adsorption oxygen production

WANG Jinhao, LI Ziyi, TANG Zhongli, LI Wenbin, ZHANG Donghui

(State Key Laboratory of Chemical Engineering and Low-carbon Technology, School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300350, China)

Abstract: Oxygen is a fundamental substance for life and an important industrial raw material. Pressure swing adsorption technology, with its low energy consumption, simple equipment, and flexible setup, is widely used in air separation oxygen production processes. With the expansion of the scale of oxygen production, the advantages of radial flow adsorber bed pressure drop reduction, small footprint and easy expansion of production scale are highlighted. However, there is a lack of detailed analysis and research on the oxygen production of radial flow adsorber. Therefore, a strict mathematical model of radial flow vacuum pressure swing adsorption process was established. Based on the two-bed eight-step process, air ($N_2/O_2/Ar=78\%/21\%/1\%$) was used as the feed gas and LiLSX molecular sieve was used as the adsorbent. The effects of adsorption time, pressure equalization time, purge feed ratio and feed flow rate on the process performance were investigated. The pressure at the outlet of the adsorber and the temporal and spatial distribution of the temperature and concentration in the bed were analyzed when the

收稿日期: 2025-08-07 修回日期: 2025-09-25

通信作者: 张东辉(1971—),男,副研究员, donghuizhang@tju.edu.cn

第一作者: 王进昊(2002—),男,硕士研究生, wangjinhao@tju.edu.cn

基金项目: 国家自然科学基金项目(22478282)

引用本文: 王进昊, 李子易, 唐忠利, 李文彬, 张东辉. 径向流真空变压吸附制氧模拟与分析[J]. 化工学报, 2026, 77(1): 218–227

Citation: WANG Jinhao, LI Ziyi, TANG Zhongli, LI Wenbin, ZHANG Donghui. Simulation and analysis of radial flow vacuum pressure swing adsorption oxygen production[J]. CIESC Journal, 2026, 77(1): 218–227

process reached the steady state of the cycle. The simulation results show that when the purity and recovery of O_2 are 92.74% and 61.88%, respectively, the productivity is as high as $121.10 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{t}^{-1}$, and the energy consumption is as low as $0.327 \text{ kWh} \cdot \text{m}^{-3} O_2$. Compared with the existing axial flow process, this process has lower energy consumption and significantly improved productivity. This study can provide preference for the process improvement of radial flow adsorber.

Keywords: radial flow adsorber; vacuum pressure swing adsorption; air separation; oxygen production; numerical simulation

引 言

氧气对于人类的生产、生活至关重要,被广泛应用于工业^[1]、制药^[2]、航空航天^[3]等领域,表1列出了不同工业场景对制氧纯度及规模的要求^[4]。工业上常用的制氧方式有深冷法、膜分离法和变压吸附法。其中,深冷法制氧纯度高($\geq 99.5\%$)、生产规模大,但具有高能耗与初始投资大的缺点^[5]。膜分离法装置简单、操作简便,但 O_2 纯度一般在30%~50%,且受限于分离膜的价格^[6-7]。变压吸附法(pressure swing adsorption, PSA)在氧气纯度要求不高的场景下,在单位氧气电耗、建设周期和运行成本等方面具有优势^[8-10]。国内外学者对轴向流PSA制氧过程开展了大量研究,Qadir等^[11]设计了应用于医用制氧机的2塔3步快速变压吸附(rapid pressure swing adsorption, RPSA)工艺,可在14 s的短循环时间内生产纯度为94%、收率为40%的 O_2 。Liu等^[12]对RPSA工艺的吹扫过程进行改进,在间歇吹扫的情况下纯度与回收率分别提升3.5%与3.2%。Urich等^[13]采用模型预测控制,独立地作用于RPSA循环中四个步骤的持续时间,在产出90% O_2 条件下显示出优于传统PID控制的性能。Alpay等^[14]通过实验

研究了5A分子筛颗粒大小对单柱空气分离工艺的影响,提出对于制氧纯度存在最佳的颗粒大小,最佳值是工艺操作条件的函数。Sun等^[15]关注吸附剂颗粒尺寸对RPSA工艺制氧效果的影响,发现随颗粒直径的减小,制氧纯度与收率先上升后下降。Zhong等^[16]通过模拟研究了LiLSX颗粒大小对工艺性能的影响,发现在RPSA工艺合理工况下、粒径小于1 mm时,轴向分散效应开始主导传质速率。Tian等^[17]将六通旋转分配阀用于PSA过程,有效节省了装置空间并提高了产率。Henrique等^[18]发现吸附塔死体积的增加会对产品纯度、收率以及吸附剂的生产能力带来不利影响。Ding等^[19]分别以产量最大和能耗最低为目标对两塔VPSA工艺进行优化,制得纯度为80%的 O_2 ,最大生产能力为 $117.87 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{t}^{-1}$,最小能耗为 $0.289 \text{ kWh} \cdot \text{m}^{-3} O_2$ 。Zhu等^[20]设计了应用于海拔3800 m地区的真空变压吸附(vacuum pressure swing adsorption, VPSA)制氧系统,在 O_2 纯度接近93%时,收率达到54.1%。

径向流吸附器结构紧凑、床层压降低,能够在大量处理量时表现出更优异的性能,对实际需求更具吸引力,受到Air Products^[21-23]、Praxair^[24-25]、Air Liquid^[26]等国内外企业的普遍采用。然而,目前对于径向流吸附器制氧的报道较少。Rota等^[27]比较了相同RPSA过程在不同尺寸下的生产能力,提出径向流吸附器具有更薄的床层,能够补偿小吸附剂颗粒带来的流动阻力。Chiang等^[28]采用循环时间小于30 s的径向流RPSA制氧工艺,吸附阶段空气向心流动时可产生纯度为60%的 O_2 ;进料方向相反时,同一系统几乎没有分离效果。数值模拟是变压吸附过程的重要研究手段,能够得到实验中难以获取的塔内流场的时空分布,可以为后续优化提供数据支持。在径向流制氧工艺的模拟方面,Huang等^[29]忽略了床层轴向的浓度梯度和压降,将吸附器内气体流动行为简化为径向分散活塞流,对单塔RPSA制氧工艺进行模拟,得出在小颗粒吸附剂以及较长的

表1 不同工业应用场景对制氧纯度及用氧规模的要求^[4]

Table 1 Requirements for oxygen purity and scale of oxygen consumption in different industrial application scenarios^[4]

