

一种高密度碳氢燃料替代模型及其热物性分析^{*}

郑寅泰¹, 孙文静^{1,2}, 王兴黎¹, 张靖周¹, 凌文辉²

(1. 南京航空航天大学 能源与动力学院, 江苏 南京 210016;

2. 北京动力机械研究所, 北京 100074)

摘 要: 针对一种应用于高超声速飞行器再生冷却的高密度碳氢燃料, 提出适用于其超临界态流动及换热特性研究的替代燃料模型。基于实验获得的碳氢燃料高温裂解的产物组分及现有航空煤油替代模型, 提出三组分替代模型, 以多物性参数分子摩尔质量、密度、运动黏度、比热容和导热系数为遴选指标, 通过多目标优化寻出一种替代燃料模型 (71.1% 反式十氢化萘、19.4% 正十二烷、9.5% 正十三烷)。基于碳氢化合物的混合热物性参数数据库 (NIST SUPERTRAPP), 通过二次开发对替代燃料模型的超临界态热物性进行预测和分析, 发现在临界压力 2.8MPa, 临界温度 700K 附近, 该种碳氢燃料的热物性参数变化最明显, 并且随着压力的升高, 变化逐渐变小。

关键词: 高密度碳氢燃料; 替代燃料模型; 热物性参数; 超临界态; 多目标寻优

中图分类号: V231.1

文献标识码: A

文章编号: 1001-4055 (2023) 11-2211093-10

DOI: 10.13675/j.cnki.tjjs.2211093

Thermophysical Property Analysis and Surrogate Model of a High-Density Hydrocarbon Fuel

ZHENG Yin-tai¹, SUN Wen-jing^{1,2}, WANG Xing-li¹, ZHANG Jing-zhou¹, LING Wen-hui²

(1. College of Energy and Power Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics,

Nanjing 210016, China;

2. Beijing Power Machinery Institute, Beijing 100074, China)

Abstract: The high-density endothermic hydrocarbon fuel was developed for the application of regenerative cooling in hypersonic vehicles, and a surrogate model of this fuel was proposed for studying fuel flow and heat transfer in supercritical state. A three-component model was chosen based on the product components captured in high-temperature pyrolysis experiments of this endothermic hydrocarbon fuel, as well as the surrogate models for current aviation kerosene. The molecular mass, density, kinematic viscosity, specific heat capacity and thermal conductivity were selected as the objectives, and the optimal surrogate model consisting of 71.1% trans-decalin, 19.4% *n*-dodecane and 9.5% *n*-tridecane was found by the multi-objective optimization method. The secondary development on the NIST SUPERTRAPP was applied to predict and analyze the thermophysical properties of the surrogate model in supercritical state, which showed that the most obvious change of thermophysical property was located around the critical pressure of 2.8MPa and the critical temperature of 700K. Besides, the change of that in the supercritical state decreased gradually with the increase of pressure.

^{*} 收稿日期: 2022-11-30; 修订日期: 2023-01-13。

基金项目: 中国博士后基金站前特别资助 (2020TQ0143); 江苏省自然科学基金青年基金 (BK20200448)。

作者简介: 郑寅泰, 硕士生, 研究领域为强化传热传质。

通讯作者: 孙文静, 博士, 讲师, 研究领域为气固两相湍流、流动强化传热。E-mail: wjsun@nuaa.edu.cn

引用格式: 郑寅泰, 孙文静, 王兴黎, 等. 一种高密度碳氢燃料替代模型及其热物性分析[J]. 推进技术, 2023, 44(11): 2211093. (ZHENG Yin-tai, SUN Wen-jing, WANG Xing-li, et al. Thermophysical Property Analysis and Surrogate Model of a High-Density Hydrocarbon Fuel[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2023, 44(11): 2211093.)

Key words: High-density hydrocarbon fuel; Surrogate fuel model; Thermophysical property; Supercritical state; Multi-objective optimization

1 引言

高超声速飞行器是国家科技发展的重中之重,对保障国家安全和提升综合国力具有重大的战略意义。在高马赫数飞行时,不仅动力装置的热端部件承受着剧烈的热载荷,飞行器机身也承受着十分严苛的气动加热,因此,在高超声速飞行器技术的发展中,热防护已然成为关键技术之一。再生冷却技术是一种实用且高效的主动热防护方案,利用燃料的物理和化学热沉对热端部件进行冷却,同时将冷却壁面时所吸收的热量回馈至燃烧室,在飞行器主动热防护中得到了广泛应用^[1]。在冷却通道中,碳氢燃料在超临界压力下不断吸热升温,从液态转变为超临界态,燃料在拟临界温度附近伴随着巨大的物性变化,增加了碳氢燃料再生冷却流动换热研究难度。因此,对燃料物性随温度和压力的变化规律研究是再生冷却技术研究的关键^[2-3]。

再生冷却燃料主要有两种:吸热型液态碳氢燃料和液氢低温燃料^[4-5],其中,高热沉吸热型液态碳氢燃料具有能量密度高、存储使用方便、安全性高、经济性好等优点,更适用于体积受限的高超声速飞行器^[6]。随着新一代飞行器更高、更快、更远的要求,密度大于 0.8g/cm^3 的高密度型碳氢燃料已逐渐被合成并成功运用,该种燃料相比常规燃料具有更高的密度和体积热值,可以低成本快速提高现有飞行器推进性能^[7-8]。

吸热型液态碳氢燃料属于混合物型燃料,实际组分非常复杂,是C7-C16大分子碳氢复杂烃类混合物,包含链烷烃、环烷烃以及芳香烃等上百种成分,所以对燃料的热物性分析存在很大的困难^[9]。现有的条件下,发展包含燃料所有组分的燃烧传热物理和化学反应动力模型是不切实际的。目前,为了研究碳氢燃料跨临界的性质,国内外学者通常采用由少数典型的高纯度碳氢化合物组成的混合物作为“替代燃料”去模拟研究真实碳氢燃料的一系列物理化学过程。不同国家的航空煤油在使用上有很大的差异,比如在欧美等西方国家,Jet A, Jet A-1和Jet B是比较常用的民用航空燃料,欧美军用煤油使用比较常见的是JP-7和JP-8。Yu等^[10]提出了两种五组分航空燃料替代模型,通过优化组分分配比研究了不同的性质。Danianu等^[11]直接采用正十二烷代替美国

