

НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК КЫРГЫЗСКОЙ РЕСПУБЛИКИ
ИНСТИТУТ ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИХ ПРОБЛЕМ И
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ ИМЕНИ АКАДЕМИКА Ж.ЖЕЕНБАЕВА

Диссертационный совет Д 01.16.537

На правах рукописи
УДК 533.15: 520.181

Ташимбетова Акдана Турсынхановна

ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЛАСТЕРНЫХ ГАЗОВ

Специальность 01.04.14-Теплофизика и теоретическая теплотехника

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Бишкек - 2017

Диссертационная работа выполнена на кафедре «Физика, математика и информатика» Факультета прикладных наук Международной образовательной корпорации (Кампус КазГАСА) Министерства образования и науки Республики Казахстан.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор Курлапов Л.И. (Алматы)

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор Урусов Р.М. (Бишкек)

кандидат физико-математических наук, доцент Токтогонов С. А. (Бишкек)

Ведущая организация Казахский Национальный педагогический университет имени Абая, г. Алматы;

Защита состоится 7 марта 2017 года в 14-00 часов на заседании диссертационного совета Д 01.16.537 по присуждению ученых степеней доктора (кандидата) наук при Институте физико-технических проблем и материаловедения имени академика Ж.Жеенбаева и КРСУ им. Б.Ельцина по адресу: 720071, г. Бишкек, проспект Чуй, 265-а.

С диссертацией можно ознакомиться в Центральной библиотеке НАН Кыргызской Республики.

Автореферат разослан «____» февраля 2017 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
д.т.н., профессор:

Алымкулов С.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

В настоящей диссертации разрабатывается модель газового состояния, в которой учитывается существование полимолекулярных образований – кластеров и связанные с этим особенности равновесных и неравновесных свойств газов. В кластерной модели газового состояния всякий газ рассматривается как многокомпонентная смесь кластерных субкомпонентов. И даже газ, состоящий из одинаковых по химическим свойствам молекул необходимо рассматривать как смесь, молярная масса которой и число молей постоянной массы зависят от макропараметров. Переменность числа молей и молярной массы кластерной смеси приводят к отклонениям свойства газов от идеальных. На свойства переноса кластеры влияют через переменность кластерного состава в неоднородном газе – через эволюцию кластерного состава

Актуальность темы связана с развитием новых технологий, в которых используются вещества с заранее рассчитанными свойствами. Расчеты свойств должны базироваться на более точных уравнениях состояния, основанных на более адекватной модели газового состояния. Учет влияния кластеров на вязкость позволяет выбрать те интервалы температуры и давления, в которых обосновано применение существующих методов извлечения параметров межмолекулярных потенциалов и уточнить, таким образом, значения этих параметров. В настоящее время уточнение расчетов свойств газов ограничена именно точностью параметров взаимодействия молекул, поэтому актуальной проблемой является уточнение механизма взаимодействия структурных элементов, а также определение тех частиц, которые являются структурными элементами в газах. Таким образом, **актуальность** обусловлена необходимостью уточнения модели газообразного состояния вещества.

Цели исследования. Цель исследования заключается в развитии кластерной модели газов. На примере исследования вязкости и уравнения состояния выяснить влияние кластеров, а путем сопоставления расчетов с известными экспериментами данными проверить надежность разработанных схем расчетов.

Задачи исследования.

- Провести анализ известных уравнений состояния с целью выяснения учета в них переменности числа молей и определить перспективное для этого уравнение состояния газов.
- Рассчитать концентрации кластеров в газах с различными характеристиками молекул (аргон, азот, кислород, криптон) при различных давлениях и температурах.
- По расчетным данным, определено что температура Бойля соответствует условию, при котором влияние собственного объема частиц компенсируется влиянием кластеров, существование которых приводит к изменению числа молей структурных элементов, создающих давление.
- Рассчитать фактор сжимаемости газов с различными характеристиками молекул (аргон, азот, кислород, криптон) при различных давлениях и температурах и провести сравнение с литературными данными.
- Путем обработки известной температурной зависимости вязкости газов получить данные по температурной зависимости эффективного диаметра столкновений молекул.
- Рассчитать вязкость газов (аргон, азот, кислород, криптон, метан) с учетом влияния кластеров, выявить кластерный механизм барической зависимости вязкости газов.
- Вычислить коэффициент объемной вязкости как функции давления молекулярно-кластерной смеси аргона при низкой температуре и парциального коэффициента объемной вязкости.

Объектом исследования является молекулярно-кластерная смесь газов.

Предмет исследования. Влияние кластеров на уравнение состояния и на вязкость газов в широкой области давлений и температуры.

Методы исследования – расчетно-теоретический и аналитический на основе кинетической теории.

Новизна исследования. Впервые учтено влияние кластеров на барическую зависимость вязкости газов и на фактор сжимаемости в уравнении состояния.

Установлено, что рост вязкости с давлением связан с аномально большим парциальным коэффициентом вязкости больших кластеров.

Положения, выносимые на защиту:

- Вязкость молекулярно-кластерной смеси можно рассчитывать по формулам кинетической теории многокомпонентных смесей, рассматривая наборы кластеров различного размера в качестве кластерных субкомпонентов.

- Увеличение вязкости газов с давлением обусловлено аномально большим парциальным коэффициентом вязкости больших кластеров, что связано с эффектом персистенции скоростей тяжелых частиц их при столкновениях с легкими, т.е. – больших кластеров с молекулами или с малыми кластерами.

- Температура Бойля при различных давлениях соответствует условию, когда влияние собственного объема частиц компенсируется переменностью числа молей молекулярно-кластерной смеси.

- Обоснованное исследование газов возможно только при установлении его кластерного состава.

Теоретическая и практическая значимость исследования. Научная значимость проявляется в том, что в работе выявлены особенности газообразного агрегатного состояния, связанные переменностью кластерного состава. Физика этого явления в том, что кластерные субкомпоненты как самостоятельные субъекты процессов вносят свой вклад в свойства и тем самым влияют на наблюдаемые свойства всего газа. Такая модель требует пересмотра многих устоявшихся понятий, пересмотра многих характеристик газов, которые приводятся в справочниках как константы, так как они в своё время были получены на основе модели газа, в которой число молей считалось постоянным, молярная масса рассматривалась как некоторая константа для данного газа. Ясно, что новый подход усложняет описание, однако уже при современном уровне развития вычислительных методов и вычислительной техники такие усложнения легко преодолеваются. Кроме того, именно усложнения задач приводят обычно к прорывам в развитии вычислительной технике. Практическая ценность результатов диссертации состоит в том, что кластерная модель газов позволяет получить формулы для равновесных теплофизических свойств в виде фактора сжимаемости и вязкости газов, которые описывают реальные свойства в широком интервале макропараметров. Коэффициент вязкости газов входит в уравнения механики сплошной среды, и использование решений этих уравнений требует надежных методов определения сдвиговой и объемной вязкости в широком интервале макропараметров. Разработанные в диссертации методы расчетов решают эту проблему. Полученные данные о температурной зависимости эффективных диаметров столкновений молекул могут использоваться в расчетах свойств газов и паров.

