CSTAM 2012-B03-0280

RP-3 煤油热物性替代模型研究

程迪，王新竹，范学军

中国科学院力学研究所高温气体动力学重点实验室

中国科学院高超声速科技中心

第五届高超声速科技学术会议

2012 年 12 月 11-14 日 广西・桂林

Copyright © 2012 版权所有 中国力学学会
地址: 北京市北四环西路 15 号　邮政编码:100190　Address: No.15 Beisihuanxi Road, Beijing 100190

CSTAM-2012-B03-0280

RP-3 煤油热物性替代模型研究

程迪[1]，王新竹[1]，范学军[1,2]

（1 中国科学院力学研究所高温气体动力学重点实验室，北京海淀区 100190）

（2 中国科学院高超声速科技中心，北京海淀区 100190）

摘要 本文针对研究超临界碳氢燃料在主动冷却超燃冲压发动机中对流换热关系的需要，依据误差传递的基本理论，开发了一套煤油热物性替代组分最优化方法，综合考虑了煤油的批次误差、计算软件的计算误差和实验误差，并根据现有的密度、热容、粘性、热导率和临界点数据，编写了基于 MATLAB 和 SUPERTRAPP 的软件，提出了一个五组分煤油热物性替代模型，提高了预测主动冷却燃烧室出口油温的可靠性。

关键词 超临界；碳氢燃料；热物性替代模型

引言

在主动冷却超燃冲压发动机的研究过程中，煤油的热物性准确与否，对分析对流换热有较大的影响。但是由于煤油是复杂的混合物，若用单一流体替代，误差太大；若用分析所得所有组分进行替代，计算代价太大。因而有必要开发合理的替代模型。而由于针对的是主动冷却研究，本文研究的是针对传热的煤油的热物性替代模型。

现在国内常用的是基于 Dagaut 等人开发的三组分模型[1]修改而来的模型[2]，但是 Dagaut 的模型最初是针对 Jet A-1 燃料开发的化学替代模型，而且我组在使用过程中发现其预测主动冷却燃烧室出口油温偏高。

国外开发的替代模型较多的是化学替代模型[1,3]，做物理替代主要是美国的 NIST 的 Huber 等人，他们用自己开发的加权最优化方法拟合了 Jet A, JP-8 和 S-8 的替代模型，采用的是基于 REFPROP[4] 的 Thermodata Engine[5] 软件平台，综合考虑了密度、热容、蒸馏曲线、声速等实验数据[6,7,8,9,10]。但是他们的方法有所欠缺的地方是主要针对亚临界物性，同时他们是从做状态方程的角度而不是做对流换热角度选取拟合权重，没有考虑输运特性，而且对误差传递关系考虑不足。

本文从对流换热关系出发，采用误差传递的基本理论，推导了权重选取的基本依据；同时对现有关于 RP-3 的热物性实验数据进行了整理分析，得到了煤油的批次误差和实验误差的定性数值；然后针对热物性计算软件的计算误差进行了分析；最后基于 MATLAB®最优化工具包和 SUPERTRAPP[11] 热物性计算软件开发了拟合程序，利用收集的热物性实验数据提出了一个五组分的煤油热物性替代模型。针对煤油主动冷却燃烧室出口油温的计算显示，与实验值更加接近。

1 拟合理论与目标函数

替代模型的拟合在数学上是一个多目标优化问题，对于多目标优化问题，最简单的处理方式就是加权重，把多目标化为单目标问题来解决。NIST 的 Huber 等人也是这么做的[6]，不过他们关于权重的选取有任意性，只针对热力学性质给出了一个定性权重，既没有考虑输运性质，又没有根据实验数据误差来选取权重。

