

本征正交分解法对正十二烷喷雾射流的解析

秦文瑾¹, 徐礼辉¹, 卢登标¹, 刘浩²

(1. 上海理工大学 机械工程学院, 上海 200093;

2. 中国航天科技集团有限公司 中国运载火箭技术研究院

北京航天计量测试技术研究所, 北京 100076)

摘 要: 应用大涡模拟方法对航空煤油单组分替代燃料正十二烷冷态喷雾现象进行模拟计算, 探究喷雾射流中的多物理场耦合现象。从宏观层面分析燃油破碎蒸发及油气混合过程, 发现流场涡团在其中起着重要的作用。运用本征正交分解方法对正十二烷射流质量分数场和涡量场数据库进行加工, 从“微观”层面深入探究两者的联系。结果表明: 正十二烷质量分数场喷雾结构与射流涡量场涡团结构存在显著的空间分布相关性, 反应出两者结构演变具有重要关联特征。湍流脉动致使涡团尺度发生变化, 从而影响燃油破碎蒸发, 最终使得喷雾不同尺度结构分布形态发生改变。

关 键 词: 大涡模拟; 本征正交分解(POD); 正十二烷; 喷雾射流; 湍流脉动

中图分类号: V231.2⁺1

文献标志码: A

Analysis of *n*-dodecane spray jet by proper orthogonal decomposition

QIN Wenjin¹, XU Lihui¹, LU Dengbiao¹, LIU Hao²

(1. School of Mechanical Engineering,

University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai 200093, China;

2. Beijing Aerospace Institute for Metrology and Measurement Technology,

China Academy of Launch Vehicle Technology,

China Aerospace Science and Technology Corporation, Beijing 100076, China)

Abstract: Large eddy simulation was used to calculate the cold spray phenomenon of single component alternative fuel *n*-dodecane for aviation kerosene, and to explore the coupling phenomenon of multiple physical fields in spray jets. The process of fuel breaking, evaporation and oil-gas mixing was analyzed from the macro level, and it was found that the flow field vortices played an important role in the process. The data base of mass fraction field and vorticity field of *n*-dodecane jet flow was processed by the proper orthogonal decomposition, and the relationship between them was explored from the micro level. The results showed that there was a significant spatial distribution correlation between the *n*-dodecane mass fraction field spray structure and the jet flow vorticity field vortex structure, reflecting that the evolution of two structures had important correlation characteristics. The turbulence fluctuation resulted in the change of the vortex

收稿日期: 2020-11-22

基金项目: 国家自然科学基金(51506118)

作者简介: 秦文瑾(1981—), 男, 副教授、硕士生导师, 博士, 主要从事先进燃烧技术研究。

引用格式: 秦文瑾, 徐礼辉, 卢登标, 等. 本征正交分解法对正十二烷喷雾射流的解析[J]. 航空动力学报, 2021, 36(9): 1917-1923.

QIN Wenjin, XU Lihui, LU Dengbiao, et al. Analysis of *n*-dodecane spray jet by proper orthogonal decomposition[J]. Journal of Aerospace Power, 2021, 36(9): 1917-1923.

scale, which affected the breakup and evaporation of the fuel, and finally changed the distribution morphologies of different scale structures of spray.

Key words: large eddy simulation; proper orthogonal decomposition (POD); n -dodecane; spray jet flow; turbulence fluctuation

众所周知,液体燃料喷雾燃烧过程非常复杂,其中多种物理化学现象相互耦合、相互影响,充分认识燃料喷雾的分布和雾化过程,对于改善油气混合、提高燃烧效率及降低排放具有重要指导意义^[1]。而湍流流场对喷雾破碎蒸发、油气混合具有极其重要的影响,对其科学的认识是研究其他物理化学现象的前提。

