
超临界条件下柴油模型燃料喷射雾化特性的数值分析

Numerical Analysis on the Injection and Atomization Characteristics of Diesel Surrogates at Engine Conditions

孙霄川, 李翔, 黄忠, 具德浩, 吕兴才, 韩东, 黄震
上海交通大学机械与动力工程学院

摘要: 随着内燃机各项技术措施的广泛应用, 燃油喷射压力与缸内平均压力的提高会使燃油喷射过程中转化为超临界流体。本文建立了由正十六烷, HMN 与 1-甲基萘组成的柴油模型燃料, 并数值分析了其在超临界条件下喷射雾化过程, 提取了液相贯穿距、喷雾贯穿距以及喷雾锥角等评估量, 并与文献中试验结果比较。结果表明, 模型燃料在超临界环境中喷雾过程, 其液相贯穿距较柴油试验数据略短, 喷雾贯穿距较柴油略短, 喷雾锥角较柴油略大。馏点、动力粘度与密度是影响喷雾特性的重要因素。整体而言该模型燃料可以较好的表示柴油喷雾特性, 需要进一步研究。

关键词: 柴油模型燃料; 喷射雾化; 大涡模拟; 超临界状态

Abstract: Recently, the research on the high efficiency and low emission of engines becomes an important direction all over the world. Technologies like high injection pressure, high levels of supercharging and higher levels of back pressure have come into application. Increasing the injection pressure and average cylinder pressure results in that parts of the spray can experience transcritical and supercritical regimes. In this paper, we established a surrogate fuel composed of n-Hexadecane, HMN and 1-Metylnaphthalene, to analyze the injection and atomization of diesel surrogate fuel with large eddy simulation (LES) in a cubic calculation region with high temperature and high pressure environment. Analyses of the surrogate fuel were performed to evaluate the characteristics of injection and atomization. To illustrate the spray, liquid penetration, jet penetration and spray cone angle of these two fuels were studied and discussed, and the influencing factors like distillation temperature, kinematic viscosity and density were considered as important reasons. The result shows that when the surrogate fuel is injected into the ambient under supercritical conditions, the liquid penetration is slightly shorter than that of No.2 diesel. The jet penetration of No.2 diesel is slightly longer than that of the surrogate fuel. Moreover, the spray cone angle of the surrogate fuel is wider than that of No.2 diesel. In summary, the fuels of different thermophysical characteristics may develop and diffuse differently resulting in different characteristics of injection and atomization.

Key Words: Diesel Surrogates; Injection and Atomization; Large Eddy Simulation; Supercritical

1. 研究背景

近年来, 化石能量的衰减与全球环境问题频发, 因此, 世界各国出台了越来越严格的排放标准。节能、减排、高效的燃烧已成为世界范围的重点研究课题之一。在内燃机领域, 节能减排的需求越来越高, 新型燃烧模式如 HCCI、PCCI 和 LTC 等已经被提出, 高喷射压力, 高增压以及高背压等技术也逐渐发展起来。所有上述因素使得缸内压力进一步升高, 而在某些特定条件下, 喷射压力超过 200MPa 时, 缸内压力可以超过 3MPa, 这一压力水平超过了大多数燃料的临界压力。显然, 燃

料喷射进入超临界状态并继续雾化过程中，部分喷雾区域将经历跨临界或超临界相变过程。

此外，与传统条件下的喷雾相比，超临界喷雾还会影响到燃料的物性，而相比液相而言，超临界态下的燃料会表现出更低的粘度以及更高的扩散系数。显然，燃料可以更好地与空气混合，以至于能够充分燃烧，降低排放，以实现更高效更清洁的燃烧。然而，在超临界状态下，燃料物理与化学特性与传统状态下相比存在明显差异，故超临界条件下的喷雾过程值得投入研究。

目前，国内外众多研究机构已经开始研究讨论超临界状态下的喷雾过程的理论与数值分析。Oefelein 和 Yang[1]使用了大涡模拟研究了超临界条件下液氢与 NO 的喷射与混合过程，结果显示密度梯度对混合层的发展具有决定性作用，且在临界点质量扩散系数接近于零。Zong 等[2]使用大涡模拟分析了超临界条件下液氮的喷射与混合过程，并发现射流表面分布着大面积的高压力梯度区域，增强了射流轴向波动并减弱了径向波动。Bellan 等[3-4]使用了直接数值模拟（DNS）研究了正庚烷/氮气混合层与 H_2/O_2 混合层在超临界环境下的发展过程，发现了它相比于气态或混有液滴的混合层有着更好的稳定性。热流与物质质量流对该现象影响较大，而粘度的影响几乎可以忽略。Selle 与 Taskinoglu[5-6]使用大涡模拟与直接数值模拟对跨临界与超临界条件下的射流混合层进行了细致的仿真研究，证明了边界层的压力梯度对整体的稳定性及湍流特性均有很重要的影响。结果表明超临界状态的研究中大涡模拟的子网格模型需要进一步重建。Schmitt 等[7-8]针对气/液氮同轴射流进行了实验和数值模拟，特别关注了不同工况下湍流功率谱密度和密度脉动的变化。

而在内燃机设计领域中，燃料喷射进入超临界状态的研究变得越来越重要。桑迪亚国家实验室的 Oefelein 和他的团队[9-11]在高压定容弹内研究了正庚烷在超临界/跨临界条件下的喷射，结果显示内燃机研究领域研究燃料射流时最常用的破碎与雾化模型在超临界状态下并不能很好的匹配。他们基于大涡模拟建立了详细的模型架构并用于分析多组分多相流的热力学性质，结论表明高温会导致气液界面变厚，高温与表面张力减小会导致分子平均自由程变短，这两者是雾化过程最大的影响因素。Kook 与 Pickett[12]在高压定容弹内试验研究了常规燃料、费托合成燃料、煤基燃料与模型燃料在高温高压条件下的液相/气相贯穿距。试验采用了频率约 50kHz 的米氏散射与纹影同步高速成像，定容弹内氧气浓度 0%，保证了混合与雾化过程不会受到燃烧的影响。结果显示液相贯穿距与燃料密度呈正相关关系，燃料的沸点也会影响贯穿距。文章中对 2 号柴油的喷射与雾化过程的研究结果可以作为与本文仿真结果进行比较的参考。Wensing 与他的团队[13]研究了正庚烷、正十二烷、正十六烷的相变特性，在高压定容弹内试验研究了它们的二元混合物喷射进入超临界条件的氮气环境的过程，结果中可以看到具有明显波动的高密度区域。结果表明燃料喷射进入超临界环境的过程中不存在蒸发，取而代之的是向超临界态的相变过程，相变过程中不同相之间的边界会逐渐消失，没有沸腾或密度变化发生。

