

纳米氧气泡对燃料喷射喷雾过程影响的分子动力学模拟研究

张峻峰¹, 郭亮¹, 孙万臣¹, 蔡宁宁², 李德刚¹, 陈艳玲¹, 程鹏¹, 王涵¹, 宣熔¹

(1. 吉林大学汽车仿真与控制国家重点实验室, 长春 130022; 2. 吉林大学商学与管理学院, 长春 130022)

Molecular dynamics simulation study of the effect of nano oxygen-bubble on the fuel injection and spray process

Zhang Junfeng¹, Guo Liang¹, Sun Wanchen¹, Cai Ningning², Li Degang¹, Chen Yanling¹, Cheng Peng¹, Wang Han¹, Xuan Rong¹

(1. Jilin University, State Key Laboratory of Automotive Simulation and Control, Changchun 130022, China; 2. School of Business and Management, Jilin University, Changchun 130022, China)

Abstract: In order to investigate the influence of bubbles on the injection process of bubbly flow fuel, the molecular dynamics simulation was used to simulate the process of nano oxygen bubble fuel passing from the fuel tank through the high-pressure fuel rail and finally being ejected through the injector nozzle. The results show that the stability of nano oxygen-bubble in fuel under normal temperature and pressure conditions depends on the number of gas phase molecules added. The more gas phase molecules added, the more favorable it is for the stable existence of nano oxygen-bubble. When the bubbly flow fuel enters the high-pressure rail, the nanobubble which can be stabilized in the fuel at normal temperature and pressure quickly dissolve and disappear under the influence of external high pressure conditions. When fuel is sprayed out through the nozzle of the fuel injector, due to an increase in external temperature and a decrease in pressure, gas phase molecules previously dissolved in the fuel first precipitate into bubbles, which gradually expands, eventually bursting and escaping. This process contributes to the breakup of the fuel and to the increase of oxygen concentration around the fuel, as well as to the atomization and subsequent combustion of the fuel.

摘要: 为了探究气泡对泡状流燃料喷油过程的影响, 本文采用了分子动力学模拟方法对纳米氧气泡燃料从油箱经过高压油轨, 并最终通过喷油器喷孔喷出的过程进行了仿真研究。结果表明: 常温常压条件下燃料中纳米氧气泡的稳定性取决于添加的氧气分子数量, 添加的氧气分子越多, 气泡越稳定; 当泡状流燃料进入高压油轨后, 受到外界高压条件的影响, 先前能稳定在燃料中存在的纳米气泡迅速溶解消失; 当燃料通过喷油器喷孔喷出时, 由于外界温度升高和压力降低, 先前溶解在燃料中的氧分子在首先燃料中析出形成气泡, 随后气泡逐渐扩大, 最终破裂并逸出, 这个过程有助于燃料的破碎并能使燃料周围的氧浓度升高, 有利于燃料的雾化及后续的燃烧。

关键词: 泡状流燃料; 分子动力学; 纳米氧气泡; 喷油过程

Key words: bubbly flow fuel; molecular dynamics; nano oxygen-bubble; injection process

中图分类号: TK407.9 文献标识码: A

收稿日期: 2023-08-31

基金项目: 国家自然科学基金项目(52202470); 吉林省自然科学基金项目(20220101205JC, 20220101212JC); 吉林大学长沙汽车创新研究院自由探索项目(CAIRIZT20220202); 吉林大学研究生创新基金资助项目(2023CX071);

作者简介: 张峻峰(1998-), 男, 博士生, 主要研究方向为发动机燃料燃烧策略优化, E-mail: zhangjf22@mails.jlu.edu.cn;

郭亮, E-mail: liangguo@jlu.edu.cn。

0 概述

近年来, 由于纳米气泡具有比表面积大, 上升速度慢、稳定性强、自身增压溶解等优异性质, 在工业清洁、医学成像、污水治理、农业生产等领域被广泛关注^[1-6]。在汽车发动机领域, 也有学者尝试将气泡加入燃料制备体相纳米泡状流燃料, 并通过发动机台架试验发现, 燃料中的纳米气泡可以在常温常压下稳定存在 121 天, 且相比于普通燃料, 体相纳米泡状流燃料的喷雾质量更高, 并能有效提高发动机功率^[7-11]。

然而, 由于纳米气泡具有尺寸小、且在燃料中随机运动的特性, 现如今的测试设备无法观察纳米气泡的微观形态^[12-14], 故有关发动机的台架试验仅能证明纳米气泡对燃料雾化有促进作用, 而并没有揭示纳米气泡改善燃料雾化的微观机理。由此, 为了解决上述问题, 基于分子动力学方式的计算机模拟是一个很好的选择^[15-17]。

近年来, 大量学者利用分子动力学对纳米气泡进行了仿真研究。Chenliang Li 等^[18]进行了石墨烯基底上表面纳米气泡的稳定性分子动力学模拟研究, 结果表明: 三相接触线对表面纳米气泡稳定性起着至关重要的作用; Yi-Xian Chen 等^[19]对疏水表面上氙气表面纳米气泡的稳定性进行了研究, 并发现界面附近的水氢键是纳米气泡稳定性的必要条件; 通过模拟固体基底上表面纳米气泡的生成过程, Jiachen Wei 等^[20]发现在可以与周围环境交换气体的开放系统中, 接触线的钉扎是表面纳米气泡稳定性的先决条件; Haichang Yang 等^[21]利用分子动力学研究了表面纳米气泡对光滑和粗糙基底的边界条件的影响, 分析了表面纳米气泡突出角度、覆盖率、数量和流动性对滑移长度的影响; Meng ZHANG 等^[22]模拟研究了常温常压下体相氮纳米气泡在不同浓度氮分子的水中的稳定性, 并得出了纳米气泡的稳定性对水中氮分子的浓度非常敏感的结论; 类似地, Zhan Gao 等^[23]进行了常态条件下水中体相纳米气泡的稳定机制研究, 并发现溶液过饱和是体相纳米气泡稳定的前提。

