

温度和压力对液氨闪沸喷雾特性的影响

胡超群, 冷鹏飞, 胡隆彪, 张冠宇, 邓俊, 李理光, 吴志军

(同济大学汽车学院, 上海 201804)

摘要: 氨作为一种绿色储氢燃料具有巨大的应用潜力, 但液氨沸点低, 其在标准大气压下沸点仅为 239.7 K, 极易发生闪沸。本文在欧拉-拉格朗日框架下, 对液氨燃料进行数值模拟, 研究其在不同过热度、喷射压力、燃料温度和环境温度下的闪沸喷雾的形态、贯穿距、粒径和氨蒸汽质量分数等特性。结果表明: 液氨过热度越大, 其喷雾的贯穿距越大, 喷雾前端坍塌发生越明显; 喷射压力越大, 液氨喷雾坍塌先增强后减弱, 喷雾的粒径越小; 液氨喷雾特征受环境温度影响较弱, 在低燃料温度下, 喷雾的特征受过热度的影响小, 相反, 高燃料温度下氨蒸汽质量分数随着温度的升高而增加。

关键词: 液氨; 喷雾特性; 闪沸; 过热度

中图分类号: TK421

文献标志码: A

Effects of Temperature and Pressure on the Flash Boiling Spray Characteristics of Ammonia

HU Chaoqun, LENG Pengfei, HU Longbiao, ZHANG

Guanyu, DENG Jun, LI Liguang, WU Zhijun

(School of Automotive Studies, Tongji University, Shanghai 201804, China)

Abstract: Ammonia is used as a green hydrogen storage fuel with great potential for application, with zero carbon emissions compared to traditional hydrocarbon fuels. Liquid ammonia has a low boiling point of only 239.7 K at 1 atm, which makes it highly susceptible to flash boiling. In this paper, numerical simulations of liquid ammonia fuel were carried out in the Eulerian-Lagrangian framework to investigate the morphology, penetration distance, particle size and ammonia vapor mass fraction of the flash-boiling sprays at different superheat degrees, injection pressures, fuel temperatures and ambient temperatures. The results show that the spray penetration increases with the larger superheat of liquid ammonia, and the collapse of the spray front becomes more

pronounced. The higher the spray pressure, the liquid ammonia collapses are enhanced and then weakened, and the particle size is smaller. The spray characteristics of liquid ammonia are almost independent of the ambient temperature, and are less affected by superheat degree at low fuel temperatures, and the opposite is true at high fuel temperatures. The ammonia vapor mass fraction increases with increasing fuel temperature.

Keywords: liquid ammonia; spray characteristics; flash boiling; superheat degree

氨作为一种含氢的零碳燃料, 在碳中和目标中发挥重要作用^[1]。氨的氢含量为 17.6%, 其体积氢密度高于乙醇、甲醇、液氢和汽油等含氢燃料^[2, 3]。氨比氢更容易储存运输, 液氨可在室温 10 bar 或常压(1 bar)-33°C 的条件下储存^[4]。然而, 氨的汽化潜热高、层流火焰速度较低, 使得其无论是在点燃式(SI)还是在压燃式(CI)发动机中应用, 都是极大的挑战^[5-7]。为了克服氨在发动机中使用的缺陷, 学者们提出了两种主要策略^[8], 一种是氨和其他燃料混合, 将氨与高活性燃料进行掺混, 采用进气道或缸内直喷的方式进行输送, 形成均质混合气或者分层混合气; 另一种是直接喷射液氨, 可以获得更高的能量密度和喷射压力。

关于氨的混合燃料的燃烧, 学者们进行了大量的研究。Han 等人^[9]对 NH₃/空气、NH₃/H₂/空气、NH₃/CO/空气和 NH₃/CH₄/空气预混合火焰的层流燃烧速度进行了试验对比研究, Valera-Medina 等人^[10]和 Pacheco 等人^[11]探究了 NH₃/H₂ 预混燃料在贫燃条件下在旋流燃烧器中的燃烧特性。Li 等人^[12]使用快压机在压力 20 和 40 bar 下, 测得了氨乙醇不同比例混合燃料的点火延迟时间, Wang 等人^[13]测量氨混合燃料的层流火焰速度。Gross 等人^[14]和 Ryu 等

收稿日期: 2023-12-10

基金项目: 国家自然科学基金(T2241003); 科技部高端外国专家引进计划(G2023133001L)

