

超临界环境下燃料液滴蒸发的分子动力学模拟

肖国炜¹ 罗开红^{2,3} 马晓¹ 帅石金¹

(1. 清华大学, 汽车安全与节能国家重点实验室, 北京 100084;

2. 清华大学, 燃烧能源中心, 北京 100084;

3. Department of Mechanical Engineering, University College London, London WC1e 7JE, UK)

摘要 本文采用分子动力学模拟的方法, 研究了超临界压力下正十二烷液滴在氮气环境中的蒸发过程, 环境温度覆盖了从亚临界到超临界的范围。研究表明, 高压下的蒸发过程相对低压下的经典理论有明显偏离, 其蒸发速率不符合 D^2 定律的预测; 环境压力和温度均对蒸发速率有明显影响, 并且环境压力的提高还会使氮气溶解度和界面厚度显著增大。此外, 分析还证明超临界环境下气液界面可能会变为连续相, 从而使蒸发过程变成扩散主导的混合过程。

关键词 正十二烷; 液滴; 蒸发; 超临界; 分子动力学

中图分类号: 文献标识码: A 文章编号: 0253-231X(2017)12-0000-07

Molecular Dynamics Simulations of the Evaporation Process of a Fuel Droplet 原稿无误 Under Supercritical Environment

XIAO Guo-Wei¹ K. H. LUO^{2,3} MA Xiao¹ SHUAI Shi-Jin¹

(1. State Key Laboratory of Automotive Safety and Energy, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

2. Center for Combustion Energy, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

3. Department of Mechanical Engineering, University College London, London WC1e 7JE, UK)

Abstract The evaporation process of an n-dodecane droplet surrounded by nitrogen ambient under supercritical pressures and sub- to super-critical temperatures is studied by molecular dynamics simulation. Results show that the evaporation process under high pressures depart considerably from the theoretical prediction of D^2 -law. Both environmental pressure and temperature have significant influence on the evaporation rate, and elevated pressure can greatly increase the nitrogen solubility in the liquid phase and also the liquid-vapor interface thickness. It is found that under supercritical environmental conditions, the expanded interface may enter the continuum regime, leading to a diffusion dominated mixing process, rather than a conventional evaporation.

Key words n-dodecane; droplet; evaporation; supercritical; molecular dynamics

0 引言

近些年来, 随着油耗和排放法规的加严, 内燃机研究者引入了均质混合气压燃 (HCCI)、部分预混压燃 (PCCI) 和低温燃烧 (LTC) 等新燃烧概念, 通过采用高废气再循环 (EGR)、高增压和高喷射压力等技术来实现高效清洁燃烧, 使得内燃机的缸内压力不断升高。在采用多级增压的情况下, 柴油发动机在喷射时刻的缸内压力可能高达 6 MPa, 已经超出了大部分烃类燃料以及环境气体的临界压力 (如表 1 所示), 此外缸内温度也显著高于燃料和环境气体的临界温度。由此可见, 缸内压力达到甚至超过燃料和环境气体的临界点并非小概率事件, 此时, 燃料的喷射过程可以认为是两种超临界流体的混合过程, 从

而使内燃机在超临界条件下的喷雾混合过程成为研究者的一个不可回避的课题^[1]。

目前学术界对于“超临界喷雾”尚未有严格的定义, 如不做特别声明, 本文中均是指环境温度与压力均高于燃料临界值的喷雾。超临界流体有许多区别于液体和气体的性质, 从而使超临界喷雾展现出许多区别于传统喷雾的特点。传统的喷雾理论认为燃料从喷嘴出口进入气缸内以后, 先后经历了初次破碎和二次破碎过程, 从连续的液柱逐渐雾化成为微米级的液滴^[2], 气动剪切力和表面张力在这个过程中起到了主导作用。伴随着破碎的是液相燃料的蒸发和气相燃料与环境气体的扩散混合过程。而在超临

收稿日期: ; 修订日期:

基金项目: 国家自然科学基金委青年科学基金项目 (No.51506111)

作者简介: 肖国炜 (1992-), 男, 学士, 主要从事内燃机喷雾研究。通信作者: 帅石金, 教授, sjshuai@mail.tsinghua.edu.cn

博士生

界喷雾的情况下,液相燃料的表面在环境气体的加热下可能会转变为超临界流体,从而导致表面张力的消失,射流破碎过程将不复存在,取而代之的是由气动力和粘性力主导的湍流混合过程;此外,由于超临界流体不存在汽化的概念,超临界环境下蒸发过程亦可能不复存在^[3]。此前国外的一系列实验研究证实了以上观点^[4-8]。

单个液滴在的蒸发过程作为喷雾中重要的一个环节,在其中起到至关重要的作用。因此,对单个液滴在超临界条件下的演化过程的研究将有助于揭示超临界蒸发的内在机理和驱动因素,同时也可以为超临界喷雾的模型建立提供重要依据。此前, Dahms 等入^[9]通过理论计算的方法,判断了正十二烷液滴在氮气环境中发生超临界转变的条件,认为这种转变是气液界面增厚、表面张力减小以及环境分子平均自由程减小的共同结果。为了进一步揭示单个液滴在超临界环境下的演化机理,本研究采取分子动力学模拟的方法,采用正十二烷作为燃料,研究了其纳米尺度下的液滴在氮气环境中蒸发的动态过程。重点关注了超临界压力下的蒸发现象与常规亚临界蒸发现象的不同,以及环境条件对气液界面现象和蒸发过程的影响。

