DOI: 10.16236/j.cnki.nrjxb.202503025

不同环境氧体积分数下甲醇喷雾自着火特性数值模拟

张祥杰[1]，王忠俊[1]，张尊华[1,2]，韦　一[1]

（1. 武汉理工大学船海与能源动力工程学院，武汉 430070；2. 船舶运输控制系统国家工程研究中心，上海 200135）

摘要：基于计算流体动力学软件 CONVERGE，利用大涡模拟方法对环境温度为 1 200 K、环境压力为 7.77 MPa 条件下定容燃烧弹中甲醇喷雾自着火过程进行了数值模拟研究，重点解析环境氧体积分数（21%、15% 和 10%）对甲醇喷雾自着火特性的影响. 结果表明：环境氧体积分数由 21% 降至 15%，着火延迟时间（IDT）增加了 2.5%，环境氧体积分数由 15% 降至 10%，IDT 则增加了 8.1%. 在环境氧体积分数为 10% 时，甲醇燃烧过程生成微量 OH 并且始终分布于甲醇喷雾轮廓处. 从 CH_2O 时空分布特征来看，随着氧体积分数的降低，CH_2O 生成的温度区间范围变窄、当量比区间范围变宽，CH_2O 的空间分布范围增大且质量分数分布更加均匀. 由此可见，环境氧体积分数变化显著影响了甲醇喷雾着火特性，进而影响其关键自由基（CH_2O、OH）的生成及分布.

关键词：甲醇；喷雾；环境氧体积分数；自着火

中图分类号：TK464　　**文献标志码**：A　　**文章编号**：1000-0909（2025）03-0211-11

Numerical simulation of auto-ignition characteristics of methanol spray under different ambient oxygen volume fraction

Zhang Xiangjie[1]，Wang Zhongjun[1]，Zhang Zunhua[1,2]，Wei Yi[1]

（1. School of Naval Architecture，Ocean and Energy Power Engineering，Wuhan University of Technology，Wuhan 430070，China；2. National Engineering Research Center of Ship & Shipping Control System，Shanghai 200135，China）

Abstract：Based on the computational fluid dynamics software CONVERGE，a numerical simulation of the methanol spray auto-ignition process was carried out using the large eddy simulation method. The effect of ambient oxygen volume fraction on auto-ignition characteristics of the methanol spray was studied in a constant volume combustion bomb at an ambient temperature of 1 200 K and an ambient pressure of 7.77 MPa. The results show that when the ambient oxygen volume fraction decreases from 21% to 15%，the ignition delay time（IDT） increases by 2.5%. When the ambient oxygen volume fraction further decreases to 10%，the IDT increases by 8.1%. At 10% ambient oxygen volume fraction，a tiny amount of OH is generated during methanol combustion and always distributed in the periphery of methanol spray. From the perspective of the spatiotemporal distribution characteristics of CH_2O，as the oxygen volume fraction decreases，the temperature range of CH_2O generation narrows，the equivalence ratio range widens，and the spatial distribution range of CH_2O increases and the concentration distribution becomes more uniform. It can be seen that the change of ambient oxygen volume fraction significantly affects the ignition characteristics of methanol spray，and then affects the generation and distribution of its key radicals（CH_2O，OH）.

Keywords：methanol；spray；ambient oxygen volume fraction；auto-ignition

目前，航运业面临的能源短缺问题日益突出，燃用传统化石燃料所带来的碳排放量不断增加，发展低碳替代燃料刻不容缓[1]. 甲醇具有清洁燃烧、来源广泛和制备成本低等优点，在缸内直喷压燃式发动机中具有良好的应用发展前景[2-4]. 缸内直喷压燃模式具有燃料与空气混合时间短、混合与燃烧同时进行等特点[5]. 其中，燃料的雾化和着火对发动机的燃烧和排放等特性有重要影响[6]. 因此，有必要对甲醇喷雾自

收稿日期：2024-11-29；**修回日期**：2025-02-19.

基金项目：国家重点研发计划重点专项资助项目（2022YFB4301403）.

作者简介：张祥杰，硕士研究生，xiangjiezhang@whut.edu.cn.

通信作者：张尊华，博士，教授，zunhuazhang@whut.edu.cn.

着火特性开展研究.

近年来,已有部分学者开展了甲醇喷雾自着火特性研究[7-10]. 杨长林等[7]在定容弹中开展了不同温度条件下甲醇喷雾自着火试验表明,甲醇喷雾着火延迟时间随着环境温度的升高而降低,且放热率峰值也随着环境温度的升高而增加. Kumar 等[8]在快速压缩机上开展了甲醇自着火过程的可视化研究,并通过数值模拟仿真手段解析了甲醇燃烧的化学动力学过程表明,甲醇着火延迟时间随着环境氧体积分数的升高而降低. Ming 等[9]通过光学测量手段在定容燃烧弹中观测了甲醇喷雾火焰结构发现,喷油质量的减少会导致喷雾火焰面积的减少,从而降低喷雾火焰燃烧的不稳定性. 此外,美国 Sandia 实验室近期开展了甲醇喷雾自着火特性试验,测量了不同环境温度、不同氧体积分数下的着火延迟时间和火焰浮起长度,并将试验数据发表于 Engine Combustion Network(ECN)数据库中[10],为甲醇喷雾数值模拟工作提供了验证依据. Sandia 试验结果表明,环境温度和环境氧体积分数对甲醇喷雾自着火特性均存在显著影响.

由上述分析可知,研究人员已开展部分甲醇喷雾自着火特性试验,证实了环境氧体积分数对甲醇燃烧过程具有显著影响[10]. 此外,有研究[11]表明,环境氧体积分数是代表废气再循环(EGR)水平的一个直接相关变量,在降低污染物排放方面具有重要研究意义. 通过研究不同环境氧体积分数下喷雾着火微观动力学过程,可以深入了解氧体积分数的变化对甲醇喷雾着火中间产物及污染物生成、燃烧速率和燃烧机理的影响规律. 然而现有研究主要关注初始条件对着火延迟时间、火焰浮起长度和火焰面积的影响,关于不同环境氧体积分数下喷雾着火微观动力学过程的研究仍存在不足. 鉴于试验测量手段的局限性,无法有效获取喷雾着火微观动力学过程的相关信息. 因而有必要采用数值模拟手段开展更加深入、全面的研究. 因此,笔者基于 ECN 试验工况,在计算流体动力学(CFD)软件 CONVERGE 中利用大涡模拟方法(LES)探究不同环境氧体积分数(10%、15%和 21%)对甲醇喷雾着火延迟时间、火焰浮起长度、放热率、关键自由基分布和温度分布的影响. 旨在揭示不同环境氧体积分数下甲醇喷雾自着火规律,为纯甲醇在压燃式发动机中的应用提供参考.

1 计算方法

1.1 控制方程和湍流模型

数值模拟计算采用的基本控制方程包括连续性方程、动量方程、组分方程和能量方程[12].

选用 LES 方法描述定容燃烧弹内的湍流流动. 采用单方程大涡模拟中 Dynamic Structure 模型[13]表征亚网格应力张量. 亚网格的动能输运方程[14-15]为

$$\frac{\partial k}{\partial t}+\tilde{u}_i\frac{\partial k}{\partial x_i}=-\tau_{ij}\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}-\varepsilon+\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\nu_t}{\sigma_k}\cdot\frac{\partial k}{\partial x_i}\right) \tag{1}$$

$$k=\frac{1}{2}\left(\widetilde{u_iu_j}-\tilde{u}_i\tilde{u}_j\right) \tag{2}$$

$$\varepsilon=C_\varepsilon k^{1.5}/\Delta \tag{3}$$

式中:u_i、ν_t 分别为速度、湍流黏度;k 为亚网格动能;ε 为亚网格耗散率;C_ε 为模型常数,设置为 1;Δ为网格尺寸.