近年来,高效科学的数值模拟方法为研究液体燃料射流燃烧的物理化学过程提供了便利的手段。对于模拟获得的原始数据库,还必须运用科学的分析手段才能获取有效的信息。传统针对数据进行统计平均操作的行为存在着较多局限性。在大部分工况下,实际发动机燃烧室内瞬态工作特性,是无法用统计的方式来精确描述,局部调整常常会丢失,此外由于燃烧室内湍流场的复杂特性,也难以直接通过观测加统计手段来记录拟序结构特征^[2-3]。本征正交分解(proper orthogonal decomposition, POD)作为一种有效的数学方法,用于湍流研究时,突破了传统统计平均方法的局限性,对湍流场原始采样数据进行分解和重组,可获得主要结构特征^[4],进而有利于深入理解缸内物化现象。由于POD方法存在独特的优势,越来越多的研究者将其应用于燃烧系统研究领域。秦文瑾等在此方面做了大量研究,将本征正交分解应用于缸内速度场,提出POD四分解法,考察了缸内的湍流脉动和循环变动特征以及四部分分流场之间的能量级联过程,验证了POD可以用来作为湍流场数值模拟结果准确性的有效工具^[5-6]。韦武等运用POD对湍流速度场进行研究,发现在超临界过程中,湍流动能较大,更容易形成涡旋^[7]。何创新等通过本征正交分解对射流浓度场进行分析,提取出了非稳态行为的主要结构的时空模式和时空演化特征^[8]。在燃烧方面, Bizon等运用POD分析燃烧光度图像,分离出光度场波动的相干和非相干部分,研究内燃机循环变动特性^[9]。陈豪等将POD应用于不同进气涡流情况下的燃烧图像,发现利用POD系数和模态可以解析出早期火焰的平均部分和波动部分,提高更多定量信息^[10]。然而上述研究大都针对单一物理现象展

开,未能对多场耦合现象进行深入探讨。

本文尝试用POD对两种不同性质的物理场进行同步处理分析,来探究航空煤油单组分替代燃料正十二烷射流两相流动场景下的多物理现象耦合特征。首先运用大涡模拟对正十二烷的冷态喷雾进行计算,探究喷雾射流特性,重点揭示喷雾射流背后包含的物理现象,从宏观层面考察模拟结果,并与实验做对比。然后运用POD对正十二烷质量分数场与射流涡量场数据库进行加工,从“微观”层面深入分析燃料喷雾质量分数场与射流流场之间的联系。

1 本征正交分解

本征正交分解是分析湍流场相干结构与动态信息的有效方法,其基本思想是将原始场分解成一组与空间相关的基函数(POD模态)和相对应的时间系数的线性组合。应用POD后,原始场的大部分能量/强度可由少数的基函数捕获,进而对原始场实现了降维近似。为了节省资源、方便计算,本研究使用Sirovich提出的“快照”POD方法^[11]对模拟数据进行加工。基于某标量场 s ,将其一组数据构成快照数据集 $s(x, t)$,其中 x 是空间坐标, t 是标量场编号,即为快照索引。其矩阵形式可表示 $S = [s_1, s_2, \dots, s_t]$,由此便可得到标量场的空间相关矩阵

$$C = \frac{1}{N} S S^T \quad (1)$$

POD的模态可通过相关矩阵 C 的特征向量的分量 $\phi_d(t)$ 与原始场的线性乘积的组合表示

$$\varphi(x) = \sum_{t=1}^N \phi_d(t) s(x, t) \quad (2)$$

这样POD模态便与矩阵 C 的特征值和特征向量一一对应。其中特征值的大小代表对应模态强度大小,将特征值从大到小递减排列,则最大的特征值对应的POD模态包含了原始场最大强度结构特征,其余模态依次递减。至此,原始标量场便可由下式重构:

$$s(x, t) = \sum_{d=1}^{N_{\text{mode}}} a_d(t) \varphi_d(x) \quad (3)$$

其中时间系数 $a_d(t)$ 可通过将原始场向各个模态投影的方式获得。

2 数值计算方法

本研究针对美国 Sandia 国家实验室进行的正十二烷无反应喷雾实验展开。实验在边长为 108 mm 的立方体定容燃烧室里进行,为了提高计算效率,本次模拟所采用的是上、下底直径分别为 40、80 mm,高为 100 mm 的圆台形定容燃烧室^[12],其余计算条件严格按照实验设置,具体参数及初始环境条件如表 1 所示。

