

УДК 544.6.018.42

РАСЧЕТНАЯ ОЦЕНКА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АЗОТА КАК РАБОЧЕГО ТЕЛА ПОРШНЕВОГО КРИОДВИГАТЕЛЯ. ВЫЧИСЛЕНИЕ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

А. М. Левтеров, канд. техн.
наук

dppp@ipmach.kharkov.ua

ORCID: 0000-0001-5308-1375

К. Р. Умеренкова, канд. техн.
наук

Институт проблем
машиностроения
им. А. Н. Подгорного
НАН Украины,
61046, Украина, г. Харьков,
ул. Пожарского, 2/10

Транспортные средства с двигателями внутреннего сгорания (ДВС), используемые на многих предприятиях или объектах с повышенной пожароопасностью (аэропорты, доки, элеваторы, химические заводы, нефтеперерабатывающие предприятия), могут представлять собой источники воспламенения в силу особенности их технологического (рабочего) цикла. В последнее время внимание создателей транспортных средств привлекают альтернативные двигателям внутреннего сгорания силовые установки (электродвигатели, гибридные силовые установки, а также криодвигатели), которые могут обеспечить, в том числе, и более высокую пожарную безопасность транспорта. Криодвигатели в качестве силовых установок приобретают особое значение для специальных транспортных средств, эксплуатируемых в структуре вышеуказанных пожароопасных объектов. В качестве рабочего тела для криодвигателя может применяться сжиженный азот, а горячим источником для реализации рабочего цикла целесообразно использовать теплоту окружающей среды. Азот является наиболее доступным негорючим газом, поэтому по экономическим соображениям он наиболее приемлем как рабочее тело для поршневого криодвигателя, при этом не нарушается баланс содержания азота в атмосфере. Повышенный интерес к созданию криогенных силовых установок для транспортных средств обусловил актуальность детального исследования термодинамических и кинетических характеристик (коэффициенты переноса) молекулярного азота в широком диапазоне давлений и температур. В статье приведен оригинальный метод и результаты расчета теплопроводности азота, используемого в качестве рабочего тела для транспортных поршневых установок. Представлено описание разработанной математической модели кинетических характеристик плотных молекулярных сред (газов и жидкостей). Математическая модель и вычислительные процедуры основаны на формальной схеме Энскога и на статистико-механическом подходе в рамках термодинамической теории возмущений без привлечения эмпирических параметров. Особенности метода являются: достаточный минимум исходной информации, высокая точность, применимость для любых практически важных диапазонов состояний. На примере газообразного и жидкого азота приведено сравнение расчетных значений теплопроводности с имеющимися в литературе экспериментальными данными для давлений до 5 МПа в интервале температур 80–300 К. Результаты расчетов, выполненных по предложенной методике, позволяют прогнозировать кинетические характеристики азота в неисследованных экспериментально диапазонах состояний вплоть до давлений 1000 МПа и температур до 5000 К. Погрешности расчетов теплопроводности азота находятся на уровне обычных экспериментальных ошибок.

Ключевые слова: поршневой криодвигатель, азот, кинетические характеристики, рабочее тело, теплопроводность, математическая модель.

Введение

Транспортные средства с двигателями внутреннего сгорания, используемые на многих предприятиях или объектах с повышенной пожароопасностью (аэропорты, доки, элеваторы, химические заводы, нефтеперерабатывающие предприятия), представляют собой источники воспламенения в силу особенности их технологического (рабочего) цикла. В последнее время создатели транспортных средств много внимания уделяют силовым установкам, альтернативным двигателям внутреннего сгорания, которые могут обеспечить более высокую пожарную безопасность транспорта для вышеуказанных объектов [1, 2].

В качестве рабочего тела (РТ) в таких двигателях может применяться сжиженный азот, а горячим источником для реализации рабочего цикла целесообразно использовать теплоту окружающей среды. Азот является наиболее доступным негорючим газом (~78% в атмосферном воздухе), по экономическим соображениям он наиболее приемлем в качестве РТ для поршневого криодвигателя, при этом не нарушается баланс его содержания в атмосфере.

Повышенный интерес к созданию криогенных силовых установок для транспортных средств [1, 2] обусловил актуальность детального исследования термодинамических [3–5] и кинетических характеристик (коэффициенты переноса) молекулярного азота в широком диапазоне давлений и температур.

