

吸附剂的选择方法、变压吸附方法及其系统

相关申请的交叉引用

本申请要求 2021 年 12 月 31 日提交的中国专利申请 202111681815.7 的权益，该申
5 请的内容通过引用被合并于本文。

技术领域

本发明实施例涉及吸附分离技术领域，特别涉及一种吸附剂的选择方法、变压吸附
方法及其系统。

10

背景技术

变压吸附技术可用于氢气、氦气、氮气等气体的提纯，还可用于二氧化碳捕集、低
碳烃类的回收等工业过程。变压吸附根据应用场景不同，选用的吸附剂可以吸附需要脱
除的杂质，或吸附需要生产的产品，吸附剂吸附的杂质或产品都称为吸附质。吸附剂、
15 控制工艺与设备是变压吸附技术应用于生产的关键。

根据不同的吸附质选择吸附剂，并匹配相应的控制工艺，进一步选用可靠的设备，
是实现变压吸附最优化生产方案的一般流程。一般而言，变压吸附通过不少于两个塔的
顺序切换实现连续生产，每个塔器中装填同样种类、相等重量的吸附剂，在一个吸附塔
中装填一定量的吸附剂，可以通过延长吸附周期的方式提高产品回收率；如果减少吸附
20 剂的装填量，则可以通过缩短吸附周期的方式保证产品回收率、并减小装置占地。

在现有技术中，针对不同的吸附质，主要通过经验选择相应吸附剂，由此，通常需
要装填过量的吸附剂且设置较长的吸附周期，来实现充分吸附的目的。

从可持续发展的角度出发，在保证变压吸附装置整体性能的条件下，通过减少吸附
剂使用量，进而减小吸附塔体积，实现减小装置占地是更优的选择。因此，针对同样原
25 料的气体变压吸附过程，如何实现优化变压吸附周期，减少吸附剂用量，从而减小装置
占地与总重是亟待解决的问题。

发明内容

本发明的目的是提供一种吸附剂的选择方法、变压吸附方法及其系统，其可基于吸
30 附等温线在初始压力处的斜率及特定温度与特定压力下的吸附剂对目标吸附质的吸附
量，选择目标吸附剂，从而在变压吸附过程中可优化变压吸附周期，减少吸附剂的用量，
进而降低变压吸附运行与生产成本。

为了实现上述目的，本发明第一方面提供一种吸附剂的选择方法，所述选择方法包括：获取多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率，其中，所述吸附等温线为在特定温度下吸附量随压力变化的曲线；获取在所述特定温度与特定压力下的所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附量；以及根据所述每个吸附剂

5 的斜率与吸附量，从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂。

优选地，所述从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂包括：根据所述每个吸附剂的斜率，确定在所述每个吸附剂的变压吸附的循环周期中的每个分解步序的最短时间；根据所确定的最短时间，从所述多个吸附剂中选择特定吸附剂，其中，所述特定吸附剂所对应的最短时间小于或等于预设时间；确定所述特定吸附剂的斜

10 率与吸附量的乘积；以及将与最大乘积相对应的吸附剂选择为所述目标吸附剂。

优选地，所述确定在所述每个吸附剂的变压吸附的循环周期中的每个分解步序的最短时间包括：在一吸附剂的斜率大于第一斜率且小于或等于第二斜率的情况下，与该吸附剂所对应的最短时间大于或等于第一最短时间；在一吸附剂的斜率大于所述第二斜率且小于或等于第三斜率的情况下，与该吸附剂所对应的最短时间大于或等于第二最短

15 时间；在一吸附剂的斜率大于所述第三斜率且小于或等于第四斜率的情况下，与该吸附剂所对应的最短时间大于或等于第三最短时间；或者在一吸附剂的斜率大于所述第四斜率且小于或等于第五斜率的情况下，与该吸附剂所对应的最短时间大于或等于第四最短时间，其中，所述第一斜率、所述第二斜率、所述第三斜率、所述第四斜率以及所述第五斜率逐渐增大；以及所述第一最短时间、所述第二最短时间、所述第三最短时间以及所述

20 第四最短时间逐渐增大。

优选地，在所述第一斜率为 1、所述第二斜率为 10、所述第三斜率为 20、所述第四斜率为 30 且所述第五斜率为 50 的情况下，所述第一最短时间为 0.05s、所述第二最短时间为 3s、所述第三最短时间为 9s 且所述第四最短时间为 24s。

优选地，所述确定在所述每个吸附剂的变压吸附的循环周期中的每个分解步序的最短时间 t 包括： $t = \frac{-40}{1+e^{(k_0-27)/6}} + T$ ，其中， T 为预设最长步序时间，单位为 s；以及 k_0 为所述每个吸附剂的斜率。

25

优选地， T 小于或等于 40。

优选地，所述选择方法还包括：将所确定的最短时间确定为吸附时间；以及根据在所述吸附时间内引入吸附塔的目标吸附质的量以及所述目标吸附剂的吸附量，确定

30 所述目标吸附剂的量。

优选地，所述获取多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率的步骤在满足预设前提条件下被执行，其中，所述预设前提条件包括：在各个压力处，所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附等温线与解吸等温线的吸附量之差

