2021.04.14

能造出功率效率都高的热机吗?

孙昌璞

合作者:马宇翰,翟若迅,陈劲夫,董辉





中国工程物理研究院研究生院 北京计算科学研究中心

中国工程物理研究院(九院/中物院)

铸国防基石 做民族脊梁

我国唯一的核武器 研发和生产单位

im.

China Academy Of Engineering Physics

需求牵引的独立自主基础研究



 *初級"("扳机")

 化学炸药

 小子

 <

坚持自主创新,紧盯 国家重大战略需求, 将核心技术牢牢掌握 在自己手里。

刘仓理《中国经济周刊》

http://news.ifeng.com/a/20160122/47178762_0.shtml

保障实战能力:整体可靠性与库存问题

未来发展需求: 禁核物理模拟数值计算

美国国核态势报告

https://media.defense.gov/2018/Feb/02/2001872886/-1/

核武器事业需求导向的从0到1的科学研究



彭桓武

物理精度上的工程: 绵阳的中国神光3号



http://www.cnwnews.com/uploads/allimg/



• 能源物理的科学基础

非平衡热力学

- 有限时间热力学:
 功率-效率的竞争关系
- 有限时间等温过程
 功不可逆性的实验测量
- 总结与未来展望



Y. H. Ma, R. X. Zhai, J. F. Chen, C. P. Sun, H. Dong, Phys. Rev. Lett. 125, 210601 (2020)
马宇翰,董辉,孙昌璞,能造出功率和效率都高的热机吗? 《物理》,50卷 (2021年)1期

能源危机引发的世界性问题:我在底特律亲历911



需求目标牵引的科学研究:基础能源科学

平衡环境约束和社会需求,有效地产生和 使用新能源是经济社会可持续发展的关键

1.可再生能源(Renewable Energy)
 2.其他替代能源(Alternative Energy)



风能,太阳能,水力,潮汐能, 生物质能,地热,核能等

基础能源科学 Basic Energy Sciences (DOE, US)

背景II:美国能源科学从需求导向到问题牵引

Phys. Today 61, July 28 (2008)



Grand challenges in basic energy sciences

Graham R. Fleming and Mark A. Ratner

Research focused in five related areas will allow unprecedented control over the microscopic world and could be the key to a sustainable future. CHALLENGES AT THE FRONTIERS OF MATTER AND ENERGY:

Transformative Opportunities for Discovery Science

Basic Energy Sciences Advisory Committee, US, 2015

- 在电子的微观层次上操控材料 的物性;
- 按能源发展需求设计、合成相
 关的功能材料;
- 利用和调控从复杂关联效应中 演生出的奇妙物性;
- 调控能量和信息,创造出与生 命媲美的能源技术;
- 5. 表征并调控非平衡物态,尤其 是远离平衡态的物态。

- 把握材料的构建层次和超越平衡态的物性;
 超越理想材料系统:理解异构体,界面和无序的关键作用;
 利用光和物质的量子相干性;
- 在模型、数学、算法、数据和 计算方面取得革命性的进展;
- 5. 探索跨尺度成像能力的变革。

能源属性决定了物理学在能源科学中可大有作为

能源存在形式: 热, 电, 光, 化学能, 核能等 能源转换传输: 光热, 光伏, 热电, 光催化等 能源存储技术: 电池, 电容, 储氢, 重力势能等

背景:基金委十三五、十四五的部署



能》	原物	理		200)7年-	201	0年	
、 人 新 能 安	エ光 型 源 全、	た 合 们 町 町 清 清	乍 用 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1	研 初研 記 の 高	究究了了	分 N核	子 牝 能 利	勿理 刘用
 差距	: 我	国通	常長	是从	领域	汸	句需	家

出发,而美国则是"需求导向、基 础问题牵引"

> 我国十四五能源相关 的基础研究怎么做?

一点背景:太阳能电池的功率与效率



晒一小时可烧开2kg水 或供40℃淋浴10分钟

充满电需要晒20小时

晒着太阳可满足办公需求 充满电需要晒7小时

太阳光辐射功率分布



假设太阳光谱是温度为T_s的黑体辐射

基础性的挑战问题举例:光伏转换极限

太阳电池光电转换SHOCKLEY-QUEISSER(SQ)极限



- 1. 高频光子激发的高于带隙的 电子与声子耦合引起的热耗
- 2. 低频光子无法激发电子越过 带隙实现光电转换

太阳电池转换效率存在SQ极限 ,源于声子热库与电子作用导致 的不可避免的热耗和光透射!

理想的能源转换过程: 卡诺循环?

