

煤基喷气燃料代用组分神经网络 混合构建方法

刘振涛¹, 许全宏^{1,2}, 张弛^{1,2}, 霍伟业¹, 林宇震^{1,2}

(1. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院

航空发动机气动热力国家级重点实验室, 北京 100191;

2. 先进航空发动机协同创新中心, 北京 100191)

摘 要: 为了建立航空燃料的喷雾模型,用于高保真液雾燃烧数值模拟,提出了基于人工神经网络混合模型的煤基喷气燃料代用组分构建方法。基于这一构建方法,重点针对煤基喷气燃料的雾化特性,利用多组分混合燃料的理化性质数据库对神经网络进行训练,获得了混合燃料理化性质隐式预测模型,结合随机投点优化方法,构建出能够很好地模拟煤基喷气燃料目标理化性质的代用组分。结果表明:该代用组分包含了5种碳氢化合物成分,摩尔分数为11.46%正癸烷、23.29%正十二烷、49.87%正十四烷、6.66%异辛烷和8.72%甲基环己烷。通过雾化特性实验,验证了代用组分对真实燃料雾化性能的模拟效果。该代用组分构建方法可以较好地解决混合燃料模拟过程中的非线性问题,通过改变目标理化性质可构建出相应代用组分。

关 键 词: 煤基喷气燃料; 代用组分; 神经网络; 优化; 雾化

中图分类号: V312.3

文献标志码: A

Surrogate formulation methodology of coal-based jet fuel based on neural network mixing model

LIU Zhen-tao¹, XU Quan-hong^{1,2}, ZHANG Chi^{1,2},

HUO Wei-ye¹, LIN Yu-zhen^{1,2}

(1. National Key Laboratory of Science and Technology on Aero-Engine

Aero-thermodynamics, School of Energy and Power Engineering,

Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China;

2. Collaborative Innovation Center for Advanced Aero-Engine, Beijing 100191, China)

Abstract: In order to build spray model of aviation fuel for the high-fidelity numerical simulation of spray combustion, a surrogate formulation methodology was proposed for coal-based jet fuel based on artificial neural network mixture model. An implicit prediction model was developed on the blended physico-chemical properties using the multi-component fuel properties data set to train the neural network. And then the surrogate of coal-based jet fuel was formulated from the neural network mixing model by the stochastic points' optimization method, which could well simulate the target physico-chemical properties focusing on its atomization. Result shows that the surrogate is composed of 5 hydrocarbons (*n*-decane, *n*-dodecane, *n*-tetradecane, iso-octane and methylcyclohexane), their mole fraction are 11.46%, 23.29%, 49.87%, 6.66% and 8.72%, respectively. Compared with the real fuel, the atomization simulation of the surrogate was evaluated by experiments. This surrogate formula-

收稿日期:2016-02-19

基金项目:国家自然科学基金(51306010);北京市自然科学基金(3152020)

作者简介:刘振涛(1993-),男,辽宁瓦房店人,硕士生,主要从事航空替代燃料的研究。

tion methodology can solve the nonlinear issue in the mixing process, and formulate different surrogates for various requirements.

Key words: coal-based jet fuel; surrogate; neural network; optimization; atomization

近年来,为了解决国内石油资源短缺和对外依存度过高等问题,同时考虑到我国能源结构特点和价格优势,煤基喷气燃料作为一种具有较高潜力的航空替代燃料,在我国航空燃料应用方面取得了很大进展。煤基喷气燃料以费托合成为基础,这是一种对煤的深加工工艺,属于煤炭清洁高效利用技术,可以改变以往我国对煤炭资源的粗放利用方式,鉴于其经济性和环保性,成为了当前国际航空能源的研究热点^[1-2]。而煤基喷气燃料与传统航空燃料一样,其包含的碳氢化合物种类很多,成分复杂,这对于以液雾燃烧为主的航空发动机燃烧室数值仿真技术而言,无疑是除了复杂的湍流燃烧以外的又一瓶颈问题,直接影响到喷雾模型和化学反应机理的应用。因此,需要发展航空燃料的有限化学组成的代用组分,才能较好地解决燃烧数值模拟中遇到的困难,对于煤基喷气燃料也是如此。

喷气燃料的代用组分模型可分为物理代用和化学代用两大类^[3]:物理代用模型是对真实燃料的密度、黏性和挥发性等物理性质进行模拟;而化学代用模型则是针对化学组成、平均分子量和点火延迟等化学性质进行模拟。

