

亚超临界 RP-3 航空煤油的热物性研究

毕业设计答辩

沈扬

清华大学航天航空学院，工程热物理研究所

2021 年 9 月 3 日

指导教师：曹炳阳



- ① 研究背景
- ② C4+ 替代模型构建
- ③ 基于神经网络的替代模型构建方法探究
- ④ 煤油热物性的分子动力学模拟研究
- ⑤ 结论

① 研究背景

研究意义

替代模型

不足与目标

② C4+ 替代模型构建

③ 基于神经网络的替代模型构建方法探究

④ 煤油热物性的分子动力学模拟研究

⑤ 结论

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。

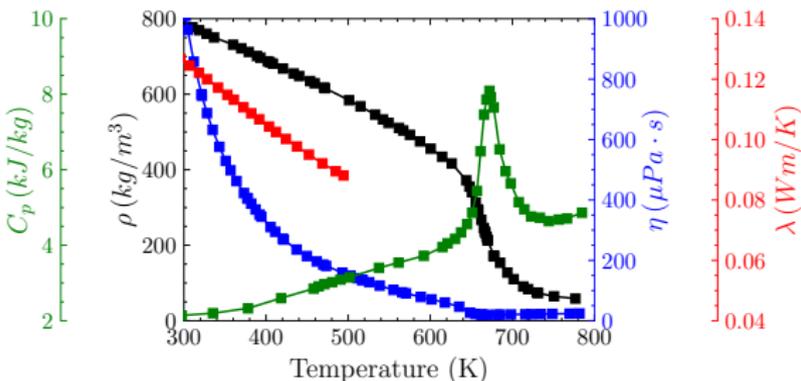


图 1: 3 MPa下 RP-3 航空煤油各热物性随温度的变化

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 ther surrogate of aviation fuel[J]. J Tsinghua Univ(Sci & Technol), 2017.

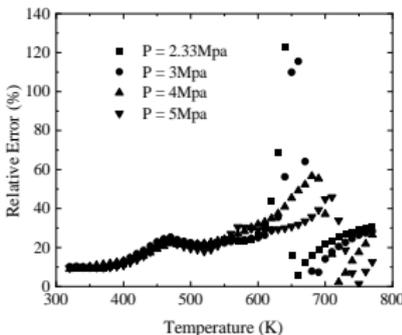
表 2: 航空煤油的几种典型替代模型 (C_n 指模型中的组分数目)

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

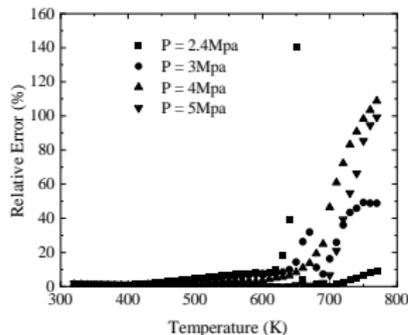
不足与目标

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 2: 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

- 现有替代模型的计算值与实验值误差仍然较大
- 温度较高时模型计算值与实验值不符

本研究的工作目标

- 采用多种手段对航空煤油替代模型的构建方法及其热物性展开研究
- 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 MPa ~ 10 MPa，温度范围 300 K ~ 750 K

1 研究背景

2 C4+ 替代模型构建

基本思路

物性计算方法

模型构建结果

3 基于神经网络的替代模型构建方法探究

4 煤油热物性的分子动力学模拟研究

5 结论

基本流程

表 3: C4 模型组分及摩尔分数

组分	正癸烷	正十二烷	甲基环己烷	正丁苯
摩尔分数	0.2030	0.3810	0.1470	0.2690

- 现有模型计算值与实验值的相对偏差仍然较大：
在 C4 模型所选择的组分上，针对不同物性进行**模型优化**
- 在高温区模型失效：
在优化后模型的基础上，引入**修正**以弥补偏差