序号	应用领域	氧气浓度/%	用氧规模/($\text{m}^3 \cdot \text{h}^{-1}$)
1	富氧炼铁	80~90	5000~30000
2	钢材加工	90~93	500~5000
3	铜铅锌钨镍钴等冶炼	80~93	1000~10000
4	金银冶炼	80~93	500~10000
5	煤化工	80~93	1000~20000
6	化肥	80~93	1000~10000
7	富氧助燃	80~90	1000~10000
8	玻璃、玻纤	92~94	1000~5000
9	其他化工	80~93	1000~5000

有效长度的情况下,径向流工艺优于轴向流工艺的结论。Yang等^[30]采用2塔4步PSA工艺,模拟时将空气简化为氮氧混合物,制得98.6%的O₂,时回收率为38.9%。Zhang等^[31]关注穿孔板及外流道结构对吸附器内部流场的影响,设计了收敛环形通道并对穿孔板开孔率进行优化,最终整体流动均匀性提升24.69%。

综上,现有的径向流吸附器制氧研究,普遍采用简单的单塔或两塔Skarstrom工艺,未能充分发挥出吸附器的制氧性能,且缺乏相近条件下同轴向流工艺的对比。VPSA工艺在略高于常压的状态下吸附、在真空状态下解吸,较PSA工艺具有更高的收率与更低的能耗。基于此,本文通过数值模拟的方式进行径向流VPSA制氧研究,以期对径向流制氧工艺的设计及优化提供参考。首先,基于已报道的吸附平衡与动力学数据,以空气(N₂/O₂/Ar=78%/21%/1%)为原料气、LiLSX分子筛为吸附剂,在gPROMS中搭建严格的径向流VPSA制氧工艺数学模型;其次,设计2塔8步径向流VPSA制氧工艺,根据循环稳态时的模拟结果探究吸附时长、均压时长、吹扫进料比以及进料量对工艺性能的影响,并详细描述吸附塔出口处压力以及床层内部温度、浓度的时空分布;最后,将提出的径向流制氧工艺同文献报道的轴向流工艺进行对比,分析现有工艺的优势。

1 制氧系统建模

径向流VPSA制氧系统的建模需要考虑到吸附器内部流体流动规律,吸附器、动力设备、缓冲罐等模型间的耦合以及计算资源的消耗。本文所研究的制氧系统主要由两座相互耦合的径向流吸附单元、30000 m³·h⁻¹罗茨鼓风机、50000 m³·h⁻¹(运行工况随时间周期性变化,取决于上游气体状态)罗茨真空泵以及三个容积为50 m³的气体缓冲罐组成。图1为该制氧系统的示意图。

1.1 径向流制氧模型假设

为保证模型具有足够的计算精度并节省计算资源,提出如下模型假设^[32-36]:

- (1) 气相视为理想气体;
- (2) 床层压降由Ergun方程计算;
- (3) 忽略吸附器内部压力、浓度、温度沿轴向的变化;
- (4) 采用扩展型Langmuir 2方程描述多组分气体的竞争吸附行为;
- (5) 采用线性推动力(linear driving force, LDF)方程描述气体与吸附剂间的传质行为。

1.2 径向流吸附器模型

径向流VPSA制氧循环是一个复杂的动态过程,吸附器内部压力、温度、组成等物理量不断随时间与空间位置改变,难以通过实验手段对这些瞬态

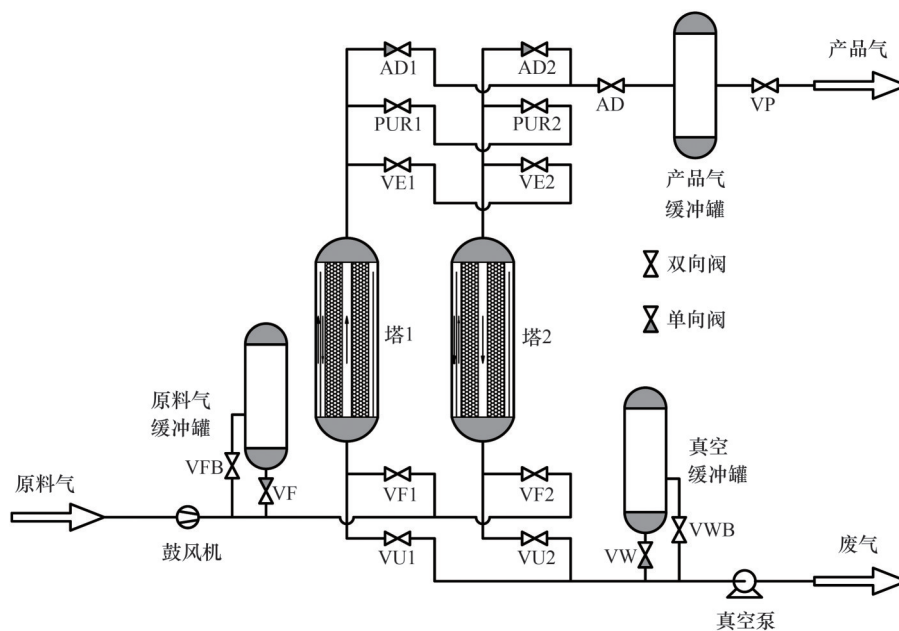


图1 制氧系统示意图

Fig.1 Schematic diagram of the oxygen production system

数据一一捕获。通过将吸附器内部质量、能量、动量传递规律转化为关于时间与空间的偏微分方程,并采用相应的求解器来求解,可以得到不同工况下吸附器内部流场的时空分布,实现吸附器及工艺的优化设计。

考虑到吸附器内部气体的吸脱附行为、气相间的对流传质、分子无规则运动与湍流混合带来的径向扩散,总的质量守恒、各组分的质量守恒与径向扩散系模型可表示为式(1)~式(3)。

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial(ruc_i)}{\partial r} + \varepsilon_i \frac{\partial c_i}{\partial t} + \rho_p(1 - \varepsilon_b) \sum_{i=1}^n \frac{\partial q_i}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

$$-\frac{1}{r} \varepsilon_b D_{m,i} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c_i}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial(ruc_i)}{\partial r} + \varepsilon_i \frac{\partial c_i}{\partial t} + \rho_p(1 - \varepsilon_b) \frac{\partial q_i}{\partial t} = 0 \quad (2)$$

$$D_{n,i} = 0.73D_{m,i} + \frac{ur_p}{\varepsilon_b \left(1 + 9.49 \frac{\varepsilon_b D_{m,i}}{2ur_p} \right)} \quad (3)$$