JP-7航空煤油进行裂解和热传导的研究。Wang^[12]选用单组分正十二烷作为RP-3煤油的替代燃料,对正十二烷提出了总包反应模型。Dondapati等^[13]提出正十二烷是喷气燃料的主要组成部分,可以作为一种喷气燃料的替代燃料,并在超临界状态下对其热物理性质进行了评估。Kim和Violi^[14]提出正十四烷/正十二烷可以作为传统喷气燃料的替代混合物,其模拟关键特性的效果比当前使用正十二烷作为单一正构烷烃的替代混合物要好得多。Yu等^[15]在超临界条件下,研究了正十二烷/正癸烷、正十二烷/正十四烷、正十二烷/正丁苯、正十二烷/正丁环己烷和正丁苯/正丁环己烷等喷气燃料模型化合物二元混合物的热分解。国内外航空煤油组成成分上有较大的差异,其他国家的航空煤油烃类构成比例、C/H、平均摩尔质量等与国内的航空煤油有很大区别,目前国内学者大多针对RP-3航空煤油进行研究。禹进等^[16]基于直接匹配分子结构和官能基团的思路,选取正十二烷、2,5-二甲基己烷、1,3,5-三甲基苯和十氢化萘作为基础燃料,为RP-3航空煤油构建了替代燃料模型。程泽源等^[17]利用广义对应态法则对吸热型碳氢燃料RP-3的5种替代模型的物性参数进行了数值计算,并研究出表现最优的三组分模型。郑东等^[18]在发展更准确的混合物特性参数计算方法的基础上,提出了摩尔分数为65%正十二烷、10%正十四烷、25%十氢化萘三组分HEF航煤替代燃料模型。曾文等^[19]通过遴选指标,提出了五种组分组成的RP-3航空煤油模拟替代燃料,并对该模拟替代燃料中各组分的摩尔分数进行了优化。裴鑫岩等^[20]对比已有研究中的8种RP-3航空煤油替代模型,基于理论分析比较提出了四组物性替代模型。郑东等^[21]也提出了RP-3航空煤油模拟替代燃料的遴选指标(摩尔质量、氢碳比、密度与运动黏度)。Zhong等^[22]在超燃冲压发动机再生冷却系统相关条件下,对RP-3煤油的传热特性进行了实验和分析研究,并提出了一种十组分煤油替代物,用于计算传热分析所需的燃料热力学和输运性质。上述分析可见,针对不同的研究工况以及不同的研究目的,使用的替代模型差别较大。对于实际航空发动机的复杂流体动力学研究,有些替代模型是专门针对物理替代燃料提出的,主要研究燃料的流动、传热、喷射等物理过程的变化,而有些替代模型是专门针对化学替代燃料提出的,

主要研究燃料的燃烧、裂解、着火特性等化学过程的变化,相互之间的关联也较少,所以不同的模型存在着差异,适用范围也存在一定的局限性。

本文针对一种高密度型碳氢燃料 EHF-851,以燃料的摩尔质量、密度、比热容、运动黏度和导热系数作为遴选指标,通过对文献中提出的 RP-3 燃油模型进行优化对比验证合理性,进而提出一种适用于计算其流动及换热特性的替代燃料模型,采用 NIST (National Institute of Standards and Technology) 碳氢化合物数据库 (NIST SUPERTRAPP^[23]) 进行二次开发,对该种高密度型碳氢燃料的热物性随温度和压力的变化规律进行预测和分析。

2 替代模型组分

2.1 组分选取原则

本文所研究的高密度型碳氢燃料与国内研究较多的 RP-3 航空煤油燃料组分构成差异较大,为了准确预测燃料在超临界条件下的物性参数,本文选取替代模型组分时遵从以下三个原则^[24]:

(1) 可行性,模拟替代燃料中各组成成分应该容易获取,同时,热力学数据与输运参数应容易获取。

(2) 简化性,模拟替代燃料的组成成分不宜过多,且为碳氢燃料中占据较大比例并对其燃烧性质有巨大影响的组分。

(3) 相似性,模拟替代燃料应具有与实际碳氢燃料相似的物理和化学特性。

气相燃料的扩散特性主要取决于其分子量,为了能够再现实际航空煤油在气相燃烧中的扩散特性,模拟替代燃料的摩尔质量应接近实际燃料的摩尔质量^[25]。在超燃冲压发动机中,物理替代模型主要应用于燃料再生冷却系统的传热、传质和流动的数值模拟中^[26],所以需要使得碳氢燃料模型的密度、黏度、比热容、导热系数等物理参数与实际值较接近。综合考虑国内外文献中所提出的模拟替代燃料的遴选指标,并根据碳氢燃料的物理与化学特性,本文确定了摩尔质量、密度、运动黏度、比热容、导热系数五个参数作为碳氢燃料替代燃料模型的遴选指标,并基于此指标选取碳氢燃料替代燃料模型的主要组成成分。

2.2 多目标参数寻优法

确定了替代燃料模型的主要组成成分后,需进一步确定各种组分的比例。本文通过多目标参数寻优法,基于文献[27]中的方法,以替代燃料模型的五项遴选指标为目标参数,通过优化替代燃料模

型中各组分的比例,使混合燃料的各项遴选指标参数与实际碳氢燃料的相应参数之间的误差达到最小。优化过程中混合燃料的各遴选指标参数的计算式为:

燃料的摩尔质量

$$M_{\text{mix}} = \sum_i^N x_i M_i \quad (1)$$

燃料的密度

$$\rho(T)_{\text{mix}} = \sum_i^N \varphi_i \rho(T)_i \quad (2)$$

燃料的运动黏度

$$\ln \nu(T)_{\text{mix}} = \sum_i^N x_i \ln[\nu(T)_i] \quad (3)$$

燃料的比热容

$$c_p(T)_{\text{mix}} = \sum_i^N x_i c_p(T)_i \quad (4)$$

燃料的导热系数

$$\lambda(T)_{\text{mix}} = \sum_i^N \omega_i \lambda(T)_i \quad (5)$$

式中 x 为摩尔分数, M 为摩尔质量, ρ 为密度, φ 为体积分, ω 为质量分数, ν 为运动黏度, T 为温度, c_p 为比热容, λ 为导热系数。在对多种组分摩尔分数的优化过程中,采用的优化目标函数如式(6)所示,其中, N 为遴选指标数量, $E_{i,\text{sur}}$ 为混合燃料某遴选指标值, $E_{i,\text{f}}$ 为本文燃油的某一种遴选指标值。

$$E = \left[\frac{\sum_i^N \left(\frac{E_{i,\text{sur}} - E_{i,\text{f}}}{E_{i,\text{f}}} \right)^2}{N} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

2.3 方法验证

为了验证该方法的合理性,本文基于文献[28]中提出的 RP-3 航空煤油三组分替代模型运用该方法进行模型优化,优化结果与实验值进行对比分析。

RP-3 航空煤油的主要组分信息在文献[29]中给出,基于官能团匹配理论,文献[28]中提出了 54.3% 正十二烷(*n*-dodecane)、32.1% 2,5-二甲基己烷(2,5 dimethylhexane)和 13.6% 甲苯(Toluene)作为 RP-3 煤油的替代模型。对此,用上述多目标参数法在煤油组分构成的基础上进行优化。使用 Matlab 进行优化计算确定最优配比,求解误差最小时的最优解。RP-3 航空煤油的主要物性参数^[21,30-31]及优化结果见表 1 和表 2。

优化后通过软件 NIST SUPERTRAPP 进行计算,计算结果与文献[28]中的计算结果以及文献[32-34]中测得的 RP-3 物性参数实验值进行对比分析。由于运动黏度和导热系数对压力变化不敏感,不同压力下的运动黏度和导热系数非常接近,尤其是运动黏度,当温度达到超临界温度后,基本保持不变,

Table 1 Thermophysical properties of RP-3

Fuel	Molar mass $M/(\text{g/mol})$	Density $\rho/(\text{kg/m}^3)$	Kinematic viscosity $\eta/(\text{mPa}\cdot\text{s})$	Specific heat capacity $c_p/(\text{kJ}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$	Thermal conductivity $\lambda/(\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1})$
RP-3	148.83	785	1.16	1.89	0.1262

Table 2 Comparison of two models

Components of model	Original results ^[28] (mol%)	Optimization results(mol%)
<i>n</i> -dodecane	54.3	71.16
2,5 dimethylhexane	32.1	9.01
Toluene	13.6	19.83
$E/\%$	5.0	2.6

因此只比较了 5.0MPa 压力条件下的运动黏度随温度的变化,如图 1 所示,可以看出两种模型与实验值的误差非常小。对于导热系数,由于误差变化非常小而且缺乏实验数据,所以本文重点对比两种不同组分分配比模型的密度以及比热容的变化趋势来验证该方法。

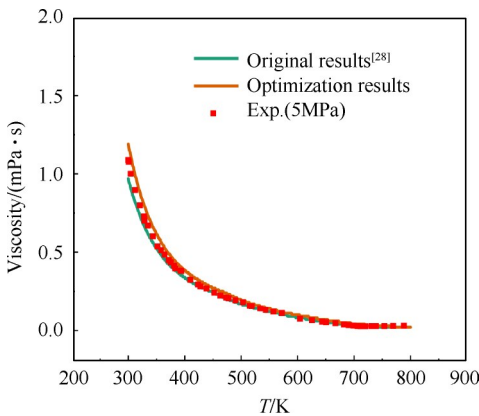


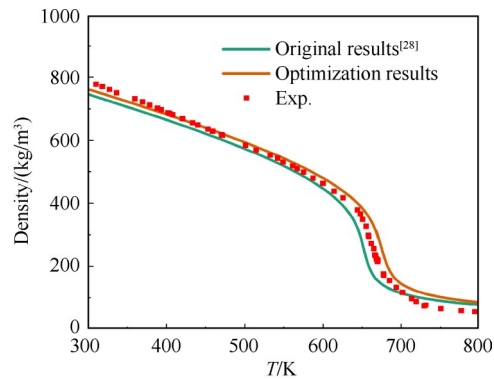
Fig. 1 Comparison between the viscosity of the two models and experimental values

燃料的密度在流动与传热过程中起着非常重要的作用。图 2 表示两种不同模型密度的计算结果与实验值的对比。可以看出,该优化结果与实验值的吻合程度较高,在文献[31]中提出的组分模型的基础上有了一定的优化,优化模型的密度值在低温区与实验值吻合程度更高,但是超过拟临界温度位置,计算值略高于实验值,模型对拟临界温度以上的高温区预测结果误差较大。因为不同型号与不同产地的煤油所测得相关实验结果都会存在一些差异,而且随着温度、压力的升高,RP-3 煤油发生裂解反应,大分子物质裂解成许多小分子物质,此时裂解反应占主导地位,导致密度值计算偏高。从理论上来讲煤油此时发生了化学反应,需要考虑裂解产物的影响,而计算结果未考虑高温区的裂解反应的影响,只