第一作者: 胡超群(1994—), 男, 博士研究生, 主要研究方向为喷雾与雾化。E-mail: 2110874@tongji.edu.cn

通信作者: 吴志军(1972—), 男, 教授, 博士生导师, 工学博士, 主要研究方向为燃烧及喷雾光学诊断。E-mail: zjwu@tongji.edu.cn

人^[15]将燃料通过高压直喷的方式,研究了氨和二甲醚混合燃料在CI发动机的燃烧和排放特性。Li等人^[16]对柴油-先导-点火氨燃烧的双燃料模式进行了数值模拟研究。氨燃料与其他燃料的混合主要是气态,可以很好是实现高效燃烧。

关于液氨的直接喷射,近年开始受到广泛关注。Okafor等人^[17]实验研究了液氨喷雾在微型燃气轮机中燃烧的火焰稳定性和排放特性,Pelé等人^[18]在定容弹中研究了在汽油直喷(GDI)发动机相关条件下液氨喷雾与乙醇、汽油喷雾的差异。Li等人^[19]使用高速漫射背光法详细地研究了过热条件下的液氨喷雾近远场特征。Colson等人^[20]利用背光成像法研究了喷嘴结构和温度对液氨喷雾的影响。Zhang等人^[21]和An等人^[22]对液氨喷雾进行了数值模拟,分析了不同的相变模型的适应性。尽管近期在氨喷雾开展诸多研究,氨燃料特殊的物性导致极易发生闪沸现象,其影响因素仍不清楚。

本文基于欧拉-拉格朗日方法进行喷雾模拟,采用雷诺平均纳维-斯托克斯方程(RANS)和气体内能输运方程进行气体相建模,采用拉格朗日粒子追踪方法(LPT)对液滴进行建模,并基于CFD软件CONVERGE进行模型求解分析,以确定喷射压力、过热度、燃油温度和环境温度对液氨闪沸喷雾特性的影响,以期液氨在发动机中的应用提供数据支撑。

1 理论模型

1.1 基本控制方程

连续方程:连续方程表示单位时间内流入和流出微元控制体的流体质量之差,等于控制体内质量的增加(表现为密度的变化),如公式(1)所示:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = s \quad (1)$$

式中: ρ 为密度; t 为时间; u_i 为速度矢量的分量, x_i 为方向矢量的分量, S 为源相。

动量方程:动量方程表示微元控制体中流体的动量随时间的变化率与控制体所受到各种外力的合力相等,如公式(2)、式(3)所示:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial P}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + S_i \quad (2)$$

$$\sigma_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (3)$$

式中: P 为压力, σ_{ij} 为粘性应力张量, μ 为动力粘度。

能量方程如公式(4)所示:

$$\frac{\rho e}{\partial t} + \frac{\partial \rho e u_i}{\partial x_i} = -P \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(K \frac{\partial T}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D \sum h_m \frac{\partial Y_m}{\partial x_j} \right) + S \quad (4)$$

式中: e 为比内能; T 为温度; K 为流体传热系数; D 为质量扩散系数; h_m 为组分 m 的焓值; Y_m 为组分 m 的质量分数。

1.2 液相破碎模型

采用KH-RT模型进行破碎雾化求解,认为在燃油喷射的过程中,液滴的破碎是在一定的条件下由KH机制与RT机制共同作用下发生的,并通过液核破碎长度 L_b 来决定哪种机制占据主导。液核破碎长度 L_b 的定义如公式(5)所示:

$$L_b = C_{bl} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} d_0 \quad (5)$$

式中: ρ_l 为液体密度, ρ_g 为气体密度, d_0 为喷孔出口直径。

1.3 湍流模型

RANS方法是目前使用最为广泛的数值模拟方法,相对于直接数值模拟方法(DNS)、大涡模拟方法,(LES)能够极大节约计算资源,在工程实际应用中能取得很好的效果^[23]。采用RNG $k-\epsilon$ 模型对喷嘴内部的湍流流动进行计算。RNG $k-\epsilon$ 模型是两方程的涡粘模型,该模型通过修正湍流粘度,考虑了平均流动中的旋转及旋流流动情况,可以更好地处理高应变率及流线弯曲程度较大的流动,结合壁面函数法,可以较好的处理近壁面流动,对分离流的计算结果可行性也较高。