表 1 部分烃类和气体的临界性质

Table 1 Critical properties of some alkanes and gases

| | T_{Cr}/K | p_{cr}/MPa |
|------|------------|--------------|
| 正十二烷 | 658.1 | 1.82 |
| 异辛烷 | 543.9 | 2.57 |
| 正庚烷 | 540.1 | 2.74 |
| 氮气 | 126.2 | 3.40 |
| 氧气 | 154.6 | 5.04 |

1 分子模型与模拟细节

1.1 分子模型

本文采用的分子间作用势能函数基于 Sara 等^[10]开发的烷烃分子模型,同时适当修改以使其准确预测正十二烷的热力学性质。该模型将烷烃分子中的甲基(CH₃)和亚甲基(CH₂)视为一个整体,即一个“联合原子”(下文简称原子),从而将正十二烷分子视为一个由十二个联合原子组成的分子链,以达到在充分考虑分子链状结构的特性的同时还能简化计算的目的^[11]。模型势能包含了不成键原子的短程势能与成键原子间的键能。其中用于描述不成键原子之间的势能为莱纳德-琼斯(Lennard-Jones)势能:

$$U^{LJ}(r_{ij}) = 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] - 4\varepsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_c} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_c} \right)^6 \right] \quad (1)$$

其中, ε_{ij} 和 σ_{ij} 分别为势阱深度和尺度参数,对于正十二烷,取值为 $\varepsilon_{CH_3} = \varepsilon_{CH_2} = 0.4686 \text{ kJ/mol}$, 以及 $\sigma_{CH_3} = \sigma_{CH_2} = 0.401 \text{ nm}$ 。为了简化计算,将该势能在 $r_c = 1.0 \text{ nm}$ 处截断,处于截断距离以外的原子之间的作用力忽略不计。

用于描述相邻两个原子的键伸缩势能为:

$$U^s(r) = k_b (r - r_0)^2 \quad (2)$$

其中, r 是键长,平衡距离取 $r_0 = 0.153 \text{ nm}$,弹性系数 $k_b = 1.464 \times 10^5 \text{ kJ}/(\text{mol} \cdot \text{nm}^2)$ 。

用于描述间隔一个原子的两个原子之间的键弯曲势能:

$$U^b(\theta) = k_\theta (\theta - \theta_0)^2 \quad (3)$$

其中, θ 为三个原子形成的键夹角,平衡角度取 $\theta_0 = 109^\circ$,弹性系数取 $k_\theta = 251.04 \text{ kJ}/(\text{mol} \cdot \text{rad}^2)$ 。

用于描述间隔两个原子的两个原子之间的键扭转势能则采用了 OPLS(Optimized Potential for Liquid Simulation) 型势能函数:

$$U^t(\phi) = \frac{1}{2}k_1(1 + \cos\phi) + \frac{1}{2}k_2(1 - \cos 2\phi) + \frac{1}{2}k_3(1 + \cos 3\phi) + \frac{1}{2}k_4(1 - \cos 4\phi) \quad (4)$$

其中, ϕ 是四个原子形成的二面角, $k_1 = 5.904 \text{ kJ/mol}$, $k_2 = -1.134 \text{ kJ/mol}$, $k_3 = 13.159 \text{ kJ/mol}$, $k_4 = 0$ 。

氮分子的势能函数相对简单。每个分子被视为固定键长连接的两个原子,不成键原子间的相互作用为莱纳德-琼斯势能,势阱深度和尺寸参数分别为 $\varepsilon_N = 0.3026 \text{ kJ/mol}$ 和 $\sigma_N = 0.332 \text{ nm}$,截断距离 $r_c = 1.0 \text{ nm}$,键长固定为 0.1106 nm 。不同原子间的耦合参数根据 Lorentz-Berthelot 混合规则^[12]计算:

$$\varepsilon_{CH_3-N} = \varepsilon_{CH_2-N} = \sqrt{\varepsilon_{CH_3} \varepsilon_N} = 0.3766 \text{ kJ/mol}$$

$$\sigma_{CH_3-N} = \sigma_{CH_2-N} = \frac{\sigma_N + \sigma_{CH_3}}{2} = 0.367 \text{ nm}$$

1.2 模拟细节

系统的初始构型如图 1 所示,模拟盒子的尺寸为 $80 \text{ nm} \times 80 \text{ nm} \times 80 \text{ nm}$,三个方向上均采用周期性边界条件。正十二烷液滴与环境氮气事先分别在正则系综(NVT 系综)下达到各自温度的平衡状态,

