

# 超临界 RP-3 航空煤油热物性替代模型研究

沈扬 刘源斌 曹炳阳

(清华大学航天航空学院, 热科学与动力工程教育部重点实验室, 北京 100084)

**摘要** 为准确预测 RP-3 航空煤油在超临界压力下的热物性, 本文在四组分模型的基础上, 分别基于遗传算法 (GA) 和人工神经网络 (ANN), 提出了两种构建航空煤油替代模型的方法, 并对比了两种方法在预测不同热物性上的性能。关注的热物性包括密度、黏度、比定压热容以及热导率。结果表明对于密度和黏度, 两种方法均能得到高精度的替代模型; 对于比定压热容, GA 构建的模型精度更高, 而 ANN 构建的模型表现反而变差; 对于热导率, 但由于缺乏跨临界区的实验数据, GA 可以通过约束适应度函数使模型仍能准确预测伪临界温度, 而 ANN 的灵活性则较差。

**关键词** 热物性; 航空煤油; 超临界状态; 遗传算法; 神经网络

**中图分类号:** V312 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2022)04-1048-07

## Study on Surrogate Models for Thermophysical Properties of Supercritical Aviation Kerosene RP-3

SHEN Yang LIU Yuan-Bin CAO Bing-Yang

(Key Laboratory for Thermal Science and Power Engineering of Ministry of Education, School of Aerospace Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract** To accurately predict thermophysical properties of aviation kerosene RP-3 at supercritical pressures, we propose two surrogate formulation methodologies for a unitary property based on genetic algorithm (GA) and artificial neural network (ANN), respectively. We compare the performance of the two approaches on different thermophysical properties including density, viscosity, constant-pressure heat capacity, and thermal conductivity. The results indicate that for density and viscosity, both the two methods can formulate accurate surrogate models; For constant-pressure heat capacity, GA can generate better surrogate models whereas the performance of ANN is poor; For the thermal conductivity, due to the lack of experimental data across the trans-critical region, GA can still generate the model which can accurately predict the pseudo-critical temperature by constraining the fitness function, while ANN is less flexible.

**Key words** thermophysical properties; aviation kerosene; supercritical condition; genetic algorithm; neural network

## 0 引言

飞行器在超声速、高超声速状态下的冷却一直是研究人员关注的重点问题。目前应用最广泛的飞行器冷却方式之一是再生冷却循环系统<sup>[1]</sup>, 即在航空煤油进入燃烧室之前, 先将其用作冷却剂吸收机体的热量。在吸热过程中, 随着温度与压力的升高, 燃料往往会经过临界点而达到超临界状态, 其临界点前后的热物性会发生显著的改变<sup>[2]</sup>。燃料在喷注、混合、燃烧等过程所表现的热物性与普通工况下也有着很大的不同。因此, 准确地预测超临界压力下航空煤油的各个热物性, 对于发动机设计、发动机有效热管理方案的提出具有极重要的意义。由

于实际的航空煤油是一种非常复杂的混合物, 由链烷烃、环烷烃、芳香烃等成百上千种成分构成<sup>[3]</sup>, 直接对其进行模拟研究是不现实的。因此, 在实际应用中, 通常采用只包含几种典型组分的简化替代物模型来代替实际的航空煤油。一旦确定了替代模型, 便可以通过广义对应态法则<sup>[4,5]</sup>或者分子动力学模拟<sup>[6,7]</sup>等方法来计算混合物的热物性, 作为实际航空煤油热物性的近似。

由于在研究航空煤油的传热或喷雾特性时, 主要关注的问题是准确地预测其各热物性随温度和压力的变化, 而较少涉及反应机理方面的研究<sup>[2]</sup>, 因

收稿日期: 2021-04-27; 修订日期: 2022-03-22

基金项目: 国家科技重大专项 (No.2017-III-0005-0030)

作者简介: 沈扬 (1998-), 男, 博士生, 主要从事热物性等方面的研究。

通信作者: 曹炳阳, 教授, E-mail: caoby@tsinghua.edu.cn.