本文拟合采用的目标函数如下

$$
\begin{aligned}
F(\mathbf{x}) = {} & W_\rho \times \sum_{(P_E,T_E)\in E_\rho} \left(\frac{\rho_{calc}(P_E,T_E,\mathbf{x})-\rho_E}{\rho_E}\right)^2 \\
& + W_{c_p} \times \sum_{(P_E,T_E)\in E_{c_p}} \left(\frac{c_{p,calc}(P_E,T_E,\mathbf{x})-c_{p,E}}{c_{p,E}}\right)^2 \\
& + W_\kappa \times \sum_{(P_E,T_E)\in E_\kappa} \left(\frac{\kappa_{calc}(P_E,T_E,\mathbf{x})-\kappa_E}{\kappa_E}\right)^2 \\
& + W_\nu \times \sum_{(P_E,T_E)\in E_\nu} \left(\frac{\nu_{calc}(P_E,T_E,\mathbf{x})-\nu_E}{\nu_E}\right)^2 \\
& + W_\psi \times \sum_{(P_E,T_E)\in E_\psi} \left(\frac{\psi_{calc}(P_E,T_E,\mathbf{x})-\psi_E}{\psi_E}\right)^2
\end{aligned}
\tag{1}
$$

本文采用的目标函数考虑了密度、热容、热导率、粘性和蒸馏曲线的影响。对应的权重选取依据的是误差传递基本理论：

考虑圆管流对流换热常用的 Dittus-Boelter 公式：

$$Nu = 0.023 \times \mathrm{Re}^{0.8}\, Pr^{0.4} \tag{2}$$

考虑管径为 D，质量流量 Q 给定的条件下，将其展开为 ρ、c_p、κ 和 ν 的表达式为：

$$\frac{hD}{\kappa} = 0.023 \times (\frac{4Q}{\pi \rho \nu D})^{0.8} \times (\frac{c_p \rho \nu}{\kappa})^{0.4} \tag{3}$$

对流换热系数为：

$$h = 0.023 \times (\frac{4Q}{\pi D})^{0.8} \times \frac{1}{D} \times \rho^{-0.4} c_p^{0.4} \kappa^{0.6} \nu^{-0.4} \tag{4}$$

除去常数项，其相对不确定度传递关系为：

$$\begin{aligned}(\frac{U_h}{h})^2 &= (0.4 \times \frac{U_\rho}{\rho})^2 + (0.4 \times \frac{U_{c_p}}{c_p})^2 \\ &\quad + (0.6 \times \frac{U_\kappa}{\kappa})^2 + (0.4 \times \frac{U_\nu}{\nu})^2 \\ &= \sum_{z \in \{\rho, c_p, \kappa, \nu\}} (s_z \frac{U_z}{z})^2\end{aligned} \tag{5}$$

根据误差传递理论，应该各项误差尽可能大小相等，从而以最经济的方式减小整体误差。在拟合替代燃料组分模型的时候，我们也尽量遵循这样的原则，即取：

$$W_z \propto \frac{s_z^2}{(U_z / z)^2} \tag{6}$$

而不确定度 $U_z, z \in \{\rho, c_p, \kappa, \nu\}$ 可以表示为三部分的组合：实验数据不确定度 $U_{z,A}$，计算程序不确定度 $U_{z,B}$ 和煤油物性的批次误差 $U_{z,C}$。

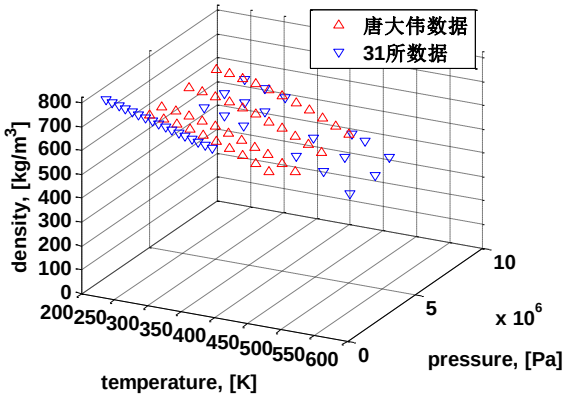
$$\begin{aligned}U_z &= \sqrt{U_{z,A}^2 + U_{z,B}^2 + U_{z,C}^2} \\ &= \sqrt{U_{z,AC}^2 + U_{z,B}^2}\end{aligned} \tag{7}$$