Анализ исследований и публикаций

Получить надежные экспериментальные данные о кинетических свойствах веществ в обширных диапазонах состояний затруднительно, а зачастую просто невозможно. Это мотивирует развитие вычислительных методов, среди которых две основные группы составляют феноменологические и статистические методы. Среди строгих статистических методов особое место занимает теория Энскога [6], соединившая в себе хорошее математическое обоснование и простоту рабочих формул.

Методика расчета

В настоящей работе для описания теплопроводности плотных молекулярных сред предложен комбинированный метод, представляющий собой развитие модифицированной теории Энскога с определением термодинамических параметров в рамках современных схем теории возмущений [7].

Конденсированная среда представляется состоящей из твердых сферических молекул диаметром σ . Несущественны столкновения тройные и более высоких порядков. Вследствие того, что молекулы обладают некоторым объемом, при сжатии газа становятся важными следующие два эффекта.

1) Ударный перенос импульса и энергии: при столкновении двух сферических молекул происходит мгновенный перенос импульса и энергии от центра одной молекулы к центру другой.

2) Изменение числа столкновений в секунду: частота столкновений, с одной стороны, увеличивается, так как σ не пренебрежимо мало по сравнению со средним межмолекулярным расстоянием, с другой – уменьшается, поскольку молекулы настолько сближены, что экранируют друг друга от налетающих молекул. Таким образом, частота столкновений отличается в Y раз от частоты столкновений в газе точечных частиц.

С учетом этих факторов интеграл столкновений для разреженных газов [6] должен быть преобразован. Для его модификации необходимо ввести два изменения. Во-первых, вследствие того, что сталкивающиеся молекулы – не точечные, их центры не совпадают и соответственно функция распределения налетающей частицы должна вычисляться в точке $\mathbf{r} - \sigma \mathbf{k}$, где \mathbf{k} – единичный вектор, направленный от центра налетающей молекулы к центру мишени. Во-вторых, в плотных газах и жидко-

стях объем, приходящийся на одну молекулу, имеет тот же порядок, что и объем молекулы $\frac{4}{3} \pi \left(\frac{\sigma}{2}\right)^3$,

поэтому объем, в котором находится центр какой-либо одной молекулы, уменьшается, а вероятность столкновения возрастает. Таким образом, частота столкновений увеличивается в Y раз, причем для системы твердых сфер (ТС) Y зависит от плотности числа частиц. Функция Y вычисляется в точке

соприкосновения двух сферических молекул, т. е. $\mathbf{r} - \frac{1}{2} \sigma \mathbf{k}$.

Из этих соображений Энскогом найден новый вид интеграла столкновений [6]. Из уравнения Больцмана с интегралом столкновений в форме Энскога может быть получена функция распределения системы ТС с помощью метода разложения по параметру частоты столкновений. Затем через интегралы от этой функции могут быть выражены плотности потоков энергии, импульса, массы и в итоге кинетические коэффициенты [6]. Результатом является следующее выражение теории Энскога для теплопроводности:

$$\frac{\lambda}{\lambda_0 b_0 \rho} = \frac{1}{y} + 1,2 + 0,755y. \quad (1)$$

Здесь $y = \frac{2\pi\sigma^3}{3}\rho Y = b_0\rho Y = b_0\rho g(\sigma)$; $\rho = N/V$ – плотность числа частиц; $g(r)$ – радиальная функция распределения системы ТС, связанная с фактором сжимаемости z следующим образом:

$$z = \frac{p}{\rho kT} = 1 + y.$$

Коэффициент λ_0 для разреженных газов, входящий в выражение (1), приведен в [7] и имеет вид

$$\lambda_0 = \frac{25}{32\sqrt{\pi}} c_v \sqrt{\frac{kT}{m}} \frac{1}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)*}}, \quad (2)$$

где c_v – молекулярная теплоемкость ($c_v = C_v/N_A$); k – постоянная Больцмана.

