

基于 Aspen Adsorption 的 He/N₂ 变压吸附过程模拟优化

安杰¹, 刘霄¹, 李凌云¹, 吴学谦¹, 林洪南², 范峥^{2*}

(1. 北京迪威尔石油天然气技术开发有限公司, 北京 100083;

2. 西安石油大学化学化工学院, 陕西 西安 710065)

摘要:针对液化天然气蒸发气(BOG)中氦气精制的技术难题,基于 Aspen Adsorption 软件,建立了包含质量、能量和动量守恒方程的多尺度耦合模型的新型变压吸附(PSA)氦气精制工艺。系统地对吸附剂进行对比筛选,继而考察了操作参数对分离性能的影响。在工艺设计方面,拓展性地提出了双塔 PSA 工艺方案,引入均压和真空解吸步骤。结果表明,CMS-5000-A 型碳分子筛的孔径范围及适用条件均符合 N₂/He 分离条件,表现出优异的分选性能,其对 N₂/He 的选择性吸附比达到 87.5:1。当吸附压力控制在 0.3~0.4 MPa 时,氦气回收率可提高 15% 以上;吸附床高度在 1.0~1.1 m 范围内时,既能保证产品纯度 >99.99%,又能使能耗维持在较低水平。使氦气回收率从单塔系统的 84.7% 提升至 89.8%。结合贝叶斯算法优化方法,新工艺能耗较传统深冷法降低 52%~68%。该工艺具有启动时间短、操作弹性大等优势,为工业级氦气提纯提供了可靠的技术方案。

关键词:氦气精制;变压吸附;碳分子筛;Aspen Adsorption;贝叶斯算法

中图分类号:TQ116.4+1;TE645

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2026)05-0204-07

DOI:10.16606/j.cnki.issn0253-4320.2026.05.034

Simulation and optimization of pressure swing adsorption process for He/N₂ using Aspen Adsorption

AN Jie¹, LIU Xiao¹, LI Ling-yun¹, WU Xue-qian¹, LIN Hong-nan², FAN Zheng^{2*}

(1. DWELL Co., Ltd., Beijing 100083, China; 2. College of Chemistry and Chemical Engineering,

Xi'an Shiyou University, Xi'an 710065, China)

Abstract:To address the technical challenges of helium purification from liquefied natural gas boil-off gas (BOG), a novel pressure swing adsorption (PSA) helium refining process was developed based on Aspen Adsorption software, incorporating a multi-scale coupled model that includes mass, energy, and momentum conservation equations. A systematic comparison and screening of adsorbents were conducted, followed by an investigation of the impact of operational parameters on separation performance. In terms of process design, an innovative dual-tower PSA process was proposed, incorporating pressure equalization and vacuum desorption steps. The results demonstrate that the CMS-5000-A carbon molecular sieve exhibits excellent separation performance, with its pore size range and operating conditions well-suited for N₂/He separation, achieving a remarkable selectivity ratio of 87.5:1 for N₂/He. When the adsorption pressure is maintained between 0.3–0.4 MPa, helium recovery rate increases by over 15%. With an adsorption bed height of 1.0–1.1 m, the product purity >99.99% while maintaining low energy consumption. The dual-tower PSA process improves helium recovery from 84.7% in a single-tower system to 89.8%. Combined with Bayesian algorithm optimization, the new process reduces energy consumption by 52%–68% compared to traditional cryogenic methods. This process offers advantages such as short startup time and large operational flexibility, providing a reliable technical solution for industrial-scale helium purification.

Key words: helium purification; pressure swing adsorption (PSA); carbon molecular sieve (CMS); Aspen Adsorption; bayesian algorithm

氦气作为战略性资源,在航天、医疗、电子等领域具有不可替代的作用。目前,工业上主要从含氦天然气中提取氦气,精制工艺包括低温冷凝法、膜分离法和变压吸附法(PSA)等^[1]。其中,低温冷凝法适用于高纯度、大规模生产,但能耗高且设备复杂;膜分离法设备简单、维护方便,但产品纯度与回收率相互制约,且膜材料易老化。而 PSA 技术因能耗低、产品纯度高、自动化程度高,成为粗氦提纯的关

键工艺,但回收率(65%~95%)和纯度(>99.95%)受吸附剂性能、压力时序及温度波动等因素制约^[2]。现有研究多聚焦于吸附剂开发(如分子筛、MOFs)和工艺改进(如多级 PSA、变温吸附耦合),但针对动态参数优化的系统性研究较少^[3]。此外,传统实验方法面临着经济成本和时间成本双重压力,而数值模拟工具(如 Aspen Adsorption)可通过非等温模型精准预测浓度场和传质行为,为工艺优化

收稿日期:2025-07-02;修回日期:2026-03-12

基金项目:国家自然科学基金项目(22308277);中国国家留学基金项目(201908610135)

作者简介:安杰(1990-),男,学士,高级工程师,研究方向为油气储运工程,010-82778722,anjie.cpe@cnpc.com.cn;范峥(1982-),男,博士,教授,研究方向为化学工程与技术,通讯联系人,fanzheng@xsyu.edu.cn。

