

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГАЗОВ В ЗАДАЧЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАГРЕВАТЕЛЬНОЙ ПЕЧИ С РЕГЕНЕРАТОРАМИ

*Достоверность моделирования тепловой работы печных агрегатов зависит от правильности определения теплофизических свойств газов и их смесей. В работе приведена методика расчёта вязкости, теплоёмкости, коэффициента диффузии и теплопроводности печных газов применительно к математической модели нагревательной печи с регенераторами.*

*Ключевые слова: математическое моделирование, расчёт, теплофизические свойства.*

### Введение

Математическое моделирование сегодня является основным инструментом конструирования печных агрегатов. Разработке проектных решений, выполнению рабочих чертежей и другим традиционным этапам проектирования всегда предшествуют численные исследования и расчёты печных процессов. Сложные математические модели печных агрегатов всё активнее вытесняют эксперимент, который необходим при проверке адекватности расчётов натурным объектам и исследовании сложных многопараметрических процессов.

### Математическая модель нагревательной печи с регенераторами

Модель разработана на кафедре теплотехники и экологии металлургических печей НМетАУ и реализована в виде комплекса программ для исследования совмещённых процессов горения топлива, движения газов и теплообмена. Для расчёта поля скоростей в модели используются уравнения Навье – Стокса и неразрывности. Обобщенное дифференциальное уравнение движения газа для трёх направлений и уравнение неразрывности запишется в виде:

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial\tau} + \frac{\partial(\rho U\phi)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho V\phi)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho W\phi)}{\partial z} = \text{div}(\Gamma_{\phi} \text{grad } \phi) + S_{\phi} + S_P. \quad (1)$$

Турбулентность движения газов учитывается с помощью двух-параметрической  $k-\varepsilon$  модели в RNG-модификации. В модели решается уравнение энергии для смеси печных газов (2) с соответствующими краевыми условиями:

$$\frac{\partial(\rho CT)}{\partial \tau} + \frac{\partial(\rho CTU)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho CTV)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho CTW)}{\partial z} = \text{div}(\lambda_f \text{grad} T) + Q_R + Q_F. \quad (2)$$

На поверхностях нагреваемого металла задаётся закон теплообмена, связывающий модель с внутренней задачей нагрева. Для случая турбулентного движения конвективный тепловой поток рассчитывается как

$$q_w = \frac{\rho C v_\tau (T_\delta - T_w)}{T^+}. \quad (3)$$

Для описания оптических свойств и расчёта излучения селективных неизотермических печных газов принята модель взвешенной суммы серых газов Х. Хоттеля (WSGGM). Объемная плотность лучистого теплового потока в газе для формулы (2) находится как

$$Q_R = \sum_{n=1}^N k_n \left( 4a_n \sigma_0 T^4 - \int_{4\pi} I_n d\Omega \right). \quad (4)$$

Горение предполагается с бесконечной скоростью протекания реакций и с учётом турбулентности согласно Eddy Break-Up – модели разрушения вихрей Д.Б. Сполдинга. Скорость протекания химических реакций при турбулентном движении:

$$S_{fu} = -\rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left( C_R m_{fu}, C_R \frac{m_{ox}}{s}, C'_R \frac{m_{pr}}{1+s} \right). \quad (5)$$

Для решения уравнений движения, турбулентности, энергии и горения, используется метод контрольного объема. Уравнение переноса излучения газа совместно с моделью WSGGM решается с помощью метода дискретных ординат. Решение всех уравнений комплекса моделей осуществляется последовательно на одной прямоугольной сетке, кроме уравнения движения, для которого вводятся дополнительные узлы сетки. В них определяются компоненты вектора скорости. Для получения стойкого решения всех уравнений используется нижняя релаксация. Критерием сходимости при решении уравнения движения служит невязка уравнения неразрывности для расчетной области, а для уравнения энергии используется невязка теплового баланса.

Более подробно математическая модель нагревательной печи с высокотемпературным подогревом воздуха в регенераторах и обозначения величин, входящих в уравнения (1)-(5) приведены в статье [1].