模型构建流程

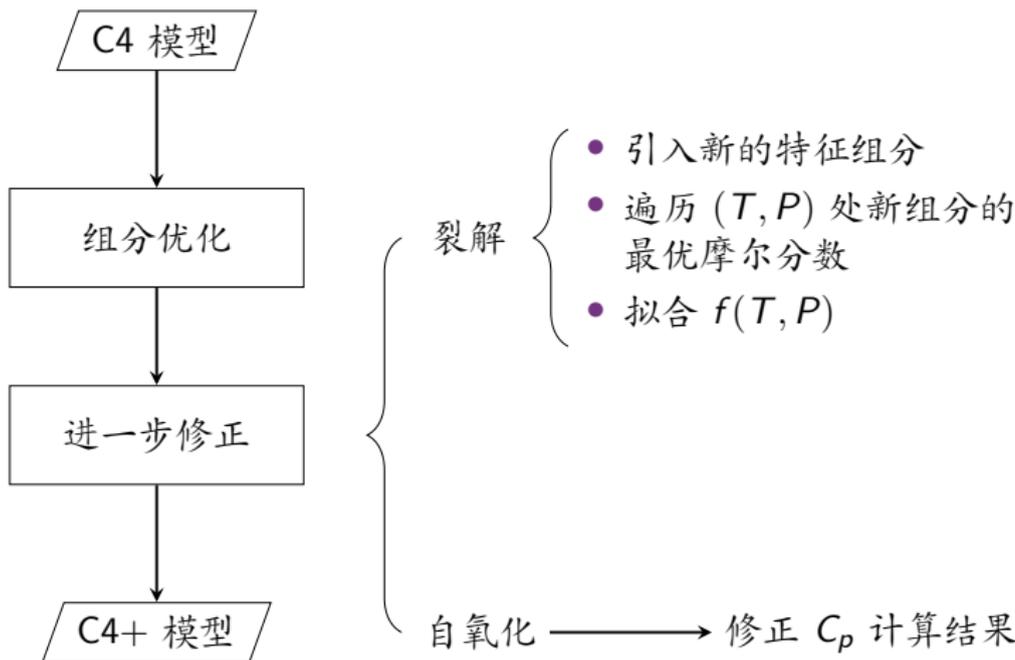


图 3: C4+ 模型构建流程示意图

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

模型优化流程

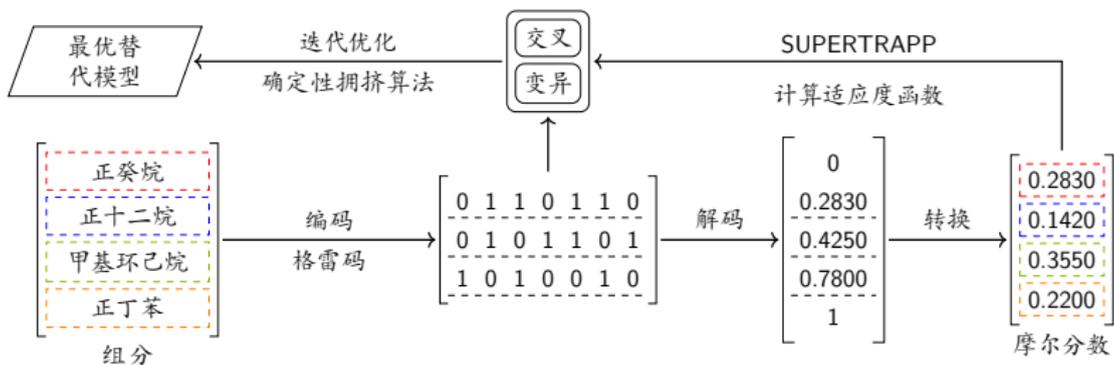


图 4: 基于遗传算法的替代模型优化流程示意图

模型构建结果

密度模型

图 5: 3 MPa下密度计算结果

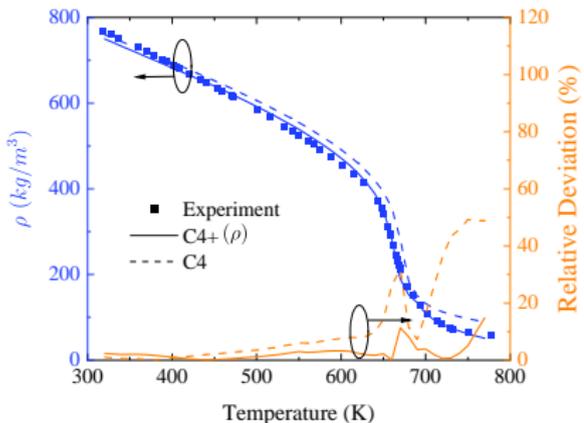


表 5: 计算值与实验值的相对偏差

Surrogate Model	3 MPa		4 MPa		5 MPa	
	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)
C4	25.44	115.54	23.74	56.66	21.35	45.90
C4+	3.70	9.06	3.23	7.46	3.11	7.41