提供新思路^[4-5]。例如,在天然气提氦技术领域,王金波团队^[6]基于 HYSYS 平台开发了低温精馏工艺模型,模拟结果显示该工艺可获得 99.2% 的氦气回收率和 99.95% 的粗氦纯度;在 BOG 提氦领域,张丽萍等^[7]集成深冷、膜分离和 PSA 的混合工艺展现出良好的应用前景,流程模拟结果显示,该组合工艺在产物纯度和能耗效率等关键指标上均优于传统的两级膜分离方案;卜令兵等^[8]通过对五床 PSA 提氦过程进行了数值模拟研究,结果表明,在原料气组成为氢气(84.5%)、氮气(13.79%)和甲烷(1.71%)的条件下,产品氢气纯度达到 99.999% 时,计算氢气的回收率为 81%,该回收率与相同工况的工业装置运行数据一致,验证了模拟方法的可靠性;刘本旭等^[9]利用 Aspen Adsorption 模拟氯化氢脱水,证明了该软件在吸附过程动态分析中的有效性;Vysyaraju 等^[10]提出了一种利用 5A 沸石通过五步变压吸附(PSA)工艺从 He/N₂ 混合气体中提纯氦气的方法。

传统 PSA 工艺在氦气回收率和纯度提升方面仍存在瓶颈,现有研究多聚焦于实验探索或单一工艺模拟且缺乏对复杂工况下工艺参数的动态优化。

本研究创新性结合贝叶斯优化算法与 Aspen Adsorption 动态模拟,突破传统试错法局限,为氦气精制提供数据驱动优化方案。基于多尺度耦合模型开展变压吸附动态模拟,通过控制变量法探究进料流量、温度、压力及吸附床、吸附剂等参数对穿透时间的影响,对比单塔与双塔工艺及模拟结果,直观呈现双塔系统的优化效果。结合贝叶斯多参数协同优化,在降低能耗的同时将氦纯度提升至 99.99% 以上,形成适用于贫氦气源(BOG)的低碳工艺方案,助力我国氦资源自主供应。

1 变压吸附精制氦气工艺过程模拟

1.1 变压吸附精制氦气工艺方法选择

自 1960 年代 Skarstrom 开发 PSA 以来,已广泛用于气体分离和纯化^[11]。Stoner 等^[12]建议采用混合膜-PSA 装置获取粗氦及高纯度氦,PSA 也已成为掺氢天然气中氢气分离提纯的核心技术^[13]。氦气精制工艺选择需综合原料气组成、产品纯度及经济性等因素。本研究针对 LNG-BOG 经膜分离提浓、催化脱氢后得到的 He/N₂ 混合气(图 1),采用 Aspen Adsorption 建立动态模拟,对比低温冷凝法、膜分离法与 PSA 的优缺点后,选定 PSA 作为核心工艺^[14]。其优势在于:①常温操作能耗较深冷法降低 60% 以上;②模块化设计适配分布式小型 LNG-BOG

站;③通过吸附剂筛选和参数优化可突破传统 PSA 的氦气回收率限制。

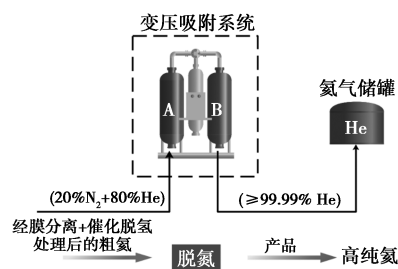


图 1 变压吸附精制氦气工艺示意图

1.2 数学模型构建

精确的数学模型是 PSA 精制氦气工艺优化的重要理论基础。本研究建立了包含质量守恒、能量守恒、动量守恒、吸附动力学及理想气体状态的多尺度耦合模型,包含如下控制方程。

(1) 质量守恒方程

根据质量守恒定律,变压吸附装置中气体组分的分布规律可表述为:

$$\partial y_i / \partial t + (RT/p)\rho_p [(1 - \varepsilon_b) / \varepsilon_b] [\partial q_i / \partial t - y_i \sum_{j=1}^N (\partial q_j / \partial t)] + U_z (\partial y_i / \partial z) - D_{ax} (\partial^2 y_i / \partial z^2) = 0, i = 1, \dots, N \quad (1)$$

式中, y_i 为第 i 组分气体的摩尔分数; t 为时间变量, s; R 为气体常数, J/(mol·K); T 为吸附床温度, K; p 为气体总压力, MPa; ρ_p 为吸附剂颗粒密度, g/cm³; ε_b 为吸附床孔隙率; q_i 为第 i 组分气体动态吸附量, mol/g; N 为气体组分的总数; U_z 为气体在吸附床轴向的表观流速, cm/s; z 为吸附床的轴向坐标; D_{ax} 为轴向质量扩散系数, cm²/s。