气体的吸脱附行为伴随着强烈的热效应,吸附时向外放出热量、解吸时吸收热量,进而引起床层温度波动。这会引引起吸附剂饱和和吸附容量与相间传质速率的改变,本文较Huang等^[29]提出的径向流动模型考虑了体系的能量变化。吸附器内部气、固相的能量守恒方程为式(4)、式(5)。

$$-k_g \varepsilon_b \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_g}{\partial r} \right) + \rho_g C_{pg} u \frac{\partial T_g}{\partial r} + \rho_g C_{pg} \varepsilon_i \frac{\partial T_g}{\partial t} + (1 - \varepsilon_b) h_p a_p (T_g - T_s) + 4 \frac{h_w}{R_o - R_i} (T_g - T_w) = 0 \quad (4)$$

$$-\frac{1}{r} k_s \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T_s}{\partial r} \right) + \rho_p C_{ps} \frac{\partial T_s}{\partial t} + \rho_p \sum_{i=1}^n (\Delta H_i \frac{\partial q_i}{\partial t}) - h_p a_p (T_g - T_s) = 0 \quad (5)$$

考虑到气体流经床层时的压降、多组分气体在吸附剂上的竞争吸附与气固相间的传质行为,动量守恒、各组分的饱和吸附量与LDF方程为式(6)~式(8)。

$$-\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{1.5 \times 10^{-3} \mu (1 - \varepsilon_b)^2}{\varepsilon_b^3 (2r_p)^2} u + \frac{1.75 \times 10^{-5} (1 - \varepsilon_b) \rho_g}{2r_p \varepsilon_b^3} |u| u \quad (6)$$

$$q_i^* = \frac{IP_{1,i} e^{IP_{2,i}/T} p_i}{1 + \sum_{i=1}^n (IP_{3,i} e^{IP_{4,i}/T} p_i)} \quad (7)$$

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = k_{LDF,i} (q_i^* - q_i) \quad (8)$$

径向流VPSA制氧过程包括终升压、吸附、均压等多个不同的工艺步骤,步骤间的切换通过程控阀的开闭与边界条件的改变实现。吸附器进出口存在进入流股、排出流股、封闭三种状态,与之匹配的

边界条件见表2。在商业软件gPROMS中搭建了上述径向流吸附器数学模型,采用有限元正交配置法(orthogonal collocation on finite elements method, OCFEM)对吸附器径向空间域进行离散,得到关于时间的一阶常微分代数方程组,而后对时间做积分运算。容差的取值直接影响到求解的速度和精度,本文采用的绝对容差和相对容差均为 1×10^{-5} 。模拟过程中床层状态随时间呈周期性变化,采用循环稳态来判断工艺是否稳定运行。循环稳态的判断标准见式(9)。

$$\varepsilon_{CSS} = \left(\sum_{k=1}^N |states_{i,k} - states_{j,k}|^2 \right)^{1/2} \quad (9)$$

式中, ε_{CSS} 小于 1×10^{-5} 时认为过程达到循环稳态; $states_{i,k}$ 与 $states_{j,k}$ 分别表示循环开始与结束时刻的床层状态。

表2 吸附器在不同状态下的边界条件

Table 2 Boundary conditions for adsorbers in different states

位置	流股进入	流股流出	关闭
吸附器入口	$y_i = y_{i,in}$	$\frac{\partial y_i}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial y_i}{\partial r} = 0$
	$T_g = T_{g,in}$	$\frac{\partial T_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial T_g}{\partial r} = 0$
吸附器出口	$y_i = y_{i,out}$	$\frac{\partial y_i}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial y_i}{\partial r} = 0$
	$T_g = T_{g,out}$	$\frac{\partial T_g}{\partial r} = 0$	$\frac{\partial T_g}{\partial r} = 0$

1.3 辅助设备模型

吸附器进出口物料状态直接受到动力设备、缓冲罐、程控阀等辅助设备的影响,因此有必要对其进行建模。考虑流股进出对缓冲罐内物料质量及温度的影响,建立缓冲罐的质量守恒模型[式(10)]与能量守恒模型[式(11)]。采用线性阀门模型[式(12)]描述流量与程控阀两侧压差间的关系。工艺性能的计算方法见表3。

$$\frac{\partial T}{\partial t} \left(\sum_{i=1}^n n_i C_{pg,i} \right) - \sum F_{bin} T_{bin} \sum_{i=1}^n y_i C_{pg,i} + \sum F_{bout} T_{bout} \sum_{i=1}^n y_i C_{pg,i} = 0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} - \sum F_{bin} y_{bin} + \sum F_{bout} y_{bout} = 0 \quad (11)$$

$$F = C_v (p_{in} - p_{out}) \quad (12)$$

表3 性能指标计算方法

Table 3 Calculation of performance indicators

指标	数学方程
纯度	$\frac{\int_0^{t_{\text{cycle}}} F_{\text{out}} y_{\text{out},i} dt}{\int_0^{t_{\text{cycle}}} F_{\text{out}} dt}$
回收率	$\frac{\int_0^{t_{\text{cycle}}} F_{\text{out}} y_{\text{out},i} dt}{\int_0^{t_{\text{cycle}}} F_{\text{in}} y_{\text{in},i} dt}$
生产能力	$\frac{\int_0^{t_{\text{cycle}}} F_{\text{out}} y_{\text{out},i} dt}{t_{\text{cycle}} W_{\text{ads}}}$
能耗	$dW = K_A V_{\text{in}} (p_{\text{out}} - p_{\text{in}}) / \eta_p \varepsilon_m$ $W_{\text{cycle}} = \int_0^{t_{\text{cycle}}} \sum dW$

2 工艺流程搭建

变压吸附制氧工艺利用气体在吸附剂上的升压吸附、降压解吸规律以及各组分饱和吸附量的差异实现 N₂、O₂ 分离。按照操作压力的不同,可分为 PSA 工艺和 VPSA 工艺。其中, VPSA 工艺收率更高、能耗更低,适合中大规模制氧^[4]。均压步骤能够回收高压塔的部分 O₂ 与机械能,从而提升工艺收率并降低能耗,在轴向流 VPSA 制氧工艺中得到广泛采用^[1, 37-38]。基于此,本文设计了 2 塔 8 步径向流 VPSA 制氧工艺,完整的循环工艺包括终升压(FR)、吸附(AD)、均压降(ED)、抽真空(VU)、真空吹扫(PUR)以及均压升(ER)过程,工艺时序见表 4,各步骤的详细描述如下。