Связь диссертационной работы с научно-исследовательскими программами.

Работа выполнялась в соответствии с планами следующих научно-исследовательских программ:

- программа Министерства науки РК «Свойства газов, плазмы и жидкостей». Отчет по теме НИИЭТФ ГПЖ-1/99 «Необратимые процессы в динамически структурированных газах и жидкостях» 1999 год, госрегистрационный № 0197РК00714;

- программа фундаментальных исследований: «Физика конденсированных, газообразных сред и проблемы материаловедения», по гранту Фонда науки НАН РК № 1-5-1.15-6(65), тема: «Равновесные и неравновесные свойства кластерных газов», госрегистрационный № 0103РК00670;

– программа фундаментальных исследований МОН РК № 1.13.3. Ф.0369/13, тема: «Расчеты термодинамических свойств газов на основе кластерного анализа», госрегистрационный № 0106РК00302;

– программа фундаментальных исследований: «Фундаментальные вопросы физики, математики, механики и информатики» МОН РК № 1.5.3. тема: «Энтропийно-синергийный анализ эволюции открытых систем», госрегистрационный № 0106РК00276.

Основные результаты диссертации опубликованы в работах [1-11]. В работах [1-3] влияние кластеров учтено в уравнении состояния реальных газов через фактор сжимаемости, и показано, что кластерная модель дает лучшее согласование с экспериментом по фактору сжимаемости, по сравнению с уравнением Ван-дер-Ваальса, что приводит к выводу о необходимости учитывать переменность числа молей в уравнении состояния.

В работах [4-11] приведены результаты расчетов концентраций кластеров и рассмотрено влияние их на барическую зависимость вязкости. Кроме того, приведены данные расчетов эффективных диаметров столкновений частиц из температурной зависимости вязкости. Из этих работ следует, что, несмотря на неоднозначность способов выбора эффективных диаметров, имеющиеся данные по температурной зависимости дают значения, использование которых в расчетах концентраций кластеров, дают хорошее согласование расчетов по фактору сжимаемости с экспериментом.

Апробация и внедрение результатов.

Основные положения и результаты докладывались на следующих научных конференциях и печатались в следующих научных изданиях: на X Российской конференции по теплофизическим свойствам веществ – Казань, Россия, 2002 г., на Шестой международной конференции «Организация структур в открытых системах». Алматы, 2002 г., на 56 Республиканской научной конференции молодых учёных, магистрантов и студентов «Молодежь и наука в третьем тысячелетии». -Алматы, 22-23 апреля 2002 г., на 3-й Международной научной конференции «Современные достижения физики и фундаментальное физическое образование», 1-3 октября 2003 г., Алматы, на Всероссийской научной конференции студентов физиков. (ВНКСФ–12). Новосибирск, 2006 г., «Наука и новые технологии» №6. 2013г., - Бишкек, «Известия ВУЗов» №6. 2014г.,-Бишкек., «Вестник КазАТК им. Тынышпаева» №1. 2015г., «Вестник КазГАСА» №3. 2015г.

Полнота отражения результатов диссертации в публикациях. Основные результаты исследования отражены в 22 опубликованных работах, в том числе 7 работ в зарубежных изданиях, РИНЦ.

Структура и объем диссертации. Содержание работы изложено на 101 печатных страницах и состоит из введения, четырех глав, заключения, библиографии, включающей 110 наименований, приложений.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обосновывается актуальность проблемы исследования; определяются объект и предмет исследования; формулируются цель и задачи исследования; раскрываются научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы; изложены положения, выносимые на защиту; определён личный вклад соискателя; приведены сведения об апробации и внедрении результатов исследования; структура и объем диссертации; представлены этапы проведенного исследования.

В первой главе «Кинетика газов и влияние кластеров на межфазовое состояние газовых смесей» сделан литературный обзор по теме исследования. Основная трудность применения кластерной модели газов состоит в определении кластерного состава. В конечном счете особенности равновесных свойств реальных газов в этой модели

определяется кластерным составом. Кластерный состав можно количественно характеризовать двумя способами [БольцманЛ., Хир К.]. В первом способе числовая доля (концентрация) кластеров определенного размера, т.е., содержащих g молекул, вводится относительно числовой плотности кластеров всех размеров

$$C_g^{(c)} \equiv \frac{n_g}{\sum_{g=1}^r n_g}, \quad (1.1)$$

где n_g –числовая плотность g -мерных кластеров,

r –размер наибольшего кластера, который учитывается в данной задаче.

Такая концентрация удобна для описания кластерного газа как смеси квазихимических компонентов–кластеров, в котором кластеры рассматриваются как полимолекулы [Голубев И.Ф.]. Она аналогична числовой доле, вводимой в кинетической теории многокомпонентных газовых смесей [Яковлев В.Ф.]. В частности, через эту концентрацию выражается средняя молярная масса кластерной смеси как некоторая средневзвешенная величина:

$$\langle M \rangle = \sum_{g=1}^r C_g^{(c)} M_g, \quad (1.2)$$

где $C_g^{(c)}$ –концентрация g -мерных кластеров относительно суммарной числовой плотности всех кластеров,

$\langle M \rangle$ –средняя молярная масса кластерной смеси.

M_g –молярная масса g -мерного кластерного субкомпонента.

Эта формула для средней молярной массы кластерной смеси получается по аналогии с формулой для смеси газов, состоящих из молекул разного вида.

Концентрацию $C_g^{(c)}$ можно выразить через отношение парциального давления кластерного субкомпонента к общему давлению газа. В кластерной модели влияние сил взаимного притяжения учитывается через механизм образования кластеров, и уравнение состояния для каждого кластерного субкомпонента можно записывать в виде:

$$pV(1 - \frac{B}{V}) = \frac{m}{M} RT; \quad p = \frac{m}{V(1 - b)M} RT. \quad (1.3)$$

где V –объем сосуда, в котором находится газ,

B –поправка на собственный объем частиц,

b –поправка на собственный объем частиц, приходящаяся на единицу объема,

m –масса всего газа,

M –молярная масса,

T –температура,

R –универсальная газовая постоянная.