表 4: C4+ 密度模型

组分	摩尔分数
正癸烷	$0.6220 \times (1 - f(T))$
正十二烷	$0.1100 \times (1 - f(T))$
甲基环己烷	0
正丁苯	$0.2680 \times (1 - f(T))$
环戊烷	$f(T)$

$${}^1 f(T) = \max(0.00767T - 5.29, 0)$$

模型构建结果

粘度模型

图 6: 3 MPa下粘度计算结果

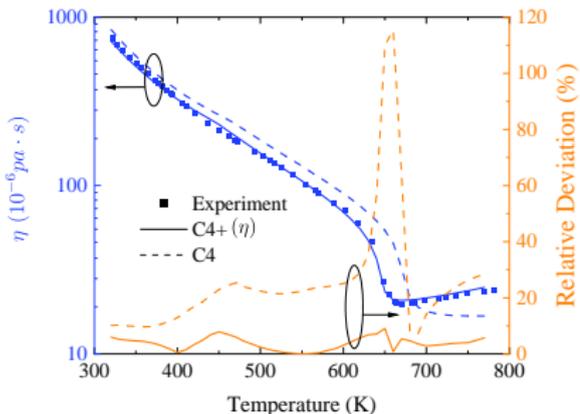


表 6: C4+ 粘度模型

组分	摩尔分数
正癸烷	$0.6320 \times (1 - g(T, P))$
正十二烷	$0.1520 \times (1 - g(T, P))$
甲基环己烷	$0.2160 \times (1 - g(T, P))$
正丁苯	0
正十八烷	$g(T, P)$

$${}^1 g(T, P) = \max(0.0054T - 0.19P - 2.97, 0)$$

表 7: 计算值与实验值的相对偏差

Surrogate Model	3 MPa		4 MPa		5 MPa	
	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)
C4	11.43	49.22	17.56	108.06	10.73	99.25
C4+	2.66	14.83	3.21	14.33	4.07	13.77

模型构建结果

定压比热容模型

图 7: 3 MPa下定压比热容计算结果

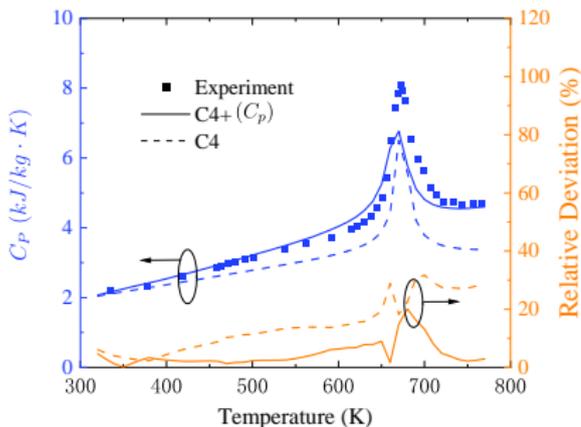


表 9: 计算值与实验值的相对偏差

Surrogate Model	3.02 MPa		4.02 MPa		4.98 MPa		5.98 MPa	
	Ave (%)	Max (%)						
C4	14.38	31.86	14.00	27.96	15.06	28.40	14.86	28.89
C4+	4.61	20.07	2.35	10.24	4.70	2.24	1.65	5.81

表 8: C4+ 比热容模型

组分	摩尔分数 ¹
正癸烷	0.6850
正十二烷	0.2913
甲基环己烷	0.0237
正丁苯	0

¹ 将计算结果乘以 R
 $R = 7.78 \times 10^{-4} T + 0.7104$

模型构建结果

热导率模型

图 8: 3 MPa下热导率计算结果

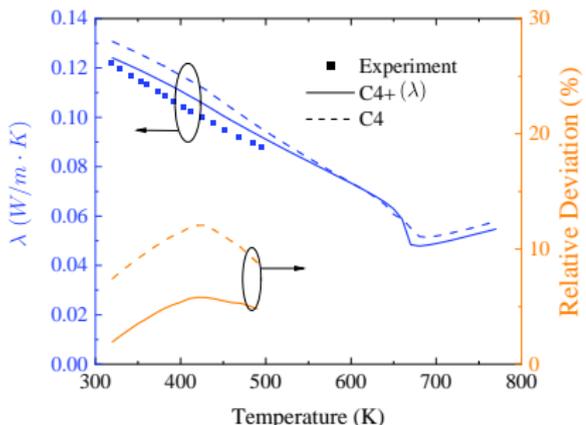


表 10: C4+ 热导率模型

组分	摩尔分数
正癸烷	0.1430
正十二烷	0
甲基环己烷	0
正丁苯	0.8570

表 11: 计算值与实验值的相对偏差

Surrogate Model	3 MPa		4 MPa		5 MPa	
	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)
C4	9.94	12.06	10.05	12.65	10.65	13.34
C4+	4.21	5.80	4.26	6.29	4.76	6.88