虽然当前利用分子动力学方式对纳米气泡的研究很多, 但绝大多数都是针对表面纳米气泡的研究, 有关体相纳米气泡的分子动力学模拟也仅仅局限于常温常压下水中纳米气泡的研究, 而发动机在运行过程中所消耗的是燃料, 燃料中体相纳米氧气泡的形态变化过程与水中纳米气泡明显不同, 且燃料在从油箱进入高压油轨、从高压油轨通过喷油器喷孔

喷出的过程需要经历高温和高压, 在这个过程中燃料中体相纳米气泡的形态变化过程显然与常温常压条件下不同。目前, 尚没有针对体相纳米氧气泡燃料喷油过程的分子动力学模拟, 体相纳米氧气泡对改善燃料在喷油过程中的雾化机理尚不明确。本研究利用分子动力学方法从分子角度研究体相纳米氧气泡燃料的喷油过程, 可以更直观、更清晰地观察体相纳米氧气泡在喷油过程中气泡的形态变化及其对燃料的影响, 为体相纳米氧气泡燃料的雾化机理提供微观分子水平的分析。本研究的结果将对体相纳米氧气泡对改善喷油过程中燃料雾化的微观机理提供理论基础。

1 模拟过程

1.1 仿真模型

在本研究中, 燃料模型采用的是正十六烷分子模型, 由于正十六烷分子中包含大量原子, 故为了简化模型, 采用了正十六烷联合原子模型(图 1(a)), 即将 $-CH_3$ 和 $-CH_2-$ 分别视为相对原子质量分别为 15.0345、14.0266 的假想原子^[24]; 而氧分子模型则采用的是全原子模型(图 1(b)), 即由两个相对原子质量为 15.9994 的氧原子组成氧分子^[23, 25]。

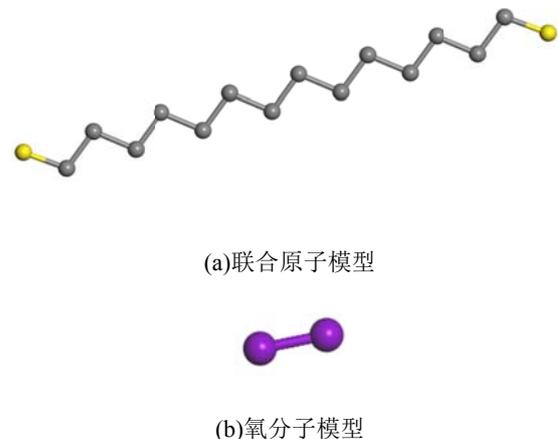


图 1 分子模型图

1.2 势能函数

根据所选择的正十六烷分子及氧气分子模型, 分子中各原子的相互作用可以用 OPLS 势函数来描述, 如式(1)所示^[26-28]。

$$U = \underbrace{\frac{1}{2}k_r(r-r_0)^2}_{bond} + \underbrace{\frac{1}{2}k_\theta(\theta-\theta_0)^2}_{angle} + 12k_{11} + \cos\varphi + k_{21} - \cos 2\varphi + k_{31} + \cos 3\varphi + k_{41} - \cos 4\varphi \text{dihedral} \quad (1)$$

式中, U 为键结势能; k_r 、 r 和 r_0 为键伸缩势能参数、键长以及平衡键长; k_θ 、 θ 和 θ_0 为键角弯曲势能参数、键角以及平衡键角; $k_1 - k_4$ 和 φ 为二面角扭转势能弹力系数和二面角。键长、键角和二面角作用参数如表 1、表 2、表 3 所示^[23-25]。

表 1 键长作用参数

键类型	$k_r/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{nm}^{-2}$	r_0/nm
CH ₃ - CH ₂	109098	0.16100
CH ₂ - CH ₂	81343	0.16100
O - O	494000	0.12100

表 2 键角作用参数

键角类型	$k_\theta/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{rad}^{-2}$	$\theta_0/(\text{°})$
CH ₃ - CH ₂ - CH ₂	113.6	104.8
CH ₂ - CH ₂ - CH ₂	93.6	102.2

表 3 二面角作用参数

二面角类型	$k_1/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$k_2/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$k_3/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	$k_4/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
CH ₃ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂	-3.4	1.25	0.3	0
CH ₂ - CH ₂ - CH ₂ - CH ₂	-3.4	1.25	0.3	0

正十六烷分子之间以及正十六烷分子与壁面之间的相互作用则是使用 LJ (12-6)势函数来描述, 如公式(2)所示^[35, 38, 44]。

$$U = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2)$$

在上式中, U 为非键结势能; ε 和 σ 分别为原子 i 和原子 j 之间的能量参数及距离参数; r_{ij} 为原子 i 与原子 j 之间的距离。相关原子的 LJ 势能参数见下表⁴^[23-25]。

表 4 各原子 LJ 势能参数

相互作用类型	$\varepsilon/\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$	σ/nm
CH ₃ - CH ₃	0.7315	0.390500
CH ₂ - CH ₂	0.4932	0.390500
CH ₃ - CH ₂	0.6006	0.390500
CH ₃ - O	0.5125	0.353195
CH ₂ - O	0.4209	0.353195
O - O	0.3590	0.315890

当两个原子之间的距离足够远时, 这两个原子之间的非键结势能无限趋近于 0, 因此, 在保证仿真准确性的前提下, 为简化计算, 会设置截至半径 r_c , 截止半径一般取 $r_c \geq 2.5\sigma$, 本研究中截止半径统一取 10 埃^[30]。

1.3 模拟方法

首先建立一个 15nm*15nm*15nm 的燃料模拟域, 模拟域中的正十六烷分子经过能量最小化之后在温度为 300K 的 NVT 系综 (即原子数 N 、体积 V 和温度 T 保持恒定) 中经历 2ns 的热平衡, 这个过程中使用的是 Nose-Hoover 恒温器, 时间步长为 2fs, x 、 y 、 z 方向均采用周期性边界条件^[23]; 待模拟域中的燃料温度稳定后, 将其放置在温度 300K, 压力 1bar 的 NPT 系综 (即保证原子数 N 、体积 V 和压力 P 保持恒定) 中稳定 2ns, 这个过程中使用 Nose-Hoover 恒温器控制温度, Parrinello-Rahman 恒压器控制压力, x 、 y 、 z 方向均采用周期性边界条件^[22], 由此获得稳定的燃料模型。