的绝对值小于或等于吸附等温线的吸附量的预设比例，其中，所述解吸等温线为在所述特定温度下解吸量随压力变化的曲线。

优选地，所述预设前提条件还包括：在各个压力处，所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附等温线的吸附量小于或等于解吸等温线的吸附量。

5 优选地，所述特定温度为 10°C~40°C。

优选地，所述初始压力小于或等于 10kPa。

优选地，所述吸附剂选自：微孔分子筛；MOFs；碳分子筛；或者硅胶。

通过上述技术方案，本发明创造性地根据多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率及在所述特定温度与特定压力下的所述每个吸附剂
10 对所述目标吸附质的吸附量，从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂，从而在变压吸附过程中可，优化变压吸附周期减少吸附剂的用量，进而降低变压吸附运行与生产成本。

本发明第二方面提供一种变压吸附方法，所述变压吸附方法包括：所述的吸附剂的选择方法，选择用于吸附一个或多个目标吸附质的目标吸附剂；以及采用所述目标吸附
15 剂对所述一个或多个目标吸附质进行变压吸附。

优选地，所述变压吸附方法还包括：在所述目标吸附剂的吸附等温线在初始压力点处的斜率大于第一预设斜率且小于或等于第二预设斜率的情况下，采用集成旋转阀控制变压吸附的工艺时序；或者在所述目标吸附剂的吸附等温线在初始压力点处的斜率大于
所述第二预设斜率且小于或等于第三预设斜率时，采用程控阀控制变压吸附的工艺时序。

20 优选地，在所述目标吸附剂为多个目标吸附剂的情况下，所述变压吸附方法还包括：对所述多个目标吸附剂进行级配，所述采用所述目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行特定温度下的变压吸附包括：采用级配后的所述多个目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行所述特定温度下的变压吸附。

优选地，所述变压吸附方法还包括：根据所述多个目标吸附剂中的具有吸附等
25 温线在初始压力处的最大斜率的吸附剂的斜率，设置变压吸附的循环周期中的每个分解步骤的最短时间。

通过上述技术方案，根据所述的吸附剂的选择方法，选择用于吸附一个或多个目标吸附质的目标吸附剂，然后采用所述目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行特定温度下的变压吸附，由此，可通过减少吸附剂的用量与优化变压吸附周期来降低变压吸
30 附运行与生产成本。

本发明第三方面提供一种吸附剂的选择系统，所述选择系统包括：存储器，用于存储多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线；以及处理器，被配置为执行以下操作：获取所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率，

其中，所述吸附等温线为在特定温度下吸附量随压力变化的曲线；获取在所述特定温度与特定压力下的所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附量；以及根据所述每个吸附剂的斜率与吸附量，从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂。

有关本发明提供的吸附剂的选择系统的具体细节及益处可参阅上述针对吸附剂的选择方法的描述，于此不再赘述。

本发明第四方面提供一种变压吸附系统，所述变压吸附系统包括：所述的吸附剂的选择系统，用于选择用于吸附一个或多个目标吸附质的目标吸附剂；以及吸附装置，用于采用所述目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行特定温度下的变压吸附。

有关本发明提供的变压吸附系统的具体细节及益处可参阅上述针对变压吸附方法的描述，于此不再赘述。

本发明第五方面提供一种计算机可读存储介质，所述计算机可读存储介质上存储有计算机程序，该计算机程序被处理器执行时实现上述的吸附剂的选择方法和/或上述的变压吸附方法。

本发明的其它特征和优点将在随后的具体实施方式部分予以详细说明。

附图说明

附图是用来提供对本发明实施例的进一步理解，并且构成说明书的一部分，与下面的具体实施方式一起用于解释本发明实施例，但并不构成对本发明实施例的限制。在附图中：

图 1 是本发明一实施例提供的吸附剂的选择方法的流程图；

图 2 是本发明一实施例提供的从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂的流程图；

图 3 为一种吸附剂对某吸附质的吸附等温线与解吸等温线；

图 4 为图 3 中吸附等温线的斜率曲线与解吸等温线的斜率曲线；

图 5 为一种吸附剂对某吸附质的吸附等温线与解吸等温线；

图 6 为图 5 中吸附等温线的斜率曲线与解吸等温线的斜率曲线；

图 7 为另一种吸附剂对某吸附质的吸附等温线与解吸等温线；

图 8 为图 7 中吸附等温线的斜率曲线与解吸等温线的斜率曲线；

图 9 为另一种吸附剂对某吸附质的吸附等温线与解吸等温线；

图 10 为图 9 中吸附等温线的斜率曲线与解吸等温线的斜率曲线；

图 11 为一种吸附剂对某吸附质的吸附等温线及该吸附等温线的斜率曲线；以及

图 12 为一种吸附剂对某吸附质的吸附等温线及该吸附等温线的斜率曲线。

具体实施方式

以下结合附图对本发明的具体实施方式进行详细说明。应当理解的是，此处所描述的具体实施方式仅用于说明和解释本发明，并不用于限制本发明。

图 1 是本发明一实施例提供的吸附剂的选择方法的流程图。如图 1 所示，所述选择方法可包括：步骤 S101，获取多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率，其中，所述吸附等温线为在特定温度下吸附量随压力变化的曲线；步骤 S102，获取在所述特定温度与特定压力下的所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附量；以及步骤 S103，根据所述每个吸附剂的斜率与吸附量，从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂。