在通常的计量过程中，$U_{z,A}$ 可以从实验数据中统计推断得出，$U_{z,B}$ 本意应该是所有独立于实验数据的非统计量，但是由于测量的真值本身也存在不确定度，所以我在这里用额外的 $U_{z,C}$ 表示真值的不确定度，这一项在通常的计量过程中是没有的。但是因为国家标准对煤油理化性质的规定较为粗糙 [12]，实际测试中也发现批次变化较大，因而需要考虑煤油物性的批次误差。但由于 $U_{z,A}$ 和 $U_{z,C}$ 单独是没有办法估计的，他们同时存在于实验数据中，所以本文直接从两组不同单位所作的实验数据中估计 $U_{z,AC}$。

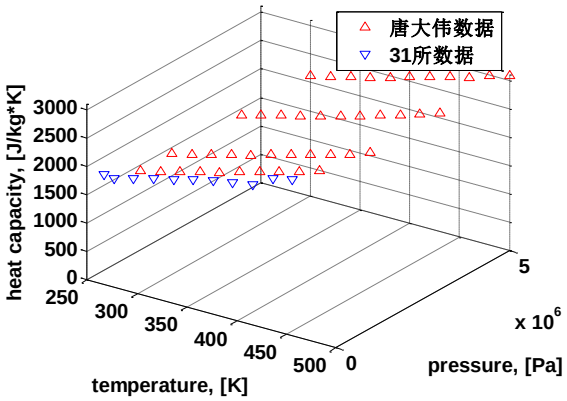
本文选定 $U_{z,B}$ 为 SUPERTRAPP 计算的不确定度，即 $U_{z,B} \approx \sigma_{z,calc}$。其计算方法为用 SUPERTRAPP 的计算值与 NIST 最新最准确的几种参考流体的实验和计算值进行比较得到。

2 实验数据

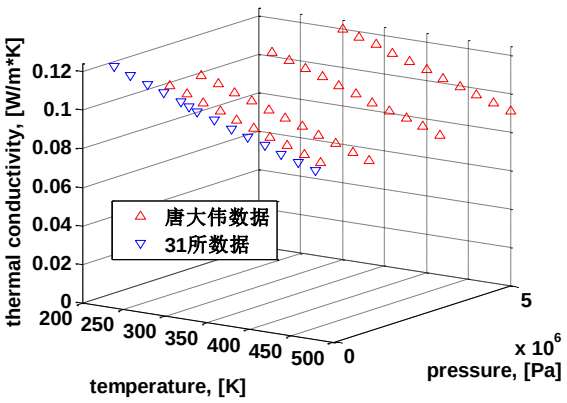
本文采用的实验数据主要有两部分，一部分来自工热所唐大伟所作的航空煤油热物性测量报告 [13]，另一部分来自于 31 所的大庆 RP-3 航空煤油数据资料，临界点和蒸馏曲线数据来自于天大孙青梅课题组 [14]，三者用的油不能保证是同一批次。