此本文构建替代模型的首要目标是提高模型预测不同热物性的精度。以往的替代模型主要是根据与实际航空煤油的组分相似性开发的。如范伟军等<sup>[5]</sup>基于 RP-3 成分分析提出的三组分替代物模型, 裴鑫岩等<sup>[4]</sup>基于物性变化的相似性提出的四组分替代物模型, 以及钟凤权等<sup>[1]</sup>提出的更为复杂的十组分替代物模型等。这类替代模型可以定性地预测实际航空煤油的各种物理化学性质, 并可以用于燃烧等过程的反应分析, 然而却损失了预测特定物性的精度与灵活性。

根据徐可可等<sup>[8]</sup>的比较, 现有的几种典型替代模型虽然可以定性地预测 RP-3 航空煤油在超临界压力下的热物性, 但其预测精度仍有进一步提升的空间。而为不同物性开发不同的替代物模型, 则具有最大程度提高模型的预测精度的潜力<sup>[9]</sup>, 而将不同模型计算的热物性整合成一组数据库后, 可将其用作后续的流体流动和传热分析。因此, 本文分别基于遗传算法和神经网络, 提出了针对不同热物性开发单一替代模型的方法, 并对所提出的两种模型构建方法进行了比较和讨论, 涉及的热物性包括 RP-3 航空煤油的密度、黏度、比定压热容以及热导率。

## 1 模型构建方法

### 1.1 替代模型的组分选择

要开发航空煤油的替代模型, 首先要确定的替代模型中包含的基础组分。徐可可等<sup>[8]</sup>比较了典型的几种替代物模型在超临界压力下预测 RP-3 航空煤油各种热物性的表现, 其研究结果表明 Mawid 等提出的四组分模型<sup>[10]</sup>(以下简称 C4 模型, 组分如表 1 所示) 在各种替代物模型之中表现最好。该模型包含了链烷烃、环烷烃和苯类物质, 与 RP-3 航空煤油的实际组成较为相似, 可以准确地预测 RP-3 在超临界压力下的拟临界温度, 且可以较好地定性预测 RP-3 的热物性变化。因此本文的模型构建过程采用同样的四种候选组分。

表 1 C4 模型组分及摩尔分数

组分	化学式	摩尔分数
正癸烷	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	0.2030
正十二烷	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	0.3810
甲基环己烷	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub>	0.1470
正丁苯	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	0.2690

### 1.2 广义对应态法则

对应态法则<sup>[11]</sup>是基于流体的热物性在用临界参数无量纲化后表现出的相似性, 通过参考流体来

计算未知流体热物性的方法, 其一般形式可表示为:

$$f(p_r, V_r, T_r) = 0, \quad (1)$$

其中,  $p_r$ 、 $V_r$ 、 $T_r$  分别为压力、比体积、温度与相应临界参数的比值。然而由于只有少部分球型、弱极性的分子近似满足对应态法则, 针对大部分实际流体传统的两参数对应态法则无法再进行准确地用于计算其热物性。因此广义对应态法则引入了一个新的参数偏心因子  $\omega$ , 用以反映分子极性等的影 响, 不同分子的偏心因子可以通过实验计算获得。针对多组分混合物, 可以通过相应的混合法则用一个假想的纯流体对其进行近似, 其具体的计算原理及方法可参考文献<sup>[12]</sup>,<sup>[13]</sup>。针对输运参数的计算方法, 可参考文献<sup>[14]</sup>,<sup>[15]</sup>。

广义对应态法则被广泛应用于计算超临界流体的热物性, 本文通过调用 NIST 开发的 SUPERTRAPP 程序<sup>[16]</sup>来计算给定模型的热物性, 该程序包含了大部分碳氢燃料的临界参数, 并采用广义对应态法则计算混合物的热力学性质以及输运性质。

### 1.3 遗传算法

遗传算法是一种模拟生物进化的启发式优化算法<sup>[17]</sup>, 在随机产生初始种群后, 逐代按照适应度 (fitness) 来选择好的个体, 淘汰掉坏的个体, 同时通过交叉重组和变异等方式来产生出新的个体, 在若干次迭代后, 种群逐渐收敛到近似最优的解。本文在模型优化过程中采用了 De Jong 提出的确定性拥挤算法<sup>[18]</sup>对传统的遗传算法进行改进, 其被证明在各种复杂度的问题上表现都较好<sup>[19]</sup>, 可有效地增强算法的搜索能力。