本实施例通过针对目标吸附质进行吸附剂选型，能够实现快周期变压吸附循环，优化变压吸附工艺流程，实现减少吸附剂用量，有效减少同生产规模（相同杂质组成与含量的等量原料气）变压吸附装置的占地与重量，降低变压吸附运行与生产成本。

在执行步骤 S101 之前，可先获取每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线与解吸等温线的重合度，然后判断所述重合度。若重合度较好，则表明将吸附的吸附质充分地解析出来，解析能力较强，执行步骤 S101；否则，针对该吸附剂无需执行相应的后续步骤。

其中，吸附等温线与解吸等温线的重合度是指两条曲线在同一压力下的吸附量的重合度。具体地，吸附等温线指静态吸附等温线，具有重复性好、易于获得、几乎适用所有吸附剂的性能表征的特点；解吸等温线指完成静态吸附等温线测试的吸附剂，在同样的温度条件下，开始降压解吸获得的吸附量等温线。吸附等温线的测试方法为，以压力为横坐标，单位为 bar，以吸附量为纵坐标，单位为 ml/g；获得的吸附等温线表示单位质量的吸附剂在一定吸附质压力下的平衡吸附量。

在一实施例中，所述获取多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率的步骤（即步骤 S101）在满足预设前提条件下被执行。

其中，所述预设前提条件可包括：在各个压力处，所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附等温线与解吸等温线的吸附量之差的绝对值小于或等于吸附等温线的吸附量的预设比例（例如 15%）。

其中，所述解吸等温线为在所述特定温度下解吸量随压力变化的曲线。所述特定温度为常温（例如，10℃~40℃），优选为 25℃。

优选地，所述预设前提条件还可包括：在各个压力处，所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附等温线的吸附量小于或等于解吸等温线的吸附量。由此，可快速将吸附的吸附质完全且快速地解析出来。

步骤 S101，获取多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线在初始压

力处的斜率。

其中，所述吸附等温线为在特定温度下吸附量随压力变化的曲线。所述特定温度为常温（例如，10°C~40°C），优选为 25°C。在本文中，若无特别指出特定温度的数值，均默认为 25°C。

- 5 其中，所述初始压力小于或等于 10kPa。对于不同的吸附剂该压力值设置可以是相同的。

其中，所述吸附剂选自：微孔分子筛；MOFs；碳分子筛；在微孔分子筛、MOFs 或碳分子筛中填充特定材料（例如，填充 Cu/Zn 等金属材料）的专用吸附剂；硅胶。

- 10 例如，对于成型的吸附剂，粒径范围在 0.4mm 至 2.5mm 之间，成型的吸附剂可以是球状、条状、柱状或核壳等型式。对于结构化吸附剂，吸附剂涂层的厚度在 50 μm 至 400 μm 之间。结构化的吸附剂一般指将吸附剂粉涂敷在多孔载体上，多孔载体可以为金属烧结多孔材料、氧化铝烧结多孔材料、有机玻璃纤维多孔材料等。

- 15 具体地，首先，测定吸附剂的特定温度下的静态吸附等温线与解吸等温线（如图 3、图 5、图 7、图 9、图 11-12 所示），进一步对吸附等温线与解吸等温线的拟合曲线求取导数（切线斜率），获得每个点的切线斜率并得到等温线斜率曲线（如图 4、图 6、图 8、图 10-12 所示），从而可得到各个吸附等温线在初始压力处的斜率。当然，也可仅获取在初始压力处的斜率即可。

步骤 S102，获取在所述特定温度与特定压力下的所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附量。

- 20 从每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线上，可获取所述特定温度与特定压力（例如，1bar）下的所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附量。在本文中，若无特别指出特定压力的数值，可均默认为 1bar。当然，所述特定压力是指用于测量吸附量的一个合理的压力，其可根据实际情况进行合理设置，而不限于 1bar。

- 25 步骤 S103，根据所述每个吸附剂的斜率与吸附量，从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂。

对于步骤 S103，如图 2 所示，所述从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂可包括以下步骤 S201-S204。

步骤 S201，根据所述每个吸附剂的斜率，确定在所述每个吸附剂的变压吸附的循环周期中的每个分解步序的最短时间。

- 30 根据所确定的每个分解步序的最短时间，可确定整个循环周期（吸附周期）。

在一实施例中，对于步骤 S201，所述确定在所述每个吸附剂的变压吸附的循环周期中的每个分解步序的最短时间包括：在一吸附剂的斜率大于第一斜率且小于或等于第二斜率的情况下，与该吸附剂所对应的最短时间大于或等于第一最短时间；在一吸附剂

的斜率大于所述第二斜率且小于或等于第三斜率的情况下，与该吸附剂所对应的最短时间大于或等于第二最短时间；在一吸附剂的斜率大于所述第三斜率且小于或等于第四斜率的情况下，与该吸附剂所对应的最短时间大于或等于第三最短时间；或者在一吸附剂的斜率大于所述第四斜率且小于或等于第五斜率的情况下，与该吸附剂所对应的最短时间大于或等于第四最短时间。