能源转换过程:理想遭遇现实



$$\eta_{\rm Carnot} = 1 - \frac{T_C}{T_H}$$

Nicolas Léonard Sadi Carnot 1796–1832

V



卡诺热机需要工作在准静 态极限下,实现可逆循环 $t \to \infty$ 输出功率 $P = W/t \to 0$ 没有实际应用价值!

有限时间热力学

	理想热机	实际热机
循环时间	$t ightarrow\infty$	t 有限
效率	$\eta_{max} = 1 - T_C/T_H$	$\eta_{max} < 1 - T_C/T_H$
功率	$P \rightarrow 0$	P > 0
理想模型 实际系统		

- 有限时间过程不可逆性与能量耗散
- 有限时间热力学循环的功率-效率优化

热力学的新"相图"



有限时间

准静态

有限时间热机优化与最大功率效率EMP

Yvon 热机



$$\eta^{e}(T_{H}^{e})$$

$$= 1 - \frac{T_{C}^{e}}{T_{H}^{e}}$$

$$= 1 - \frac{T_{C}}{T_{H}^{e}}$$

J. Yvon, in Proceedings of the International Conference on Peaceful Uses of Atomic Energy, (United Nations, Geneva, 1955), p. 387

1、高温端做功物质和热库间有热流

$$\dot{Q}_{\rm H} = \kappa (T_{\rm H} - T_{\rm H}^{\rm e})$$

- 2、 低温端做功物质被热库热化 $T_{\rm C}^{\rm e} = T_{\rm C}$
- 3、假设热机内可逆(Endo-reversible)

热机工作在高温端和低温端温度分 别为*T*^e_H和*T*^e_C的可逆的卡诺循环中

相对于做功物质温度的热机功率优化

热机的输出功率

$$P(T_{\rm H}^{\rm e}) = \dot{W} = \eta^{\rm e} \dot{Q}_{\rm H} = \kappa \left(1 - \frac{T_{\rm C}}{T_{\rm H}^{\rm e}}\right) (T_{\rm H} - T_{\rm H}^{\rm e})$$
$$= \kappa \left(T_{\rm H} + T_{\rm C} - T_{\rm H}^{\rm e} - \frac{T_{\rm H} T_{\rm C}}{T_{\rm H}^{\rm e}}\right)$$



CA热机的优化

模型假设:不可逆性来源于系统与环境的热交换,在等温过程中,做功物质处在与热库温度不同的有效温度下,做功物质与 热库的热交换满足牛顿冷却定律: $\dot{Q} = \kappa(T - T_e)$



高温端等温传热过程

$$Q_h = \alpha (T_h - T_{he}) t_h$$

低温端等温放热过程

 $Q_c = \beta (T_{ce} - T_c) t_c$

 t_h, t_c 分别是高温、低温等温过程时间

CA热机的优化

内可逆(Endoreversible):不可逆热机被映射为一个工作 在处于做功物质有效温度的高低温热库之间的可逆热机,即

$$\frac{Q_h}{T_{he}} - \frac{Q_c}{T_{ce}} = 0$$

忽略绝热过程的时间,CA热机循环的功率为

$$P = \frac{Q_{h} - Q_{c}}{t_{h} + t_{c}} = \frac{T_{he} - T_{ce}}{\left[\frac{T_{he}}{\alpha(T_{h} - T_{he})} + \frac{T_{ce}}{\beta(T_{ce} - T_{c})}\right]}$$

CA热机的优化

 $以T_{he}$ 和 T_{ce} 为变量求P的最大值,得到

$$\frac{T_{ce}}{T_{he}} = \sqrt{\frac{T_c}{T_h}}$$

相应的, CA热机的最大功率效率为

$$\eta_{CA} = \frac{Q_h - Q_c}{Q_h} = 1 - \sqrt{\frac{T_c}{T_h}}$$

与Yvon热机的最大功率效率一致

非平衡热力学的有限时间尺度



压缩活塞到压强传感器的距离 d ~ 0.5m 声速v=340m/s





气体和外界平衡弛豫时间: $t_r = 1.94s$

理想气体实验的时间尺度 >> 气体与外界平衡弛豫时间

有限时间热力学的发展

- J. Yvon, in First Geneva Conf. Proc. UN (1955)
- I. Novikov, Journal of Nuclear Energy 7, 125 (1958)
- F. L. Curzon and B. Ahlborn, Am. J. Phys. 43, 22 (1975)
- B. Andresen, Finite-time thermodynamics (University of Copenhagen Copenhagen, 1983).