表 1 喷雾模拟参数设置
Table 1 Parameter setting of spray simulation

参数	数值及详情	
燃料	正十二烷	
燃料温度/K	363	
喷嘴直径/ μm	90	
喷射压力/MPa	150	
喷射脉宽/ms	1.5	
初始环境温度/K	900	
初始环境压力/MPa	6.05	
环境气体体积分数/%	O ₂	0
	N ₂	89.7
	CO ₂	6.52
	H ₂ O	3.77

本次油气两相流模拟在大涡模拟的框架下,采用传统的欧拉-拉格朗日方法进行。通过自适应网格加密策略来平衡计算成本和计算精度的要求,最终网格数目为 400 万,最小网格尺寸为 0.1 mm。大涡模拟湍流模型采用 Dynamic Structure 模型。由于本研究关注无反应喷雾的情形,所以环境气体剔除了氧气。此外,在高温高压超临界条件下(正十二烷的临界温度为 658.1 K,临界压力为 1.82 MPa),气体分子间的相互作用力不能被忽略,理想气体状态方程并不适用^[13],故本次模拟采用了 RK(Redlich-Kwong)真实气体状态方程。本次研究关于两相流动的处理是基于传统的欧拉-拉格朗日方法,依旧选取当前比较成熟的液滴 KH-RT(Kelvin Helmholtz-Rayleigh Taylor)破碎模型以及 Frossling 蒸发模型,而暂时未考虑超临界液体和环境气体界面消失的现象。关于超临界液体射流气液交互处特性的研究,将在今后的工作中展开。

3 结果与讨论

为了验证此次模拟结果的准确性,图 1 对比了在 1.5 ms 喷射脉宽内模拟与实验^[14]的液相与蒸汽相喷雾贯穿距。液相贯穿距定义为从喷嘴到液体燃料总质量分数为 0.95 区域的轴向距离,蒸汽相贯穿距由燃料蒸汽质量分数达到 0.001 的最远下游位置所确定^[15]。可以看出贯穿距的总体趋势与实验符合较好,喷射初期的瞬态变化被很好地捕获,液相贯穿距偏差较小,稳定的液核长度被很好地捕获。

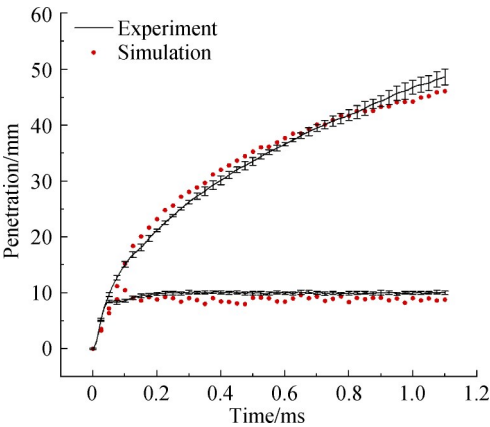


图 1 喷雾贯穿距
Fig.1 Spray penetration

图 2 中进一步给出了轴向和径向混合分数与实验结果的对比。径向在距离喷嘴 18 mm 处取样,轴向则为喷嘴所在轴线,模拟结果在 1.0~1.5 ms 内取平均,在此期间可保证上游射流基本处于稳定状态。可以发现,模拟得到的喷雾场空间分布特征与实验结果吻合较好,存在的误差在可允许范围之内,即模拟结果能够比较准确地描述高温、高压下的正十二烷喷雾发展过程。

图 3 给出了喷射脉宽 $T=0.5, 1.0, 1.5$ ms 时刻模拟与实验正十二烷质量分数 $w_{n\text{-dodecane}}$ 对比图,以表征喷雾前、中、后期的射流状况。可以看出,模拟的射流空间形态分布情况与实验吻合程度较高,进一步验证了所建立的喷雾模型的合理性,且与实验相比模拟可显示出喷雾射流边缘以及沿轴向射流质量分数变化方面更多的细节。在喷雾前期,燃料以较高的速度从喷嘴喷出,射流表面与环境气体之间存在较大的速度差,由于气动不稳定性形成液体射流表面 K-H(Kelvin-Helmholtz)扰动波,燃油与环境气体之间的大密度梯度则形成 R-T(Rayleigh-Taylor)扰动波^[16]。在 KH-RT 扰动