步骤 1,床层 1 由罗茨鼓风机和原料气缓冲罐共同提供原料气进行升压,床层 2 由真空泵和真空缓冲罐进行再生。步骤 2,床层 1 进入吸附阶段,气体呈向心流动,吸附前沿向床层内部移动;床层 2 由真

表4 工艺时序

Table 4 Sequence of the process

Step	Bed 1	Bed 2	Time/s
1	FR	VU	4
2	AD	VU	4
3	AD	PUR	4
4	ED	ER	2
5	VU	FR	4
6	VU	AD	4
7	PUR	AD	4
8	ER	ED	2

空泵继续再生,气体呈离心流动。步骤 3,吹扫阀门打开,床层 1 产出的部分高浓度 O₂ 进入床层 2,辅助其再生。步骤 4,两个吸附器执行压力均衡,此时罗茨鼓风机向原料气缓冲罐进料、真空泵对真空缓冲罐抽真空。步骤 5~8 与步骤 1~4 相同,但床层互换。

吸附剂的选择是相关工艺设计的基础。在空分制氧过程中, LiLSX 分子筛具有明显优势;包括制氧纯度和回收率较高、单位氧气产量的吸附剂用量少、单位氧气电耗明显降低等^[4]。因此,本工艺选择 LiLSX 分子筛为吸附剂。吸附剂的特性参数是决定吸附质的吸附容量、吸附分离选择性、解析效果等性能指标的基础。具体见表 5 与表 6。

表5 N₂、O₂、Ar 在 LiLSX 分子筛上扩展型 Langmuir 2 拟合参数^[19]

Table 5 Extended Langmuir 2 fitting parameters for N₂, O₂, and Ar on LiLSX molecular sieves^[19]

参数	N ₂	O ₂	Ar
IP ₁ /(mol·kg ⁻¹ ·kPa ⁻¹)	7.107×10 ⁻⁷	6.861×10 ⁻⁶	6.354×10 ⁻⁶
IP ₂ /K	2910	1567	1634
IP ₃ /kPa ⁻¹	2.563×10 ⁻⁵	4.625×10 ⁻⁵	4.325×10 ⁻⁵
IP ₄ /K	1612	441.3	450.6
ΔH/(kJ·mol ⁻¹)	-23.43	-13.22	-12.65

表6 吸附器参数及吸附剂参数^[19]

Table 6 Adsorber parameters and adsorbent parameters^[19]

参数	数值
H _v /m	4
R _m /m	0.5
R _{out} /m	1.5
ρ _p /(kg·m ⁻³)	1000
d _p /m	0.0017
ε _p	0.53
ε _b	0.36
C _{rg} /(kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹)	1.03
C _{ps} /(kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹)	1.21
k _g /(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	0.02452
k _s /(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	0.48
k _{LDF,N₂} /s ⁻¹	2.05
k _{LDF,O₂} /s ⁻¹	4.98
k _{LDF,Ar} /s ⁻¹	4.98

3 结果与讨论

变压吸附是多步骤耦合的循环工艺,各操作参数间关联性强。通过了解吸附器内流场的时空分

布,可以得到不同工况下床层的吸附、解吸效果,识别制约工艺性能的关键参数,为后续的优化设计提供数据支撑。因此,本节重点分析了典型工况下床层压力、温度以及气固相浓度分布,并就关键操作参数对工艺性能的影响进行分析。

3.1 压力分布

操作压力受到众多工艺参数的共同影响,能够直观反映工艺性能的优劣。如图2所示,终升压过程中塔内压力由0.86 bar(1 bar=101325 Pa)升至1.23 bar,初始阶段原料气缓冲罐与鼓风机同时向吸附器内供气,因此增速较快。吸附过程持续8 s,压力由1.23 bar增至1.34 bar,在吸附过程的第4 s吹扫阀门打开,压力曲线在此处出现转折。均压降过程持续2 s,压力由1.34 bar先快速下降而后缓慢接近0.86 bar。真空过程持续12 s,压力曲线的两个拐点分别与真空缓冲罐和吹扫过程有关,最终压力抽至0.47 bar。均压升步骤与另一个吸附器的均压降步骤相互耦合,压力快速上升而后趋于平缓,此时大量轻组分气体用于吸附器升压。

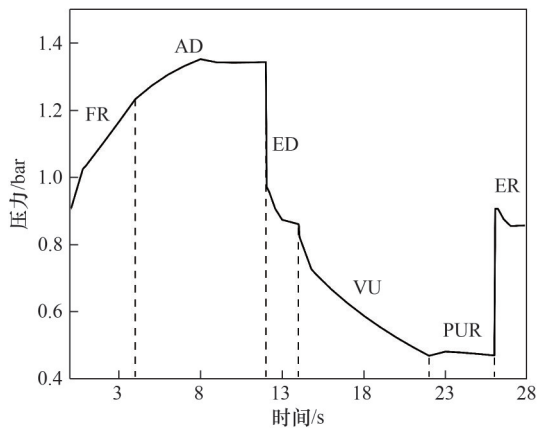


图2 VPSA过程塔1出口压力变化

Fig.2 Pressure variation at bed 1 of the VPSA process

3.2 温度分布

吸附与解吸过程伴随着强烈的热效应,带来床层温度的明显变化,进而影响吸附剂的饱和吸附容量与气体的吸脱附行为。图3展示了塔1达到循环稳态后单个周期内床层不同径向位置处温度随时间的变化情况。终升压与吸附过程压力升高,吸附剂饱和吸附量增大,此时床层内吸附过程占主导地位,气体被吸附而放出热量,温度逐渐上升。均压降、抽真空与真空吹扫过程压力降低,发生气体脱附而吸收热量,床层温度降低。均压升过程进入床层的气体以轻组分为主,吸附量较低,床层温升并

