

# 基于窄带模型的新灰气体加权和模型关联式

聂宇宏

(广州航海学院 船舶工程学院 广东 广州 510725)

摘要: 基于窄带模型计算得到了不同 H<sub>2</sub>O 和 CO<sub>2</sub> 的摩尔比、不同温度、不同行程下的总黑度, 以此为基础, 提出了可用于富氧燃烧条件下气体辐射换热计算的新的灰气体加权和模型关联式。该关联式中, 灰气体的吸收系数和权值均是气体温度以及 H<sub>2</sub>O 和 CO<sub>2</sub> 的摩尔比的函数, 而在传统的灰气体加权和模型中气体的灰吸收系数为定值。新的关系式可以提高灰气体加权和模型的准确性, 与用统计窄带模型计算得到的总黑度相比, 最大相对误差在 5% 以内。

关键词: 窄带模型; 灰气体加权和; 关联式; 摩尔比; 温度

中图分类号: TK224 文献标识码: A

DOI: 10.16146/j.cnki.rndlgc.2016.11.010

## 引言

在高温炉膛内, 辐射换热占总换热量的 90% 以上, 所以介质参与的辐射特性研究近年来一直受到重视, 由于参与介质中的 CO<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O 的非灰辐射特性, 使得辐射特性的计算十分困难, 经过近几十年的努力, 出现了各种模型, 其中的 WSGGM (灰气体加权和模型) 是最常用的整体模型, 其模型参数 (灰吸收系数和相应的权值) 可以由逐线计算的光谱数据获得<sup>[1]</sup>, 也可以由窄带和宽带模型数据获得<sup>[2-3]</sup>, 这样, WSGGM 就可以很容易地用于各种辐射传递方程的解法, 并能获得任意的精度。

由于 WSGGM 的相关参数是温度、压力和组分的非线性函数, 它们的确定是 WSGGM 的关键和难点。燃用不同的燃料, 产物中 CO<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O 的比例不同, Smith 等人提出的关联式只能用于燃油和燃气的产物<sup>[4]</sup>, 近年来提出的富氧燃烧技术, 由于不同的循环方式, 烟气中 CO<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O 的比例更加复杂, 为此, 有一些研究者提出了一些新的 WSGGM 关联式<sup>[5-6]</sup>, 然而, 这些研究都缺少确定这些参数的详细过程, 并且关联式中只将吸收数表达为 H<sub>2</sub>O 和 CO<sub>2</sub> 摩尔比的函数, 并不随温度而变化, 本文的研究表

明, 吸收系数不随温度而变的表达方式引起的误差较大, 所以提出了吸收系数随温度而变的新 WSGGM 关联式。

## 1 统计窄带模型

为了获得准确的 WSGGM 关联式, 需要计算不同条件下大量的 H<sub>2</sub>O 和 CO<sub>2</sub> 混合气体总黑度值, 本文的研究中用统计窄带模型计算这些黑度。

在统计窄带模型中, 将气体的辐射光谱分为许多带, 在每一宽度为  $\Delta\eta$  的窄带上, 平均的透射率为

$$\bar{\tau}_\eta = \exp \left[ - \frac{2\bar{\gamma}_\eta}{\bar{\delta}_\eta} \left( \sqrt{1 + \frac{xpl\bar{k}_\eta\bar{\delta}_\eta}{\bar{\gamma}_\eta}} - 1 \right) \right] \quad (1)$$

式中,  $\bar{\tau}_\eta$ —平均透射率;  $p$ —总压力, Pa;  $l$ —射线行程,  $\mu\text{m}$ ;  $x$ —吸收气体组分的摩尔比;  $\bar{k}_\eta$ —平均吸收系数;  $\bar{\delta}_\eta$ —线间距参数;  $\bar{\gamma}_\eta$ —平均线 Lorentz 半宽, H<sub>2</sub>O 和 CO<sub>2</sub> 的平均 Lorentz 线半宽公式, 采用最新的拟合公式<sup>[7]</sup>:

$$\bar{\gamma}_{\eta, \text{H}_2\text{O}} = \frac{p}{p_s} \left\{ 0.462 \frac{T_s}{T} x_{\text{H}_2\text{O}} + \left( \frac{T_s}{T} \right)^{0.5} \times [0.0792(1 - x_{\text{CO}_2} - x_{\text{O}_2}) + 0.106x_{\text{CO}_2} + 0.036x_{\text{O}_2}] \right\} \quad (2)$$

$$\bar{\gamma}_{\eta, \text{CO}_2} = \frac{p}{p_s} \left( \frac{T_s}{T} \right)^{0.7} [0.07x_{\text{CO}_2} + 0.58(1 - x_{\text{CO}_2} - x_{\text{H}_2\text{O}}) + 0.1x_{\text{CO}_2}] \quad (3)$$