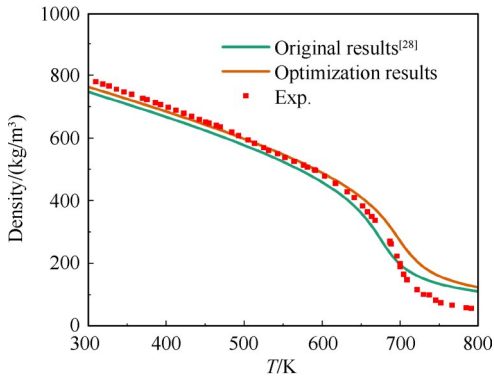
是集中在物理变化过程,这样在高温区替代模型的计算结果只能作为一个物性变化趋势的参考。图 3 给出了 300~700K 内不同压力下,优化后的模型计算结果与实验结果的密度偏差 E_p (已无量纲化)随温度的变化曲线。可以看出:温度在 300~700K 内,误差较小,在 15% 以内,吻合度较好;当温度再升高,发生裂解反应,出现较大偏差。文献[35]指出随着压力的升高,RP-3 煤油裂解反应物浓度增加,反应速率增大,RP-3 煤油热裂解生成更多的烷烃产物,气相产物的量逐渐增大,对密度影响较大,所以由图 2 可知当压力升高,温度增加到 720K 左右时,此时密度偏差逐渐变大,裂解带来的影响逐渐变大。

图 4 表示定压比热容实验值与两种模型计算结果的对比,可以看出随着温度的升高,比热容的实验值会高于模型计算值,这是因为航空煤油在 423K 后会发生吸热自氧化反应^[36]。通过对比发现,两种模型对于比热容的变化趋势模拟较好,表 3 表示了两种模型的拟临界温度与实验值的对比,可见优化后的结果对于比热容的峰值点(即拟临界温度)更准确,优化后的模型对于拟临界温度的预测精度比之前的模型精度提高了约 20K 左右。通过两种模型的比较,优化后的模型提高了正十二烷和甲苯的含量,进而模型的平均分子质量有所提高。随着替代模型平均分子质量增加,会导致替代模型对拟临界温度的预测提前度逐渐减小^[17]。正十二烷属于典型的直链烷烃,提高直链烷烃的碳含量会提高拟临界温度。在燃料的成分中,直链烷烃的结焦特性较好,不易结焦,所以提高燃料中直链烷烃的含量有利于改善燃料的结焦特性。

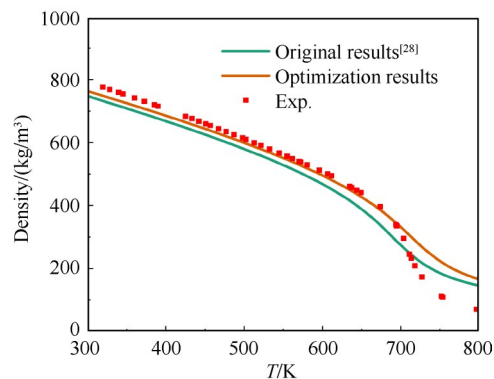
基于软件 NIST SUPERTRAPP,对该优化后的模型计算结果分析,得到该模型的拟临界温度 $T_{cr}=656\text{K}$,拟临界压力 $p_{cr}=2.37\text{MPa}$ (RP-3 煤油的临界温度和临界压力分别为 646K 和 2.3MPa^[37]),而文献[28]中的



(a) 3.0MPa

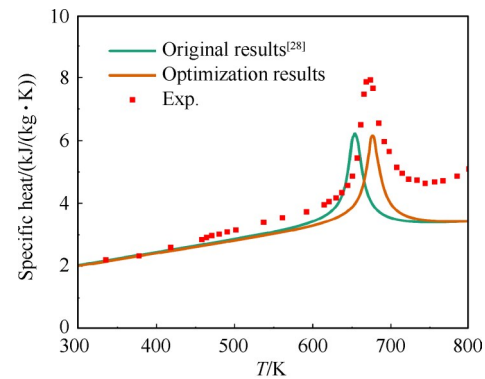


(b) 4.0MPa

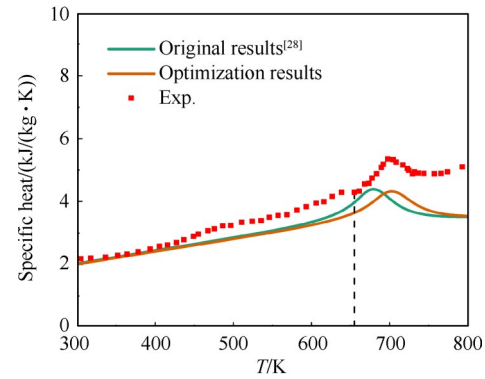


(c) 5.0MPa

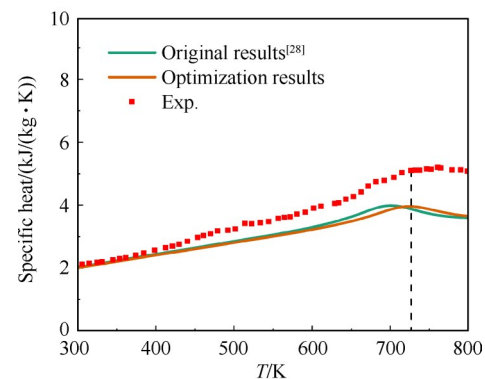
Fig. 2 Comparison between the density of the two models and experimental values



(a) 3.02MPa



(b) 4.02MPa



(c) 4.98MPa

Fig. 4 Comparison between the specific heat of the two models and experimental values

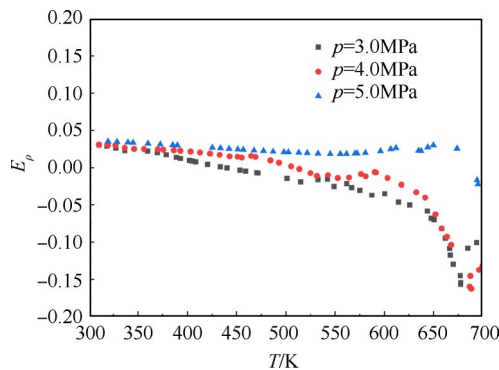


Fig. 3 Deviation of density variation with temperature under different pressure

Table 3 Comparison of pseudocritical temperature under different pressure

p/MPa	Exp. T/K	Original ^[28] T/K	Optimization T/K
3.02	673.9	654	676
4.02	697.7	679	703
4.98	726.7	701	725