2 数值模型

2.1 模型建立

根据Li等人^[19]的定容弹液氨喷射实验建立计算模型,计算域为直径108 mm和高108 mm的圆柱体。喷嘴模型设置与实验完全一致,设置为单孔,可以避免多孔的油束之间的相互干涉,喷孔直径为0.28 mm,长径比为6,喷油脉宽为1.66 ms。整个计算域的基础网格为4 mm,采用基于速度梯度的5级自适应网格加密(AMR),最小单元尺寸为0.125 mm。网格敏感性研究表明,如果采用更细的网格,结果变化不大。

本文对过热度参照文献[19]的表示方法,即用压力比(R_p)表示,其定义为特定燃油温度下的饱和

压力(P_s)与环境压力(P_a)的比值。边界条件设置如表1所示。

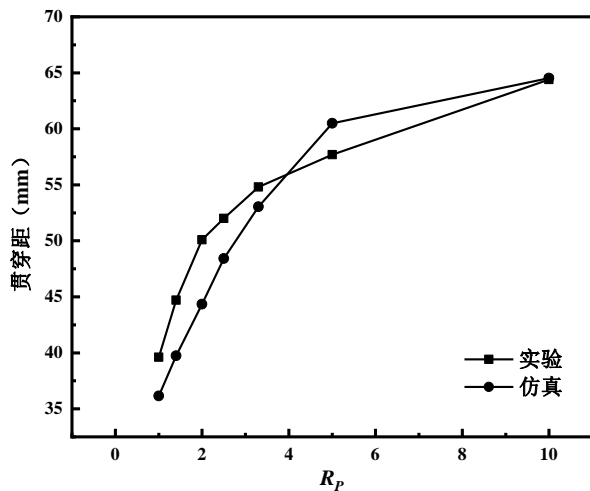
表 1 计算边界条件

Tab.1 Computational boundary condition

条件参数	参数值
燃料	氨
环境气体	氮气
燃料喷射压力 P/MPa	5 ~ 30
燃料温度 T/K	243 ~ 338
定容弹压力 P_a/bar	1.0 ~ 29.5
定容弹温度 T_a/K	288 ~ 328

2.2 模型验证

为了验证模型的有效性与准确性,将仿真模型计算结果与实验结果^[19]进行对比。设置与实验相同的工况,喷射压力为 30 MPa,喷射温度为 338 K,环境温度为 298 K。图1所示为不同的过热度下氨喷雾贯穿距模拟与实验结果的对比,模拟与实验的平均误差为 6.6%,两者随过热度的变化趋势相同,二者一致性良好。进一步验证仿真模型的可靠性,图2所示为 $R_p=10$ 时氨喷雾贯穿距随时间变化模拟与实验结果的对比,模拟结果与实验具有较好的一致性。

图1 氨喷雾贯穿距模拟与实验结果对比($t=0.1\text{ ms}$)Fig.1 Comparison of the ammonia spray penetration between experimental and simulation ($t=0.1\text{ ms}$)

3 结果与讨论

3.1 喷射压力的影响

图3所示为液氨闪沸喷雾贯穿距随着喷射压力变化的曲线。燃油温度 338 K,环境温度 298 K。可知,随着喷射压力的增大,氨喷雾的贯穿距也增大。同时,液氨的过热度越大,喷雾的贯穿距也越大。在

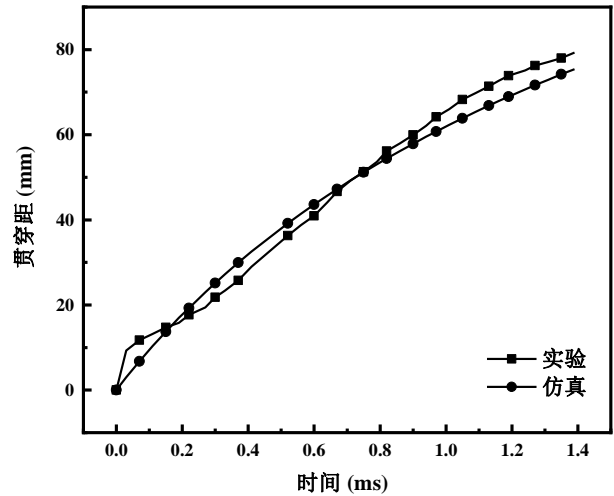


图2 氨喷雾贯穿距随时间变化的模拟与实验结果对比

Fig.2 Comparison of simulation and experimental results for ammonia spray penetration distance with time