(2) 能量守恒方程

多组分气体在多孔介质内的吸附过程遵循能量守恒定律,给出吸附床内气相和固相能量方程:

$$[\varepsilon_b c_g C_{pg} + (1 - \varepsilon_b) \rho_p c_{ps}] (\partial T_a / \partial t) = -\varepsilon_b c_g C_{pg} U_z (\partial T_a / \partial z) + K_z (\partial^2 T_a / \partial z^2) + (1 - \varepsilon_b) \rho_p \sum_{i=1}^N [\Delta H_i (\partial q_i / \partial t)] + (2h_{in} / R_{in}) (T_w - T_a) \quad (2)$$

式中, c_g 为混合气体摩尔浓度, mol/cm³; C_{pg} 为混合气体摩尔比热容, J/(mol·K); c_{ps} 为吸附剂质量比热容, J/(g·K); T_a 为气相温度, K; K_z 为轴向热传导系数; ΔH_i 为组分气体在吸附剂中的吸附热, kJ/mol; h_{in} 为吸附床与床壁的换热系数, W/(m²·K); R_{in} 为吸附床半径, T_w 为吸附床壁面温度 K⁻¹。

(3) 动量守恒方程

基于多孔介质流动理论,吸附床内多元气体体系的动量守恒可由 Ergun 方程定量描述:

$$- dp/dz = [150(1 - \varepsilon_b)^2 / (4R_p^2 \varepsilon_b^3)] \mu V_z + [1.75(1 - \varepsilon_b) / (2R_p \varepsilon_b^3)] \rho_g V_z^2 \quad (3)$$

式中, R_p 为吸附剂颗粒半径, cm; μ 为多组分气体的黏度, Pa·s; V_z 为轴向的真实流速, cm/s, $V_z = U_z \varepsilon_b$; ρ_g 为质量浓度, g/cm³。

(4) 吸附动力学方程

气体在吸附剂颗粒表面的吸附动力学行为可采用线性驱动力(LDF)模型表征^[15]:

$$\partial q_i / \partial t = \omega_i (q_i^* - q_i), i = 1, \dots, N \quad (4)$$

式中, ω_i 为第 i 组分气体的质量传递系数, s⁻¹; q_i^* 为第 i 组分的平衡吸附量, mol/g。

(5) 理想气体状态方程

基于理想气体状态方程, 建立了气体组分浓度、混合气体总浓度及其比热容的计算方法。

$$c_i = n_i / V = p_i / RT = y_i p / RT, i = 1, \dots, N; c = \sum_{i=1}^N c_i \quad (5)$$

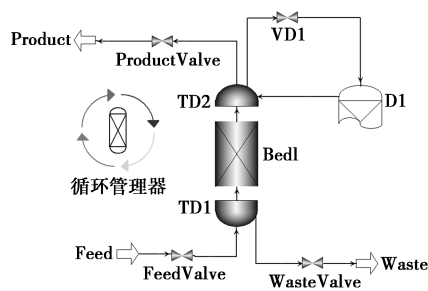
$$C_{pg} = \sum_{i=1}^N y_i C_{pi} \quad (6)$$

式中, c_i 为组分 i 的气相摩尔浓度, mol/cm³; n_i 为组分 i 的物质的量, mol; V 为气体混合物的总体积, cm³; p_i 为组分 i 的分压; c 为气体混合物的总摩尔浓度, mol/cm³; C_{pi} 为组分 i 的摩尔比热容, J/(mol·K)。

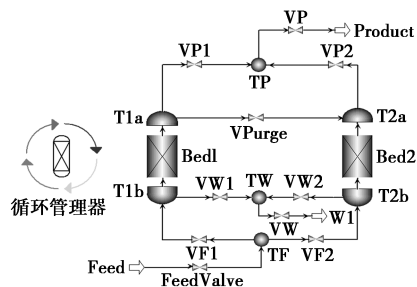
1.3 模拟流程搭建

本文中利用 Aspen Adsorption 建立对 LNG 生产过程中的 BOG 进行氦气精制的模拟流程。

单塔变压吸附精制氦气工艺模拟流程图见图 2(a), 双塔变压吸附精制氦气工艺模拟流程图见图 2(b)。



(a) 单塔变压吸附精制氦气工艺



(b) 双塔变压吸附精制氦气工艺

Bed1—吸附床; Bed2—解吸床; D1—虚拟吸附床

图 2 变压吸附精制氦气工艺模拟流程

如图 2(a) 所示, 单塔 PSA 工艺通过吸附(AD)、降压(BD)、解吸(DR)、升压(FR) 4 步循环提纯氦气: 0.3 MPa 下原料气从塔底进入, CMS-5000-A 吸附氦气, 塔顶采出 99.99% 高纯氦气; 循环周期 110 s(吸附占 45%), 压力在 0.3-0.1-0.3 MPa 周期性变化, 但存在 ±0.005% 纯度波动, 处理能力有限。

