

亚超临界 RP-3 航空煤油的热物性研究

毕业设计开题报告

沈扬

清华大学航天航空学院，工程热物理研究所

2020 年 12 月 16 日



- ① 课题背景
- ② 现有研究
- ③ 研究计划
- ④ 计划进度

- ① 课题背景
- ② 现有研究
- ③ 研究计划
- ④ 计划进度

飞行器冷却

在发动机冷却系统中，航空煤油往往被用作冷却剂去吸收机体的热量。在实际工作过程中，航空煤油往往工作在**超临界工况**下，各物性随温度、压力的变化将发生很大的改变。

因此，准确地计算超临界状态下航空煤油的各个热物性，对流动换热、以及后续喷注、燃烧等过程的研究具有重要的意义。

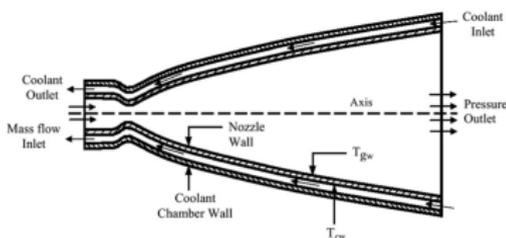


图 1: 再生冷却循环系统

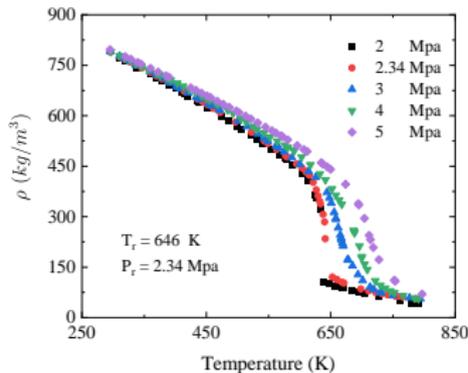


图 2: 不同压力下 RP-3 密度测量值随温度的变化

① 课题背景

② 现有研究

替代模型

计算方法

不足与目标

③ 研究计划

④ 计划进度

① 课题背景

② 现有研究

替代模型

计算方法

不足与目标

③ 研究计划

④ 计划进度

替代模型

由于实际航空煤油的十分复杂，由上百种组分构成，不可能对每一种组分均进行模拟。在实际研究中，根据不同需要，常选取代表性组分构成简化替代物模型，模拟实际燃料的性质。

表 1: 研究测得 RP-3 成分（质量百分比）¹

饱和烃		不饱和烃			芳香族化合物		
链烷烃	环烷烃	直链烯烃	环烷烯烃	醇类	芳烃类	萘及其衍生物	其他成分
49.55%	26.37%	1.83%	0.23%	2.94%	4.12%	11.24%	3.72%

¹Pei Xinyuan Hou Lingyun. Effect of different species on physical properties for their surrogate of aviation fuel[J]. J Tsinghua Univ(Sci & Technol), 2017.

替代模型

表 2: 航空煤油的几种典型替代模型 (C_n 指模型中的组分数目)

Species	Chemical formula	Surrogate model components in mole fraction				
		C1	C3	C4	C6	C10
n-Octane	C8H18	0	0	0	0.0312	0.0600
n-Decane	C10H22	1	0.4900	0.2030	0	0.1000
n-Dodecane	C12H26	0	0	0.3810	0.2227	0.2000
n-Tridecane	C13H28	0	0	0	0	0.0800
n-Tetradecane	C14H30	0	0	0	0	0.1000
n-Hexadecane	C16H34	0	0	0	0.0706	0.1000
Methylcyclohexane	C7H14	0	0	0.1470	0	0.2000
trans-1,3- Dimethylcyclopentane	C7H14	0	0	0	0	0.0800
1,3,5- Trimethylcyclohexane	C9H18	0	0.4400	0	0	0
Xylene	C8H10	0	0	0	0.2111	0
Propylbenzene	C9H12	0	0.07	0	0	0.0500
n-Butylbenzene	C10H14	0	0	0.2690	0	0
Tetralin	C10H12	0	0	0	0.1632	0

① 课题背景

② 现有研究

替代模型

计算方法

不足与目标

③ 研究计划

④ 计划进度

广义对应态法则 (ECS)

