

基于分子动力学的充气压力影响脉管制冷机性能机理研究

陶杰, 祁影霞, 刘雅丽, 芦洋

(上海理工大学 能源与动力工程学院, 上海 200093)

摘要: 为了进一步探究脉管制冷机的内部运行机理, 基于分子动力学仿真对脉管内气体交变流动进行了分析研究。研究表明: 当充气压力增大时, 脉管内压比、质量流量增大, 冷端最低制冷温度下降, 热端温度上升, 但对压力波、温度波和质量流量波相位没有影响。在不考虑压缩机级后换热器和回热器的情况下, 在压缩机出口处, 压力波超前流速波的相位角大约为 90° , 超前质量流量波大约 72° , 温度波领先流速波大约 72° , 领先质量流量波大约 72° ; 在远离压缩机的远端, 压力波则落后于流速波大约 72° , 落后于质量流量波大约 72° , 温度波则落后流速波大约 90° , 落后于质量流量波大约 72° ; 无论在热端还是冷端, 压力波与温度波均几乎同相。

关键词: 脉管; 交变流动; 充气压力; 相位

中图分类号: TB61+1

文献标识码: A

DOI: 10.16146/j.cnki.rndlge.2022.03.002

[引用本文格式] 陶杰, 祁影霞, 刘雅丽, 等. 基于分子动力学的充气压力影响脉管制冷机性能机理研究[J]. 热能动力工程, 2022, 37(3): 9-14. TAO Jie, QI Ying-xia, LIU Ya-li, et al. The mechanism of the influence of inflation pressure on the performance of pulse tube refrigerator based on molecular dynamics[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2022, 37(3): 9-14.

The Mechanism of the Influence of Inflation Pressure on the Performance of Pulse Tube Refrigerator based on Molecular Dynamics

TAO Jie, QI Ying-xia, LIU Ya-li, LU Yang

(School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai, China, Post Code: 200093)

Abstract: In order to further explore the internal operating mechanism of the pulse tube refrigerator, the alternating flow of gas in the pulse tube was analyzed and studied based on molecular dynamics simulation. The research results show that when the inflation pressure increases, the pressure ratio and mass flow in the pulse tube increase, the minimum refrigeration temperature at the cold end drops, and the temperature at the hot end rises, but it has no effect on the phases of the pressure wave, temperature wave and mass flow wave. Without considering the heat exchanger and regenerator at the rear of the compressor stage, at the compressor outlet, the phase angles of the pressure wave leading the velocity wave and mass flow wave are about 90° and 72° respectively, and the phase angles of the temperature wave leading the velocity wave and mass flow wave are about 72° equally; at the far end away from the compressor, the phase angles of the pressure wave lagging behind the velocity wave and mass flow wave are about 72° equally, while the phase angles of the temperature wave lagging behind the velocity wave and mass flow

收稿日期: 2021-05-13; 修订日期: 2021-07-14

基金项目: 国家重点研发计划(2020YFF0303901); 上海市动力工程多相流动与传热重点实验室项目(13DZ2260900)

Fund-supported Project: National Key R&D Program of China(2020YFF0303901); Key Laboratory of Multiphase Flow and Heat Transfer in Shanghai Power Engineering Project(13DZ2260900).

作者简介: 陶杰(1996-), 男, 安徽蚌埠人, 上海理工大学硕士研究生。

通讯作者: 祁影霞(1964-), 女, 上海人, 上海理工大学教授。

wave are about 90° and 72° respectively. The pressure wave and temperature wave are almost in phase regardless of whether they are on the hot end or on the cold end.

Key words: pulse tube, alternating flow, inflation pressure, phase

引 言

1964 年, Gifford 等人^[1]在其论文中系统阐述了基本型的脉管制冷机。Narayankhedkar 等人^[2]从理论上引入了以零热泵率(zero heat pumping rate)来推导冷端温度的概念, 并且提出了相关的经验公式, 证明了在所需的冷端温度下存在一个最佳热端长度。Mikulin 等人^[3]提出了经典分析法, 在理想情况下, 利用热力学关系式和热平衡方程, 计算得到有效制冷量的表达式, 求得了改进型脉管制冷机的制冷量和效率。Storch 等人^[4]提出向量分析法, 在压比较小时, 使用旋转向量表示正弦向量, 但是表达式仅在计算结果与实验结果定性时才会有较好的符合度。Redebaugh 等人^[5]提出了焓流调相理论, 指出制冷机的理论制冷量可以用脉管内的时均焓流来表示, 且二者在数值上是相等的。