之后将液滴放置在模拟盒子的中心, 同时删除中心区域的氮气分子, 以防止分子的重叠。

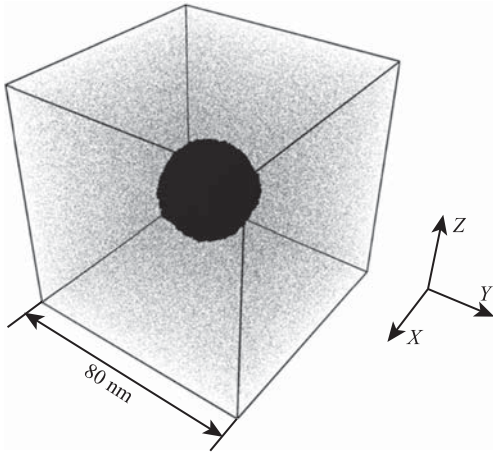


图 1 模拟的初始构型 ($p=4.4$ MPa, $T=600$ K)

Fig. 1 Initial configuration for the simulations

模拟的环境条件覆盖了从亚临界到超临界范围, 如表 2 所示。所有的算例中, 液滴的初始温度均为 363 K, 含有的正十二烷分子数均为 37359, 对应的液滴直径为 $d \approx 34$ nm; 环境压力的改变依靠不同的氮气分子数实现。Case 1 ~ Case 4 为低压算例, 环境压力约为 4 MPa; Case 5 ~ Case 8 处于中等压力条件, 环境压力约为 6.5 MPa; Case 9 ~ Case 12 为高压算例, 环境压力约为 85 bar。其中 Case 3 ($p=4.2$ MPa, $T=900$ K), Case 7 ($p=6.4$ MPa, $T=900$ K) 以及 Case 12 ($p=8.5$ MPa, $T=1100$ K) 分别代表内燃机在 a) 自然进气、中小负荷, b) 增压、中小负荷, c) 高增压、大负荷时的缸内条件。

表 2 模拟的环境条件

Table 2 Environmental Conditions for the current simulations

| 编号# | 环境压力/MPa | 环境温度/K | 正十二烷分子数 | 总原子数 |
|-----|----------|--------|---------|---------|
| 1 | 4.4 | 600 | 37359 | 911038 |
| 2 | 4.3 | 750 | 37359 | 820490 |
| 3 | 4.2 | 900 | 37359 | 759090 |
| 4 | 4.0 | 1100 | 37359 | 702882 |
| 5 | 6.6 | 600 | 37359 | 1138948 |
| 6 | 6.5 | 750 | 37359 | 1002254 |
| 7 | 6.4 | 900 | 37359 | 910744 |
| 8 | 6.3 | 1100 | 37359 | 827828 |
| 9 | 8.8 | 600 | 37359 | 1358484 |
| 10 | 8.7 | 750 | 37359 | 1180392 |
| 11 | 8.6 | 900 | 37359 | 1060474 |
| 12 | 8.5 | 1100 | 37359 | 951398 |

模拟中, 随着蒸发的进行, 体系的温度会逐渐降低。为了模拟燃料液滴在恒定环境温度下的蒸发,

将模拟盒子中直径为 $D = 79.8$ nm 以外的区域定义为加热区域, 在其中每间隔 10 时间步将温度调整至目标环境温度, 从而实现近似恒定的环境温度^[13]; 同时, 每间隔 10 时间步都将进入到加热区域的正十二烷分子删除, 从而消除逐渐累积的气相燃料对蒸发过程的影响, 模拟液滴在接近于无限大的空间里的蒸发过程^[14], 如图 2 所示。

模拟过程中对整个体系采用微正则系综 (NVE 系综)。模拟全部采用开源的分子动力学模拟代码 LAMMPS 进行, 采用 velocity-Verlet 算法求解粒子的运动方程, 时间步长为 2 fs。模拟的总时长取决于蒸发完全的时间, 对于不同的环境条件, 所需的总时长在 1000000 步到 2500000 步之间 (即 2.0~5.0 ns)。

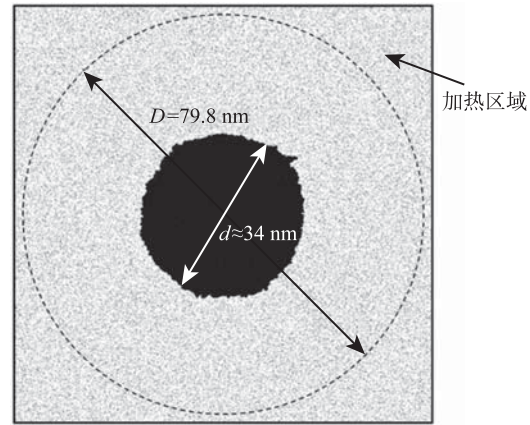


图 2 模拟盒子和加热区域示意图

Fig. 2 Schematic of the simulation box and heating area

2 结果与讨论

2.1 蒸发现象

传统低压下的蒸发理论认为, 随着环境气体对液滴的加热, 液滴的温度在经历了最初的上升过程后, 将会稳定在沸点值附近, 此后液滴从环境吸收的热量全部用于使液相蒸发为气相, 液滴进入相对稳定的状态。液相组分的逐渐减少体现在液滴的直径不断减小, 而液滴的内部温度分布均匀、密度保持不变。液滴直径的二次方将随时间线性减小, 即 $D^2 = D_0^2 - Kt$ 。此为描述低压下蒸发过程的 D^2 定律^[15]。