类似地, 五个含有不同氧气分子数的氧气模拟域被建立, 模拟域尺寸均为 15nm*15nm*15nm, 模拟域中的氧气分子经过能量最小化之后在温度为 300K 的 NVT 系综中使用 Nose-Hoover 恒温器经历 2ns 的热平衡, 待模拟域中氧气分子达到平衡后, 分别在五个氧气模拟域中心挖取四个半径为 4nm 的

气

泡

中

的

气

泡

氧气分子数量分别为 N_1 、 N_2 、 N_3 、 N_4 , 具体参数如下表 5 所示。

表 5 纳米气泡参数

气泡类型	气泡半径/nm	分子数量
N1	4	1563
N2	4	2399
N3	4	2624
N4	4	2902

随后在平衡后的燃料模拟域中心删除半径 4.5nm 的球形区域内的正十六烷分子, 然后将从氧气模拟域中挖取的气泡模型分别嵌入燃料模拟域中心, 从而得到含有不同数量氧气分子的体相纳米氧气泡燃料模型^[31], 如图 2 所示。

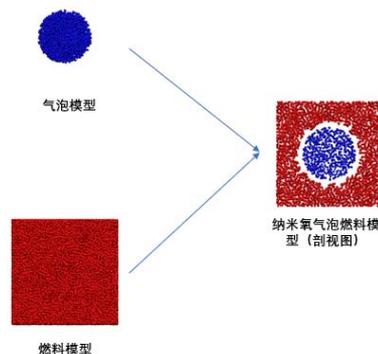


图 2 纳米氧气泡燃料模型建立过程图

基于建立好的体相纳米氧气泡燃料模型，本文模拟了体相纳米氧气泡燃料从常温常压的油箱经过高压油轨，最后通过喷孔进入高温的发动机气缸中的一系列过程，同时设置一对照组 N^* ，即直接使用平衡后的燃料模型来模拟不添加纳米气泡的普通燃料的喷油过程，对比纳米气泡对燃料雾化的影响。整个模拟过程持续 28ns，在 0ns 时的边界条件为温度 300K，压力 1bar 来模拟燃料在油箱中的常温常压条件；在 15ns 时将边界条件变为 318K、800bar 模拟燃料进入高压油轨后外界的温度和压力；在 17ns 时采用 423K、3bar 的边界条件模拟燃料从喷油孔喷入发动机气缸时受到的温度及压力，同时给燃料一个 y 方向 50m/s 的速度模拟燃料从喷油器喷孔喷出时的流速。模拟过程中采用 NPT 系综和周期性边界条件，时间步长为 2fs，使用的程序是 lammps 开源程序包^[32]，算法采用的是 Velocity-Verlet 算法^[33]，快照的可视化是通过 vmd 执行的^[34]。通过上述方式，本文研究了不同氧气分子数量组成的油中纳米气泡在喷油过程中的形态变化过程及其对燃料雾化的影响。

1.4 模型验证

为了确保本文所选择的正十六烷联合原子模型及氧气全原子模型是可靠的，本节输出了常压条件下正十六烷及液氧的密度，并将之与正十六烷及液氧实际密度进行对比验证，如下表 6 所示。

表 6 正十六烷及液氧密度对比

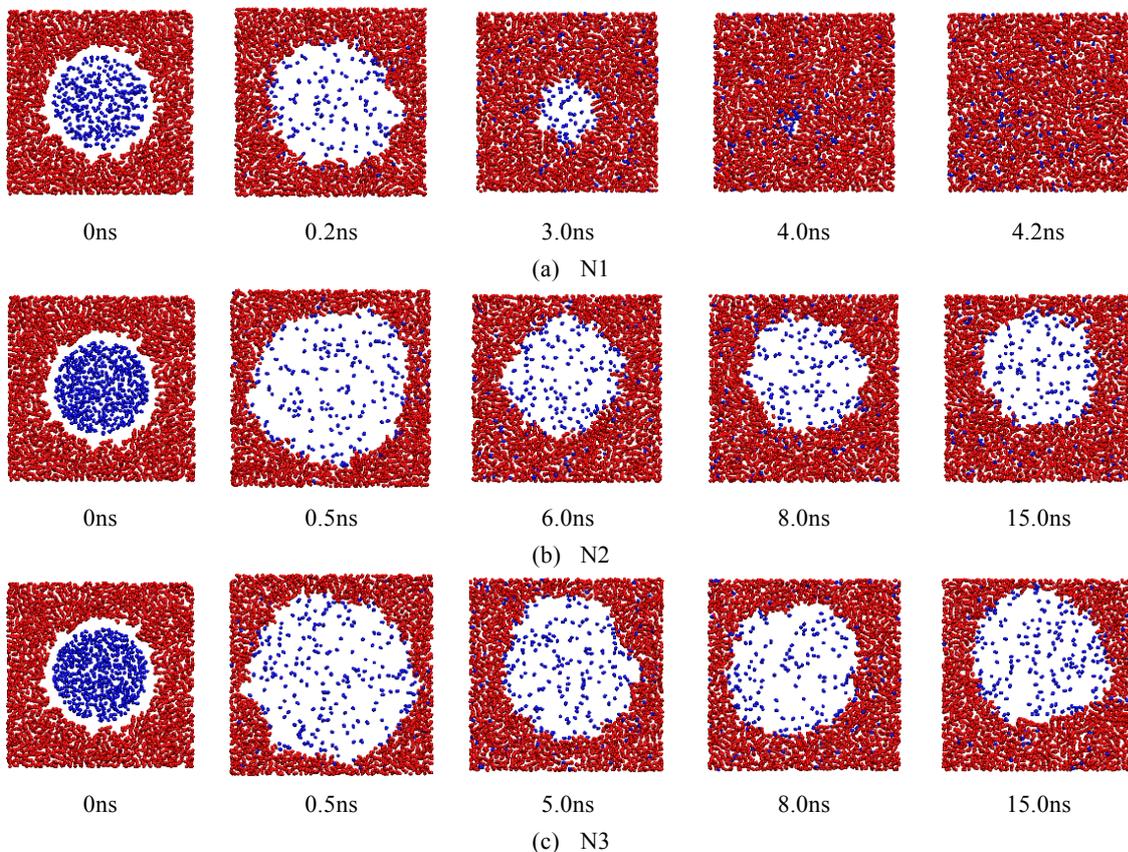
	模拟值	实际值	误差
正十六烷/ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	0.7429	0.7734	3.9%
液氧/ $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	1.125	1.143	1.6%