1.2 喷雾模型和燃烧模型

研究使用 Frössling 模型[16]模拟液滴的蒸发,选用无时间计数器(NTC)模型[17]模拟液滴间的碰撞. 选择 KH-RT 模型[18]模拟燃油液滴的破碎,该模型的作用机制为:在小于特征破碎长度 L_b 的液滴破碎仅由 KH 机理决定,在大于 L_b 部分的液滴破碎由 KH 机理和 RT 机理同时作用. 在 KH 破碎模型中,破碎液滴半径 r 和特征破碎时间 τ_{KH} 由式(5)和式(6)定义. 在 RT 破碎模型中,当 RT 波的传播时间超过 RT 破碎时间 τ_{RT},就会发生液滴破碎.

$$L_b=C_{bl}d_0\sqrt{\rho_l/\rho_g} \tag{4}$$

$$r=B_0\Lambda_{KH} \tag{5}$$

$$\tau_{KH}=3.726B_1\,r/\Lambda_{KH}\Omega_{KH} \tag{6}$$

$$\tau_{RT}=C_\tau/\Omega_{RT} \tag{7}$$

式中:ρ_l、ρ_g 分别为离散项(液)和连续项(气)密度;C_{bl} 为破碎长度常数;d_0 为喷孔直径;Λ_{KH}、Ω_{KH} 分别为波长和增长最快的 KH 表面波增长率;C_τ 为 RT 破碎时间常数,C_τ=1.0;Ω_{RT} 为增长率;参考 Salehi 等[19]的模型设置:KH 模型常数 B_0 为 0.61,B_1 为 5.

喷雾燃烧过程采用 SAGE 模型进行预测[20],该模型可耦合详细的化学反应动力学机理对化学反应过程进行求解,在喷雾燃烧领域具有广泛应用.

2 模型设置

2.1 工况设置

表 1 为模型验证所参考的试验工况. 工况 1 为 Wang 等[21]研究中的无反应甲醇喷雾试验工况,用来验证喷雾模型. 定容燃烧弹几何模型也参考 Wang 等的试验装置进行设计,如图 1 所示. 工况 2~4 为美国 Sandia 实验室 ECN 数据库中的甲醇高压喷雾着火试验工况[10],其试验工况按照发动机实际工作工况制定,用来验证燃烧模型. 开展不同氧体积分数下甲醇喷雾自着火数值模拟中的工况则参考 Sandia 实验

室试验工况设定，甲醇以 116.3 MPa 的高压直接喷射入定容燃烧弹中，随后经历雾化、蒸发、混合和着火等过程. 环境中的氧体积分数分别设置为 21%、15% 和 10%，其他环境气体组分体积分数按照 ECN 试验工况进行设置，其他参数保持一致，具体模拟工况设置如表 1 中工况 2、表 2 中工况 5 和工况 6 所示.

研究中网格无关性验证方法参见文献[6, 22-23]，首先选用 4、3、2 和 1 mm 基础网格尺寸进行基础网格无关性验证. 另外，无反应工况 1 下的气态贯穿距将作为验证喷雾网格无关性的代表性参数，气态贯穿距的定义为喷嘴轴线上甲醇气相质量分数达到 0.1% 的点到达喷嘴的轴线距离[10]. 基础网格无关性验证结果如图 2(a)所示，基础网格尺寸为 2 mm 与 1 mm 得出的喷雾气态贯穿距预测结果较为接近，综合考虑计算成本和计算精度等要求，选取 2 mm 的基础网格尺寸. 在此基础上，分别进行了自适应网格尺寸为 0.500、0.250、0.125 和 0.095 mm 的自适应网格(AMR)无关性验证见图 2(b)，从其模拟结果可以看出，自适应加密网格尺寸为 0.125 mm 和 0.095 mm 得出的喷雾气态贯穿距预测结果较为接近，综合考虑计算成本和计算精度，选取自适应网格尺寸为 0.125 mm.

在计算域内的网格划分如图 3 所示，采用 2 mm 基础网格大小，在较高速度梯度和温度梯度的区域采用自适应网格加密技术，自适应加密等级设置为 4 级，最小网格为 0.125 mm. 此外，有研究[24]表明，喷雾近喷嘴区域的发展会显著影响后续燃料的混合、破碎和蒸发等过程. 为了提高模拟计算的精度，笔者模拟研究在喷雾近喷嘴区域采用 4 级固定加密，近喷嘴区域的最小网格大小为 0.125 mm.

此外，该模拟方法基于压力隐式算子分割算法求解输运方程. 时间步长设置参考 Wei 等[23]的工作，其可变范围为 10^{-8} ~ 10^{-7} s，每个计算循环的时间步长基

表 1　模型验证所参考的试验工况

Tab.1　Experimental conditions for model validation

参数	工况 1[21]	工况 2[10]	工况 3[10]	工况 4[10]
喷孔直径/mm	0.120	0.186	0.186	0.186
背景温度/K	800	1 200	1 200	1 200
背景压力/MPa	3.00	7.77	7.91	7.89
喷射脉宽/ms	1.9	2.5	2.5	2.5
喷射压力/MPa	140.0	116.3	109.7	102.2
喷射质量/mg	7.99	7.25	7.03	6.81
环境气体体积分数/%	N_2:100	O_2:21 N_2:69.33 CO_2:6.11 H_2O:3.56	O_2:15 N_2:75.15 CO_2:6.22 H_2O:3.62	O_2:10 N_2:80.01 CO_2:6.32 H_2O:3.67

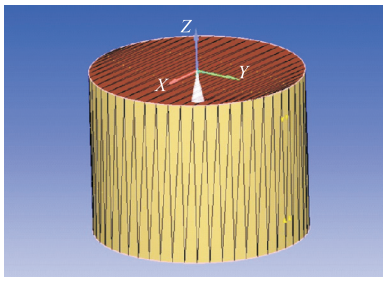


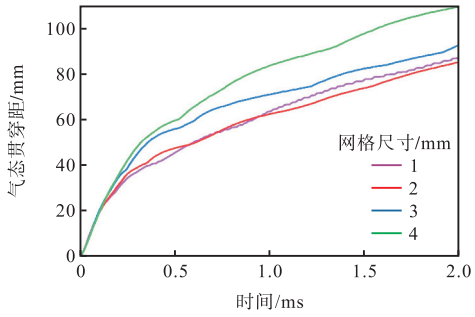
图 1　定容燃烧弹几何模型

Fig.1　Geometric model of constant volume combustion bomb

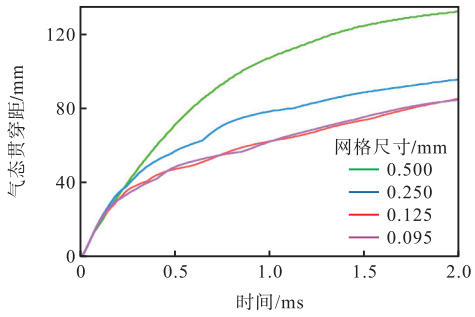
表 2　模拟工况的设定

Tab.2　Simulation of working conditions setting

参数	工况 5	工况 6
喷孔直径/mm	0.186	0.186
背景温度/K	1 200	1 200
背景压力/MPa	7.77	7.77
喷射脉宽/ms	2.5	2.5
喷射压力/MPa	116.3	116.3
喷射质量/mg	7.25	7.25
环境气体体积分数/%	O_2:15，N_2:75.15，CO_2:6.22，H_2O:3.62	O_2:10，N_2:80.01，CO_2:6.32，H_2O:3.67



(a) 基础网格



(b) 自适应网格

图 2　基于气态贯穿距的网格无关性验证

Fig.2　Verification of grid-independence based on vapor phase penetration

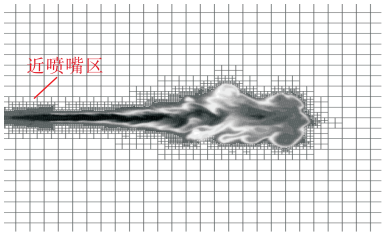


图 3　喷雾模型网格划分

Fig.3　Spray model meshing

于库朗数求得. 模型中最大对流库朗数、最大扩散库朗数和最大马赫库朗数分别设置为 1.0、2.0 和 50.0.