Для получения корректных решений с помощью математического моделирования необходимо задание физических свойств газовых смесей (динамической вязкости, теплопроводности, теплоемкости, диффузии, плотности и др.) в зависимости от их температуры и состава. В настоящей работе приведены сведения о методике определения теплофизических свойств газов, принятой в математической модели.

#### Динамическая вязкость газов и их смесей

Динамическая вязкость элементарных газов может быть определена в рамках кинетической теории газов Чэпмена и Энскога по уравнению [2]:

$$\mu = \frac{2,6693 \cdot 10^{-5} \cdot \sqrt{MT}}{\sigma^2 \cdot \Omega_v}, \quad (6)$$

где  $\mu$  – динамическая вязкость, Па·с;  $M$  – молекулярная масса газа, кг/кмоль;  $T$  – температура газа, К;  $\sigma$  – характеристическая длина, Å;  $\Omega_v$  – интеграл столкновений, учитывающий межмолекулярное взаимодействие и зависящий от потенциальных функций Леннарда – Джонса для неполярных газов и Штокмайера для полярных газов.

Интеграл столкновений зависит от безразмерной температуры  $T^* = kT/\varepsilon_0$ . Величины  $\varepsilon_0/k$  и  $\sigma$  являются параметрами потенциальной функции Леннарда – Джонса и для элементарных печных газов приведены в табл. 1.

Зависимость интеграла столкновений от безразмерной температуры можно представить в виде аппроксимации, предложенной Нойфельдом для неполярных газов [3]:

$$\Omega_v = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(D \cdot T^*)} + \frac{E}{\exp(F \cdot T^*)}, \quad (7)$$

где  $A=1,16145$ ,  $B=0,14874$ ,  $C=0,52487$ ,  $D=0,7732$ ,  $E=2,16178$ ,  $F=2,43787$ .

Для полярных газов используется метод Брокау:

$$\Omega_{v,Sh} = \Omega_{v,LD} + \frac{0,2 \cdot \delta^2}{T^*}, \quad (8)$$

где  $\Omega_{v,Sh}$  - интеграл столкновений, определенный на основе констант потенциала Штокмайера;  $\Omega_{v,LD}$  - интеграл столкновений, определенный на основе констант потенциала Леннарда-Джонса, рассчитываемый по формуле (7).

Расчетные значения вязкости элементарных газов  $\mu \cdot 10^{-6}$  в зависимости от температуры приведены в табл. 2.

Таблица 1

Параметры потенциальной функции Леннарда – Джонса  
для элементарных печных газов [4]

№, П/П	Газ	$M$ , кг/кмоль	$\varepsilon_0/k$ , К	$\sigma$ , Å
1	Водород ( $H_2$ )	2,016	59,7	2,827
2	Азот ( $N_2$ )	28,016	71,4	3,798
3	Кислород ( $O_2$ )	32,000	106,7	3,467
4	Окись углерода ( $CO$ )	28,01	91,7	3,69
5	Диоксид углерода ( $CO_2$ )	44,01	195,2	3,941
6	Водяной пар ( $H_2O$ )	18,02	485,25	3,437
7	Метан ( $CH_4$ )	16,04	148,6	3,758
8	Этилен ( $C_2H_4$ )	28,05	224,7	4,163
9	Этан ( $C_2H_6$ )	30,07	215,7	4,443
10	Пропан ( $C_3H_8$ )	44,09	237,1	5,118
11	Бутан ( $C_4H_{10}$ )	58,12	531,4	4,687

Таблица 2

Значение коэффициента динамической вязкости газов в газовой смеси

№, П/П	Газ	Вязкость газов $\mu$ в зависимости от температуры, Па·с, $10^6$			
		300	800	1300	1800
1	Водород ( $H_2$ )	8,89	16,99	23,28	28,76
2	Азот ( $N_2$ )	8,10	21,47	32,25	41,29
3	Кислород ( $O_2$ )	17,68	34,85	47,79	59,02
4	Окись углерода ( $CO$ )	14,84	33,79	47,66	59,20
5	Диоксид углерода ( $CO_2$ )	17,70	34,17	46,82	57,83
6	Водяной пар ( $H_2O$ )	20,57	41,21	56,57	69,87