在本文热物性替代模型的优化过程中, 算法的优化目标是 最小化替代模型计算值和实验值之间的相对偏差。在随机初始化种群后, 通过 SUPERTRAPP 计算给定替代模型的热物性。适应度函数被定义为不同温度、压力处对应热物性的模型计算值和实验值相对偏差之和的倒数。随着迭代的进行, 种群中适应度较高的个体被保留下来, 模型计算值与实验值的偏差逐渐减小, 模型最终收敛到对应热物性的各组分最优摩尔分数。其中 RP-3 航空煤油热物性的实验数据来自文献<sup>[20]</sup>~<sup>[23]</sup>。

### 1.4 神经网络

人工神经网络 (ANN) 是一种模仿生物神经结构的数学模型, 理论上其可以对任意函数进行拟合和近似。由于其可以较好地处理非线性问题, 因此 ANN 被广泛应用于各种分类以及回归问题<sup>[24,25]</sup>。一般的多层 ANN 由三部分构成, 即输入层、隐藏层

和输出层,每层由若干个节点构成。训练后的 ANN 模型可以根据所学习的训练集,构建输入和输出之间的映射。

在本文的 ANN 模型中,输入为由压力及对应压力下各温度处的物性构成的向量。由于在超临界压力下煤油的物性随温度变化较大,因此为减小物性间的绝对差异,使其分布更加平稳,本文对实际输入 ANN 的物性做了取对数处理。输出层为由四个节点构成的向量,分别代表替代模型中四种组分的摩尔分数,在通过 softmax 函数归一化后,得到最终输出的替代模型。

用于训练 ANN 模型的数据集用如下方式得到:随机生成 2~10 MPa 的压力及四种组分的摩尔分数,并调用 SUPERTRAPP 计算对应压力下对应模型不同温度处的物性。将对应的压力和物性输入到 ANN 中,即可求得由 ANN 输出的替代模型摩尔分数和实际的摩尔分数之间的相对偏差。根据该偏差值,即可通过反向传播算法更新各层的权重与偏置。迭代若干步后,误差不再降低,模型达到收敛。将实际航空煤油测得的各压力下不同温度处的物性输入到训练后的 ANN 中,即可输出相应的热物性替代模型;将各压力下输出的摩尔分数取平均后,即可得到最终的替代模型。随着测得的实验数据的增加,模型的可靠性与适用性也随之增加。

由于实际航空煤油的热物性必然和模型计算值存在一定的差别,而 ANN 需要在训练集和预测集独立同分布的条件下表现才能较好,因此为增强模型鲁棒性,对输入数据施加高斯分布噪声。同时在 ANN 的每一层后执行批规范化 (Batch Normalization)<sup>[26]</sup>,以进一步增强模型的稳定性和泛化能力。

## 2 结果与讨论

### 2.1 密度

表 2 为分别用两种方法构建得到的密度模型,从结果可以看出用 GA 和 ANN 构建的模型(以下简称 GA 模型和 ANN 模型)中各组分摩尔分数有较大的差异。相比于原有的 C4 模型,GA 模型中正癸烷的比例大幅上升,而甲基环己烷的比例变为 0。这说明正癸烷的物性变化规律和 RP-3 航空煤油有较大的相似性,这和徐可可等<sup>[8]</sup>的分析结果相一致,表明正癸烷也可作为 RP-3 航空煤油的一种单一组分替代模型。而 ANN 模型与 C4 模型的差异并不大,这一方面表明了 C4 模型本身是一种 RP-3 航空煤油较好的近似;另一方面,也说明了实际航空煤油在超临界压力下的密度的变化规律较易近似,密度最优替代模型并不唯一。

表 2 密度模型构建结果

Table 2 Comparisons between C4 surrogate model and surrogate models formulated for density based on GA and ANN

组分	摩尔分数		
	C4	GA	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

图 1 为 3 MPa 下各模型的密度计算结果和实验值的对比,可以看到整体上,三个模型密度计算值随温度的变化规律与实验值均较为接近,但 GA 模型和 ANN 模型的计算结果与实验值更为吻合,尤其是在跨临界区域。然而,在温度较高时 ( $T > 690$  K),各模型的计算值与实验值的相对偏差明显增大,计算值始终高于实验值,但各模型的计算结果趋于一致。这很可能由于 RP-3 航空煤油在温度较高时已经发生了裂解,生成了密度较低的成分,导致其整体密度降低。

