ห้องสมุดงานวิจัย สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ
E46967

SIMULATION AND COMPARISON OF ENERGY CONSUMPTION FOR AIR SEPARATION TECHNOLOGIES

MISS ARUNSIRI THIPPARUEK

A SPECIAL RESEARCH PROJECT SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENTS FOR
THE DEGREE OF MASTER OF ENGINEERING (CHEMICAL ENGINEERING)
FACULTY OF ENGINEERING
KING MONGKUT'S UNIVERSITY OF TECHNOLOGY THONBURI
2010

b002466333

ห้องสมุดงานวิจัย สำนักงานคณะกรรมการวิจัยแห่งชาติ
E46967

Simulation and Comparison of Energy Consumption for Air Separation Technologies

Miss Arunsiri Thipparuek B.Eng. (Chemical Engineering)

THE NATIONAL RESEARCH COUNCIL OF THAILAND RESEARCH LIBRARY

A Special Research Project Submitted in Partial Fulfillment
of the Requirements for
the Degree of Master of Engineering (Chemical Engineering)
Faculty of Engineering
King Mongkut's University of Technology Thonburi
2010

Special Research Project Committee

..... (Assoc. Prof. Thongchai Srinophakun, Ph.D.)	Chairman of Special Research Project Committee
..... (Lect. Hong-ming Ku, Ph.D)	Member and Special Research Project Advisor
..... (Asst. Prof. Kwanchanok Pasuwat, Ph.D.)	Member

Copyright reserved

Special Research Project Title	Simulation and Comparison of Energy Consumption for Air Separation Technologies
Special Research Project Credits	6
Candidate	Miss Arunsiri Thipparuek
Special Research Project Advisor	Dr.Hong-ming Ku
Program	Master of Engineering
Field of Study	Chemical Engineering
Department	Chemical Engineering
Faculty	Engineering
B.E.	2553

E46967

Abstract

Air separation technologies have been developed for supplying high purity of oxygen which is a major part of the capital cost and operating cost of power plants and industrial processes using oxy-combustion and pre-combustion gasification of fuels. The process behaviors of the air separation technologies have been widely studied individually. However, the study of energy consumption and the comparison of technologies have not been focused; therefore it might be worthwhile to develop the steady state models of the air separation technologies to compare their required energy, the production rate, and the product purity. In this study, pressure swing adsorption (PSA), vacuum swing adsorption (VSA), cryogenic and $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-\delta}$ (BSCF) membrane were modeled using input data from the available literatures. Initially, Aspen Plus was a simulator used to develop the steady state model of cryogenic process while BSCF membrane was developed using MATLAB. Additionally, Aspen Adsim was used to model the cyclic steady state of both PSA and VSA. After that, some parameters had to be adjusted to match the essential parameters and the pressure profile obtained from the experimental data. For both PSA and VSA adsorption processes, the pressure profiles and the product purity from the simulation models agreed satisfactorily with the experimental results, while the flow quantities and oxygen recovery were not close to those of the experiment. The results of BSCF membrane gave a good fit with the experiment. However, the convergence of the simulation was limited at low oxygen partial pressure, 0-0.129 atm. Therefore, a range of 0.13-1 atm was the oxygen partial pressure which could be converted to obtain the verified permeation flux. The suitable technique for each process depended on the requirement of the product quality and quantity. Cryogenic process was favored at high oxygen production rates and purity with low energy consumption, while BSCF membrane, VSA, and PSA were favored at lower oxygen production, respectively. The results also showed that BSCF membrane technology can produce oxygen with the highest purity at the lowest oxygen production. Besides, this technology required the lowest energy consumption and had high potential for improvement. Thus, this technology can be an alternative technology for air separation process.

Keywords: PSA/VSA / BSCF membrane/ Cryogenic/Aspen Plus/ Aspen Adsim

หัวข้อโครงการศึกษาวิจัย	การสร้างแบบจำลองและเปรียบเทียบการใช้พลังงาน สำหรับเทคโนโลยีการแยกอากาศ
หน่วยกิต	6
ผู้เขียน	นางสาวอรุณศิริ ทิพฤกษ์
อาจารย์ที่ปรึกษา	Dr. Hong-ming Ku
หลักสูตร	วิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชา	วิศวกรรมเคมี
ภาควิชา	วิศวกรรมเคมี
คณะ	วิศวกรรมศาสตร์
พ.ศ.	2553