本文旨在研究在柴油机条件下柴油模型燃料的喷射雾化特性，使用大涡模拟分析了模型燃料的喷雾过程。环境温度为 900K，环境压力 6MPa，这一环境条件对于 2 号柴油（下文中称“柴油”）而言超过了其临界点。本文中建立了柴油模型燃料，其组分包括正十六烷（质量分数 41.3%），2,2,4,4,6,8,8-七甲基壬烷（HMN，质量分数 36.8%）以及 1-甲基苯（质量分数 21.9%）。本文讨论了液相贯穿距、喷雾贯穿距以及喷雾锥角等喷雾特性。为了从数值分析结果中提取上述特性数据，编写了 MATLAB 程序以处理从三维数据中提取的图像。使用了 Kook 和 Pickett 的试验数据[12]与数值模拟结果进行对比，并据此讨论了模型燃料与柴油在超临界条件下的喷雾过程的区别。

2. 研究方法

本文中使用了 CFD 软件 CONVERGE 进行燃料的喷雾过程的数值分析，本软件使用经典的拉格朗日-欧拉流体方法。它内置了多种喷雾喷射、雾化、燃料蒸发、液滴碰撞与湍流模型。应用了大涡模拟描述射流湍流。所需模型的细节均可在已发布文献中找到，模型的选择依据也可在其他文献的结论中得到[17-18]。由此可以保证本次数值模拟选择模型的可行性，在此只简单说明。此外，因为本文主要研究喷雾过程，故数值模拟不包括燃烧过程，即计算区域的环境中不含氧气。

2.1 喷雾模型

本次仿真应用了许多子模型以分析包括液滴蒸发、碰撞、破碎、变形过程在内的喷雾过程的射流特性。使用了 Frossling 模型分析液滴蒸发过程[19]，使用了基于 NTC 算法的模型预测液滴的碰撞[20]。此外，由于良好的试验结果适配性，使用了 KH-RT 模型模拟了液滴破碎过程，且该方法相较于预测破碎长度更具实际的预测性[21-22]。使用了动态液滴拉伸模型动态定义了液滴拉伸系数，使用了液滴变形系数描述了液滴从球形到椭球形之间的形变。

2.2 子网格湍流模型

在大涡模拟动态结构模型中不需要湍流粘度来建立子网格压力张量。使用动态结构模型的子网格湍动能的运输方程分析了在子网格尺度下的能量流动[24-25]。此外，子网格压力张量应为关于子网格湍动能的函数。子网格湍动能的运输方程为：

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \overline{u_i} \frac{\partial k}{\partial x_i} = -\tau_{ij} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \varepsilon + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{v_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_i} \right), \quad (1)$$

其中，压力张量的定义为：

$$\tau_{ij} = c_{ij} k, \quad (2)$$

其中子网格尺度动能定义为：

$$k = \frac{1}{2} (\widehat{\overline{u_i u_i}} - \overline{\widehat{u_i} \widehat{u_i}}), \quad (3)$$

其中符号“ $\widehat{}$ ”指子网格尺度过滤器，根据中心网格单元与临近单元决定。

子网格耗散率的定义为：

$$\varepsilon = \frac{C_\varepsilon k^{3/2}}{\Delta}, \quad (4)$$

其中 C_ε 是定义为 1.0 的常量， Δ 是子网格长度尺度。

子网格张量模型即可以表示为：

$$\tau_{ij} = 2k \left(\frac{L_{ij}}{L_{ii}} \right), \quad (5)$$

其中伦纳德压力张量定义为:

$$L_{ij} = Kc_{ij} - \overline{kc_{ij}} \quad (6)$$

2.3 网格模型

本文中数值模拟的结果与 Kook 与 Pickett[12]的柴油喷雾试验结果进行了对比。为了与试验条件保持一致,数值分析中建立了方形的计算区域,其尺寸与上述试验保持一致。计算区域边长为 108mm。基础网格尺寸为 1mm。为了计算的精确度和良好的收敛性,喷嘴附近区域实行了网格细化,最小网格达 0.0625mm。在仿真过程中,所有产生压力与温度变化的区域会实行自适应网格细化,最小网格为 0.0625mm,这一区域的网格数最大达到了 903 万。喷雾区域的网格分布示意参见图 1,该图已经根据温度分布染色。在图中可以看到喷雾内部与非喷雾区域网格密度不同,密度比最高达 16:1。

2.4 燃料与仿真条件

由于数值分析的目的是研究柴油模型燃料的喷射和雾化,我们选择了三种组分的混合物作为模型燃料,其中包括 2,2,4,4,6,8,8-七甲基壬烷(HMN),1-甲基萘和正十六烷。表 1 中给出了模型燃料和柴油的一些热力学性质的比较,从中可以看出模型燃料具有比柴油更低的馏点,更高的动力粘度和更低的密度。

方形区域内的温度设定为 900K,压力为 6MPa,温度和压力均超过模型燃料组分的临界点。内燃机相关工况基于 Engine Combustion Network(ECN)提供的“Spray A”条件。根据 Lin 和 Tavlarides 之前得到的结论,柴油的临界温度约为 440-470℃,临界压力为 1.9-2.2MPa[26],因此计算区域内温度和压力都超出了柴油的临界点。计算区域的边界都设置隔热边界条件,温度边界条件设置为 900K,因为边界在 CONVERGE 中设置为固定边界,边界处的速度和压力自动设置为 0。喷油器为单孔,喷嘴直径为 0.090mm,喷射方向垂直。喷射压力固定在 150MPa,喷射持续时间为 1.5ms,喷射总质量为 3.5mg,喷射速率曲线如图 2 所示。在该条件下,仿真的时间步长设定为 0.01ms 至 0.01μs 之间,可以在仿真过程中进行动态调整。该工况下的仿真重复了 6 次,后面讨论的结果数据均为平均值。