对应态法则

$$h_x = \rho_r^c / \rho^c; f_x = T^c / T_r^e$$

$$\rho_r = h_x \rho; T_r = T / f_x$$

$$Z_x(T, \rho) = Z_r(T_r, \rho_r)$$

形状因子

$$h_x = (\rho_r^c / \rho^c) \varphi(T / T_c, \rho / \rho_c, \omega)$$

$$f_x = (T^c / T_r^c) \theta(T / T_c, \rho / \rho_c, \omega)$$

NIST-Supertrapp

① 课题背景

② 现有研究

替代模型

计算方法

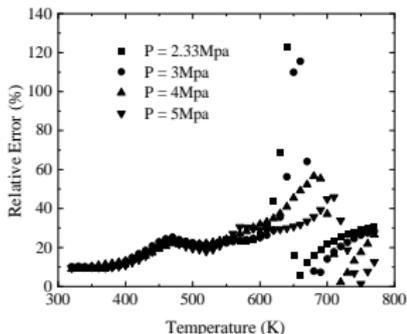
不足与目标

③ 研究计划

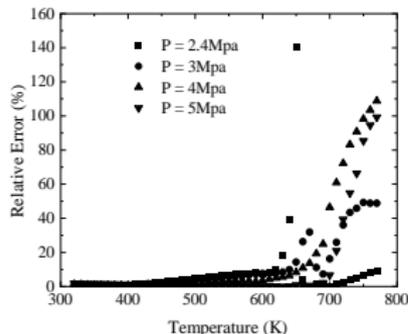
④ 计划进度

现有问题

- 各模型预测 RP-3 各热物性与实验值的相对误差仍然较大
- 模型在高温区失效



(a) 粘度



(b) 密度

图 3: 不同压力下 C4 模型²计算值与 RP-3 实验值的相对误差

²Xu K K, Meng H. Analyses of surrogate models for calculating thermophysical properties of aviation kerosene RP-3 at supercritical pressures[J]. Science China Technological Sciences, 2015.

研究目标

现有研究的不足

- 各物性计算与实验值误差仍然较大：模型问题
- 高温区与实验值不符：方法问题

本研究的工作目标

- 开发适用于国产航空煤油 RP-3 在亚/超临界状态下的高精度热物性计算模型，关注的物性主要包括 RP-3 的密度、粘度、定压比热容及热导率，
- 在新开发模型的基础上，构建 RP-3 的热物性数据库。压力范围：3.5 ~ 10 Mpa，温度范围300 ~ 750 K