其中，所述第一斜率、所述第二斜率、所述第三斜率、所述第四斜率以及所述第五斜率逐渐增大；以及所述第一最短时间、所述第二最短时间、所述第三最短时间以及所述第四最短时间逐渐增大。

在所述第一斜率为 1、所述第二斜率为 10、所述第三斜率为 20、所述第四斜率为 30 且所述第五斜率为 50 的情况下，所述第一最短时间为 0.05s、所述第二最短时间为 3s、所述第三最短时间为 9s 且所述第四最短时间为 24s。

具体地，若对于目标吸附质，吸附剂的吸附等温线初始压力点的斜率大于 50 时，可判断该吸附剂不适用于常温的变压吸附连续生产过程。对于目标吸附质，吸附剂的吸附等温线初始压力点的斜率小于或等于 50 时，该吸附剂适用于常温变压吸附过程，在适宜的变压吸附周期时间内可以实现吸附剂的周期循环吸附与再生（即降压再生工艺）。

例如，当所选择的吸附剂的吸附等温线初始压力点的斜率 $1 < k_0 \leq 10$ ，变压吸附的循环周期中每个分解步序的时间大于或等于 0.05s；当所选择的吸附剂的吸附等温线初始压力点的斜率 $10 < k_0 \leq 20$ ，变压吸附的循环周期中每个分解步序的时间大于或等于 3s；当所选择的吸附剂的吸附等温线初始压力点的斜率 $20 < k_0 \leq 30$ ，变压吸附的循环周期中每个分解步序的时间大于或等于 9s；当所选择的吸附剂的吸附等温线初始压力点的斜率 $30 < k_0 \leq 50$ ，变压吸附的循环周期中每个分解步序的时间大于或等于 24s。

当测定的吸附剂对某一吸附质的吸附等温线和解吸等温线以及相应的斜率曲线如图 1 和图 2 所示，该吸附剂适用于快周期变压吸附，循环周期中每个分解步序的时间大于或等于 0.05s 即可。

当测定的吸附剂对某一吸附质的吸附等温线和解吸等温线以及相应的斜率曲线如图 3 和图 4 所示，该吸附剂适用于循环周期中每个分解步序的时间大于或等于 3s 的快周期变压吸附。

当测定的吸附剂对某一吸附质的吸附等温线和解吸等温线以及相应的斜率曲线如图 5 和图 6 所示，该吸附剂适用于循环周期中每个分解步序的时间大于或等于 9s 的快周期变压吸附。

当测定的吸附剂对某一吸附质的吸附等温线和解吸等温线以及相应的斜率曲线如图 7 和图 8 所示，该吸附剂适用于循环周期中每个分解步序的时间大于或等于 24s 的快周期变压吸附。

当气源中含有多种需要吸附质组分时，可按照上述方法选择吸附剂进行级配，多种吸附剂级配的复合床层适用的循环周期，由分解步序所需时间最长的吸附剂决定。

当测定的吸附剂对某一吸附质的吸附等温线与吸附等温线切线斜率曲线如图 9 或图 10 所示，由于该吸附剂在测定温度下，不能实现解吸，故不能得到同温度的解吸等温线；
5 同时，该吸附剂吸附等温线初始压力点的斜率大于 50，该吸附剂不能用于实现常温变压吸附过程。

因此，上述实施例可适用于降压再生工艺。对于其他工艺， k_0 可为其他合理范围，例如， $50 < k_0 \leq 200$ ，并且，也可针对不同的子范围，确定与不同的子范围对应的变压吸附的循环周期中每个分解步序的时间。

10 在另一实施例中，对于步骤 S201，所述确定在所述每个吸附剂的变压吸附的循环周期中的每个分解步序的最短时间 t （单位为 s）可包括：

$$t = \frac{-40}{1+e^{(k_0-27)/6}} + T,$$

其中， T 为预设最长步序时间，单位为 s；以及 k_0 为所述每个吸附剂的斜率。

由于本实施例适用于快周期变压吸附过程，故 T 小于或等于 40（在本文中，如无
15 特殊说明，均默认 $T=40$ ）。在根据步骤 S101 获取 k_0 的情况下，可根据上式确定每个吸附剂对应的分解步序的最短时间 t 。

因此，上述实施例的适用范围非常广，不仅可适用于降压再生工艺（无需抽真空），还可适用于采用抽真空与包含吹扫工艺的吸附剂选择与级配，并且据此确定的最短时间的结果也非常精确。

20 步骤 S202，根据所确定的最短时间，从所述多个吸附剂中选择特定吸附剂。

其中，所述特定吸附剂所对应的最短时间小于或等于预设时间。该预设时间可根据实际情况进行合理设定：例如，可设置预设时间为 15.10s（其对应的斜率为 24）。

表 1 三种吸附剂吸附吸附质 N_2 的具体参数

吸附剂	吸附质	初始点斜率	最短时间（s）
分子筛 1	N_2	21	10.76
分子筛 2	N_2	7	1.38
活性炭 1	N_2	8	1.62

表 1 中的最短时间根据 t 的计算公式求得。对于表 1 来说，三种吸附剂所对应的最
25 短时间均小于 15.10s，由此可选出所述三种吸附剂。通过本步骤可优化变压吸附的周期，以实现快速吸附。