过热度 $R_p=1$ 时,即未发生闪沸,喷雾贯穿距随着压力增长的较为平缓。在较小的喷射压力下,贯穿距随着压力的增长率在不同的过热度下呈现不同的趋势,在过渡闪沸阶段,贯穿距的增长率较大。过热度较大时,随着喷射压力增大,贯穿距变化较小。

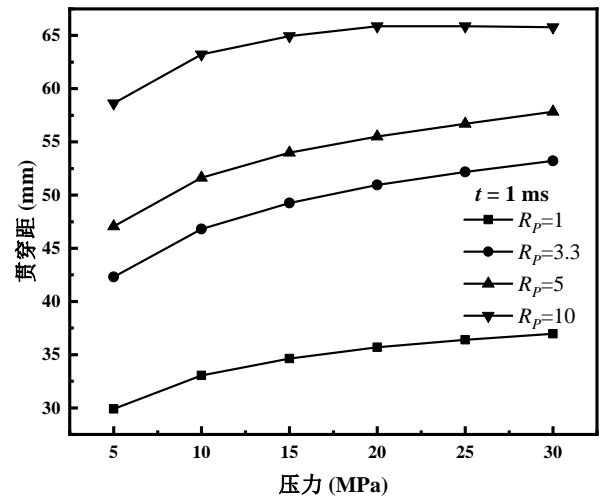


图3 氨喷雾贯穿距随喷射压力的变化

Fig.3 Ammonia spray penetration at different pressures

图4所示为液氨喷雾索特平均直径(SMD)随着压力变化的曲线。图中右上角展示了过热度 $R_p=5$ 时不同喷射压力下液氨喷雾 SMD 随时间的变化曲线。从图可知,喷雾 SMD 随着压力增大而减小。液氨喷雾的粒径越小越容易蒸发成气相,故喷射压力越大,过热度较大的液氨喷雾闪蒸越快,贯穿距变化越平缓,与图3对应。在喷射压力较小时,不同的过

热度下液氨喷雾粒径大小较接近。在低过热度时,过热度越大的液氨喷雾粒径越小。在 $R_p=10$ 时,液氨闪沸喷雾的SMD并不是最小,因为过热度太大,小液滴蒸发过快。在液氨过热状态下,喷雾SMD并不是随时间持续的下降,高喷射压力下,呈现一定增长趋势,液滴速度较快,小液滴易与后面液滴合并。

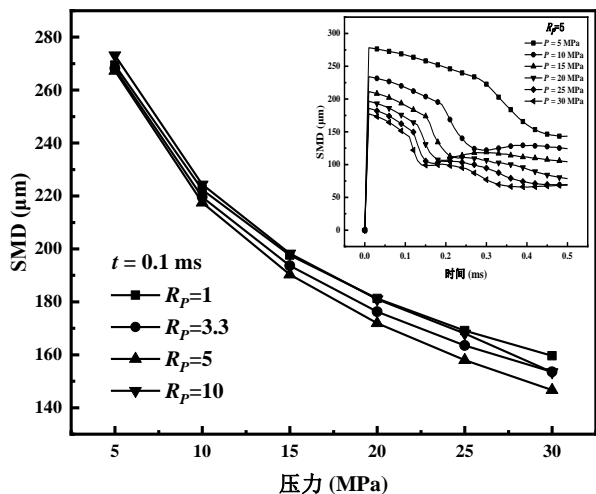


图4 氨喷雾SMD随喷射压力的变化

Fig.4 Ammonia spray SMD at different pressures

图5所示为不同喷射压力下氨蒸汽质量分数随时间的变化曲线。从图可知,过热氨蒸汽的质量分数随着时间增大,质量分数的变化率先增大后减小。喷射压力越大,过热氨蒸汽的质量分数越大。喷射压力越大,喷雾的粒径越小,越有利于液氨的蒸发。压力增大到一定程度,氨蒸汽质量分数的增幅不明显。结合图4,过热度增大,液氨粒径减小,氨蒸汽的质量分数增大。过热度和喷射压力同时增大,将有利于液态氨向气态氨的转化,对于燃料混合气的形成有着促进作用。