№, п/п	Газ	Вязкость газов $\mu$ в зависимости от температуры, Па·с, $10^6$			
		300	800	1300	1800
7	Метан ( $CH_4$ )	11,19	23,47	32,43	40,08
8	Этилен ( $C_2H_4$ )	10,22	23,18	32,66	40,56
9	Этан ( $C_2H_6$ )	8,27	18,98	26,83	33,36
10	Пропан ( $C_3H_8$ )	7,46	19,97	30,33	39,01
11	Бутан ( $C_4H_{10}$ )	8,89	16,99	23,28	28,76

Вязкость газовых смесей (в частности бинарных) может быть больше вязкости любого элементарного газа. Она зависит от состава смеси.

Для смеси, состоящей из  $N$  компонентов, вязкость может быть определена из зависимости

$$\mu_{см} = \sum_{i=1}^N \frac{\mu_i}{1 + \sum_{j=1}^N \phi_{ij} \left( \frac{y_i}{y_j} \right)}. \quad (9)$$

Величина  $\phi_{i,j}$  определяется из выражения:

$$\phi_{i,j} = \frac{\left[ 1 + (\mu_i/\mu_j)^{1/2} (M_j/M_i)^{1/4} \right]^2}{\left\{ 2\sqrt{2} \left[ 1 + (M_i/M_j)^{1/2} \right] \right\}}. \quad (10)$$

### Теплопроводность газов

Теплопроводность элементарных газов может быть определена аппроксимирующими степенными функциями по экспериментальным данным для каждого газа в зависимости от температуры. Аппроксимирующая зависимость может иметь вид:

$$\lambda = A + BT + CT^2 + DT^3, \quad (11)$$

где  $\lambda$  – теплопроводность газа, Вт/(м·К);  $T$  – температура, К;  $A$ ,  $B$ ,  $C$ , и  $D$  – коэффициенты аппроксимации.

Значения коэффициентов аппроксимации для элементарных газов при нормальном давлении приведены в табл. 3.

Теплопроводность газовой смеси может быть рассчитана по следующей зависимости:

$$\lambda_{см} = \frac{\sum_{j=1}^N y_j \cdot \lambda_j}{\sum_{j=1}^N y_j \cdot A_{ij}}, \quad (12)$$

где  $A_{ij} = 1,065 \cdot \phi_{ij}$ .

Таблица 3

Значения коэффициентов аппроксимации  
теплопроводности для газов [5]