如图 2(b) 所示, 双塔 PSA 工艺优化为 6 步循环(AD-ED-BD-VU-ER-FR), 两塔协同实现连续生产: 均压步骤(ED)使能耗降低 22%, 吸附时间延长至 60 s, 新增 0.03 MPa 真空解吸(VU), 氦回收率提升至 89.8%; 16 个阀门精准切换, 纯度波动缩小至 ±0.002%, 压力控制精度 ±0.005 MPa, 适配 20~100 m³/h 中等规模装置, 在吸附剂利用率、能耗及稳定性上优于单塔。

1.4 单双塔模拟效果对比

本研究通过工艺模拟对比, 分析了单塔与双塔 PSA 系统的氦气提纯差异(表 1)。对比操作参数及纯度、回收率、能耗等指标后发现, 双塔系统优势显著: 氦气回收率较单塔提升 5.06%, 单位能耗降低 14.3%; 在保持氦纯度 >99.99% 的前提下, 更适配 20~100 m³/h 中等规模工业化生产, 为装置选型提供了重要技术参考。

表 1 单双塔模拟效果对比表

对比指标	单塔 PSA 系统	双塔 PSA 系统	性能提升幅度
操作步骤	吸附-降压-解吸-升压	吸附-均压-降-逆放-真空解吸-均压-升-升压	增加能量回收步骤
循环周期时间/s	110	230	+109%
吸附压力/MPa	0.3	0.3	
解吸压力/MPa	0.1	0.03(真空辅助)	-70%
氦气纯度/%	≥99.99	≥99.99	持平
氦气回收率/%	84.74	89.8	+5.06
单位能耗/(kWh·m ⁻³)	0.42	0.36	-14.3%
吸附剂利用率/%	61.2	78.5	+17.3
阀门数量/个	8	16	+100%
处理规模适应性	<20 m ³ /h	20~100 m ³ /h	提升规模上限

2 He/N₂ 变压吸附过程模拟参数优化

2.1 参数优化模拟实验

穿透曲线分析是关键研究方法, 连接单组分吸

附平衡表征与动力学研究^[16]。工业 PSA 中,可反映吸附质初始穿透时间、总处理时长等关键参数,且曲线斜率与吸附速率正相关,是表征吸附动力学的有效手段^[17],为固定床吸附器工艺设计提供重要依据。

建立填料塔 N₂-He 混合气吸附分离数学模型,设定床层结构及基础物性参数后开展系统模拟;为探究进料流量、温度、压力及吸附床等参数对 N₂ 穿透时间的影响,采用图 3 所示吸附床模型进行研究。

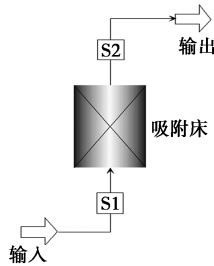


图 3 吸附床模拟图

初始进料参数:温度为 298.15 K,压力为 0.3 MPa,流量为 0.001 67 kmol/s。气体组成为 80% 的氦气(He)和 20% 的氮气(N₂)。吸附床及吸附剂的主要参数列于表 2 中。

表 2 吸附床及吸附剂主要参数一览表

参数名称及单位	数值
固体吸附剂	CMS-5000-A 碳分子筛
吸附剂装填高度(H_b)/m	1
吸附塔内径(D_b)/cm	3.5
吸附床孔隙率(E_i)/(m ³ ·m ⁻³)	0.3
吸附剂孔隙率(E_p)/(m ³ ·m ⁻³)	0.7
吸附剂堆积密度(RHOs)/(kg·m ⁻³)	650
吸附剂颗粒大小(R_p)/mm	0.7
吸附剂球型系数(SFac)/(n·a ⁻¹)	1.0
He 传质系数(MTC)/S ⁻¹	1
N ₂ 传质系数(MTC)/S ⁻¹	1

图 4(a)为进料流量对 N₂ 穿透曲线的影响,保持其他参数不变,进料流量设为 5.012、6.012、7.012、8.012 kmol/h。流量越大,气体在吸附床停留时间越长,N₂ 吸附越充分,分离效率越高,但过高流量会增大床层压降、增加能耗。

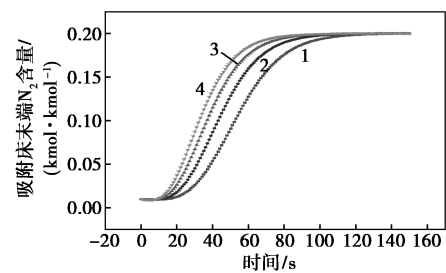
图 4(b)考察了床层孔隙率(E_i)(0.2~0.9)对氮气穿透行为的影响,结果表明,孔隙率增大则流动阻力减小、吸附接触时间缩短,穿透时间提前; $E_i > 0.4$ 会显著降低吸附效率,综合考虑,最优孔隙率为 0.2~0.4。

图 4(c)考察了吸附剂堆积密度(RHOs)在 450~700 kg/m³ 范围内对氮气吸附性能的影响。堆积密度越高,N₂ 穿透时间越长,有效吸附位点越多;超过 650 kg/m³ 后曲线斜率趋于平缓,说明此时吸附过程接近完全。结合实际工业应用的经济性和可行性,最优范围为 650~700 kg/m³,可避免压降过大。