E46967

บทคัดย่อ

เทคโนโลยีการแยกอากาศถูกพัฒนาเพื่อสนองความต้องการก๊าซออกซิเจนบริสุทธิ์ โดยที่กระบวนการผลิตออกซิเจนเป็นส่วนที่สูญเสียค่าใช้จ่ายอย่างมากในการติดตั้งและกระบวนการผลิตของโรงไฟฟ้าและกระบวนการอุตสาหกรรมที่ใช้กระบวนการเผาไหม้แบบใช้ออกซิเจนแทนอากาศ พฤติกรรมของเทคโนโลยีการแยกอากาศแต่ละชนิดได้มีการศึกษากันอย่างแพร่หลาย แต่อย่างไรก็ตามปริมาณการใช้พลังงานในการผลิตและการเปรียบเทียบวิธีทางเลือกต่างๆยังไม่ได้มุ่งสนใจศึกษา การสร้างแบบจำลองของเทคโนโลยีการแยกอากาศที่สภาวะคงตัวสามารถนำมาใช้พิจารณาเปรียบเทียบความต้องการใช้พลังงาน, อัตราการผลิต และความบริสุทธิ์ของผลิตภัณฑ์ของแต่ละเทคโนโลยี ในการศึกษานี้ได้สร้างแบบจำลองของกระบวนการดูดซับแบบสลับความดัน, แบบสุญญากาศ, การกลั่นที่อุณหภูมิต่ำ และเยื่อเลือกผ่านแบบ $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Co_{0.8}Fe_{0.2}O_{3-\delta}$ ข้อมูลที่ใช้ในการสร้างแบบจำลองเป็นข้อมูลที่รวบรวมจากวิทยานิพนธ์ต่างๆ สำหรับกระบวนการกลั่นที่อุณหภูมิต่ำได้สร้างแบบจำลอง ณ สภาวะคงตัวโดยใช้โปรแกรม Aspen Plus ขณะที่เยื่อเลือกผ่าน BSCF ได้ถูกสร้างขึ้นโดยใช้โปรแกรม MATLAB ยิ่งไปกว่านั้นทั้งกระบวนการดูดซับแบบสลับความดันและสุญญากาศถูกสร้างแบบจำลองโดยใช้โปรแกรม Aspen Adsim หลังจากนั้นแบบจำลองที่สร้างขึ้นทั้งหมดได้รับการประเมินความถูกต้องโดยตัวแปรบางตัวถูกปรับเพื่อทำให้ผลของตัวแปรสำคัญบางตัวและการเปลี่ยนแปลงของค่าความดันต่อเวลามีค่าใกล้เคียงกับผลที่ได้จากการทดลอง สำหรับการประเมินความถูกต้องของกระบวนการดูดซับแบบสลับความดันและสุญญากาศพบว่าการเปลี่ยนแปลงค่าความดันต่อเวลา และความบริสุทธิ์ของผลิตภัณฑ์จากแบบจำลองเห็นพ้องกับผลของการทดลอง แต่ทว่าทั้งสองแบบจำลองนี้ให้ผลของปริมาณการไหลและอัตราการแยกกลับไม่ใกล้เคียงกับผลจากการทดลอง สำหรับเยื่อเลือกผ่าน BSCFให้ผลจากแบบจำลองที่ตรงกับผลจากการทดลอง อย่างไรก็ตามการลู่เข้าเพื่อหาคำตอบของแบบจำลองถูกจำกัดที่สภาวะความดันต่ำ ณ 0-0.129 ความดันบรรยากาศ ดังนั้นแบบจำลองสามารถลู่เข้าหาคำตอบของเพอมิเอทฟลักซ์ได้ในช่วงความดัน

