



Nghiên cứu tính toán các tham số động học của mô hình toán mô tả quá trình hấp phụ của một cột trong thiết bị tạo khí N<sub>2</sub> làm việc theo chu trình hấp phụ thay đổi áp suất (PSA) và sử dụng vật liệu hấp phụ sàng phân tử cacbon CMS-240

Study on calculating kinetic parameters of mathematical model describing the adsorption process of a single fixed bed of N<sub>2</sub> gas generator working by pressure swing adsorption (PSA) and using carbon molecular sieves CMS-240

Phạm Văn Chính<sup>1</sup>, Lê Quang Tuấn<sup>1</sup>, Nguyễn Tuấn Hiếu<sup>2</sup>, Vũ Đình Tiến<sup>3\*</sup>

<sup>1</sup>Viện Hóa học Vật liệu – Viện Khoa học và Công nghệ Quân sự

<sup>2</sup>Viện Công nghệ – Tổng cục Công nghiệp Quốc phòng

<sup>3\*</sup>Viện Kỹ thuật Hóa học – Trường Đại học Bách khoa Hà Nội

Email: [tien.vudinh@hust.edu.vn](mailto:tien.vudinh@hust.edu.vn)

#### ARTICLE INFO

Received: 21/9/2019

Accepted: 05/01/2020

#### Keywords:

Kinetic parameters, mathematical model, simulation, separation, adsorption, pressure swing adsorption (PSA), carbon molecular sieves, nitrogen.

#### ABSTRACT

Nitrogen generator working by pressure swing adsorption cycle using carbon molecular sieves adsorbent is widely used in industry at small and medium scale in recent years, due to its convenience. This is equipment that uses a molecular size selective adsorption technique to separate nitrogen from air. In general, kinetic modeling and optimization are commonly used to analyze the process dynamics of the adsorption column at various operating conditions in which process parameters such as gas concentration, operating temperature and pressure are considered to be functions of time and bed height. In this paper, a mathematical model describing the adsorption column according to the pressure function is established following time and the height of the bed assuming that the velocity through area of the bed is constant at each pressure. The results of these calculations are model parameters that describe the adsorption process of the column. This model can be solved by MATLAB software to simulate the adsorption process of the column. This study was carried out on a nitrogen gas generator that was researched and designed at the Institute of Technology - General Department of Defense Industry to simulate, optimize and scale-up.

#### Giới thiệu chung

Trên thế giới, trong những năm gần đây đã có nhiều công trình nghiên cứu về công nghệ và thiết bị làm việc theo chu trình PSA, TSA được công bố [1] để phân tách các loại khí từ hỗn hợp của nó trên cơ sở nền tảng lý thuyết đầy đủ của Douglas M. Ruthven, Shamsuzzaman Farroq, Kent S. Knaebel (1994) [2]. Một trong các ứng dụng lớn của kỹ thuật phân tách bằng PSA là phân tách các thành phần khí N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> và Ar...từ không khí để sử dụng cho các quy mô sản

xuất vừa và nhỏ trong công nghiệp, thực phẩm và y tế mà việc vận chuyển, sử dụng N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub> hóa lỏng rất khó khăn. Trên thế giới cũng đã có nhiều công trình nghiên cứu về vấn đề này được công bố trên các phương diện khác nhau về vật liệu hấp phụ sàng phân tử, chu trình PSA, mô hình toán [3,4]...nhưng việc nghiên cứu tính toán các thông số động học và mô phỏng để nâng quy mô công nghiệp còn rất hạn chế bởi các kết quả này là bản quyền của các hãng sản xuất vật liệu hấp phụ sàng phân tử và thiết bị PSA.

Ở trong nước, tại Viện Công nghệ - Tổng cục Công nghiệp quốc phòng đã nghiên cứu, thiết kế và chế tạo thiết bị tạo khí N<sub>2</sub> từ không khí sử dụng vật liệu hấp phụ sàng phân tử cacbon CMS-240, làm việc theo chu trình PSA để nghiên cứu mô phỏng, tối ưu hóa thiết bị và nâng qui mô công nghiệp [5,6]. Các nghiên cứu đã được thực hiện: nghiên cứu mô phỏng và tối ưu hóa thiết bị bằng phần mềm Aspen Adsorption[7]; nghiên cứu quá trình hấp phụ của một cột trong máy tạo khí N<sub>2</sub>[8]; nghiên cứu so sánh lựa chọn chu trình làm việc và tối ưu hóa thiết bị [9]; nghiên cứu thành phần, cấu trúc của vật liệu hấp phụ sàng phân tử CMS-240[10]. Nhưng chưa nghiên cứu thiết lập mô hình toán và mô phỏng mô tả quá trình làm việc của cột. Trong nội dung nghiên cứu này, việc nghiên cứu phân tích và tính toán các tham số của mô hình là rất quan trọng. Các tham số này phụ thuộc vào bản chất của vật liệu, kích thước của thiết bị và chế độ làm việc của cột như nhiệt độ, áp suất.