通过表 6 可以发现，虽然模拟值和实际值有差异，但误差都在 4% 以内，说明本文所选用的正十六烷分子联合原子模型和氧气全原子模型是可靠的。

2 结果与讨论

2.1 常温常压条件下氧气分子数量对燃料中纳米气泡变化过程的影响

为了了解常温常压下不同氧气分子数量 $N1$ 、 $N2$ 、 $N3$ 、 $N4$ 的燃料中纳米气泡的形态变化过程，本节输出了温度 300K，压力 1bar 的条件下油中纳米气泡在气泡中心处的剖视图以及所对应的氧分子所占据的体积变化曲线，结果分别如图 3 和图 4 所示。



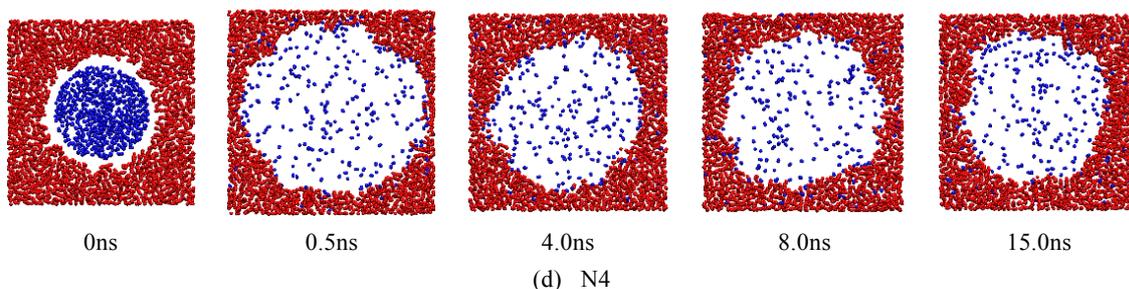


图 3 常温常压下燃料中纳米氧气泡形态变化过程图

完全溶于液相。

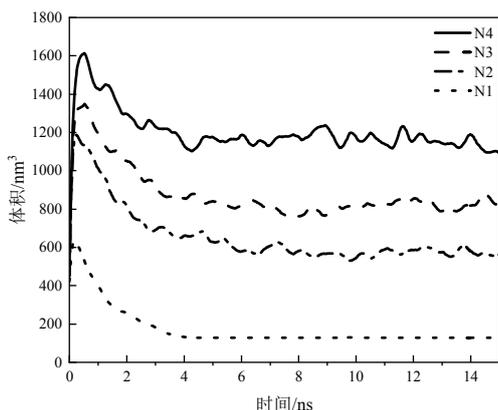


图 4 溶于燃料及未溶于燃料的氧分子所占据的总体积变化曲线图

图 3 和图 4 可以看出，氧气分子数量对常温常压下燃料中纳米气泡的形态变化和稳定性有重要影响。正如图 3(a) 展示的，加入气泡后，由于燃料中没有氧气分子，气泡中的氧气分子迅速向外扩散，从而使气泡轮廓增大，所以图 3(a) 0.2ns 时气泡半径要比 0ns 时气泡半径大，图 4 中 N1 条件下的氧分子所占据的总体积也随之升高，除此之外，可以发现图 3(a) 0.2ns 时气泡外部有少量氧分子，这说明气泡中的氧气分子在通过气泡边缘向燃料中扩散；通过图 3(a) 3.0ns 时气泡的形态特征可以发现，随着氧气分子不断从气泡中逸出进入燃料，气泡内的氧气分子数量降低，使气泡很难保持像图 3(a) 0.2ns 时较大的气泡轮廓，气泡半径降低，所以图 3(a) 3.0ns 时的气泡半径小于 0.2ns 时的气泡半径，图 4 中 N1 条件下的氧分子所占据的总体积也随之降低；随着大量氧气分子逸出气泡，气泡内的氧气分子数量不足以维持气泡稳定存在，气泡逐渐消散，图 3(a) 4.0ns 时，气泡几乎完全消散，图 3(a) 4.2ns 时气泡

通过图 3(b) 可以看出在 0-6ns 过程中 N2 条件下气泡的变化与 N1 条件下相同，即气泡先向外扩散，半径增大，之后收缩，轮廓减小；然而，与 N1 条件下气泡最终消散的结果不同，图 3(b) 6.0ns、图 3(b) 8.0ns 和图 3(b) 15.0ns 时气泡半径保持不变，图 4 中 N2 条件下 6ns 后氧分子所占据的总体积变化也保持稳定，这说明在 6.0ns 时 N2 条件下的气泡在燃料中达到了稳定状态，相比于 N1 条件，N2 条件仅增加了氧气分子数目就能形成稳定的体相纳米气泡，这说明氧气分子数量对体相纳米气泡的稳定性有重要影响^[22]，同时，也有研究表明：只有当溶液处于过饱和状态时才会有稳定的体相纳米气泡，这同样能解释 N2 条件下气泡能稳定存在，而 N1 条件下气泡却消散的现象^[23]；对比图 3(b) 6ns、图 3(b) 8ns 和图 3(b) 10ns 时气泡的形态可以发现，虽然气泡半径保持不变，但不同时刻下气泡内部以及气泡外的气相分子形态并不相同，图 4 中 N2 条件下 6ns 后氧分子所占据的总体积变化虽保持稳定但也有小幅度的波动，这说明纳米气泡在燃料中的稳定不是静止不变的，而是通过氧分子离开和进入气液界面的动态平衡所形成的。

图 3(c) 和图 3(d) 展示在 N3 和 N4 条件下气泡的变化过程与 N2 条件下相似，不同的是相比于 N2 条件，N3 和 N4 条件下添加的氧气分子更多，氧气分子扩散的速度更快，图 3(c) 和图 3(d) 0.5ns 时气泡半径明显大于图 3(b) 0.5ns 时的气泡半径，而且由于更快的氧气分子扩散速度，N3 和 N4 条件下气泡达到稳定所需的时间也比 N2 更短，分别为 5.0ns 和 4.0ns。