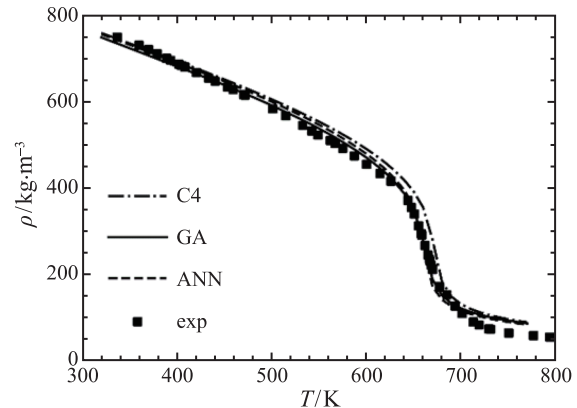


图 1 3 MPa 下密度的各模型计算结果与实验值对比

Fig. 1 Comparisons of density calculated using different surrogate models with experimental data at 3 MPa

图 2 为 5 MPa 下各模型预测的密度值和实验值的对比,可以看到随着压力的增加,煤油密度在跨临界区域的变化变缓,三个模型的计算结果间的差异也相应减小。然而同样是在  $T > 690$  K 后,各模型的计算值和实验值又出现了明显的差别,计算值始终高于实验数据,且偏差比 3 MPa 时更加明显,这种差异同样可能是由于高温裂解所引起。有关高温区计算值和实验值之间的偏差,值得进一步地讨论与分析。

### 2.2 黏度

表 3 为分别通过 GA 和 ANN 构建的黏度模型

的各组分的摩尔分数与原始 C4 模型的对比。针对黏度, 新构建的两个模型各组分的摩尔分数较为接近, 与 C4 模型均有较大的不同。这说明相比与密度, 航空煤油在超临界压力下的黏度变化规律更难近似, 其替代模型的最优解较为单一。在新构建的模型中, 正癸烷仍然占据了较大的比例, 这也说明了 RP-3 航空煤油的热物性变化规律与正癸烷有较大的相似性。

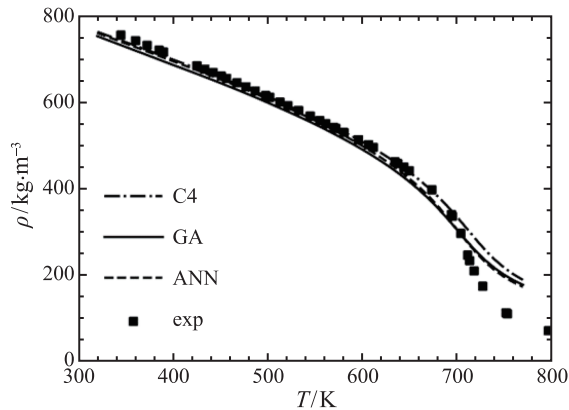


图 2 5 MPa 下密度的各模型计算结果与实验值对比  
Fig. 2 Comparisons of density calculated using different surrogate models with experimental data at 5 MPa

表 3 黏度模型构建结果

Table 3 Comparisons between C4 surrogate model and surrogate models formulated for viscosity based on GA and ANN

组分	摩尔分数		
	C4	GA	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	0.2160	0.2106
正丁苯	0.2690	0	0.0056

图 3 为 3 MPa 下各模型计算得到的黏度值和 RP-3 航空煤油实验值的对比, 可以看到 GA 模型和 ANN 模型的计算结果与实验值基本重合, 精度较 C4 模型有了较大程度的提高, 尤其是新构建的两个模型可以准确地预测拟临界温度附近的黏度变化, 这进一步说明了两种模型构建方法的适用性。同时也可以看到, 在  $T > 660$  K 时, 各模型黏度计算值与实验值的偏差开始增大, 甚至出现了趋势上的不同, 黏度的实验值随着温度的增加而增大, 而计算值却随着温度的升高而降低。