模型构建结果

C4+ 替代模型

表 12: C4 模型与 C4+ 模型对比

组分	化学式	摩尔分数					
		C4	C4+				
			ρ	η	C_p^a	λ	
正癸烷	$C_{10}H_{22}$	0.2030	$0.6220 \times (1 - f(T))^b$	$0.6320 \times (1 - g(T, P))^c$	0.6850	0.1430	
正十烷	$C_{12}H_{26}$	0.3810	$0.1100 \times (1 - f(T))$	$0.1520 \times (1 - g(T, P))$	0.2913	0	
甲基环己烷	C_7H_{14}	0.1470	0	$0.2160 \times (1 - g(T, P))$	0.0237	0	
正丁苯	$C_{10}H_{14}$	0.2690	$0.2680 \times (1 - f(T))$	0	0	0.8570	
环戊烷	C_6H_{12}	0	$f(T)$	0	0	0	
正十八烷	$C_{18}H_{38}$	0	0	$g(T, P)$	0	0	

^a Multiply calculated data by $(7.78 \times 10^{-4} T + 0.7104)$

^b $f(T) = \max(0.00767 T - 5.29, 0)$

^c $g(T, P) = \max(0.0054 T - 0.19 P - 2.97, 0)$

模型构建结果

热物性查询接口

```

*****
*           RP-3 Reference Database           *
*           Program RP3thermalor - Version 1.0 *
*
* Scope of application:                       *
*   Temperature Range: 300K - 750K           *
*   Pressure range: 2Mpa - 10 Mpa            *
*
* Included Properties:                       *
*   Density (kg/m^3)                         *
*   Viscosity (μPa.s)                       *
*   Cp (kJ/kg.K)                             *
*   Thermal conductivity (W/m.K)            *
*   Heat sink (kJ/kg)                       *
*
* Based on research sponsored by National Science and *
* Technology Major Project of the Ministry of Science *
* and Technology of China (2017-III-0005-0030) *
*
* All rights reserved.                       *
*****

Please enter property number:

0 Density (kg/m^3)
1 Viscosity (μPa.s)
2 Cp (kJ/kg.K)
3 Thermal conductivity (W/m.K)
4 Heat sink (kJ/kg)

```

图 9: RP-3thermalor V1.0

- 1 研究背景
- 2 C4+ 替代模型构建
- 3 基于神经网络的替代模型构建方法探究
模型构建流程
十组分模型替代结果
RP-3 航空煤油替代结果
- 4 煤油热物性的分子动力学模拟研究
- 5 结论

模型构建流程

输入：物性的实验数据 输出：替代模型

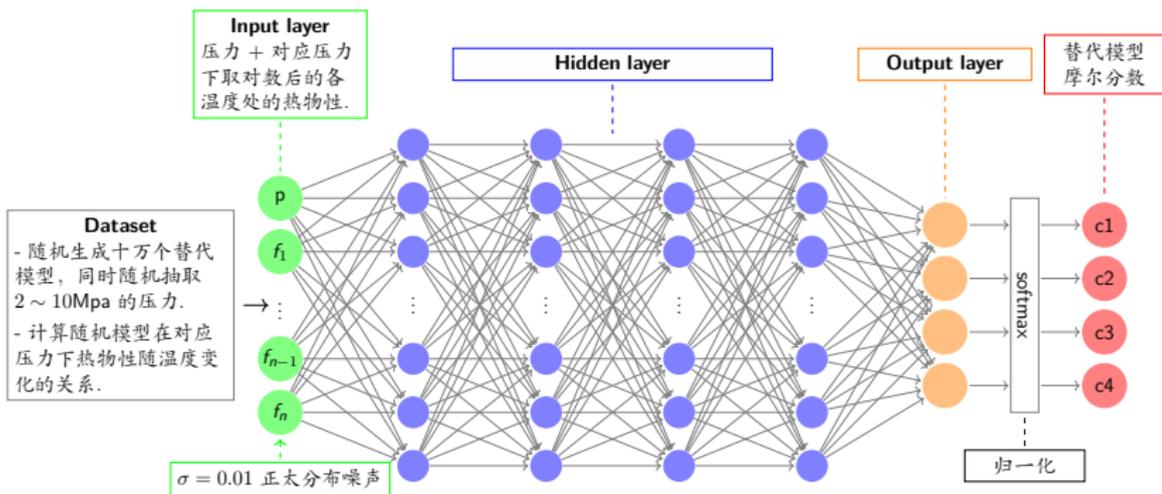
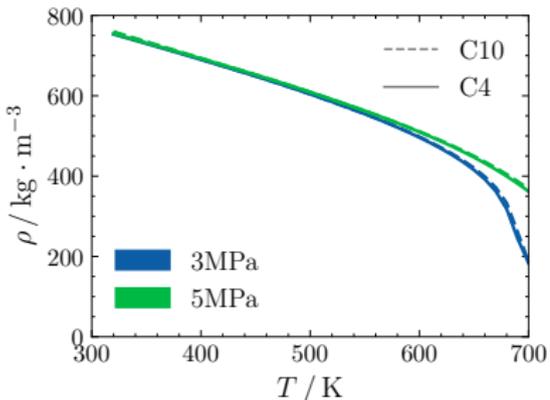