图 4(d)研究了进料压力(0.2~0.5 MPa)对吸附性能的影响,压力升高可延长 N₂ 穿透时间,0.3~0.5 MPa 内呈线性增长;结合能耗与设备要求,推荐采用 0.3~0.5 MPa 中低压操作。

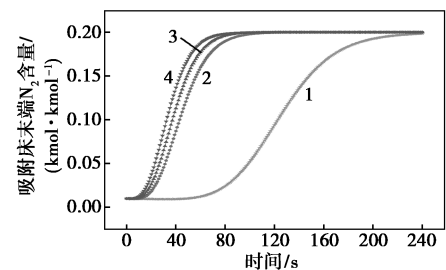
图 4(e)中,在保持其他操作参数不变的条件下,系统考察了 H_b 分别为 0.8、1.0、1.2 m 时的穿透曲线演变特征。高度越高,N₂ 穿透时间越晚,归因于吸附剂装填量增加、气固接触时间延长及浓度梯度优化;过高床层会增加成本和压降,小试建议吸附床高度设定为 0.8~1.2 m。

图 4(f)为进料温度对 N₂ 穿透曲线的影响,进



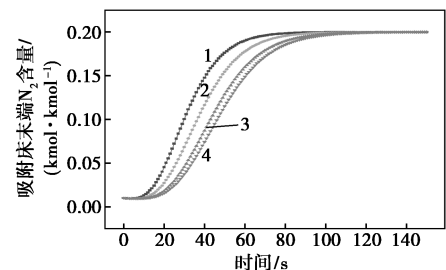
1—5.012 kmol/h; 2—6.012 kmol/h; 3—7.012 kmol/h;
4—8.012 kmol/h

(a) 进料流量对穿透曲线的影响



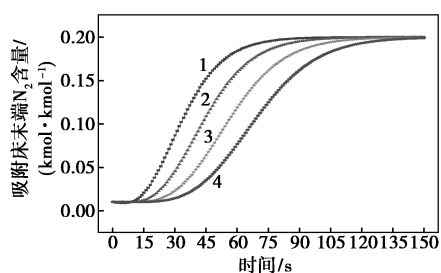
1— $E_i = 0.2$; 2— $E_i = 0.3$; 3— $E_i = 0.5$; 4— $E_i = 0.9$

(b) 床层孔隙率对穿透曲线的影响

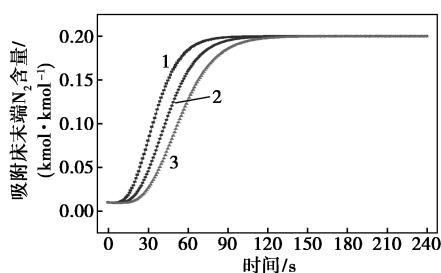


1—RHOs = 450 kg/m³; 2—RHOs = 550 kg/m³;
3—RHOs = 650 kg/m³; 4—RHOs = 700 kg/m³

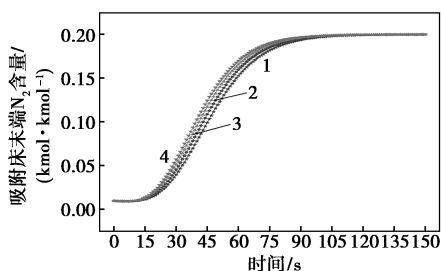
(c) 吸附剂堆积密度对穿透曲线的影响



1—0.2 MPa; 2—0.3 MPa; 3—0.4 MPa; 4—0.5 MPa
(d) 进料压力对穿透曲线的影响



1— $H_b = 0.8$ m; 2— $H_b = 1.0$ m; 3— $H_b = 1.2$ m
(e) 吸附剂用量对穿透曲线的影响



1—278.15 K; 2—298.15 K; 3—318.15 K; 4—338.15 K
(f) 进料温度对穿透曲线的影响

图 4 不同工艺参数对 N_2 在吸附床中的穿透曲线的影响

料温度设为 278.15、298.15、318.15、338.15 K, 吸附为放热过程, 降温可提高 N_2 吸附容量^[18], 综合能耗与操作便利性, 推荐常温 25℃ (298.15 K) 操作。以上参数优化为工艺设计提供重要依据。

2.2 基于贝叶斯优化的多参数协同优化研究

基于 6 组单因素实验结果, 针对氦气精制工艺多参数耦合的复杂性, 本研究采用贝叶斯优化 (BO)

算法^[19-20], 协同优化进料流量、床层孔隙率等 6 个关键工艺参数。基于高斯过程 (GP) 代理模型^[21], 建立多目标优化框架: ①优化目标, 最大化 N_2 穿透时间 (t_b)、最小化穿透曲线斜率 (k) 及单位能耗 (E); ②约束条件, 氦纯度 $\geq 99.99\%$ 、床层压降 ≤ 0.05 MPa/m; ③结合单因素实验结果构建 BO 模型。

