

航空煤油替代燃料模型热物性

裴鑫岩, 侯凌云, 莫崇康, 董 宁

(清华大学 航天航空学院, 北京 100084)

摘 要: 研究基于国产航空煤油 RP-3 液相组分数据, 提出了单组分、简化 3 组分和详细 13 组分 3 种替代燃料模型, 并对采用 3 组分替代模型计算得到的燃料密度、黏度、导热率、比热容 4 个热物性参数进行了在不同温度(300~1000 K)和压力(1~15 MPa)状态下的分析. 结果表明, 燃料的物性在超临界压力下, 随着温度升高, 密度减小, 黏性降低, 导热率则先降后增, 而比热容逐渐增大, 同时, 在拟临界温度附近, 燃料热物性均发生变化剧烈, 比热容在不同压力下对应不同峰值点, 在 3 MPa 下最大; 压力的变化会使得拟临界温度发生改变, 给密度的变化程度、比热容的峰值分布和导热率的大小带来一定的影响. 采用 3 组分替代模型预测燃料热沉, 经实验验证, 其物理热沉吻合较好.

关 键 词: 航空煤油; 再生冷却; 替代燃料模型; 热物性; 拟超临界温度

中图分类号: V312⁺1

文献标志码: A

Thermo-physical properties for surrogate models of aviation kerosene

PEI Xin-yan, HOU Ling-yun, MO Chong-kang, DONG Ning

(School of Aerospace Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Based on the liquid-phase product analysis of aviation kerosene RP-3, three kinds of surrogate models, including single-specie, three-species and 13-species surrogate were proposed. The investigations covered the temperatures ranged from 300 to 1000 K under the pressures from 1 to 15 MPa. The distributions of the four thermo-physical properties were calculated under supercritical pressure conditions with temperature rise and decrease in density, viscosity and thermal conductivity, as well as specific heat increase. Drastic changes of thermo-physical properties occurred near the pseudo-critical temperature, especially for the specific heat under the pressure of 3 MPa. The variation in pressure will change critical temperature location and has a certain influence on distributions of density and thermal conductivity, as well as the peak value of specific heat. The heat sink of RP-3 calculated from the three-species surrogate is in good agreement with the experiments.

Key words: aviation kerosene; regenerative cooling; surrogate model; thermo-physical properties; pseudo-critical temperature

目前航空发动机部件的冷却问题成为制约发动机性能、寿命、可靠性的重要因素. 依靠现有的冷却技术和耐高温材料, 难以满足航空发动机高性能的需要. 从传热学的角度看, 在材料耐温程度、冷气用量和冷却结构都无法大幅变化的情况下, 最有效的出路就是降低冷却空气自身的温度.

因此, 使用航空发动机航空燃料作为冷源降低涡轮冷却空气温度(cooled cooling air, 简称 CCA), 是提高空气冷却品质的有效途径. CCA 冷却技术中所采用的燃料多为航空煤油, 研究航空煤油的热物性对对流换热过程和喷射雾化的研究就显得非常重要, 也是 CCA 冷却技术的基础与关键^[1].

收稿日期: 2014-03-06

基金项目: 国家自然科学基金(51176093)

作者简介: 裴鑫岩(1987—), 男, 内蒙古包头人, 博士生, 主要从事航空发动机煤油主动冷却技术的研究与设计.

但由于煤油成分非常复杂,以国产航空煤油为例,已测得成分多达 100 多种,这对于煤油物性的分析造成很大困难,所以需要开发合理可靠的替代燃料模型来对煤油的热物性进行研究。

在替代模型的热物性研究中,Huber 等人使用加权最优化方法,综合考虑了密度、声速、黏度、热导率和蒸馏曲线分别提出了 Jet-A-4658 的 8 组分,Jet-A-3638 的 7 组分^[2]和 S-8 的 7 组分^[3] 3 种替代模型;之后 Heneghan 等人^[4]针对 JP-8 和 JP-7 的特点分别开发了 11 组分和 6 组分替代模型;Bruno 等人^[5]针对 Jet-A/JP-8,将少于 3 组分的简单替代模型和大于 3 组分复杂替代模型进行了分类对比研究。目前国内对于 RP-3 航空燃料替代组分的研究一直在进行,范学军等人^[6]基于 Dagaut 等人^[7]开发的 3 组分模型修改而来的针对 RP-3 的 3 组分模型;张若凌等人^[8]依据上百种组分参与的计算结果所提出的 3 组分模型;程迪等人^[9]利用多目标优化方法得出的 5 组分模型;仲峰泉等人^[10]针对超临界煤油传热实验所提出的 10 组分模型。可以看出以上替代模型提出的出发点与优化标准都不同,研究者多是针对所研究的具体问题提出的对应模型,相互之间可参考性很小,例如程迪等人^[9]利用 3 组分模型^[6]所计算的燃烧室出口温度就比实验值偏高,这样模型的可应用范围比较局限。