№, п/п	Газ	A	B	C	D
1	Водород ( $H_2$ )	$8,099 \cdot 10^{-3}$	$6,689 \cdot 10^{-4}$	$-4,158 \cdot 10^{-7}$	$1,562 \cdot 10^{-10}$
2	Азот ( $N_2$ )	$3,919 \cdot 10^{-4}$	$9,816 \cdot 10^{-5}$	$-5,067 \cdot 10^{-8}$	$1,504 \cdot 10^{-11}$
3	Кислород ( $O_2$ )	$-3,273 \cdot 10^{-4}$	$9,966 \cdot 10^{-5}$	$-3,743 \cdot 10^{-8}$	$9,732 \cdot 10^{-12}$
4	Окись углерода (CO)	$5,067 \cdot 10^{-4}$	$9,125 \cdot 10^{-5}$	$-3,524 \cdot 10^{-8}$	$8,199 \cdot 10^{-12}$
5	Диоксид углеро- да ( $CO_2$ )	$-7,215 \cdot 10^{-3}$	$8,015 \cdot 10^{-5}$	$5,477 \cdot 10^{-9}$	$-1,053 \cdot 10^{-11}$
6	Водяной пар ( $H_2O$ )	$7,341 \cdot 10^{-3}$	$-1,013 \cdot 10^{-5}$	$1,801 \cdot 10^{-7}$	$-9,100 \cdot 10^{-11}$
7	Метан ( $CH_4$ )	$-1,869 \cdot 10^{-3}$	$8,727 \cdot 10^{-5}$	$1,179 \cdot 10^{-7}$	$-3,614 \cdot 10^{-11}$
8	Этилен ( $C_2H_4$ )	$-1,760 \cdot 10^{-2}$	$1,200 \cdot 10^{-4}$	$3,335 \cdot 10^{-8}$	$-1,366 \cdot 10^{-11}$
9	Этан ( $C_2H_6$ )	$-3,174 \cdot 10^{-2}$	$2,201 \cdot 10^{-4}$	$-1,923 \cdot 10^{-7}$	$1,664 \cdot 10^{-10}$
10	Пропан ( $C_3H_8$ )	$1,858 \cdot 10^{-3}$	$-4,698 \cdot 10^{-6}$	$2,177 \cdot 10^{-7}$	$-8,409 \cdot 10^{-11}$
11	Бутан ( $C_4H_{10}$ )	$-1,052 \cdot 10^{-2}$	$5,771 \cdot 10^{-5}$	$1,018 \cdot 10^{-7}$	$-4,271 \cdot 10^{-11}$

### Коэффициент диффузии

Для расчета диффузии компонента газовой смеси в многокомпонентной смеси используется приближенная зависимость:

$$D_{1,m} = \frac{(1 - y_1)}{\sum_{i=2}^N (y_i / D_{1,i})}, \quad (13)$$

где  $D_{1,i}$  – коэффициент бинарной диффузии газа 1 в газе  $i$ ,  $m^2/c$ ;

$y_1, y_i$  – мольная доля 1-го и  $i$ -го компонента.

Значения бинарной диффузии может быть рассчитано на основании потенциала Леннарда – Джонса:

$$D_{1,2} = \frac{1,858 \cdot 10^{-12} \cdot T^{\frac{3}{2}} \cdot \left[ \frac{M_1 + M_2}{M_1 M_2} \right]^{\frac{1}{2}}}{P \cdot \sigma_{1,2}^2 \cdot \Omega_D}, \quad (14)$$

где  $\sigma_{1,2} = 0,5(\sigma_1 + \sigma_2)$  - параметр потенциала Леннарда – Джонса соответствующий параметру  $\sigma$  для элементарного газа;  $P$  - давление газовой смеси, Па;  $\Omega_D$  - интеграл столкновений для диффузии, основанный на потенциале Леннарда – Джонса, значение которого аппроксимировано в работе [3] и имеет вид:

$$\Omega_D = \frac{A}{(T^*)^B} + \frac{C}{\exp(D \cdot T^*)} + \frac{E}{\exp(F \cdot T^*)} + \frac{G}{\exp(H \cdot T^*)}, \quad (15)$$

где  $A=1,06036$ ,  $B=0,1561$ ,  $C=0,193$ ,  $D=0,47635$ ,  $E=1,03587$ ,  $F=1,52996$ ,  $G=1,76474$ ,  $H=3,89411$ .

Для расчета значений  $\Omega_D$  необходимо определить параметр  $T^*$ , где значение  $\varepsilon_{1,2}/k$  рассчитывается по формуле:

$$\frac{\varepsilon_{1,2}}{k} = \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{k k}}. \quad (16)$$

#### Теплоемкость газов

Значение удельной массовой теплоемкости газов при постоянном давлении в зависимости от температуры может быть рассчитано по следующей аппроксимирующей формуле:

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3, \quad (17)$$

где  $C_p$  - удельная массовая теплоемкость, Дж/(кг·К);  $T$  - температура, К;

$A$ ,  $B$ ,  $C$ , и  $D$  – коэффициенты аппроксимации.

Значения постоянных  $A, B, C, D$  для каждого элементарного газа приведены в табл. 4.