随着制冷机结构的不断改进, 其他理论也相继出现。肖家华等人^[6]在原有的热声理论上建立了回热式制冷机的热声理论框架。基于脉管内部气体流动的特征, 梁惊涛等人^[7-9]提出了热力学非对称理论, 在一个完整的循环中对一个气体微团来说, 它在流向热端和流向冷端的两个过程中经历的热力学参数变化是不对称的, 非对称性越大制冷机制冷量也就越大。Waele 等人^[10-11]在假设气库无限大、压力为正弦变化时, 得到了小孔型和双向进气型脉管制冷机的冷、热端动态温度变化。Zhu 等人^[12]使用数值模拟方法, 模拟出了脉管制冷机整机性能及内部流动和传热动态的特性。Shaft 等人^[13]模拟计算了双向进气型二级脉冲管制冷机的性能, 在以正弦曲线代表压缩机压力波时, 得到了质量流量和体积流量与时间及位置的关系, 在考虑空体积的情况下通过压力与质量流量之间的相移来计算系统的制冷量。基于力平衡和电压平衡方程式, Zhang 等人^[14]分析了如何通过调整阻抗来提高脉冲管制冷机的性能, 发现调整压力的大小及惯性管的长度与压缩机

进行良好耦合时可以提高电声效率。

目前实验研究表明, 提高充气压力可以降低脉管制冷温度、提高冷量, 但其中的机理还未明了。本文基于分子动力学的方法, 对脉管内的交变流动及脉管与压缩机的耦合进行了研究, 从各参数波形及其相位关系多方面进行了深入探讨, 揭示了充气压力对脉管制冷性能的影响机理。

1 仿真模型及方法

采用绝热模型, 针对斯特林型脉管制冷机内的交变振荡流及制冷性能进行研究。在模型中没有回热器和冷、热端换热器, 压缩机出口直接与脉管相连, 因而可独立研究压缩机与脉管之间的相位关系。

物理模型如图 1 所示。右边有一段虚拟活塞, 使其做正弦往复运动, 从而提供正弦压力波, 使左侧脉管内气体压缩或膨胀。受限于分子动力学计算规模的限制, 根据相似准则对模型尺寸进行了缩小。压缩腔尺寸为 $953.5 \text{ \AA} \times 2\,000 \text{ \AA} \times 14.303 \text{ \AA}$ (长 $\times$ 宽 $\times$ 厚), 脉管尺寸为 $5\,721.2 \text{ \AA} \times 2\,000 \text{ \AA} \times 14.303 \text{ \AA}$ (长 $\times$ 宽 $\times$ 厚)。

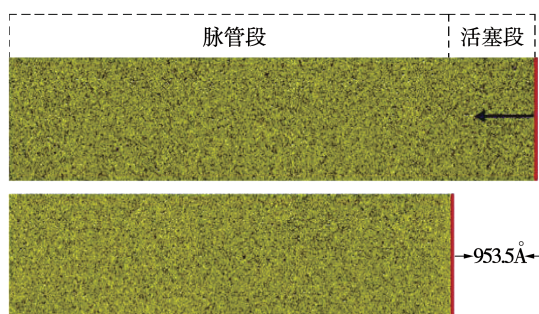


图 1 带虚拟压缩活塞的脉管分子模型图

Fig. 1 Molecular diagram of pulse tube with virtual compression piston

由于模型中仅包含 He 原子, 所以只考虑 He-He 原子之间的相互作用力。根据经验, 对 He-He 原子之间的相互作用力采用 Lennard-Jone 势能函数。Lennard-Jone 势能函数的参数为 $\varepsilon (\text{eV}) = 6.070\,98 \times 10^{-4}$, $\sigma (\text{\AA}) = 2.103$ 。

仿真过程在大型原子分子模拟器(LAMMPS)中进行的。模型首先在 NVT(number, volume, temperature)正则系综下运行,对模型的初始温度进行标定,赋予其相应温度下的初速度,并使模型中各个区域内的气体分子混合均匀。然后,在 NVE(number, volume, energy)微正则系综下运行,以获得性能参数。模型中气体始终是在虚拟活塞的推动下运动的,虽与外界绝热,但虚拟活塞的作用相当于外力输入。