2.2 高压油轨中氧气分子数量对燃料中纳米气泡变化过程的影响

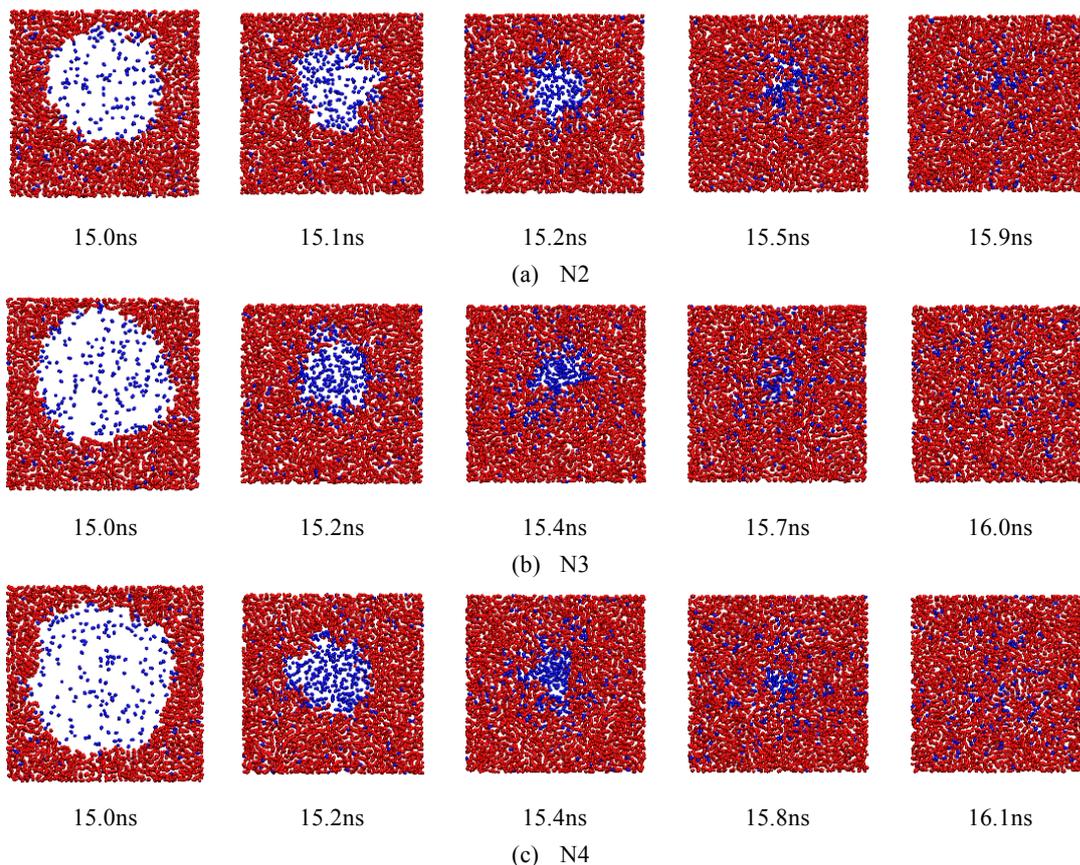


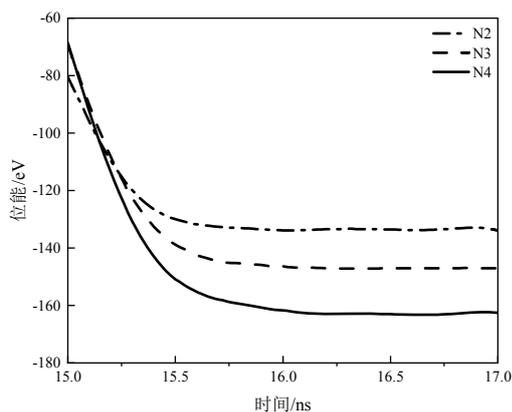
图 5 高压油轨中燃料中纳米氧气泡形态变化过程图

燃料从油箱进入高压油轨后，其温度略微升高，压力急剧升高，故通过在 15ns 时将边界条件调整为 $T=318\text{K}$ ， $P=800\text{bar}$ ，来模拟燃料进入高压油轨后受到的温度及压力，由于在常温常压条件下由 N1 数量氧气分子组成的气泡无法在燃料中稳定存在，故本节仅研究了由 N2、N3 和 N4 条件下油中纳米气泡在高压油轨中的形态变化过程。下图 5 和图 6 分别为在高压油轨中不同氧气分子数量 N2、N3 和 N4 的油中纳米气泡在气泡中心处的剖视图，以及所对应的氧分子位能变化曲线。

通过图 5 可以发现，在高压环境下，气泡的形态与常温常压下相比发生了显著的变化，对比图 5(a)

15.0ns 和图 5(a) 15.1ns 时气泡的形态变化可以看出在高压的影响下，气泡轮廓迅速收缩，气泡半径减小，气泡内氧气分子密度增加，气泡内氧气分子间距变低，图 6 中 N2 条件下氧分子位能降低；图 5(a)15.2ns 时有大量氧气分子逸出气泡进入燃料，这是由于在高压条件下，氧气分子在燃料中的溶解度变大，气泡难以像常温常压条件下那样在燃料中保持稳定，气泡内大量氧气分子通过气泡边界向燃料中扩散。由于气泡内部氧气分子减少，燃料中溶解的氧分子数量增加，同时在高压的影响下气泡内的氧气分子间距持续降低，图 5(a) 15.2ns 时的气泡半径比图 5(a) 15.1ns 时的更小；随着气泡中氧气分子不断向燃料中扩散，气泡逐渐缩小，图 5(a) 15.5ns 时气泡轮廓已经难以辨认，图 5(a) 15.9ns 时气泡完全溶解于燃料中，图 6 中 N2 条件下 15.9ns 时氧分子位能也降为最低。

N3 和 N4 条件下气泡的变化过程与 N2 条件下类似，即在受到外界高压条件的作用下，气泡收缩，然后溶解；但是由于 N3 和 N4 条件下添加的氧气分子更多，气泡溶解所需要的时间相较于 N2 条件更长，分别在 16.0ns 和 16.1ns 才完全溶解，图 6 中 N3 和 N4 条件下氧分子位能也在 16.0ns 和 16.1ns