本文研究主要针对煤油传热及喷射雾化过程所涉及的热物性,以国产 RP-3 航空煤油为研究对象,提出了 3 种替代燃料模型,并对它们的热物性开展相关理论与实验研究。

1 替代燃料模型

替代燃料成份的选择取决于研究目的与燃料本身的物质组成,一般按照研究目的不同,分为物理替代和化学替代两种^[11]。物理替代燃料具有和实际燃料相似的物理特性,例如密度、比热容、声速、黏性和热导率等,可以用来计算燃料的储存、加热及流动等只存在物理变化的过程;化学替代燃料具有和实际燃料相近的化学组分及相近的点火延迟、绝热火焰温度、层流火焰速度和化学反应速率等化学特性,可以用来模拟燃料的点火、燃烧以及裂解和结焦等化学过程。

本研究是基于 Supertrapp® 软件^[12]进行二次开发,研究 RP-3 的热物性替代燃料模型。Supertrapp® 可用于预测纯燃料或混合燃料的热力学特性和传输性质,采用广义对应状态法则和

Peng-Robinson 方程计算燃料组分的相均衡性质和传输性质,如燃料的密度、压缩因子、焓值、熵值、比定压热容 c_p 、比热容比 c_p/c_v 、声速、焦耳-汤姆逊系数(Joule-Thomson coefficient)及黏性系数和热导率。

国产 RP-3 航空煤油,它是单一直馏馏分或直馏组分与精制组分混合组成,以直链烷烃和环烷烃为主,两者共占 70%~90%,碳数分布从 C_{10} - C_{16} ,密度为 $0.775\sim 0.830\text{ g/cm}^3$ 。图 1 为本研究中所测得的航空煤油 RP-3 的色谱-质谱的分析结果,其可测成分组分高达 60 余种。

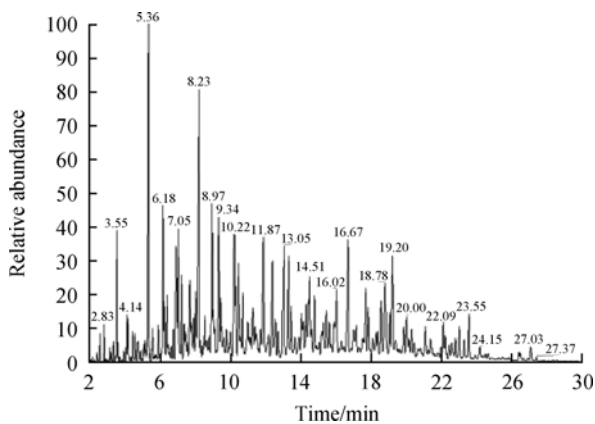


图 1 RP-3 色谱-质谱分析结果谱图
Fig. 1 GC-MS Analysis of RP-3

表 1 为整理后的 RP-3 的主要成分的分类结果。可以看出 RP-3 主要可分为饱和烃,不饱和烃与芳烃类,其中饱和烃类特别是直链烷烃占了很大一部分。物质根据温度和压力的不同,会呈现出液体、气体、固体等状态变化。在温度高于某一数值时,任何大的压力均不能使该物质由气相转化为液相,此时的温度即被称之为临界温度 T_c ;而

表 1 RP-3 成分组成分析
Table 1 Composition of RP-3

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

在临界温度下,气体能被液化的最低压力称为临界压力 p_c . 当一种物质的温度和压力同时高于 T_c 与 p_c 时,则称其为超临界流体. 在超临界物态的相变过程中,临界点两相差别消失,相变是连续相变,没有相变潜热. 在拟临界点附近,会出现流体的密度、黏度、溶解度、热容量、介电常数等所有流体的物性发生急剧变化的现象. RP-3 航空煤油的临界温度 645.5 K,临界压力为 2.39 MPa^[13].