图 10: 基于神经网络 (ANN) 的模型构建流程

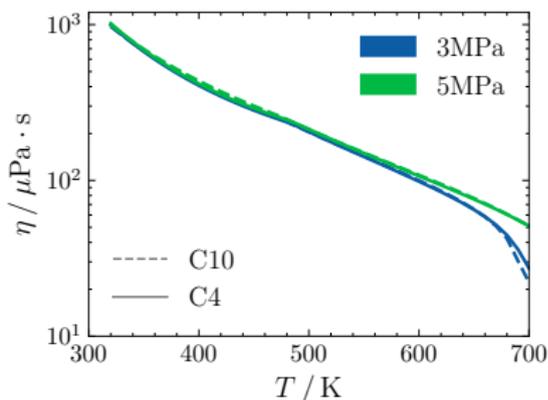
十组分模型替代结果

用四组分构建十组分混合物的替代模型

向 ANN 中输入十组分模型的热物性计算结果，输出对应的四组分替代模型



(a) 密度

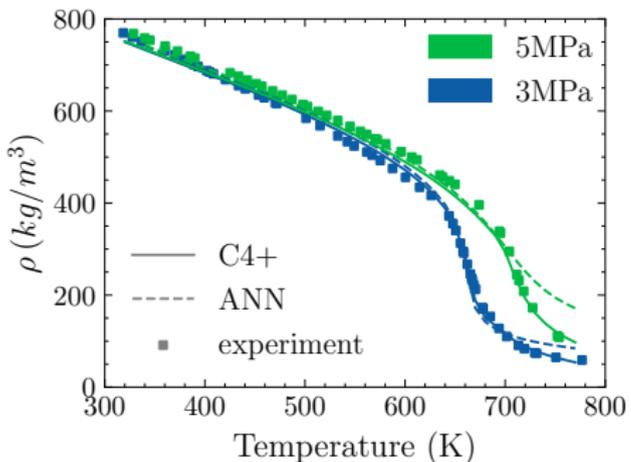


(b) 粘度

图 11: 十组分模型与简化四组分模型计算结果对比

密度模型

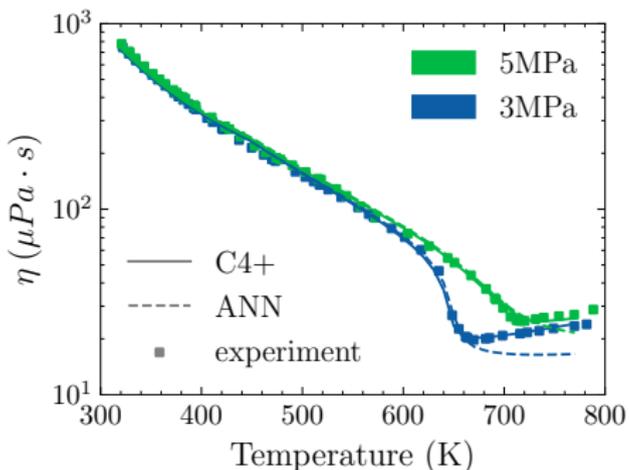
图 12: 密度计算结果



组分	摩尔分数		
	C4	C4+	ANN
正癸烷	0.2030	0.6220	0.3285
正十二烷	0.3810	0.1100	0.2436
甲基环己烷	0.1470	0	0.1723
正丁苯	0.2690	0.2680	0.2556

粘度模型

图 13: 粘度计算结果

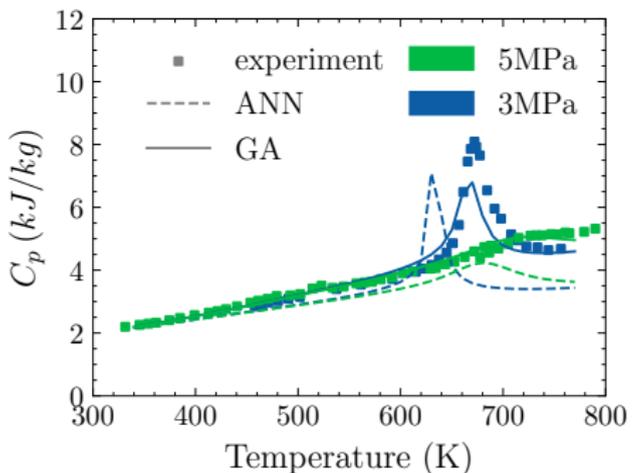


组分	摩尔分数		
	C4	C4+	ANN
正癸烷	0.2030	0.6320	0.5957
正十二烷	0.3810	0.1520	0.1881
甲基环己烷	0.1470	0.2610	0.2106
正丁苯	0.2690	0	0.0056