模型对于 RP-3 的临界温度和临界压力约为 $p_{cr}=2.44\text{MPa}$, $T_{cr}=636\text{K}$, 所以该组分优化结果对于拟临界态的条件预测精度有所提高。综上所述, 该优化模型精度更好。

3 高密度燃料替代燃料模型分析

3.1 模型组分优化

本文所研究的高密度型碳氢燃料 EHF-851 组成成分中,链烷烃约占 14.6%,环烷烃约占 83.7%,芳香烃约占 1.3%^[38]。该燃料高温裂解产物中,十氢化萘占比高达 64%,剩余产物为正十二烷及其他烃类。十氢化萘是先进航空燃料中广为应用的多环烷烃,具有较高的碳氢比,同时具有较强的热稳定性和吸热性,对改进燃料性能起到重要作用。在此基础上,结合国内外学者提出的航空煤油替代模型组分构成的综合分析,本文提出三组分模型(71.1% 反式十氢化萘、19.4% 正十二烷、9.5% 正十三烷)作为该碳氢燃料替代模型。根据上文提出的组分优化方法进行组分比例确定,表 4 为该替代模型的各种物性参数^[38-40]。

Table 4 Comparison of thermophysical properties between surrogate model and EHF-851

Parameter	Model	Fuel	$E_i/\%$	$E/\%$
Molar mass/(g/mol)	148.83	147.46	0.92	
Density/(kg/m ³)	850.6	850.6	0	
Kinematic viscosity/(mPa·s)	1.97	2.11	6.6	
Specific heat capacity/(kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹)	1.75	1.8	2.7	3.1
Thermal conductivity/(W·m ⁻¹ ·K ⁻¹)	0.1161	0.1226	5.3	

3.2 替代模型热物分析

针对本文高密度碳氢燃料 EHF-851,对该种高密度碳氢燃料替代模型的热物性(包括密度、比热容、运动黏度、导热系数)在不同压力和温度条件下进行预测和分析。

3.2.1 密 度

图 5 表示密度在不同压力下随温度的变化规律,在 1.0MPa 和 2.0MPa 时随着温度的升高,可以发现密度存在一段垂直下降的相变过程,完成液相到气相的转变,此时它的压力很明显并没有达到超临界压力。当压力达到 3.0MPa 时,随着温度的逐渐升高,会出现一个明显的急剧下降点,从曲线可以看出这种变化趋势有别于 1.0MPa 与 2.0MPa 下的两相变化,临界点两相差别消失,相变连续,没有相变潜热,可以判断出此时达到了超临界状态。随着压力的升高,曲线逐渐变得平缓,不同压力下的密度差值随着温度的升高逐渐变大,密度发生急剧下降的位置不断向后移,即拟临界温度不断升高。

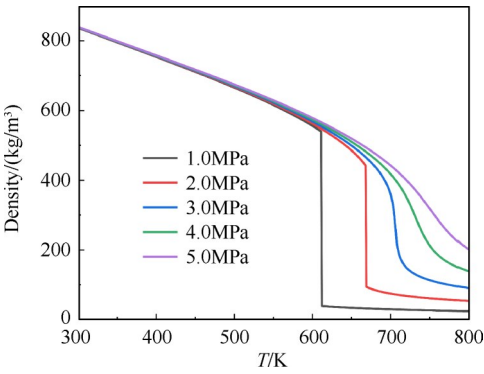


Fig. 5 Values of density of the model at the pressure of 1.0~5.0MPa

3.2.2 比热容

图 6 表示定压比热容在不同压力下随温度的变化规律。根据图像可以看出在低温段,不同压力下的定压比热容大小相差很小,并且随着温度的升高缓慢升高。根据文献[30,41]可得知,在低温区,随着压力的升高,比热容下降得很小,当温度低于拟临界温度时,在不同压力下,其热沉值几乎都不随压力变化,当温度低于拟临界温度时,燃料的传热能力的提高主要归功于物理热沉。在亚临界压力 1.0MPa 与 2.0MPa 下,存在一个明显的相变过程,存在相变潜热,定压比热容先突然下降,再缓慢升高。而当压力达到拟临界压力 3.0MPa 时,比热容的跃升突变,同时会导致热沉的跃升,到达一定温度时,定压比热容先急剧升高,再急剧下降,再趋于平缓,变化曲线会出现一个明显的峰值,比热容发生连续变化,没有明显的相变过程,与亚临界压力下曲线变化差异很大,此时可以看出已经达到了超临界态。随着压力的升高,定压比热容峰值位置不断向后移,并且峰值也逐渐变小,曲线随着压力的升高逐渐变得平缓。

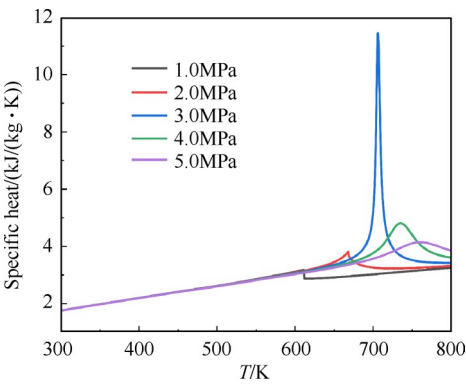


Fig. 6 Values of specific heat of the model at the pressure of 1.0~5.0MPa

3.2.3 运动黏度

图7表示运动黏度在不同压力下随温度的变化,不同压力下运动黏度差别不大,压力升高,运动黏度有细微的升高。并且随着压力的增大,运动黏度的变化趋势基本保持不变。但还是可以看出亚临界压力和超临界压力下在相变的时候存在细微差别。在恒定的压力下,在准液体区,黏度随温度的升高下降较为明显;当温度逐渐升高后,黏度受温度的影响越来越小。