2.2 化学反应动力学机理筛选

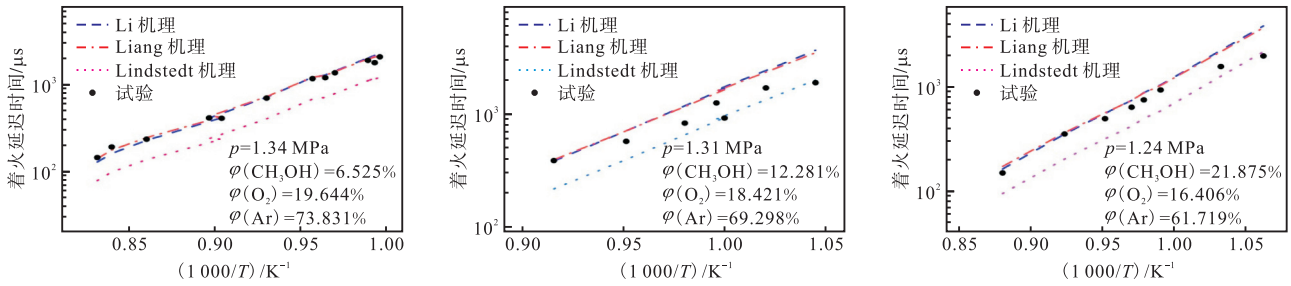
规模适度、预测准确的化学反应动力学机理对于喷雾火焰数值计算至关重要. 笔者首先选取 3 种被广泛应用的甲醇简化机理. 其中 Li 机理[25]是以分层的方式开发,更新了 Held 等[26]的详细 CH_3OH 氧化机理,包括 21 个组分、93 步反应. Liang 机理[27]是在 AramcoMech 3.0[28]详细的化学反应机理的基础上简化而来,包括 20 个组分、74 步反应. Lindstedt 简化机理[29]是在总结先前已有的甲醇氧化机理的基础上开发而来,包括 32 个组分、167 步反应. 随后,通过由激波管测量的甲醇着火延迟时间数据[30]来验证并筛选出较为合适的机理.

对于着火延迟时间的 0-D 计算,其定义为温度对时间的一阶导数最大值对应的时刻. 0-D 计算结果如图 4 所示,3 种化学反应机理中,Li 机理和 Liang 机理的预测结果与试验结果最为接近,而 Lindstedt 机理对于着火延迟时间的预测存在较大偏差.

此外,为了进一步筛选出适用于甲醇喷雾燃烧的化学反应动力学机理,通过 LES 湍流模型耦合 3 种化学反应动力学机理,模拟甲醇喷雾自着火过程. 着火延迟时间(IDT)和火焰浮起长度(FLOL)作为喷雾燃烧特性的代表性参数,其预测结果的准确性对喷雾火焰后续的发展有重要影响[31]. 为此,在工况 2 下进行了 3 种简化机理的 IDT 和 FLOL 模拟结果与试验值比较,以初步选出最优的机理. 参考 ECN 推荐的喷雾燃烧数值模拟 IDT 和 FLOL 定义方法[10],其方法是:(1)IDT 定义为 OH 质量分数首次达到稳定火焰形成后最大值 OH 质量分数的 2% 所对应的时间;(2)FLOL 定义为喷雾轴向 OH 质量分数达到稳定火焰形成后 OH 质量分数最大值的 2% 处与喷嘴之间长度.

3 种简化机理下 IDT 和 FLOL 预测结果与试验值[10]对比如图 5 所示. Li 机理相比于其他两种机理而言,对于甲醇喷雾燃烧特性预测最为准确.

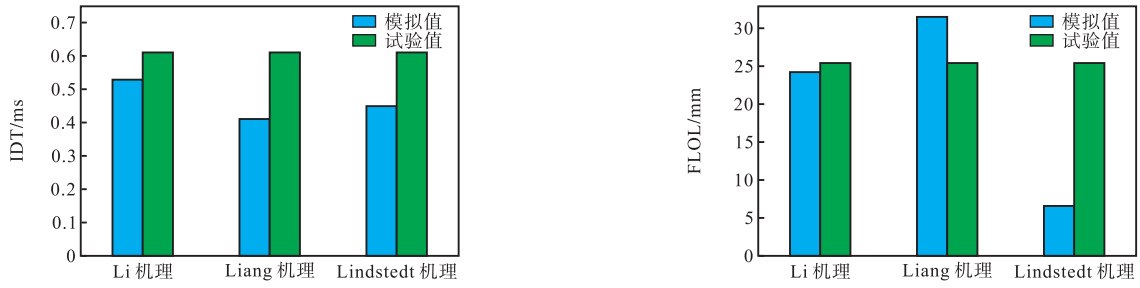
综上所述,初步选择 Li 机理作为模拟研究的化学反应动力学机理,随后在模型验证部分将对该机理在其他工况下的预测效果进行验证.



(a) $\phi=0.5$ (b) $\phi=1.0$ (c) $\phi=2.0$

图 4 3种机理对着火延迟时间预测对比

Fig.4 Comparison of ignition delay time predicted by three mechanisms



(a) IDT (b) FLOL

图 5 3种简化机理下 IDT 和 FLOL 模拟结果与试验值对比

Fig.5 Comparison of IDT and FLOL predicted by three reduced mechanisms and measured from experiments

2.3 模型验证和化学动力学分析后处理方法

图 6 为工况 1 甲醇喷雾气态贯穿距模拟与试验结果[21]比较,模拟值略大于试验值,这是由于试验中喷雾末端气态甲醇密度与定容燃烧弹内背景气体密度相近,试验测量的结果偏小. 整体而言,气态贯穿距的模拟与试验结果差异较小,误差控制在 10% 以内且其发展趋势具有良好的一致性,所以此喷雾模型可以较好地预测甲醇喷雾的宏观特性.

选用工况 2 ~ 4 下甲醇着火延迟时间和火焰浮起长度来验证燃烧模型. 着火延迟时间模拟结果[10]如

图 7(a)所示，工况 2 和工况 3 的着火延迟时间的预测偏小，在工况 4 下，对于着火延迟时间的预测则偏高. 其主要原因是：ECN 试验工况 2～4 中没有严格控制氧体积分数作为单一变量，且每组工况下的试验偏差较大，导致数值模拟与试验结果趋势存在一定差异，但整体上对于着火延迟时间的预测较为准确，预测结果在试验偏差范围之内. 火焰浮起长度的模拟与试验结果[10]如图 7(b)所示，火焰浮起长度的模拟与试验结果误差小于4.6%，呈现较好的一致性. 因此，该燃烧模型可以准确地预测甲醇喷雾的燃烧特性.

参见文献[32-33]的基于开源软件 Cantara 方法对三维 CFD 模拟结果进行瞬时反应路径分析. 该方法的步骤是：(1)三维 CFD 模拟结果、化学反应机理及热力学数据的导入；(2)计算各种组分的生成与消耗速率、每个反应的正向和逆向反应速率；(3)导出计算结果进行分析.

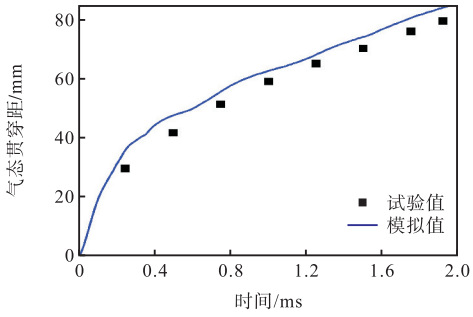


图 6　气态贯穿距模拟结果与试验结果对比

Fig.6　Comparison of vapor phase penetration simulation results with experimental results

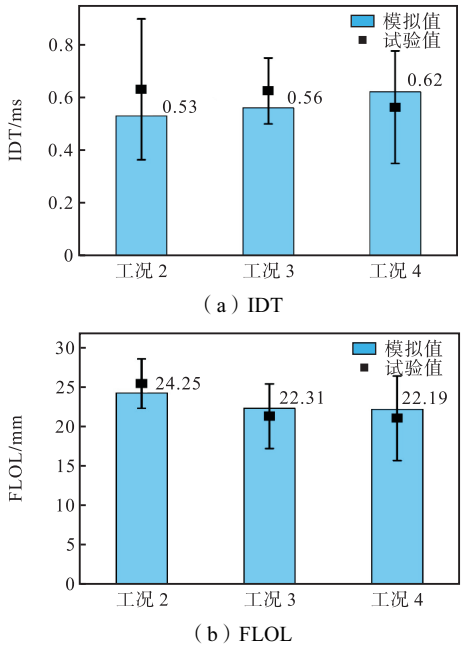


图 7　不同工况下 IDT 和 FLOL 模拟结果与试验结果对比

Fig.7　Comparison of IDT and FLOL simulation results and experimental results under different operating conditions