而在超临界环境下, 上述理论的诸多假设将不再成立。高压下环境气体向液滴内部的渗透溶解将不可忽略, 从而使液相的热力学性质发生改变; 进入超临界状态的流体将不再有表面张力和汽化潜热, 使得液滴在蒸发过程中往往不能保持球形, 清晰可辨的气液界面也将不再存在。图 3 展示了 Case 1

($p=4.4$ MPa, $T=600$ K), Case 7 ($p=6.4$ MPa, $T=900$ K) 以及 Case 12 ($p=8.5$ MPa, $T=1100$ K) 的蒸发过程。从图中可以看出, 在高温高压的环境下, 除了蒸发速率更快以外, 气液界面可辨识的程度也在下降。

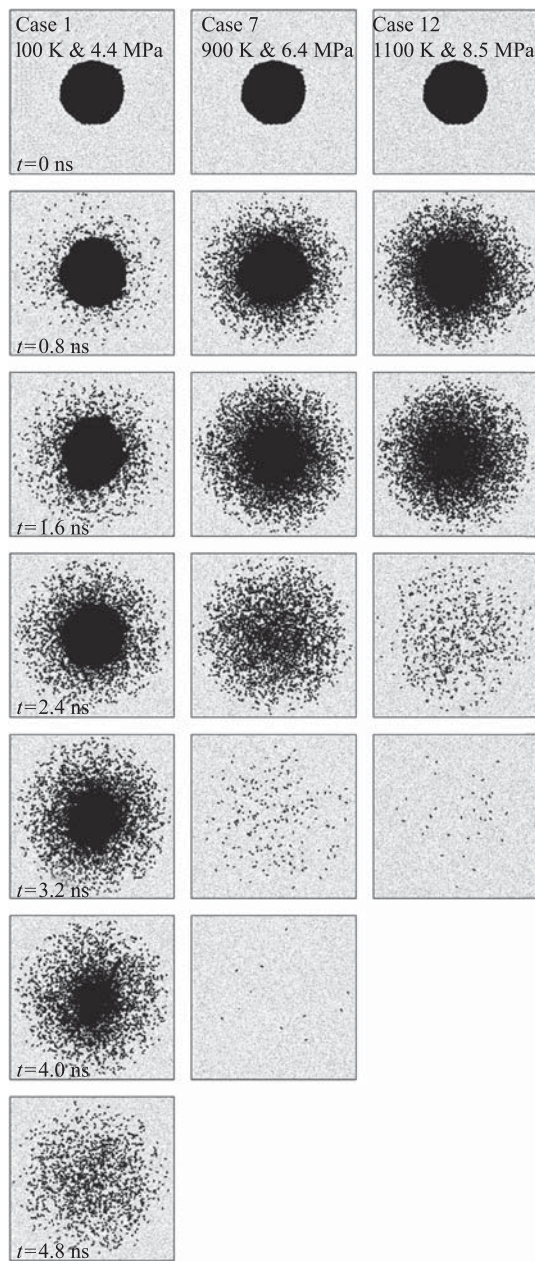


图3 正十二烷液滴的蒸发过程

Fig. 3 Snapshots of the evaporation process of the n-dodecane droplet

2.1.1 蒸发速率

在液滴蒸发的研究中, 一般采用液滴直径随时间的变化来表征蒸发速率。但是在分子动力学模拟中, 尤其是在高环境压力的条件下, 液滴往往不会时刻保持球形, 此外理想的气液界面并不存在, 取

而代之的是一个密度和组分浓度连续变化的过渡区域^[16,17]。这些因素导致在分子动力学模拟中, 液滴的直径难以确定。这里选择采用液滴所含有的分子数来表征蒸发过程, 如图5所示。从图中可以看出, 压力的增大会使蒸发加快, 但是在压力很高的时候这一趋势变得很不明显, 在环境压力为6 MPa和8 MPa的条件下, 蒸发速率几乎没有变化, 环境温度的提高同样会使蒸发加快。这一点与李云清等人的理论研究一致^[18,19]。