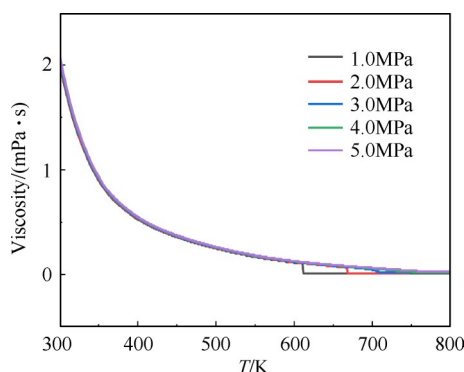


Fig. 7 Values of viscosity of the model at the pressure of 1.0~5.0MPa

3.2.4 导热系数

图8表示替代模型在不同压力下的导热系数计算结果。从图中可以看出,随着温度的增加,导热系数呈变小的趋势。压力1.0MPa与2.0MPa时,随着温度的升高,会出现一段明显的相变段,导热系数垂直下降一段后再升高。当压力达到3.0MPa后,随着温度的升高,在拟临界温度导热系数迅速下降,不存在明显的相变过程,导热系数会达到一个最小值,且该最小值明显大于1.0MPa与2.0MPa时的最小值;当温度超过拟临界温度之后,导热系数开始缓慢回升。当压力逐渐升高,导热系数在拟临界区间的变化逐渐变小,曲线越来越平缓。

3.3 替代模型临界态分析

根据上述图5~8的变化规律以及现有航空煤油的物性参数,得到该碳氢燃料临界压力在2.6~3.0MPa之间。针对该三组分替代模型,用NIST SUPERTRAPP来计算该种三组分燃油替代混合物在近临界压力2.6~3.0MPa下600K~800K的各项物性参数见图9所示。

可以发现当压力达到2.8MPa后,随着温度的升高没有发生液相到气相的变化,各项物性参数发生明显变化,发生连续相变,没有液相到气相的变化,特别是比热容的变化,会达到一个极大的峰值,变化

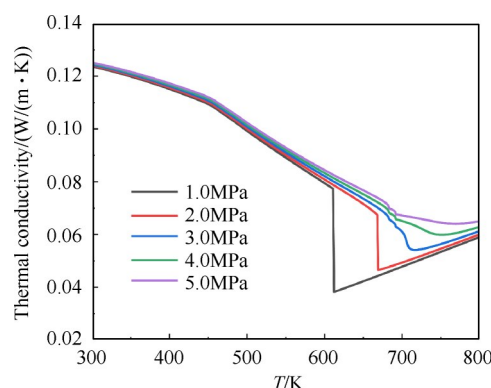


Fig. 8 Values of thermal conductivity of the model at the pressure of 1.0~5.0MPa

非常剧烈,说明到达了超临界态附近。通过计算以及图像分析,可以得到该种高密度碳氢燃料的超临界界点在 $p_{cr}=2.8\text{MPa}$, $T_{cr}=700\text{K}$ 左右。此碳氢燃料临界条件是高于RP-3航空煤油的。

同时基于上述分析看出随着压力的升高,在温度较低的时候,不同压力下的物性参数基本都一致,压力影响不大,高压下的物性参数值略高于低压下的参数值;而当温度逐渐升高,不同压力下的物性参数值差值会变大,并且压力的不同会导致物性参数的变化趋势有所不同。压力对替代模型的运动黏度的影响要远远小于其余三个物性,黏度的变化在拟临界温度之前下降较快,运动黏度下降, Re 数增大,导致湍流强度增大。当超过拟临界温度点后,燃料的运动黏度随温度的变化趋势相对保持平稳,此时达到了气体的数量级,即当燃料进入超临界态后具备了气体的低黏度性质,并且运动黏度受压力影响较小。而对于定压比热容,变化最为剧烈,在拟临界压力条件下的定压比热容有一个明显的突增,流体在亚临界和超临界状态之间转换,煤油汽化潜热的吸收与释放,超临界流体在拟临界点附近发生拟核态沸腾,传热加强,热物性急剧变化,压力越靠近临界压力,热物性在拟临界点处的变化越显著。随着温度的持续升高,燃料会产生结焦,导致传热恶化,热沉值降低,比热容下降。对于替代模型的密度,可以发现密度变化幅度随压力的增大而逐渐趋于平缓,压力越大,发生超临界变化时参数值变化越不明显,且拟临界温度会随压力增大而增大,密度与温度和压力的关系是一个典型的非线性关系。同样地,替代燃料的导热系数随压力的变化也不算明显,在到达临界点附近会有一个转折,转折的程度与压力条件有关。随着压力的升高,流动温度分布会更均匀^[42]。压力较小时,发生换热恶化导致热流传导不