表 2 是 3 种组分替代模型,根据所测得的 RP-3 的组分提出 13 组分替代模型,由于直链烷烃所占比重大,将色谱质谱所未测得的组分归类到直链烷烃类中. 之后对 13 组分替代模型进行进一步简化,按照 RP-3 主要成分所占的比重分类简化为 3 组分替代模型,其中正癸烷为直链烷烃的代表,1,2,4 三甲基环己烷为环烷烃的代表,1,3,5 三甲苯为芳香烃类物质的代表. 这 3 种组分在所测得的 RP-3 组分中含量中明显高出其他同类组分. 为讨论组分对于物性计算结果的影响,特别将只由正癸烷组成的单组分替代模型进行对比计算分析.

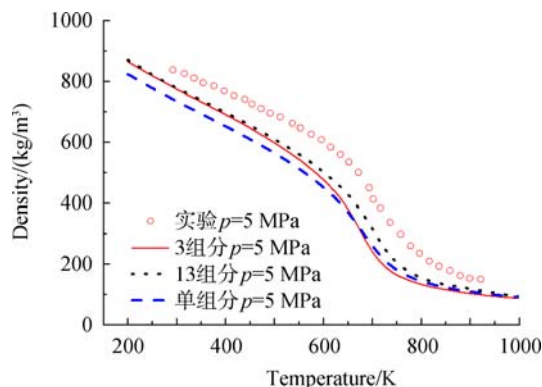
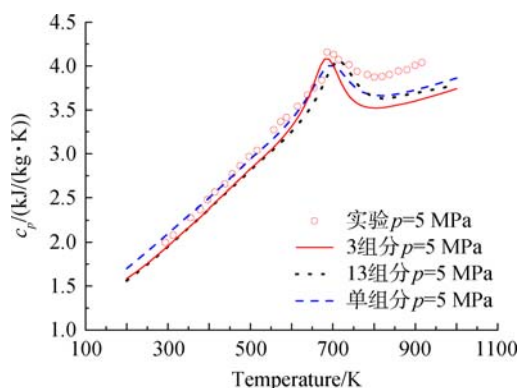
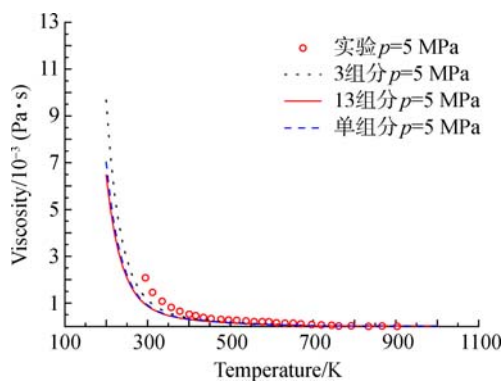
表 2 3 种组分替代模型

Table 2 Model of surrogate components

组分模型	组分替代	质量分数/%
单组分	正癸烷($n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$)	100
	正癸烷($n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$)	53.27
3 组分	1,2,4 三甲基环己烷(C_9H_{18})	31.37
	1,3,5 三甲苯(C_9H_{12})	15.36
	庚烷($n\text{-C}_7\text{H}_{16}$)	0.28
	正 11 烷($n\text{-C}_{11}\text{H}_{24}$)	10.06
	正 15 烷($n\text{-C}_{15}\text{H}_{32}$)	1.03
13 组分	1,2,4 三甲基环己烷(C_9H_{18})	31.37
	辛烷($n\text{-C}_8\text{H}_{18}$)	1.47
	正 12 烷($n\text{-C}_{12}\text{H}_{26}$)	6.21
	丁基环己烷($n\text{-C}_{10}\text{H}_{20}$)	2.06
	正壬烷($n\text{-C}_9\text{H}_{20}$)	6.51
	正 13 烷($n\text{-C}_{13}\text{H}_{28}$)	4.99
	1,3,5 三甲苯(C_9H_{12})	4.12
	正癸烷($n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$)	15.67
	正 14 烷($n\text{-C}_{14}\text{H}_{30}$)	4.29
	反氢化萘烷($\text{C}_{10}\text{H}_{18}$)	11.24