3　结果与分析

3.1　着火延迟时间和放热率

着火延迟时间作为喷雾燃烧特性的重要参数，影响着后续喷雾燃烧及污染物排放等特性[34]. 初始条件的变化又显著影响燃料的着火延迟时间. 图 8 为甲醇喷雾着火延迟时间随环境氧体积分数变化情况. 随着环境氧体积分数的降低，甲醇喷雾的着火延迟时间增加. 其原因是：环境氧体积分数为 15% 和 21% 时氧含量较为充足，雾化后的甲醇与氧气混合程度增强，有利于达到其所需的着火条件，较早出现着火；而环境氧体积分数为 10% 时，氧含量较为贫乏，甲醇-空气混合物达到着火条件的时刻出现显著的推迟，减缓了燃烧反应的发生. 另外，环境氧体积分数由 21% 降至 15% 后，相应的着火延迟时间增大了约 2.5%. 而随着氧体积分数的进一步减小，10% 氧体积分数下的着火延迟时间相较于 15% 工况则显著增加了约 8.1%. 因此，环境氧体积分数降低造成的着火延迟时间增大在低氧体积分数环境中更为显著. 而对比环境氧体积分数对柴油着火延迟时间的影响发现[35]，在环境氧体积分数为 10%～21% 时，柴油着火延迟时间改变较小.

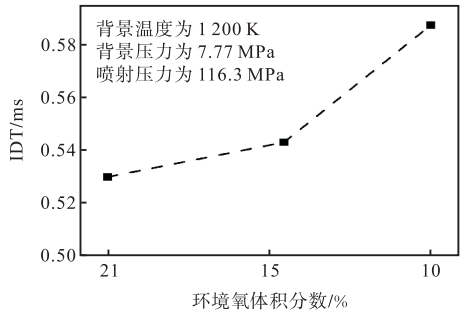


图 8　不同环境氧体积分数下甲醇喷雾着火延迟时间

Fig.8　Methanol spray ignition delay time under different ambient oxygen volume fraction

图 9 为不同环境氧体积分数下甲醇喷雾燃烧放热率随时间变化过程. 环境氧体积分数从 21% 降至 15% 后，放热率峰值降低约 55.56%，而 10% 环境氧体积分数与 15% 工况下的放热率峰值相比则降低了约 37.5%. 由此可见，放热率峰值随着氧体积分数的降低而减小，且随着氧体积分数的进一步降低受到的抑制作用逐渐减弱. 此外，随着氧体积分数的降低，放热率峰值对应的时刻越靠后. 放热率峰值对应的时刻与甲醇喷雾的着火延迟时间呈现相同的规律，即环境氧体积分数在 15% 和 21% 时，放热率峰值对应的时刻相差不大，而环境氧体积分数在 10% 时，放热率峰值对应时刻出现显著的滞后. 从放热量的角度观

察，甲醇燃烧的放热量随着环境氧体积分数的降低而减少. 出现上述现象是由于在较高环境氧体积分数下，甲醇较早达到燃烧条件，且在富氧条件下形成的可燃混合气较多，燃烧也较充分，从而导致了放热率峰值出现时刻较早，放热率峰值较高、放热量较大的现象. 此外，与柴油双峰放热率曲线相比，甲醇放热率第二个峰呈现缓而长的特点. 这是由于甲醇燃烧速度较慢，放热过程不集中，放热过程持续时间长，并且这一现象随着氧体积分数的降低而加剧.

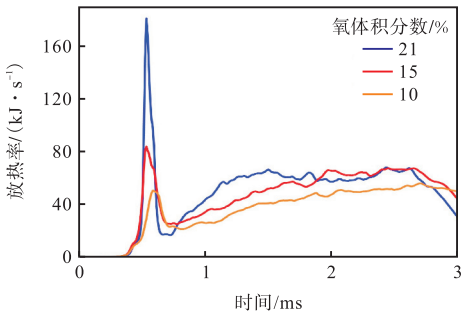


图 9　不同环境氧体积分数下甲醇喷雾燃烧放热率随时间变化过程

Fig.9　Variation of heat release rate of methanol spray combustion with time at different ambient oxygen volume fraction

3.2　甲醇喷雾燃烧场温度和 CH_2O 分布

图 10 为不同环境氧体积分数下甲醇喷雾燃烧场温度分布随时间变化过程. 由于燃烧前期温度分布变化较为复杂，因而温度分布图像提取时刻从甲醇喷射后 0.4 ms 开始，在 0.4 ~ 0.7 ms 和 1.0 ~ 2.5 ms 间提取的时间间隔分别设置为 0.1 ms 和 0.5 ms. 在不同环境氧体积分数条件下甲醇喷雾燃烧场温度分布呈现显著差异，即在环境氧体积分数分别为 21%、15% 和 10% 时，甲醇喷雾的高温区域分别达到 2 300 ~ 2 600、2 000 ~ 2 300 和 1 700 ~ 2 000 K. 另外，甲醇喷雾高温区域分布位置的发展趋势也呈现较大差异. 即环境氧体积分数为 15% 和 21% 时，在燃烧前期(0.4 ~ 1.0 ms)高温区域主要分布于喷雾轮廓处；而在燃烧后期(1.0 ~ 2.5 ms)高温区域主要分布于喷雾头部. 但环境氧体积分数为 10% 时，高温区域始终分布在喷雾轮廓处. 结合图 9 分析造成喷雾燃烧场温度分布呈现差异性的原因是：在较高环境氧体积分数条件下，甲醇喷雾燃烧更充分，放出的热量更多且放热率较大，从而导致不同环境氧体积分数条件下温度分布出现较大差异. 而在环境氧体积分数为 15% 和 21% 时，喷雾轮廓处最早出现高温燃烧则是由于该区域首先达到甲醇燃烧条件，随着燃烧反应的进行，高温区域逐渐向喷雾头部发展. 环境氧体积分数为 10% 时，高温区域始终分布于喷雾轮廓处则是由于环境氧体积分数过低，只有在喷雾轮廓处氧体积分数较高，燃烧相对更充分.

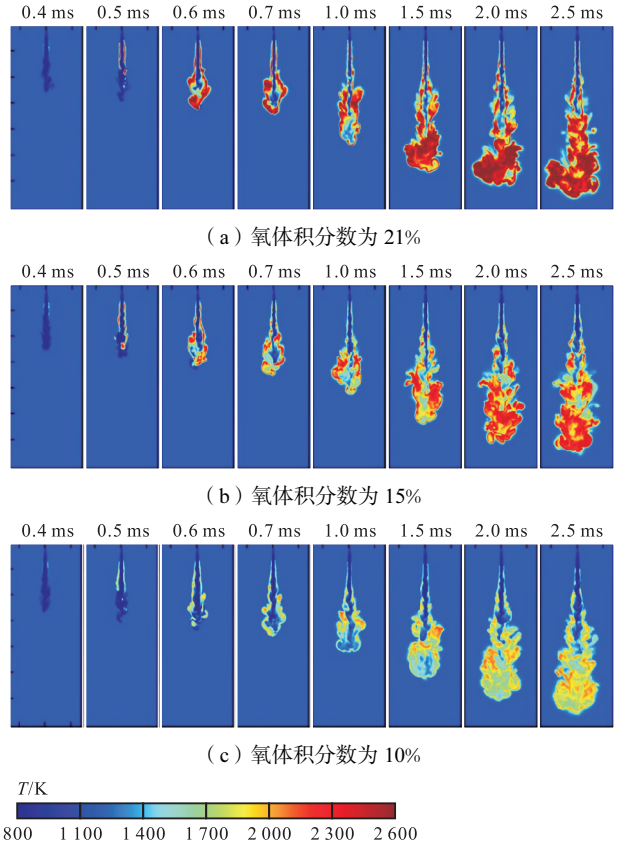


图 10　不同环境氧体积分数下甲醇喷雾燃烧场温度分布随时间变化过程

Fig.10　Variation of temperature distribution of methanol spray with time at different ambient oxygen volume fraction

有研究[36]表明，甲醇发动机中非常规排放物 CH_2O 显著多于传统柴油机. 因此，为降低非常规排放物 CH_2O 的生成，解析其时空分布特征受氧体积分数的影响规律十分必要. 图 11 为不同环境氧体积分数下喷雾燃烧场中 CH_2O 分布随时间的变化过程. 由于在甲醇开始喷射 0.25 ms 就已经出现了微量的 CH_2O，同时为了对比不同时刻下 CH_2O 分布与温度分布之间的关系，因而对于 CH_2O 分布图像的提取从 0.25 ms 时刻开始，在 0.40 ~ 0.70 ms 和 1.00 ~ 2.50 ms 之间的时间间隔分别设置为 0.10 ms 和 0.50 ms.