初始温度设定为 300 K,行程为 95.35 nm,行程为脉管长度的 16.7%,相当于压比为 1.13。周期为 2 000 ps,相当于活塞的平均速度为 238 m/s,是实际活塞运行速度的 20 倍左右。初始充气压力范围为 2.1~2.9 MPa,每变化 0.2 MPa 为一个工况点。

在运行 6 个周期后,系统达到稳定运行状态,从第 7 个周期开始提取数据用于分析。运行结束后,计算结果由 LAMMPS 计算所得,利用 Fortran 语言编写程序对计算结果进行进一步的处理,以得到研究所需参数。将模型划分为等距的格子,格子长度为 100 nm。根据 LAMMPS 中周期及步长的大小,取每 0.1 ns 时间间隔输出一个数据。通过对格子中气体原子数、位置及速度的统计计算,得到模型整体温度、压力、流速和质量流量的变化。

通过分子动力学模拟计算可从微观层面得到各粒子随时间变化的位置和速度,利用统计热力学可以从微观性质计算得到系统的宏观性质。通过系统内粒子每运行一步所产生的新速度可计算得到系统瞬时温度:

$$T_{\text{gas}} = \frac{\sum m_i [(v_{i,x} - v_{c_{i,x}})^2 + (v_{i,y} - v_{c_{i,y}})^2 + (v_{i,z} - v_{c_{i,z}})^2]}{3 N k_B} \tag{1}$$

式中: m —粒子质量,kg; N —系统中粒子的数量; k_B —玻尔兹曼常数; $v_{i,x}, v_{i,y}, v_{i,z}$ — x, y 和 z 方向的粒子速度。

因为氦气是惰性气体,可以按照理想气体进行分析计算,故采用理想气体状态方程计算压力:

$$pV = \frac{N}{N_A}RT \tag{2}$$

式中: p —压力,Pa; V —模型体积, m^3 ; N —原子数;

N_A —阿伏伽德罗常数, $N_A = 6.02 \times 10^{23}$; R —通用气体常数, $R = 8.3145$; T —温度,K。

2 模拟结果及分析

对模拟结果的正确性进行验证。理想气体等熵膨胀关系式为:

$$T_2 = T_1 \left(\frac{p_2}{p_1} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \tag{3}$$

式中: T_2 —等熵膨胀终了温度,K; T_1 —初始温度,K; p_2 —排气压力,Pa; p_1 —吸气压力,Pa; κ —绝热指数,单原子绝热指数为 1.61。

表 1 将模拟温度与等熵膨胀关系式所计算的温 度进行对比,结果显示,模拟温度与计算温度相差不大,验证了模型的正确性。由表 1 可知,在相同压比下,脉管模拟的冷端最低制冷温度仅略高于等熵膨胀制冷温度。这主要是因为模型虽为绝热环境,但脉管气团存在轴向导热,因而冷端最低制冷温度相比等熵膨胀制冷温度稍微上升。这说明模型虽然是在微小尺寸下建立的,但温度等相关变量并没有受到尺寸效应的影响,它与宏观尺寸的规律一致。

表 1 不同温度下模拟最低制冷温度与等熵膨胀制冷温度对比(K)

Tab. 1 Comparison of simulated minimum refrigeration temperature and isentropic expansion refrigeration temperature at different temperatures(K)

初始温度	模拟最低制冷温度	等熵膨胀制冷温度
300	245	238.4
200	146.5	141.9
100	73.3	71.4
70	49.7	47.6
50	36.9	35.4
20	14.7	14.1
10	7.86	7.1

2.1 压力波、温度波、质量流量波随初始压力的变化

图 2 是不同初始充气压力下冷端压力波的变化。可以看出,随着初始压力的增加,冷端压力波振幅逐渐增大,即压比逐渐增大,但均不超过各压力下活塞腔内压力波的振幅及压比,且压力波相位不随

初始压力的变化而变化。

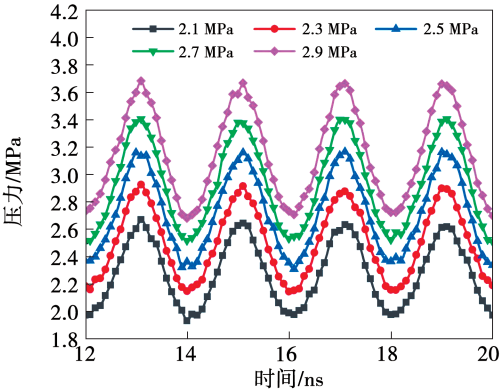


图2 不同初始压力下冷端压力波对比
Fig.2 Comparison of cold end pressure waves at different initial pressures