Như trong [3,4] đã công bố các giả thiết và các mô hình toán mô tả cột hấp phụ như sau:

- Các giả thiết: các phần tử trong cấu trúc dòng là khí lý tưởng; phân tán hướng kính là không đáng kể chỉ có phân tán dọc trục; tính chất hấp phụ trên toàn cột không đổi; mối quan hệ cân bằng dự đoán theo đường đẳng nhiệt Langmuir – Freundlich của các thành phần O<sub>2</sub> và N<sub>2</sub>; tốc độ chuyển khối coi như tuyến tính; nhiệt hấp phụ và nhả hấp không đáng kể coi như đẳng nhiệt; tổn thất áp suất qua cột tính theo Eugrun's; cột ban đầu sạch không có không khí; thành phần đầu vào chỉ có O<sub>2</sub> (79%) và N<sub>2</sub> (21%).

- Các mô hình toán mô tả cột hấp phụ được thiết lập [3,4]:

+ Phương trình cân bằng chất cho cấu tử i (sự thay đổi nồng độ của cấu tử i theo thời gian và theo chiều cao cột, ví dụ như O<sub>2</sub>):

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} - D_L \cdot \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} + \frac{\partial(C_i \cdot u)}{\partial z} + \rho_p \cdot \left( \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} \right) \cdot \frac{\partial q_i}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

+ Phương trình cân bằng động lượng Eugrun's (tổn thất áp suất theo chiều cao cột):

$$-\frac{dP}{dZ} = a \cdot \mu \cdot u + b \cdot r \cdot u \cdot |u|; a = \frac{150 \cdot (1-\varepsilon)^2}{4R_p^2 \varepsilon^2}, b = \frac{1.75(1-\varepsilon)}{2R_p \varepsilon} \quad (2)$$

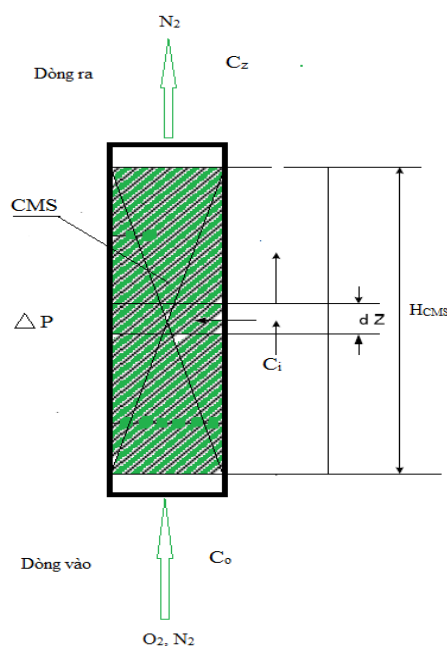
+ Phương trình cân bằng hấp phụ (phương trình đẳng nhiệt Langmuir – Freundlich):

$$q_i^* = \frac{B_i q_{mi} P_i^{n_i}}{1 + \sum_{j=1}^n B_j P_j^{n_j}} \quad (3)$$

$$q_{mi} = k_1 + k_2 \cdot T; B_i = k_3 \exp\left(\frac{k_4}{T}\right); n_i = \frac{k_5 + k_6}{T} \quad (4)$$

$$\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial z} = \omega_i (q_i^* - \bar{q}_i); \omega_i = \frac{15D_{ei}}{r_c^2} \quad (5)$$

$$\frac{15D_{ei}}{r_c^2} = CP_r^5 (1 + B_i P_i)^2 \quad (6)$$



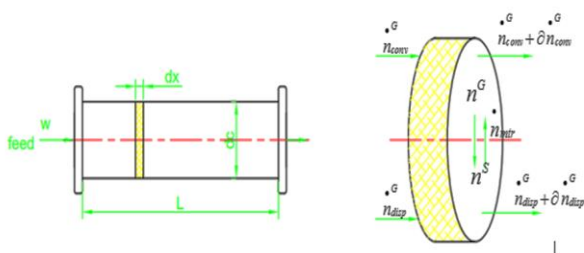
Hình 1: Mô hình cột hấp phụ cố định sàng phân tử cacbon CMS-240

Bởi vì phương trình (1) không thể kiểm chứng được bằng thực nghiệm, việc đo đặc sự biến thiên nồng độ của cấu tử bị hấp phụ C<sub>i</sub> theo thời gian và theo chiều cao của cột hết sức khó khăn. Nguyên lý đo và độ chính xác của thiết bị đo nồng độ (O<sub>2</sub>) thấp và có độ trễ (nguyên lý đo bằng cảm biến hấp phụ). Nên ta có thể mô phỏng cột hấp phụ theo áp suất vì nó có cảm biến chính xác hơn, việc kiểm chứng mô hình dễ dàng hơn.