步骤 S203，确定所述特定吸附剂的斜率与吸附量的乘积。

例如，根据下述每个吸附剂的斜率与吸附量，确定相应的乘积，如表 2 所示。

表 2 三种吸附剂吸附吸附质 N₂ 的具体参数

吸附剂	吸附质	初始点斜率	吸附量	乘积
分子筛 1	N ₂	21	18	378
分子筛 2	N ₂	7	7.5	52.5
活性炭 1	N ₂	8	9.2	73.6

步骤 S204，将与最大乘积相对应的吸附剂选择为所述目标吸附剂。

例如，分子筛 1 的吸附等温线在初始压力处的斜率与吸附量（1bar/25℃）乘积值最大，所以将分子筛 1 确定为目标吸附剂。通过本步骤可采用少量的目标吸附剂实现对目标吸附质的有效吸附，减小吸附塔体积。

因此，通过上述各个实施例可优化变压吸附周期，减少吸附剂用量，降低变压吸附运行与生产成本，从而在满足变压吸附装置生产率的同时，保证产品回收率。

在一实施例中，所述选择方法还包括：将所述目标吸附剂所对应的最短时间确定为吸附时间；以及根据在所述吸附时间内引入吸附塔的所述目标吸附质的量以及所述目标吸附剂的吸附量，确定所述目标吸附剂的量。

例如，通过步骤 S201 确定的目标吸附剂所对应的最短时间确定为吸附时间；然后，可确定所述吸附时间内引入吸附塔的目标吸附质的量，再结合目标吸附剂的吸附量，可确定目标吸附质的量。

上述各个实施例可以针对各种目标吸附质进行吸附剂的选型，同时对备选的吸附剂无特别限定，因此，适用范围广泛。

综上所述，本发明创造性地根据多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率及在所述特定温度与特定压力下的所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附量，从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂，从而在变压吸附过程中可优化变压吸附周期，减少吸附剂的用量，进而降低变压吸附运行与生产成本。

本发明一实施例还提供一种变压吸附方法，所述变压吸附方法包括：根据所述的吸附剂的选择方法，选择用于吸附一个或多个目标吸附质的目标吸附剂；以及采用所述目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行特定温度下的变压吸附。

在一实施例中，所述变压吸附方法还包括：在所述目标吸附剂的吸附等温线在初始压力点处的斜率大于第一预设斜率且小于或等于第二预设斜率的情况下，采用集成旋转阀控制变压吸附的；或者在所述目标吸附剂的吸附等温线在初始压力点处的斜率大于所述第二预设斜率且小于或等于第三预设斜率时，采用程控阀控制变压吸附的工艺时序。

例如，当所选择的吸附剂的吸附等温线在初始压力处的斜率满足 $1 < k_0 \leq 20$ 时，采

用集成旋转阀实现工艺时序，由此可实现非常精准的控制；当所选择的吸附剂的吸附等温线在初始压力处的斜率满足 $20 < k_0 \leq 50$ 时，采用程控阀实现工艺时序。

在另一实施例中，在所述目标吸附剂为多个目标吸附剂的情况下，所述变压吸附方法还包括：对所述多个目标吸附剂进行级配，所述采用所述目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行特定温度下的变压吸附包括：采用级配后的所述多个目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行所述特定温度下的变压吸附。

所述变压吸附方法还包括：根据所述多个目标吸附剂中的具有吸附等温线在初始压力处的最大斜率的吸附剂的斜率，设置变压吸附的循环周期中的每个分解步序的最短时间。

具体地，当目标吸附质为多个时，例如，原料气包含多种组分，逐一对多个目标吸附质选择吸附剂，将所选择的多个吸附剂形成级配。在一实施例中，级配是指按照目标吸附质的分子量的大小设置多个目标吸附剂所在的床层，按照对应目标吸附质的分子量由大到小依次吸附。同一吸附剂一般更易于吸附大分子量的吸附质，但是，大分子量的杂质不容易解吸，因此，使级配的吸附剂按分子量大小依次吸附吸附质，有利于吸附剂的解吸。

进一步地，变压吸附的循环周期中每个分解步序的最短时间由形成级配的目标吸附剂中的吸附等温线在初始压力处的斜率最大的目标吸附剂决定。每种吸附剂对变压吸附的循环周期的每个分解步序的最短时间与吸附等温线初始压力点的斜率的关系参照上述技术方案中所述，在此不再赘述。

进一步地，变压吸附的循环周期的工艺时序包括按时间顺序的吸附、均压降、解吸和均压升步骤。

进一步地，采用吸附塔数-同时处于吸附状态的塔数-均压次数为 10-3-4、12-3-6、4-1-2、6-1-2、8-2-3、8-2-2 或 9-2-3 的工艺流程。

本实施例还提供了吸附剂的级配方式，为快周期变压吸附的吸附剂的级配方案提供了简单易行的实现方法。

上述各个实施例中的快周期变压吸附方法能够通过吸附剂的选型，满足各种时长的变压吸附循环周期要求，无需额外工艺时序弥补吸附剂的解吸性能；增加吸附剂床层的产率、减小再生过程的能耗，如，减少吹扫再生气的用量、减少抽真空的功耗，甚至省略抽真空，从而降低整个过程能耗，有效提高综合效率。