2 替代燃料模型热物性计算分析

图 2~图 4 分别表示了使用单组分、3 组分、13 组分替代模型所计算的热物性结果与实验

图 2 $p=5$ MPa 下密度随温度变化的对比Fig. 2 Density distribution with temperature for different models in $p=5$ MPa图 3 $p=5$ MPa 下比热容随温度变化的对比Fig. 3 Specific heat distribution with temperature for different models in $p=5$ MPa图 4 $p=5$ MPa 下黏度随温度变化的对比Fig. 4 Viscosity distribution with temperature for different models in $p=5$ MPa

值^[14]比较,其物性包括比热容,密度,黏度,均在压力为 5 MPa 下随温度增加的变化。首先可以看到,所得的实验值普遍要比计算值要高,主要原因是实验^[14]中所用的煤油主要应用在火箭发动机中,而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,计算中所采用的煤油为 RP-3 航空煤油,但总体差别不大(大致都在 5% 范围内),从各图中分布曲线可以看出,各个模型在 3 个物性参数的计算结果上与实验曲线的分布趋势大致相同。其中单组分中因为只采用了正癸烷,这种相同的分布趋势就可以说明正癸烷在替代模型中所起到的作用是非常重要的,航空煤油的物性变化主要取决于正癸烷的特性。另一方面,可以看出不同替代模型在 5 MPa 超临界压力下所计算的结果还是存在一些差异的。从图 2 中密度分布可以看出,单组分的计算结果会低于多组分的模型,这与物质的单一性有关,但过低的密度预测会使得计算的雷诺数相对较低,对于转捩点的预估会造成一定偏差;多组分替代模型中在拟临界温度(680 K)前 3 组分和 13 组分替代模型的计算结果基本相同,而在拟临界温度附近差别比较大。从图 3 中可以看出不同模型的计算结果在比热容计算上会有一些区别,特别是对于峰值点的位置的预测与在拟临界温度后与实验值的差别。这是由于在实验过程中 RP-3 航空煤油在 750 K 左右已经开始发生热裂解反应,由于裂解反应,煤油本身的物质组成及物性会发生很大的变化,所以在 750 K 以后的实验数据与计算结果会有一些差别是合理的。另外从比热容的计算结果上就可以看出单组分替代模型有他的不足之处,在拟临界温度处峰值点的大小和位置的预测不如多组分替代模型准确,这就会对热沉的计算带来一定的偏差。图 4 中对于黏度的计算几个模型的差别不大,只有单组分模型计算的黏度要稍大一些,黏度预测偏大会对于附面层厚度的计算造成一定的偏差。总之,从不同模型与实验结果的对比可以看出,3 组分和 13 组分替代模型在拟临界温度前的计算结果基本相同,只有在拟临界温度附近会有一些差别,所以可以认为 3 组分替代模型可以较好地将 RP-3 的热物性的变化规律表现出来。

图 5~图 8 采用 3 组分替代模型,对比了 5 个压力值下燃料的热物性随温度变化的结果,压力为 1,2 MPa 表征亚临界状态特性,压力为 3,5 MPa 表征超临界状态特性,压力为 15 MPa 代表的是燃料应用在火箭发动机工况下中的超高压特

性。RP-3 航空煤油一般在 750 K 左右就会发生裂解反应,在 750 K 以下燃料的裂解过程可以忽略,所以从理论上讲煤油在这个温度以上已经发生了显著的化学变化,需要考虑裂解产物的影响,而替代组分模型的计算结果还只是集中在物理变化过程,这样在高温段替代模型的计算结果只能作为一个物性变化趋势的参考。