图3 是不同初始压力下冷端、热端温度波随时间的变化曲线。从图3(a)可以看出,冷端温度波的振幅虽然随初始压力的上升变化很小,但是周期时均温度却有所下降,这意味着制冷温度随充气压力的上升而下降,特别是在2.9 MPa时下降较明显。

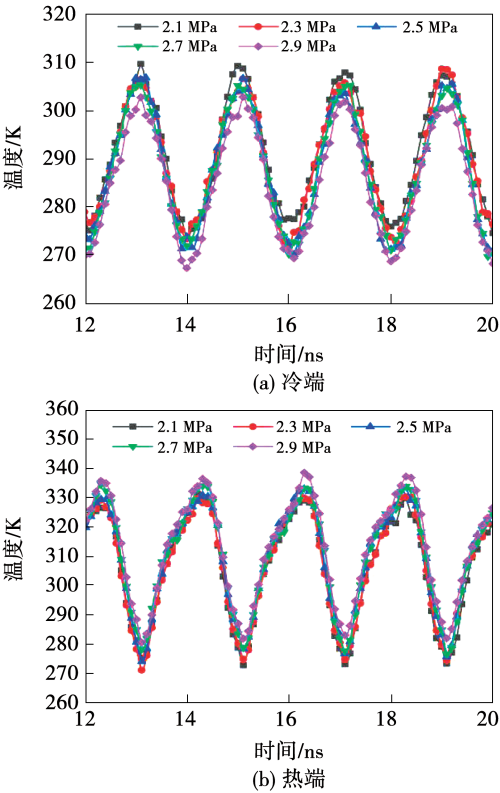


图3 不同初始压力下冷、热端温度波对比
Fig.3 Comparison of temperature waves at the cold end and hot end at different initial pressures

同样,初始压力对冷端温度波相位也没有影响。从图3(b)可以看出,温度波与压力波几乎同相。热端温度波的振幅随初始压力的升高也几乎不发生变化,但是周期时均温度却有所升高。同样,初始压力对热端温度波相位也没有影响,但热端温度波与冷端温度波相位相角大约为 180° 。

图4 是冷、热端质量流量随初始压力的变化。可以看出,冷、热端的质量流量相位相同,但是冷端质量流量远小于热端质量流量,这是由于冷端处于封闭端,那里没有气体质量流出。还可以看出,随着初始压力的升高,冷端、热端质量流量振幅值也逐渐升高,这意味着初始压力的升高提高了脉管内的质量流量,因而冷端制冷量也会提高。

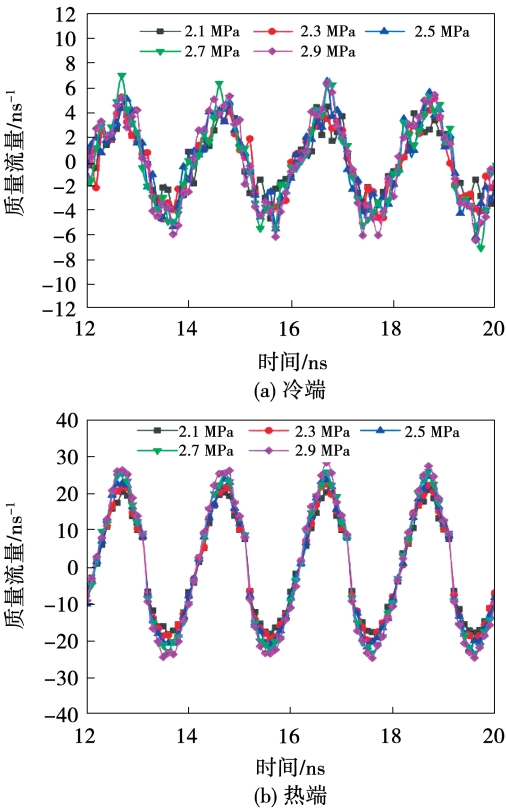


图4 不同初始压力下冷端、热端质量流量对比
Fig.4 Comparison of mass flow waves at the cold end and hot end at different initial pressures