Từ Hình 1, nghiên cứu này thiết lập phương trình cân bằng mô tả sự thay đổi áp suất riêng phần của cấu tử i (O<sub>2</sub>) theo thời gian và theo chiều cao của cột bằng phương pháp giải tích,

+ Trong một phân tử thể tích dV<sub>c</sub> ta có:

$$dV_c = A_c \cdot dz ; A_c = \frac{\pi \cdot d_c^2}{4} \quad (7)$$



Hình 2: Mô hình cấu trúc dòng qua một phần tử thể tích cột hấp phụ

+ Phương trình cấu trúc dòng chảy qua phần tử tiết diện  $dV_c$  có chiều cao  $dz$ , phương trình cân bằng của cột hấp phụ trong pha khí (G) và pha rắn (S) như sau:

$$\frac{\partial n^{(G)}}{\partial t} = \underbrace{-\partial \dot{n}_{cov}^{(G)}}_{(I)} - \underbrace{\partial \dot{n}_{disp}^{(G)}}_{(II)} + \underbrace{\partial \dot{n}_{mtr}}_{(III)} \quad (8)$$

$$\frac{\partial n^{(S)}}{\partial t} = -\partial \dot{n}_{mtr} \quad (9)$$

+ Từ (8), (9) thực hiện các phép biến đổi giải tích ta có (10) và (11) :

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} = -\varepsilon \cdot u_v \cdot \frac{\partial C}{\partial z} + \varepsilon D_L \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + (1-\varepsilon)\beta(q-q^*) \quad (10)$$

$$(1-\varepsilon) \frac{\partial q}{\partial t} = -(1-\varepsilon)\beta(q-q^*) \quad (11)$$

+ Cộng 2 về phương trình (10) và (11) ta có phương trình cân bằng chất cho cả pha khí (G) và pha rắn (S) theo cấu tử i ( $O_2$ ) (12):

$$\varepsilon \frac{\partial C_i}{\partial t} + (1-\varepsilon) \frac{\partial q_i}{\partial t} + \varepsilon \cdot u_v \cdot \frac{\partial C_i}{\partial z} = \varepsilon D_L \cdot \frac{\partial^2 C_i}{\partial z^2} \quad (12)$$

+ Do ở trạng thái khí, nồng độ cấu tử  $O_2$  sẽ tỷ lệ với áp suất riêng phần của  $O_2 \Rightarrow$  Nồng độ  $O_2$  trong pha rắn là hàm của áp suất riêng phần của  $O_2$  trong pha khí nên ta có  $q_i = f(p_i)$ :

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{\partial q_i}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} = \frac{\partial q_i}{\partial t} f'(p_i) \quad (13)$$

+ Nên từ (12) ta có:

$$\varepsilon \frac{\partial p_i}{\partial t} + (1-\varepsilon) \frac{\partial q_i}{\partial p_i} \frac{\partial p_i}{\partial t} = -\varepsilon \cdot u_c \cdot \frac{\partial p_i}{\partial z} + \varepsilon D_L \cdot \frac{\partial^2 p_i}{\partial z^2} \quad (14)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial p_i}{\partial t} \left( 1 + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} f'(p_i) \right) = -\varepsilon \cdot u_c \cdot \frac{\partial p_i}{\partial z} + \varepsilon D_L \cdot \frac{\partial^2 p_i}{\partial z^2} \quad (15)$$

Theo (13):  $q = K \cdot p \Leftrightarrow f'(p) = K$

$$\frac{\partial p_i}{\partial t} \left( 1 + \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon} K \right) = -\varepsilon \cdot u_c \cdot \frac{\partial p_i}{\partial z} + \varepsilon D_L \cdot \frac{\partial^2 p_i}{\partial z^2} \quad (16)$$