RP-3 航空煤油替代结果

定压比热容模型

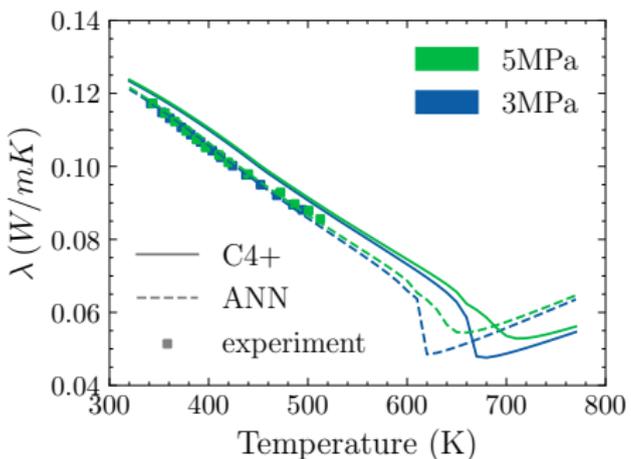
图 14: 定压比热容计算结果



组分	摩尔分数		
	C4	C4+	ANN
正癸烷	0.2030	0.6850	0.3396
正十二烷	0.3810	0.2913	0.2071
甲基环己烷	0.1470	0.0237	0.4453
正丁苯	0.2690	0	0

热导率模型

图 15: 热导率计算结果



组分	摩尔分数		
	C4	C4+	ANN
正癸烷	0.2030	0.1430	0.1160
正十二烷	0.3810	0	0.0517
甲基环己烷	0.1470	0	0.5923
正丁苯	0.2690	0.8570	0.2400

- ① 研究背景
- ② C4+ 替代模型构建
- ③ 基于神经网络的替代模型构建方法探究
- ④ 煤油热物性的分子动力学模拟研究
 - 研究目标
 - 体系建模
 - 正癸烷的密度粘度模拟
 - 优化模型密度粘度模拟

⑤ 结论

煤油热物性的分子动力学模拟

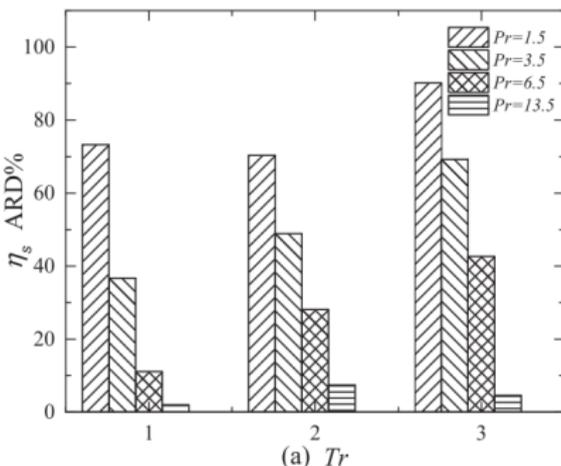


图 16: opls-aa 力场下正十二烷粘度模拟值和实验值的相对偏差³

³Chen C, Jiang X. Transport property prediction and inhomogeneity analysis of supercritical n-Dodecane by molecular dynamics simulation[J]. Fuel, 2019, 244: 48-60.