时降为最低。

2.3 喷油过程中氧气分子数量对燃料喷射过程的影响

燃料通过高压油轨，从喷油器喷孔喷出的过程是一个升温降压的过程，故本节在 17ns 时调整 $T=423\text{K}$, $P=3\text{bar}$ 的边界条件，模拟燃料喷入气缸时

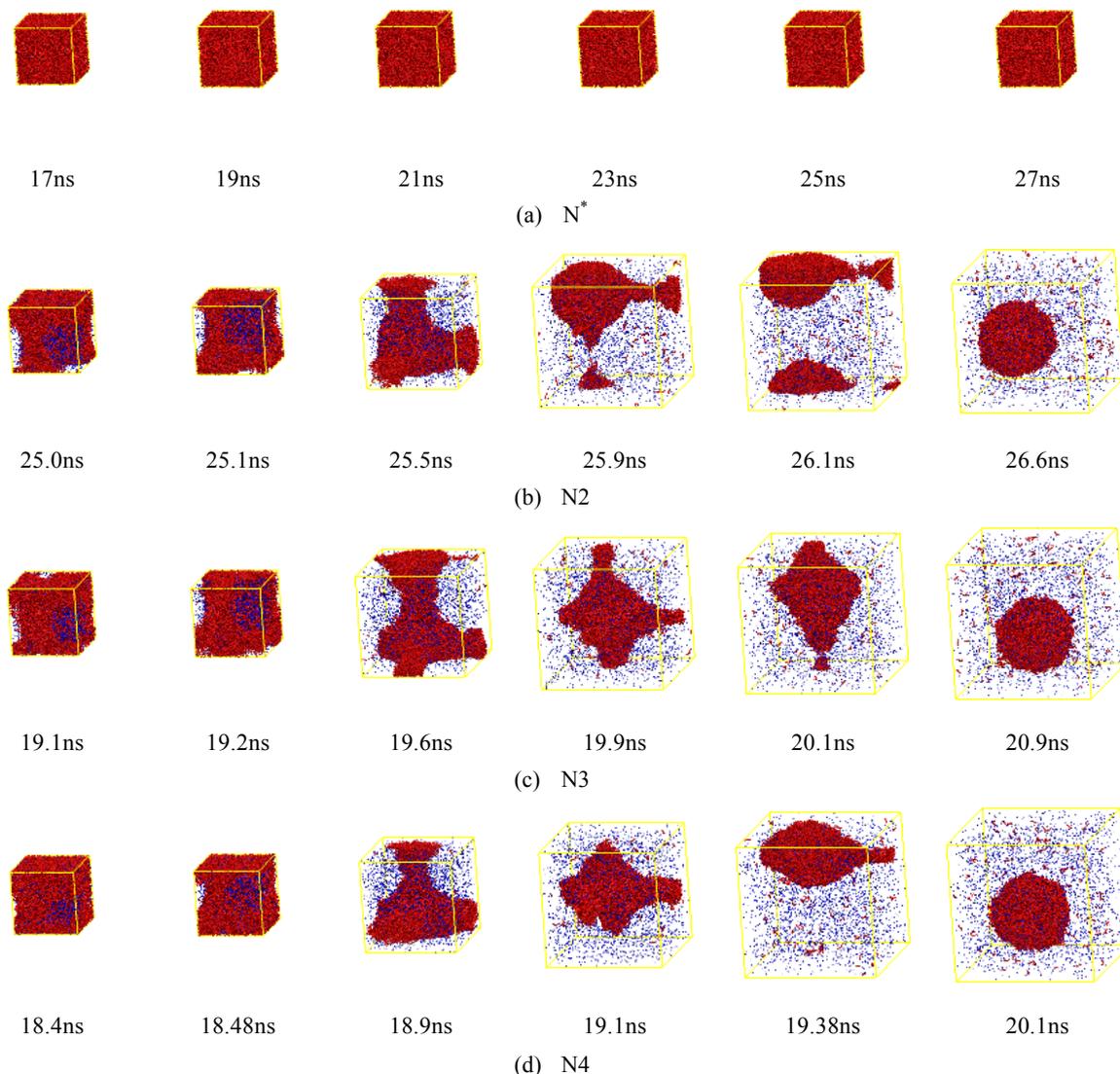


图 7 喷油过程中不同氧气分子数量条件下燃料形态变化过程图

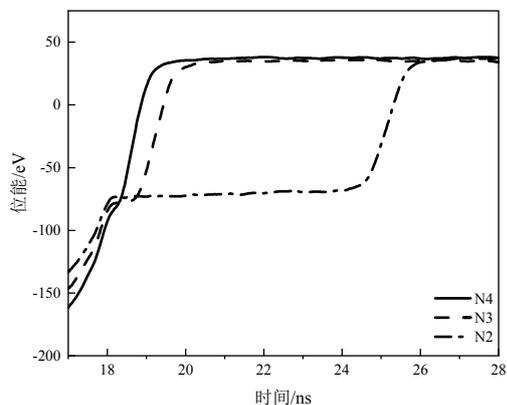


图 8 喷油过程中氧分子位能变化曲线图

受到的温度及压力，同时给燃料一个 y 方向 50m/s 的速度模拟燃料从喷油器喷孔喷出时的流速，为了更好地展现氧分子对燃料在喷油过程中的影响，本节输出了不添加气泡的 N^* 条件下燃料喷油过程中的形态变化作为对照组，同时为了更加立体地观察燃料在喷油过程中的形态变化，本节输出了燃料不同时刻下形态变化的立体图；下图 7 和图 8 分别为 N^* 、 N_2 、 N_3 和 N_4 条件下燃料的变化过程立体图及 N_2 、 N_3 和 N_4 条件下氧分子位能变化曲线。