图 4 为 5 MPa 下各模型计算的黏度值和实验值的对比, 随着压力的增加, 黏度在跨临界区域的变化变缓, 但新构建的两个模型计算值与实验值的

一致程度仍高于 C4 模型。然而随着温度的升高, 各模型计算值和实验值的偏差又开始增大。

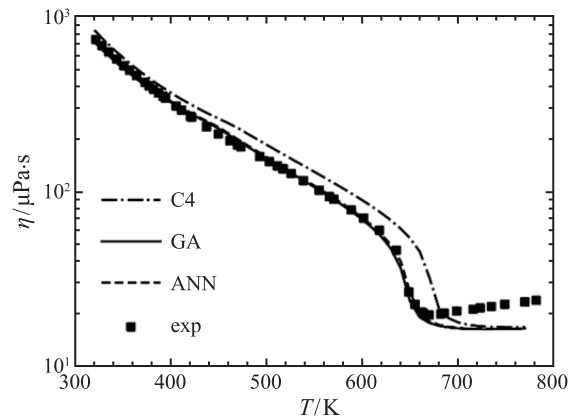


图 3 3 MPa 下黏度的各模型计算结果与实验值对比  
Fig. 3 Comparisons of density calculated using different surrogate models with experimental data at 3 MPa

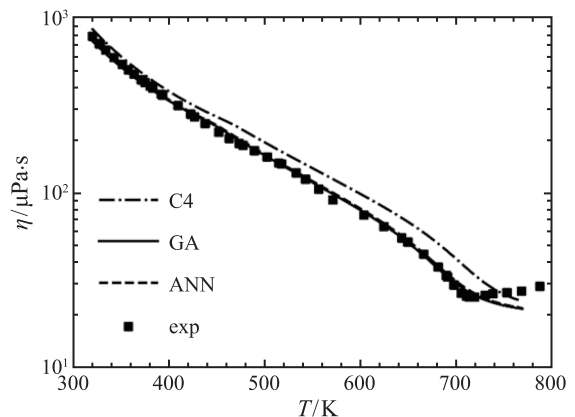


图 4 5 MPa 下黏度的各模型计算结果与实验值对比  
Fig. 4 Comparisons of viscosity calculated using different surrogate models with experimental data at 5 MPa

### 2.3 比定压热容

表 4 为采用 GA 和 ANN 方法构建的比定压热容替代模型。可以看到 GA 模型和 ANN 模型中各组分的摩尔分数相差较大, 这很可能是由于模型计

表 4 比定压热容模型构建结果

Table 4 Comparisons between C4 surrogate model and surrogate models formulated for constant-pressure heat capacity based on GA and ANN

组分	摩尔分数		
	C4	GA	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

算值和实验值偏差较为明显, ANN 因鲁棒性较差无法准确构建替代模型所导致的。

图 5 为 3 MPa 下各模型预测的比定压热容与实验值的对比, 从结果可以看出 GA 所构建模型的计算值在整体上与实验值更加接近, 但其峰值比热容相对于 C4 模型有所降低, 这主要是由于算法的优化目标是最小化整体相对误差之和。同时可以看到, 各模型计算值均始终低于实验值, 且这种差异随着温度的升高而持续增大, 在伪临界温度之后, 模型计算值和实验值甚至出现了趋势上的差异。裴鑫岩等<sup>[4]</sup>讨论了计算值偏低的原因, 认为其主要是由自氧化过程以及高温裂解所造成的。由于替代模型只能计算理想状态下的物性参数, 因此这种偏差无法通过模型优化来消除。由于 ANN 的鲁棒性较差, 无法很好地处理预测集与训练集差异较大的问题, 因此所构建的模型无法准确预测伪临界温度, 精度反而下降。

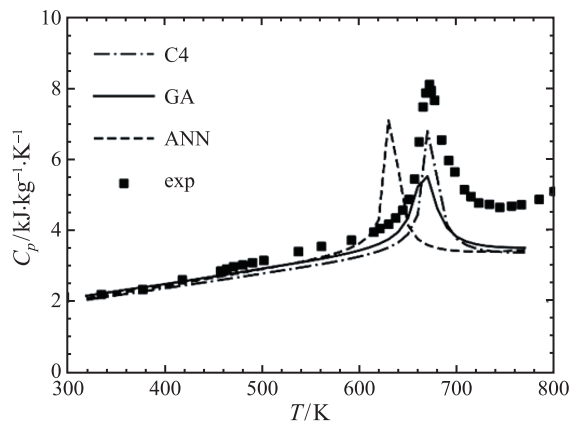


图 5 3 MPa 下比定压热容的各模型计算结果与实验值对比  
Fig. 5 Comparisons of constant-pressure heat capacity calculated using different surrogate models with experimental data at 3 MPa