对比不同环境氧体积分数下 CH_2O 分布可以发现，3 种氧体积分数下 CH_2O 分布呈现较大差异. 在环境氧体积分数为 15% 和 21% 时，CH_2O 质量分数在 0.012 以上的高浓度区域分布较多，而在环境氧体积分数为 10% 时，图 11 中只呈现出微量的红色斑点，表明此工况下高浓度 CH_2O 分布较少. 随着环境氧体积分数的减少，相同时刻下 CH_2O 在喷雾径向上的分

布范围逐渐变宽，而在喷雾轴向方向分布范围基本不变. 这是由于在较低的环境氧体积分数下，靠近喷雾轮廓处氧含量相对较高，最终导致 CH_2O 的生成逐渐向外围轮廓处发展. 此外，还观察到 CH_2O 的分布位置对应与图 10 中喷雾液核温度较低的区域. 上述结果表明，随着环境氧体积分数的降低，CH_2O 的分布范围增大且分布更均匀.

图 12 为不同环境氧体积分数下 CH_2O 生成量随时间变化. CH_2O 在着火开始后快速生成，随后 CH_2O 的量开始减少，并在喷油持续期内保持相对稳定. CH_2O 量的升高表明，在计算域内 CH_2O 的生成速率大于消耗速率，随后大约在 0.6 ms 时刻，喷雾场中出现了大量高温反应，促进了 CH_2O 的消耗，CH_2O 量开始降低，最终 CH_2O 生成速率与消耗速率持平，CH_2O 生成量在较小的波动下保持稳定. 其中，在环境氧体积分数为 15% 和 21% 时，CH_2O 的量降低较多，并最终分别保持在 0.018 mg 和 0.012 mg 左右，而在环境氧体积分数为 10% 时，CH_2O 的量降低较少，并保持在 0.034 mg 左右. 与 21% 环境氧体积分数下 CH_2O 生成量相比，随着氧体积分数的降低，CH_2O 的量在保持稳定后分别增加了 50% 和 183.3%. 这是由于

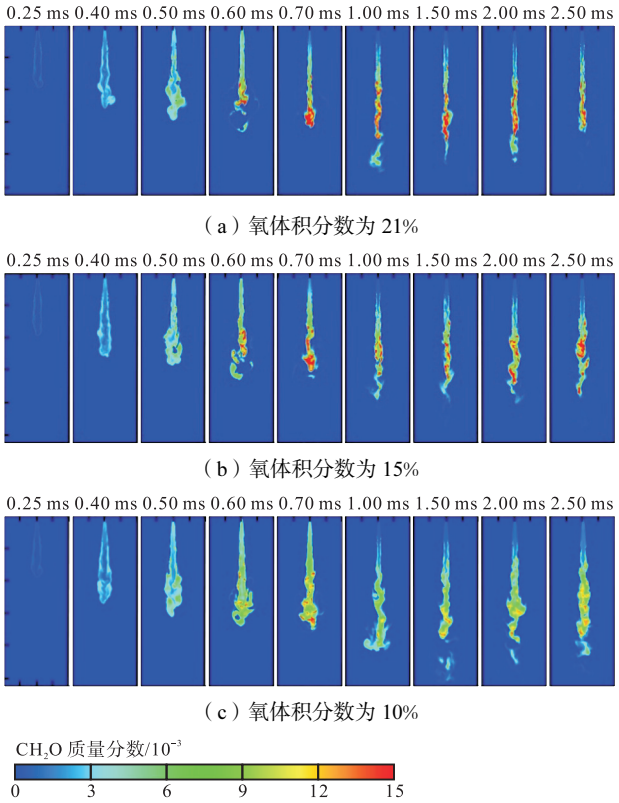


图 11　不同环境氧体积分数下甲醇喷雾燃烧场 CH_2O 质量分数分布随时间变化过程

Fig.11　Variation of distribution of CH_2O mass fraction of methanol spray with time under different ambient oxygen volume fraction

CH_2O 主要生成于低温工况范围内，结合图 10 甲醇喷雾温度场分布分析，喷雾燃烧场温度随着氧体积分数的减少而降低，从而 CH_2O 的生成量也逐渐增多. 以上研究结果表明，低环境氧体积分数对 CH_2O 的生成具有显著促进作用. 另外，环境氧体积分数对甲醇喷雾场中 CH_2O 的开始生成时刻几乎无影响. 但对比柴油 CH_2O 生成曲线图[35]发现，氧体积分数降低则导致柴油喷雾场中 CH_2O 开始生成时刻显著推迟.

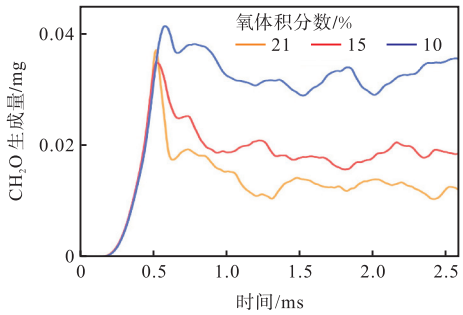


图 12　不同环境氧体积分数下 CH_2O 生成量随时间变化

Fig.12　Variation of CH_2O generation with time under different ambient oxygen volume fraction

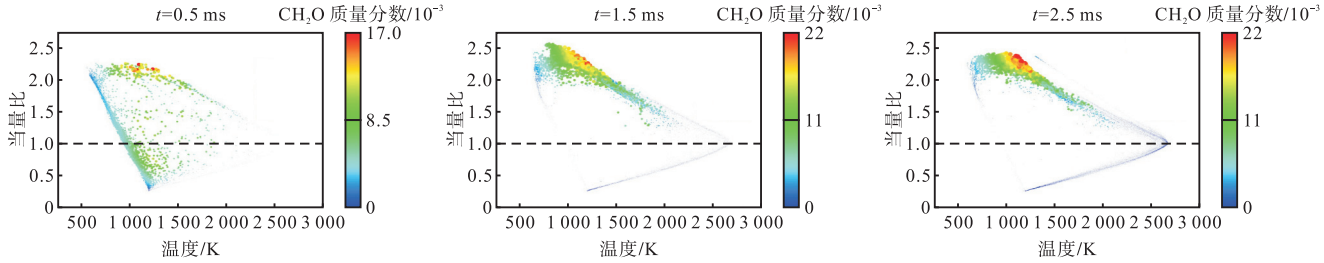
图 13 为不同氧体积分数下 CH_2O 质量分数的当量比与温度散点，散点图分别取着火开始时刻、喷油结束时刻及中间时刻，图中虚线代表理论化学计量比. CH_2O 主要生成于当量比为 2.25（当量比 ϕ 定义如式（8）所示）、温度区间为 1 000 ~ 1 500 K，且这一规律不会随着燃烧反应的进行而改变. 与之不同的是，柴油燃烧生成 CH_2O 的主要分布区域随着燃烧进行由稀燃料区（$\phi<1$）向富燃料区（$\phi>1$）转移[37]. 此外，随着氧体积分数降低，CH_2O 生成的温度区间范围变窄、当量比区间范围变宽，在燃料更富集（$\phi>2.5$）的区域开始出现 CH_2O 的分布.