(1) 参数空间定义

参数空间定义见表 3。

表 3 参数空间定义表

参数	符号	范围
进料流量/($\text{kmol} \cdot \text{h}^{-1}$)	F	5.0~8.0
床层孔隙率	ε	0.2~0.4
堆积密度/($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	ρ	600~750
进料压力/MPa	P	0.2~0.5
床层高度/m	H	0.8~1.2
进料温度/K	T	278~318

(2) 采用各向异性 Matérn 5/2 核函数:

$$k(x_i, x_j) = \sigma^2 \prod_{d=1}^6 [1 + (\sqrt{5} |x_i^d - x_j^d|) / \rho_d + 5(x_i^d - x_j^d)^2 / 3\rho_d^2] \exp[-(\sqrt{5} |x_i^d - x_j^d|) / \rho_d] \quad (7)$$

式中, k 为输入点 x_i, x_j 之间的协方差 (核函数值); x_i 和 x_j 为输入空间中的点; σ^2 为信号的方差 (核函数的幅值参数); x_i^d 和 x_j^d 为在第 d 维的分量; d 为维度索引; ρ_d 为各参数的长度尺度。

(3) 多目标采集函数

采用改进的 EHVI (expected hypervolume improvement) 准则:

$$\alpha_{\text{EHVI}}(x) = \int_{R^3} HV[f(x)] \cdot p(f | x, D) df \quad (8)$$

式中, HV 为超体积指标。

(4) 通过最优拉丁超立方设计生成 30 组初始参数组合, 再利用 Aspen Adsorption 进行动态模拟, 获取穿透曲线特征数据。前 6 组参数组合及模拟结果如表 4 所示。

表 4 前 6 组参数组合模拟结果表

序号	P/MPa	T/K	H/m	$F/(\text{kmol} \cdot \text{h}^{-1})$	ε	$\rho/(\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	t_b/s	$k/(\% \cdot \text{s}^{-1})$	$E/(\text{kWh} \cdot \text{m}^{-3})$
1	0.321	295.6	0.92	6.34	0.28	632	187	0.16	0.38
2	0.478	302.3	1.15	5.67	0.35	698	203	0.14	0.42
3	0.245	285.1	1.08	7.82	0.22	615	165	0.21	0.35
4	0.389	310.2	0.85	6.95	0.31	725	178	0.18	0.39
5	0.297	292.7	1.12	5.23	0.26	658	194	0.15	0.37
6	0.412	299.4	0.96	7.41	0.38	687	212	0.12	0.45

(5) 进行主动学习循环步骤及内容见表 5。

表 5 主动学习循环步骤表

序号	步骤	内容
1	代理模型训练	最大化边缘似然估计核超参数
2	候选点评估	计算 5000 个 Sobol 点的 EHVI 值
3	新实验选择	选取 EHVI 值最高的 3 组参数进行模拟
4	终止条件	当超体积改进率连续 5 次 < 1% 时停止

(6) 在 30 组初始参数组合中筛选出 Pareto 最优解, 标记为 1, 其余标记为 0, 在多目标优化中, 判断一个解 x^* 被称为 Pareto 最优解^[22-23], 当且仅当:

$$\delta x \in X \quad \text{s. t.} \quad \left\{ \begin{array}{l} t_b(x) \geq t_b(x^*) \\ k(x) \leq k(x^*) \\ E(x) \leq E(x^*) \\ \text{且至少 1 个不等式严格成立} \end{array} \right. \quad (9)$$

标记结果为 1 的参数组合, 即为 Pareto 最优解全集, 为了保留原始数据分布规律并消除量纲对数据分析的影响, 将数据统一进行归一化处理记为

x_{norm}^*

(7) 优化结果分析

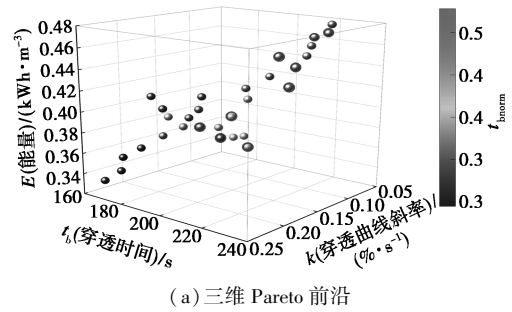
图 5 为贝叶斯优化分析图, 通过系统地分析三维 Pareto 前沿图、平行坐标图以及动态优化进程图, 展现了氦气精制工艺的多目标优化规律与动态特性, 形成了一套完整的“结构-过程-性能”关联体系。

三维 Pareto 前沿图 5(a) 显示, t_b (160~230 s) 与 E (0.32~0.48 kWh/m³) 存在显著正相关, 而 k 值每降低 0.01%/s 需增加约 7% 能耗。高压区 (0.42±0.03 MPa) 虽实现 $t_{b,max} = 228$ s, 但能耗达 0.47±0.03 kWh/m³, 印证了“纯度-能耗”的基本矛盾。