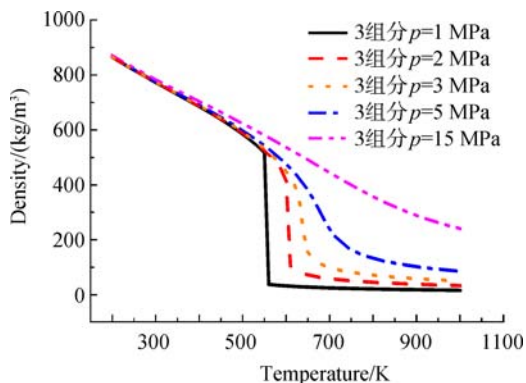


图 5 密度随压力和温度的变化

Fig. 5 Density distribution with temperature in different pressures

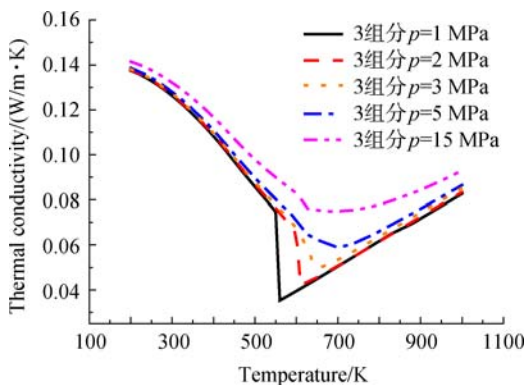


图 6 热导率随压力和温度变化

Fig. 6 Thermal conductivity distribution with temperature in different pressures

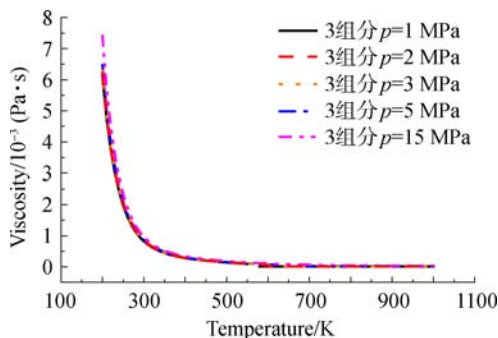


图 7 黏度随压力和温度变化

Fig. 7 Viscosity distribution with temperature in different pressures

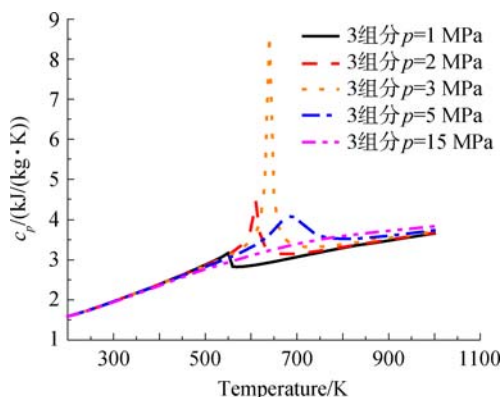


图8 比热容随压力和温度变化

Fig. 8 Specific heat distribution with temperature in different pressures

在图5~图8中,从各参数整体变化的趋势来看,煤油的密度、黏性会随着温度的升高而减小,热导率先降后增,比热容会缓慢的增大,同时从1~5 MPa四个压力下的拟临界温度是不同的,几个物性参数变化程度也不同.从图5密度分布可以看出,除在15 MPa的高压力下,随着温度的升高,在拟临界点前,密度缓慢下降,温度超过拟临界温度后煤油直接进入超临界态,没有经历两相共存的状态,密度有一个突降过程,之后有渐渐趋于缓慢下降,密度与温度和压力的关系是一个典型的非线性关系.同时,随着压力的升高所对应的拟临界温度升高,导致这个下降过程发生的温度点提高,超临界压力后密度下降的速度也逐渐减缓.密度随温度和压力的变化十分敏感,微小的压力或温度的变化都会导致密度的急剧变化,特别是在拟临界温度点附近.可以说,密度是超临界流体的重要性质之一.图6中从热导率的分布可以看出,在拟临界温度前,热导率随着温度的升高近似地线性降低,在拟临界点位置处与密度变化的趋势类似,会有一个剧烈下降的过程,之后会缓慢的上升.随着压力的升高热导率在整体上会略有增大.图7中表示的为黏度的分布,黏度是衡量流体传质能力的重要物理参数,从图7中可以看出,黏度的变化在拟临界温度之前下降较快,而在拟临界点处却无剧烈变化,变化速率随温度的升高相对平缓,并且随压力变化不明显;可以说,当超过拟临界点时,煤油的黏度比液体状态下小了一个数量级,达到了气体的量级,即煤油进入超临界态后具有气体的低黏度的特性.图8为煤油比热容的分布,比热容能够直接反应体积内能、分子间相互作用和体系微结构的相关信息.拟临界点前比热容随着温度的增加而逐渐增大,除15 MPa

高压下外,在其他压强下随温度变化会有一个骤然上升之后回落的现象.不同压力下峰值略有不同,上升和回落的程度也不同,靠近临界压力的条件下,比热容的峰值会比较大,而且处于超临界压力3 MPa的比热容峰值要比处于亚临界压力时变化更剧烈.同时,可以看到压力越高发生突变的温度越高,这也是拟临界温度变化所引起的.比热容总体趋势是随着温度的增大而缓慢升高的.