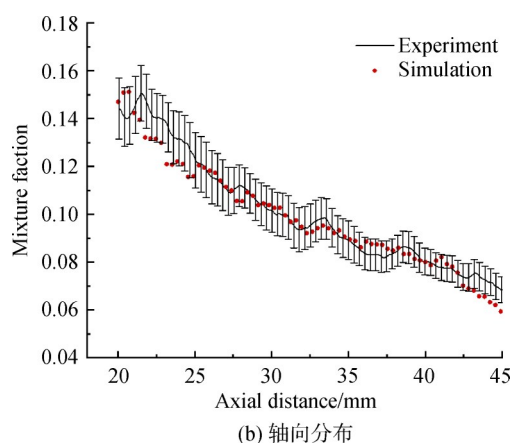
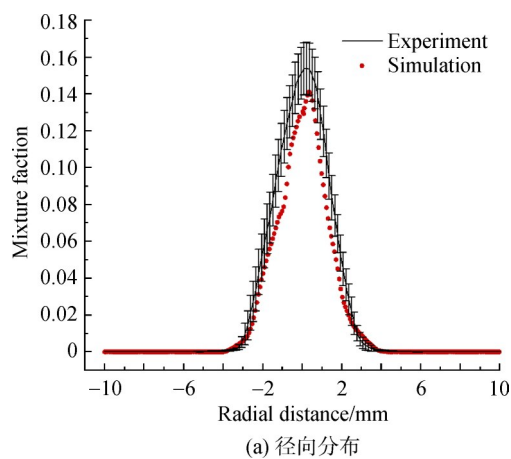


图2 混合分数分布

Fig.2 Mixture fraction distribution

波的作用下,燃油逐渐剥落,形成小的液滴,然后在高温环境下变成燃油蒸汽。当喷雾发展到中后期,此时喷雾形态逐渐趋于稳定,不再发生大的改变,只有喷雾的蒸汽相贯穿距在不断发展。在此过程中,燃油蒸汽与环境气体间强烈的剪切作用,使得在喷雾边缘形成很多蒸汽涡团结构。

图4显示了1.5 ms时刻流场温度、涡量和正十二烷质量分数梯度的分布云图,此时射流完全发展,处于稳定状态。结合图4(a)和图4(b)来看,在接近喷嘴区域,燃料喷入高温环境气体中,刚喷入的液体射流温度较低,随后受KH-RT扰动波的影响,射流开始破碎成液滴,燃料液滴接触到高温环境气体蒸发成燃料蒸汽。沿轴向发展的燃料蒸汽卷起形成小的涡旋结构,然后涡结构开始配对并形成更大的涡^[17]。这些涡旋形成的大规模的涡流运动,将较暖的环境气体夹带到喷雾射流中,促进两者的混合,同时燃料蒸汽温度逐渐升高。图4(c)给出了正十二烷质量分数梯度云图。高质量分数梯度主要集中在射流内部液核周围及射流表面,可起到类似于“固壁”的作用^[18],阻碍射流在径向的发展。此外,沿射流轴向质量分数梯度逐渐变小,很大程度上反映了流动中喷雾大尺度结构的破坏。