以典型的 8-2-2（即八个吸附塔、两个吸附塔同时处于吸附步序，每个周期经过两次均压降与均压升）工艺为例，变压吸附周期为吸附塔从一次吸附开始至终充完成，准备好下次吸附开始之间的时间，每个变压吸附周期的时间为所有分解步序的时间之和。参考表 3 所示，若每个分解步序的时间为 30s，那么整个变压吸附周期为 480s（8min）。

表 3 中吸表示吸附步序；充表示终充步序；降 1/升 1 表示一次均压降/升步序，降 2/升 2 表示二次均压降/升步序，顺表示顺放步序；逆表示逆放步序；吹表示利用顺放气吹扫步序。

表 3 典型 8-2-2 工艺的分解步序

步序 时 间	30	30	30	30	30	30	30	30	30	30	30	30	30	30	30	30
步序/ 吸 附 塔	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
A	吸	吸	吸	吸	降 1	降 2	顺	逆	逆	逆	吹	逆	逆	升 2	升 1	充
B	升 1	充	吸	吸	吸	吸	降 1	降 2	顺	逆	逆	逆	吹	逆	逆	升 2
C	逆	升 2	升 1	充	吸	吸	吸	吸	降 1	降 2	顺	逆	逆	逆	吹	逆
D	吹	逆	逆	升 2	升 1	充	吸	吸	吸	吸	降 1	降 2	顺	逆	逆	逆
E	逆	逆	吹	逆	逆	升 2	升 1	充	吸	吸	吸	吸	降 1	降 2	顺	逆
F	顺	逆	逆	逆	吹	逆	逆	升 2	升 1	充	吸	吸	吸	吸	降 1	降 2
G	降 1	降 2	顺	逆	逆	逆	吹	逆	逆	升 2	升 1	充	吸	吸	吸	吸
H	吸	吸	降 1	降 2	顺	逆	逆	逆	吹	逆	逆	升 2	升 1	充	吸	吸

5 下面以具体实施例的方式更详细地说明本发明的快周期变压吸附方法，应了解的是，
实施例仅为示例性的，本发明并不以此为限。

 实施例一（特定温度为 25℃）

 对于吸附质 N₂ 来说，表 1 中的三种吸附剂（分子筛 1、分子筛 2、活性炭 1）对应的
最短时间小于 15.10s，故三种吸附剂均符合初选条件。再从三种吸附剂中筛选斜率与
10 吸附量的乘积最大的分子筛 1（如表 2 所示），将其确定为目标吸附剂。

 实施例二（特定温度为 20℃）

 本实施例中，原料气的组成（体积分数）为氮气 1%，甲烷 8%和氢气 91%，压力为
2MPa，温度为 20℃，流量为 1000Nm³/h。目标是采用变压吸附工艺从该原料气中提纯
制取氢气产品（氢气纯度：99.999%）。

15 本实施例中提纯工艺确定为典型 10-3-4 流程，即 10 个吸附塔，3 塔同时吸附，4 次
均压流程，收率保持 85%不变，物料平衡如表 4 所示。根据本发明的快周期变压吸附方
法，测定吸附剂对两种吸附质（氮气和甲烷）的吸附等温线与解吸等温线，及其对应的
斜率曲线。表 5 所示的三种吸附剂可实现常温快周期变压吸附过程。

表 4 物料平衡

物流名称	原料	氢气产品	尾气
流量 (Nm³/h)	1000	770	230
压力 (MPa)	2.00	1.95	0.02
温度 (°C)	20	20	20
	(体积分数)		
组分	原料	产品	尾气
H ₂	91×10 ⁻²	99.999×10 ⁻²	60.97×10 ⁻
CH ₄	8×10 ⁻²	1×10 ⁻⁶	34.69×10 ⁻
N ₂	1×10 ⁻²	9×10 ⁻⁶	4.33×10 ⁻²
总计	100.0	100.0	100.0
收率 (%)	85		

表 5 三种吸附剂的测定结果

吸附剂种类	对氮气初始点斜率	0.1MPa 氮气吸附量	对甲烷初始点斜率	0.1MPa 甲烷吸附量
分子筛 1	9	9ml/g	16	13 ml/g
分子筛 2	18	13 ml/g	38	20 ml/g
活性炭 1	7	7 ml/g	29	20 ml/g

根据上述吸附剂测定结果，可以采用一种吸附剂实现对上述原料气的提纯制取氢气，也可以采用吸附剂级配的方法实现氢气提纯。对于氮气，三种吸附剂的吸附时间均小于 15.10s（或者斜率均小于 24），故均满足初选条件；再选择斜率与吸附量最大的分子筛 2 确定为目标吸附剂。对于甲烷，分子筛 1 的吸附时间小于 15.10s（或者斜率小于 24），故将分子筛 1 确定为目标吸附剂。并且，由于分子筛 2 的斜率更大，故将其所对应的最短时间 8s 确定为变压吸附的每个分解步序的最短时间，由此可确定吸附周期约为 2.7min。选择不同的吸附剂，吸附周期与吸附塔体积之间的关系，如表 6 所示。

10 表 6 目标吸附剂装填方案的适用吸附周期及吸附塔体积

序号	吸附剂装填方案	吸附周期/min	吸附塔体积	吸附率
1	分子筛 2+分子筛 1	2.7	0.12	100%
2 (现有技术)	分子筛 1	10	0.35	100%