Phương trình (16) là phương trình toán mô tả sự thay đổi áp suất riêng phần của  $O_2$  theo thời gian và theo chiều cao của cột. Đây là một phương trình vi phân đạo hàm riêng cấp 2 với 2 biến số độc lập (PDAE) với hàm là áp suất ( $p_i$ ), các biến là thời gian ( $t$ ) và chiều cao của cột ( $z$ ) với các giả thiết (khí lý tưởng, tốc độ khí không đổi...). Để có thể mô phỏng động học của cột hấp phụ, cần thiết phải đi tìm nghiệm của phương trình (16), trước tiên ta phải xác định các tham số của nó như hằng số Henry  $K$ , độ xốp  $\varepsilon$ , tốc độ  $u$  (m/s) và hệ số khuếch tán dọc trục  $D_L$  ( $cm^2/s$ ). Các tham số này phụ thuộc vào bản chất của vật liệu, kích thước của cột và thông số công nghệ làm việc của cột.

Trong đó  $p_i$  được coi là hàm (áp suất riêng phần của  $O_2$  cấu tử bị hấp phụ), bar; còn lại  $t$  là thời gian;  $z$  là tọa độ chiều cao của cột, m là các biến số.

Đồng thời phải đặt các điều kiện đầu và điều kiện biên của nó, phương trình (16) hoàn toàn giải được bằng thuật toán Euler trên phần mềm MATLAB.

Các công thức tính toán các tham số của mô hình (16):

+ Độ xốp tổng [8] :  $\varepsilon_t = \varepsilon_i + \varepsilon_p(1-\varepsilon_i) \quad (17)$

+ Vận tốc qua cột [2]:  $v = \frac{V_{kk}}{\varepsilon \frac{\pi D^2}{4}} \quad (18)$

+ Hệ số khuếch vùng chuyển tiếp khi  $d_p = \lambda$  [2]:  $\frac{1}{D_L} = \frac{1}{D_{AB}} + \frac{1}{D_K} \quad (19)$

Trong đó:

+ Hệ số khuếch tán phân tử khí - Khuếch tán phân tử khí  $d_p \gg \lambda$  [2]:

$$D_{A,B} = 0,00158 \frac{T^{3/2} \left( \frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B} \right)^{1/2}}{P \cdot \sigma_{AB}^2 \cdot \Omega_{AB} (\varepsilon / kT)} \quad (20)$$

+ Hệ số khuếch tán Knudsen khi  $\lambda \ll d_p$  [2]:

$$D_K = \frac{1}{3} d_p \sqrt{\frac{8RT}{M_i}} = 4850 d_p \sqrt{\frac{T}{M_i}} \quad (21)$$

T là nhiệt độ của hệ [K]

$M_A, M_B$  khối lượng mol của 2 cấu tử  $O_2$  và  $N_2$  [kg/kmol]

P là áp suất tổng [atm]

$\sigma_{AB}, \epsilon_{AB}$  là các hệ số trong phương trình thế năng Lennard-Jones

$\Omega_{AB} = (\epsilon_{AB}/kT)$  là hàm số tích phân va chạm

$k = 1,3806504 \cdot 10^{23}$  là hằng số Boltzmann (Ludwig Bozmann).

### Thực nghiệm và phương pháp nghiên cứu

#### Đối tượng nghiên cứu

- Xây dựng mô hình thiết bị thí nghiệm một cột được trình bày trong Hình 3 bao gồm các thiết bị chính sau đây: F1-Lọc sơ cấp; C1-Máy nén khí Piston; T01-Bình tích; D1-Cột Silicagen; B1-Cột hấp phụ CMS-240 (DxH=102x950mm) chứa 3,5 kg CMS-240; T02-Bình chứa sản phẩm; FM01-Thiết bị đo lưu lượng không khí đầu vào; FM02-Thiết bị đo lưu lượng khí  $N_2$  đầu ra, mục đích đo sự thay đổi của lưu lượng theo thời gian; CT02-Thiết bị đo nồng độ khí  $N_2$  đầu ra, mục đích đo sự thay đổi nồng độ khí  $N_2$  ở đầu ra của cột theo thời gian; PT-01/06 6 cảm biến đo áp suất lắp đặt theo chiều cao cột (10cm/1 cảm biến), mục đích để đo sự thay đổi áp suất theo chiều cao của cột và theo thời gian. Các cảm biến này được lắp sâu vào tâm cột để đo sự khác biệt (lắp ở sát thành cột sẽ không có sự khác biệt về áp suất); Các van được điều khiển V1, V7 theo cài đặt và các thông số đo được truyền tín hiệu về máy tính PLC S7-1200 và được ghi lại trên máy tính với sự giám sát điều khiển bằng giao diện SCADA được lập trình bằng WinCC V14. Mục đích xây dựng mô hình này để nghiên cứu, kiểm chứng mô phỏng một cột theo phương trình (16).