3.2 燃油温度的影响

图6所示为液氨闪沸喷雾贯穿距随着燃料温度变化的曲线。喷射压力20 MPa,环境温度298 K。可知,随着燃料温度的升高,液氨喷雾的贯穿距减小,过热液氨和非过热液氨在低燃料温度下呈现不同的变化趋势。低过热度的氨喷雾贯穿距的变化率随燃料温度增大而减小,高过热度氨喷雾的贯穿距的变化率增大。在燃油温度与环境温度差值较大时,过热氨喷雾贯穿距受过热度影响小。当燃料温度接近环境温度时,过热度对贯穿距的影响大。

图7所示为液氨闪沸喷雾SMD随燃料温度的变化曲线。选取在0.1 ms时刻不同的过热度下,不同燃料温度的氨喷雾SMD。可见相同的过热度下,

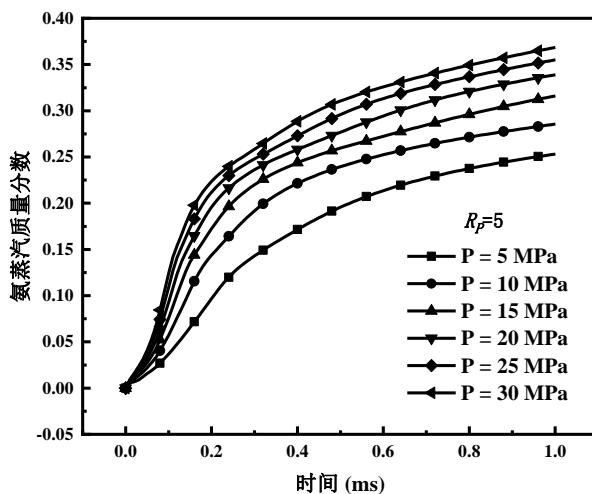


图5 不同喷射压力下氨蒸汽质量分数随时间的变化

Fig.5 Ammonia vapor mass fraction at different pressures

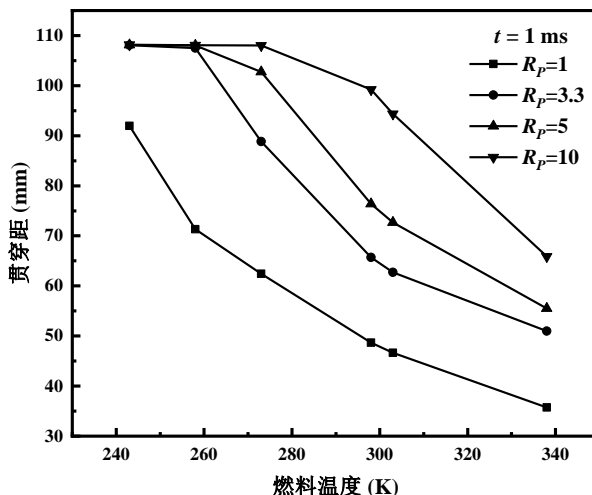


图6 氨喷雾贯穿距随燃料温度的变化

Fig.6 Spray penetration at different fuel temperatures

过热氨喷雾的SMD整体呈减小的趋势。不同的过热度下,燃油温度对氨喷雾SMD的影响差异很大。燃料温度小于环境温度时,过热度越大,氨喷雾SMD越大。燃料温度大于环境温度时,过热氨的过热度越大,过热氨喷雾的粒径更小。 $R_p=1$ 时,非过热氨喷雾粒径整体随燃油温度增大。过热氨和非过热氨粒径随燃料温度的变化趋势是相反的。

图8所示为不同燃料温度下氨蒸汽质量分数随时间的变化。选取 $R_p=5$ 的过热度的氨蒸汽质量分数。可见,氨喷雾的整体蒸汽质量分数在增大。在喷射初期,燃料温度越高,氨蒸汽的质量分数越大,质量分数的增长率随时间在减小。燃料温度 $T=338$ K时,燃料温度高于环境温度,过热氨在喷射初期就快速的蒸发,喷射后期蒸发减弱,氨蒸汽的质量