吸附剂装填方案 1 采用分子筛 2 和分子筛 1 组成的级配床层，甲烷的分子量大于氮气的分子量，因此吸附剂级配装填时，满足原料气先经分子筛 1 吸附甲烷，再经分子筛 2 吸附氮气。虽然吸附周期由吸附等温线初始点斜率最大的吸附剂决定，但是，活性炭床层可以保证将甲烷吸附完全，并不带入分子筛床层中，从而使两种吸附剂的作用均发挥到最大，吸附周期优选 2.7min。该级配方案兼顾了吸附周期、吸附剂对吸附质的吸附

量，发挥了每种吸附剂针对不同吸附质的特性，可以实现最优的级配工艺与操作周期，同时，实现了吸附塔体积最小。

综上所述，本发明创造性地根据所述的吸附剂的选择方法，选择用于吸附一个或多个目标吸附质的目标吸附剂，然后采用所述目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行特定温度下的变压吸附，由此，可通过减少吸附剂的用量与优化变压吸附周期来降低变压吸附运行与生产成本。

本发明一实施例还提供一种吸附剂的选择系统，所述选择系统包括：存储器，用于存储多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线；以及处理器，被配置为执行以下操作：获取所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率，其中，所述吸附等温线为在特定温度下吸附量随压力变化的曲线；获取在所述特定温度与特定压力下的所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附量；以及根据所述每个吸附剂的斜率与吸附量，从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂。

有关本发明提供的吸附剂的选择系统的具体细节及益处可参阅上述针对吸附剂的选择方法的描述，于此不再赘述。

本发明一实施例还提供一种变压吸附系统，所述变压吸附系统包括：根据所述的吸附剂的选择系统，用于选择用于吸附一个或多个目标吸附质的目标吸附剂；以及吸附装置，用于采用所述目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行特定温度下的变压吸附。

有关本发明提供的变压吸附系统的具体细节及益处可参阅上述针对变压吸附方法的描述，于此不再赘述。

本发明一实施例还提供一种计算机可读存储介质，所述计算机可读存储介质上存储有计算机程序，该计算机程序被处理器执行时实现上述的吸附剂的选择方法和/或上述的变压吸附方法。

以上结合附图详细描述了本发明实施例的可选实施方式，但是，本发明实施例并不限于上述实施方式中的具体细节，在本发明实施例的技术构思范围内，可以对本发明实施例的技术方案进行多种简单变型，这些简单变型均属于本发明实施例的保护范围。

另外需要说明的是，在上述具体实施方式中所描述的各个具体技术特征，在不矛盾的情况下，可以通过任何合适的方式进行组合。为了避免不必要的重复，本发明实施例对各种可能的组合方式不再另行说明。

本领域技术人员可以理解实现上述实施例方法中的全部或部分步骤是可以通程序来指令相关的硬件来完成，该程序存储在一个存储介质中，包括若干指令用以使得单片机、芯片或处理器（processor）执行本申请各个实施例所述方法的全部或部分步骤。而前述的存储介质包括：U 盘、移动硬盘、只读存储器（ROM，Read-Only Memory）、随机存取存储器（RAM，Random Access Memory）、磁碟或者光盘等各种可以存储程序

代码的介质。

此外，本发明实施例的各种不同的实施方式之间也可以进行任意组合，只要其不违背本发明实施例的思想，其同样应当视为本发明实施例所公开的内容。

权利要求

- 1、一种吸附剂的选择方法，其特征在于，所述选择方法包括：

获取多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率，
其中，所述吸附等温线为在特定温度下吸附量随压力变化的曲线；

5 获取在所述特定温度与特定压力下的所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附量；
以及
根据所述每个吸附剂的斜率与吸附量，从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标
吸附质的目标吸附剂。
- 10 2、根据权利要求 1 所述的选择方法，其特征在于，所述从所述多个吸附剂中选择
用于吸附所述目标吸附质的目标吸附剂包括：

根据所述每个吸附剂的斜率，确定在所述每个吸附剂的变压吸附的循环周期中的每
个分解步序的最短时间；
根据所确定的最短时间，从所述多个吸附剂中选择特定吸附剂，其中，所述特定吸
15 附剂所对应的最短时间小于或等于预设时间；
确定所述特定吸附剂的斜率与吸附量的乘积；以及
将与最大乘积相对应的吸附剂选择为所述目标吸附剂。
- 20 3、根据权利要求 2 所述的选择方法，其特征在于，所述确定在所述每个吸附剂的
变压吸附的循环周期中的每个分解步序的最短时间包括：

在一吸附剂的斜率大于第一斜率且小于或等于第二斜率的情况下，与该吸附剂所对
应的最短时间大于或等于第一最短时间；
在一吸附剂的斜率大于所述第二斜率且小于或等于第三斜率的情况下，与该吸附剂
所对应的最短时间大于或等于第二最短时间；
25 在一吸附剂的斜率大于所述第三斜率且小于或等于第四斜率的情况下，与该吸附剂
所对应的最短时间大于或等于第三最短时间；或者
在一吸附剂的斜率大于所述第四斜率且小于或等于第五斜率的情况下，与该吸附剂
所对应的最短时间大于或等于第四最短时间，
其中，所述第一斜率、所述第二斜率、所述第三斜率、所述第四斜率以及所述第五
30 斜率逐渐增大；以及所述第一最短时间、所述第二最短时间、所述第三最短时间以及所