在上面的结果中可以看出流场涡团对喷雾破碎蒸发、油气混合过程具有极其重要的作用。然

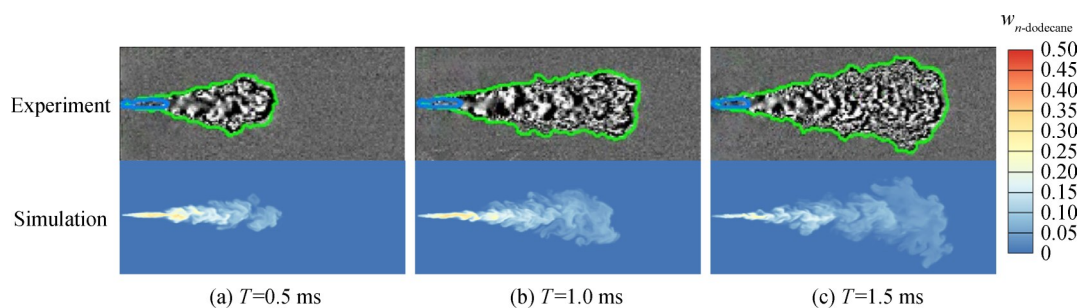


图3 正十二烷质量分数

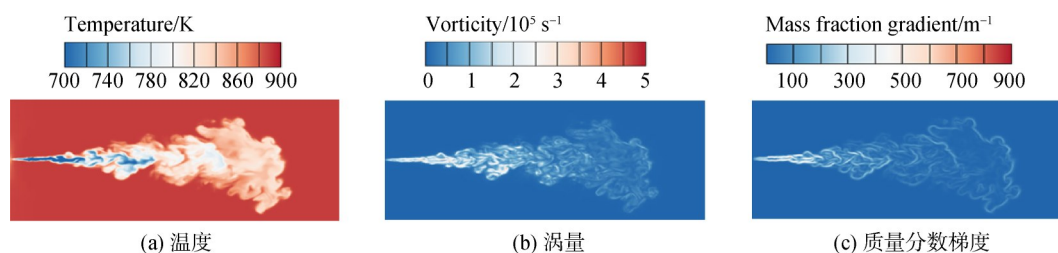
Fig.3 Mass fraction of *n*-dodecane

图4 温度、涡量与质量分数梯度云图

Fig.4 Contours of temperature, vorticity and mass fraction gradient

而仅通过宏观的观察不足以解释流场对喷雾的影响,还应通过其他途径来深入分析两者的联系。POD在此方面具有优势,其特征值快速收敛的特性可将大尺度结构与小尺度结构有效分离,全面观察喷雾射流结构的演变特征,获取更加丰富的信息。

不同的POD模态所包含的原物理场强度大小通过该模态的特征值呈现,若将特征值按照大小依次递减排列,则可反映原物理场强度的变化趋势。图5描绘了正十二烷质量分数场与射流涡量场的前10个特征值的分布曲线。首位特征值都占据了全部特征值总和80%以上的比例,随后,特征值曲线迅速递减。说明首模态捕获了原始场最大强度的形态结构特征,而后续模态捕获的原始场形态结构的强度则显著减弱。对于涡量场而言,其快速收敛的特性说明射流流场具有较高的整体流动性,相对全局而言,流场局部随机无规则脉动较弱。

在射流过程中,燃油会经历多次二次破碎,大量液滴出现在射流中下游区域,其蒸汽质量分数场结构会呈现出复杂的多种尺度结构形态。图6给出了正十二烷质量分数场和涡量场的前3个POD模态和两个高阶模态的无量纲空间分布情况。通过比较可以看出,模态1展现了喷雾场中最大空间尺度的平均结构特征,此时的涡量场呈现出一个整体涡团结构,该结构携带着流场绝大

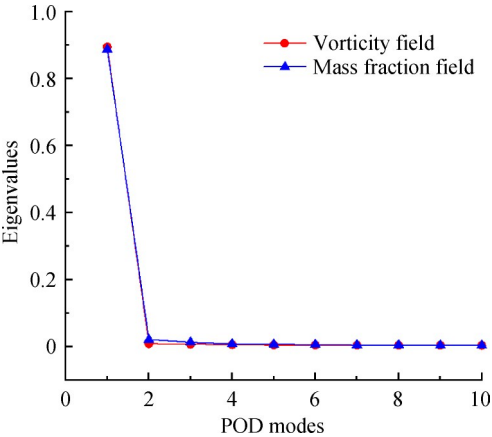


图5 POD模态特征值分布
Fig.5 Distribution of POD mode eigenvalues

部分的动能;模态2和模态3则反映了喷雾大尺度结构特征,涡量场也显示出较大尺度的涡团结构,可以发现喷雾大尺度结构出现的位置与流场涡团拥有明显的相关性。随后的高阶模态则反映了喷雾的小尺度结构特征,随着模态数的增加,其所包含的喷雾结构尺度显著变小,且此时的涡量场同样主要包含小尺度流场涡团结构。依然将质量分数场高阶模态形态结构与涡量场高阶模态所呈现出的小尺度涡团进行比对,可以发现其空间分布相关性进一步增强,反映出流场的演变对喷雾场的演变(破碎和蒸发)起到重要的影响。即在整个燃油喷射过程中,伴随着射流流场的发展,环境气体湍流脉动增强,流场大尺度涡团结构被拉