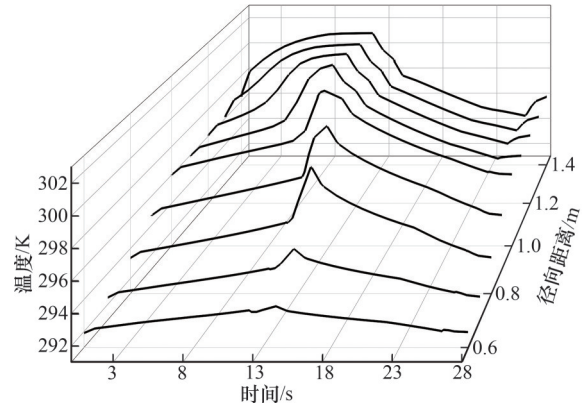


图3 温度随时间与径向位置的变化

Fig.3 The change of temperature with time and radial position

不明显。床层内靠近进料端的区域温度变化更为剧烈,这是由于原料气进料管路与真空管路均靠近吸附剂层外侧,此处吸附质的吸脱附行为较其他位置更为剧烈。

3.3 浓度分布

工艺运行至循环稳态后,床层各位置处气固相浓度随时间呈周期性变化。图4、图5分别为各步骤结束时 N_2 、 O_2 在床层内的固相与气相浓度分布。终升压与吸附阶段气体呈向心流动,随着时间的推移床层外层吸附剂逐渐达到吸附饱和,气相浓度前沿向中心移动。均压降阶段气体仍做向心流动,此时床层压力降低, N_2 开始大量脱附,外层气相 N_2 浓度高于原料气浓度、吸附前沿继续向中心移动。真空管路与吸附剂层外侧相连,因此床层压力降低的同时气相浓度前沿向外侧转移。产品气吹扫阶段进一步降低了 N_2 分压,并带走吸附剂间隙中的部分 N_2 ,促进了吸附剂的解吸。均压升阶段大量高浓度产品气自中心管进入吸附剂层,使得床层气相浓度出现较大变化。

3.4 吸附时长的影响

吸附时间的长短直接影响了吸附前沿在床层中的推进程度,从而影响工艺性能。图6展示了纯度、回收率、生产能力以及能耗随吸附时长的变化情况。随着吸附时长的增加,产品气 O_2 纯度下降、回收率上升,能耗先下降后上升。这是由于吸附时长增加,更多重组分从吸附剂层穿出,导致产品气纯度下降、回收率上升,吸附剂的生产能力亦随之升高。吸附时长增加,单个周期内动力设备做功与吸附器产氧量均增大,两者增速不同,导致工艺能耗变化趋势出现转折。当吸附时长为8 s时,继续增加步骤时长,工艺能耗变化不大。且此时可制得纯

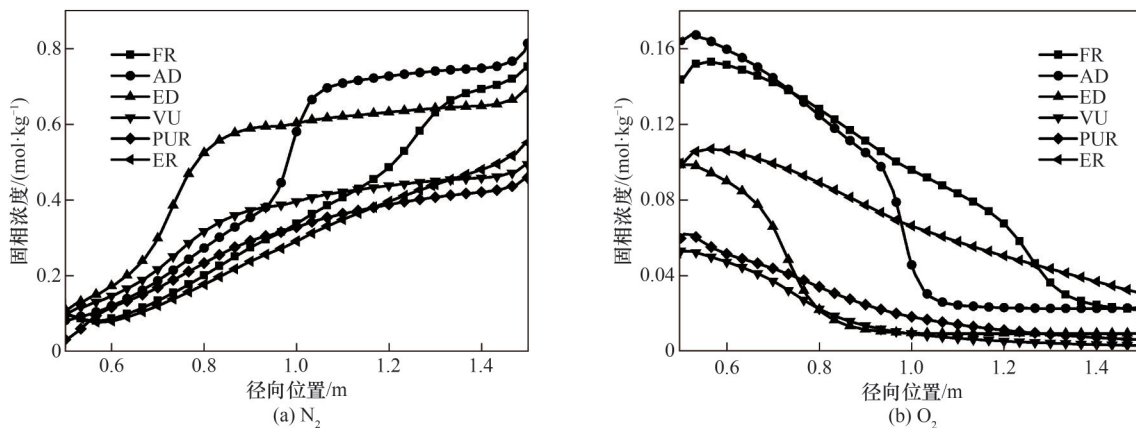


图 4 各步骤结束时刻 N₂、O₂ 的固相浓度分布

Fig.4 Solid-phase concentration distribution of N₂ and O₂ at the end of each step

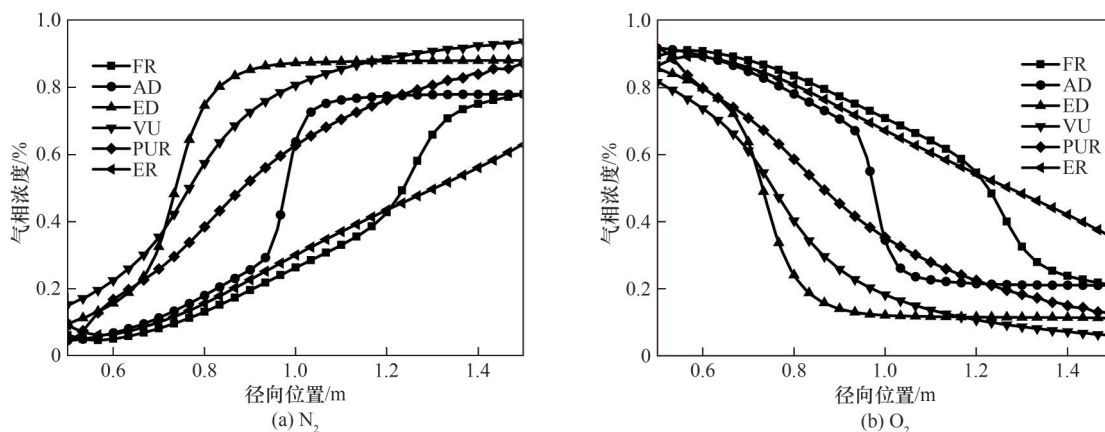


图 5 各步骤结束时刻 N₂、O₂ 的气相浓度分布

Fig.5 Gas-phase concentration distribution of N₂ and O₂ at the end of each step

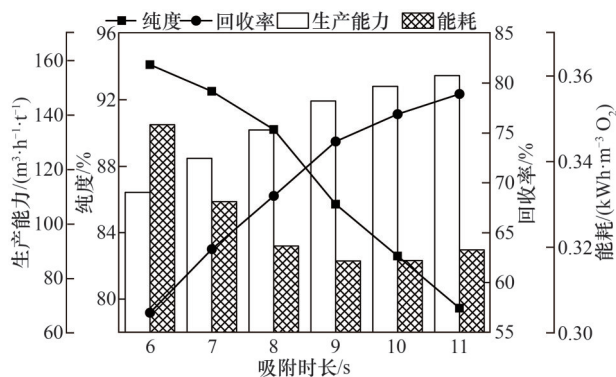


图 6 吸附时长对工艺性能的影响

Fig.6 Effect of adsorption time on process performance

度为 90.21% 的氧气,能够满足大多数场景下的使用要求。因此,确定吸附时长为 8 s。

3.5 均压时长的影响

均压步骤时高压塔内保留的部分高浓度混合气向解吸塔传递并完成压力均衡,该过程能够提升 O₂ 回收率并降低升压与再生能耗。由图 7 可知,随着均压时长的增加,产品气 O₂ 纯度下降、回收率与生产能力