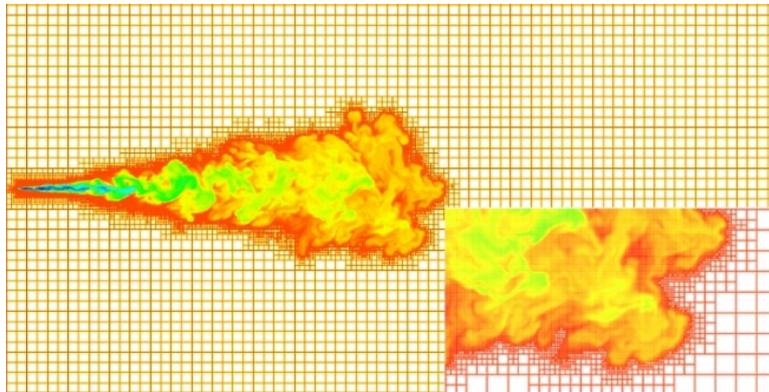


图 1 应用自适应网格细化的喷雾区域网格截面图

表 1 模型燃料与柴油的部分热力学性质

性质	柴油	模型燃料
T ₁₀ [°C]	211	244.31
T ₉₀ [°C]	315	299.25
T ₁₀₀ [°C]	350	308.44
十六烷值	46	66.46
密度(15°C) [kg/m ³]	848	799.30
低热值[MJ/kg]	42.975	43.221
动力粘度(40°C) [mm ² /s]	2.35	2.93

表 2 模型燃料组分的部分热力学性质

性质	HMN	正十六烷	1-甲基萘
沸点[°C]	246.3	286.9	244.7
临界温度[°C]	418.9	449.9	498.9
密度(15°C) [kg/m ³]	788.4	775.9	1024.3
动力粘度(40°C) [mm ² /s]	31.9	30.0	20.6
表面张力[N/m]	1.01325	0.02327	0.02580
气化潜热[J/mol]	63981.6	81687.3	57836.7
十六烷值	70.8	109.2	13.75

表 3 仿真环境与模型燃料设置

环境条件	
环境压力	6MPa
环境温度	900K
N ₂ 质量分数	87.6%
(续表 3)	
CO ₂ 质量分数	10.0%
H ₂ O质量分数	2.4%
喷射条件	
喷嘴直径	0.090mm
喷射压力	150MPa
喷射持续时间	1.5ms
喷嘴流量系数	0.81
喷射温度	363K
模型燃料	
HMN质量分数	36.8%
1-甲基苯质量分数	41.3%
正十六烷质量分数	21.9%

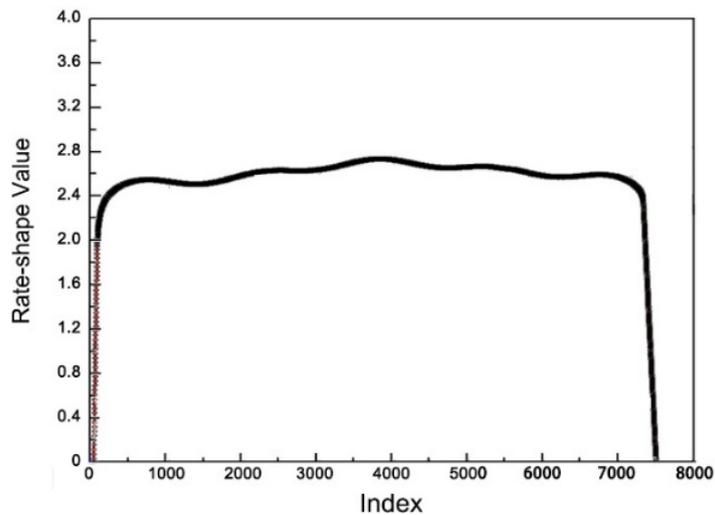


图 2 喷射模型中应用的喷射率曲线

2.5 喷雾图像处理

本文讨论了液相贯穿距，喷雾贯穿距和喷雾锥角等特性。上述相应的数据均从数值分析结果中提取。将不同时间的以温度和密度着色的 3D 结果的横截面输出成为图像序列，并转换为灰度图像。其中每个像素的值仅表示强度信息。灰度值分布在 0-255 间，其中 255 表示强度最高的白色，0 表示强度最弱的黑色。

将灰度图像转换为二值图像时需要阈值设定，其中二值图像像素值应为 0 或 1。当灰度图像转换为二值图像时，其值大于阈值的像素值设置为 1（表示白色），而其他像素的值设置为 0（表示黑色）。在本文中，分析液相贯穿距、喷雾贯穿距与喷雾锥角时均采用了不同的阈值。

为实现上述的图像处理，编写了对应的 MATLAB 程序，可以将原始图像转换为二值图并且对二值图像进行批量处理。每一个二值图均转换为与其像素一一对应的 0-1 矩阵。该程序可通过判断矩阵数值的变化以确定喷雾的边界位置，据此计算出喷雾贯穿距与喷雾锥角的具体数值。

3. 结果分析

在本文中，使用了软件 CONVERGE 实现了内燃机环境下柴油模型燃料的数值分析。液相贯穿距、喷雾贯穿距与喷雾锥角三者的关系在图 3 中显示，并在后续部分给出了详细的定义。此外，将模型燃料的数值分析结果与 Kook 与 Pickett [12]的工作结果进行了比较，主要包括液相贯穿距和喷雾贯穿距在内的重要特性。

图中液相贯穿距的定义为在每个时间点液相轮廓点距喷嘴位置的最大距离，其中喷嘴位置是指喷雾第一次出现帧图像中喷雾区域的最左点。喷雾贯穿距定义为沿着轴向从喷嘴到喷雾区域的最右点的最大距离。喷雾锥角定义为包含喷嘴位置与喷雾贯穿距的 70%位置之间燃料喷雾部分最小的三角形的顶角，以保证燃料的扩散，蒸发和雾化均可体现在喷雾锥角中。

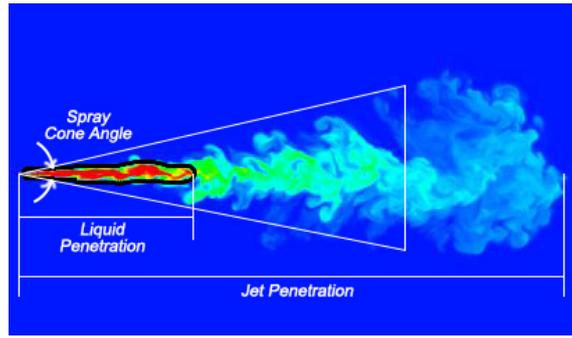


图 3 液相贯穿距、喷雾贯穿距与喷雾锥角的定义

3.1 液相贯穿距

图 4 显示了一次数值分析结果的例图。这些图像描述了在喷射开始后计算区域中密度场随时间的变化，间接描述了喷雾的发展。调整了结果着色后的颜色范围使得液相边界更加明显，同时喷雾中非液相部分变得不可见。