图 6 为 5 MPa 下各模型预测的比定压热容和实验值的对比, 可以看到随着压力的增加, 伪临界温度附近比热容的反常变化减小, 随温度地变化更加平缓。其中 GA 模型和 C4 模型的计算结果基本一致, 而 ANN 模型则错误地预测了伪临界温度的位置。各模型计算结果在 420 K 后均始终低于实验值, 且偏差随着温度的增加而增大。在伪临界温度之后, 比定压热容的实验值随着温度的升高继续升高, 而模型计算值则下降。

## 2.4 热导率

由于实验数据有限, 用于 GA 优化以及 ANN 训练的实验数据只采用  $T < 500$  K 的热导率数值。为使得模型仍能够准确预测伪临界点的位置, 在 GA

优化的过程对适应度函数加以限制, 一旦模型预测的伪临界温度与实验数据不符, 就将其设置为 0。表 5 为各模型之间的对比, 可以看到此时 GA 模型各组分的摩尔分数与之前优化的结果差别较大, 正癸烷不再占据最高的比例。这很可能是由于缺乏更宽温度范围内的实验数据, 导致优化过程自由度过大引起的。

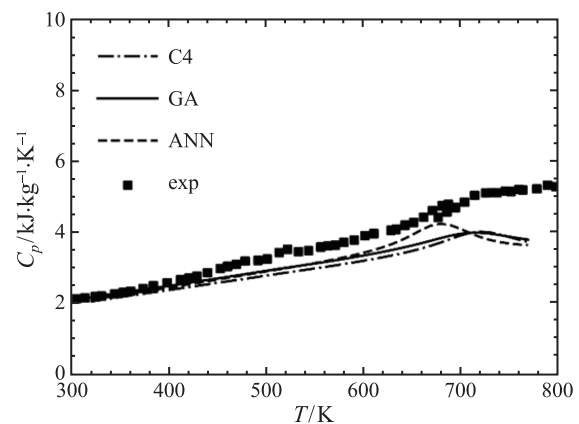


图 6 5 MPa 下比定压热容的各模型计算结果与实验值对比  
Fig. 6 Comparisons of constant-pressure heat capacity calculated using different surrogate models with experimental data at 5 MPa

表 5 热导率模型构建结果

Table 5 Comparisons between C4 surrogate model and surrogate models formulated for thermal conductivity based on GA and ANN

组分	摩尔分数		
	C4	GA	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

图 7 为 3 MPa 下各模型预测热导率的结果与实验值的对比, 可以看到 GA 模型和 ANN 模型的计算结果均与实验值更加吻合。虽然 ANN 模型的计算结果与实验值更加接近, 但由于 ANN 的训练过程难以像 GA 一样对模型预测的伪临界温度进行限制, 因此 ANN 模型无法准确地预测 RP-3 航空煤油的伪临界点。这说明针对在实际航空煤油的替代模型构建过程中, GA 方法具有更高的灵活性。

图 8 为 5 MPa 下各模型预测的热导率与实验值对比, 可以看到在伪临界温度之前, 热导率在不同压力下的差异很小, 因此这也导致了模型构建过程中的自由度过大。从结果可以看到 GA 模型和 ANN 模型的计算值与实验值更加接近, 但 ANN 模

型同样会低估实际 RP-3 航空煤油的伪临界温度。

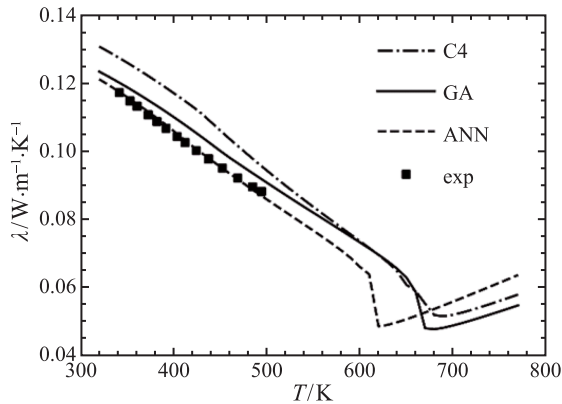


图 7 3 MPa 下热导率的各模型计算结果与实验值对比

Fig. 7 Comparisons of thermal conductivity calculated using different surrogate models with experimental data at 3 MPa