Записывая такое уравнение состояния для парциальных давлений, выражение для концентрации можно записать в виде:

$$C_g^{(c)} = \frac{n_g \frac{kT}{1-b}}{\frac{kT}{1-b} \sum_{g=1}^r n_g}. \quad (1.4)$$

Через $C_g^{(c)}$ можно выразить парциальное давление кластерного субкомпонента:

$$pC_g^{(c)} = \frac{m_g}{V(1-b)M_g} RT, \quad (1.5)$$

где m_g -масса одного g -мерного кластера,

Эту формулу можно представить в виде:

$$M_g C_g^{(c)} = \frac{m_g}{V(1-b)p} RT. \quad (1.6)$$

Суммирование по всем кластерам дает:

$$\sum_{g=1}^r M_g C_g^{(c)} = \frac{RT}{V(1-b)p} \sum_{g=1}^r m_g = \frac{m}{V} \frac{RT}{(1-b)p} = \frac{\rho RT}{(1-b)p}. \quad (1.7)$$

Как принято в теории плотных газов Энскога, из геометрических соображений поправка на собственный объем выражается через эффективный диаметр столкновений молекул [Петров Ю.И.]:

$$b = \frac{2}{3} n^{(n)} \pi \sigma^3, \quad (1.8)$$

где σ -эффективный диаметр столкновений молекул,

$n^{(n)}$ -числовая плотность молекул.

Вторая концентрация кластеров вводится как доля (концентрация) g -мерных кластеров по отношению к числовой плотности молекул-носителей химических свойств:

$$C_g^{(n)} = \frac{n_g}{n^{(n)}} = \frac{n_g}{\sum_{g=1}^r g n_g}, \quad (1.9)$$

где $n^{(n)}$ -числовая доля молекул (число молекул, приходящихся на единицу объема).

Связь между введенными концентрациями получается из сопоставления определений для них:

$$C_g^{(n)} = \frac{n_g}{n^{(n)}} = \frac{n_g}{\sum_{g=1}^r g n_g} = C_g^{(c)} \frac{n^{(c)}}{\sum_{g=1}^r g n_g} = C_g^{(c)} \frac{n^{(c)} / n^{(c)}}{\sum_{g=1}^r g n_g / n^{(c)}} = C_g^{(c)} \frac{1}{\sum_{g=1}^r g C_g^{(c)}}, \quad (1.10)$$

Как уже отмечалось, отклонения уравнения состояния реального газа от идеального удобно отражать через фактор сжимаемости. Приведенные соотношения дают для него следующие формулы, эквивалентность которых показали расчеты:

$$z = \frac{1}{(1-b) \sum_{g=1}^r g C_g^{(c)}}; \quad (1.11)$$

В настоящей диссертации расчеты фактора сжимаемости проведены по этим формулам. Для расчетов концентраций кластеров разработана схема, которая основана на экспоненциальном распределении кластеров по их размерам [Больцман Л., Хир К.]. Такое распределение следует из общих соображений, в частности, из распределения Гиббса. В схеме расчетов удобно использовать концентрацию $C_g^{(c)}$, для которой экспоненциальное распределение записывается так:

$$C_g^{(c)} = C_1^{(c)} \exp[-\beta(g-1)], \quad (1.12)$$

β - нормировочный множитель,

$C_1^{(c)}$ -числовая доля (концентрация) молекул как одномерных кластеров относительно числовой плотности кластеров.

Это соотношение вместе с ранее введенными величинами дает систему уравнений, которая является основой для расчетов концентраций кластеров и через них—для описания равновесных и неравновесных свойств реальных газов и паров:

$$C_1^{(c)} \left(1 + \sum_{g=2}^r \exp[-\beta(g-1)] \right) - 1 = 0; \quad (1.13)$$

$$C_1^{(c)} \sum_{g=1}^r \{ g \exp[-\beta(g-1)] \} - \frac{\rho RT}{p M_1 (1-b)} = 0; \quad (1.14)$$

Во второй главе «Вязкость газов» приведены экспериментальные методы измерения вязкости при различных температурах и давлениях. Наибольшее распространение получили следующие методы измерения вязкости [Лыков А.В., Курлапов Л.И.]. Метод капилляра, основанный на использовании капиллярных вискозиметров различного типа. В основе метода лежит использование течения Пуазейля в капилляре и измерение расхода под действием измеряемой разности давления. Метод вращающихся дисков, в котором чаще всего используется эффект затухания колебаний диска в газовой среде, которая определяется вязкостью газа. Метод падающего груза, в котором используется эффект торможения падающему грузу, который определяется в основном вязкостью газа. Как измерения, так и теоретическое описание вязкости основано на использование феноменологического закона трения, который является обобщением многочисленных экспериментов. Конститутивным соотношением для описания вязкости (внутреннего трения) является закон трения Ньютона-Рихмана. Для одномерного течения типа куэттова течения этот закон запишется в виде

$$P_{xy} = -\eta \frac{dW_y}{dx}, \quad (2.1)$$

где P_{xy} - компонент тензора вязких напряжений,

η - коэффициент вязкости (обычно считается тензором нулевого ранга—скаляром),

$\frac{dW_y}{dx}$ - компонент градиента скорости течения для одномерного случая.

W_y - составляющая скорости течения вдоль оси ou .

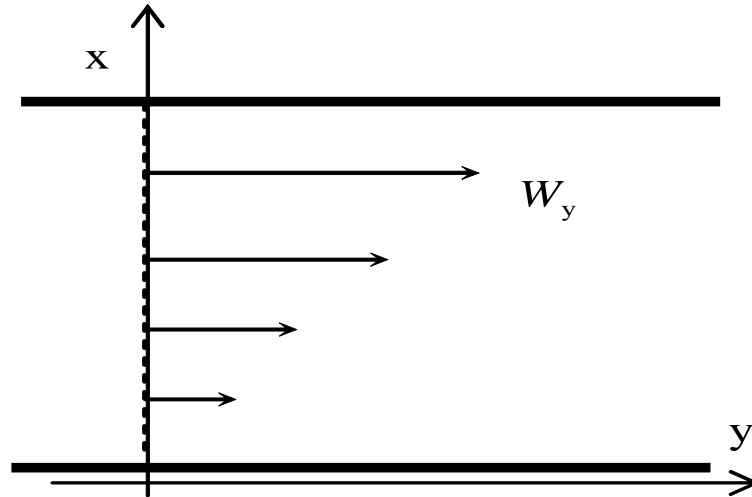


Рисунок 1-Одномерное течение Куэтта между двумя плоскостями

В символьной форме в общем случае этот закон можно записать так:

$$\vec{P} = -\vec{\eta} \cdot \vec{G}, \quad (2.2)$$

где символом \vec{P} - обозначен тензор вязких напряжений (тензор второго ранга),

$\vec{\eta}$ - коэффициент вязкости как тензор второго ранга,

\vec{G} - тензор скоростей сдвига, который в компонентной форме записывается так:

$$G_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial W_j}{\partial r_i} + \frac{\partial W_i}{\partial r_j} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial W_i}{\partial r_i}. \quad (2.3)$$

В условиях слабых неоднородностей и когда скорость упорядоченного движения (скорость течения) намного меньше средней скорости теплового хаотического движения частиц, газ представляет собой изотропную среду, и коэффициент вязкости можно считать тензором нулевого ранга (скаляром), а тензор градиент скорости течения—симметричным тензором.