述第四最短时间逐渐增大。

- 4、根据权利要求 3 所述的选择方法，其特征在于，在所述第一斜率为 1、所述第二斜率为 10、所述第三斜率为 20、所述第四斜率为 30 且所述第五斜率为 50 的情况下，
- 5 所述第一最短时间为 0.05s、所述第二最短时间为 3s、所述第三最短时间为 9s 且所述第四最短时间为 24s。

5、根据权利要求 2 所述的选择方法，其特征在于，所述确定在所述每个吸附剂的变压吸附的循环周期中的每个分解步序的最短时间 t 包括：

10
$$t = \frac{-40}{1+e^{(k_0-27)/6}} + T,$$

其中， T 为预设最长步序时间，单位为 s；以及 k_0 为所述每个吸附剂的斜率。

6、根据权利要求 5 所述的选择方法，其特征在于， T 小于或等于 40。

- 15 7、根据权利要求 2-6 中任一项所述的选择方法，其特征在于，所述变压吸附方法还包括：

将所述目标吸附剂所对应的最短时间确定为吸附时间；以及

根据在所述吸附时间内引入吸附塔的所述目标吸附质的量以及所述目标吸附剂的吸附量，确定所述目标吸附剂的量。

20

8、根据权利要求 1-6 中任一项所述的选择方法，其特征在于，所述获取多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率的步骤在满足预设前提条件下被执行，

- 25 其中，所述预设前提条件包括：在各个压力处，所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附等温线与解吸等温线的吸附量之差的绝对值小于或等于吸附等温线的吸附量的预设比例。

- 9、根据权利要求 8 所述的选择方法，其特征在于，所述预设前提条件还包括：在各个压力处，所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附等温线的吸附量小于或等于解吸等温线的吸附量，
- 30

其中，所述解吸等温线为在所述特定温度下解吸量随压力变化的曲线。

10、根据权利要求 1-6 中任一项所述的选择方法，其特征在于，所述特定温度为 10°C~40°C。

5

11、根据权利要求 1-6 中任一项所述的选择方法，其特征在于，所述初始压力小于或等于 10kPa。

12、根据权利要求 1-6 中任一项所述的选择方法，其特征在于，所述吸附剂选自：
10 微孔分子筛；MOFs；碳分子筛；；硅胶。

13、一种变压吸附方法，其特征在于，所述变压吸附方法包括：

根据权利要求 1-12 中任一项所述的吸附剂的选择方法，选择用于吸附一个或多个目标吸附质的目标吸附剂；以及

15 采用所述目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行特定温度下的变压吸附。

14、根据权利要求 13 所述的变压吸附方法，其特征在于，所述变压吸附方法还包括：

20 在所述目标吸附剂的吸附等温线在初始压力点处的斜率大于第一预设斜率且小于或等于第二预设斜率的情况下，采用集成旋转阀控制变压吸附的工艺时序；或者

在所述目标吸附剂的吸附等温线在初始压力点处的斜率大于所述第二预设斜率且小于或等于第三预设斜率时，采用程控阀控制变压吸附的工艺时序。

15、根据权利要求 13 或 14 所述的变压吸附方法，其特征在于，在所述目标吸附剂
25 为多个目标吸附剂的情况下，所述变压吸附方法还包括：对所述多个目标吸附剂进行级配，

所述采用所述目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行特定温度下的变压吸附包括：采用级配后的所述多个目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行所述特定温度下的变压吸附。

30

16、根据权利要求 15 所述的变压吸附方法，其特征在于，所述变压吸附方法还包

括：

根据所述多个目标吸附剂中的具有吸附等温线在初始压力处的最大斜率的吸附剂的斜率，设置变压吸附的循环周期中的每个分解步序的最短时间。

- 5 17、一种吸附剂的选择系统，其特征在于，所述选择系统包括：
存储器，用于存储多个吸附剂中的每个吸附剂对目标吸附质的吸附等温线；以及
处理器，被配置为执行以下操作：
获取所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附等温线在初始压力处的斜率，其中，
所述吸附等温线为在特定温度下吸附量随压力变化的曲线；
- 10 获取在所述特定温度与特定压力下的所述每个吸附剂对所述目标吸附质的吸附量；
以及
根据所述每个吸附剂的斜率与吸附量，从所述多个吸附剂中选择用于吸附所述目标
吸附质的目标吸附剂。
- 15 18、一种变压吸附系统，其特征在于，所述变压吸附系统包括：
根据权利要求 17 所述的吸附剂的选择系统，用于选择用于吸附一个或多个目标吸
附质的目标吸附剂；以及
吸附装置，用于采用所述目标吸附剂对所述一个或多个目标吸附质进行特定温度下
的变压吸附。
- 20 19、一种计算机可读存储介质，其特征在于，所述计算机可读存储介质上存储有计
算机程序，该计算机程序被处理器执行时实现上述权利要求 1-12 中任一项所述的吸附
剂的选择方法和/或上述权利要求 13-16 中任一项所述的变压吸附方法。