2.2 冷、热端各波之间的相位关系

图5 是脉管冷、热端压力波、温度波与质量流量波之间的相位关系图。

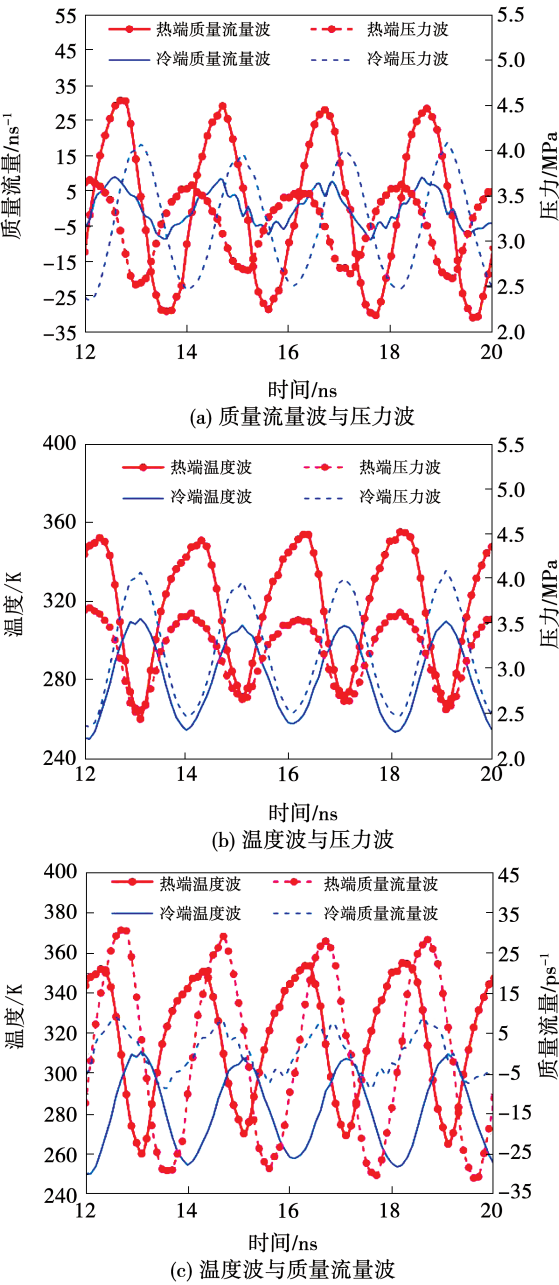


图5 冷、热端压力波、质量流量波与温度波的相位关系

Fig.5 The phase relationship among the pressure waves, mass flow waves and temperature waves at the cold end and hot end

图5(a)为初始压力为3.0 MPa时,冷、热端压力波与质量流量波相位关系图。热端压力波振幅小于冷端,但相位超前冷端压力波大约 162° 。不难看出,在脉管热端,压力波超前质量流量波大约 72° ,而在脉管冷端,压力波则落后于质量流量波大约 72° 。理论研究说明,脉管冷端压力波滞后于质量流量波相位角为 90° ,与本研究一致。这说明虽然是

在微小尺寸下进行模拟,但结果并不受影响,尺寸相似准则在此处是合理的。实验研究表明,当脉管冷端质量流量波与压力波相差 30° 时,制冷机相位关系比较合理,整机效率也相对较高^[15]。由于本模拟没有考虑回热器,因而质量流量波领先压力波相位角较大。

图5(b)为初始压力为3.0 MPa时,脉管冷、热端气体温度波与压力波相位关系图。热端温度波超前冷端温度波大约 180° ,即两者几乎反相。可以看出,无论在热端还是冷端,压力波与温度波均几乎同相。

图5(c)为冷、热端气体温度波与质量流量波的相位关系。与流速类似,在热端,温度波领先质量流量波相位角大约 72° ,在冷端,温度波落后质量流量波大约 90° 。

研究结果还发现,冷、热端的速度波同相位,但是冷端速度远小于热端速度,初始压力对速度波几乎没有影响。热端压力波超前流速波大约 90° ,而冷端压力波落后于流速波大约 72° 。热端温度波超前流速波大约 72° ,而冷端温度波则落后流速波大约 90° 。