#### Phương pháp nghiên cứu

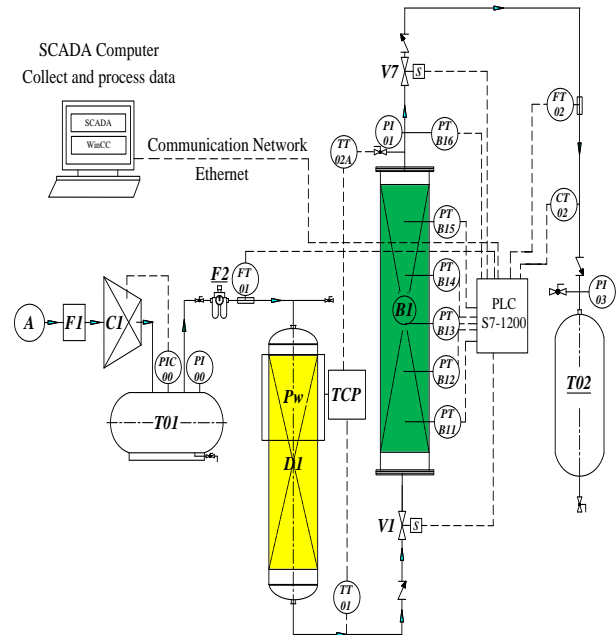
- Sử dụng các kết quả phân tích vật liệu như tỷ trọng đồng, tỷ trọng hạt và tỷ trọng thực để xác định độ xốp tổng  $\epsilon$  của vật liệu CMS-240 [8].

- Sử dụng các kết quả tính toán xây dựng mô hình thiết bị thí nghiệm một cột [5] để xác định các kích thước của cột.

- Sử dụng các công thức lý thuyết [2] để tính toán các

tham số khác của cột như tốc độ u, hệ số khuếch tán dọc trục  $D_L$ . Các tham số khác tra trong tài liệu tham khảo [2].

- Sử dụng thuật toán Euler trên phần mềm MATLAB để giải phương trình vi phân (16) để mô phỏng sự thay đổi của áp suất riêng phần theo thời gian và theo chiều cao của cột ứng với các thông số làm việc của thiết bị và điều kiện đầu, điều kiện biên cho trước ứng với chế độ cài đặt, chạy thử mô hình thiết bị.



Hình 3: Mô hình thiết bị một cột

### Kết quả và thảo luận

#### Kết quả tính toán các tham số của mô hình (16)

Bảng 1.1: Kết quả tính toán các tham số động học ở một số áp suất

TT	Áp suất	P	bar	1	5	8
1	Tốc độ khí đi trong cột	$u_c$	m/s	0,058	0,0194	0,0130
2	Nhiệt độ	T	K	298	298	298
3	Bán kính của mao quản	$R_p$	$10^{-8}$ cm	2	2	2

4	Khối lượng phân tử	M (O <sub>2</sub> )	kg/kmol	32	32	32
5	Hệ số khuếch tán dòng	D <sub>k</sub>	.10 <sup>-6</sup> cm <sup>2</sup> /s	592	592	592
6	Hệ số khuếch tán phân tử	D <sub>AB</sub>	10 <sup>-6</sup> .cm <sup>2</sup> /s	8,6	2,9	1,92
7	Hệ số khuếch tán dọc trục	DL	10 <sup>-6</sup> cm <sup>2</sup> /s	8,5	2,87	1,92
8	Độ xốp của cột	ε	-	0,547	0,547	0,547

**Kết quả nghiên cứu mô phỏng một cột**

Với các tham số của mô hình xác định được ở trên mục 1. Ta có kết quả mô phỏng phương trình (16) với các điều kiện đầu và điều kiện biên:

+ Điều kiện đầu:

$$\text{Áp suất riêng phần tại } x=0, t=0 \text{ là: } p(z, t = 0) = 0 \tag{22}$$

+ Điều kiện biên:

$$z = 0; p(z = 0, t) = \begin{cases} p^d + \frac{D_L}{u_c} \frac{\partial p}{\partial z} \Big|_{z=0,t} & ; 0 \leq t \leq t^c \\ + \frac{D_{ap}}{u_c} \frac{\partial p}{\partial z} \Big|_{z=0,t} & ; t \geq t^c \end{cases} \tag{23}$$