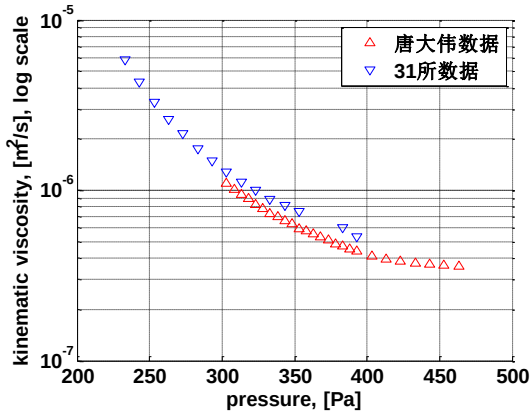
密度，三维



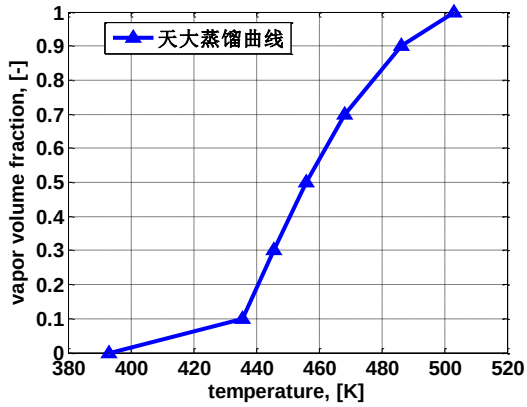
比热，三维



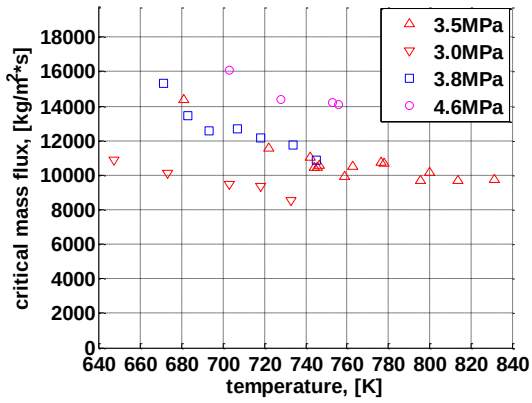
热导率，三维



粘性，二维



蒸馏曲线，二维



临界流量，二维

临界点为： 645.50K，2.390MPa

实验数据的特点是：

1. 密度、比热、粘性、热导率只有高压液相数据，温度不超过 550K，超临界区测量量只有临界流量，中间温度区、有临界点数据和蒸馏曲线；
2. 不同单位测得数据不同，怀疑是不同批次的油料和不同测试方法导致的差异；
3. 根据唐大伟的测试报告，热导率测量绝对平均偏差为 0.48%，运动粘度与关联式的平均偏差为 0.66%，无其他物性测试不确定度信息。31 所报告完全没有不确定度信息。
4. 因为蒸馏曲线对组分，特别是饱和温度最高和最低的组分敏感，国家标准也仅仅是粗略地规定了蒸馏曲线，且本次拟合目的是用作无相变的超临界主动冷却，所以不将蒸馏曲线纳入目标函数的计算。

3 拟合结果

本文根据以上基本原理，基于 MATLAB 的 Optimization Toolbox 最优化工具箱，编写了拟合程序，并根据以上实验数据拟合得到了一下煤油热物性替代模型。

表格 1 煤油热物性替代模型拟合结果

组分	中文名	比例
C10	正癸烷	0.3886
C13	正十三烷	0.2724
1C2T4TMCH	1,2,4 三甲基环己烷	0.0889
NBCHEX	正丁基环己烷	0.1111
C3BNZ	丙基苯	0.1390

经检验，在主动冷却发动机耦合传热分析中采用以上模型计算出口油温更接近实验值。

4 致谢

本文的研究得到了国家自然基金重大研究计划重点支持项目（91016005）和国家自然基金创新群体项目（10621202）的资助。

参考文献

[1]Dagaut, P. and Cathonnet, M., "The Ignition, Oxidation, and Combustion of Kerosene: A Review of Experimental and Kinetic Modeling," *Progress in Energy and Combustion Science*, Vol. 32, No. 1, 2006, pp. 48-92.

[2] 范学军,俞刚, "大庆 rp-3 航空煤油热物性分析," *推进技术*, Vol. 27, No. 2, 2006, pp. 187, 6.