图 7(a)可以看出当燃料中没有加入氧分子时，由于不受氧分子的影响，在喷油过程中燃料的形态

未发生变化, 全程保持油束状态; 而通过图 7(b) 可以发现, 当燃料中加入氧分子后, 燃料的形态变化过程与图 7(a) N^* 条件下的燃料形态变化过程截然不同, 结合图 8 所展示的, 由于外界温度升高, 氧分子受热温度升高, 同时由于外界压力降低, 燃料对氧分子的束缚能力降低, 溶解在燃料中的氧分子与其周围的燃料分子之间的分子间距增大, 图 8 中 N_2 条件下 17ns 至 18ns 时氧分子位能上升; 而且由于温度升高, 压力降低, 氧分子在燃料中的溶解度降低, 24ns 时氧分子开始逐渐从燃料中析出, 所以图 8 中, N_2 条件下 24ns 时氧分子位能开始上升; 析出的氧气分子逐渐在燃料中聚集形成气泡, 故图 7(b) 25ns 时可以发现燃料中存在明显的气泡, 随着氧分子不断从燃料中析出, 气泡向外扩张, 半径增大, 所以图 7(b) 25.1ns 时的气泡轮廓要大于图 7(b) 25ns 时的气泡轮廓; 伴随着燃料中纳米气泡的持续增大, 气泡无法在燃料中稳定存在, 图 7(b) 25.5ns 时气泡破裂, 大量氧气分子逸出燃料, 逸出燃料的氧气分子向外扩散并逐渐包裹燃料, 图 7(b) 25.9ns 时逸出燃料的氧气分子已经将燃料完全包裹; 氧气分子析出燃料并向外扩散的过程中, 氧气分子与周围分子间距一直增大, 所以图 8 中 N_2 条件下 24ns 至 26.6ns 时氧分子位能保持上升趋势; 图 7(b) 26.1ns 可以看出, 由于液相的燃料分子非键结势能大于气相氧气分子, 所以包裹在气相中的燃料逐渐向球冠状转变, 图 7(b) 26.6ns 时已经完全由条状油束转化为球冠状纳米油滴, 而且图 7(b) 26.6ns 时能够发现氧气分子中有脱离纳米油滴外的零星燃料分子, 这是由于氧气分子在逸出燃料的过程中与燃料分子发生的剧烈碰撞会将部分燃料分子带离燃料, 这说明燃料中的氧气分子有利于燃料在喷油过程中的破碎, 促进燃料的雾化; 同时图 7(b) 26.6ns 时在燃料纳米液滴周围的氧气分子还会改善燃料液滴周围的氧浓度, 有利于改善后续燃料在气缸中的燃烧反应。

图 7(c) 和图 7(d) 可以看出在 N_3 和 N_4 条件下燃料的变化过程和 N_2 条件下相似, 但由于 N_3 和 N_4 条件下溶解在燃料中的氧分子数量更多, 氧气分子向外扩散的过程更快, 结合图 8 N_3 和 N_4 条件下氧分子位能变化曲线可以得知氧气分子分别在 18.2ns 和 18.4ns 时就析出燃料, 在图 7(c) 19.6ns 和图 7(d) 18.9ns 时氧气分子逸出燃料, 图 7(c) 20.9ns 和图 7(d) 20.1ns 时被氧气分子包裹的燃料由条状油束转化为球冠状纳米油滴。

3 结论

在本项研究中, 通过分子动力学模拟研究了纳米氧气泡燃料喷油过程中气泡的变化过程及其对燃料雾化的影响, 并得出以下结论:

(1) 常温常压条件下燃料中纳米气泡的稳定性取决于气泡中的氧气分子数量, 当气泡中添加的氧气分子数量少时, 气泡难以在燃料中稳定存在, 气泡逐渐溶解消失; 当气泡中添加足够多的氧气分子时, 气泡会与燃料形成一种稳定的动态平衡状态。

(2) 当纳米氧气泡燃料处于高压状态时, 由于受到高压条件的影响, 常温常压下能稳定存在于燃料中的气泡迅速溶解消失。

(3) 在喷油过程中, 受到气缸内的高温及降压条件的影响, 溶解于燃料中的氧分子逐渐析出燃料并形成气泡, 气泡逐渐扩大最后破裂并逸出, 这个过程有助于燃料的雾化并能改善燃料周围的氧含量, 有利于后续燃料在气缸内的燃烧反应。

参考文献:

- [1] Seddon, J. R., Lohse, D., Ducker, W. A., & Craig, V. S. A deliberation on nanobubbles at surfaces and in bulk [J]. *Chemphyschem: a European journal of chemical physics and physical chemistry*, 2012, 13(8), 2179 - 2187.
- [2] Alheshibri, M., Qian, J., Jehannin, M., & Craig, V. S. A History of Nanobubbles [J]. *Langmuir: the ACS journal of surfaces and colloids*, 2016, 32(43), 11086 - 11100.
- [3] Wu, C., Nasset, K., Masliyah, J., & Xu, Z. Generation and characterization of submicron size bubbles [J]. *Advances in colloid and interface science*, 2012, 179-182, 123 - 132.
- [4] Calgaroto, S., Wilberg, K. Q., & Rubio, J. On the nanobubbles interfacial properties and future applications in flotation [J]. *Minerals Engineering*, 2014, 60, 33 - 40.
- [5] Ebina, K., Shi, K., Hirao, M., Hashimoto, J., Kawato, Y., Kaneshiro, S., Morimoto, T., Koizumi, K., & Yoshikawa, H. Oxygen and air nanobubble water solution promote the growth of plants, fishes, and mice [J]. *PloS one*, 2013, 8(6), e65339.
- [6] Li, H., Hu, L., Song, D., & Lin, F. Characteristics of micro-nano bubbles and potential application in groundwater bioremediation [J]. *Water environment research: a research*