为与 Kook 与 Pickett 的工作中计算液相贯穿距的方法保持一致，在得到仿真结果中包括整个密度范围的密度分布截面后（此时液相与非液相燃料分布均可见），需将密度范围调整为仅液相燃料分布范围可见，从而可以由此计算液相贯穿距的值。喷射开始时刻定义为喷雾第一次出现时刻的前一帧，之后每一帧图像均有对应的喷射开始后时刻（在每一个图像右上角给出）。图 4 中的图像序列为是柴油模型燃料的数值分析结果。

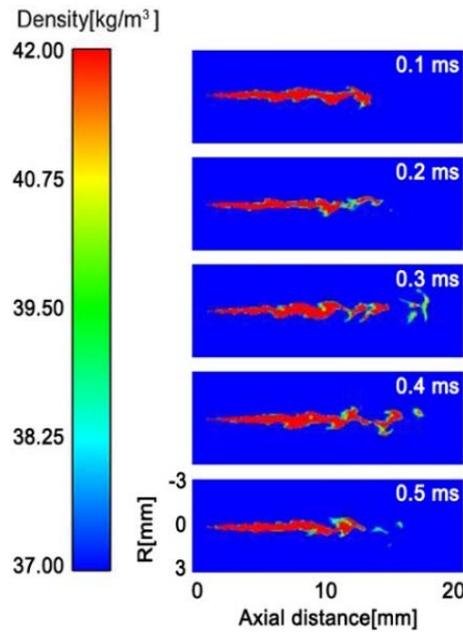


图 4 柴油模型燃料数值模拟结果密度分布截面

为了有助于结果的可视化和数据的提取，需将喷雾密度的横截面的图像序列转换为灰度图像，然后使用上文中的图像处理将灰度图像转化为二值图像，阈值设为 26，这与 Kook 和 Pickett 工作中保持一致[12]。经过尝试，阈值的变化不会显著影响液相贯穿距的值。使用图像处理的 MATLAB

程序处理转换后的图像以提取液体贯穿距的值。图 5 显示了一些转化后的二值图像，描述了柴油模型燃料的液相贯穿距。图像中蓝色水平线与数值表示在每个时刻处的液相贯穿距，垂直虚线是在准稳定期间（在图中大约 0.2ms 的时间之后）的平均液相贯穿距。此外，每个图像的右上方标记了对应于每个图像的喷射后时刻。垂直线标记的平均值是 14.21mm（定义为平均液体长度）。在图 6 中，给出了对应于图 5 中所示的图像序列的液相贯穿距。在液相贯穿距随时间变化曲线中用红色圆圈符号标记了图 5 中每个图像对应的喷射后时刻。平均液体长度以水平虚线给出。

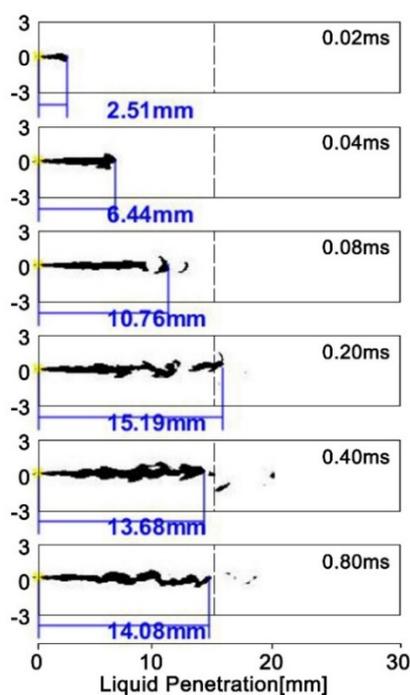


图 5 柴油模型燃料仿真结果喷雾密度分布截面转换后的二值图像序列

根据图 5，显然在喷射后 0.15ms 内，液相贯穿距逐渐增加，且随时间基本成线性关系，这也体现了喷射率曲线。0.15ms 之后，液相贯穿距达到平均液体长度并在此附近波动。图 6 显示了液相燃料的发展过程，与图 5 结论一致。平均液体长度附近的液相贯穿距波动，经分析其标准差与平均液体长度之比为 9.2%，小于 10%。这样的波动主要是由于湍流波动造成的。

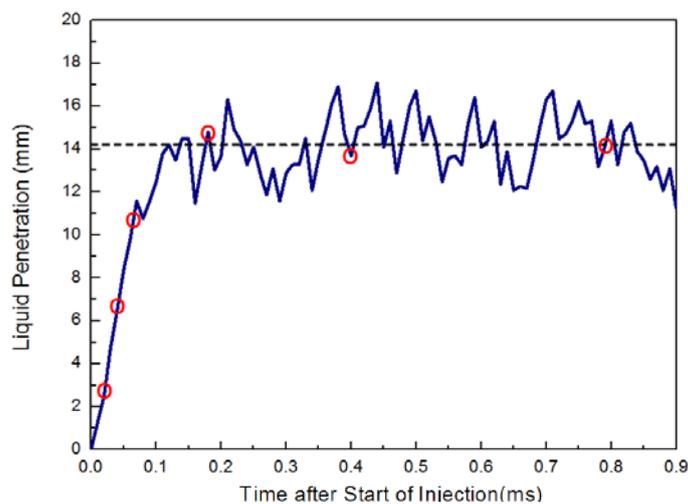


图 6 柴油模型燃料液相贯穿距随喷射后时间的变化

模型燃料数值分析结果中与 Kook 和 Pickett 的研究中柴油试验结果中的液相贯穿距随时间变化的比较如图 7 所示。绘制了两条折线来描述液相贯穿距随时间的发展，其中红色折线代表了数值分析结果，黑色折线代表了试验结果。此外，图中两条横向虚线代表了数值分析结果与试验结果中的平均液体长度，颜色与对应的折线相同，即红色横虚线代表数值模拟结果，黑色横虚线代表试验结果。在后续小节中也相同。根据图 7 所示，在开始的 0.1ms 内，两个结果中的液相贯穿距均随着时间呈基本线性的增长趋势，增长率基本为常数。在大约 0.15ms 之后，液相贯穿距均达到其相对应的平均液体长度，并在平均液体长度上下波动。