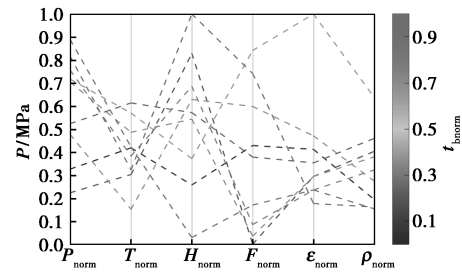
平行坐标图 5(b) 中每条彩色折线代表一个候选解, 揭示了 PSA 系统中关键操作参数与吸附剂物性的交互作用, 定量解析了最优解的六维特征: 高压解簇为, $P > 0.4$ MPa, $H = 1.1 \pm 0.1$ m, $\varepsilon = 0.28 \pm 0.03$; 高效解簇为, $F = 6.2 \pm 0.5$ kmol/h, $\rho = 680 \pm 20$ kg/m³。提出优化建议: 优先优化高压 (P) 和床高 (H) 以提升穿透时间, 但需监控能耗; 床层孔隙率 (ε) 和堆积

密度 (ρ) 可设为次要变量; 进料流量 (F) 与进料压力 (P) 的权衡需通过经济性分析确定最优解。

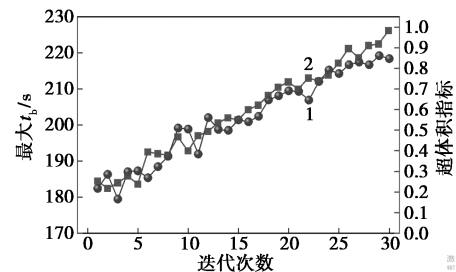
图 5(c) 动态进程图显示, t_b 随迭代次数增加而延长, 说明优化算法可提升吸附床利用率 (超体积指标反映解集综合性能); 两者在 20~30 次迭代后趋于平缓, 表明优化已逼近 PSA 系统最优操作区。



(a) 三维 Pareto 前沿



(b) 平行坐标



1—最大 t_b ; 2—超体积指标

(c) 动态进程

图 5 贝叶斯优化分析

基于三图联动的参数敏感性排序为: $P > \varepsilon \approx H > \rho > F > T$ 。

根据优化结果给出工业实施参数参考方案见表 6。

表 6 工业实施参数参考方案表

方案	核心参数组合	六参数协同机制	验证指标
超高纯模式	$P = 0.43$ MPa; $\varepsilon = 0.24$; $H = 1.15$ m	高压提升传质速率, 低 ε 延长停留时间, 高 H 补偿压降	$t_b = 228$ s; $k = 0.055\%/s$
节能模式	$P = 0.32$ MPa; $\varepsilon = 0.31$; $\rho = 620$ kg/m ³	中压降低能耗, 较高 ε 提升通量, 低 ρ 减少流动阻力	$E = 0.30$ kWh/m ³ ; $k = 0.085\%/s$
动态调节	$P = 0.38 \pm 0.04$ MPa; $F = 6.5 \pm 1$ kmol/h	压力-流量解耦控制: 原料 $He > 25\%$ 时 $P \downarrow + F \uparrow$, $He < 15\%$ 时 $P \uparrow + F \downarrow$	日均波动 $\pm 5\%$
抗扰动方案	$T = 300 \pm 5$ K; $H = 1.05$ m; $\rho = 650 \pm 10$ kg/m ³	温度-密度补偿: $T \uparrow$ 时 $\rho \downarrow$ 维持吸附容量, H 恒定确保流场稳定	$CV(t_b) < 3\%$

Pareto 前沿界定性能边界, 平行坐标解码参数关联, 动态进程揭示演化规律。结果表明, 将吸附压力控制在 0.35~0.4 MPa 动态区间, 配合 1.0~1.1 m 床层高度, 可在保证 $\geq 99.99\%$ 纯度的同时, 较传统低温冷凝法降低了 52%~68% 能耗。该成果为吸附分离工艺的优化提供了可量化的设计范式。

3 结论

设计并构建了基于 Aspen Adsorption 软件的 He/N₂ 变压吸附过程模拟优化研究, 得出如下结论。

(1) 利用 Aspen Adsorption 软件, 基于质量、能量、动量守恒、吸附动力学及理想气体状态的多尺度耦合模型, 完成变压吸附过程动态模拟实验。

(2) 对比单塔与双塔 PSA 工艺模拟结果发现, 双塔系统通过优化操作步骤、压力条件及循环周期, 优势显著: 氮气回收率提升 5.06%, 单位产品能耗降低 14.3%, 得益于压力能回收机制和时序控制优化, 在保证氮纯度 $> 99.99\%$ 的同时提升了工艺经济性。

(3) 单因素模拟实验表明, 最优流量 6.0~7.0 kmol/h (平衡分离效率与能耗); 最优孔隙率 0.2~0.4 (平衡通量与分离效率); 推荐吸附剂堆积密度 650~700 kg/m³ (提高利用率); 较优操作压力 0.3~0.5 MPa (中低压, 平衡能耗与效果); 建议床高 0.8~1.2 m (平衡分离效率与设备成本); 推荐基准温度 25℃ (298.15 K, 经济实用)。