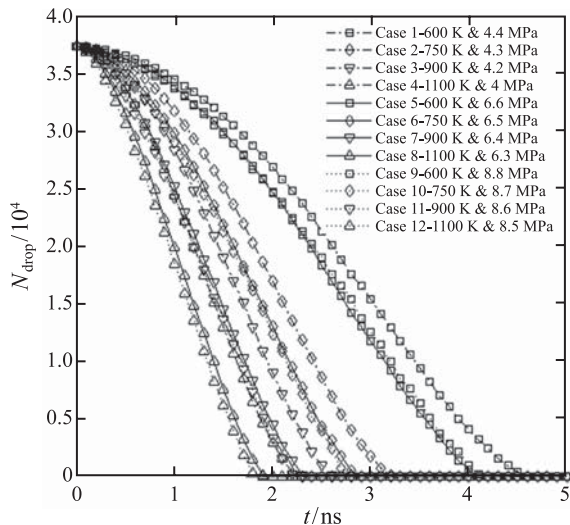


图4 液滴所含分子数的变化

Fig. 4 Time evolution of the number of remaining molecules in liquid phase

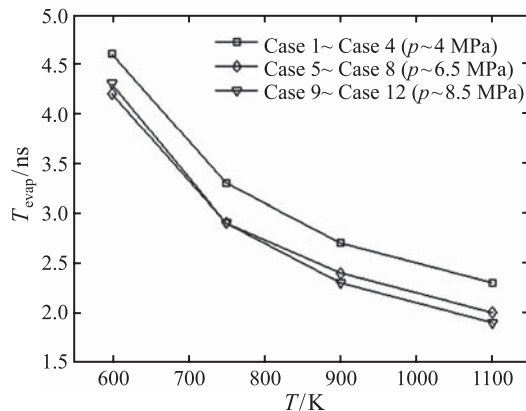


图5 液滴蒸发时间随温度和压力的变化规律

Fig. 5 Droplet life time as functions of environmental pressure and temperature

按照 D^2 定律的描述, 在低压环境下, 液滴的直径的平方随着时间的减小是线性的。根据该定律的假设条件, 液滴在蒸发过程中温度均匀一致且为液滴沸点, 因而密度也不随时间变化, 从而可以得到液

滴所含有的分子数的 $2/3$ 次方随时间线性变化的推论, 即 $(N_{\text{drop}}^{2/3} - N_{\text{cr}}^{2/3}) \propto -t$ 。但是在图 6 所示的 $N_{\text{drop}}^{2/3}$ 随时间的变化中, 直至蒸发结束都无法观察到这一趋势, 说明经典蒸发理论在模拟的条件下并不适用。

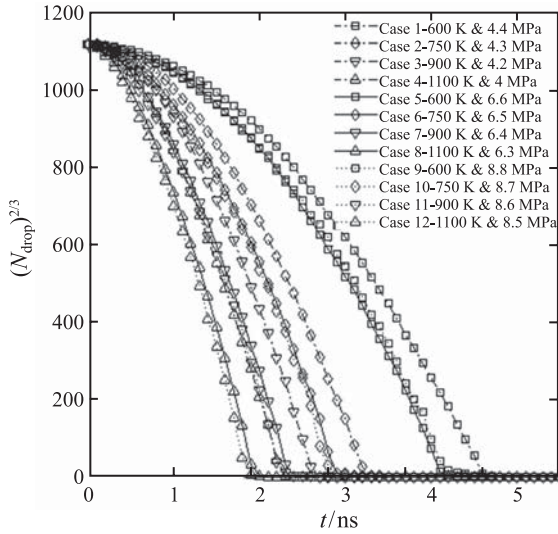


图 6 $N_{\text{drop}}^{2/3}$ 随时间的变化
Fig. 6 Time evolution of $N_{\text{drop}}^{2/3}$

2.1.2 液滴温度变化

蒸发进行过程中, 伴随着气体对液滴的加热, 液滴的温度将会逐渐升高。传统低压下的蒸发理论认为, 液滴温度升高到接近沸点之后将不再继续升高, 液滴进入准稳态, 此时从环境气体吸收的热量将全部用于使液体蒸发为气体。在研究残余液滴温度变化的时候, 本研究采用的是环境压力对应的混合物临界温度来将液滴温度进行归一化处理。归一化的液滴温度变化如图 7 所示。

从图中可以看出, 即便在相对较低的环境压力下 ($p \approx 4$ MPa), 液滴的温度仍随着蒸发进行而持续上升, 因此可以认为准稳态假设在本研究的超临界压力环境下并不成立。考虑到 4 MPa 的压力仍然两倍于正十二烷的临界压力, 因此不能下结论说在超临界压力环境下该假设一定不成立。使得准稳态假设成立的环境压力下限值还需进一步研究才能给出。

另外值得一提的是, 对于相对较低压力 ($p \approx 4$ MPa) 和较低温度 ($T=600$ K) 的算例, 直至蒸发完全, 液滴的温度仍然没有达到临界值 (即 $T/T_{\text{cr}} < 1$)。而对于较高温度和压力的条件, 在蒸发完全之前或之时, 残余液滴的温度已经达到了临界值 (即 $T/T_{\text{cr}} \geq 1$)。严格来说, 此时发生的过程已经不能称为蒸发, 而是两种超临界流体的混合扩散。