Самым простым соотношением для коэффициента вязкости смеси является соотношение, в котором он выражается через коэффициенты вязкости чистых газов линейным законом:

$$\eta = \sum_{\alpha=1}^S x_{\alpha} \eta_{\alpha} , \quad (2.4)$$

где η_{α} - коэффициент вязкости чистого компонента под номером α , x_{α} -числовая доля молекул этого компонента в смеси, S -число компонентов в смеси.

Такое соотношение следует из аддитивности импульса, и оно правильно отражает факт сложения вязкостей компонентов, но при этом необходимо учесть, что парциальные коэффициенты вязкости, входящие в эту формулу, определяются столкновениями не только молекул одинаковой массы, но и разной массы. В разнородных столкновениях влияние персистенции скоростей на легкие молекулы и на тяжелые различно. Таким образом, как это принято в теории Максвелла-Больцмана-Джинса, учет транспортной длины свободного пробега, приводит к следующей формуле для вязкости многокомпонентной смеси [Jeans J, Богатырев А.Ф., Косов Н.Д.]:

$$\eta = \sum_{\alpha=1}^S \frac{1.051 \langle v_{\alpha} \rangle n_{\alpha} m_{\alpha}}{3\pi \sum_{\gamma=1}^S (1 - \Theta_{\alpha\gamma}^2) n_{\gamma} \sigma_{\alpha\gamma}^2 \sqrt{1 + \frac{m_{\alpha}}{m_{\gamma}}}}, \quad (2.5)$$

где n_{α} -парциальная числовая плотность компонента смеси под номером α ,

$$\langle v_{\alpha} \rangle = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_{\alpha}}} . \quad (2.6)$$

Более точное выражение для коэффициента вязкости смеси получается из решения кинетического уравнения, что позволяет дать микроскопическую интерпретацию введенных на феноменологическом уровне величинам.

Для смеси газов конститутивное соотношение для вязкости можно записать через парциальные коэффициенты вязкости:

$$\vec{P} = -\eta \vec{G} = \sum_{\alpha=1}^S \eta_{\alpha} \vec{G}, \quad (2.7)$$

так как из аддитивности импульса следует, что

$$\vec{P} = \sum_{\alpha=1}^S \vec{P}_{\alpha} , \quad (2.8)$$

где \vec{P}_{α} -парциальная поверхностная плотность потока импульса.

В кинетической теории тензор вязких напряжений вводится как момент второго порядка от функции распределения. В первом приближении \vec{P}_{α}^f записывается так:

$$\vec{P}_{\alpha}^f = \int m_{\alpha} \overrightarrow{v_{\alpha} v_{\alpha}} f_{\alpha}^{(1)} d^3 \xi_{\alpha} \quad (2.9)$$

где $\vec{\xi}_{\alpha}$ - скорость молекул компонента α в первичной инерциальной системе отсчета.

Неравновесная функция распределения $f_{\alpha}^{(1)}$ выражается через локально-максвелловскую функцию и функцию возмущения $\Phi_{\alpha} \ll 1$:

$$f_{\alpha}^{(1)} = f_{\alpha}^0 (1 + \Phi_{\alpha}). \quad (2.10)$$

Второй член в этом выражении представляет собой тензор вязких напряжений:

$$\vec{P}_{\alpha} = \int m_{\alpha} \overrightarrow{v_{\alpha} v_{\alpha}} f_{\alpha}^0 \Phi_{\alpha} d^3 v_{\alpha} \quad (2.11)$$

Для описания вязкости используется время вязкостное время свободного пролета $\omega_{\alpha}^{(1)}$, через которое затем определяется и парциальный тензор напряжений:

$$\vec{P}_{\alpha} = - \int 2\omega_{\alpha}^{(1)} \overrightarrow{V_{\alpha} V_{\alpha}} : \overrightarrow{V_{\alpha} V_{\alpha}} f_{\alpha}^0 d^3 v_{\alpha} \overrightarrow{\nabla W} \quad (2.12)$$

При использовании только нулевого приближения для времени свободного пролета,

$$\vec{P}_{\alpha} = -2\omega_{\alpha}(0) \int \overrightarrow{V_{\alpha} V_{\alpha}} : \overrightarrow{V_{\alpha} V_{\alpha}} f_{\alpha}^0 d^3 v_{\alpha} \overrightarrow{\nabla W} \quad (2.13)$$

Это соотношение поддается интегрированию, а сравнение результата с конститутивным соотношением дает формулу для коэффициента вязкости в первом приближении.

Коэффициент вязкости смеси в этом приближении через безразмерные интегралы столкновений выражается так:

$$[\eta]_l = \sum_{\alpha=1}^s \frac{x_{\alpha} h \sqrt{T}}{\sum_{\beta=1}^s x_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}^2 \sqrt{\frac{2M_{\beta\alpha}}{M_{\alpha}}} (5M_{\alpha\beta} + 3M_{\beta\alpha})}, \quad (2.14)$$

$$h = 8009 \cdot 10^{-29} \text{ Дж}^{1/2} \text{ К}^{-1/2} \text{ кмоль}^{1/2}$$

x_{α} -числовая доля (для газа Больцмана она совпадает-с объёмной долей C_{α}),

$$M_{\alpha\beta} \equiv \frac{m_{\alpha}}{m_{\alpha} + m_{\beta}} = \frac{M_{\alpha}}{M_{\alpha} + M_{\beta}} \text{ -относительная масса, } M_{\beta} \text{ -масса киломоля, кг/кмоль (в}$$

этом случае молярная масс численно равна числу, указанному в таблице Менделеева), h - размерный коэффициент, T -температура, К; $\sigma_{\alpha\beta}$ -эффективный диаметр твердых сфер, зависящий от температуры, м.

В кинетической теории обычно используется метод последовательных приближений, в котором порядок приближения определяется числом членов, которые удерживаются в разложении искомой функции скорости по ортогональным полиномам. Во втором приближении коэффициент вязкости смеси определяется следующей формулой:

$$[\eta]_2 = \sum_{\alpha=1}^s [\eta_{\alpha}]_2 = \sum_{\alpha=1}^s [\eta_{\alpha}]_1 \frac{1}{1 - \Delta_{\alpha}^{\eta}(2)}, \quad (2.15)$$

где поправка $\Delta_{\alpha}^{\eta}(2)$ обычно составляет доли процентов.

Усложнения, связанные с использованием высших приближений не оправданы, так как они не дают ничего нового в выявлении зависимостей вязкости от температуры или давления, поэтому в настоящей диссертации за основу взята формула в первом приближении.