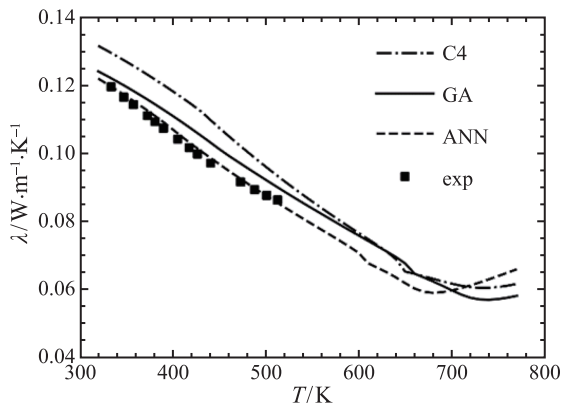


图 8 5 MPa 下热导率的各模型计算值与实验值对比

Fig. 8 Comparisons of thermal conductivity calculated using different surrogate models with experimental data at 5 MPa

### 3 结 论

本文分别基于遗传算法和神经网络, 提出了两种针对航空煤油单一热物性构建替代物模型的方法。针对超临界压力下 RP-3 航空煤油的密度、黏度、比定压热容以及热导率, 在 C4 模型的基础上通过两种方法分别构建了新的替代模型, 并将模型计算值与实验值进行了对比。

结果表明针对密度和黏度, 两种方法均能构建高精度的替代模型; 对于比定压热容, 遗传算法能够构建更优的模型, 神经网络由于泛化能力较差, 其构建模型的预测精度反而不如原始模型, 且无法准确预测不同压力下的煤油伪临界温度; 针对热导率, 由于目前实验数据有限, 只针对  $T < 500$  K 的实验数据进行了模型构建, 其中遗传算法可以通过约束适应度函数, 可以使得模型在提高精度的同时仍能准确预测伪临界温度, 而神经网络则较难对其

训练过程进行控制。总体而言, 基于遗传算法的模型构建方法更加稳定、灵活, 更适合用于实际航空煤油热物性替代模型的构建。

### 参 考 文 献

- [1] ZHONG Fengquan, FAN Xuejun, YU Gong et al. Heat Transfer of Aviation Kerosene at Supercritical Conditions [J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2009, 23(3): 543–550
- [2] ZHENG Zhaolei, YANG Zhanfei. Numerical Simulation of the Influence of Environmental and Jet Parameters on Supercritical Injection [J]. Applied Thermal Engineering, 2017, 127: 925–932
- [3] JIANG Rongpei, LIU Guozhu, ZHANG Xiangwen. Thermal Cracking of Hydrocarbon Aviation Fuels in Regenerative Cooling Microchannels [J]. Energy & Fuels, 2013, 27(5): 2563–2577
- [4] 裴鑫岩, 侯凌云. 不同组分对航空煤油物性替代模型的影响 [J]. 清华大学学报 (自然科学版), 2017, 57(7): 774–779  
PEI Xinyan, HOU Lingyun. Effect of Different Species on Physical Properties for the Surrogate of Aviation Fuel [J]. Journal of Tsinghua University (Science and Technology), 2017, 57(7): 774–779
- [5] 范学军, 俞刚. 大庆 RP-3 航空煤油热物性分析 [J]. 推进技术, 2006, 27(2): 187–192  
FAN Xuejun, YU Gang. Analysis of Thermophysical Properties of Daqing RP-3 Aviation Kerosene [J]. Journal of Propulsion Technology, 2006, 27(2): 187–192
- [6] YANG Xueming, FENG Yiyu, XU Jiangxin et al. Numerical Study on Transport Properties of the Working Mixtures for Coal Supercritical Water Gasification Based Power Generation Systems [J]. Applied Thermal Engineering, 2019, 162: 114228
- [7] LIU Yuanbin, CAO Bingyang. Thermodynamic Models for  $H_2O-CO_2-H_2$  Mixtures in Near-Critical and Supercritical Regions of Water [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2020, 45(7): 4297–4304
- [8] XU Keke, MENG Hua. Analyses of Surrogate Models for Calculating Thermophysical Properties of Aviation Kerosene RP-3 at Supercritical Pressures [J]. Science China, 2015, 58(3): 510–518
- [9] SHEN Yang, LIU Yuanbin, CAO Bingyang. C4+ Surrogate Models for Thermophysical Properties of Aviation Kerosene RP-3 at Supercritical Pressures [J]. Energy & Fuels, 2021, 35(9): 7858–7865
- [10] Mawid M A, Park T W, Sekar B et al. Development of Detailed Chemical Kinetic Mechanisms for Ignition/Oxidation of JP-8/Jet-A/JP-7 Fuels [C]//ASME Turbo Expo 2003, Collocated with the 2003 International Joint Power Generation Conference. US: American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, 2003: 613–624
- [11] Leland T W, Chappellear P S. THE Corresponding States Principle—A Review of Current Theory and Practice [J]. Industrial & Engineering Chemistry, 1968, 60(7): 15–43
- [12] Fisher G D, Leland T W. Corresponding States Principle Using Shape Factors [J]. Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals, 1970, 9(4): 537–544
- [13] Huber M L, Ely J F. A Predictive Extended Corresponding States Model for Pure and Mixed Refrigerants Including