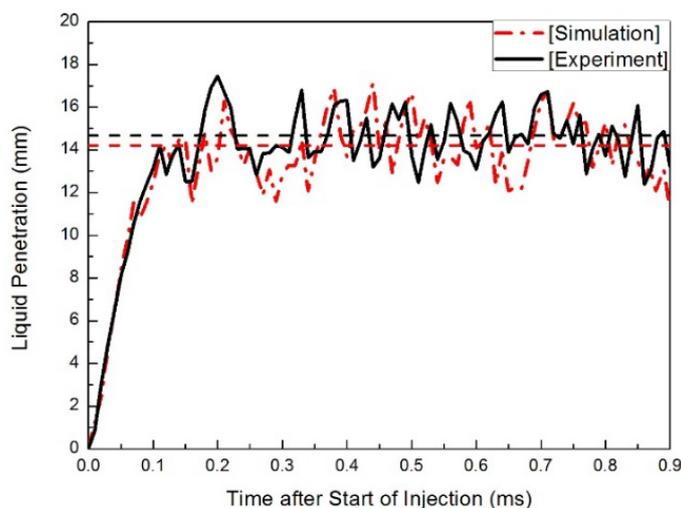


图 7 模型燃料(数值分析)与柴油(试验)液相贯穿距对比

图 7 中显示了试验中柴油的平均液体长度较数值分析中模型燃料的平均液体长度略长，其中试验结果中平均液体长度为 14.68mm，而模型燃料的平均液体长度为 14.21mm，差距仅只有 3.1%。考虑到液相贯穿距波动造成的数据的相对标准差达到了 9.2%，可以认为两者平均液体长度基本一致，即在数值模拟中模型燃料可以良好地预测超临界状态下柴油喷雾的液相部分。此外，根据表 1 中柴油与模型燃料物性的对比，柴油密度较模型燃料高，而挥发性较模型燃料差。根据研究，更高的密度一般导致更长的液相贯穿距，而挥发性好会导致平均液体长度偏低[27-29]。故实验数据中平均液体长度较数值模拟结果中平均液体长度更长。

3.2 喷雾贯穿距

在本文中，喷雾贯穿距定义为沿轴向从喷嘴到燃料区域的最右点的最大距离。图 8 中显示了模型燃料的数值分析结果沿喷雾方向的温度和密度横截面的图像序列，并描述了喷雾的发展和扩散。由于在温度和密度场中，燃料区域与周围环境差异较大，故燃料区域的轮廓在图 8 中是明显的。相应的时刻标记在每个图像的右上方。图 8a) 显示了密度场的横截面，图 8b) 显示了温度场的横截面。喷雾与周围环境之间的界限是明显的，且环境温度远高于燃料的临界温度。此外，在图 8.a) 和 b) 中的相同刻，边界在图像序列中保持一致。从图像中可以得出结论，喷雾贯穿距的增加与喷射后时刻不成线性关系，并且增长率随时间逐渐变小。

为了加强结果的可视性，有利于喷雾贯穿距数据的输出，使用上文中图像处理算法并设置阈值为 0，将数值分析结果中导出的图像转换为二值图，并提取喷雾贯穿距的值。图 9 显示了在某些时刻模型燃料的温度场截图转换后的二值图。喷嘴的位置由黄点标出，喷雾贯穿距长度标有蓝色水平

线与具体数值，右上角标有相对应的喷射后时刻。从图像中导出的喷雾贯穿距数值随时间变化的折线图绘制在图 10 中，同时用红圈标记了折线上图 9 中图像序列所对应的时刻。

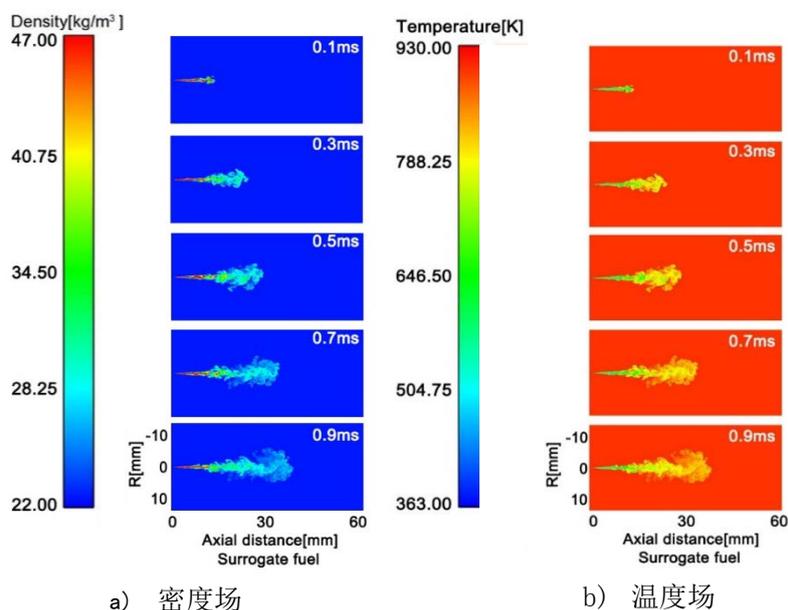


图 8 模型燃料数值分析结果密度与温度场

从图 10 中可以看出，喷雾贯穿距随着时间逐渐增加，但与时间不成线性关系。具体而言，喷雾贯穿距的增长率随时间逐渐降低。在喷射开始后的 0.1ms 之前，喷雾贯穿距快速增加。在这段时间之后，喷雾贯穿距的增加显著减小，并且增长率随时间降低。