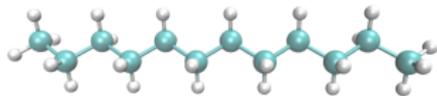
煤油热物性的分子动力学模拟

- 先通过对单组份正癸烷模拟，分析比较计算不同物性的最优力场
- 在比较得出最优分子力场后，对本研究所构建的替代模型进行热物性模拟，对比广义对应态法则的计算结果

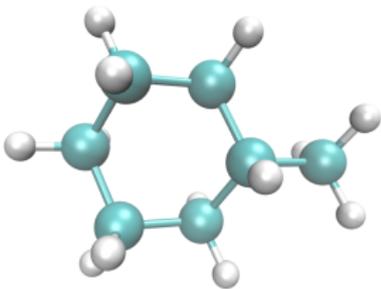
单分子模型构建



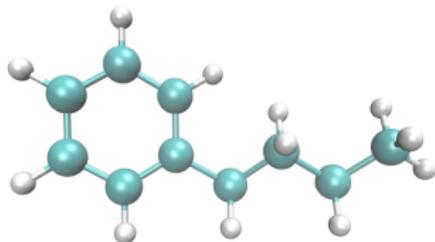
(a) 正癸烷



(b) 正十二烷



(c) 甲基环己烷



(d) 正丁苯

模拟体系构建

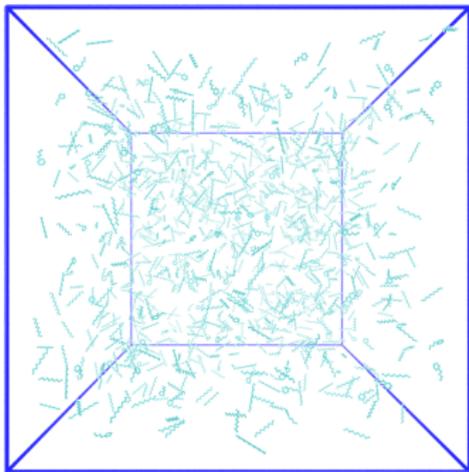


图 17: 正癸烷、正十二烷、以及正定苯构成的模拟系统

正癸烷的密度粘度模拟

密度模拟结果

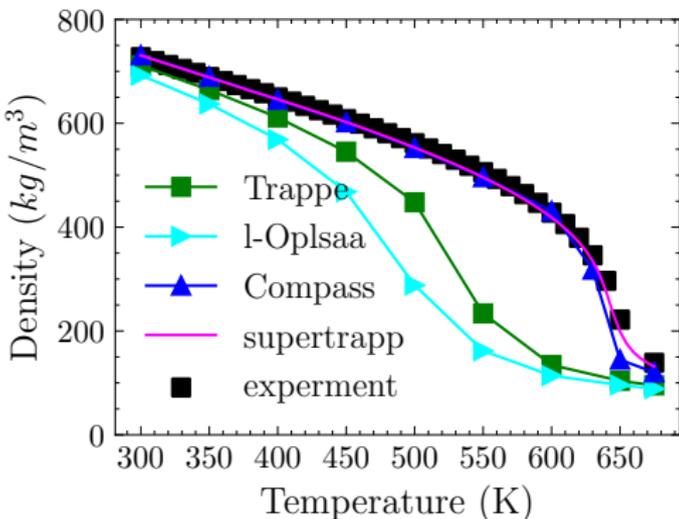
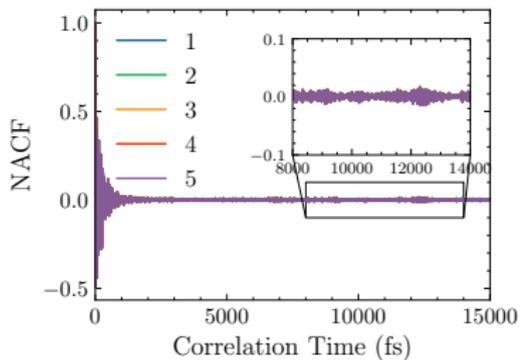