上升,能耗先降低后增加。这是由于较长的均压时间会导致床层内 N₂ 大量解吸,浓度前沿向吸附器中心移动,更多的吸附剂遭到污染而性能下降,最终导致纯度下降、回收率与生产能力上升。床层污染程度加剧,导致工艺的吸附与解吸压力升高,鼓风机能耗增加、真空泵能耗降低。两者共同作用,在均压时间 2.0 s 时工艺能耗有最小值 0.3202 kWh·m⁻³ O₂。考虑工艺能耗最低,确定均压时长为 2.0 s。

3.6 吹扫进料比的影响

吹扫是一种重要的辅助再生手段,通过将吸附阶段产出的一部分产品气通入处于真空状态的吸附塔,可以降低床层中 N₂ 的分压,促进其解吸,并将吸附剂间隙中的 N₂ 带走,从而提升床层解吸效果。随吹扫进料比的增大,纯度与能耗上升、回收率与生产能力下降(图 8)。这是由于吹扫流量上升,提升了床层解吸效果,但同时产品气的损失量也随之增加。能耗的变化幅度不大,最高值与最低值间仅相差 0.011 kWh·m⁻³ O₂,这是动力设备做功相近、O₂ 产量降低所致。

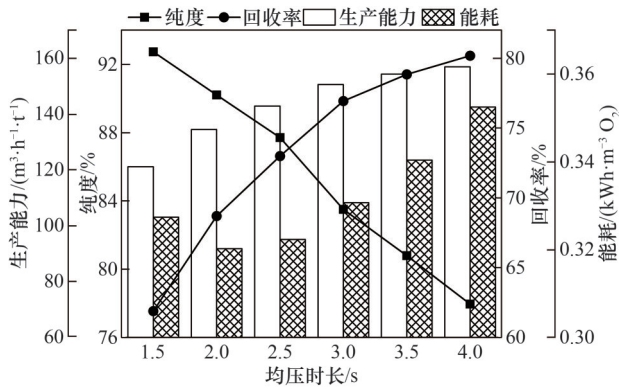


图7 均压时长对工艺性能的影响

Fig.7 Effect of pressure equalization time on process performance

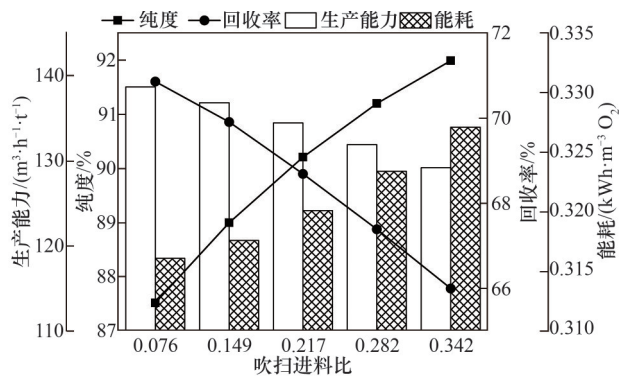


图8 吹扫进料比对工艺性能的影响

Fig.8 Effect of purge feed ratio on process performance

3.7 进料量的影响

针对工艺运行过程可能存在的进料波动,固定其他工艺参数不变,考察进料量的改变对制氧性能的影响。由图9可以看出进料量出现2000 m³·h⁻¹的波动时,这套工艺仍能产生纯度80%以上的产品气。然而,进料量的改变仍然带来工艺性能的较大波动,需要制定相应的控制策略来削弱这一影响。随进料量的增大,工艺的纯度与能耗下降、收率与生产能力上升。这是由于床层截面积不变,进气量的增大会直接导致空塔气速的提升,吸附前沿推进速度加快,床层的分离效果下降。能耗的明显下降与工艺产氧量的快速提升有关。

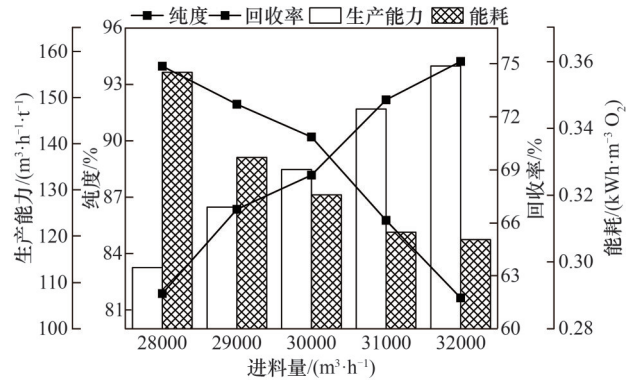


图9 进料量对工艺性能的影响

Fig.9 Effect of feed flow rate on process performance

3.8 工艺对比

本工艺在制氧纯度为92.74%时,回收率为61.88%、生产能力高达121.10 m³·h⁻¹·t⁻¹、能耗低至0.327 kWh·m⁻³ O₂。相较同类型的轴向流制氧工艺,本文采用的工艺在纯度、收率相近的情况下能耗更低、生产能力显著提升。径向流动形式有利于充分发挥吸附剂的制氧性能。吸附阶段气体流量由外向内逐渐减少,解吸阶段气体流量由内向外逐渐增加,与吸附器截面积的变化趋势相同。气体在不同位置处的流速更加均匀,有利于吸附与解吸过程。

4 结论

径向流吸附器结构紧凑且床层压降更低,受到Air Products、Praxair、Air Liquid等国内外企业的普遍关注。然而,目前径向流工艺的设计严重依赖于经验,缺乏模拟数据的支持。基于此,本文建立了严格的径向流VPSA制氧系统数学模型,考虑到吸附器内部流体的三传特性以及吸附器、动力设备、缓冲罐等多模块间的耦合。为充分发挥出吸附器的制氧性能,本文采用2塔8步VPSA制氧工艺,以空气为原料气、LiLSX分子筛为吸附剂。探究了吸附时长、均压时长、吹扫进料比以及进料量对工艺性能的影响,并对典型工况下床层内压力、温度以及气固相组成的时空分布进行分析,以期为进一步的优化