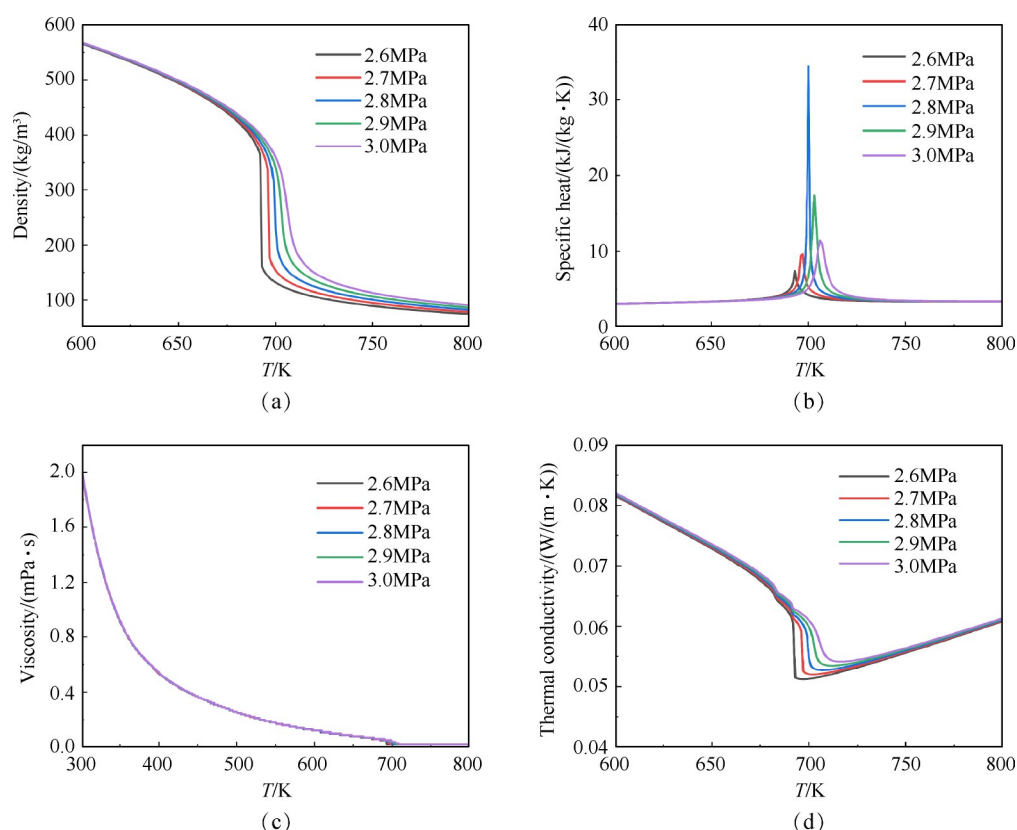


Fig. 9 Values of thermophysical properties of the model at the near-critical pressure of 2.6~3.0MPa

畅通,故导热系数曲线会出现明显跨临界过程,压力越小其转折程度越剧烈。压力超过临界压力后,随着压力的升高,其临界温度也会增大,这一点是符合碳氢燃料的实际物性的。

4 结论

本文结合一种针对物性参数的组分优化方法,通过对比验证该方法的合理性,提出了一种高密度吸热型碳氢燃料的三组分替代模型。主要结论如下:

(1)为了适用于超临界态流动及换热特性研究,确定了分子摩尔质量、密度、运动黏度、比热容、导热系数为该碳氢燃料物理替代模型组分优化的遴选指标。

(2)通过对文献中RP-3煤油替代模型组分比例的优化对比,验证了该方法的合理性,能更好地预测碳氢燃料的临界条件。同时,随着温度的升高,计算结果与实验值依然存在一定的误差,后期会引入裂解反应模型进行校正研究,需要进一步改善优化模型来适应更高的温度研究需求。

(3)基于高温裂解产物组分和该优化方法,对高密度型碳氢燃料EHF-851模型优化得到最终的替代

模型为71.1%反式十氢化萘、19.4%正十二烷、9.5%正十三烷。

(4)研究发现在该种碳氢燃料拟临界压力2.8MPa,拟临界温度在700K附近,物性参数变化最明显,随着压力的升高,超临界态的物性参数变化逐渐变小。

致谢:感谢中国博士后基金站前特别资助基金和江苏省自然科学基金青年基金的资助。

参考文献

- [1] Edwards T. Liquid Fuel and Propellant for Aerospace Propulsion: 1903-2003 [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2003, 19(6): 1089-1107.
- [2] 陈玮玮. 管内超临界流动传热特性及应用研究[D]. 南京: 南京航空航天大学, 2016.
- [3] 王龙云, 朱剑琴, 李海旺, 等. 压力对超临界碳氢燃料换热恶化影响的数值研究[J]. *推进技术*, 2017, 38(11): 2540-2547. (WANG Long-yun, ZHU Jian-qin, LI Hai-wang, et al. Numerical Study of Pressure Effect on Deterioration in Heat Transfer with Supercritical Hydrocarbon Fuel [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2017, 38(11): 2540-2547.)
- [4] 陈玮玮, 方贤德, 鹿世化, 等. 飞行器燃料再生冷却热管理系统参数设计[J]. *化工学报*, 2020, 71(增刊1):