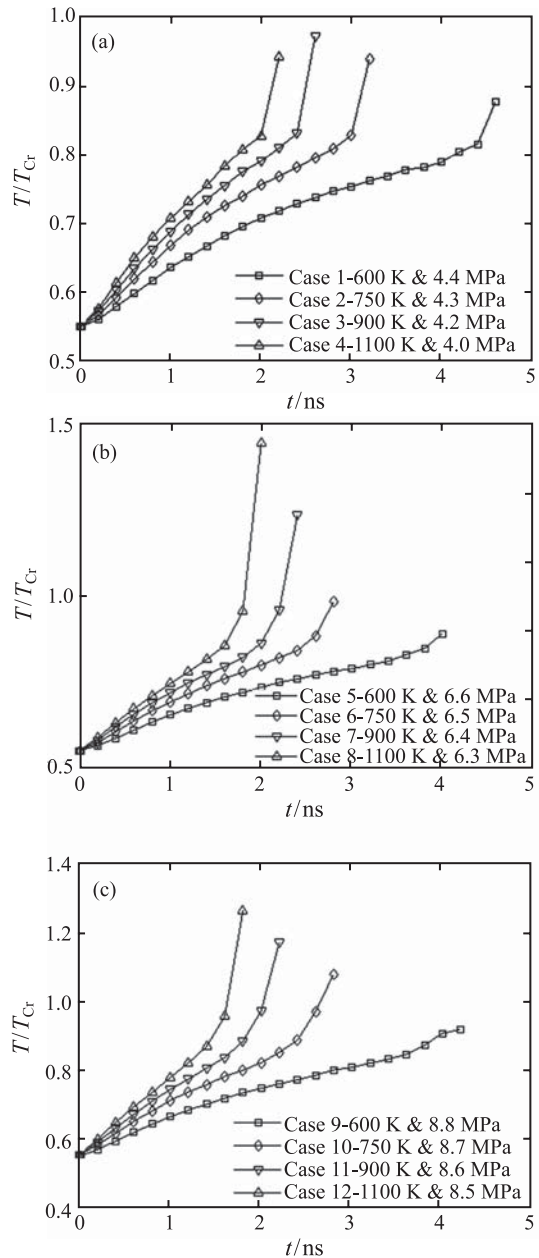


图 7 归一化的液滴温度变化
Fig. 7 Time evolution of the reduced droplet temperature

2.1.3 溶解度变化

在高压下, 气相组分在燃料液滴之中的溶解同样不可忽略。图 8 给出了残余液滴中氮气的摩尔分数随时间的变化曲线。从图中可以看出, 对所有的算例, 都有相当数量的氮气分子渗透到液滴中去。结果表明, 传统蒸发理论对于气体溶解度为零的假设在高环境压力下不成立, 这也是模拟结果与 D^2 定律出现偏差的原因。此外, 在蒸发的最初阶段, 相同环境温度下的曲线基本重合, 此时氮气的溶解量仅与压力有关, 直到蒸发接近完成时温度对溶解量的影响才显现出来。

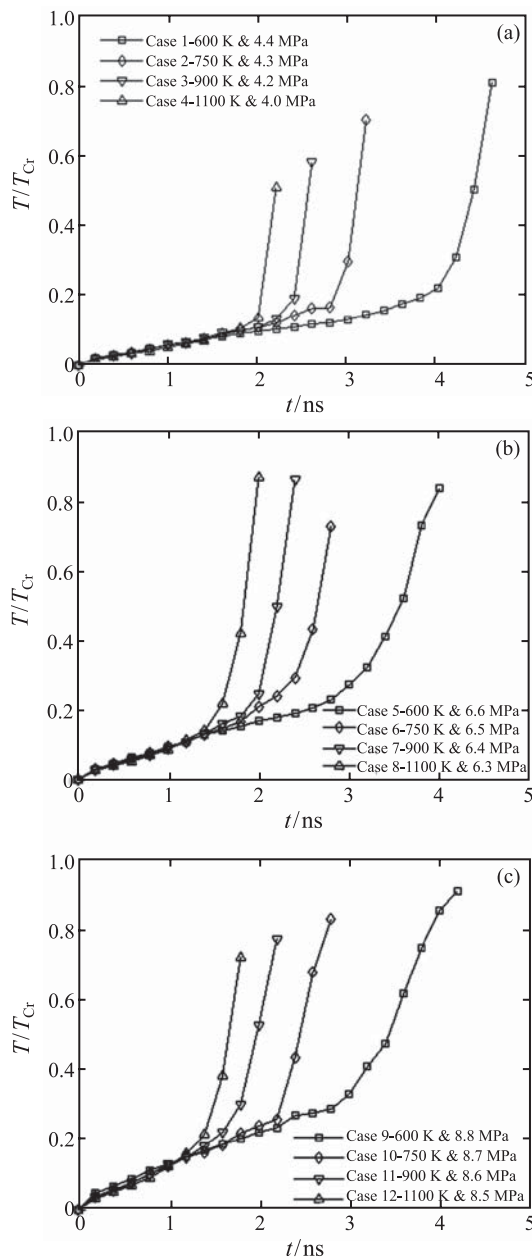


图 8 液滴中氮气的摩尔分数随时间的变化

Fig. 8 Time evolution of the mole fraction of nitrogen in the liquid phase

2.2 界面现象

超临界蒸发过程区别于传统蒸发过程的一个显著特征是气液界面性质的变化。超临界蒸发过程中表面张力逐渐消失，伴随着的是界面厚度变大，蒸发过程逐渐变为以扩散为主的混合过程。图 9 是蒸发过程中气液界面厚度 l 随时间的变化曲线。这里界面厚度定义为密度曲线上 $\rho_{0.9}$ 与 $\rho_{0.1}$ 两个位置之间的距离。从图中可以看出，温度和压力的升高均会使界面厚度变大。并且在蒸发临近结束时刻，界面厚度会出现突增，这也是区别于传统亚临界蒸发的一个特征。