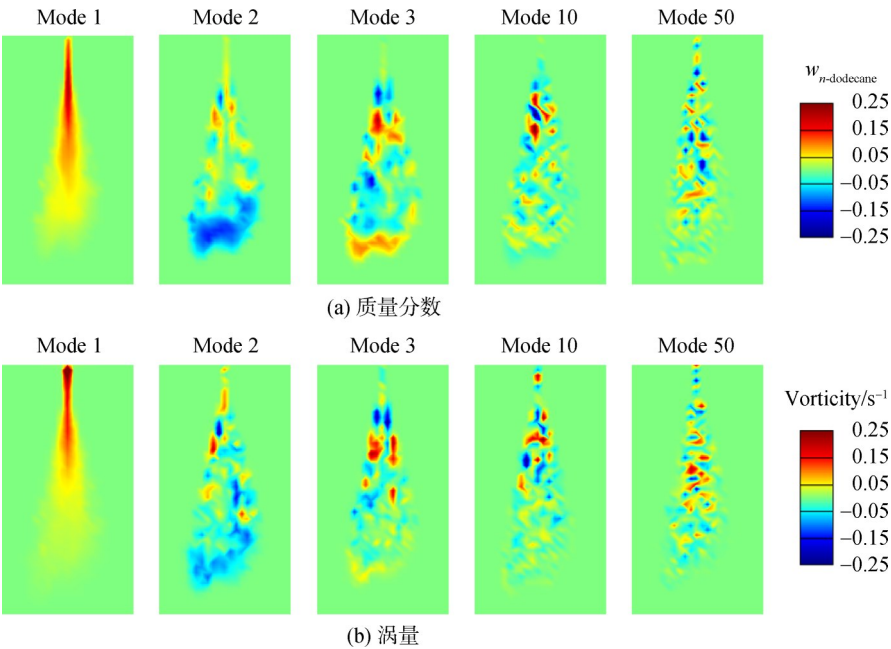


图6 质量分数场与涡量场典型模态
Fig.6 Typical modes of mass fraction field and vorticity field

伸并分裂成更小的涡团结构,并对燃油喷雾的破碎产生影响,使整个液滴群的表面积不断增大,从而促进液滴群蒸发,然后通过流场涡团的演变来不断改变燃油蒸汽相的空间不同尺度结构的分布形态。

为了更好地研究流场涡团和正十二烷质量分数场结构演变在时间上的关联特征,将1.5ms喷射脉宽内的质量分数场和涡量场平均分为10个阶段,进行POD分解。图7为质量分数场和涡量场前两个模态的时间系数的演变情况。在POD中,时间系数的大小与特征值一样可以反应对应模态捕获的能量(强度)。模态1代表平均场结构,占据绝大部分强度特征,可知在燃料不断喷入定容弹的过程中,入口射流与环境气体的强烈剪切作用使得大量涡团产生,所以涡量场强度逐渐增强,而此时的质量分数场强度也呈现相同的演变特征。相反,模态2代表的大尺度结构强度则随着喷射时间逐渐减小,原因在于大尺度结构会随着时间的演变逐渐破碎成小尺度结构,所包含的强度也随之传递到小尺度结构中,最终慢慢耗

散掉。同样可以看出两种结构的演变趋势非常相似。进一步说明了质量分数场和涡量场结构演变具有重要关联特征。

4 结 论

本文运用大涡模拟方法对航空煤油单组分替代燃料正十二烷的冷态喷雾现象进行数值模拟,计算结果经过实验对比验证。重点运用本征正交分解对正十二烷质量分数场和射流涡量场进行分析,来探究喷雾射流中的多物理现象耦合特征。主要结论如下:

1) 流场对喷雾破碎蒸发、油气混合过程具有重要影响。宏观层面的分析表示,在喷雾前期,燃油受KH-RT扰动波的作用破碎成液滴,燃油液滴受高温环境气体影响蒸发成燃料蒸汽,随后卷起形成涡旋结构,环境气体卷入燃料射流,促进油气混合。