В третьей главе «Расчеты равновесных свойств молекулярно-кластерных газов»

В кластерной модели главной причиной отклонений равновесных свойств газов от идеальных считается изменение числа молей, связанное с изменениями концентраций кластеров. Таким образом, основная проблема заключается в определении концентраций кластеров как функции давления и температуры. В настоящей главе приведены результаты расчетов концентраций кластеров в газах, основанные на решении системы уравнений (1.16)-(1,18), приведенной в главе 1. В данной диссертации разработана схема расчетов концентраций кластеров, фактора сжимаемости, коэффициентов вязкости кластерной смеси, парциальных коэффициентов вязкости и парциальной вязкости в виде одной компьютерной программы. Удобство и быстрота действия (расчет в приближении сорокопятимеров занимает время несколько минут) позволяет быстро получать данные указанные в свойствах. Программа оформлена в виде файла, занимающего мало памяти, что позволяет для каждого газа при конкретных значениях параметров иметь одну отдельную программу.

Для расчетов концентраций кластеров необходимо использовать справочные данные по удельному или молярному объему. В связи с важностью и широким использованием таких данных к настоящему времени накоплен достаточно большой массив таких данных. Для многих газов в системе ГСССД в свое время были опубликованные отдельные книги, в которых собраны достоверные данные о многих свойствах. В настоящей диссертации использованы такие данные, так как при этом упрощается анализ погрешностей: для этих данных доверительный интервал соответствует стандартной надежности.

Данные по эффективным диаметрам столкновений в основном найдены по методике, описанной в разделе 2. Для большинства газов эффективные диаметры столкновений рассчитаны по температурной зависимости вязкости, а при отсутствии таковой из коэффициентов самодиффузии. Результаты таких расчетов приведены на рисунках 13–22 и в таблицах 3.1–3.4. При различных условиях и для разных газов использовалась схема расчетов, в которой учитывались кластеры до десятимеров, двадцатимеров, сорокопятимеров. Чаще всего на графиках или в таблицах проводилось сокращение до кластеров такого размера, для которого концентрация не превышала 0,0001 числовой доли. Кроме приведенных в данной диссертации были проведены расчеты и для других газов и были получены аналогичные результаты. Общий вывод заключается в том, что в газах при повышенных давлениях или/или низких температурах могут существовать

кластеры до двадцатого размера. Видно также, что с ростом давления или понижением температуры уменьшается доля молекул и возрастает концентрация тяжелых кластеров.

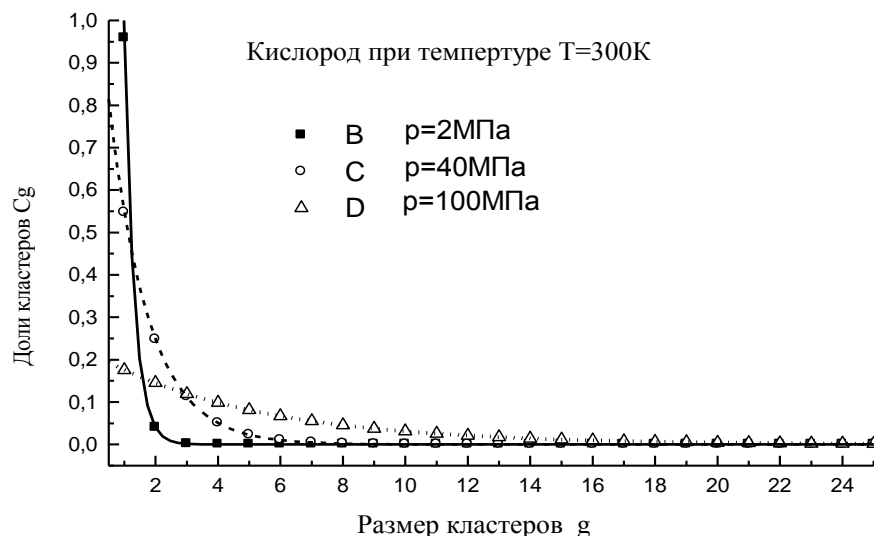
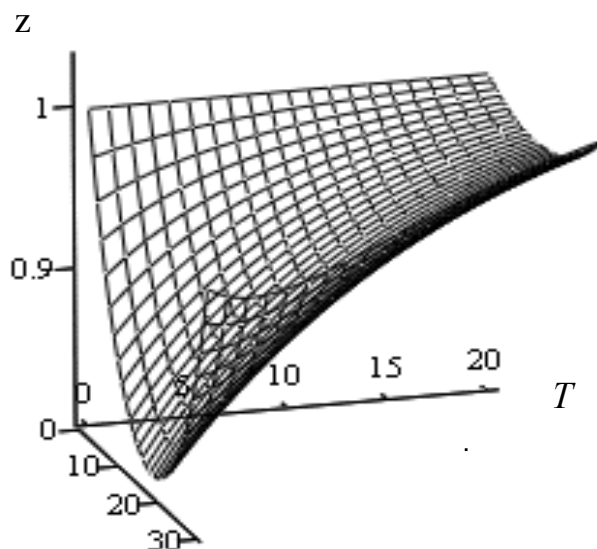


Рисунок 2 – Зависимость размера кластеров от давления

Линии – расчеты по формуле $C_g^{(c)} = C_1^{(c)} \exp[-\beta(g-1)]$ как результаты решения системы уравнений (1.16)– (1.18) в приближении учета кластеров до тридцатимеров с использованием табличного значения плотности при соответствующих условиях [Курлапов Л.И.].

Как видно из рисунка, при высоких температурах фактор сжимаемости, оставаясь больше единицы, начинает уменьшаться. Этим он отличается от второго вириального коэффициента, который для всех вещества, кроме гелия, только возрастает. Это объясняется тем, что второй вириальный коэффициент при обработке экспериментальных данных трудно отделить от высших вириальных коэффициентов. Приведенные на рисунке 3 данные относятся к давлению, при котором уже нельзя пренебрегать и третьим и последующими вириальными коэффициентами. Фактор сжимаемости удобнее вириальных коэффициентов, так как при его вычислении нет проблемы отделения одного вириального коэффициента от другого, а в кластерной модели он просто отражает кластерный состав, и в ней, как и в эксперименте, получается уменьшение фактора сжимаемости при высоких температурах.



$P, \text{ МПа}$

Рисунок 3—Фактор сжимаемости кислорода как функция давления и температуры

По оси от 0 до 30 отложено давление в МПа, по оси от 0 до 20 отложена температура в десятках кельвинов. Расчет по уравнению Ван-дер-Ваальса.

В четвертой главе «Расчеты коэффициента вязкости газов с учетом влияния кластеров»

В кластерной модели появляется еще один механизм барической зависимости, механизм, связанный с эффектом персистенции скоростей для тяжелых кластеров. В настоящей главе рассматривается барическая зависимость вязкости в рамках кластерной модели.