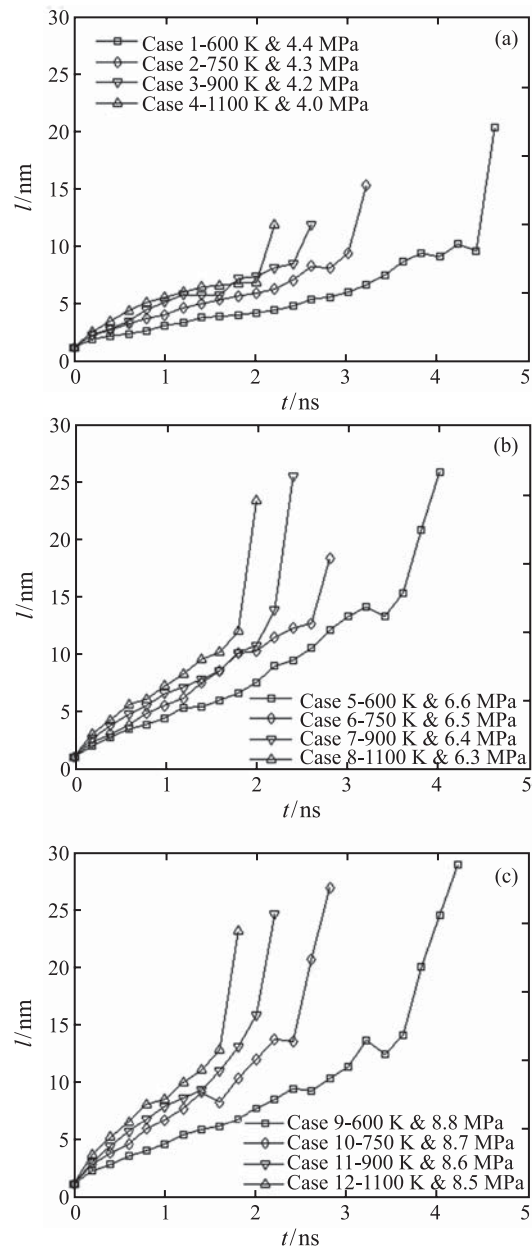


图 9 蒸发过程中气液界面厚度随时间的变化

Fig. 9 Time evolution of the interface thickness

为了检验蒸发过程中界面厚度的增大是否足以使扩散成为主导过程，我们计算了界面的 Kn 数。这里 Kn 数定义为 $Kn = \frac{\lambda}{l}$ ，其中 l 为界面厚度， λ 为环境气体的分子平均自由程。从图 10 中可以看出，在相对较高压力的算例 ($p \approx 6.5$ MPa 以及 $p \approx 8.5$ MPa) 中 Kn 数明显小于低压算例 ($p \approx 4$ MPa)，且在蒸发的末尾阶段已经进入 $Kn < 1$ 范围，证明此时气液界面将不再是传统认为的非连续分割面，而是一段密度、组分浓度、温度等性质连续变化的混合层。相应的，由浓度梯度和温度梯度所驱动的扩散也有可能发生并成为混合过程的主导因素。

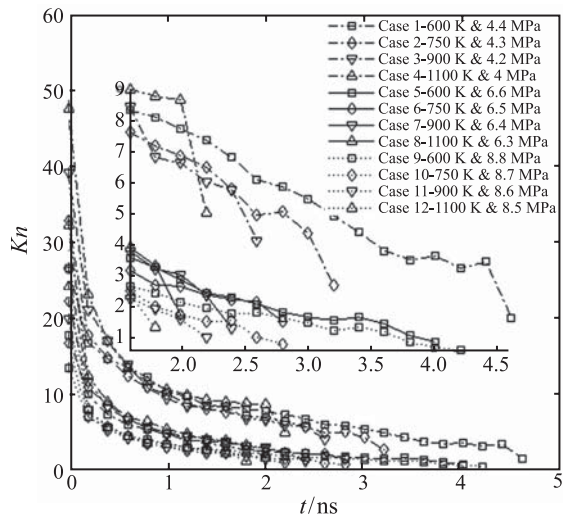
图 10 气液界面 Kn 数的变化

Fig. 10 Time evolution of the Knudsen number of the interface

3 结 论

本文通过分子动力学模拟,研究了超临界压力下正十二烷液滴在氮气环境中的蒸发过程,环境条件的设置参考了内燃机喷油时刻的缸内条件,并且环境温度覆盖了从亚临界到超临界范围。重点探讨了高压下的蒸发过程与传统低压下的蒸发理论的区别,以及环境条件对蒸发过程的影响,得到以下结论:

1) 高环境压力下,蒸发速率不符合常规蒸发理论的 D^2 定律的预测。主要原因在于高压下液滴温度持续上升,且环境气体的溶解不可忽略,从而导致 D^2 定律的诸多假设不再成立。

2) 环境压力和温度的提高都会使蒸发进行更快,但是压力升高到一定程度之后,将不再对蒸发速率有显著影响;此外,环境温度还对氮气溶解度和气液界面厚度的变化有较大的影响。

3) 在较高压力下,临近蒸发完成的时刻界面的增厚会使其进入连续相,从而使蒸发过程转变为由界面内部扩散主导的混合过程成为可能。

参 考 文 献

- [1] 解茂昭. 内燃机跨临界/超临界燃料喷雾混合过程的机理与模型 [J]. 燃烧科学与技术, 2014, 20(1): 1-9
XIE Maozhao. Mechanism and Modeling of Transcritical/Supercritical Fuel Spray and Mixture Formation in Internal Combustion Engines [J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2014, 20(1): 1-9
- [2] Reitz R D, Bracco F B. On the Dependence of Spray Angle and Other Spray Parameters on Nozzle Design and Operating Conditions [R]. SAE Technical Paper, 1979
- [3] Chehroudi B, Talley D, Coy E. Visual Characteristics and Initial Growth Rates of Round Cryogenic Jets at Subcritical and Supercritical Pressures [J]. Physics of Fluids (1994-present), 2002, 14(2): 850-861
- [4] OSCHWALD M, Smith J J, Branam R, et al. Injection of Fluids Into Supercritical Environments [J]. Combustion Science and Technology, 2006, 178(1-3): 49-100
- [5] Chehroudi B, Talley D G. The Fractal Geometry of Round Turbulent Cryogenic Nitrogen Jets at Subcritical and Supercritical Pressures [J]. Atomization and Sprays, 2004, 14(1): 81-91
- [6] Chehroudi B. Recent Experimental Efforts on High-pressure Supercritical Injection for Liquid Rockets and Their Implications [J]. International Journal of Aerospace Engineering, 2012, 1(2012): 1-31
- [7] Oswald M. Spreading Angle and Centerline Variation of Density of Supercritical Nitrogen Jets [J]. Atomization and Sprays, 2002, 12(1-3): 91-106
- [8] Dahms R N, Manin J, Pickett L M, et al. Understanding High-pressure Gas-liquid Interface Phenomena in Diesel Engines [J]. Proceedings of the Combustion Institute, 2013, 34(1): 1667-1675
- [9] Dahms R N, Oefelein J C. On the Transition Between Two-phase and Single-phase Interface Dynamics in Multicomponent Fluids at Supercritical Pressures [J]. Physics of Fluids (1994-present), 2013, 25(9): 092103
- [10] Sanmartín S, Ramos J, Vega J F, et al. Strong Influence of Branching on the Early Stage of Nucleation and Crystal Formation of Fast Cooled Ultralong N-alkanes as Revealed by Computer Simulation [J]. European Polymer Journal, 2014, 50: 190-199
- [11] Simon J M, Kjelstrup S, Bedeaux D, et al. Thermal Flux Through a Surface of N-octane. A Non-equilibrium Molecular Dynamics Study [J]. The Journal of Physical Chemistry B, 2004, 108(22): 7186-7195
- [12] Allen M P, Tildesley D J. Computer Simulation of Liquids [M]. Oxford University Press, 1989
- [13] Walther J H, Koumoutsakos P. Molecular Dynamics Simulation of Nanodroplet Evaporation [J]. Journal of Heat Transfer, 2001, 123(4): 741-748
- [14] Cheng S, Lechman J B, Plimpton S J, et al. Evaporation of Lennard-Jones Fluids [J]. The Journal of Chemical Physics, 2011, 134(22): 224704
- [15] Law C K. Recent Advances in Droplet Vaporization and Combustion [J]. Progress in energy and combustion science, 1982, 8(3): 171-201
- [16] Kaltz T L, Long L N, Micci M M, et al. Supercritical Vaporization of Liquid Oxygen Droplets Using Molecular Dynamics [J]. Combustion Science and Technology, 1998, 136(1-6): 279-301
- [17] Consolini L, Aggarwal S K, Murad S. A Molecular Dynamics Simulation of Droplet Evaporation [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2003, 46(17): 3179-3188
- [18] 李云清, 何鹏. 超临界环境下燃料液滴蒸发过程的计算研究 [J]. 内燃机学报, 2008, 26(1): 55-61
LI Yunqing, HE Peng. Numerical Investigation of Fuel Droplet Evaporation in a Supercritical Environment [J]. Transactions of CSICE, 2008, 26(1): 55-61
- [19] 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. Effects of State Equation on Numerical Simulation of Fuel Droplet Evaporation at High Temperature and High Pressure [J]. Transactions of CSICE, 2009, 27(4): 344-351

卷期
号、页
码, 录
入齐全

给出编号