E46967

บรรยากาศที่ 0.13-1 ความดันบรรยากาศ เทคโนโลยีที่เหมาะสมสำหรับแต่ละกระบวนการขึ้นอยู่กับความต้องการของปริมาณและคุณภาพของผลิตภัณฑ์ กระบวนการกลั่นที่อุณหภูมิต่ำเหมาะสมกับการนำไปใช้ที่อัตราการผลิตออกซิเจนและความบริสุทธิ์สูงโดยที่ใช้พลังงานต่ำ ในขณะที่อัตราการผลิตออกซิเจนของกระบวนการเยื่อเลือกผ่าน BSCF, กระบวนการดูดซับแบบสุญญากาศและสลับความดันมีอัตราการผลิตต่ำลงมาตามลำดับ ผลของแบบจำลองแสดงว่ากระบวนการเยื่อเลือกผ่านแบบ BSCF เป็นเทคโนโลยีใหม่ซึ่งเหมาะสำหรับสภาวะการผลิตออกซิเจนที่ต้องการความบริสุทธิ์สูงในขณะที่มีอัตราการผลิตต่ำ นอกจากนี้พบว่าเทคโนโลยีนี้มีความต้องการใช้พลังงานต่ำ และศักยภาพในการพัฒนาต่อไปยังมีอีกมาก ดังนั้นเทคโนโลยีการผลิตของเยื่อเลือกผ่านแบบ BSCF เป็นทางเลือกของกระบวนการผลิตออกซิเจนที่น่าสนใจ

คำสำคัญ : กระบวนการดูดซับแบบสลับความดัน / สุญญากาศ / เยื่อเลือกผ่านแบบ BSCF / การกลั่นที่อุณหภูมิต่ำ / Aspen Plus / Aspen Adsim

ACKNOWLEDGEMENTS

I would like to express my thanks to many people who helped and supported me throughout this research. I would like to express my sincere gratitude to Prof. Dr. Karimi and Dr. Hong-ming Ku, my advisors for their advices, constructive comments and useful suggestions. I also like to thank Asst. Prof. Dr. Kwanchanok Pasuwat and Assoc. Prof. Dr. Thongchai Srinophakun, members of my thesis committee, who also advised me about the results and their discussion. Furthermore, I would like to express my appreciation to Mr. Nattapol Akkarachaneeyakorn at Aspen Technology, Inc. for providing the document on Aspen Adsim tutorial.

In addition, my appreciation also goes to Mr. Yanyong Angklomkleaw who advised me about the wording and structure of English. I am also thankful to him for giving me guidance at every step of this research. Furthermore, I wish to express my thanks to my labmates at National University of Singapore, Mr. Mohammad Sadegh, Mr. Faruque Hasan, and Mr. Vemula Rama Rao who shared with me their experience. Moreover, I would like to extend my sincere thanks to all the faculty members, particularly in the Chemical Engineering Practice School (ChEPS) at King Mongkut's University of Technology Thonburi, who provided the fundamental knowledge through their lectures. Last but not least, I wish to express my deep thanks to my family for their support and encouragement during the course of my study.

CONTENTS

	PAGE
ENGLISH ABSTRACT	ii
THAI ABSTRACT	iii
ACKNOWLEDGEMENTS	v
CONTENTS	vi
LIST OF TABLES	viii
LIST OF FIGURES	ix
LIST OF SYMBOLS	xi
CHAPTER	
1. INTRODUCTION	**1**
1.1 Background	1
1.2 Objectives	2
1.3 Scope of work	2
2. THEORY AND LITERATURE REVIEWS	**3**
2.1 Air separation technologies	3
2.1.1 Chemical Absorption	3
2.1.2 Adsorption (TSA, PSA, VSA)	4
2.1.2.1 PSA	5
2.1.2.2 VSA	7
2.1.3 Cryogenic	8
2.1.4 Membrane	9
2.1.4.1 Polymer membrane	9
2.1.4.2 Ion transport membranes (ITMs)	11
2.2 CSS adsorption simulation using Aspen Adsim	12
2.2.1 Adsim algorithm	12
2.2.1.1 Creating the process flowsheet	12
2.2.1.2 Defining the physical properties of the adsorption bed and adsorbent	12
2.2.1.3 Creating the cyclic steady state process	12
2.2.1.4 Solving and visualizing the results	13
2.2.2 Mathematic model for adsorption	13
2.2.2.1 Material balance: Convection with constant dispersion	13
2.2.2.2 Momentum balance: Ergun equation	14
2.2.2.3 Kinetic model: Lumped resistance model	14
2.2.2.4 Equilibrium model: Langmuir isotherm	15
2.3 Design of ejector	16
2.4 Literature reviews	17
2.5 Comparisons of the air separation technologies	19
3. METHODOLOGY	**20**
3.1 Gethering and analyzing information	20
3.2 Study Aspen Adsim	21
3.3 Simulation and validation the models	21
3.4 Study of process behavior	21
3.5 Energy evaluation and comparison	21

4. MODEL DEVELOPMENT 22
4.1 VSA cyclic steady state simulation 22
4.2 PSA cyclic steady state simulation 25
4.3 Cryogenic distillation simulation 29
4.4 BSCF Tubular Membrane modeling 31