Для молекулярно-кластерной смеси формула для сдвиговой вязкости записывается через концентрации и параметры столкновений кластеров:

$$\eta = \sum_{g=1}^r \frac{C_g^{(c)} h \sqrt{T}}{\sum_{l=1}^r C_g^{(c)} \sigma_{gl}^2 \sqrt{\frac{2M_{lg}}{M_g}} (5M_{gl} + 3M_{lg}) \chi_{gl}}, \quad (4.1)$$

где l -размер кластера, содержащего l молекул,

$M_{gl} \equiv \frac{M_g}{M_g + M_l}$ —приведенная безразмерная масса, выраженная через молярные

массы M ,

h -размерный коэффициент: $h = 8009 \cdot 10^{-29} \text{ Дж}^{1/2} \text{ К}^{-1/2} \text{ кмоль}^{1/2}$.

σ_{gl} -эффективный диаметр столкновений соответствующих кластеров, зависящий от температуры.

В отличие от смеси, состоящей из молекул разного сорта, в этой формуле суммирование производится по кластерным субкомпонентам, которые классифицируются по количеству входящих в них молекул, поэтому молярная масса кластеров вычисляется через молярную массу мономеров. Радиальная функция χ_{gl} учитывает, как обычно, взаимную экранировку и собственный объём частиц [Смирнов Б.М., Комаров В.Н.]. Такая функция является обобщением поправки, введенной Энскогом [Смирнов Б.М., Яковлев В.Ф.], и ее можно называть поправкой энскоговского типа. Эффективный диаметр кластеров больше диаметров молекул, поэтому при их столкновениях необходимо учитывать механизм передачи импульса упорядоченного движения на расстояние их эффективного диаметра:

$$s_{gl} = \frac{\sigma_{gl}}{\tau_g} \sqrt{\frac{m_g}{3kT}}. \quad (4.2)$$

Эту поправку удобно ввести в радиальную функцию. Тогда она будет иметь следующий вид:

$$\chi_{gl} = \frac{1}{S^3(1+s_{gl})} \left\{ S^2 + 3 \frac{\sigma_{gg}\sigma_{ll}}{\sigma_{gg} + \sigma_{ll}} S S_2 + 2 \left(\frac{\sigma_{gg}\sigma_{ll}}{\sigma_{gg} + \sigma_{ll}} \right)^2 S_2^2 \right\}, \quad (4.3)$$

$$S_2 \equiv \frac{\pi n^{(n)}}{6} \sum_{l=1}^r C_l^{(c)} \sigma_{ll}^2,$$

$$S \equiv 1 - \frac{\pi n^{(n)}}{6} \sum_{l=1}^r C_l^{(c)} \sigma_{ll}^3.$$

Расчеты по этим формулам приведены в третьем разделе. Сравнение с имеющимися литературными данными показывают, что она правильно отражает рост вязкости с давлением. Это позволяет сделать вывод о том, что кластерная модель в сочетании с кинетической теорией многокомпонентных смесей позволяет прогнозировать барическую зависимость вязкости в широком интервале параметров состояния.

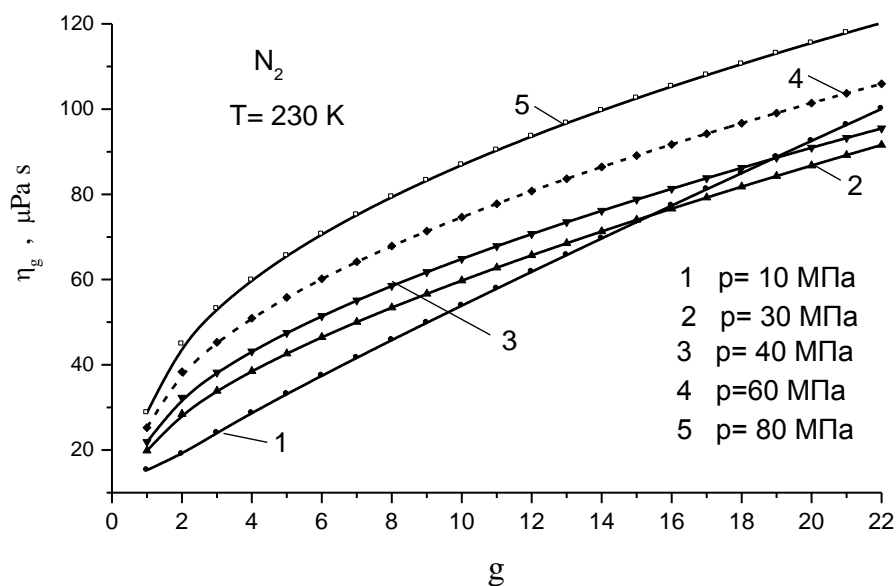


Рисунок 4—Барическая зависимость вязкости азота при температуре, 230K

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- Расчеты концентраций кластеров в газах с различными характеристиками молекул (аргон, азот, кислород, криптон) при различных давлениях и температурах (от критической до температуры ионизации) показали, что в газах структурными элементами, определяющими свойства, являются не только молекулы, но и кластеры.
- Установлено, что температура Бойля соответствует условию, при котором влияние собственного объема частиц компенсируется влиянием кластеров, существование которых приводит к изменению числа молей структурных элементов, создающих давление.
- Расчеты фактора сжимаемости при различных давлениях и температурах хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными (справочными) данными, что подтверждает работоспособность молекулярно-кластерной модели газов.
- Путем обработки температурной зависимости вязкости газов получены данные по температурной зависимости эффективного диаметра столкновений молекул, необходимые для расчетов концентраций кластеров и других свойств газов.
- Получены данные по барической зависимости вязкости газов (аргон, азот, кислород, криптон, метан) с учетом влияния кластеров, которые согласуются с имеющимися табличными данными и, таким образом, выявлен кластерный механизм барической зависимости вязкости газов.
- Расчеты парциальной вязкости кластерных субкомпонентов показал, что рост вязкости с давлением обусловлен аномально большим парциальным коэффициентом вязкости, что имеет наглядное объяснение на основе учета эффекта персистенции скоростей тяжелых частиц (больших кластеров) при столкновениях с легкими (молекулами).

Расчеты коэффициента объемной вязкости молекулярно-кластерной смеси аргона при температуре 220K и парциального коэффициента объемной вязкости, а также парциальной объемной вязкости, показали, что объемная вязкость исчезает при давлениях ниже атмосферного, но при давлениях выше 40МПа превышает сдвиговую вязкость.

Оценка полноты решения поставленной задачи

Результаты данной диссертационной работы представляют собой определенный шаг в развитии молекулярно-кластерной модели газообразного состояния. Поставленные задачи выполнены полностью. Схема расчетов концентраций кластеров проверена на газах, состоящих из разных по свойствам молекул. Полученные данные согласуются с табличными данными по фактору сжимаемости. Показано, что влияние кластеров на вязкость выражается в виде барической зависимости. Расчеты достаточно хорошо согласуются с известными сглаженными экспериментальными данными. Таким образом, доказано, что для описания молекулярно-кластерных газов можно применять методы кинетической теории многокомпонентных смесей.