表7 不同PSA制氧工艺对比

Table 7 Comparison of different PSA oxygen production processes

工艺	流动类型	处理量/(m ³ ·h ⁻¹)	纯度/%	回收率/%	生产能力/(m ³ ·h ⁻¹ ·t ⁻¹)	能耗/(kWh·m ⁻³ O ₂)
本文	径向流	30000	92.74	61.88	121.10	0.327
2塔6步VPSA ^[19]	轴向流	19800	93.00	58.35	87.66	0.344
2塔8步VPSA ^[39]	轴向流	270	90.00	62.60	—	0.550
2塔8步PSA ^[40]	轴向流	—	92.57	43.79	101.61	1.030

设计提供数据支撑。本工艺在制氧纯度为 92.74% 时, 收率为 61.88%, 生产能力高达 $121.10 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{t}^{-1}$ 、能耗低至 $0.327 \text{ kWh} \cdot \text{m}^{-3} \text{ O}_2$ 。相比轴向流工艺, 本工艺在纯度、收率相近的情况下生产能力提升 $33.44 \text{ m}^3 \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{t}^{-1}$ 、能耗降低 $0.017 \text{ kWh} \cdot \text{m}^{-3} \text{ O}_2$, 符合制氧工艺大规模、低成本、低能耗的发展趋势。

符 号 说 明

a_p ——单位体积床层吸附剂表面积, m^{-1}
 $C_{pg,i}$ ——组分 i 的摩尔热容, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 C_{ps} ——固相比定压热容, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 C_v ——阀门开度系数, $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{bar}^{-1}$
 C_{vg} ——气相比定容热容, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 c_i ——组分的气相浓度, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$
 c_i ——气相浓度, $\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$
 $D_{m,i}$ ——组分 i 的分子扩散系数, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
 $D_{m,i}$ ——组分 i 的径向扩散系数, $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
 d_p ——吸附剂颗粒直径, m
 F ——通过阀门的质量流率, $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$
 F_{bin} ——流入缓冲罐的摩尔流率, $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$
 F_{bout} ——流出缓冲罐的摩尔流率, $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$
 F_{in} ——流入体系的质量流率, $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$
 F_{out} ——流出体系的质量流率, $\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$
 H_b ——吸附塔高度, m
 ΔH_i ——组分 i 的吸附热, $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
 h_p ——气固相间传热系数, $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
 h_w ——气壁间传热系数, $\text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$
 $IP_{1,i}$ ——组分 i 的吸附等温线参数, $\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{kPa}^{-1}$
 $IP_{2,i}$ ——组分 i 的吸附等温线参数, K
 $IP_{3,i}$ ——组分 i 的吸附等温线参数, kPa^{-1}
 $IP_{4,i}$ ——组分 i 的吸附等温线参数, K
 K_A ——动力设备负载系数
 k_g ——气相热导率, $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 $k_{\text{LDF},i}$ ——组分 i 的传质系数, s^{-1}
 k_s ——固相热导率, $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
 n_i ——组分 i 的物质的量, mol
 p ——压力, bar
 p_i ——组分 i 的分压, kPa
 p_{in} ——设备上游压力, bar
 p_{out} ——设备下游压力, bar
 q_i ——组分 i 的吸附量, $\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$
 q_i^* ——组分 i 的饱和吸附量, $\text{mol} \cdot \text{kg}^{-1}$
 R_{in} ——吸附剂层内径, m
 R_{out} ——吸附剂层外径, m
 r ——径向距离, m
 r_p ——吸附剂颗粒半径, m

T ——温度, K
 T_g ——气相温度, K
 T_{in} ——流入流的温度, K
 T_{out} ——流出流的温度, K
 T_s ——固相温度, K
 T_w ——壁温, K
 t ——时间, s
 t_{cycle} ——单循环周期时间, s
 u ——表观气速, $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$
 V_{in} ——动力设备体积流率, $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$
 W ——动力设备能耗, J
 W_{cycle} ——动力设备单周期能耗, J
 y_i ——组分 i 的气相组成
 $y_{\text{in},i}$ ——流入体系的组分 i 组成
 $y_{\text{out},i}$ ——流出体系的组分 i 组成
 ε_b ——床层空隙率
 ε_m ——动力设备容积效率
 ε_t ——总空隙率
 η_p ——动力设备机械效率
 μ ——气体动力学黏度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
 ρ_g ——气相密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
 ρ_p ——吸附剂颗粒密度, $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$

下角标

g——气相
i——组分
in——进口
out——出口
s——固相

参 考 文 献

- [1] Chin C, Kamin Z, Bahrin M H V, et al. The production of industrial-grade oxygen from air by pressure swing adsorption[J]. International Journal of Chemical Engineering, 2023, **2023**(1): 2308227.
- [2] Rumbo Morales J Y, Ortiz-Torres G, García R O D, et al. Review of the pressure swing adsorption process for the production of biofuels and medical oxygen: separation and purification technology[J]. Adsorption Science & Technology, 2022, **2022**: 3030519.
- [3] Bhat A A, Mang H, Rajkumar S, et al. On-board oxygen generation using high performance molecular sieve[J]. Defence Life Science Journal, 2017, **2**(4): 380-384.
- [4] 陈健. 吸附分离工艺与工程[M]. 北京: 科学出版社, 2022: 417.
Chen J. Technology and Engineering of Adsorption Separation[M]. Beijing: Science Press, 2022: 417.
- [5] Singla R, Chowdhury K. Comparisons of thermodynamic and economic performances of cryogenic air separation plants designed for external and internal compression of oxygen[J]. Applied Thermal Engineering, 2019, **160**: 114025.
- [6] Himma N F, Wardani A K, Prasetya N, et al. Recent progress and challenges in membrane-based O_2/N_2 separation[J]. Reviews in Chemical Engineering, 2019, **35**(5): 591-625.