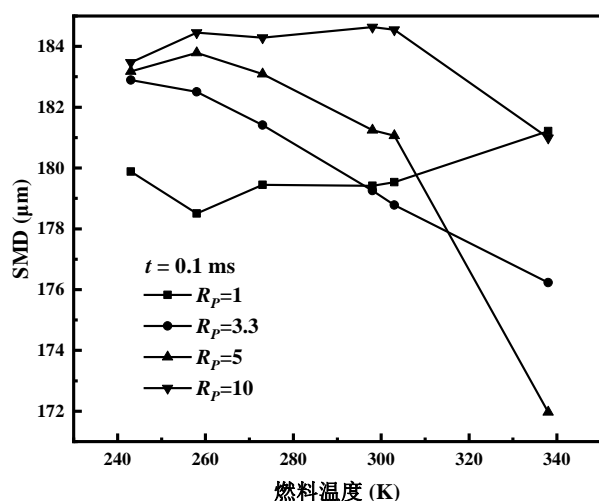


图7 氨喷雾SMD随燃料温度的变化

Fig.7 Spray SMD at different fuel temperatures

分数增长较小,燃料温度与环境的温差过大,蒸发的焓值更大,从环境需要获得潜热更大。与环境温差越小,氨蒸汽的质量分数越大。

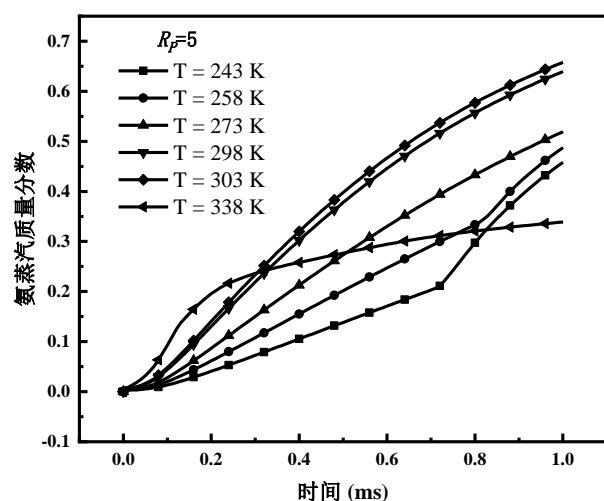


图8 不同燃料温度下氨蒸汽质量分数随时间的变化

Fig.8 Ammonia vapor mass fraction at different fuel temperatures

3.3 环境温度的影响

图9所示为液氨闪沸喷雾贯穿距随着环境温度变化的曲线。喷射压力20 MPa,燃料温度308 K。从图中可见,过热度 $R_p=5$ 时,随着变化趋势一致。氨喷雾的贯穿距随着环境温度的增大而增大,增大的比例非常小。环境温度增大了10 K,氨喷雾的贯穿距只增大了1mm。因此,对于过热氨喷雾,环境温度对贯穿距的影响小。

图10所示为氨的闪沸喷雾SMD随环境温度的变化曲线。与图9保持相同的条件,从图中可知,环

境温度不同,过热氨喷雾的SMD几乎相同。粒径差异不大,可以推测出环境温度对氨蒸汽的质量分数影响很微弱。因此,环境温度对氨喷雾的影响可以忽略。图11和图12所示为不同的过热度不同喷射压力下液氨喷雾形态。过热度越大,液氨喷雾坍塌越明显。喷射压力越大,液氨喷雾坍塌状态先增强后减弱。