式中:  $p_s$ —参考压力, Pa;  $T$ —气体的温度, K;  $T_s$ —参考温度, K。

燃烧产物是 CO<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O 的混合物, 对于气体混合物, 窄带透射率的计算采用:

$$\bar{\tau}_{\eta, \text{mix}} = \bar{\tau}_{\eta, \text{CO}_2} \cdot \bar{\tau}_{\eta, \text{H}_2\text{O}} \quad (4)$$

得到混合物窄带的透射率  $\bar{\tau}_{\eta, \text{mix}}$  后, 气体的总黑

收稿日期: 2015-12-14; 修订日期: 2016-01-20

作者简介: 聂宇宏 (1968-), 女, 河南新安人, 广州航海学院教授。

度为:

$$\epsilon_{tot} = \frac{\pi}{\sigma T^4} \sum_{band} (1 - \bar{\tau}_{\eta, mix}) I_{\eta_b} \Delta\eta \quad (5)$$

式中:  $\epsilon_{tot}$  —总黑度;  $\sigma$  —斯狄芬 - 波尔兹曼常数;  $I_{\eta_b}$  —窄带的黑体辐射强度,  $W/m^2 \cdot sr$ ;  $\Delta\eta$  —窄带的带宽,  $\mu m$ 。

计算中, 在  $50 \sim 10\,000\text{ cm}^{-1}$  的波数区间内, 每一窄带的宽度为  $25\text{ cm}^{-1}$ , 共分为 398 个窄带进行计算, 得到不同温度 ( $400 \sim 2\,600\text{ K}$ )、不同  $H_2O$  和  $CO_2$  摩尔成分比 (用  $MR$  表示:  $MR = H_2O/CO_2 = 0.125 \sim 8$ )、不同压力行程下 ( $0 \sim 60\text{ bar} \cdot m$ ) ( $\text{bar} \cdot m$  是压力行程的单位, 也就是压力与长度的乘积, 辐射的计算多用到这样的单位) 下的混合气体的总黑度。结果如图 1 所示。为了与文献 [6] 中的结果进行比较, 图中还给出了文献中 LBL (逐线计算模型) 的结果。

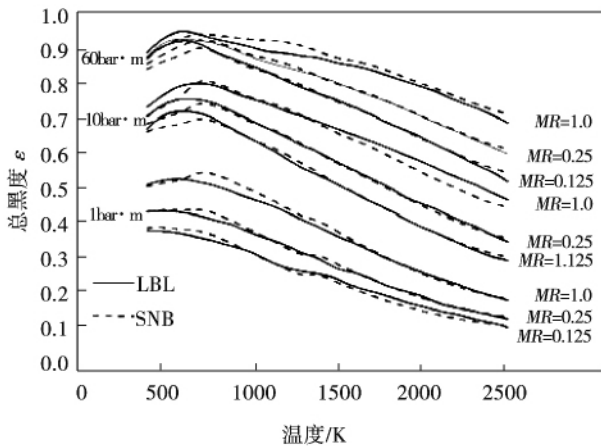


图 1 SNB 计算得到的总发射率与 LBL 的比较

Fig. 1 Comparison of the total emissivity calculated by using the statistical narrow band model with that by using the line-by-line calculation model

从图中可以看出, 就总黑度的计算而言, SNB (统计窄带模型) 计算精度较高,  $400 \sim 700\text{ K}$  之间计算的差别较大, 最高黑度出现的位置、最大值与 LBL 的变化趋势基本吻合, 压力行程中等温度较高 ( $>1\,000\text{ K}$ ) 时, 计算最为准确。在  $1.0\text{ bar} \cdot m$ ,  $MR = 0.125$  时, 误差最大, 最大相对误差为 10.54%, 这主要因为此处的黑度值较小。窄带模型的总黑度计算结果可以作为 WSGGM 的“真实”黑度。