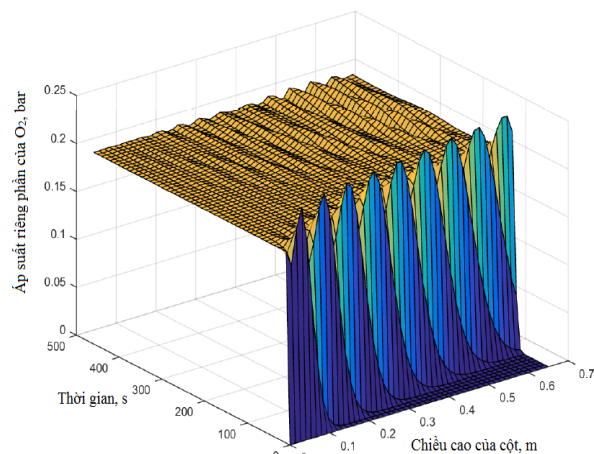
$$z = L; \frac{\partial p_i}{\partial t} \Big|_{z=L} = 0$$

Trong đó t<sup>c</sup> là thời gian của chu kỳ hấp phụ.

Giải phương trình (16) với các điều kiện đầu và điều kiện biên tương ứng với chế độ làm việc của thiết bị, nhập các tham số tìm được vào chương trình MATLAB theo thuật toán OLE ta sẽ tìm được mối quan hệ p<sub>i</sub> = f(z,t) cho ta kết quả sự thay đổi áp suất riêng phần của

chất bị hấp phụ (O<sub>2</sub>) theo thời gian và chiều cao của cột hấp phụ ( Hình không gian 3D).

+ Kết quả mô phỏng cột ở áp suất 1 bar:

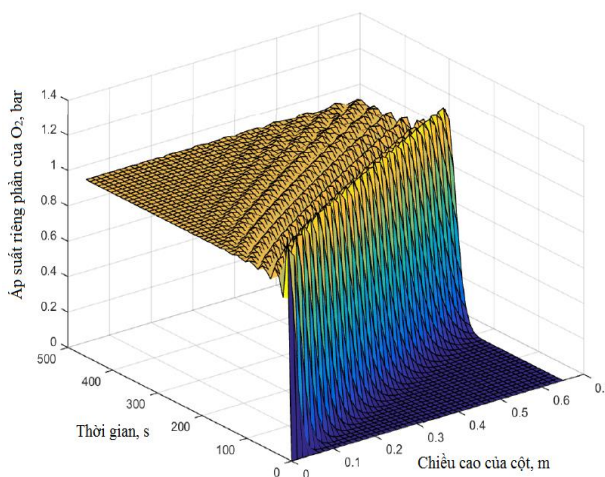


Hình 4: Sự thay đổi áp suất riêng phần của O<sub>2</sub> theo thời gian và theo chiều cao của cột ở áp suất cột 1 bar.

Hình 4 cho thấy trên biểu đồ có nhiều điểm nhọn, góc nghiêng theo thời gian và theo chiều cao cột nhỏ, chứng tỏ áp suất riêng phần của O<sub>2</sub> thay đổi không ổn định, giảm rất ít theo thời gian và theo chiều cao của cột. Điều đó quá trình hấp phụ xảy ra rất ít do bước nhảy tự do của phân tử khí lớn hơn rất nhiều kích thước mao quản.

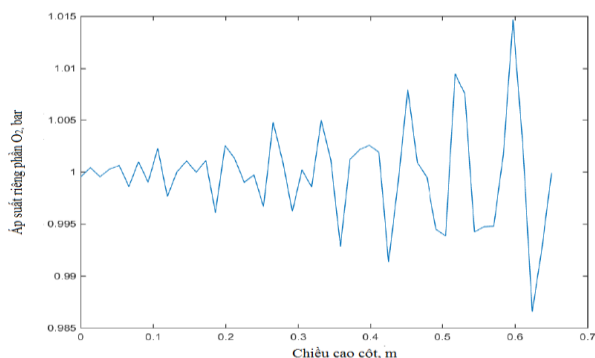
Kết quả mô phỏng từ áp suất tổng 1 bar đến áp suất 5 bar quan sát biểu đồ cho ta thấy độ ổn định tăng dần, góc nghiêng tăng dần theo chiều cao cột.

+ Kết quả mô phỏng cột ở áp suất 5 bar:



Hình 5: Sự thay đổi áp suất riêng phần của O<sub>2</sub> theo thời gian và theo chiều cao của cột ở áp suất cột 5 bar.