$$\phi=\left(X_{\mathrm{M}}/X_{\mathrm{a}}\right)_{\mathrm{re}}/\left(X_{\mathrm{M}}/X_{\mathrm{a}}\right)_{\mathrm{st}} \tag{8}$$

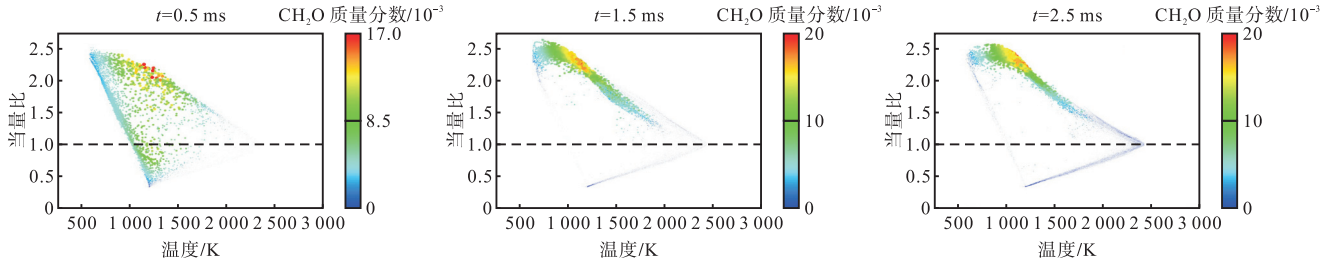
式中：X 为物质的摩尔分数；下标 M、a、re 和 st 分别为甲醇、空气、理论和实际.

为了从化学反应动力学的角度分析着火时刻下 CH_2O 的生成过程，有必要开展甲醇喷雾着火过程中 CH_2O 的生成路径研究. 首先基于开源软件 Cantera 计算了全局中各物质的净生成速率与各反应的净反应速率，随后得出各反应生成各物质的比例. 图 14 为不同环境氧体积分数下开始着火时刻（0.53、0.56 和 0.62 ms）影响 CH_2O 生成的关键反应. 筛选出了着火时刻生成 CH_2O 占比大于 5% 的反应，分别为反应 R59：$CH_2OH + M = CH_2O + H + M$、R64：$CH_2OH + O_2 = CH_2O + HO_2$ 和 R71：$CH_3O + M = CH_2O + H + M$. 反应 R64 生成 CH_2O 占比最大，随后依次是反应

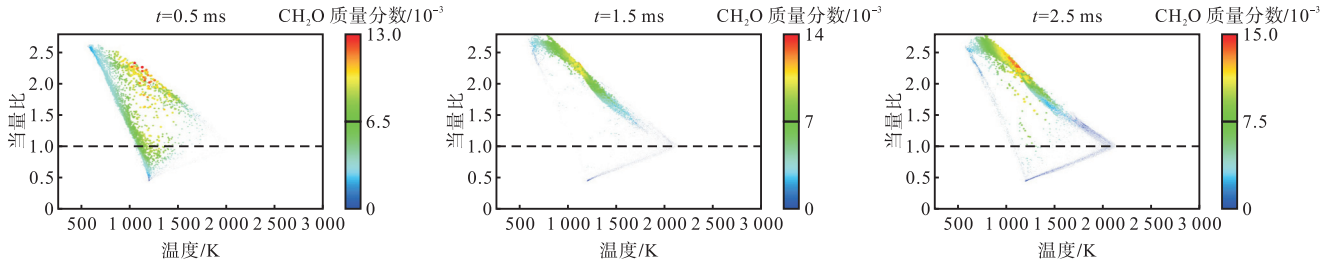
R71 和 R59. 另外，反应 R59 生成 CH_2O 的占比随着氧体积分数的降低而增多，反应 R64 生成 CH_2O 的占比则随着环境氧体积分数的降低而减少，反应 R71 受环境氧体积分数的影响较小. 由上述分析可知，随着氧体积分数的降低，生成 CH_2O 的路径占比逐渐从反应 R64 向反应 R59 转移.



（a）氧体积分数为 21%



（b）氧体积分数为 15%



（c）氧体积分数为 10%

图 13　不同环境氧体积分数下 CH_2O 质量分数的当量比与温度散点分布

Fig.13　Scatterplot of equivalence ratios versus temperature of CH_2O mass fraction under different ambient oxygen volume fraction

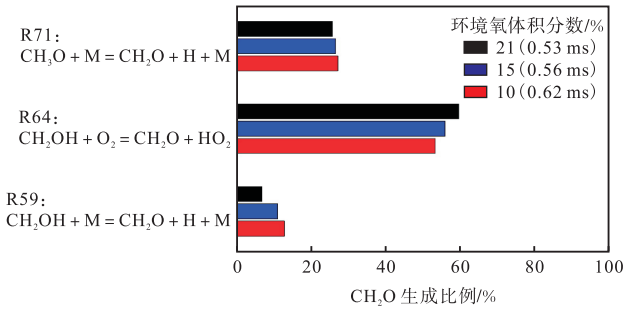


图 14　不同环境氧体积分数下开始着火时刻影响 CH_2O 生成的关键反应

Fig.14　Key reactions affecting CH_2O generation at ignition onset times under different ambient oxygen volume fraction

3.3　甲醇喷雾燃烧场 OH 分布

OH 作为喷雾燃烧反应过程中的关键自由基，对于碳烟的生成有重要的影响[38]. 此外，OH 的生成表征着高温着火过程[39]，有必要了解甲醇喷雾温度场与 OH 分布之间的关系. 图 15 为不同氧体积分数下甲醇喷雾 OH 质量分数分布随时间的变化过程. 由于在甲醇喷射 0.45 ms 才出现 OH，同时为了厘清 OH 质量分数分布与温度分布之间的关系，对于甲醇喷雾 OH 质量分数分布图像的提取从 0.45 ms 开始，0.50 ~ 0.70 ms 的时间间隔设为 0.10 ms，1.00 ~ 2.50 ms 的时间间隔设置为 0.50 ms. 在环境氧体积分数为 15% 和 21% 时，喷油开始后 0.45 ~ 1.50 ms OH 主要分布于喷雾轮廓处；在 1.50 ~ 2.50 ms OH 主要分布于喷雾头部区域. 而在环境氧体积分数为 10% 时，OH 始终分布于喷雾轮廓处，这与图 10 中高温区域的分布规律一致. 这是由于 OH 主要生成于高温燃烧反应区，因而只有在高温区域才有 OH 的大量分布. 此外，对比不同环境氧体积分数下 OH 分布可知，随着环境氧体积分数的降低，OH 生成的量也显著降低. 结合图 10 温度分布分析，这是由于甲醇喷雾在低环境氧体积分数下不能完全燃烧，放热不充分，燃烧温度整体较低.

图 16 为不同氧体积分数下 OH 质量分数的当量

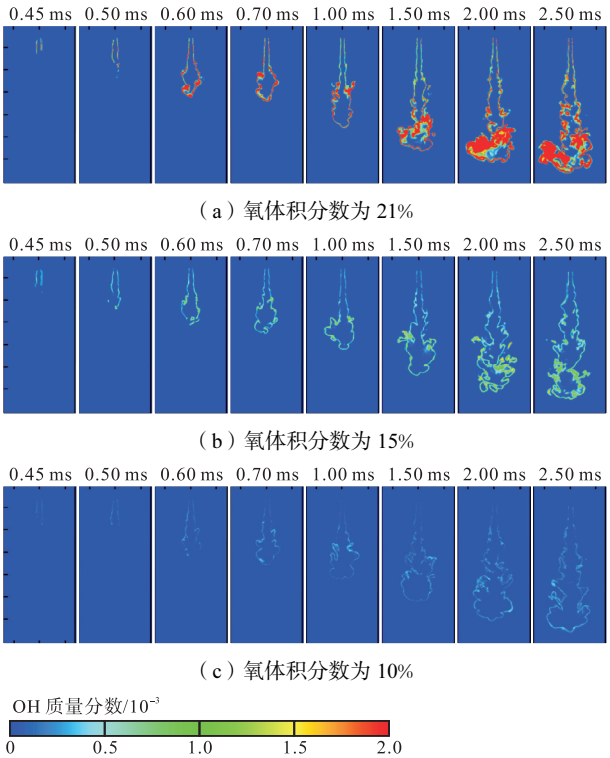


图 15　不同环境氧体积分数下甲醇喷雾燃烧场 OH 质量分数分布随时间变化过程

Fig.15　Variation of distribution of methanol spray OH mass fraction with time under different ambient oxygen volume fraction

比与温度散点分布，散点分别取着火开始时刻、喷油结束时刻和中间时刻. 在燃烧开始时刻附近（即 t = 0.5 ms），OH 在稀燃料区和富燃料区域都有大量分布，随着燃烧反应的进行，OH 的分布逐渐偏向于稀燃料区域，这与柴油燃烧过程中 OH 的发展趋势较为一致[37]. 另外，OH 生成量随着环境氧体积分数的降低而减少的现象，是由于低氧体积分数下燃烧温度较低，从而抑制了 OH 的生成.