## 2 灰气体加权和模型新关联式

WSGGM 的基本思路是将气体的总黑度  $\epsilon$  表示为  $j$  个灰气体的加权和:

$$\epsilon(T, L) = \sum_{j=0}^J a_j(T) [1 - \exp(-k_j L)] \quad (6)$$

式中: 黑度  $\epsilon(T, L)$  是温度和平均射线行程  $L$  的函数,  $k_j$  和  $a_j(T)$  分别为第  $j$  灰气体的吸收系数和相应的权,  $j=0$  表示吸收系数为 0 的谱带窗口,  $a_j(T)$  是辐射源温度  $T$  的函数。由不同的方法得到  $k_j$  和  $a_j(T)$  后, 就可以将它们引入辐射传递方程, 计算气体介质参与的辐射换热。目前获得  $k_j$  和  $a_j(T)$  最简单的方法是将方程 (6) 与实测或计算的总黑度曲线拟合, 本研究以 SNB 计算得到的黑度作为“真实”黑度, 进行拟合, 得到吸收系数和权值。在以往的文献中, 拟合时将  $k_j$  视为定值, 认为  $k_j$  随温度的变化对计算结果影响很小 [6]。图 2 和图 3 是  $k_j$  不随温度变化时 WSGGM 计算的总黑度与 SNB 比较图。

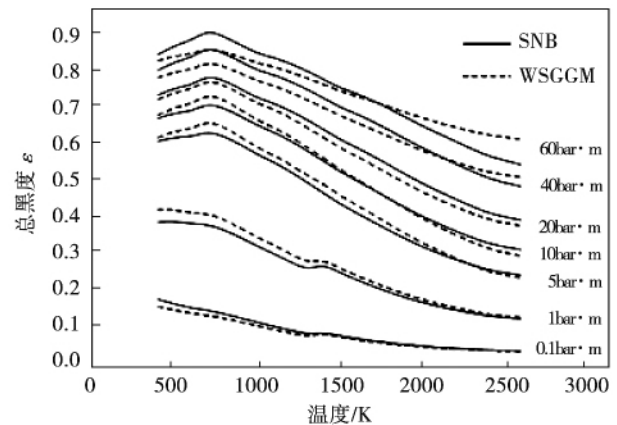


图 2  $MR = 0.125$   $k_j$  为定值时 WSGGM 计算得到的总黑度与 SNB 的比较

Fig. 2 Comparison of the total blackness calculated by using the WSGGM (weighted sum of grey gas) model with that calculated by using the SNB model when  $MR = 0.125$  and  $k_j$  is constant

从图中可以看到,  $k_j$  为定值时的误差较大, 特别是压力行程为  $60\text{ bar} \cdot m$  时, 最大相对误差可达 20% 以上, 所以文献中将  $k_j$  视为定值的思路是错误的。

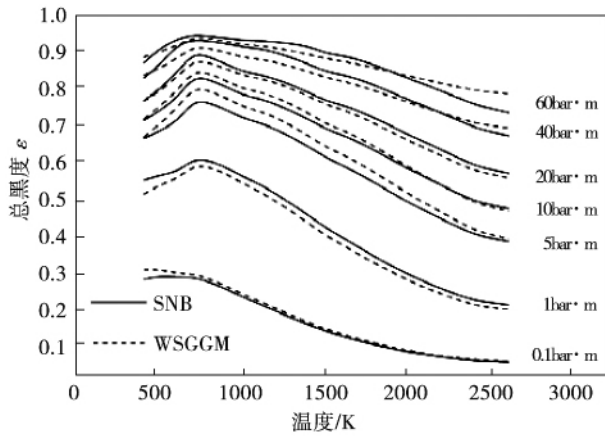


图 3  $MR = 2 k_j$  为定值时 WSGGM 计算得到的总黑度与 SNB 的比较

Fig. 3 Comparison of the total blackness calculated by using the WSGG( weighted sum of grey gases) model with that calculated by using the SNB model when  $MR = 2$  and  $k_j$  is constant