Để quan sát rõ sự thay đổi của áp suất riêng phần theo thời gian và theo chiều cao của cột, xem các hình chiếu của nó trên Hình 6, 7 dưới đây:

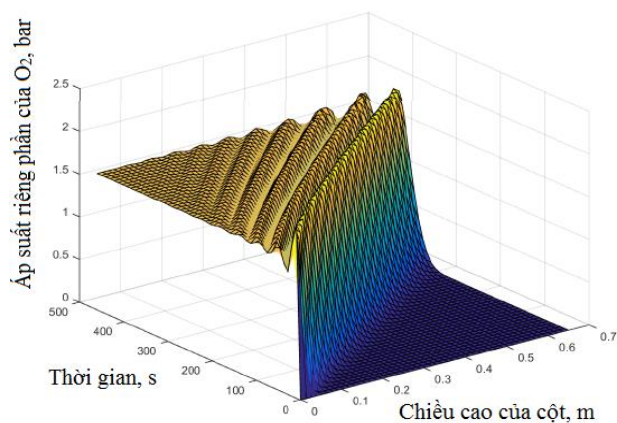


Hình 6: Sự thay đổi áp suất riêng phần của O<sub>2</sub> theo chiều cao của cột ở áp suất cột 5 bar.

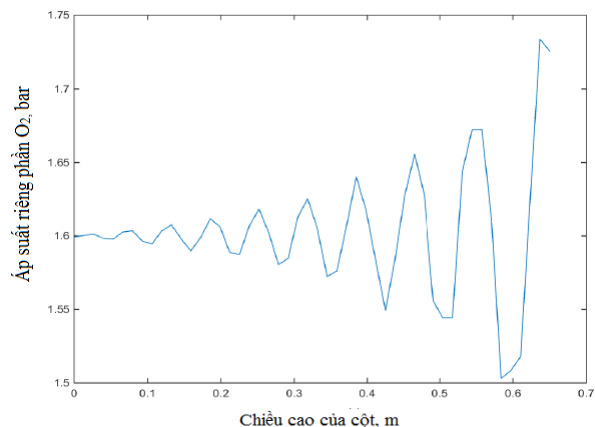
Hình 6 cho thấy áp suất riêng phần của O<sub>2</sub> tại cuối cột (0,65m) là thấp nhất. Cho thấy đây có thể là chế độ mô phỏng tối ưu của cột.

Kết quả mô phỏng tiếp theo từ 5 bar đến 8 bar cho thấy độ ổn định của áp suất riêng phần giảm dần cho thấy sự bão hòa của cột, dẫn đến áp suất riêng phần tại đầu ra của cột (tại z = 0,65 m) tăng.

+ Kết quả mô phỏng cột ở áp suất 8 bar:



Hình 7: Sự thay đổi áp suất riêng phần của O<sub>2</sub> theo thời gian và theo chiều cao của cột ở áp suất cột 8 bar.



Hình 8: Sự thay đổi áp suất riêng phần của O<sub>2</sub> theo chiều cao của cột ở áp suất cột 8 bar.

Hình 7 cho thấy góc nghiêng tăng nhưng độ ổn định lại giảm. Áp suất riêng phần của O<sub>2</sub> tại đầu ra của cột lại tăng cao do sự bão hòa của cột.

Hình 8 cho thấy sự tăng đột biến áp suất riêng phần O<sub>2</sub> tại đầu ra của cột (z=0,65m). Mà có thể thấy điểm tối ưu khác của cột (tại z=0,59 m). Cho thấy áp suất càng cao sự bão hòa xảy ra càng nhanh.

Kết quả mô phỏng này (tối ưu tại 5 bar) gần đúng với kết quả thực nghiệm nghiên cứu một cột ở [8,9] về chế độ làm việc tối ưu của một cột là ở 4,5 bar. Áp suất tối ưu của cột trong thực nghiệm thấp hơn là do trong mô phỏng ta chấp nhận giá trị vận tốc qua cột là không đổi. Nhưng trên thực tế vận tốc qua cột thay đổi theo chiều cao của cột do một lượng khí O<sub>2</sub> bị hấp phụ vào mao quản.

Kết quả mô phỏng cho thấy sự phân bố áp suất riêng phần theo chiều cao cột gần đúng với phân bố áp suất tổng đo được theo chiều cao của cột mà [8,9] đã đưa ra.

## Kết luận

Kết quả nghiên cứu này đã tiếp cận cột hấp phụ sàng phân tử cacbon để tách khí N<sub>2</sub> với một phương diện khác [5,6,7,8,9,10] về mặt động học, một mô hình toán mới được thiết lập so với [3,4] mô tả sự thay đổi áp suất riêng phần theo thời gian và theo chiều cao cột (16) với các giả thiết tốc độ khí qua cột không đổi và động lực quá trình hấp phụ tuyến tính.