3 结 论

本文利用分子动力学方法模拟了脉管内气体的交变流动,进一步探究了脉管制冷机内部的运行机理。根据研究可知,当初始温度为300 K,充气压力在2.1~2.9 MPa范围内变化时,随着压比增大,冷端最低制冷温度随之下降,热端最高温度随之上升,冷、热端质量流量均随之上升,但压力波、温度波、质量流量波的相位均不发生迁移。

在没有压缩机级后换热器和回热器的情况下,在压缩机出口的热端,压力波超前流速波相位角大约 90° ,超前质量流量波大约 72° ;温度波领先流速波大约 72° ,领先质量流量波大约 72° 。在远离压缩机的冷端,压力波则落后于流速波大约 72° ,落后于质量流量波大约 72° ;温度波则落后流速波大约 90° ,落后于质量流量波大约 72° 。显然,无论是在热端还是冷端,压力波与温度波均几乎同相。以上相位关系可以作为回热器对脉管内交变流动相位关

系影响的参照标准。

参考文献：

[1]

GIFFORD W E, LONGSWORTH R C. Pulse-tube refrigeration[J]. Journal of Engineering for Industry, 1964, 86(3) : 264 – 268.

[2]

NARAYANKHEDKAR K G, MANE V D. Investigation of pulse tube refrigerator[J]. Journal of Engineering for Industry, 1973, 95(1) : 373 – 378.

[3]

MIKULIN E I, TARASOV A A, SHKREBYONOCK M P. Low-temperature expansion pulse tubes[J]. Advances in Cryogenic Engineering, 1984, 29 : 629 – 637.

[4]

STORCH P J, RADEBAUGH R. Development and experimental test of an analytical model of the orifice pulse tube refrigerator[J]. Advances in Cryogenic Engineering, 1988, 33 : 851 – 859.

[5]

RADEBAUGH R. A review of pulse tube refrigeration[J]. Advances in Cryogenic Engineering, 1990, 35 : 1191 – 1205.

[6]

肖家华. 热声效应与回热式低温制冷机(热机) 的热声理论[D]. 北京 : 中国科学院物理研究所, 1990.
XIAO Jia-hua. Thermoacoustic effect and thermoacoustic theory of regenerative cryogenic refrigerator(heat engine) [D]. Beijing : Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, 1990.

[7]

LIANG J, RAVEX A, Rolland P. Study on pulse tube refrigeration, part 1 : thermodynamic nonsymmetry effect[J]. Cryogenics, 1996, 36(2) : 87 – 93.

[8]

LIANG J, RAVEX A, ROLLAND P. Study on pulse tube refrigeration, part 2 : theoretical modelling-science direct[J]. Cryogenics, 1996, 36(2) : 95 – 99.

[9]

LIANG J, RAVEX A, ROLLAND P. Study on pulse tube refrigeration, part 3 : experimental verification[J]. Cryogenics, 1996, 36(2) : 101 – 106.

[10]

A. T. A. M. DE WAELE, STELJAERT P P, GIJZEN J. Thermodynamical aspects of pulse tubes[J]. Cryogenics, 1997, 37(6) : 314 – 324.

[11]

A. T. A. M. DE WAELE, STELJAERT P P, KONING J J. Thermodynamical aspects of pulse tubes II[J]. Cryogenics, 1998, 38(3) : 329 – 335.

[12]

ZHU S W, MASAFUMI N, TATSUO I. Numerical simulation of a step-piston type series two-stage pulse tube refrigerator[J]. Cryogenics, 2007, 47(9) : 483 – 489.

[13]

SHAFT K A, RASHEED K K A, GEORGE J M, et al. An adiabatic model for a two-stage double-inlet pulse tube refrigerator[J]. Archive Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part C-Journal of Mechanical Engineering Science, 2008, 222(7) : 1247 – 1252.

[14]

ZHANG A K, WU Y N, LIU S S, et al. Effect of impedance on a compressor driving pulse tube refrigerator[J]. Applied Thermal Engineering, 2017, 124(1) : 688 – 694.

[15]

张隆满, 蒋珍华, 吴亦农. 斯特林型脉冲管制冷机中压缩机与冷指耦合实验研究[J]. 低温工程, 2007(1) : 9 – 12.
ZHANG Long-man, JIANG Zhen-hua, WU Yi-nong. Experimental study on coupling of compressor and cold finger in stirling pulse tube refrigerator[J]. Cryogenic Engineering, 2007(1) : 9 – 12.

(刘 颖 编辑)