5. RESULTS AND DISCUSSION 34
5.1 Model validation 34
5.1.1 Model validation of VSA 34
5.1.2 Model validation of PSA 35
5.1.3 Model validation of BSCF membrane 37
5.2 Energy analysis 38
5.2.1 Energy analysis of VSA 38
5.2.2 Energy analysis of PSA 39
5.2.3 Energy analysis of cryogenic 40
5.2.4 Energy analysis of BSCF membrane 41

6. CONCLUSIONS AND RECOMMENDATIONS 43
6.1 Conclusions 43
6.2 Recommendations 43

REFERENCES 44

APPENDIX
A VSA process input data 46
B PSA process input data 53
C Cryogenic distillation process input data 59
D BSCF membrane input files 67
E Calculation of motive steam requirement for ejector 70
F Oxygen permeation flux of some ITM membrane materials 74
G Aspen Adsim Simulation 76

CURRICULUM VITAE 98

LIST OF TABLES

TABLE		PAGE
4.1	Bed and NaX Zeolite Characteristics and bicomponent Langmuir parameters	24
4.2	Specification of valve flow coefficient for VSA	25
4.3	Bed and 5A Zeolite Characteristics and bicomponent Langmuir parameters	26
4.4	Specification of valve flow coefficient for PSA	29
4.5	Feed properties for cryogenic distillation process	29
4.6	Input data of cryogenic distillation process	31
4.7	Parameters used in the simulation of the BSCF membrane tube	32
5.1	Process conditions of VSA	35
5.2	Process conditions of PSA	36
5.3	Energy consumption over the different process sections	41
6.1	Comparisons of the air separation technologies	43
A.1	Adsorbent property for VSA process	49
A.2	Langmuir isotherm parameters for VSA process	49
A.3	Geometry of adsorption bed for VSA process	50
A.4	LDF coefficient for VSA process	50
A.5	Axial dispersion coefficient for VSA process	50
A.6	Boundary parameter of step 1 for VSA process	51
A.7	Boundary parameter of step 2 for VSA process	51
A.8	Boundary parameter of step 3 for VSA process	52
A.9	Boundary parameter of step 4 for VSA process	52
A.10	Boundary parameter of step 5 for VSA process	52
A.11	Boundary parameter of step 6 for VSA process	53
A.12	Boundary parameter of step 7 for VSA process	53
A.13	Boundary parameter of step 8 for VSA process	53
B.1	Adsorbent property for PSA process	55
B.2	Langmuir isotherm parameters for PSA process	55
B.3	Geometry of adsorption bed for PSA process	55
B.4	LDF coefficient for PSA process	56
B.5	Axial dispersion coefficient for PSA process	56
B.6	Boundary parameter of step 1 for PSA process	56
B.7	Boundary parameter of step 2 for PSA process	57
B.8	Boundary parameter of step 3 for PSA process	57
B.9	Boundary parameter of step 3 for PSA process	58
B.10	Boundary parameter of step 4 for PSA process	58
B.11	Boundary parameter of step 5 for PSA process	58
B.12	Boundary parameter of step 6 for PSA process	59
E.1	Vapor pressure of water (Metric Units)	72
F.1	Oxygen permeation flux of some ITM membrane materials	76