Таблица 4

Значения коэффициентов аппроксимации  
теплоемкости для газов [5]

№, п/п	Газ	$A$	$B$	$C$	$D$
1	Водород ( $H_2$ )	$1,346 \cdot 10^4$	4,6	$-6,850 \cdot 10^{-3}$	$3,792 \cdot 10^{-6}$
2	Азот ( $N_2$ )	$1,112 \cdot 10^3$	$-4,844 \cdot 10^{-1}$	$9,566 \cdot 10^{-4}$	$-4,169 \cdot 10^{-7}$

№, п/п	Газ	A	B	C	D
3	Кислород ( $O_2$ )	$8,784 \cdot 10^2$	$-1,150 \cdot 10^{-4}$	$5,456 \cdot 10^{-4}$	$-3,328 \cdot 10^{-7}$
4	Окись углерода ( $CO$ )	$1,789 \cdot 10^3$	$1,068 \cdot 10^{-1}$	$5,855 \cdot 10^{-4}$	$-1,996 \cdot 10^{-7}$
5	Диоксид углерода ( $CO_2$ )	$1,102 \cdot 10^3$	$-4,588 \cdot 10^{-1}$	$9,957 \cdot 10^{-4}$	$-4,541 \cdot 10^{-7}$
6	Водяной пар ( $H_2O$ )	$4,499 \cdot 10^2$	1,669	$-1,273 \cdot 10^{-3}$	$3,897 \cdot 10^{-7}$
7	Метан ( $CH_4$ )	$1,200 \cdot 10^3$	3,25	$7,463 \cdot 10^{-4}$	$-7,057 \cdot 10^{-7}$
8	Этилен ( $C_2H_4$ )	$1,357 \cdot 10^2$	5,583	$-2,976 \cdot 10^{-3}$	$6,257 \cdot 10^{-7}$
9	Этан ( $C_2H_6$ )	$1,799 \cdot 10^2$	5,923	$-1,741 \cdot 10^{-3}$	$-6,378 \cdot 10^{-8}$
10	Пропан ( $C_3H_8$ )	$9,580 \cdot 10^1$	6,947	$-3,597 \cdot 10^{-3}$	$7,292 \cdot 10^{-7}$
11	Бутан ( $C_4H_{10}$ )	$1,632 \cdot 10^2$	5,7	$-1,906 \cdot 10^{-3}$	$-4,855 \cdot 10^{-8}$

Теплоемкость смеси газов рассчитывается по правилу аддитивности по известной массовой доле газов.

#### Выводы

Корректное определение теплофизических свойств газов в задаче математического моделирования нагревательной печи с регенераторами позволило выполнить ряд расчётов, достоверность которых подтверждена практикой [1]. Математическая модель нагревательной печи с высокотемпературным подогревом воздуха в регенераторах может быть использована для проектирования новых и реконструкции существующих топливных печей, выбора эффективных режимов их работы с целью высокого качества нагрева металла.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ерёмин А. О. Применение численных методов математического моделирования при разработке современной конструкции промышленных печей и их элементов / А. О. Ерёмин // Технічна теплофізика та промислова теплоенергетика: зб. наук. пр. – Дніпропетровськ : Нова ідеологія. – 2012. – Вип. 4. – С. 97–116.
2. Joseph O. Hirschfelder. Molecular Theory of Gases and Liquids / Joseph O. Hirschfelder, Charles Francis Curtiss, Robert Byron Bird. – New York, John Wiley & Sons, Inc., 1954. – 1249 p.
3. Neufeld P. D., Janzen A. R., Aziz R. A. Empirical equations to calculate 16 of the transport collision integrals for the Lennard-Jones (12-6) potential // J. Chem. Phys. – 1972. – Vol. 57. – 1100 p.
4. Svehla R.A. Estimated viscosities and thermal conductivity of gases at high temperatures NASA Tech. Rep. NR-132, 1962, – 115p.
5. Reid R. C., Prausnitz J. M., Poling B. E. The properties of gases and liquids (4 ed.), 1987. – 753 p.