(4) 贝叶斯多参数协同优化显示, 吸附压力控制在 0.35~0.4 MPa、床层高度 1.0~1.1 m 时, 可保证氮纯度 $\geq 99.99\%$, 较传统低温冷凝法降低 52%~68% 能耗, 为工艺优化提供可量化设计范式。

参考文献

- [1] 陈兵, 任金平, 孟国亮, 等. LNG 蒸发气中氮气提取技术及应用[J]. 石油化工设计, 2023, 40(1): 6-9.
- [2] 周起忠, 闫卫东, 胡容波, 等. 全球氮气供需形势分析与展望[J]. 中国矿业, 2025, 34(2): 493-502.
- [3] 肖永厚, 肖红岩, 李本源, 等. 基于 Aspen Adsorption 的氮气/甲烷吸附分离过程模拟优化[J]. 化工学报, 2019, 70(7): 2556-2563.
- [4] Li D, Zhou Y, Shen Y, et al. Experiment and simulation for separating CO₂/N₂ by dual-reflux pressure swing adsorption process[J]. Chemical Engineering Journal, 2016, 297: 315-324.
- [5] 王鹏, 刘京雷, 张胜中, 等. 结构化 5A 分子筛吸附床结构及工艺参数对 N₂/H₂ 吸附性能的影响[J]. 化工学报, 2020, 71(7): 3114-3122.
- [6] 王金波, 白宸瑞, 宋晓娟, 等. 新型天然气提氮工艺模拟与分析[J]. 石油与天然气化工, 2023, 52(1): 58-68.
- [7] 张丽萍, 巨永林. 基于深冷—膜分离的天然气蒸发气联合提氮流程模拟与效果对比[J]. 天然气工业, 2023, 43(8): 170-182.
- [8] 卜令兵, 伍毅, 殷文华, 等. 变压吸附提氮过程数值模拟研究[J]. 石油与天然气化工, 2017, 46(2): 27-30.
- [9] 刘本旭, 宋宝东. 用 Aspen Adsorption 模拟氯化氢脱水[J]. 化学工业与工程, 2012, 29(2): 58-62.
- [10] Vysyaraju R, Sawada J A, Perez L E, et al. Simulation and experimental demonstration of helium purification from He/N₂ mixtures by pressure swing adsorption[J]. Chemical Engineering Journal, 2024, 499: 155929.
- [11] Skarstrom C W. Method and apparatus for fractionating gaseous mixtures by adsorption: US 2944627[P]. 1960-07-12.
- [12] Stoner G, Reingold III H E, D'amico J S, et al. Enhanced helium recovery: US 5632803[P]. 1997-05-27.
- [13] 刘其武, 高卓然, 胡亚琼, 等. 掺氢天然气的氢气分离提纯技术浅析[J]. 应用化工, 2024, 53(9): 2211-2214, 2220.
- [14] 李均方, 张瑞春, 何伟. 变压吸附在粗氮纯化工艺中的流程优化研究[J]. 石油与天然气化工, 2022, 51(3): 47-55.
- [15] 孙康. 基于神经网络的多层床变压吸附氮气纯化性能的优化[D]. 武汉: 武汉理工大学, 2022.
- [16] Abd A A, Othman M R, Helwani Z. Evaluation of thermal effects on carbon dioxide breakthrough curve for biogas upgrading using pressure swing adsorption[J]. Energy Conversion and Management, 2021, 247: 114752.
- [17] 张妍, 李洪峻, 董志明, 等. Aspen Adsorption 在气体吸附过程模拟方面的应用[J]. 化学工业与工程, 2024, 41(2): 86-93.
- [18] 孙琳, 刘志雄, 罗文波, 等. Mn₃O₄@SiO₂ 核壳磁性复合材料对钼(VI)的吸附性能[J]. 精细化工, 2019, 36(8): 1677-1683.
- [19] 高虹雷, 门昌骞, 王文剑. 多核贝叶斯优化的模型决策树算法[J]. 国防科技大学学报, 2022, 44(3): 67-76.
- [20] 黄晓芙. 基于贝叶斯优化的成矿动力学数值模型参数校正及条件推断[D]. 长沙: 中南大学, 2022.
- [21] 张晶, 裴东兴, 马瑾, 等. 基于代理模型估值不确定度的昂贵多目标优化问题研究[J]. 石河子大学学报: 自然科学版, 2024, 42(1): 110-116.
- [22] 朱博文, 龚懿, 陈再扬, 等. 基于 Pareto 最优解的跨流域调水泵站多目标优化运行研究[J]. 灌溉排水学报, 2022, 41(2): 131-139.
- [23] 朱博文. 基于 Pareto 最优解的调水泵站多目标优化运行方法研究[D]. 扬州: 扬州大学, 2023. ■