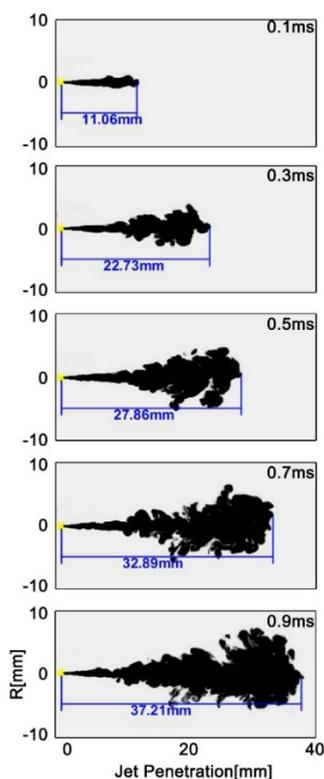


图 9 模型燃料仿真结果温度场截面转换后二值图序列

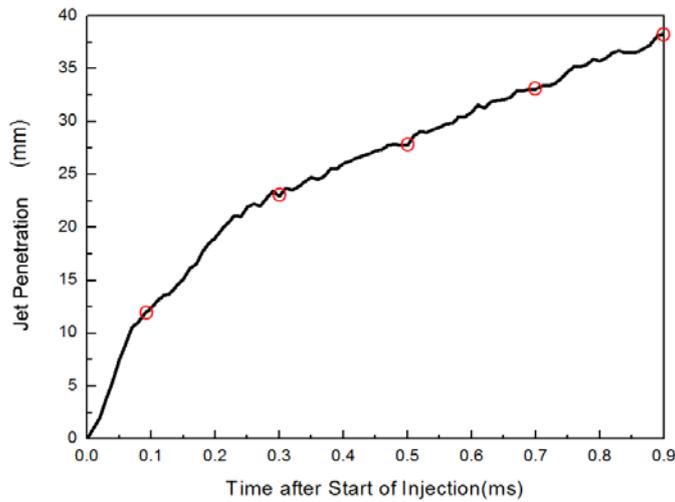


图 10 模型燃料喷雾贯穿距随喷射后时间变化

图 11 中的两条折线描述了数值模拟结果中模型燃料和试验结果中柴油的喷雾贯穿距随时间的变化，其中红色虚线为模型燃料的喷雾贯穿距，黑色实线为柴油的喷雾贯穿距。根据图中显示，这两条折线的趋势几乎相同，并且柴油的喷雾贯穿距的增长率几乎与模型燃料的速度相同，尤其是在喷射开始后的 0.2ms 内。0.3ms 后，试验结果中柴油的喷雾贯穿距高于模型燃料，且差异明显。喷射后 0.5ms 之后，试验结果比仿真结果高近 10%。由于试验和仿真的液相贯穿距几乎相同，而喷雾贯穿距的差异稍大，下面将根据模型燃料与柴油的物理特性分析该现象的原因：

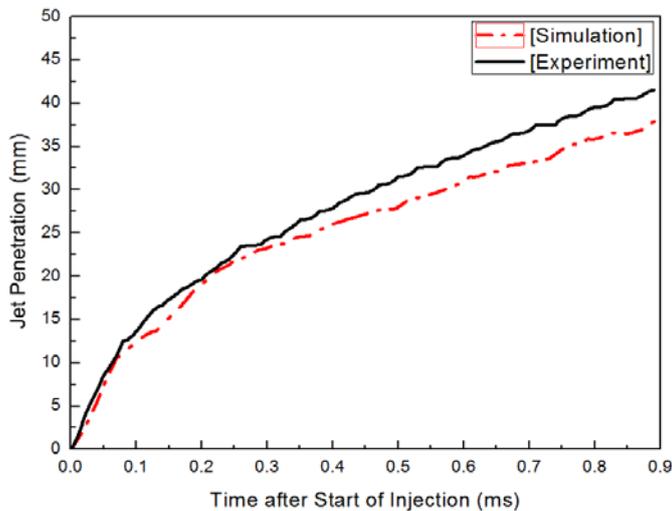


图 11 模型燃料与柴油喷雾贯穿距随时间变化的对比

1. 模型燃料的馏点低于柴油的馏点，这导致模型燃料蒸发相对提前，抑制了模型燃料轴向的贯穿。这将使柴油的喷雾贯穿距更大。

2. 与柴油相比，模型燃料的密度较低。因为射流中卷入的周围环境气体的质量与燃料质量之比与燃料密度成反比，使得模型燃料喷雾中卷入了更多周围空气，这意味着模型燃料的较低密度有益于燃料与空气的充分混合，从而加速了液体破碎的过程，使得喷雾的径向发展更充分，轴向发展反而受限。

3. 模型燃料的粘度高于柴油的粘度，这可以抑制液体模型燃料的轴向贯穿以及初次与二次破碎，使得模型燃料的喷雾贯穿距偏小。因此，与模型燃料相比，在高环境温度和高环境压力的超临界条件下，拥有较低粘度的柴油可以达到更高的喷雾贯穿距。

根据上面的分析，由于模型燃料密度较柴油低，粘度较柴油高，会发性较柴油更好，且随着破碎、相变和雾化的发展，粘度和馏点的影响变得更加重要，使得最终柴油的喷雾贯穿距高于模型燃料。

3.3 喷雾锥角

在本文中，使用喷嘴位置和喷雾贯穿距 70%位置之间的喷雾部分确定喷雾锥角，从而将燃料的扩散，蒸发和雾化过程均考虑进去。如图 12 所示，以喷嘴位置，喷雾贯穿距 70%位置的上下边界点为三端点做出的三角形，其左顶角定义为喷雾锥角。角度以蓝色数字标记在锥角旁。由于喷雾未完全发展时，喷雾头部会显着影响喷雾锥角的测量，尤其是在喷射开始后的 0.1ms 内（如图 12 中第一幅图所示），故在本小节只研究 0.1ms 后的结果。

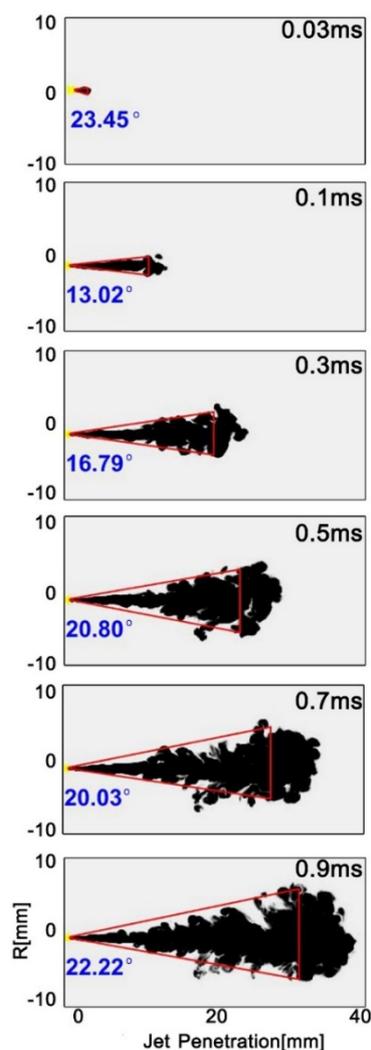


图 12 模型燃料仿真结果中个别时刻下的喷雾锥角

从图 12 中可知，超临界条件下模型燃料喷雾锥角随着喷射后时间而增加。由于喷雾锥角在 0.1ms 处仅为 13.0°而在 0.9ms 处为 22.2°，因此平均增加率约为每微秒 11.5°。射流的发展和扩散时角度增加的原因。

图 13 中绘制了两种燃料的喷雾锥角随喷射后时间的变化曲线（喷射开始后 0.1ms 之后）。黑线为柴油喷雾锥角的变化曲线，红线为模型燃料的曲线。为了更加直观，在喷雾锥角折线上对应于图 12 中图像的每个时刻的位置绘制了红色圆圈。