2) POD应用在正十二烷质量分数场和涡量场数据后,可从“微观”层面深入分析两者之间的联系。从两者POD模态和时间系数的对比可发现质量分数场喷雾结构与涡量场涡团结构存在显著的空间分布相关性,反应两者结构演变具有重要关联特征。

3) 射流流场的发展使得环境气体湍流脉动增强,流场大尺度涡团结构被拉伸并分裂成更小的涡团结构,对燃油喷雾的破碎产生影响,使得整个液滴群的表面积不断增大,从而促进液滴群蒸发,然后通过流场涡团的演变来不断改变燃油蒸汽相的空间不同尺度结构的分布形态。

参考文献:

- [1] 李亮,解茂昭,贾明.新欧拉模型下不同湍流模型对喷雾的数值分析[J].内燃机学报,2018,36(1):76-82.
LI Liang, XIE Maozhao, JIA Ming. Comparison of different turbulence models applied to spray by the new eulerian model[J]. Transactions of CSICE, 2018, 36(1): 76-82. (in Chinese)
- [2] 陈豪.直喷汽油机缸内过程稳定性机理的可视化研究[D].上海:上海交通大学,2014.
CHEN Hao. Analyzing cycle-to-cycle variations of in-cylinder processes in an optical spark-ignition direct-injection engine[D]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University, 2014. (in Chinese)
- [3] 严浩,张少华,余西龙,等.OH与CH₂O双组分平面激光诱导荧光对旋流燃烧室火焰结构与脉动特征的研究[J].航空动力学报,2019,34(4):894-907.
YAN Hao, ZHANG Shaohua, YU Xilong, et al. Flame struc-