总之,当温度升高时,密度的减小会引起流速的增大,加上黏性的降低会使得雷诺数增大,湍动能增大;另一方面黏性的降低会使附面边界层厚度变薄,而比热容的增大则会增强燃料的吸热能力,导热系数的减小则会削弱热量的传递,它们的综合作用会造成普朗特数的减小,随着温度的升高会导致燃料换热的增强.压力的变化会对密度的变化,比热容的峰值分布,热导率的大小,拟临界温度产生一定的影响.高压15 MPa下各参数变化均相对平稳.

3 热沉对比分析

为更好地验证替代模型的可靠性,特别针对燃料吸热性能(即热沉)的性质进行相关实验研究.图9为本研究中测量RP-3航空煤油热沉的实验装置,装置主要由燃料供给系统,预热与加热系统,冷却系统,数据采集系统4部分组成.本套实验装置可以在流动状态下完成压力为1,3,5 MPa的RP-3航空煤油的热沉测量,实验中流量均为1 g/s.

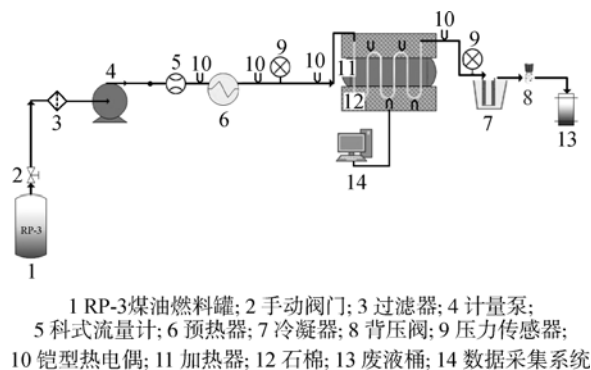


图9 燃料热沉测量实验装置

Fig. 9 Set up of heat sink experiment

图10为不同压力下RP-3航空煤油在3个压力下,采用3组分替代模型的计算结果与实验结果的对比.当温度低于拟临界温度时,在不同压力下,无论是计算结果还是实验数据,其热沉值几乎

都是不随压力变化的,一些实验研究中^[15]也指出不同压力下,燃料的热沉基本相同。可以看出在 650 K 前,计算的物理热沉与实验得到的热沉值符合良好,这主要是因为当燃油温度低于其拟临界温度时,燃料传热性能的提高主要都归功于物理热沉。而当压力为 3 MPa 时,计算热沉曲线在临界点附近一个明显的跃升,跃升的原因是比热容曲线斜率在临界点后有较大变化(如图 8),3 MPa 实验中,煤油在临界态物性变化很剧烈,实验值的跃升明显。其次,可以看到在 700 K 以后,实验值与计算值的差别越来越大,主要原因是之前介绍的 RP-3 航空煤油在 700 K 以后,裂解反应将占主导地位,这有利于燃料的吸热,使得热沉增大,可以说图中实验值高出计算值的部分即为燃料的化学热沉。最后,从总体趋势来看,实验结果与计算结果符合良好,这个结果表明 3 组分替代模型在预测物理热沉上完全可以胜任。

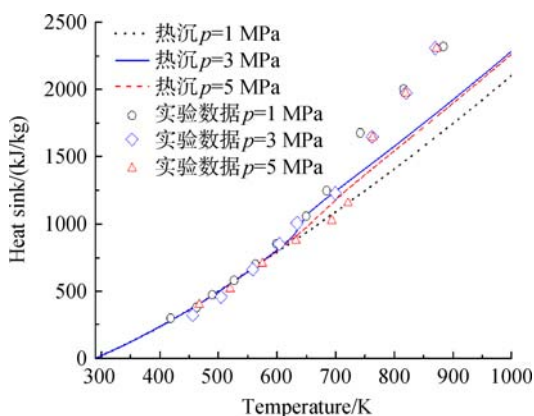


图 10 热沉计算结果与实验对比

Fig. 10 Heat sink comparison between numerical and experimental results

4 结 论

本文以 RP-3 航空煤油为研究对象,基于实验中所测得的 RP-3 液相组分,提出了单组分、简化 3 组分和详细的 13 组分 3 种替代模型。不同替代模型计算结果与实验数据的对比表明采用本文提出的 3 组分替代模型可以很好地描绘出 RP-3 航空煤油在各种状态下的物性的变化趋势。同时与本文实验所测热沉对比的结果表明 3 组分替代模型可以较好的预估出燃料的物理热沉的变化。热物性计算结果表明,拟临界温度前后,密度、黏度、热导率和比热容变化明显,在拟临界温度附近, $p=3$ MPa 的比热容变化最剧烈;超临界压力