Удобно свести это выражение к произведению двух множителей, один из которых будет безразмерным и общим для различных газообразных и жидких сред, а другой будет включать в себя индивидуальные характеристики каждого вещества. В качестве потенциала взаимодействия используем потенциал Леннарда-Джонса (ЛД), относящийся к наилучшим простым двухпараметрическим потенциалам. Проведя замену $T = ET^*$, получим для одноатомных газов

$$\lambda_0 = \left(10^{-7} \frac{R_0^{3/2}}{n_A \sigma_A^2} \sqrt{\frac{E}{M}} \right) \left(\frac{75}{64\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{T^*}}{\Omega^{(2,2)*}} \right), \quad (3)$$

где $M=28,0134$ кг/кмоль – молярная масса азота; R_0 – универсальная газовая постоянная, $R_0=8,31441$ кДж/(кмоль·К); N_A – число Авогадро, $N_A = n_A \cdot 10^{27}$ 1/кмоль ($n_A=0,6022045$); $\sigma = \sigma_A \cdot 10^{-10}$ м, ϵ , σ – параметры ЛД-потенциала, $E=\epsilon/k$.

В выражениях (2) и (3) $\Omega^{(2,2)*}$ – интеграл столкновений для системы (ЛД), отнесенный к интегралу столкновений для системы ТС. Для него используется аппроксимация [8].

Отношение

$$\frac{\lambda_0}{\eta_0} \frac{M}{C_v} = f,$$

где $\eta_0 = \frac{5}{16\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{mkT}}{\sigma^2 \Omega^{(2,2)*}}$, известно как коэффициент Эйкена. В одноатомном случае отношение

$$\tilde{f} = f C_v = \frac{15}{4} R_0.$$

В многоатомных газах и жидкостях заметную роль играют вращательные и колебательные степени свободы, которые вносят существенный вклад в теплоемкость. Чтобы учесть эти влияния, предлагаются различные модификации коэффициента \tilde{f} . В данной схеме используется простая, но достаточно надежная поправка Эйкена

$$\tilde{f} = R_0 \left(\frac{C_v(T)}{R_0} + 2,25 \right).$$

Таким образом, выражение (3) приобретает вид

$$\lambda_0 = \tilde{\lambda} \lambda_0^*, \quad \tilde{\lambda} = 10^{-7} \frac{R_0^{3/2}}{n_A \sigma_A^2} \left(\frac{C_v}{R_0} + 2,25 \right) \sqrt{\frac{E}{M}}, \quad \lambda_0^* = \frac{5}{16\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{T^*}}{\Omega^{(2,2)*}} \cdot f_c, \quad (4)$$

где $f_c = \left(\frac{C_v^0}{R_0} \right) + 2,25$; C_v^0 – теплоемкость в идеально-газовом состоянии ($C_v^0 = C_p^0 - R_0$).

При $C_v/R_0 = 3/2$ выражение (4), очевидно, переходит в (3).

Хотя приведенные выше формулы для теплопроводности получены для системы ТС, Энског показал, каким образом их можно модифицировать и применить к реальным плотным молекулярным средам. Для этого надо переопределить величины b_0 и y [6].

Приведенные уравнения определяют так называемую модифицированную теорию Энскога. Кинетические коэффициенты реальной системы можно вычислить, используя только данные об уравнении состояния, полученные в рамках оригинальной схемы модифицированной теории возмущений (МТВ) [7].

Далее применен следующий комбинированный метод: для вычисления коэффициентов переноса используются выражения, полученные в модифицированной теории Энскога, а определение входящих туда параметров осуществлено на базе схемы МТВ.

В уравнении (1), определяющем теплопроводность, необходимо независимо определить параметры b и y . Фактор сжимаемости z , задающий уравнение состояния,

$$z = \frac{pv}{N_A kT} = \frac{p}{T^* \rho^*} = \rho^* \left[\frac{\partial(\beta\beta f)}{\partial \rho^*} \right]_{T^*}.$$

В дальнейших расчетах ограничимся первым порядком МТВ, так как поправки, вносимые учетом членов последующих порядков, настолько малы, что выходят за пределы точности, заданной существующими экспериментальными данными. Согласно МТВ с учетом членов первого порядка получим

$$z = 1 + 2\chi \frac{2-\chi}{(1-\chi)^3} + \sum_{i,k=0}^3 (i+1) a_{ik} \rho^{*(i+1)} / T^{*(k+1)}, \quad (5)$$

где $\chi = \frac{\pi}{6} \rho d^3 = \frac{\pi}{6} \xi^3 \rho^* = 0,4177 \rho^*$ – параметр упаковки, a_{ik} – коэффициенты полиномиального представления группового интеграла $I_1(T^*, \rho^*)$ первого порядка МТВ [8].