陈金灿,严子浚.有限时间热力学理论的特征及发展中几个重要标志[J].厦门大学学报(自然科学版),2001(02):232-241

陈林根,夏少军,冯辉君.不可逆循环的广义热力学动态优化研究进展[J].中国科学:技术科学,2019,49(11):1223-1267.

马宇翰, 董辉, 孙昌璞, 能造出功率和效率都高的热机吗?《物理》, 50卷 (2021年)1期

内热化的时间尺度=不可逆性的1 / τ 标度

实际热机	内可逆热机	线性不可逆热机	随机热机	低耗散热机
模型参数	α, β	L _{ij} , q	γ_c , γ_h	Σ_c , Σ_h
热机效率	$\eta_{CA} = 1 - \sqrt{\frac{T_c}{T_h}}$	$\eta_{LI}=rac{\eta_C}{2}$	$\eta_S = \frac{\eta_C}{2 - \eta_C/2}$	$\frac{\eta_c}{2} \leq \eta_{LD} \leq \frac{\eta_c}{2 - \eta_c}$

有限时间等温过程传热与熵产生的关系

$$\Delta Q = T \left(\Delta S - S^{(ir)} \right)$$

不可逆熵产生的时间反比关系 在各种模型中都有发现或预言



兼顾效率和功率的选择性优化

高温传热低温传热功率效率
$$Q_h = T_h \Delta S - \frac{\Sigma_h}{t_h}$$
 $Q_c = -T_c \Delta S - \frac{\Sigma_c}{t_c}$ $P = \frac{Q_c + Q_h}{t_c + t_h}$ $\eta = \frac{Q_c + Q_h}{Q_h}$

优化的参数

外部参数:	循环时间	内部参数:	弛豫时间
t_h ,	t _c	Σ_c ,	Σ_h

最大功率效率(EMP: Efficiency at maximum power)

 $\begin{aligned} & \text{Max}(P) \quad s.t. \quad (t_{c}, t_{h}) \implies \eta = \eta(t_{c}^{*}, t_{h}^{*}, \Sigma_{c}, \Sigma_{h}) \\ & \text{Max}(\eta) \quad s.t. \quad (\Sigma_{c}, \Sigma_{h}) \implies \eta = \eta(t_{c}^{*}, t_{h}^{*}, \Sigma_{c}^{*}, \Sigma_{h}^{*}) \end{aligned}$

低耗散热机:最大功率效率EMP

$$\eta *= \frac{\eta_C}{2 - \zeta \eta_C},$$
$$\varsigma = \left(1 + \sqrt{\frac{\Sigma_C}{\Sigma_h}}\right)^{-1}$$

$$\frac{\eta_{\mathcal{C}}}{2} < \eta \ll \frac{\eta_{\mathcal{C}}}{2 - \eta_{\mathcal{C}}}$$

M. Esposito et al., Phys. Rev. Lett. 105, 150603 (2010).







Y. H. Ma, D. Xu, H. Dong, C. P. Sun, Phys. Rev. E 98, 042112 (2018)

验证不可逆性 $1/\tau$ 标度的普适性

有限时间热力学

P. Salamon, A. Nitzan, B. Andresen, and R. S. Berry, Phys. Rev. A 21, 2115 (1980)

T. Schmiedl and U. Seifert, Europhys. Lett. 81, 20003 (2008)

M. Esposito, R. Kawai, K. Lindenberg, and C. V. den Broeck, Phys. Rev. Lett. 105, 150603 (2010)

衡热力学的多个研究方向都有重

要意义,但缺乏直接的实验检验

•随机热力学 $S^{(ir)} \propto \frac{1}{2}$ Z. Gong, Y. Lan, and H. T. Quan, Phys. Rev. Lett. 117, 180603 (2016) G. Li, H. T. Quan, and Z. C. Tu, Phys. Rev. E 96, 012144 (2017) 普适的时间反比标度律,在非平 热力学长度

G. E. Crooks, Phys. Rev. Lett. 99, 100602 (2007).

D. A. Sivak and G. E. Crooks, Phys. Rev. Lett. 108, 190602 (2012)

・量子热力学

V. Cavina, A. Mari, and V. Giovannetti, Phys. Rev. Lett. 119, 050601 (2017)

Y. H. Ma, D. Xu, H. Dong, and C. P. Sun, Phys. Rev. E 98, 042112 (2018)

用可测量表征不可逆熵产生:不可逆功

不可逆功
$$W^{(ir)} = W - \Delta F$$

长时极限(近平衡区域)