- an Equation of State for R134a [J]. *International Journal of Refrigeration*, 1994, 17(1): 18–31
- [14] Ely J F, Hanley H. Prediction of Transport Properties. 1. Viscosity of Fluids and Mixtures [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 1981, 20(4): 323–332
- [15] Ely J F, Hanley H. Prediction of Transport Properties. 2. Thermal Conductivity of Pure Fluids and Mixtures [J]. *Ind.eng.chem.fundam*, 1983, 22(1): 90–97
- [16] Huber M L. NIST Thermophysical Properties of Hydrocarbon Mixtures Database (Supertrapp), Version 3.2 [R]. Gaithersburg, US: National Institute of Standards and Technology, 2003: 1–40
- [17] Holland J H. Genetic Algorithms[J]. *Scientific American*, 1992, 267(1): 66–72
- [18] De Jong, K. A. Analysis of the Behavior of a Class of Genetic Adaptive Systems [D]. Ann Arbor: University of Michigan: 1975
- [19] Mahfoud S W. A Comparison of Parallel and Sequential Niching Methods [C]// *International Conference on Genetic Algorithms*, 1995. San Francisco: Morgan Kaufmann, 1995: 136–145
- [20] DENG Hongwei, ZHANG Chunben, Xu Guoqiang et al. Density Measurements of Endothermic Hydrocarbon Fuel at Sub- and Supercritical Conditions [J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2011, 56(6): 2980–2986
- [21] DENG Hongwei, ZHANG Chunben, Xu Guoqiang et al. Viscosity Measurements of Endothermic Hydrocarbon Fuel from (298 to 788) K under Supercritical Pressure Conditions [J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2012, 57(2): 358–365
- [22] DENG Hongwei, ZHU Kaiwen, XU Guoqiang et al. Isobaric Specific Heat Capacity Measurement for Kerosene RP-3 in the Near-Critical and Supercritical Regions [J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2011, 57(2): 263–268
- [23] JIA Zhouxia, XU Guoqiang, DENG Hongwei et al. Thermal-Conductivity Measurements of Aviation Kerosene RP-3 from (285 to 513) K at Sub- and Supercritical Pressures [J]. *International Journal of Thermophysics*, 2015, 36(4): 620–632
- [24] LIU Yuanbin, HONG Weixiang, CAO Bingyang. Machine Learning for Predicting Thermodynamic Properties of Pure Fluids and Their Mixtures [J]. *Energy*, 2019, 188: 116091
- [25] LIU Yuanbin, YANG Jiayue, XIN Gongming et al. Machine Learning Interatomic Potential Developed for Molecular Simulations on Thermal Properties of  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2020, 153(14): 144501
- [26] Ioffe S, Szegedy C. Batch Normalization: Accelerating Deep Network Training by Reducing Internal Covariate Shift [C]// *International Conference on Machine Learning*. Breckenridge: PMLR, 2015: 448–456