- [7] Murali R S, Sankarshana T, Sridhar S. Air separation by polymer-based membrane technology[J]. *Separation & Purification Reviews*, 2013, **42**(2): 130–186.
- [8] Si H, Hong Q, Chen X H, et al. Pressure swing adsorption for oxygen production: adsorbents, reactors, processes and perspective[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2025, **509**: 161273.
- [9] Shokroo E J, Farsani D J, Meymandi H K, et al. Comparative study of zeolite 5A and zeolite 13X in air separation by pressure swing adsorption[J]. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 2016, **33**(4): 1391–1401.
- [10] Ackley M W. Medical oxygen concentrators: a review of progress in air separation technology[J]. *Adsorption*, 2019, **25**(8): 1437–1474.
- [11] Qadir S, Li D F, Gu Y M, et al. Experimental and numerical analysis on the enhanced separation performance of a medical oxygen concentrator through two-bed rapid pressure swing adsorption[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2021, **60**(16): 5903–5913.
- [12] Liu Y S, Zhang Q L, Cao Y Z, et al. Effect of intermittent purge on O₂ production with rapid pressure swing adsorption technology[J]. *Adsorption*, 2021, **27**(2): 181–189.
- [13] Urich M D, Vemula R R, Kothare M V. Multivariable model predictive control of a novel rapid pressure swing adsorption system[J]. *AIChE Journal*, 2018, **64**(4): 1234–1245.
- [14] Alpay E, Kenney C, N, Scott DM. Adsorbent particle size effects in the separation of air by rapid pressure swing adsorption[J]. *Chemical Engineering Science*, 1994, **49**(18): 3059–3075.
- [15] Sun Y, Zhang C Z, Zhu X Q, et al. Mass and heat transfer of pressure swing adsorption oxygen production process with small adsorbent particles[J]. *Processes*, 2023, **11**(8): 2485.
- [16] Zhong G, Rankin P J, Ackley M W. High frequency PSA process for gas separation: US7828878[P]. 2010–11–09.
- [17] Tian T, Wang Y Y, Liu B, et al. Simulation and experiment of six-bed PSA process for air separation with rotating distribution valve[J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2022, **42**: 329–337.
- [18] de Henrique G J, Torres A E B, de Azevedo D C S, et al. Evaluation of oxygen separation from air by pressure/vacuum swing adsorption[J]. *Adsorption*, 2024, **30**(5): 555–568.
- [19] Ding Z Y, Han Z Y, Fu Q, et al. Optimization and analysis of the VPSA process for industrial-scale oxygen production[J]. *Adsorption*, 2018, **24**(5): 499–516.
- [20] Zhu X Q, Sun Y, Zhou S D, et al. Comparative performance of industrial-scale oxygen production by pressure swing adsorption and vacuum pressure swing adsorption under plateau environment[J]. *Adsorption*, 2024, **30**(7): 1539–1545.
- [21] Tentarelli S C. Radial flow adsorption vessel: US006086659[P]. 2000–07–11.
- [22] Kalbassi M A, Gibbon S J, Tentarelli S C. Radial flow adsorber ‘U’ configuration: US9731241[P]. 2017–08–15.
- [23] Kiffer M S, O’neill C M, Tentarelli S C. Radial flow adsorption vessel comprising flexible screen: US010994238[P]. 2021–05–04.
- [24] Smolarek J, Leavitt F W, Nowobilski J J, et al. Radial bed vacuum/pressure swing adsorber vessel: US5759242[P]. 1998–06–02.
- [25] Ackley M W, Nowobilski J J, Smolarek J, et al. Multiple adsorbent loading method and apparatus for a radial flow vessel: US5836362[P]. 1998–11–17.
- [26] Bosquain M, Grenier M, Hay L, et al. Reactor and apparatus for purifying by adsorption: US4541851[P]. 1985–09–17.
- [27] Rota R, Wankat P C. Intensification of pressure swing adsorption processes[J]. *AIChE Journal*, 1990, **36**(9): 1299–1312.
- [28] Chiang A S T, Hong M C. Radial flow rapid pressure swing adsorption[J]. *Adsorption*, 1995, **1**(2): 153–164.
- [29] Huang W C, Chou C T. Comparison of radial- and axial-flow rapid pressure swing adsorption processes[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2003, **42**(9): 1998–2006.
- [30] Yang X, Wang H Y, Chen J W, et al. Two-dimensional modeling of pressure swing adsorption (PSA) oxygen generation with radial-flow adsorber[J]. *Applied Sciences*, 2019, **9**(6): 1153.
- [31] Zhang R Y, Wang Y H, Yu X X, et al. Flow characteristics of air separation in VPSA process with radial flow adsorber[J]. *Powder Technology*, 2022, **407**: 117672.
- [32] Tian J P, Shen Y H, Zhang D H, et al. CO₂ capture by vacuum pressure swing adsorption from dry flue gas with a structured composite adsorption medium[J]. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 2021, **9**(5): 106037.
- [33] Wang Y Y, An Y X, Ding Z Y, et al. Integrated VPSA processes for air separation based on dual reflux configuration[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2019, **58**(16): 6562–6575.
- [34] Sun W N, Shen Y H, Zhang D H, et al. A systematic simulation and proposed optimization of the pressure swing adsorption process for N₂/CH₄ separation under external disturbances[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2015, **54**(30): 7489–7501.
- [35] Wu W L, Chen S A, Niu Z Y, et al. A high-productivity PSA process configuration for H₂ purification[J]. *Fuel*, 2024, **356**: 129566.
- [36] Shi W R, Yang H W, Shen Y H, et al. Two-stage PSA/VSA to produce H₂ with CO₂ capture *via* steam methane reforming (SMR)[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2018, **43**(41): 19057–19074.
- [37] Yavary M, Ebrahim H A, Falamaki C. The effect of number of pressure equalization steps on the performance of pressure swing adsorption process[J]. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, 2015, **87**: 35–44.
- [38] Chahbani M H, Talmoudi R, Abdel Jaoued A, et al. Modeling and simulation of pressure equalization step between a packed bed and an empty tank in pressure swing adsorption cycles[J]. *The Open Chemical Engineering Journal*, 2017, **11**(1): 33–52.
- [39] Zhu X Q, Sun Y, Liu Y S, et al. Experimental performance analysis of vacuum pressure swing adsorption air separation process under plateau special conditions[J]. *Separation Science and Technology*, 2022, **57**(18): 2885–2893.
- [40] Zhang Q L, Wang S, Li S G, et al. PSA oxygen generation: process parameter optimization and improved oxygen production performance in plateau regions[J]. *Separation and Purification Technology*, 2025, **374**: 133620.