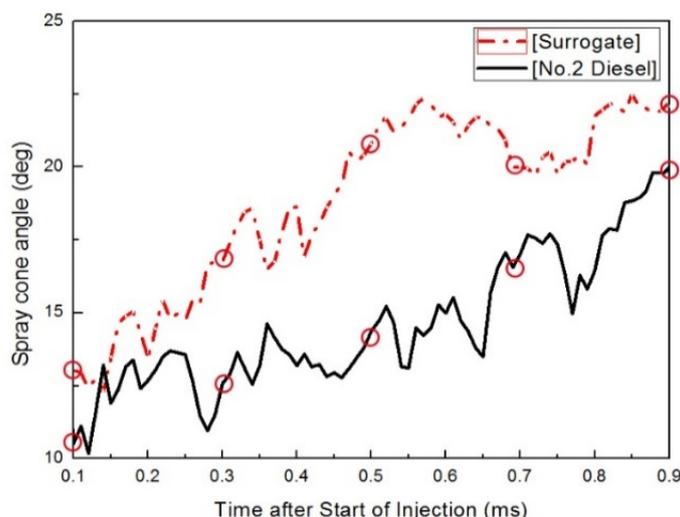


图 13 模型燃料与柴油喷雾锥角随时间的变化

从图 13 中可以得出结论，在所研究的时间范围内，模型燃料的喷雾锥角比柴油的喷雾锥角更大。此外，柴油喷雾锥角的变化趋势明显不同于模型燃料。从模型燃料的数值分析结果输出的数据表明从 0.1ms 到 0.5ms 时，喷雾锥角一开始逐步增加，随后增加的速率变小。在 0.5ms 的时间之后，喷雾锥角几乎保持不变，维持在 21.7°左右。事实上，喷雾锥角的增加是由于喷雾径向发展较轴向发展更快，这表明在喷雾开始初期，轴向发展比径向发展更加活跃，而随着喷雾继续发展，喷雾的轴向与径向发展逐渐保持同步，从而在模型燃料喷雾的完全发展期间喷雾锥角维持在某一水平变化变小。出于同样的原因，可以得出结论，在柴油的喷射和雾化过程中，径向的发展与轴向发展也基本保持同步。

如上所述，与模型燃料相比，柴油的喷雾贯穿距更长，柴油在轴向的贯穿和发展更加活跃。虽然柴油的喷雾锥角比模型燃料的喷雾锥角窄，但显而易见的是，模型燃料的径向扩散和发展比柴油更加充分，这与馏点、粘度等热力学因素有关：

较低的馏点意味着较早的蒸发，代表着更好的挥发性。因此，模型燃料的径向扩散由于其较低的馏点而更充分。此外，蒸发时间较早抑制了模型燃料的轴向贯穿，有助于在其他方向上的扩散。这是模型燃料喷雾锥角较大的原因。

较短的贯穿距是另一个原因。由于模型燃料的径向扩散与柴油的径向扩散过程基本一致，且模型燃料拥有更短的贯穿距，从而导致模型燃料喷雾锥角比柴油喷雾锥角更宽。

模型燃料的动力粘度高于柴油的动力粘度，因此模型燃料在喷嘴出口的速度较大，这加速了初次和二次破碎的过程。这有助于更好的雾化，并导致了径向扩散更加充分，得到了更大的喷雾锥角。

模型燃料的密度较低，根据上文中的理论，这有利于燃料与环境气体的混合，从而加速液体破碎，导致更好的雾化。根据燃料密度对雾化的影响，模型燃料的喷雾锥角在理论上也应比柴油更宽。

上述分析和理论解释了数值分析的结果。结论表明，与 2 号柴油相比，模型燃料的雾化较为容易。模拟结果与实验结果趋势保持一致，差异很小。因此，这一 HMN，正十六烷 1-甲基萘组成的模型燃料值得进一步研究。

4. 小结

为了研究超临界条件下柴油模型燃料的喷射和雾化特性，使用了商业软件对边长为 108mm，环境温度为 900K，环境压力为 6MPa 的立方区域进行了数值分析。对于柴油和模型燃料而言，该条件是超临界的。柴油模型燃料的数值结果与柴油喷雾的试验结果进行了比较，试验结果来自 Kook & Pickett 的工作[12]。研究和讨论了液相贯穿距，喷雾贯穿距和喷雾锥角等特性。本文中主要发现如下。

液相贯穿距在喷射开始期间增加，然后达到平均液体长度并在其周围波动。由于模型燃料密度较低，模型燃料显示出比柴油略短的液相贯穿距和平均液体长度。整体而言，模型燃料的液相特性的结果与试验结果大致相同。

在所研究的时间范围内，喷射贯穿距增加随着时间的推移逐渐增加。柴油的喷雾贯穿距略长于模型燃料的喷雾贯穿距，原因在于模型燃料具有较低的馏点和较低的密度，这限制了喷雾的轴向贯穿并加速了雾化。

喷射锥角随着喷射开始时的波动而增加。模型燃料的喷雾锥角比柴油喷雾锥角更宽，因为馏点较低，模型燃料的粘度和密度较高，这有助于蒸发和破碎过程的发展，从而加速雾化。

总之，不同热力学性质的燃料的超临界状态下的喷雾的发展与扩散也不同，从而观测出不同的流动特征（如液相/喷雾贯穿距）。模型燃料的动力粘度，密度和馏点都会影响其超临界条件下的雾化特性。

5. 参考文献

- [1] Oefelein, J. C. and Yang, V., "Modeling high-pressured mixing and combustion processes in liquid rocket engines," *Journal of Propulsion and Power*, 114:843, 1998, doi:[10.2514/2.5349](https://doi.org/10.2514/2.5349).
- [2] Zong, N., Meng, H., Hsieh, S. Y. and Yang, V., "A numerical study of cryogenic fluid injection and mixing under supercritical conditions," *Physics of Fluids*, 16:4248, 2004, doi:[10.1063/1.1795011](https://doi.org/10.1063/1.1795011).
- [3] Okong'o, N. A. and Bellan, J., "Direct numerical simulation of a transitional supercritical binary mixing layer: Heptane and nitrogen," *Journal of Fluid Mechanics*, 464:1-34, 2002, doi:[10.1017/S0022112002008480](https://doi.org/10.1017/S0022112002008480).