- 204–211.
- [5] 王佩广, 刘永绩, 王 浚. 高超声速飞行器综合热管理系统方案探讨[J]. 中国工程科学, 2007, 9(2): 44–48.
- [6] 侯 淋, 刘 青, 张香文. 面向高超声速飞行的碳氢燃料吸热反应研究进展[J]. 化学工业与工程, 2022, 39(5): 1–10.
- [7] 邹吉军, 郭 成, 张香文, 等. 航天推进用高密度液体碳氢燃料: 合成与应用[J]. 推进技术, 2014, 35(10): 1419–1425. (ZOU Ji-jun, GUO Cheng, ZHANG Xiang-wen, et al. High-Density Liquid Hydrocarbon Fuels for Aerospace Propulsion: Synthesis and Application [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2014, 35(10): 1419–1425.)
- [8] 潘 伦, 邓 强, 鄂秀天凤, 等. 高密度航空航天燃料合成化学[J]. 化学进展, 2015, 27(11): 1531–1541.
- [9] 刘朝晖, 宋晨阳, 陈 强, 等. 吸热型碳氢燃料再生冷却性能评估方法[J]. 火箭推进, 2020, 46(2): 15–20.
- [10] Yu W, Yang W, Tay K, et al. An Optimization Method for Formulating Model-Based Jet Fuel Surrogate by Emulating Physical, Gas Phase Chemical Properties and Threshold Sooting Index(TSI) of Real Jet Fuel under Engine Relevant Conditions [J]. *Combustion and Flame*, 2018, 193: 192–217.
- [11] Daniau E, Bouchez M, Bounaceur R, et al. Contribution to Scramjet Active Cooling Analysis Using *N*-Dodecane Decomposition Model[C]. *Virginia: 12th AIAA International Space Planes and Hypersonic Systems and Technologies*, 2003.
- [12] Wang T S. Thermophysics Characterization of Kerosene Combustion [J]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2001, 15(2): 140–147.
- [13] Dondapati R S, Usurumarti P R, Kumar A. Development of Correlations for Combustion Modelling with Supercritical Surrogate Jet Fuels [J]. *Engineering Science and Technology*, 2017, 20(6): 1676–1679.
- [14] Kim D, Violi A. Hydrocarbons for the Next Generation of Jet Fuel Surrogates[J]. *Fuel*, 2018, 228: 438–444.
- [15] Yu J, Eser S. Supercritical-Phase Thermal Decomposition of Binary Mixtures of Jet Fuel Model Compounds[J]. *Fuel*, 2000, 79(7): 759–768.
- [16] 禹 进, 余彬彬, 于佳佳. RP-3航空煤油综合替代燃料模型构建 [J]. 航空动力学报, 2020, 35(4): 673–681.
- [17] 程泽源, 朱剑琴, 金 钊. 吸热型碳氢燃料RP-3替代模型研究[J]. 航空动力学报, 2016, 31(2): 391–398.
- [18] 郑 东, 钟北京, 姚 通. 航空煤油替代燃料模型构建方法及 HEF 航空煤油替代燃料模型[J]. 物理化学学报, 2017, 33(12): 2438–2445.
- [19] 曾 文, 刘 靖, 张治博, 等. 一种新的 RP-3 航空煤油模拟替代燃料[J]. 航空动力学报, 2017, 32(10): 2314–2320.
- [20] 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.
- [21] 郑 东, 于维铭, 钟北京. RP-3 航空煤油替代燃料及其化学反应动力学模型[J]. 物理化学学报, 2015, 31(4): 636–642.
- [22] Zhong F, Fan X, Yu G, et al. Heat Transfer of Aviation Kerosene at Supercritical Conditions[J]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2009, 23(3): 543–550.
- [23] Huber M L. NIST Standard Reference Database 4: NIST Thermophysical Properties of Hydrocarbon Mixtures Database [M]. *Gaithersburg: National Institution of Standards and Technology*, 2007.
- [24] Mehl M, Pitz W J, Sarathy S M, et al. Modeling the Combustion of High Molecular Weight Fuels by a Functional Group Approach [J]. *International Journal of Chemical Kinetics*, 2012, 44(4): 257–276.
- [25] 黄世璋. 超临界压力碳氢燃料裂解传热及其动态响应特性数值模拟研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2018.
- [26] 陈泰然, 顾玲燕, 王国玉, 等. RP-3 航空煤油不同替代模型的空化流动特性[J]. 推进技术, 2016, 37(3): 563–571. (CHEN Tai-ran, GU Ling-yan, WANG Guo-yu, et al. Cavitating Flow Characteristics of RP-3 Aviation Kerosene Surrogate Mixture Models [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2016, 37(3): 563–571.)
- [27] Kim D, Martz J, Violi A. A Surrogate for Emulating the Physical and Chemical Properties of Conventional Jet Fuel [J]. *Combustion and Flame*, 2014, 161(6): 1489–1498.
- [28] 姚长鑫, 禹 进. RP-3 航空煤油物理替代燃料模型及应用研究[J]. 推进技术, 2020, 41(4): 934–941. (YAO Chang-xin, YU Jin. A Physical Surrogate Fuel Model for RP-3 Aviation Kerosene and Applications [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2020, 41(4): 934–941.)
- [29] 徐佳琪, 郭俊江, 刘爱科, 等. RP-3 替代燃料自点火燃烧机理构建及动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2015, 31(4): 643–652.
- [30] 郑煜鑫, 魏朝晖, 李 洁. 采用流动型绝热量热法测量航空煤油的比热容[J]. 山西建筑, 2018, 44(3): 217–219.
- [31] 周海鹏, 闻 洁, 邓宏武, 等. 多组分碳氢燃料 RP-3 导热系数实验[J]. 北京航空航天大学学报, 2013, 39(10): 1387–1391.
- [32] Deng H W, Zhang C B, Xu G Q, et al. Density Measure-

- ments of Endothermic Hydrocarbon Fuel at Sub- and Supercritical Conditions[J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2011, 56(6): 2980–2986.
- [33] Deng H W, Zhang C B, Xu G Q, 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.
- [34] Deng H W, Zhu K, Xu G Q, et al. Isobaric Specific Heat Capacity Measurement for Kerosene RP-3 in the Near-Critical and Supercritical Regions [J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2012, 57(2): 263–268.
- [35] 焦 思. 超临界压力 RP-3 传热-热裂解耦合机理及裂解动力学模型研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2021.
- [36] Roan M A, Boehman A L. The Effect of Fuel Composition and Dissolved Oxygen on Deposit Formation from Potential JP-900 Basestocks [J]. *Energy & fuels*, 2004, 18(3): 835–843.
- [37] Wang N, Zhou J, Pan Y, et al. Determination of Critical Properties of Endothermic Hydrocarbon Fuel RP-3 Based on Flow Visualization[J]. *International Journal of Thermophysics*, 2014, 35(1): 13–18.
- [38] Li Y, Jin B, Zhang X, et al. Pyrolysis and Heat Sink of an Endothermic Hydrocarbon Fuel EHF-851 [J]. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, 2021, 155: 105084.
- [39] 金百堂. 冷却通道内高密度吸热型碳氢燃料裂解及结焦研究[D]. 天津: 天津大学, 2017.
- [40] 陈 冉, 刘 洁, 张香文. 氧清除剂用于增强吸热型碳氢燃料热氧化安定性[J]. *燃料化学学报*, 2020, 48(2): 249–256.
- [41] 裴鑫岩, 侯凌云, 莫崇康, 等. 航空煤油替代燃料模型热物性[J]. *航空动力学报*, 2015, 30(9): 2122–2128.
- [42] 王龙云, 朱剑琴, 李海旺, 等. 压力对超临界碳氢燃料换热恶化影响的数值研究[J]. *推进技术*, 2017, 38(11): 2540–2547. (WANG Long-yun, ZHU Jian-qin, LI Hai-wang, et al. Numerical Study of Pressure Effect on Deterioration in Heat Transfer with Supercritical Hydrocarbon Fuel [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2017, 38(11): 2540–2547.)

(编辑:梅 瑛)