Kết quả tính toán các tham số của mô hình cho ta thấy sự tin cậy của lý thuyết tính toán trong [2] điều đó được chỉ rõ trong kết quả mô phỏng.

Kết quả mô phỏng cho biết gần đúng chế độ làm việc tối ưu của cột mà chưa cần phải tiến hành thí nghiệm. Cho thấy phương trình (16) đáng tin cậy để mô phỏng cột hấp phụ.

Từ các kết quả này cho thấy tầm quan trọng của việc tính toán các tham số và việc thiết lập mô hình toán để mô phỏng quá trình làm việc của cột hấp phụ. Đây là một phương pháp nghiên cứu không mới nhưng còn nguyên giá trị cho việc nghiên cứu các quá trình công nghệ hóa học nói chung và quá trình hấp phụ sàng phân tử nói riêng.

Các kết quả nghiên cứu này đã được kiểm chứng bằng thực nghiệm [8,9] với sai số chấp nhận được.

## Lời cảm ơn

Để thực hiện thành công nghiên cứu này tác giả xin trân thành cảm ơn sự giúp đỡ của Viện Công nghệ - Tổng cục Công nghiệp quốc phòng và Bộ môn Máy và thiết bị hóa chất – Viện kỹ thuật Hóa học – Đại học Bách khoa Hà Nội.

### Tài liệu tham khảo

1. Kulkarami, Sunil Jayant (2016), Pressure Swing Adsorption: A Summary on Investigation in Recent Past, International Journal of Research and Review, vol. 3, no. 10, p. 46-49.
2. Douglas M. Ruthven, Shamsuzzanman Farroq, Kent S. Knaebel (1994), Pressure Swing Adsorption, New York: Wiley - VCH Publishers.
3. Ashkan, Mostamand, Masoud, Mofarahi (2011), "Simulation of a Single Bed Pressure Swing Adsorption for Producing Nitrogen," in International Conference on Chemical, Biological and Environment Sciences, Bangkok.
4. Javadi Shokroo Ehsan, Mofarahi Masoud (2014), "Pilot-Scale Experiments for Nitrogen Separation from Air by Pressure Swing Adsorption", South African Journal of Chemical Engineering, vol. 19, no. 2, p 42-56.
5. Phạm Văn Chính, Vũ Đình Tiến (2018), Xây dựng mô hình thiết bị PSA, nghiên cứu, tối ưu hóa chu trình hấp phụ với áp suất thay đổi để tách khí ni tơ từ không khí, Tạp chí Nghiên cứu Khoa học và Công nghệ quân sự, số 56, p. 157-165.
6. Phạm Văn Chính, Vũ Đình Tiến (2018), Thiết kế hệ thống đo lường, và điều khiển để nghiên cứu và tối ưu hóa thiết bị tạo khí ni tơ sử dụng chu trình áp suất thay đổi, Tạp chí Nghiên cứu Khoa học và Công nghệ quân sự, số đặc san 08, p. 269-275.
7. Phạm Văn Chính, Vũ Đình Tiến (2019), Nghiên cứu mô phỏng, tối ưu hóa thiết bị tách khí ni tơ theo chu trình hấp phụ áp suất thay đổi (PSA) bằng phần mềm Aspen Adsorption, Tạp chí Nghiên cứu Khoa học và Công nghệ quân sự, số 61, p.140-149.
8. Phạm Văn Chính, Vũ Đình Tiến (2019), Nghiên cứu quá trình hấp phụ của một cột sử dụng vật liệu hấp phụ sàng phân tử cacbon CMS-240 để tách khí nitơ. Tạp chí Xúc tác Hấp phụ, Volume 8, Issue 2, p107-113.
9. Phạm Văn Chính, Vũ Đình Tiến (2019), Nghiên cứu so sánh và lựa chọn chu trình hấp phụ thay đổi áp suất 4 bước và 6 bước trong thiết bị tạo khí N<sub>2</sub>. Tạp chí Xúc tác Hấp phụ, Volume 8, Issue 3, p25-31.
10. Phạm Văn Chính, Vũ Đình Tiến (2019), Nghiên cứu về vật liệu hấp phụ sàng phân tử cacbon CMS-240 sử dụng trong thiết bị tạo khí N<sub>2</sub>, Tạp chí Nghiên cứu Khoa học và Công nghệ quân sự, số 62, p97-105.