1 课题背景

2 现有研究

3 研究计划

研究整体思路

RP-3 热物性模型优化

用机器学习方法反推替代模型

分子模拟方法计算煤油热物性

4 计划进度

1 课题背景

2 现有研究

3 研究计划

研究整体思路

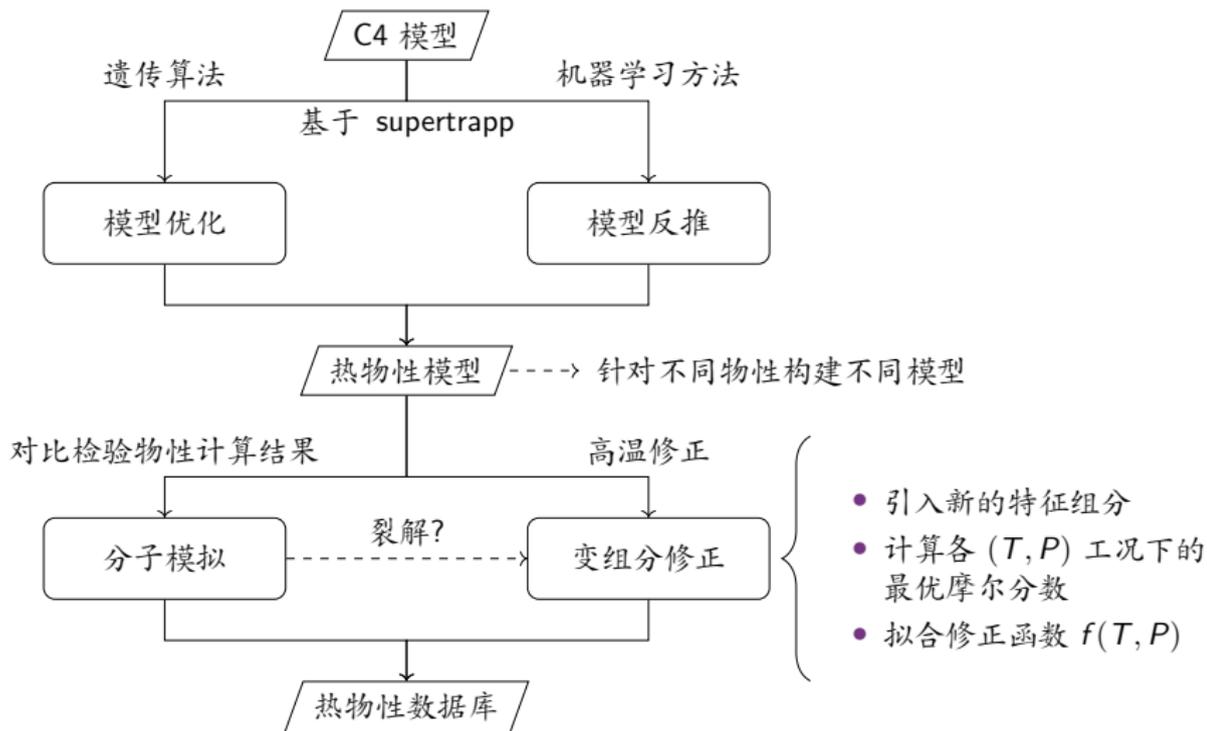
RP-3 热物性模型优化

用机器学习方法反推替代模型

分子模拟方法计算煤油热物性

4 计划进度

研究框架



1 课题背景

2 现有研究

3 研究计划

研究整体思路

RP-3 热物性模型优化

用机器学习方法反推替代模型

分子模拟方法计算煤油热物性

4 计划进度

模型优化流程

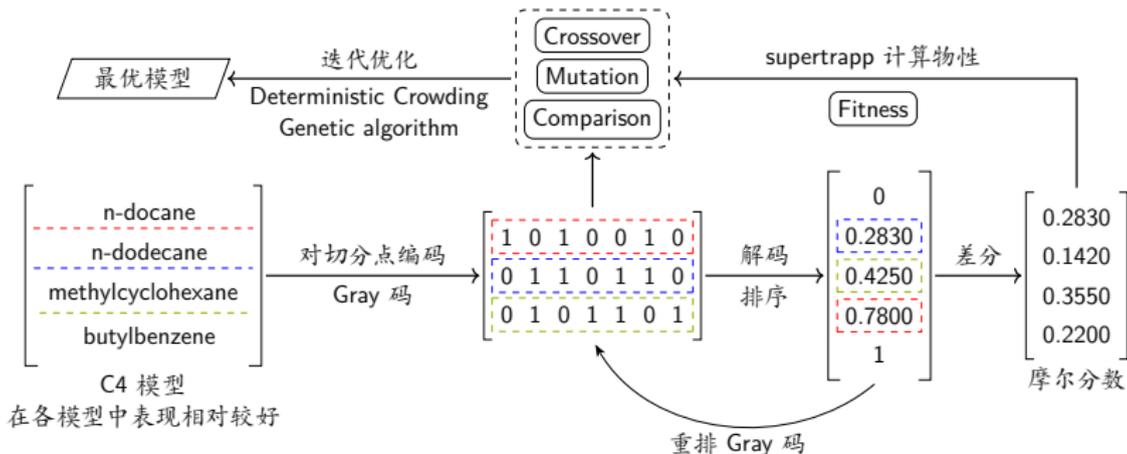


图 4: 优化过程编码、解码示意图

1 课题背景

2 现有研究

3 研究计划

研究整体思路

RP-3 热物性模型优化

用机器学习方法反推替代模型

分子模拟方法计算煤油热物性

4 计划进度

机器学习方法预测热物性

P/T - 物性对应

输入温度、压力等工况参数，输出物性

i.e. $\text{H}_2 - \text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O}$ 三元混合物物性预测³

煤油：数据量过少；无法预测超出实验范围的物性。

结构 - 物性对应

将碳氢分子按官能团种类及数量编码，输入编码向量，输出物性

i.e. 用 QSPR 模型预测辛烷值⁴

煤油：编码困难；超临界状态下物性强烈依赖于温度和压力。

³Y.B. Liu, W.X. Hong, B.Y. Cao. Machine learning for thermodynamic properties of pure fluids and their mixtures. Energy, 2019, 188: 116091

⁴Li R, Herreros J M, Tsolakis A, et al. Machine learning regression based group contribution method for cetane and octane numbers prediction of pure fuel compounds and mixtures[J]. Fuel, 2020,280:118589.