Сравнивая (5) с вириальным разложением для z , находим второй вириальный коэффициент

$$B = \frac{2\pi}{3} N_A \sigma^3 B^*,$$

$$B = N_A \sigma^3 \left[\frac{2\pi}{3} \xi^3 + \sum_{k=0}^3 a_{0k} (T^*)^{-(k+1)} \right].$$

Произведение $b\rho$ определяется из выражения

$$b\rho = \frac{2\pi}{3} \rho^3 \left[B^*(T^*) + T^* (dB^*/dT^*) \right] = 4\chi - \rho^* \sum_{k=1}^3 k a_{0k} (T^*)^{-(k+1)},$$

а параметр y

$$y = 2\chi \frac{2-\chi}{(1-\chi)^3} + \sum_{i,k=0}^3 (i+1) k a_{ik} \rho^{*(i+1)} / T^{*(k+1)}. \quad (6)$$

Для определения B^* используется аппроксимация [7]

$$B^* = \sum_{s=0}^9 B_s / T^{*s},$$

что дает альтернативную форму для $b\rho$

$$b\rho = \frac{2\pi}{3} \rho^* \left[B_0 + \sum_{s=2}^9 B_s (1-s) / T^{*s} \right], \quad (7)$$

используемую в последующих расчетах.

Коэффициент переноса λ газов и жидкостей в рамках комбинированного метода имеет вид

$$\lambda = \lambda_0 b p \left(\frac{1}{y} + 1,2 + 0,755 y \right),$$

где y и $b p$ определены согласно (6) и (7); λ_0 – теплопроводность идеального газа.

Параметр приведения $\tilde{\lambda}$, фигурирующий в (4), можно вычислить по следующей формуле:

$$\tilde{\lambda} = 125,893 \sqrt{\frac{E/M}{\sigma^2}}, 10^{-3} \text{ Вт/(м·К)}.$$

Работоспособность предложенной расчетной процедуры проверена при определении теплопроводности газообразного и жидкого азота в диапазоне от криогенных до комнатных температур (80–300 К) при давлениях до 5 МПа. Параметры ЛД-потенциала имеют для азота следующие значения: $E = \varepsilon/k = 97,31$ К, $\sigma = 3,5827 \cdot 10^{-10}$ м.

В табл.1, 2 полученные расчетным путем значения теплопроводности азота сравниваются с экспериментальными данными, приведенными в литературе [10–12].

Таблица 1. Сравнение экспериментального и расчетного значения теплопроводности азота в зависимости от температуры при давлении $P=0,1$ МПа

$T, \text{ К}$	$\lambda \cdot 10^3, \text{ Вт/(м·К)}$ (расчет)	$\lambda \cdot 10^3, \text{ Вт/(м·К)}$ (эксперимент [10])	δ	$\lambda \cdot 10^3, \text{ Вт/(м·К)}$ (эксперимент [12])	δ
70	213,96				
80	8,36	7,82	0,06900	7,82	0,06900
90	9,40	8,63	0,08920	8,63	0,08900
100	10,49	9,58	0,09500	9,58	0,09500
110	11,59	10,48	0,10590	10,40	0,11440
120	12,67	11,30	0,12120	11,30	0,12120
130	13,71	12,00	0,14250	12,00	0,14250
140	14,71	13,00	0,13160	13,00	0,13160
150	15,66	13,90	0,12660	13,90	0,12660
160	16,56	14,80	0,11890	14,80	0,11890
170	17,41	15,70	0,10890	15,70	0,10890
180	18,21	16,60	0,09700	16,60	0,09700
190	18,97	17,50	0,08400	17,50	0,08400
200	19,70	18,30	0,07650	18,30	0,07650
220	21,04	19,80	0,06260	20,00	0,05200
240	22,29	21,30	0,04648	21,40	0,04159
250	22,87	–		–	
260	23,44	22,80	0,02800	22,90	0,02358
280	24,53	24,20	0,01360	24,40	0,00530
300	25,57	25,70	-0,00510	25,90	-0,01300
$\bar{\delta}$	–	–	0,08100 (8,1%)	–	0,08380 (8,38%)

На рис. 1, 2 представлена температурная зависимость теплопроводности азота по изобарам 2 и 4 МПа в сравнении с экспериментальными данными [9–11].