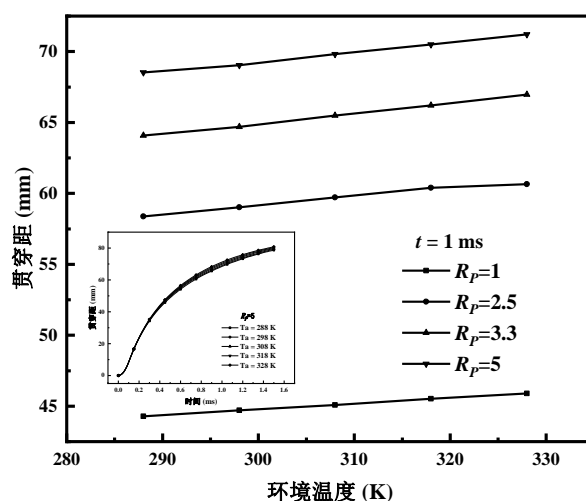


图9 氨喷雾贯穿距随环境温度的变化

Fig.9 Spray penetration at different ambient temperatures

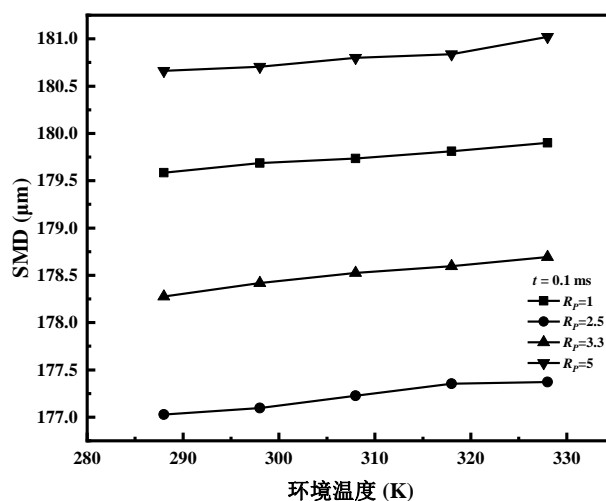


图10 氨喷雾SMD随环境温度的变化

Fig.10 Spray SMD at different ambient temperatures

4 结论

(1) 喷射压力越大,液氨闪沸喷雾的贯穿距越大,粒径越小,氨蒸汽的质量分数越大,这是因为过热状态下,粒径越小越易蒸发。过热度增大,闪沸喷雾贯穿距增大,粒径在小过热度范围内减小。

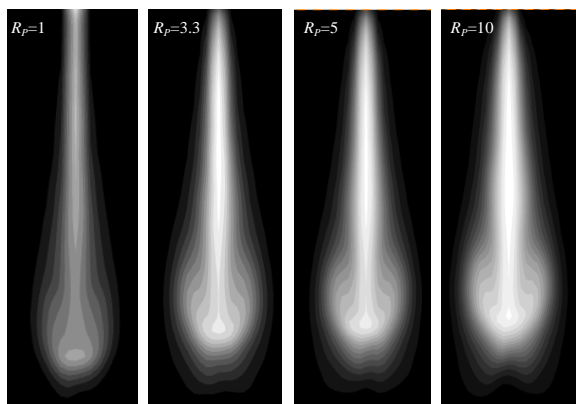


图11 不同的过热度下液氨喷雾形态 ($P=20\text{ MPa}$, $T=308\text{ K}$, $T_a=298\text{ K}$, $t=0.01\text{ ms}$)

Fig.11 Spray morphology at different superheat degree

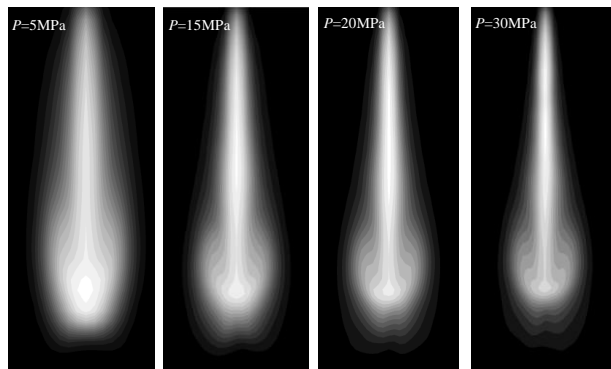


图12 不同的喷射压力下液氨喷雾形态 ($R_p=5$, $T=308\text{ K}$, $T_a=298\text{ K}$, $t=0.01\text{ ms}$)

Fig.12 Spray morphology at different injection pressures

(2) 燃油温度增大, 贯穿距减小, 氨蒸汽质量分数增大。燃油温度小于环境温度时, 过热度越大, 粒径越大, 由于小颗粒直接蒸发。燃油温度大于环境温度时, 过热度越大, 粒径越小。

(3) 环境温度改变, 液氨闪沸喷雾贯穿距变化很小, 粒径变化较小, 环境温度对液氨喷雾特性影响微弱。增大喷射压力和适当提高过热度是促进液氨雾化的有效手段。

参考文献:

- [1] DIMITRIOU P, JAVAID R. A review of ammonia as a compression ignition engine fuel [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2020, 45(11): 7098.
- [2] VALERA-MEDINA A, AMER-HATEM F, AZAD A K, *et al.* Review on ammonia as a potential fuel: from synthesis to economics [J]. *Energy & Fuels*, 2021, 35(9): 6964.
- [3] MACHAJ K, KUPECKI J, MALECHA Z, *et al.* Ammonia as a potential marine fuel: a review [J]. *Energy Strategy*

Reviews, 2022, 44: 100926.