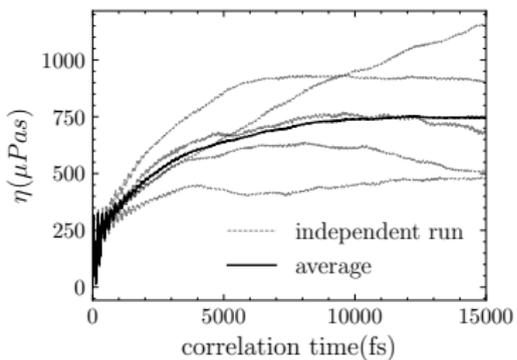
图 18: 3 MPa下不同力场正癸烷密度模拟结果

正癸烷的密度粘度模拟

自相关函数



(a) 压力自相关函数



(b) 五次独立模拟

图 19: 3 MPa下模拟结果

正癸烷的密度粘度模拟

粘度模拟结果

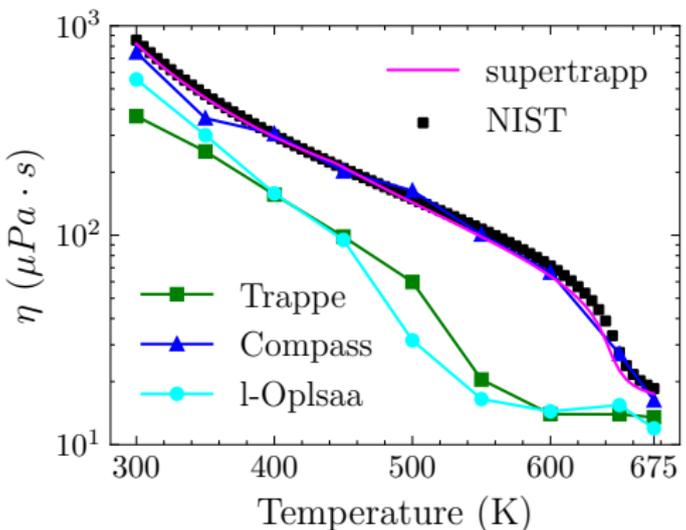


图 20: 3 MPa下不同力场正癸烷的粘度模拟结果

密度模拟结果

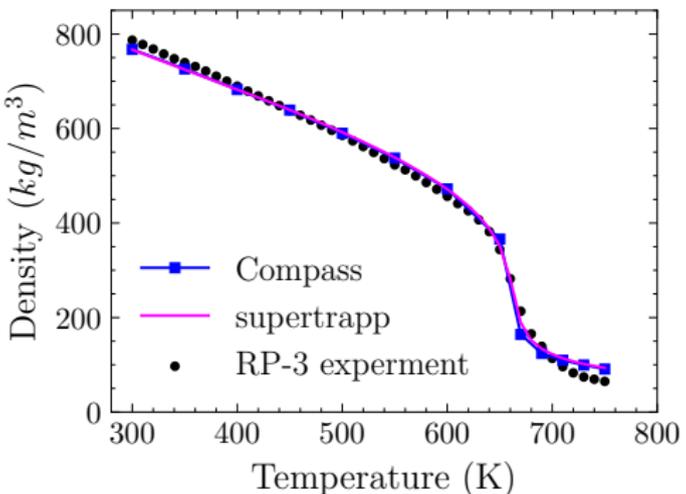


图 21: 3 MPa下不同力场密度优化模型模拟结果

优化模型密度粘度模拟

粘度模拟结果

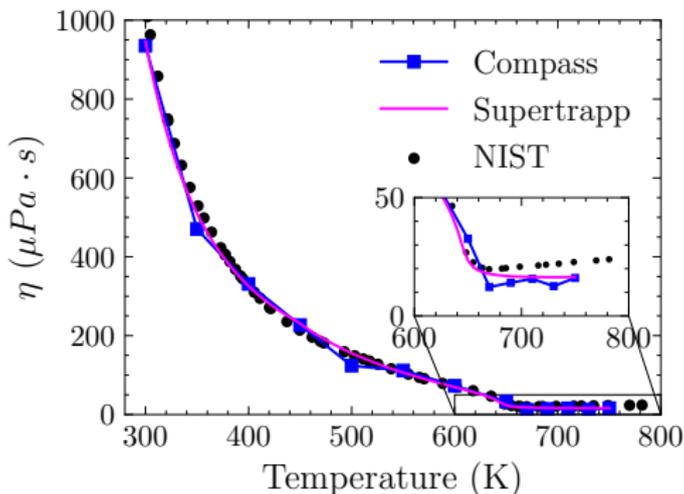


图 22: 3 MPa下不同力场粘度优化模型模拟结果

- ① 研究背景
- ② C4+ 替代模型构建
- ③ 基于神经网络的替代模型构建方法探究
- ④ 煤油热物性的分子动力学模拟研究
- ⑤ 结论

结论

- 基于模型优化和高温修正，构建了 RP-3 航空煤油的热物性替代模型 C4+，结果表明现有模型的预测精度最高，并建立了热物性数据库以及其查询接口
- 提出了基于人工神经网络的模型构建方法，模型构建速度比优化方法高几个量级，适用于快速参数化生成大量替代模型研究其影响因素等，但对于实际实验数据鲁棒性较差
- 比较了 l-ops-aa、trappe、compass 三种分子力场在模拟亚超临界碳氢化合物的热物性上的表现，结果表明 compass 力场和广义对应态法则计算结果基本一致，均适用于计算亚超临界碳氢混合物的热物性

成果

学术论文：

- Shen Y, Liu Y B, Cao B Y. C4+ Surrogate Models for Thermophysical Properties of Aviation Kerosene RP-3 at Supercritical Pressures[J]. Energy & Fuels, 2021.
- 沈扬, 刘源斌, 曹炳阳. 超临界 RP-3 航空煤油热物性替代模型研究 [J]. 工程热物理学报, 2021.

专利：

- 曹炳阳, 沈扬, 刘源斌. 亚超临界 RP-3 航空煤油热物性数据库系统, 案件号: GG21913302A

软件著作权：

- 曹炳阳, 沈扬, 刘源斌. RP-3 航空煤油热物性计算软件 [简称 RP3thermalor], 受理号: 2021R11S0544950

Thanks!