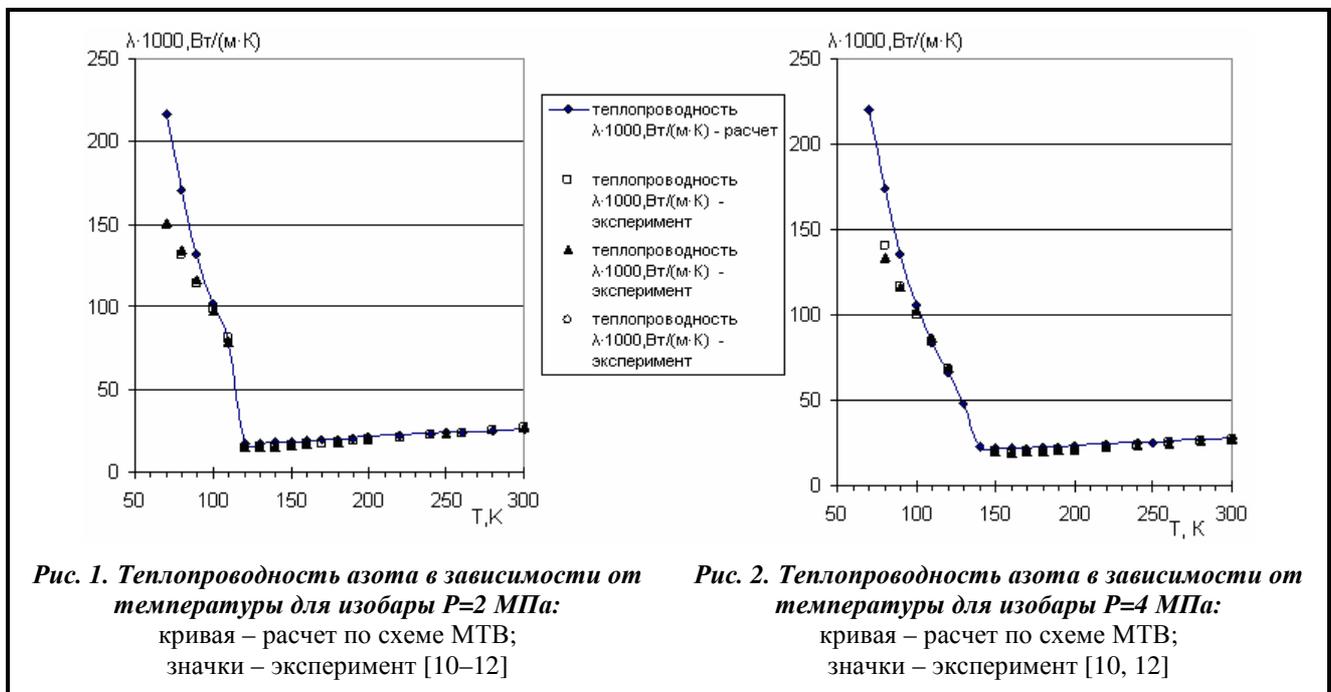
Средние значения $\bar{\delta} = \sum_{n=1}^{N_{\delta}} |\delta(T_n)| / N_{\delta}$ модулей отклонений $\delta = (\eta^{\text{рас}} / \eta^{\text{экс}}) - 1$ в указанном температурном интервале для теплопроводности $\bar{\delta} = 9,6\%$ (2 МПа) и $\bar{\delta} = 8\%$ (4 МПа).

Приведенные результаты расчетных значений теплопроводности азота находятся в удовлетворительном согласии с опытными данными. Таким образом, ограничение членами первого порядка

в полученных разложениях МТВ обеспечивает погрешности расчетов теплопроводности, сравнимые по величине с экспериментальными ошибками.