Практическая ценность результатов диссертации состоит в том, что разработанные методики расчетов кластерного состава и вязкости можно применять для различных газов или паров в широкой области макропараметров. Данные по температурной зависимости эффективных диаметров столкновений молекул можно использовать практически во всех теплофизических расчетах по формулам, основанным на кинетической теории газов. Данные по сдвиговой и объемной вязкости можно использовать при решении уравнений механики сплошных сред тепломассопереноса для описания важных для практики процессов.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Ташимбетова А.Т. Диффузия разреженных и плотных газов. X Российская конференция по теплофизическим свойствам веществ. Казань, Россия, 30 сентября – 4 октября 2002 года. - Стр. 128.
2. Ташимбетова А.Т. Расчет равновесных и неравновесных свойств кластерных газов. X Российская конференция по теплофизическим свойствам веществ. 30 сентября – 4 октября 2002 года. Казань, Россия. Стр. 128.
3. Ташимбетова А.Т. Расчет концентрации кластеров и фактора сжимаемости в газах. Вестник КазНУ им. аль-Фараби. Серия физическая. – 2002. – №1(12). – С. 112-116.
4. Ташимбетова А.Т. Влияние кластеров на вязкость умеренно плотных газов. Вестник КазНУ им. аль-Фараби. Серия физическая. – 2003. – №2 (15). – С. 123-128.
5. Ташимбетова А.Т. Расчет температурной зависимости эффективных диаметров столкновений. 57-я Республиканская научная конференция молодых ученых, магистрантов и студентов «Образование, наука и молодежь: взгляд в будущее Казахстана», посвященная 70-летию КазНУ им. аль-Фараби. 21-28 апреля 2003 г. Казак университеті, Алматы, 2003 , с. 103.
6. Ташимбетова А.Т. Вязкость кластерных газов. 57-я Республиканская научная конференция молодых ученых, магистрантов и студентов «Образование, наука и молодежь: взгляд в будущее Казахстана», посвященная 70-летию КазНУ им. аль-Фараби. 21-28 апреля 2003 г. Казак университеті, Алматы, 2003
7. Ташимбетова А.Т. Влияние кластеров на барическую зависимость коэффициент диффузии. Материалы Всероссийской научной конференции студентов физиков. (ВНКСФ – 12). Новосибирск, 23-29 марта 2006. – С. 332-333.
8. Ташимбетова А.Т. Влияние кластеров на барическую зависимость коэффициент вязкости. Вестник КазНУ имени аль-Фараби, Серия физическая г.Алматы, №1(23), 2007
9. Ташимбетова А.Т. Расчеты коэффициента объемной вязкости молекулярно-кластерной смеси аргона при давлении 4,0 МПа. Вестник КазНУ имени аль-Фараби, Серия физическая г.Алматы, №2(24), 2007г.

10. Ташимбетова А.Т. Расчеты коэффициента сдвиговой вязкости инертных газов. Вестник КазНУ имени аль-Фараби, Серия физическая г.Алматы, №1(17), 2008г.
11. Ташимбетова А.Т. Роль коэффициента вязкости газов и жидкостей в строительных материалах. Сборник материалов Международной научно-практической конференции «Архитектурно-строительное образование Казахстана: развитие и перспективы», посвященной к 50-летию высшего образования в Казахстане. Алматы, 2011 г.
12. Ташимбетова А.Т. Роль коэффициента вязкости газов на атмосферное давление. Сборник материалов международной научно-методической конференции «Прикл.вопросы естественных наук». – Алматы, 2012 г.
13. Ташимбетова А.Т. Расчеты вязкости кластерных газовых смесей по кинетической теории газов. Сборник материалов международной научно-методической конференции «Актуальные вопросы естественно-научных дисциплин», 2013 г.
14. Ташимбетова А.Т., Цой А.П., Грановский А.И., Разработка инновационной холодильной системы с использованием эффективного излучения в космосе. Сборник материалов Международной научно-методической конференции «Актуальные вопросы естественно-научных дисциплин», 2014 г.
15. Ташимбетова А.Т. Влияния кластеров на барическую зависимость вязкости газов. Известия ВУЗов, №6., Кыргызская Республика, г. Бишкек, 2013.
16. Ташимбетова А.Т. Расчет концентрации кластеров и фактора сжимаемости в газах. Известия ВУЗов, №6., Кыргызская Республика, г. Бишкек, 2013.
17. Ташимбетова А.Т. Расчеты эффективных диаметров столкновений молекул по данным от температурной зависимости вязкости и коэфф. диффузии разреженных газов. Наука и новые технологии, №6, Изд-во НЖИДХЛ, Кыргызская Республика, г. Бишкек, 2015. (РИНЦ)
18. Ташимбетова А.Т. Барическая зависимость кластерных газов. «Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук», Москва, Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), октябрь 2015г. Журнал включен в международный каталог периодической изданий «Ulrich`s Periodicals Directory» (издательство «Bowker», США).
19. Ташимбетова А.Т. Расчеты вязкости кластерных газов в широкой области давлений. «Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук», Москва, Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), декабрь 2015г.
20. Ташимбетова А.Т. Роль коэффициента вязкости газов и жидкостей на атмосферу. «Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук», Москва, Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), апрель 2016г.
21. Ташимбетова А.Т. Расчеты числа столкновений молекул по данным от температурной зависимости вязкости разреженных газов. «Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук», Москва, Российского индекса научного цитирования (РИНЦ), апрель 2016г.
22. Ташимбетова А.Т. Равновесные свойства газов и влияние кластеров. 56-я международная научно –практическая конференция «Технические науки – от теории к практике», Алматы, январь 2016 год
23. Ташимбетова А.Т. Учет кластерной модели в уравнениях состояния газов. Научный журнал Физиа, илимий журналы, Бишкек, 2016, 24 октября.

Ташимбетова Акдана Турсынхановнанын
«Кластердик газдардын жылуулук өткөрүмдүүлүк касиеттери»

деген темада 01.04.14 - теориялык жылуулук техника жана жылуулук физикасы адистиги боюнча физика - математика илимдеринин кандидаттыгына талап кылынган диссертациянын

РЕЗЮМЕСИ

Урунттуу сөздөр: газ - аныкталган формага жана көлөмгө ээ болбогон заттын агрегаттык абалы, молекула - берилген заттын химиялык касиеттерине ээ болгон заттын майда бөлүгү, кластер - газдын физикалык касиеттерин аныктаган молекулалардын жыйындысы, кайталануучу процесс - энтропияны генерациялабаган процесс, кайталанбоочу процесс – энтропияны генерациялаган процесс.