由于 WSGGM 的相关参数是温度、压力和组分的非线性函数, 它们的确定是 WSGGM 的关键和难点。为避免每产生一组黑度数据都要进行优化和拟合计算的麻烦, 一般将  $k_j$  和  $a_j$  表示为  $MR$  和温度的函数。传统的作法是将  $a_j$  表示为温度的函数, 而认为将  $k_j$  随温度的变化可以忽略, 为了提高 WSGGM 模型的准确性, 本研究在将  $k_j$  视为温度的函数的基础上, 提出了新的 WSGGM 关联式, 新关联式将  $a_j$  和  $k_j$  都表示为温度的三次多项式,  $MR$  的二次多项式, 即:

$$k_j = \sum_i b_{ji} (T/T_{ref})^{i-1} \quad (i=3) \quad (7)$$

$$b_{ji} = b1_{ji} + b2_{ji}MR + b3_{ji}MR^2 \quad (8)$$

$$a_j = \sum_i c_{ji} (T/T_{ref})^{i-1} \quad (i=4) \quad (9)$$

$$c_{ji} = c1_{ji} + c2_{ji}MR + c3_{ji}MR^2 \quad (10)$$

式中:  $b, b1, b2, b3, c, c1, c2, c3$  为关联式系数, 通过对 8 个  $MR$ 、10 个压力行程  $PL$ 、23 个温度下计算得到的 1 840 个总黑度的拟合, 得到  $c_{ji}$  和  $b_{ji}$  的值。计算步骤为:

(1) 用 SNB 模型计算温度 400 ~ 2 600 K, 间隔 100 K, 共 23 个温度  $L = 0.01, 0.1, 1.0, 5.0, 10.0, 20.0, 30.0, 40.0, 50.0, 60.0$  m, 共 10 个行程,  $MR = 0.125, 0.25, 0.5, 1.0, 1.25, 1.5, 2.0, 4.0$  共 8 个  $MR$ , 总压为 1 bar 下的黑度, 共计 1 840 个总黑度;

(2) 按优化方法 给出 4 个  $k_j$  的初值  $k_{j0}$  用最小

二乘法与 SNB 计算得到的黑度进行拟合, 得到随温度而变的 4 个  $k_j$  和 4 个  $a_j$ ;

(3) 通过多项目拟合, 得到随温度而变的多项式系数  $b_{ji}, c_{ji}$ , 以及系数  $b1_{ji}, b2_{ji}, b3_{ji}$  和  $c1_{ji}, c2_{ji}, c3_{ji}$ 。

计算结果如表 1 和表 2 所示。

表 1  $b_{ji}$  的计算结果

Tab. 1 Calculation results of  $b_{ji}$

$j$	$i$	$b1_{ji}$	$b2_{ji}$	$b3_{ji}$
1	1	82.126 1	0.021 34	0.016 96
1	2	6.384 7	1.277 36	-1.562 43
1	3	0.016 5	0.608 64	0.464 12
1	4	0.009 12	0.027 30	0.026 07
2	1	75.821 2	-0.061 75	0.044 33
2	2	5.219 75	1.567 79	-1.304 09
2	3	0.200 11	0.125 76	0.034 23
2	4	0.017 69	0.042 61	-0.029 14
3	1	68.114 8	-0.101 47	0.079 48
3	2	3.328 64	3.036 43	-2.239 10
3	3	0.341 07	-0.571 45	0.496 59
3	4	0.015 43	0.024 28	-0.027 201
4	1	59.448 2	-0.128 31	0.093 94
4	2	2.823 35	3.143 31	-2.355 47
4	3	0.517 19	-0.944 05	0.913 71
4	4	0.014 67	0.028 31	-0.026 31

表 2  $c_{ji}$  的计算结果

Tab. 2 Calculation results of  $c_{ji}$

$j$	$i$	$c1_{ji}$	$c2_{ji}$	$c3_{ji}$
1	1	0.074 79	0.037 69	0.041 29
1	2	0.414 54	0.306 37	0.258 62
1	3	0.311 55	0.288 64	0.367 49
1	4	0.318 12	0.304 30	0.306 60
2	1	0.072 12	0.062 75	0.054 33
2	2	0.302 18	0.322 69	0.310 35
2	3	0.268 11	0.292 74	0.360 23
2	4	0.317 59	0.300 82	0.291 94
3	1	0.134 80	0.111 47	0.098 48
3	2	0.338 64	0.346 43	0.368 00
3	3	0.211 07	0.261 42	0.276 51
3	4	0.321 50	0.289 19	0.265 01
4	1	0.151 82	0.124 31	0.103 40
4	2	0.313 35	0.363 31	0.345 47
4	3	0.227 16	0.194 07	0.207 22
4	4	0.324 67	0.294 31	0.253 91