图 17 为不同环境氧体积分数下开始着火时刻（0.53、0.56 和 0.62 ms）时影响 OH 生成的关键反应. 图中筛选出了着火时刻下生成 OH 占比大于 5% 的反应，分别为反应 R1：$H + O_2 = O + OH$、R4：$O + H_2O = OH + OH$、R15：$HO_2 + H = OH + OH$ 和 R20：$H_2O_2(+M) = OH + OH(+M)$. 着火时刻下主要有 4 个反应生成 OH，按照反应生成 OH 占比从高到低排列依次为反应 R20、R1、R15 和 R4. 其中，反应 R4 和 R1 生成 OH 占比随着环境氧体积分数的降低而减少，而反应 R15 和 R20 生成 OH 占比则随着环境氧体积分数的降低而增多. 由上述分析可知，环境氧体积分数变化不会导致 OH 生成路径发生变化，且随着环境氧体积分数的降低，生成 OH 的反应 R1 和 R4 逐渐减弱，反应 R15 和 R20 逐渐增强.

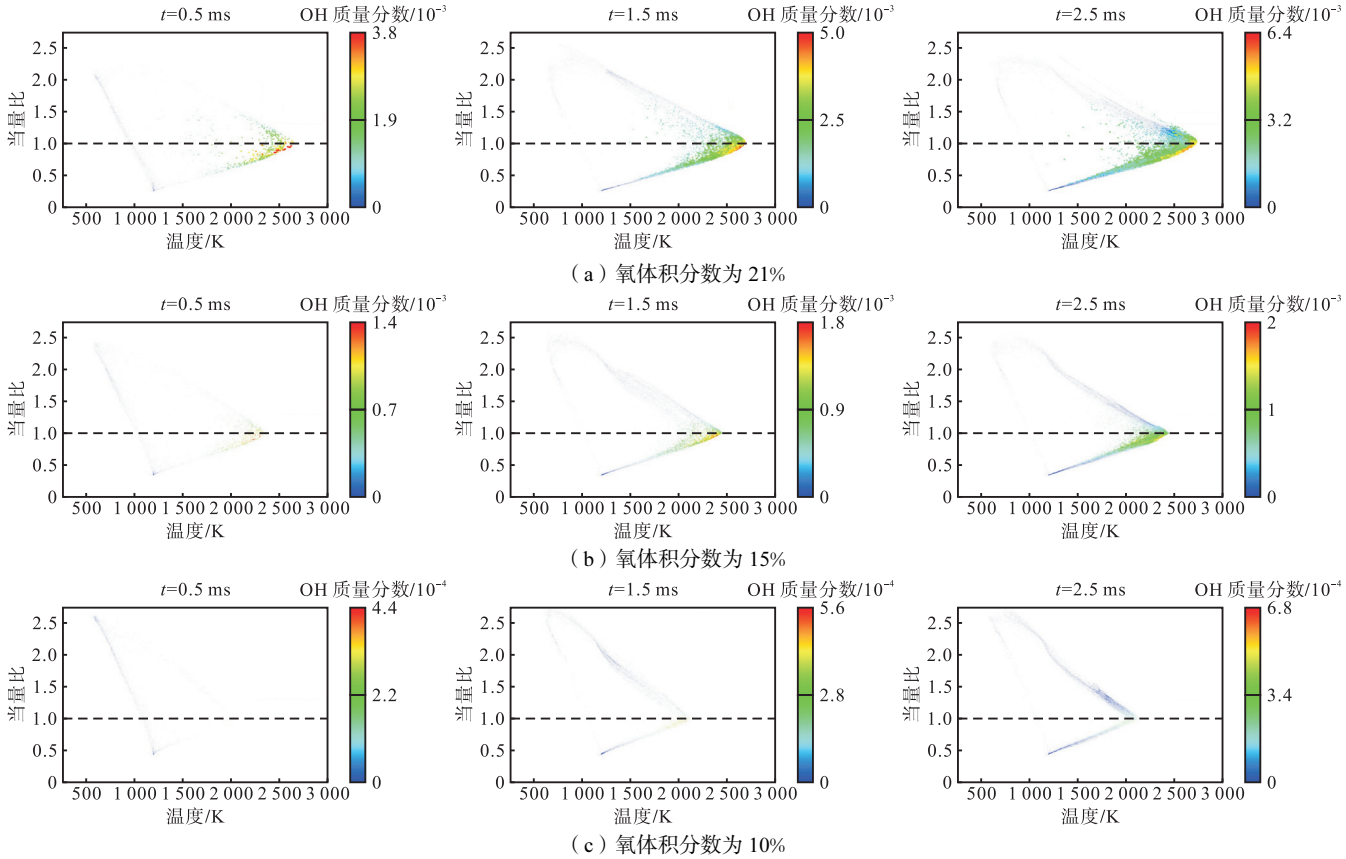


图 16　不同环境氧体积分数下 OH 质量分数的当量比与温度散点分布

Fig.16　Scatterplot of equivalence ratios versus temperature of OH mass fraction at different ambient oxygen volume fraction

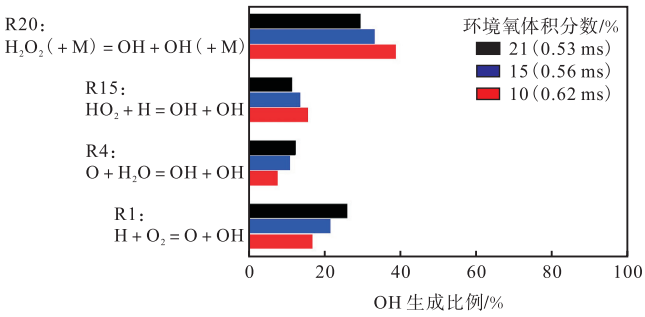


图 17　不同环境氧体积分数下开始着火时刻影响 OH 生成的关键反应

Fig.17　Key reactions affecting OH generation at the ignition time under different ambient oxygen volume fraction

4　结　论

基于 CFD 软件 CONVERGE，利用大涡模拟的方法对环境温度为 1 200 K、环境压力为 7.77 MPa 条件下定容燃烧弹中甲醇喷雾自着火过程开展了数值模拟，重点探究了不同环境氧体积分数(21%、15% 和 10%)对甲醇喷雾自着火特性(着火延迟时间、放热率、温度分布、CH_2O 分布和 OH 分布)的影响，并结合现有文献中柴油燃烧特性开展了对比研究. 具体结论如下：

(1) 环境氧体积分数降低，甲醇喷雾着火受到抑制，着火延迟时间增大；环境氧体积分数降低造成的着火延迟时间增大在低氧体积分数环境中更为显著.

(2) 随着环境氧体积分数的降低，放热率峰值显著降低，放热量减少；与柴油的双峰放热率曲线相比，甲醇放热率第二个峰呈现缓而长的特点.

(3) 在环境氧体积分数为 21%、15% 和 10% 时，甲醇喷雾燃烧温度分别达到 2 300 ~ 2 600、2 000 ~ 2 300 和 1 700 ~ 2 000 K；甲醇的高温区域分布也呈现较大差别，在环境氧体积分数为 21% 和 15% 时，高温区域是从喷雾轮廓处向喷雾头部发展，而环境氧体积分数为 10% 时，高温区域始终分布于喷雾轮廓处.