- publication of the Water Environment Federation, 2014, 86(9), 844–851.
- [7] Oh, S. H., Han, J. G., & Kim, J.-M. Long-term stability of hydrogen nanobubble fuel [J]. *Fuel*, 2015, 158, 399–404.
- [8] Nakatake, Y., Kisu, S., Shigyo, K., Eguchi, T., & Watanabe, T. Effect of nano air-bubbles mixed into gas oil on common-rail diesel engine [J]. *Energy*, 2013, 59, 233–239.
- [9] Zhang, J., Jiang, D., Huang, Z., Wang, X., & Wei, Q. Performance and Emissions of Direct Injection Diesel Engine Fueled with Diesel Fuel Containing Dissolved Methane [J]. *Energy & Fuels*, 2006, 20(2), 504–511.
- [10] Zhang, J., Jiang, D., Huang, Z., Obokata, T., Shiga, S., & Araki, M. Experimental Study on Flashing Atomization of Methane/Liquid Fuel Binary Mixtures [J]. *Energy & Fuels*, 2005, 19(5), 2050–2055.
- [11] Oh, S. H., Yoon, S. H., Song, H., Han, J. G., & Kim, J.-M. Effect of hydrogen nanobubble addition on combustion characteristics of gasoline engine [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2013, 38(34), 14849–14853.
- [12] Midtvedt, D., Eklund, F., Olsén, E., Midtvedt, B., Swenson, J., & Höök, F. Size and Refractive Index Determination of Subwavelength Particles and Air Bubbles by Holographic Nanoparticle Tracking Analysis [J]. *Analytical chemistry*, 2020, 92(2), 1908–1915.
- [13] Snell, J. R., Zhou, C., Carpenter, J. F., & Randolph, T. W. Particle Formation and Aggregation of a Therapeutic Protein in Nanobubble Suspensions [J]. *Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2016, 105(10), 3057–3063.
- [14] Bhattacharjee, S. DLS and zeta potential - What they are and what they are not [J]? *Journal of Controlled Release*, 2016, 235, 337–351.
- [15] da Silva, G. C. Q., Oliveira, F. G., de Souza, W. F., de Oliveira, M. C. K., Esteves, P. M., & Horta, B. A. C. Effects of paraffin, fatty acid and long alkyl chain phenol on the solidification of n-hexadecane under harsh subcooling condition: A molecular dynamics simulation study [J]. *Fuel*, 2021, 285, N.PAG.
- [16] Mar, W., Hautman, J., & Klein, M. L. Molecular dynamics studies of microscopic wetting phenomena on self-assembled monolayers [J]. *Computational Materials Science*, 3(4), 1995, 481–497.
- [17] Qiang, W., Wang, B., Li, Q., & Wang, W. Molecular dynamics simulation of wetting and evaporation characteristics for sessile nanofluid nanodroplets [J]. *Chemical Physics Letters*, 2018, 695, 112–118.
- [18] Li, C., Zhang, A.-M., Wang, S., & Cui, P. Formation and coalescence of nanobubbles under controlled gas concentration and species [J]. *AIP Advances*, 2018, 8(1), 1.
- [19] Chen, Y.-X., Chen, Y.-L., & Yen, T.-H. Investigating Interfacial Effects on Surface Nanobubbles without Pinning Using Molecular Dynamics Simulation [J]. *Langmuir: The ACS Journal of Surfaces and Colloids*, 2018, 34(50), 15360–15369.
- [20] Wei, J., Zhang, X., Song, F., & Shao, Y. Nanobubbles in confined solution: Generation, contact angle, and stability [J]. *Journal of Chemical Physics*, 2018, 148(6), 1.
- [21] Haichang Yang, Binglin Zeng, Xuehua Zhang, Yaowen Xing, XiahuiGui, Yijun Cao. Control of boundary slip by interfacial nanobubbles: A perspective from molecular dynamics simulations [J]. *Physics of Fluids*, 2023, 35(3): 032108.
- [22] Zhang, M., Tu, Y., & Fang, H. Concentration of nitrogen molecules needed by nitrogen nanobubbles existing in bulk water [J]. *Applied Mathematics & Mechanics*, 2013, 34(12), 1433–1438.
- [23] Gao, Z., Wu, W., Sun, W., & Wang, B. Understanding the Stabilization of a Bulk Nanobubble: A Molecular Dynamics Analysis [J]. *Langmuir: The ACS Journal of Surfaces and Colloids*, 2021, 37(38), 11281–11291.
- [24] 白麟, 王宝和, 于志家. 正十六烷纳米液滴在光滑壁面上润湿行为的分子动力学模拟 [J]. *河南化工*, 2017, 34(11):25–29.
- [25] Zhou, L., Wang, X., Shin, H. J., Wang, J., Tai, R., Zhang, X., Fang, H., Xiao, W., Wang, L., Wang, C., Gao, X., Hu, J., & Zhang, L. Ultrahigh Density

- of Gas Molecules Confined in Surface Nanobubbles in Ambient Water [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2020, 142(12), 5583 - 5593.
- [26] Martin, M. G. Comparison of the AMBER, CHARMM, COMPASS, GROMOS, OPLS, TraPPE and UFF force fields for prediction of vapor - liquid coexistence curves and liquid densities [J]. *Fluid Phase Equilibria*, 2006, 248(1), 50 - 55.
- [27] de Jesús-González, N. E., Pérez de la Luz, A., López-Lemus, J., &Alejandre, J. Effect of the Dielectric Constant on the Solubility of Acetone in Water [J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2018, 63(5), 1170-1179.
- [28] van Leeuwen, M. E., & Smit, B. Molecular Simulation of the Vapor-Liquid Coexistence Curve of Methanol [J]. *The Journal of Physical Chemistry*, 1995, 99(7), 1831-1833.
- [29] Nahid Sedighi, Sohail Murad, & Suresh K Aggarwal. Molecular dynamics simulations of nanodroplet spreading on solid surfaces, effect of droplet size [J]. *Fluid Dynamics Research*, 2010, 42(3), 035501.
- [30] Wang, F.-C., & Zhao, Y.-P. Contact angle hysteresis at the nanoscale: a molecular dynamics simulation study [J]. *Colloid & Polymer Science*, 2013, 291(2), 307 - 315.
- [31] Wang, X. F., Tao, G., Xu, N., Li, Z., & Wen, P. Molecular dynamics analysis of shock wave-induced collapse of nanobubbles in water [J]. *Journal of Physics*, 2021, 1-23.
- [32] Steve Plimpton. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117, 1-19, 0021-9991.
- [33] William C. Swope, Hans C. Andersen, Peter H. Berens, Kent R. Wilson. A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water clusters [J]. *J. Chem. Phys.*, 1982, 76 (1): 637 - 649.
- [34] Humphrey, W., Dalke, A., &Schulten, K. VMD: visual molecular dynamics [J]. *Journal of molecular graphics*, 1996, 14(1), 33 - 28.