Изилдөө объектиси газдардын молекулалык-кластердик аралашмасы (димерлер, тримерлер, квадрамерлер).

Иштин максаты: Газдардын кластердик моделин өркүндөтүү. Илешкетүүлүктү жана абалдын теңдемесин изилдөө аркылуу кластерлердин таасирин аныктоо жана эсептөөлөрдү белгилүү тажрыйбалык маалыматтар менен салыштыруу аркылуу эсептөөлөрдүн иштелип чыккан схемаларын текшерүү

Изилдөө ыкмалары: газдын кинетикалык теориясынын негизинде теориялык жана аналитикалык эсептөө.

Илимий жаңылык Биринчи жолу газдардын илешкектүүлүгүнүн барикалык көз карандылыгына жана абалдын теңдемесиндеги кысылуучу факторуна кластерлердин таасири эске алынган. Басым аркылуу илешкектүүлүктөрүнүн жогорулашы ири кластерлердин аномалдуу көп парциалдык илешкектүүлүктүн коэффициент менен байланышы аныкталган.

Алынган жыйынтыктар жана алардын жаңылыктары: Бул диссертацияда касиеттердин алып жүрүүчү бир гана молекула эмес жана кластерлер болгон газдын жаны модели иштелип чыккан. Газдардын бардык өзгөчөлүктөрүнүн биринчи себеби болуп молекулалардын өз ара аракет этишуу таасирлери эсептелинет, ондоо турундо которуу (перенос) процессинин катышын – Больцмандын газы үчүн алынган мындай аракет этишуулорду Ван-дер-Ваальстын ондоосунда эске алынган. Макропараметрлердин (басым, температура, химиялык компоненттердин курамы) өзгөрүү абалындагы кластерлердин пайда болушу туруктуу салмактын системасындагы молдук санынын өзгөрүшүнө дал келип, ал түздөн-түз абалдын теңдемесине таасир этип, молдук өтмө санына жазылышы абзел. Ал өзгөрмөлөрдүн киришин алмаштырбайт, себеби бул учурда ал башка мааниге жана сандык жактан башка мааниге ээ.

Молекулалардын кагылуушусундагы эффективдүү диаметрлердин температуралык көз карандылыгы боюнча, изилденип алынган маалыматтар макропараметрлердин кеңири аймагында газдардын жана буулардын касиеттерин эсептөө практикасында пайдаланышы мүмкүн.

Колдону аймагы (область): Алынган жыйынтыктар иштин оптималдуу режиминде колдонууга мүмкүндүк берет, мында башка нанотехнологиянын өнүгүшүндө колдонулат. Жыйынтыктар атайын дисциплиналарда окутуу процессиндеги «Жылуулуктехника», «Газодинамика» - деген темада колдонууга болот.

РЕЗЮМЕ

Ташимбетова Акдана Турсынхановна
«Теплофизические свойства кластерных газов»

Ключевые слова: газ – агрегатное состояние вещества, не имеющее формы и определенного объема, молекула – мельчайшая частица вещества, обладающая химическими свойствами данного вещества, кластер – совокупность молекул, определяющих физические свойства газа, обратимый процесс – процесс, не генерирующий энтропию, необратимый процесс – процесс, генерирующий энтропию.

В данной диссертации разрабатывается новая модель газов, в которой носителями свойств являются не только молекулы, но и кластеры. В качестве объекта исследований выбраны молекулярно-кластерные смеси газов, в которых заметную роль играют кластеры (димеры, тримеры, квадromеры и т.д.). Первопричиной всех особенностей газов являются силы межмолекулярного взаимодействия, и это всегда учитывалось как в уравнениях состояния через поправки типа поправок Ван-дер-Ваальса, а в соотношениях для процессов переноса – в виде поправок, полученным для газа Больцмана. Метод исследования расчетно-теоретический и аналитический, основанные на проверенных многолетней практикой методов, в частности на основе кинетической теории. Образование кластеров при изменении макропараметров (давления, температуры, состава по химическим компонентам) соответствует изменению числа молей системы постоянной массы, что напрямую влияет на уравнение состояния оно должно записываться для переменного числа молей, что не заменяет введение поправок, которые в этом случае имеют другой смысл и, следовательно, другие численные значения.

Полученные данные о температурной зависимости эффективных диаметров столкновений молекул, которые могут использоваться на практике в расчетах свойств газов и паров в широкой области макропараметров.

Объектом исследования является молекулярно-кластерная смесь газов.

Предмет исследования. Влияние кластеров на уравнение состояния и на вязкость газов в широкой области давлений и температуры.

Метод исследования – расчетно-теоретический и аналитический на основе кинетической теории газов.

Новизна исследования. Впервые учтено влияние кластеров на барическую зависимость вязкости газов и на фактор сжимаемости в уравнении состояния.

Установлено, что рост вязкости с давлением связан с аномально большим парциальным коэффициентом вязкости больших кластеров.

RESUME

Akdana T. Tashimbetova

Theme: “Influence of clusters on baric dependence of viscosity of gases”

The dissertation paper on scientific of the candidate of physical and mathematical sciences by specialty number 01.04.14- Thermophysics and thermoengineering

Key words: gas- the state of matter which has no shape and definite volume, molecule is the smallest particle of a substance having the chemical properties of this substance, cluster- set of molecules determines the physical properties of the gas, reversible process- a process that doesn't generate entropy, irreversible process- a process that generate entropy. In this dissertation developed a new model of gases, which carriers of properties are not only molecules and clusters. As an object of study selected molecular-cluster mixtures of gases in

which play a significant role clusters (dimers, trimers, quadromers etc.). The primary cause all the features of the gases are intermolecular forces and it is always taken into account in the equations of state through the corrections of the type of amendments van der Waals, and ratios for transfer processes- as amendments obtained for the Boltzmann gas. Method of research: settlement- theoretical and analytical based on proven long-term practice methods, in particular, based on the kinetic theory. The formation of clusters when changing macroparameters (pressure, temperature, composition for chemical components) corresponds to the change in the number of moles of constant mass that directly influences the state equation. It should be written to a variable number of moles that doesn't replace the introduction of amendments which in this case have a different meaning and therefore other numerical values.

Findings about the temperature dependence of the effective dimmers of molecular collisions, which can be used in practice, in the calculations of the properties of gases and vapors in a wide range of macroparameters.

Object of research is molecular-cluster mixtures of gases.

Subject of research is clusters influence on the equation of state and the viscosity of the gases in a wide range of pressures and temperatures.

Method of research: settlement-theoretical and analytical based on the kinetic theory of gases.

The novelty of the thesis. First considered influence of clusters to pressure dependence of the viscosity of gases and compressibility factor in the equation of state.

Founded that the increase of viscosity with pressure associated with an anomaly large partial coefficient of viscosity of large clusters.