下,当温度升高时,密度减小,黏性降低,热导率则先降后增,而比热容逐渐增大,会导致换热的增强;压力的改变会对密度变化程度,比热容的峰值分布,热导率的大小,拟临界温度带来一定的影响。

参考文献:

- [1] 朱锟,邓宏武,王英杰,等. 超临界压力下航空煤油结焦换热综述及实验[J]. 航空动力学报, 2010, 25(11): 2472-2478.
ZHU Kun, DENG Hongwu, WANG Yingjie, et al. Review and experimental study of the coke deposition and heat transfer characteristics of aviation kerosene at supercritical pressure[J]. Journal of Aerospace Power, 2010, 25(11): 2472-2478. (in Chinese)
- [2] Huber M L, Lemmon E W, Bruno T J. Surrogate mixture models for the thermophysical properties of aviation fuel jet-A[J]. Energy & Fuels, 2010, 24(6): 3565-3571.
- [3] Huber M L, Smith B L, Ott L S, et al. Surrogate mixture model for the thermophysical properties of synthetic aviation fuel S-8; explicit application of the advanced distillation curve[J]. Energy & Fuels, 2008, 22(2): 1104-1114.
- [4] Heneghan S P, Zabarnick S, Ballal D R, et al. JP-8+100: the development of high-thermal-stability jet fuel[J]. Journal of Energy Resources Technology, 1996, 118(3): 170-179.
- [5] Bruno T J, Smith B L. Evaluation of the physicochemical authenticity of aviation kerosene surrogate mixtures: Part 1 analysis of volatility with the advanced distillation curve [J]. Energy & Fuels, 2010, 24(8): 4266-4276.
- [6] 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. (in Chinese)
- [7] Dagaut P. On the kinetics of hydrocarbons oxidation from natural gas to kerosene and diesel fuel[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2002, 4(11): 2079-2094.
- [8] ZHANG Ruoling, JIANG Jin, LE Jialing. The simulation of endothermic fuel flow in cooling channels of scramjet [R]. Novosibirsk: International Conference on Methods of Aerophysical Research, ICMAR, 2008.
- [9] 程迪,王新竹,范学军. RP-3 煤油热物性替代模型研究[R]. 广西 桂林:中国力学学会高超声速专题研讨会暨第五届全国高超声速科学技术会议, 2012.
- [10] ZHONG Fengquan, FAN Xuejun, YU Gong, et al. Heat transfer of aviation kerosene at supercritical conditions [R]. AIAA-2008-4615, 2008.
- [11] Leach J W, Chapple P S, Leland T W. Use of molecular shape factors in vapor-liquid equilibrium calculations with corresponding states principle[J]. AIChE Journal, 1968, 14(4): 568-571.
- [12] Huber M L. NIST standard reference database 4: NIST

- thermophysical properties of hydrocarbon mixtures database [M]. Gaithersburg, MD: National Institution of Standards and Technology, 2007.
- [13] 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[J]. 燃料化学学报, 2006, 34(4): 466-470.
- SUN Qingmei, MI Zhentao, ZHANG Xiangwen. Determination of critical properties (t_c 、 p_c) of endothermic hydrocarbon fuels-RP-3 and simulated JP-7[J]. Journal of Fuel Chemistry and Technology, 2006, 34(4): 466-470. (in Chinese)
- [14] 胡志宏. 火箭发动机特种煤油传热特性的试验研究[D]. 西安: 西安交通大学, 1996.
- HU Zhihong. The experimental study on the heat transfer characteristics of special kerosene for rocket engine[D]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University, 1996. (in Chinese)
- [15] Fan X J, Zhong F Q, Yu G, et al. Catalytic cracking of China No. 3 aviation kerosene under supercritical conditions [R]. AIAA-2008-5130, 2008.

(编辑: 秦理曼)