-
- [4] Okong'o, N. A., Harstad, K. G. and Bellan, J., "Direct numerical simulation of O₂/H₂ temporal mixing layers under supercritical conditions," *AIAA Journal*, 40(5):914-926, 2002, doi:[10.2514/2.1728](https://doi.org/10.2514/2.1728).
- [5] Selle, L. C., Okong'o, N. A., Bellan, J. and Harstad, K. G., "Modelling of subgrid-scale phenomena in supercritical transitional mixing layers: An a priori study," *Journal of Fluid Mechanics*, 593:57-91, 2007, doi:[10.1017/S0022112007008075](https://doi.org/10.1017/S0022112007008075).
- [6] Taskinoglu, E. S. and Bellan, J., "A posteriori study using a DNS database describing fluid disintegration and binary species mixing under supercritical pressure: Heptane and nitrogen," *Journal of Fluid Mechanics*, 645: 211-254, 2010, doi:[10.1017/S0022112009992606](https://doi.org/10.1017/S0022112009992606).
- [7] Schmitt, T., Rodriguez, J., Leyva, I. A. and Candel, S., "Experiments and numerical simulation of mixing under supercritical conditions," *Physics of Fluids*, 24:055104, 2012, doi:[10.1063/1.3701374](https://doi.org/10.1063/1.3701374).
- [8] Selle, L. and Schmitt, T., "Large-eddy simulation of single species flows under supercritical thermodynamic conditions," *Combustion Science and Technology*, 182(4):392-404, 2010, doi:[10.1080/00102200903462664](https://doi.org/10.1080/00102200903462664).
- [9] Oefelein, J., Dahms, R., and Lacaze, G., "Detailed Modeling and Simulation of High-Pressure Fuel Injection Processes in Diesel Engines," *SAE Int. J. Engines* 5(3):1410-1419, 2012, doi:[10.4271/2012-01-1258](https://doi.org/10.4271/2012-01-1258).
- [10] Dahms, R. N., Manin, J., Pickett, L. and Oefelein, J. C., "Understanding high-pressure gas-liquid interface phenomena in diesel engines," *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(1):1667-1675, 2013, doi:[10.1016/j.proci.2012.06.169](https://doi.org/10.1016/j.proci.2012.06.169).
- [11] Dahms, R. N. and Oefelein, J. C., "On the transition between two-phase and single-phase interface dynamics in multicomponent fluids at supercritical pressures," *Physics of Fluids*, 25:092103, 2013, doi:[10.1063/1.4820346](https://doi.org/10.1063/1.4820346).
- [12] Kook, S. and Pickett, L., "Liquid length and vapor penetration of conventional, Fischer-Tropsch, coal-derived, and surrogate fuel sprays at high-temperature and high-pressure ambient conditions," *Fuel*, 93:539-548, 2012, doi:[10.1016/j.fuel.2011.10.004](https://doi.org/10.1016/j.fuel.2011.10.004).
- [13] Wensing, M., Vogel, T. and Götz, G., "Transition of diesel spray to a supercritical state under engine conditions", *International Journal of Engine Research*, 17(1): 108-119, 2016, doi:[10.1177/1468087415604281](https://doi.org/10.1177/1468087415604281).
- [14] Som, S. and Aggarwal, S., "Effects of primary breakup modeling on spray and combustion characteristics of compression ignition engines," *Combust. Flame*, 157(6) 1179-1193, 2010, doi:[10.1016/j.combustflame.2010.02.018](https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2010.02.018).
- [15] Senecal, P., Richards, K., Pomraning, E., Yang, T. et al, "A new parallel cut-cell Cartesian CFD code for rapid grid generation applied to in-cylinder diesel engine simulations," *SAE paper*, 2007-01-0159, 2007, doi: [10.4271/2007-01-0159](https://doi.org/10.4271/2007-01-0159).
- [16] Richards, K., Senecal, P. and Pomraning, E., "CONVERGE (Version 2.1) Manual, Technical Report," Convergent Science, Inc., Madison, WI, 2013.
- [17] Som, S., "Development and validation of spray models for investigating diesel engine combustion and emissions," *University of Illinois at Chicago, Ph.D. thesis*, 2009.

-
- [18] Xue, Q., Som, S., Senecal, P. K. and Pomraning, E., "Large eddy simulation of fuel-spray under non-reacting IC engine conditions," *Atomization and Sprays*, 23 (10): 925–955, 2013, doi:[10.1615/AtomizSpr.2013008320](https://doi.org/10.1615/AtomizSpr.2013008320).
- [19] Frossling, N., "Evaporation, heat transfer, and velocity distribution in two-dimensional and rotationally symmetrical laminar boundary-layer flow," NATIONAL AERONAUTICS AND SPACE ADMIN LANGLEY RESEARCH CENTER HAMPTON VA, 1956.
- [20] Schmidt, D. P. and Rutland, C., "A new droplet collision algorithm," *Journal of Computational Physics*, 164 (1) 62–80, 2000, doi:[10.1006/jcph.2000.6568](https://doi.org/10.1006/jcph.2000.6568).
- [21] Reitz, R. D., "Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays," *Atomisation and Spray Technology*, 3(4)309–337, 1987.
- [22] Patterson, M. and Reitz, R., "Modeling the Effects of Fuel Spray Characteristics on Diesel Engine Combustion and Emission," SAE Technical Paper 980131, 1998, doi:[10.4271/980131](https://doi.org/10.4271/980131).
- [23] Liu, A., Mather, D., and Reitz, R., "Modeling the Effects of Drop Drag and Breakup on Fuel Sprays," SAE Technical Paper 930072, 1993, doi:[10.4271/930072](https://doi.org/10.4271/930072).
- [24] Pomraning, E. and Rutland, C. J., "Dynamic one-equation non-viscosity large eddy simulation model," *AIAA J.*, 40 (4) 689–701, 2002, doi:[10.2514/2.1701](https://doi.org/10.2514/2.1701).
- [25] Senecal, P., Pomraning, E., Richards, K. and Som, S., "An investigation of grid convergence for spray simulations using an LES turbulence model," SAE paper 2013-01-1083, 2013, doi:[10.4271/2013-01-1083](https://doi.org/10.4271/2013-01-1083).
- [26] Lin, R. and Tavlarides, L. L., "Thermal stability and decomposition of diesel fuel under subcritical and supercritical conditions," *The Journal of Supercritical Fluids*, 75101-111, 2013, doi:[10.1016/j.supflu.2012.12.026](https://doi.org/10.1016/j.supflu.2012.12.026).
- [27] Canaan, R., Dec, J., Green, R., and Daly, D., "The Influence of Fuel Volatility on the Liquid-Phase Fuel Penetration in a Heavy-Duty D.I. Diesel Engine," SAE Technical Paper 980510, 1998, doi:[10.4271/980510](https://doi.org/10.4271/980510).
- [28] Siebers, D. L., "Liquid-phase fuel penetration in diesel sprays," SAE Paper 980809, 1998, doi:[10.4271/980809](https://doi.org/10.4271/980809).
- [29] Pischinger, F., Reuter, U. and Scheid, E., "Self-ignition of diesel sprays and its dependence on fuel properties and injection parameters," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 110.3: 399-404, 1988, doi:[10.1115/1.3240135](https://doi.org/10.1115/1.3240135).