[3]Violi, A., Yan, S., Eddings, E. G., Sarofim, A. F., Granata, S., Faravelli, T. and Ranzi, E., "Experimental Formulation and Kinetic Model for Jp-8 Surrogate Mixtures," *Combustion Science and Technology*, Vol. 174, No. 11-12, 2002, pp. 399-417.

[4]Lemmon, E. W., Huber, M. L. and Mclinden, M. O., "Nist Standard Reference Database 23: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties-Refprop, Version 9.0", 2010.

[5]Diky, V., Chirico, R. D., Muzny, C. D., Kazakov, A., Magee, J. W., Kroenlein, K., Abdulagatov, I. and Frenkel, M., "Nist Thermodata Engine: Data Expert System for Thermophysical Properties," *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*, Vol. 242, No. 2011, pp.

[6]Huber, M. L., Bruno, T. J., Chirico, R. D., Diky, V., Kazakov, A. F., Lemmon, E. W., Muzny, C. D. and Frenkel, M., "Equations of State on Demand: Application for Surrogate Fuel Development," *International Journal of Thermophysics*, Vol. 32, No. 3, 2011, pp. 596-613.

[7]Huber, M. L., Lemmon, E. W. and Bruno, T. J., "Surrogate Mixture Models for the Thermophysical Properties of Aviation Fuel Jet-A," *Energy & Fuels*, Vol. 24, No. 2010, pp. 3565-3571.

[8]Bruno, T. J., Ott, L. S., Lovestead, T. M. and Huber, M. L., "Relating Complex Fluid Composition and Thermophysical Properties with the Advanced Distillation Curve Approach," *Chemical Engineering & Technology*, Vol. 33, No. 3, 2010, pp. 363-376.

[9]Bruno, T. J., Huber, M. L., Laesecke, A. R., Lemmon, E. W., Mclinden, M. O., Outcalt, S. L., Perkins, R. A., Smith, B. L. and Widegren, J. A., "Thermodynamic, Transport, and Chemical Properties of “Reference” Jp-8", 2010.

[10]Huber, M. L., Smith, B. L., Ott, L. S. and Bruno, T. J., "Surrogate Mixture Model for the Thermophysical Properties of Synthetic Aviation Fuel S-8: Explicit Application of the Advanced Distillation Curve," *Energy & Fuels*, Vol. 22, No. 2, 2008, pp. 1104-1114.

[11]Ely, J. F. and Huber, M. L., "Nist Thermophysical Properties of Hydrocarbon Mixtures Database (Supertrapp). Nist Standard Reference Database 4.", 1990.

[12]中华人民共和国质量监督检验检疫总局, "3 号喷气燃料", 2006.

[13]唐大伟, "航空煤油热物性测量报告", 2009.

[14]孙青梅, 米镇涛 , 张香文, "吸热型碳氢燃料 rp-3 仿 jp-7 临界性质(T_C、P_C)的测定," *燃料化学学报*, Vol. No. 04, 2006, pp.

THERMOPHYSICAL SURROGATE MODELING OF RP-3 AVIATION KEROSENE

Di Cheng[1], Xinzhu Wang[1] and Xuejun Fan[1,2]

(1 Key Laboratory of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, CAS, No.15 Beisihuanxi Road, Beijing 100190, China)
(2 Hypersonic Research Center CAS, No.15 Beisihuanxi Road, Beijing 100190, China）

Abstract In order to study the convective heat transfer of hydrocarbon fuel in active cooling scramjet combustor, a thermophysical surrogate modeling method was developed based upon the concept of error propagation. This method considered the variation of batch, error of software and error of experimental data. According to available data of density, heat capacity, viscosity, thermal conductivity and critical point of the RP-3 aviation kerosene, a 5 species surrogate model is proposed based on the program using MATLAB and SUPERTRAPP. This model increase the accuracy of oil temperature at the outlet of active cooling combustor.

Keywords supercritical, hydrocarbon fuel, thermophysical surrogate model.