- [4] AYVALI T, TSANG S C E, VAN VRIJALDENHOVEN T. The position of ammonia in decarbonizing maritime industry: an overview and perspectives: Part II costs, safety and environmental performance and the future prospects for ammonia in shipping [J]. *Johnson Matthey Technology Review*, 2021, 65(2): 291.
- [5] LHUILLIER C, BREQUIGNY P, CONTINO F, *et al.* Experimental study on ammonia/hydrogen/air combustion in spark ignition engine conditions [J]. *Fuel*, 2020, 269(1): 117448.
- [6] YOUSEFI A, GUO H, DEV S, *et al.* Effects of ammonia energy fraction and diesel injection timing on combustion and emissions of an ammonia/diesel dual-fuel engine [J]. *Fuel*, 2022, 314: 122723.
- [7] REITER A J, KONG S. Combustion and emissions characteristics of compression-ignition engine using dual ammonia-diesel fuel [J]. *Fuel*, 2011, 90(1): 87.
- [8] NOVELLA R, PASTOR J, GOMEZ-SORIANO J, *et al.* Challenges and directions of using ammonia as an alternative fuel for internal combustion engines [Z]. Paris: SAE International, 2023.
- [9] XINLU H, ZHIHUA W, COSTA M, *et al.* Experimental and kinetic modeling study of laminar burning velocities of NH_3/air , $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{air}$, $\text{NH}_3/\text{CO}/\text{air}$ and $\text{NH}_3/\text{CH}_4/\text{air}$ premixed flames [J]. *Combustion and Flame*, 2019, 206: 214.
- [10] VALERA-MEDINA A, PUGH D G, MARSH P, *et al.* Preliminary study on lean premixed combustion of ammonia-hydrogen for swirling gas turbine combustors [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017, 42(38): 24495.
- [11] PACHECO G P, ROCHA R C, FRANCO M C, *et al.* Experimental and kinetic investigation of stoichiometric to rich $\text{NH}_3/\text{H}_2/\text{Air}$ flames in a swirl and bluff-body stabilized burner [J]. *Energy and Fuels*, 2021, 35(9): 7201.
- [12] LI M, ZHU D, HE X, *et al.* Experimental and kinetic modeling study on auto-ignition properties of ammonia/ethanol blends at intermediate temperatures and high pressures [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2023, 39(1): 511.
- [13] ZHIHUA W, XINLU H, YONG H, *et al.* Experimental and kinetic study on the laminar burning velocities of NH_3 mixing with CH_3OH and $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ in premixed flames [J]. *Combustion and Flame*, 2021, 229: 224.
- [14] GROSS C W, KONG S. Performance characteristics of a compression-ignition engine using direct-injection ammonia-DME mixtures [J]. *Fuel*, 2013, 103: 1069.
- [15] RYU K, ZACHARAKIS-JUTZ G E, KONG S. Performance characteristics of compression-ignition engine using high concentration of ammonia mixed with dimethyl ether [J]. *Applied Energy*, 2014, 113: 488.
- [16] LI T, ZHOU X, WANG N, *et al.* A comparison between low- and high-pressure injection dual-fuel modes of diesel-pilot-ignition ammonia combustion engines [J]. *Journal of the Energy Institute*, 2022, 102: 362.
- [17] OKAFOR E C, YAMASHITA H, HAYAKAWA A, *et al.*

- Flame stability and emissions characteristics of liquid ammonia spray co-fired with methane in a single stage swirl combustor [J]. *Fuel*, 2021, 287: 119433.
- [18] PELÉ R, MOUNAÏM-ROUSSELLE C, BRÉQUIGNY P, *et al.* First study on ammonia spray characteristics with a current GDI engine injector[J]. *Fuels*, 2021, 2(3): 253.
- [19] LI S, LI T, WANG N, *et al.* An investigation on near-field and far-field characteristics of superheated ammonia spray [J]. *Fuel*, 2022, 324: 124683.
- [20] COLSON S, YAMASHITA H, OKU K, *et al.* Study on the effect of injection temperature and nozzle geometry on the flashing transition of liquid ammonia spray [J]. *Fuel*, 2023, 348: 128612.
- [21] ZHANG Y, XU L, ZHU Y, *et al.* Numerical study on liquid ammonia direct injection spray characteristics under engine-relevant conditions[J]. *Applied Energy*, 2023, 334: 120680.
- [22] AN Z, XING J, KUROSE R. Numerical study on the phase change and spray characteristics of liquid ammonia flash spray [J]. *Fuel*, 2023, 345.
- [23] HAN Z Y, REITZ R D. Turbulence modeling of internal combustion engines using RNG κ - ϵ models [J]. *Combustion Science and Technology*, 1995, 106(4/5/6): 267.