### 3 新关联式验证

为验证新关联式的准确性,将表 1 和表 2 中的数据用于  $MR = 0.125$  和  $MR = 1$  时烟气总黑度的计算,结果如图 4 和图 5 所示。

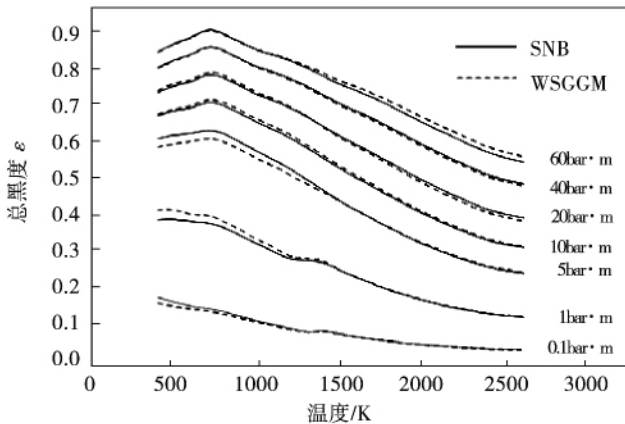


图 4  $MR = 0.125$  新关联式计算的不同压力行程下 WSGGM 的总发射率与 SNB 的比较  
Fig. 4 Comparison of the total emissivity calculated by using the new WSGGM correlation formula with that calculated by using the SNB model at various pressures and travelling distances when  $MR = 0.125$

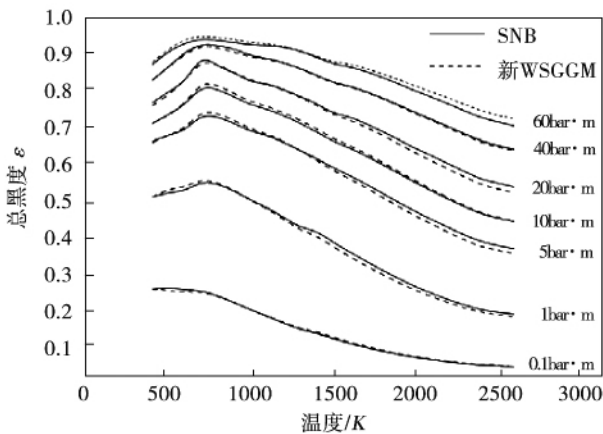


图 5  $MR = 1$  新关联式计算的不同压力行程下 WSGGM 的总发射率与 SNB 的比较  
Fig. 5 Comparison of the total emissivity calculated by using the new WSGGM correlation formula with that calculated by using the SNB model at various pressures and travelling distances when  $MR = 1$

从图 4 和图 5 中可以看到,与  $k_j$  为定值的结果相比, $k_j$  为温度的函数时,WSGGM 关联式的结果更

准确,最大相对误差在 5% 以内。

### 4 结 论

(1) 为方便工程应用,将 SNB 模型计算得到的黑度作为“真实黑度”,用 WSGGM 模型计算气体的辐射特性。用 4 个灰气体的  $k_j$  和  $a_j$  表示气体的辐射特性,将它们表达为  $MR$  和温度的函数,得到新的表达式和参数值,既保证计算精度,又方便工程应用。

(2) 在传统的 WSGGM 关联式中,将吸收系数  $k_j$  视为不随温度而变的方法是的,本文提出的新关系式可以提高 WSGGM 的准确性,与 SNB 计算得到的黑度相比,最大相对误差在 5% 以内。在富氧燃烧中, $N_2$  被干烟气中的  $CO_2$  或者湿烟气中的  $CO_2 / H_2O$  所代替。采用干烟气再循环时  $MR = 0.125$ ,采用湿烟气循环时  $MR = 1$ ,都在本文的研究范围内。

### 参考文献:

[1] Mohammad Hadi Bordbar ,Gabriel WeceI ,Timo Hyppanen. A line by line based weighted sum of gray gases model for inhomogeneous  $CO_2 - H_2O$  mixture in oxy-fired combustion [J]. Combustion and Flame 2014 ,161 :2435 - 2445.

[2] Robert Johansson ,Bo Leckner ,Klas Andersson ,Filip Johnsson. Account for variations in the  $H_2O$  to  $CO_2$  molar ratio when modelling gaseous radiative heat transfer with the weighted-sum-of-grey-gases model[J]. Combustion and Flame 2011 ,158 :893 - 901.