(4) 环境氧体积分数降低对 CH_2O 的生成具有显著的促进作用；对比柴油着火特性，环境氧体积分数对甲醇喷雾中 CH_2O 开始生成时刻几乎无影响，而环境氧体积分数降低则导致柴油喷雾中 CH_2O 开始生成时刻显著推迟；随着氧体积分数的降低，CH_2O 生成的温度区间范围变窄、当量比区间范围变宽.

(5) 环境氧体积分数为 15% 和 10% 时，甲醇燃烧过程生成微量 OH 并且始终分布于甲醇喷雾轮廓处.

参考文献：

[1] Deniz C，Zincir B. Environmental and economical assessment of alternative marine fuels[J]. Journal of Cleaner Production，2016，113：438-449.

[2] 陈超，王斌，姚安仁，等. 提高 DMCC 发动机高负荷下甲醇替代率试验[J]. 内燃机学报，2018，36(3)：200-207.

[3] 玄铁民，孙中成，米永刚，等. 甲醇/正辛醇/HCB 混合燃料喷雾燃烧特性[J]. 内燃机学报，2022，40(3)：216-224.

[4] Tian Z，Wang Y，Zhen X，et al. The effect of methanol production and application in internal combustion engines on emissions in the context of carbon neutrality：A review[J]. Fuel，2022，320：123902.

[5] 侯玉晶，林学东，李德刚. 高压喷射对直喷柴油机喷雾及燃烧特性影响规律的仿真研究[J]. 内燃机工程，2016，37(4)：1-7.

[6] 李徐程，张尊华，毛立通，等. 天然气/柴油双燃料发动机燃料喷射及着火特性[J]. 内燃机学报，2021，39(1)：34-43.

[7] 杨长林，舒国才，刘月辉，等. 高温条件下甲醇喷雾的燃烧特性[J]. 工程热物理学报，1996，17(3)：375-378.

[8] Kumar K，Sung C J. Autoignition of methanol：Experiments and computations[J]. International Journal of Chemical Kinetics，2011，43(4)：175-184.

[9] Ming Z，Liu B，Zhang X，et al. Study of methanol spray flame structure and combustion stability mechanisms by optical phenomenology and chemical kinetics[J]. Fuel Processing Technology，2023，252：107947.

[10] Sandia National Laboratories. Engine combustion network[EB/OL]. https：//ecn.sandia. gov/ecn-data-search/. Accessed Apr，2023.

[11] Zhang J，Jing W，Roberts W L，et al. Effects of ambient oxygen concentration on soot temperature and concentration for biodiesel and diesel spray combustion[J]. Journal of Energy Engineering，2015，141(2)：C4014002.

[12] Zhou L，Luo K，Qin W，et al. Large eddy simulation of spray and combustion characteristics with realistic chemistry and high-order numerical scheme under diesel engine-like conditions[J]. Energy Conversion & Management，2015，93(15)：377-387.

[13] Chumakov S G，Rutland C J. Dynamic structure subgrid-scale models for large eddy simulation[J]. Int J Numer Meth，Fluids，2005，47(8/9)：911-923.

[14] Yoshizawa A，Horiuti K. A statistically-derived subgrid-scale kinetic energy model for the large-eddy simulation

of turbulent flows[J]. Journal of the Physical Society of Japan，1985，54(8)：2834-2839.

[15] Menon S，Yeung P K，Kim W W. Effect of subgrid models on the computed interscale energy transfer in isotropic turbulence[J]. Computers & Fluids，1996，25(2)：165-180.

[16] Frössling N. Uber die verdunstung fallernder tropfen[J]. Gerlands Beitr Geophys，1938，52：170-216.

[17] Schmidt D P，Rutland C J. A new droplet collision algorithm[J]. Journal of Computational Physics，2000，164(1)：62-80.

[18] Reitz R. Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays[J]. Atomisation and Spray Technology，1987，3(4)：309-337.

[19] Salehi F，Ghiji M，Chen L. Large eddy simulation of high pressure spray with the focus on injection pressure[J]. International Journal of Heat & Fluid Flow，2020，82：108551.

[20] Senecal P K，Pomraning E，Richards K J，et al. Multidimensional modeling of direct-injection diesel spray liquid length and flame lift-off length using CFD and parallel detailed chemistry[J]. SAE Transactions，2003，112：1331-1351.

[21] Wang Y，Dong P，Long W，et al. Characteristics of evaporating spray for direct injection methanol engine：Comparison between methanol and diesel spray[J]. Processes，2022，10(6)：1132.

[22] 王解托，刘腾，董晶瑾，等. 燃气预喷对高压直喷天然气船机的影响研究[J]. 内燃机工程，2018，39(5)：73-79.

[23] Wei Y，Zhang Z，Li X，et al. The ignition characteristics of dual-fuel spray at different ambient methane concentrations under engine-like conditions[J]. Applied Thermal Engineering，2023，219：119634.

[24] Battistoni M，Som S，Powell C F. Highly resolved Eulerian simulations of fuel spray transients in single and multi-hole injectors：Nozzle flow and near-exit dynamics[J]. Fuel，2019，251：709-729.

[25] Li J，Zhao Z，Kazakov A，et al. A comprehensive kinetic mechanism for CO，CH_2O and CH_3OH combustion[J]. International Journal of Chemical Kinetics，2008，39(3)：109-136.

[26] Held T J，Dryer F L. A comprehensive mechanism for methanol oxidation[J]. International Journal of Chemical Kinetics，1998，30(11)：805-830.

[27] Liang J，Jia W，Sun Y. Skeletal chemical kinetic mechanism generation for methanol combustion and systematic analysis on the ignition characteristics[J]. Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering，2020，15(3)：1-12.

[28] Zhou C，Li Y，Burke U，et al. An experimental and chemical kinetic modeling study of 1，3-butadiene combustion：Ignition delay time and laminar flame speed measurements[J]. Combust Flame，2018，197：423-438.

[29] Lindstedt R P，Meyer M P. A dimensionally reduced reaction mechanism for methanol oxidation[J]. Proceedings of the Combustion Institute，2002，29(1)：1395-1402.

[30] Pinzón L T，Mathieu O，Mulvihill C R，et al. Ignition delay time and H_2O measurements during methanol oxidation behind reflected shock waves[J]. Combustion and Flame，2019，203：143-156.

[31] Liu F，Shi Z，Zhang Z，et al. Numerical study on critical ambient temperature for auto-ignition of the diesel spray under cold-start conditions[J]. Fuel，2019，258：116191.

[32] Li Y，Li H，Guo H，et al. A numerical study on the chemical kinetics process during auto-ignition of *n*-heptane in a direct injection compression ignition engine[J]. Applied Energy，2018，212：909-918.

[33] Tang Q，Liu X，Liu H，et al. Investigation on the dual-fuel active-thermal atmosphere combustion strategy based on optical diagnostics and numerical simulations[J]. Fuel，2020，276：118023.

[34] Jiun C O，Kar M P，Jens H W. Prediction method for ignition delay time of liquid spray combustion in constant volume chamber[J]. Fuel，2021，287：119539.

[35] 赵万辉，孙婷，卫海桥，等. 正十二烷喷雾火焰大涡模拟研究[J]. 内燃机学报，2023，41(3)：193-202.

[36] Wei H，Yao C，Pan W，et al. Experimental investigations of the effects of pilot injection on combustion and gaseous emission characteristics of diesel/methanol dual fuel engine[J]. Fuel，2017，188：427-441.

[37] Kahila H，Wehrfritz A，Kaario O，et al. Large-eddy simulation on the influence of injection pressure in reacting spray A[J]. Combustion and Flame，2018，191：142-159.

[38] Guo H，Anderson P M，Sunderland P B. Optimized rate expressions for soot oxidation by OH and O_2[J]. Fuel，2016，172：248-252.

[39] 王利民，韩义勇，刘宗宽，等. 柴油喷雾火焰低温燃烧大涡模拟研究[J]. 天津大学学报，2020，53(4)：349-357.