模型构建流程

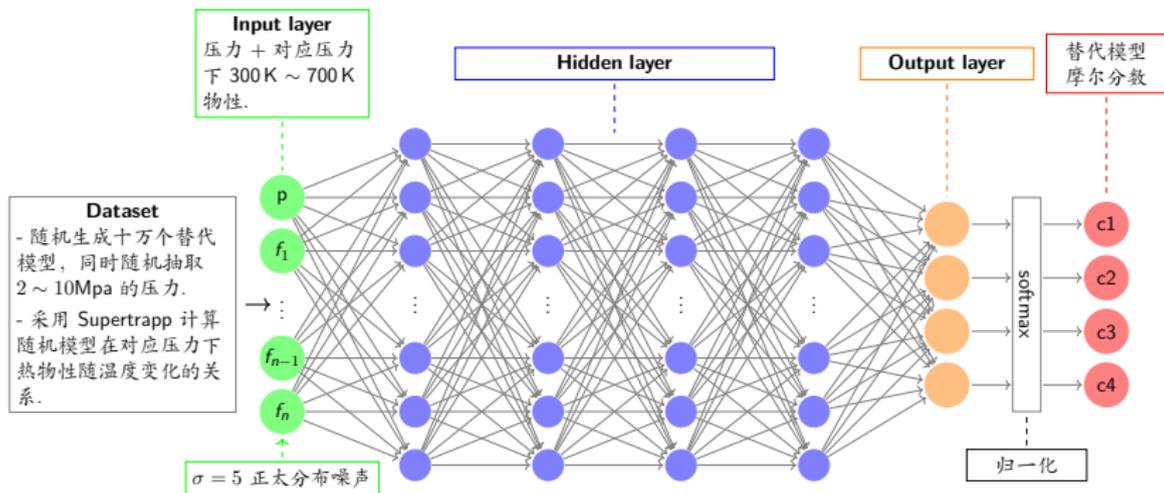


图 5: 神经网络结构示意图

1 课题背景

2 现有研究

3 研究计划

研究整体思路

RP-3 热物性模型优化

用机器学习方法反推替代模型

分子模拟方法计算煤油热物性

4 计划进度

煤油的分子模拟

- 通过单组份模拟，确定计算不同物性的最优力场
- 对本文所提出的替代模型进行热物性模拟，校核 supertrapp 计算结果

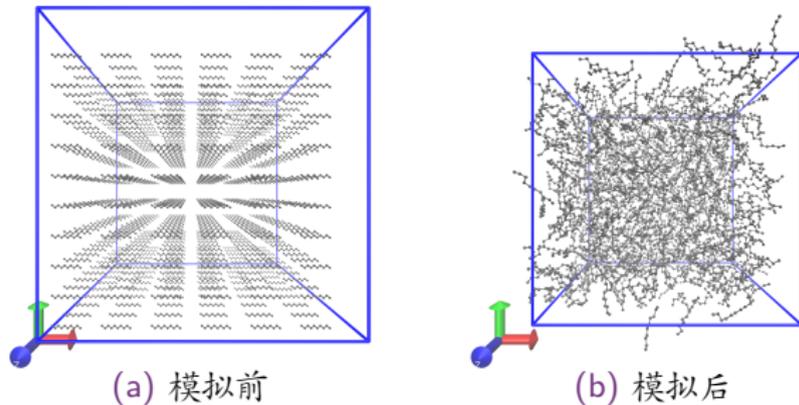


图 6: 正癸烷在 npt 系综下的模拟 ($N = 600$)

- ① 课题背景
- ② 现有研究
- ③ 研究计划
- ④ 计划进度

已完成

- 密度、粘度机器学习模型的构建与训练
- 单组份及煤油密度的力场选择和分子模拟
- 热物性模型优化及高温修正公式

待完成

- 一月：继续调研相关文献，整理已有结果
- 二、三月：粘度、比热容及热导率的分子模拟
- 四、五月：论文撰写

Thanks!