$$\lim_{t\to\infty} W^{(\mathrm{ir})} = T\Delta S^{(\mathrm{ir})}$$

热力学第一定律 牛顿传热定律

 $dU = C_V dT = dQ - PdV$ $\delta Q = -\kappa (T_{gas} - T_{bath})dt$

为什么选择理想气体作为实验系统



状态方程PV = nRT绝热方程 $PV^{\gamma} = C$

 $au \gg t_r \gg t_r^{ ext{internal}}$

- 1. 理想气体是一个简单、经典的内可逆体系
- 2. 状态由压强和体积确定,两者实验可测量

不可逆熵产生

 $\Delta S^{(ir)} = \Delta S^{(system)} + \Delta S^{(enviorment)}$

内可逆

$$= \int_{0}^{\tau} \left(\frac{\dot{Q}_{s}}{T_{s}(t)} + \frac{\dot{Q}_{e}}{T_{e}} \right) dt = \int_{0}^{\tau} \left(\frac{\dot{Q}_{s}}{T_{s}(t)} - \frac{\dot{Q}_{s}}{T_{e}} \right) dt$$
能量守恒

$$= \int_{0}^{\tau} \left(\frac{\dot{U} - \dot{W}}{T_{s}(t)} \right) dt - \frac{1}{T_{e}} \int_{0}^{\tau} (\dot{U} - \dot{W}) dt$$
理想气体

$$= \int_{0}^{\tau} \left(\frac{C_{V} \dot{T} s - nRT_{s} \dot{V} / V}{T_{s}(t)} \right) dt - \frac{1}{T_{e}} \int_{0}^{\tau} \left(C_{V} \dot{T} s - \frac{nRT_{s} \dot{V}}{V} \right) dt$$

$$T_{s}(\mathbf{0}) = T_{e}$$

不可逆熵产生

$$\Delta S^{(\mathrm{ir})} = C_V \ln\left[\frac{T_s(\tau)}{T_e}\right] + nR \ln\left(\frac{V_f}{V_0}\right) - C_V \frac{T_s(\tau) - T_e}{T_e} - \frac{\int_0^{\tau} P\dot{V}dt}{T_e}$$

长时近似 $|T_s(\tau) - T_e|/T_e \ll 1$

应用牛顿传热定律

$$\dot{Q_s} = -\kappa (T_s - T_e)$$

 $\dot{Q_s} = C_V \dot{T_s} + nRT_s \frac{\dot{V}}{V}$

$$\vec{T}_s = -\frac{\kappa}{C_V} (T_s - T_e) - \frac{nRT_s}{C_V} \frac{\dot{V}}{V}$$

$$T_{s} = \frac{1}{1 + \frac{nR\dot{V}}{\kappa V}} T_{e} - \frac{\kappa/C_{V}}{1 + \frac{nR\dot{V}}{\kappa V}} \frac{dT_{s}}{dt}$$

不可逆熵产生

$$\Delta S^{(\mathrm{ir})} = \int_0^\tau \left(\frac{\dot{Q_s}}{T_s} - \frac{\dot{Q_s}}{T_e}\right) dt = \int_0^\tau \frac{\kappa (T_s - T_e)^2}{T_s T_e} dt$$

长时近似

$$\frac{nR\dot{V}}{\kappa} = (1 - \gamma)t_r \frac{\dot{V}}{V} << 1$$

$$\downarrow$$

$$T_s \approx T_e / \left(1 + \frac{nR\dot{V}}{\kappa V}\right) \qquad \gamma = 絶热系数$$

不可逆熵产生

$$\Delta S^{(ir)} = \int_0^\tau \frac{\kappa (T_s - T_e)^2}{T_s T_e} dt = \kappa \int_0^\tau \left(\frac{nR}{\kappa}\frac{\dot{V}}{V}\right)^2 dt \qquad = \frac{(nR)^2 \left(V_f - V_0\right)^2}{\kappa \tau V_0 V_f}$$

不可逆功

$$W^{(ir)} = T_e \Delta S^{(ir)} = \frac{P_0 P_f^{\text{iso}} (V_f - V_0)^2}{\kappa T_e \tau}$$

$$P_0V_0 = nRT_e$$

过程结束对应的等温压强

$$P_{\rm f}^{\rm iso} = P_0 V_0 / V_{\rm f}$$

实验装置原理图

Μ **S**4 气压传感器 S1, S2, S3: P(t) 位置传感器 S4: $V(t) = V_0 - AL(t)$ S2 **S**3 气缸组整体沉浸在可控温的水浴中, C B 主气缸A中活塞由电脑控制步进电机 D 操纵,实现对气体的可控压缩