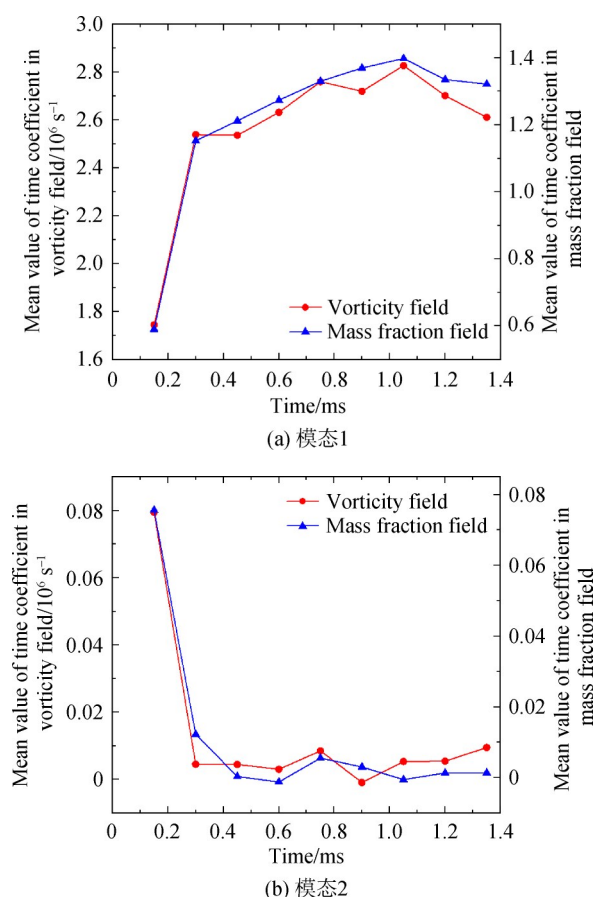


图7 POD模态时间系数演变
Fig.7 POD mode time coefficients evolution

- ture and dynamics characters investigation by OH and CH₂O planar laser-induced fluorescence in the swirl combustor[J]. Journal of Aerospace Power, 2019, 34(4):894-907. (in Chinese)
- [4] BERKOOZ G, HOLMES P J, LUMLEY J L. The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows [J]. Annual Review of Fluid Mechanics, 2003, 25(1): 539-575.
- [5] 秦文瑾, 解茂昭, 贾明, 等. 4气门DISI汽油机缸内湍流场POD分析[J]. 内燃机学报, 2013, 31(1):45-52.
QIN Wenjin, XIE Maozhao, JIA Ming, et al. POD analysis on in-cylinder turbulent flows in a DISI gasoline engine[J]. Transactions of CSICE, 2013, 31(1):45-52. (in Chinese)
- [6] 秦文瑾, 解茂昭, 贾明, 等. 4气门直喷式汽油机缸内湍流场多周期循环变动的大涡模拟[J]. 内燃机学报, 2012, 30(3): 234-240.
QIN Wenjin, XIE Maozhao, JIA Ming, et al. Large eddy simulation of in-cylinder turbulent flows cycle-to-cycle variation in a DISI gasoline engine[J]. Transactions of CSICE, 2012, 30(3):234-240. (in Chinese)
- [7] WEI Wu, LIU Hongsheng, XIE Maozhao, et al. Large eddy simulation and proper orthogonal decomposition analysis of fuel injection under trans/supercritical conditions[J]. Computers and Fluids, 2019, 179:150-162.
- [8] HE Chuangxin, LIU Yingzheng. Proper orthogonal decomposition of time-resolved LIF visualization: scalar mixing in a round jet[J]. Journal of Visualization, 2017, 20(4):789-815.
- [9] BIZON K, CONTINILLO G, MANCARUSO E, et al. POD-based analysis of combustion images in optically accessible engines[J]. Combustion and Flame, 2010, 157(4): 632-640.
- [10] CHEN Hao, XU Min, DAVID L S, et al. Cycle-to-cycle variation analysis of early flame propagation in engine cylinder using proper orthogonal decomposition[J]. Experimental Thermal and Fluid Science, 2014, 58:48-55.
- [11] SIROVICH L. Turbulence and the dynamics of coherent structures: I coherent structures[J]. Quarterly of Applied Mathematics, 1987, 45(3):561-571.
- [12] 秦文瑾, 卢登标, 刘浩. 气体状态方程对正十二烷射流燃烧的影响[J]. 航空动力学报, 2020, 35(1):66-74.
QIN Wenjin, LU Dengbiao, LIU Hao. Effects of gas state equation on *n*-dodecane jet combustion[J]. Journal of Aerospace Power, 2020, 35(1):66-74. (in Chinese)
- [13] 李云清, 王宏楠, 王德福. 状态方程对高温高压条件下燃料液滴蒸发计算的影响[J]. 内燃机学报, 2009, 27(4):344-351.
LI Yunqing, WANG Hongnan, WANG Defu. Effect of state equation on numerical simulation of fuel droplet[J]. Transactions of CSICE, 2009, 27(4):344-351. (in Chinese)
- [14] ABRAHAM J, PICKETT L M. Computed and measured fuel vapor distribution in a diesel spray[J]. Atomization and Sprays, 2010, 20(3):241-250.
- [15] KIM D, MARTA J, VIOLI A. The relative importance of fuel oxidation chemistry and physical properties to spray ignition[J]. SAE (Society of Automotive Engineers) International Journal of Fuels and Lubricants, 2017, 10(1):10-21.
- [16] 朱斌. 亚临界/超临界燃油喷雾特性及空化的数值研究[D]. 辽宁 大连: 大连理工大学, 2017.
ZHU Bin. Numerical research on subcritical/supercritical fuel spray characteristics and cavitation[D]. Dalian Liaoning: Dalian University of Technology, 2017. (in Chinese)
- [17] ZHANG Jibao, ZHANG Xin, WANG Tao, et al. A numerical study on jet characteristics under different supercritical conditions for engine applications[J]. Applied Energy, 2019, 252:113428.1-113428.11.
- [18] 韦武, 解茂昭, 贾明. 环境压力对超临界流体喷雾特性影响的数值分析[J]. 内燃机学报, 2018, 36(3):237-244.
WEI Wu, XIE Maozhao, JIA Ming. Numerical analysis on the influence of ambient pressure on supercritical fluent spray characteristics[J]. Transactions of CSICE, 2018, 36(3): 237-244. (in Chinese)

(编辑:王碧琚)