[3] Chungen ,Yin ,Lars C R ,Johansen ,Lasse A Rosendahl ,Soren K Kar. New weighted sum of gray gases model applicable to computational fluid dynamics (CFD) modeling of oxy-fuel combustion: derivation ,validation and implementation [J]. Energy & Fuel 2010 , 24 :6275 - 6282.

[4] T F Smith ,Z F Shen ,J N Friedman. Evaluation of coefficient for the weighted sum of gray gases model [J]. ASME Journal of Heat Transfer ,1982 ,104 :602 - 608.

[5] Leonardo J Dorigon ,Gustavo Dustavo ,Rogerio Brittes ,Fabiano Cassol ,Marcelo Galarca ,Francis H R Franca. WSGG correlations based on HITEMP2010 for computation of thermal radiation in non- isothermal ,non-homogeneous  $H_2 O/CO_2$  mostures [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer 2013 ,64 : 863 - 873.

[6] Tanin Kangwanpongpan ,Francis H R Franca ,Rodrigo Correa da Silva ,Paulo Smith Svneider ,Hans Joachim Krautz. New correlations for the weighted-sum-of-gray-gases- model in oxy-fuel conditions based on HITEMP 2010 database [J]. International Journal of Heat Mass Transfer 2012 ,55 :7419 - 7433.

[7] Philippe Riviere ,Anouar Soufiani. Updated band model parameters for  $H_2 O ,CO_2 ,CH_4$  and  $CO$  radiation at high temperature [J]. International Journal of Heat Mass Transfer 2012 ,55 :3349 - 3358.

(刘 瑶 编辑)

will increase with an increase of the seawater temperature. **Key words**: seawater-caused foul , metal material , seawater temperature , influencing factor , experimental study

**基于窄带模型的新灰气体加权和模型关联式 = New Weighted Sum of Grey Gases Model Correlation Formula Based on Statistical Narrow Band Model [刊 汉]** /NIE Yu-hong ( School of Marine Engineering , Guangzhou Maritime University ,Guangzhou , China , Post Code: 510725) //Journal of Engineering for Thermal Energy & Power. -2016 ,31(11). -55 ~58

On the basis of various  $H_2O$  and  $CO_2$  molar ratios and total blackness at various temperature and travelling distances calculated by using a narrow band model , proposed was a new weighted sum of grey gases model correlation formula for calculating the heat quantity exchanged in radiation from gases under the condition of oxygen-enriched combustion. In the above-mentioned correlation formula , both grey gas absorption coefficient and the weighted value are a function of the gas temperature and the molar ratio between the  $H_2O$  and  $CO_2$  , however , in the traditional grey gas weight sum model , the grey gas absorption coefficient is a constant. The new correlation formula can enhance the accuracy of the grey gas weight sum model and compared with the total blackness obtained by using the statistical narrow band model , the maximal relative error is within 5% . **Key words**: narrow band model , grey gas weight sum , correlation formula , molar ratio , temperature

**燃煤飞灰碳质颗粒与水相互作用的模拟研究 = Study of the Simulation of the Interaction Between Water and Carbon-contained Particles in Flying Ash Produced in Combustion of Coal [刊 汉]** /LV Hai-hua , GUO Xin ( National Key Laboratory on Coal Combustion , Central China University of Science and Technology , Wuhan , China , Post Code: 430074) //Journal of Engineering for Thermal Energy & Power. -2016 ,31(11). -59 ~63

A model for the microporous amorphous carbon atomic configuration was established by using the molecular dynamics melting-quenching method and the adsorption of water-steam in the model was investigated. A model for carbon-contained particles at various initial densities was built and the radial distribution function and pore diameter distribution curves of the carbon-contained particles were calculated respectively. In the meantime , the isotherm of the carbon-contained particles to adsorb water molecules at various initial densities was studied and the influence of the temperature on the carbon-contained particles at a single initial density to adsorb water molecules was also investigated. It has been found that for amorphous carbon-contained particles having a same number of atoms , the greater the initial density , the smaller the probability of a relatively big pore diameter will emerge inside. With an increase of the initial density , the number of water molecules adsorbed by the carbon-contained particles will gradually decrease. At the same time , with an increase of temperature , the number of water molecules adsorbed by the carbon-contained particles will continuously decrease. **Key words**: pulverized coal , molecular dynamics , grand canonical