气体在水浴中弛豫时间测量



 $\Delta P(t) = \Delta P(0)e^{-t/t_r} \qquad \frac{c_V}{\kappa} = t_r = 1.942s$

气体的PV图测定



气体做功由对测得的
PV图积分得到
$$W = - \int_{V_0}^{V_f} P dV$$

气体体积的线性调控

 $\dot{V} = A\dot{L} = Av$

气体做功与压缩时间 τ 的关





✓ 验证了长时区域内有限时间等温过程不可逆
 性的 1/τ标度关系

$$W^{(\mathrm{ir})} = T_e \Delta S^{(\mathrm{ir})} \approx \frac{P_0 P_\mathrm{f}^{\mathrm{iso}} (V_f - V_0)^2}{\kappa T_e \tau}$$

- ✓ 实验上展示了短时域不可逆性对时间反比关 系的偏离
- ✓ 定量展示了对系统的不同操纵方式的对不可逆做功的影响

$$W^{(\text{ir})} = \frac{(\gamma - 1)P_0 (V_f - V_0)^2}{2MV_0} \frac{\langle v^2 \rangle}{\langle v \rangle^2}$$

 $W^{(ir)}(\mathbf{J})$ Q Exp. [313.15K] Num. [$\kappa = \text{const}$] 55.5 -----Num. [κ (v)] (c) $W^{(\mathrm{ir})}(J)$ 0.5 0.2 55 0.1 0.03 0.01 5 10 20 50 100 23 54.5 $\tau/t_{\rm r}$ 44 44 44 50 0 100 150 200 250 $\tau(s)$



Hank You

有限时间等温过程的控制

上述实验过程都是匀速压缩气体:

是否存在最优化控制在给定时间降低不可逆做功?



实验困难:设备中的步进 电机按照匀速运动

解决方案: 离散匀速运动

离散步骤等温过程

有限时间等温过程可以用一系列离散的等容和绝热过程来实现,比起 连续过程,离散过程的优势是更易操控,且功和热是分离的



在第 /-步中

气体体积 $V_i = V_{i-1} - Av_i \delta \tau$ 活塞的平均移动速度 $v_i = (L_i - L_{i-1})/\delta \tau$

B. Andresen et al., Phys. Rev. A 15, 2086 (1977).
G. E. Crooks, Phys. Rev. Lett. 99, 100602 (2007).
H. T. Quan et al., Phys. Rev. E 78, 021116 (2008).
Y. H. Ma et al., Phys. Rev. E 98, 022133 (2018).

绝热过程压缩用最大速度400mm/s交换,减少过程热保证绝热

离散步骤等温过程中理想气体的做功

第i步中的做功(绝热过程)

$$W_{i} = -\int_{V_{i-1}}^{V_{i}} P_{i}(V)dV = \frac{nRT_{e}}{1-\gamma} \left[\left(\frac{V_{i}}{V_{i-1}} \right)^{1-\gamma} - 1 \right]$$

整个过程中的总功

$$W = \sum_{i=1}^{i=M} W_i = -\frac{nRT_e}{1-\gamma} \sum_{i=1}^{i=M} \left[\left(\frac{V_i - Av_i \delta \tau}{V_{i-1}} \right)^{1-\gamma} - 1 \right] \qquad \text{iff} (U: |\frac{V_i - V_{i-1}}{V_i}| \ll 1)$$

$$\approx \frac{nRT_e(V_f - V_0)}{V_0} + \frac{nRT_e(V_f - V_0)^2}{2V_0^2} \longrightarrow nRT_e \ln\left(\frac{V_f}{V_0}\right)$$
$$+ \frac{(\gamma - 1)nRT_e(V_f - V_0)^2}{2V_0^2} \frac{\sum_{i=1}^M v_i^2}{\left(\sum_{i=1}^M v_i\right)^2} \longrightarrow W^{(\text{ir})}$$

离散步骤等温过程中理想气体的做功

$$W^{(ir)} = \frac{\Theta \Lambda}{M}$$
 通过改变对系统的操控方式,如压缩气体的方式,可以实现对系统不可逆性的调控。从而可以根据需求,实现对有限时间热力学循环功率-效率的调控

Y.-H. Ma, D. Xu, H. Dong, and C. P. Sun, Phys. Rev. E 98, 022133 (2018)

离散步骤等温过程中不可逆功的测量

气体压缩方式:幂指数函数
$$L_i = \left(\frac{i}{M}\right)^{a}$$



操纵方式对不可逆性的影响



在给定的幂指数操纵方式下,线性压缩可以实现最小的不可逆功