Таблица 2. Сравнение экспериментального и расчетного значения теплопроводности азота в зависимости от температуры при давлении P=5 МПа

T, K	$\lambda \cdot 10^3$, Вт/(м·К) (расчет)	$\lambda \cdot 10^3$, Вт/(м·К) (эксперимент [10])	δ	$\lambda \cdot 10^3$, Вт/(м·К) (эксперимент [11])	δ	$\lambda \cdot 10^3$, Вт/(м·К) (эксперимент [12])	δ
70	221,54	–	–	152,3	0,6800	–	–
80	175,34	135,0	0,2988	137,4	0,2760	142,0	0,2348
90	136,74	–	–	119,7	0,1420	–	–
100	107,84	–	–	102,3	0,0540	–	–
110	86,03	–	–	85,6	0,0050	–	–
120	68,63	–	–	69,4	-0,0110	–	–
130	53,00	–	–	54,7	-0,0310	–	–
140	26,36	–	–	32,0	-0,1760	–	–
150	24,44	–	–	24,5	-0,0025	–	–
160	23,72	21,8	0,0880	22,7	0,0450	21,8	0,0880
170	23,58	21,6	0,0920	–	–	21,6	0,0920
180	23,69	21,7	0,0920	22,1	0,0720	21,2	0,1170
190	23,92	22,2	0,0770	–	–	22,6	0,0580
200	24,22	22,4	0,0810	22,7	0,0670	22,4	0,0810
220	24,92	23,2	0,0740	–	–	23,4	0,0650
240	25,69	24,4	0,0528	–	–	24,5	0,0480
250	26,09	–	–	25,2	0,0350	–	–
260	26,49	25,6	0,0347	–	–	25,7	0,0310
280	27,29	26,7	0,0220	–	–	26,9	0,0145
300	28,10	27,8	0,0108	28,3	-0,0070	28,0	0,0064
$\bar{\delta}$	–	–	0,0840 (8,4%)	–	0,097 (9,7%)	–	0,0760 (7,6%)



Выводы

Предложенный метод определения коэффициентов переноса плотных газов и жидкостей является комбинированным: для расчетов применена формальная схема Энскога, а определение входящих в выражения термодинамических параметров осуществлено в рамках МТВ. Такой метод развит до состояния, отвечающего инженерным потребностям, и позволяет получить кинетические характеристики жидкого и газообразного азота, используемые для разработки перспективных видов экологически чистых и пожаробезопасных транспортных средств. Особенности метода являются применимость его для широкого диапазона состояний и достаточность минимума исходной информации. Реализованный в виде программы для ЭВМ он обеспечивает оперативное получение данных о теплопроводности азота, в том числе криогенного.

Литература

1. Plummer M. C., Koehler C. P., Flanders D. R. Cryogenic heat engine experiment. *Proc. of 1997 Cryogenic Eng. Conf.*, Portland, July 1997, USA. P. 7.
2. Туренко А. Н., Пятак А. И., Кудрявцев И. Н. Экологически чистый криогенный транспорт: современное состояние проблемы. *Вестн. Харьк. автомоб.-дор. техн. ун-та*. 2000. Вып. 12–13. С. 42–47.
3. Левтеров А. М., Умеренкова К. Р. Расчетная оценка теплофизических свойств азота, как рабочего тела поршневого криодвигателя. Ч I. Математическая модель фазовых равновесий. *Пром. теплотехника*. 2013. Т. 35. № 4. С. 90–95.
4. Левтеров А. М., Умеренкова К. Р. Расчетная оценка теплофизических свойств азота, как рабочего тела поршневого криодвигателя. Ч II. Вычисление теплоемкости. *Пром. теплотехника*. 2014. Т. 36. № 2. С. 93–100.
5. Левтеров А. М., Умеренкова К. Р. Расчетная оценка теплофизических свойств азота, как рабочего тела поршневого криодвигателя. Ч. III. Вычисление энтальпии и энтропии. *Пром. теплотехника*. 2015. Т. 37. № 2. С. 32–38.
6. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1961. 930 с.
7. Маринин В. С. Теплофизика альтернативных энергоносителей. Харьков: Форт, 1999. 212 с.
8. Умеренкова К. Р., Маринин В. С. Термодинамические свойства и фазовые равновесия предельных углеводородов и их смесей. I. Физическая модель и метод расчета. *Вісн. НТУ "ХПІ". Сер. Хімія, хімічна технологія та екологія*. 2002. Т. 2. № 2. С. 3–9.
9. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1982. 592 с.
10. Малков М. П., Данилов И. Б. Справочник по физико-техническим основам криогеники. 3-е изд. М.: Энергоатомиздат, 1985. 432 с.
11. Варгафтик Н. Б., Филиппов Л. П. Справочник по теплопроводности жидкостей и газов. М.: Энергоатомиздат, 1990. 352 с.
12. Варгафтик Н. Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. М.: Наука, 1972. 720 с.

Поступила в редакцию 24.10.2018