LIST OF FIGURES

FIGURE		PAGE
2.1	The process diagram of the MOLTOX™ system (a) Pressure swing absorption (b) Temperature swing absorption	4
2.2	Adsorption for air separation process	5
2.3	Simplified flow diagram of pressure swing adsorption	6
2.4	Simplified flow diagram of vacuum swing adsorption	8
2.5	Simplified flow diagram of cryogenic air separation process	9
2.6	Polymeric membrane for air separation process	10
2.7	Ion transport membrane for air separation process	11
2.8	Concentration profile (a) plug flow (b) plug flow with axial dispersion	13
3.1	Methodology	20
4.1	Skarstrom cycle with equalization of two bed VSA	23
4.2	Process flowsheet of two bed VSA	25
4.3	Skarstrom cycle with equalization of two bed PSA	28
4.4	Process flowsheet of two bed PSA	28
4.5	Simplified flowsheet of cryogenic distillation process	30
4.6	Flow configuration of BSCF membrane	33
5.1	VSA pressure profile obtained by Aspen adsorption and the experimental data	34
5.2	PSA pressure profile obtained by Aspen adsorption and the experimental data	36
5.3	Permeation flux of BSCF membrane obtained by MATLAB and the experimental data	37
5.4	The effect of production flow rate on the oxygen purity and the energy consumption for VSA process	38
5.5	The effect of the production flow rate on the product purity and the energy consumption for PSA process	39
5.6	The effect of the production flow rate on the product purity and the energy consumption for cryogenic process	40
5.7	The effect of the production flow rate on the energy consumption for BSCF tubular membrane process	42
E.1	Molecular weight entrainment ratio	71
E.2	Temperature entrainment ratio (Metric Units)	72
E.3	Nomograph to determine the ratio of motive stream to saturated water vapor, R_3	72
G.1	Component lists	77
G.2	Physical properties configuration	77
G.3	Aspen Plus components	78
G.4	Aspen Plus property methods	78
G.5	Aspen Plus property	79
G.6	Physical properties using Aspen properties	79
G.7	Build component list	80
G.8	Structure type	80
G.9	Name structure	81
G.10	Structure of flowsheet	81
G.11	Structure configuration	82

G.12 Gas libraries 82
G.13 Process flowsheet 83
G.14 GCSS material connection 83
G.15 PSA flowsheet 84
G.16 Adsorbent Property 84
G.17 Energy balance 85
G.18 Equilibrium 85
G.19 Flow direction 86
G.20 Geometry 86
G.21 Kinetics 86
G.22 Material Momentum 87
G.23 Numerics 87
G.24 TD1 configuration 87
G.25 Cycle organization 88
G.26 Cycle interactions 88
G.27 Manipulated variable 89
G.28 Manupulated variables (Step1) 89
G.29 Manupulated variables (Step2) 90
G.30 Manupulated variables (Step3) 90
G.31 Manupulated variables (Step4) 91
G.32 Manupulated variables (Step5) 91
G.33 Manupulated variables (Step6) 92
G.34 Cycle option 92
G.35 Profile plot name 93
G.36 Pressure profile editor 94
G.37 Product composition profile editor 95
G.38 Forms browser 96
G.39 Pressure profile 96
G.40 Product composition profile 97
G.41 Product composition plot 97

LIST OF SYMBOLS

v	=	Gas velocity
D_{mk}	=	Molecular diffusivity
r_p	=	Particle radius
v_g	=	Gas velocity
ε_i	=	Interparticle voidage
ψ	=	Shape factor
μ	=	Dynamic gas viscosity
M	=	Molecular weight
w_i	=	Adsorbed phase concentration for component i (loading in the adsorbent)
ρ_s	=	Bulk density of solid
MTC_{gi}	=	Mass transfer coefficient in the gas phase
MTC_{si}	=	Mass transfer coefficient in the solid phase
c_i	=	Bulk gas phase concentration
c_i^*	=	Interface gas phase concentration
w_i^*	=	Loading at $r = r_p$
IP_i	=	Isotherm parameter for component i
P_i	=	Partial pressure of component i
T_s	=	Adsorbent particle temperature
W_{wv}	=	Mass flow rate of water vapor
P_{v,H_2O}	=	Vapor pressure of water at inlet temperature
P_1	=	Total inlet pressure
W_a	=	Mass flow rate of air and other non-condensibles
MW_a	=	Average molecular weight of air and other non-condensibles
W_{DAE}	=	Dry Air Equivalent mass flow rate
$W_{DAE,tot}$	=	Total Dry Air Equivalent mass flow rate
$W_{DAE,st}$	=	Steam or water vapor Dry Air Equivalent mass flow rate
$W_{DAE,a}$	=	Air and other non-condensible hydrocarbon Dry Air Equivalent mass flow rate
W	=	Mass flow rate of suction fluid
W_m	=	Mass flow rate of motive steam
R_{mw}	=	Molecular weight entrainment ratio
R_T	=	Temperature entrainment ratio
S	=	Membrane area
d_2	=	Inner diameter
d_1	=	Outer diameter
L	=	Membrane length
N_F	=	Air flow rate
N_{He}	=	Helium flow rate

N_{O2}	=	Oxygen permeation flux
C_i	=	Density of oxygen ion
D_a	=	Ambipolar oxygen ion-hole diffusion coefficient
P_S	=	Total pressure in the shell side
$P_{T,in}$	=	Total pressure in the inlet of the membrane tube
$P_{1,in}$	=	Oxygen partial pressure in the feed