在构建代用组分过程中,对碳氢燃料混合物的性质模拟能力是一个关键。目前大多数研究者采用了显式函数的线性混合模型,来计算多组分混合燃料的理化性质,包括碳(氢)原子数、摩尔质量、密度、热值、黏度和表面张力等,再以真实燃料的目标性质为优化目标,构建代用组分^[4-5]。例如, Kim 等^[4]利用显式函数优化得到了可以模拟 POSF-4658 标准喷气燃料的代用组分,并经过理化性质及点火延迟的基础燃烧性质的验证。

但是,线性的显式函数方法在描述混合燃料性质方面是具有局限性的,无法体现出化学组分和理化性质以及众多性质间的相互关联,而这种关联性具有显著的非线性特征^[4]。

近年来,随着所谓人工智能的发展,人工神经网络在各领域的应用越来越广泛。神经网络混合模型在模拟燃料性质的非线性关系上具有很好的效果^[6-8]。比如常见的 BP(back propagation)神经网络由输入层、隐含层和输出层组成^[7],能将误差反

向传递,具有较好的适应和学习能力^[9-10]。本文将利用 BP 神经网络建立对混合燃料理化性质的隐式“专家”模型,比显式函数更具通用性和扩展性。

在神经网络基础上发展的代用组分构建方法,可以生成煤基喷气燃料的代用组分。由于航空发动机燃烧室中的液体燃料均是通过喷射雾化、蒸发、混合后再燃烧的^[11],为了验证该代用组分在液雾燃烧中喷射雾化阶段的模拟能力,首先对其雾化特性与真实燃料进行了对比验证^[12]。

1 构建目标

1.1 选择代用组分的目标特性

在液雾燃烧过程中,液体燃料雾化效果对于燃烧的情况有重要影响,而索太尔平均直径 SMD (Sauter mean diameter,量符号记为 D_{sm})是表征燃料雾化效果的重要指标^[11],从 Lefebvre 等^[13]的 SMD 经验预测模型可以看出,燃料的密度、黏度和表面张力等对 SMD 影响颇大。考虑到净热值直接影响燃料的绝热火焰温度,且燃料碳原子摩尔分数和摩尔质量决定燃料的化学恰当比,因此对燃料燃烧的实际温度有明显影响。为了使构建的代用组分更具有代表性,最终选择碳原子摩尔分数、摩尔质量、净热值以及 20℃ 下的密度、黏度和表面张力作为代用组分构建的目标性质。

煤基喷气燃料目标理化性质^[14]如表 1 所示,该煤基喷气燃料中包含质量分数为 32.9% 直链烷烃、64.8% 支链烷烃和 2.3% 环烷烃。可以根据煤基喷气燃料的烃族分布及其目标理化性质选择候选组分。

表 1 煤基喷气燃料的理化性质^[14]

Table 1 Physico-chemical properties of coal-based jet fuel^[14]

参数	数值
碳原子摩尔分数	0.3154
摩尔质量/(g/mol)	173.2
密度(20℃)/(kg/m ³)	754.3
黏度(20℃)/(mPa·s)	1.302
表面张力(20℃)/(N/m)	0.02467
净热值/(MJ/kg)	43.68

1.2 代用组分候选组分的选择

费托合成的煤基喷气燃料具有无硫、无氮和少芳香烃的特点,因此燃烧污染排放物较少^[2].在对煤基喷气燃料代用组分进行研究时,可以根据以下要求选择候选组分^[4]:

- 1) 目标燃料的理化性质和碳(氢)原子数与单组分的关联性.
- 2) 从反应机理角度尽量考虑其他代用组分

模型曾用到的候选组分.

根据以上两条原则,通过对现有的代用组分进行比较,分析了不同种类的碳氢化合物,选择 6 种常见的碳氢化合物作为候选组分,如表 2 所示,其目标性质数据源自 ASPEN 软件.从表 1 和表 2 的对比可以发现,煤基喷气燃料的理化性质介于候选组分之间,需要这 6 种碳氢化合物按照一定的配比混合模拟.

表 2 候选单组分的理化性质(数据源自 ASPEN 软件)

Table 2 Physico-chemical properties of candidate single component (from ASPEN)

参数	组分					
	正癸烷	正十二烷	正十四烷	异辛烷	甲基环己烷	甲苯
碳原子摩尔分数	0.3125	0.3158	0.3182	0.3077	0.3333	0.4667
摩尔质量/(g/mol)	142.3	170.3	198.4	114.2	98.19	92.14
密度(20℃)/(kg/m ³)	731.4	749.32	762.3	696.7	770.1	869.2
黏度(20℃)/(mPa·s)	0.9152	1.489	2.320	0.5064	0.7319	0.5878
表面张力(20℃)/(N/m)	0.02387	0.02539	0.02659	0.01880	0.02388	0.02851
净热值/(MJ/kg)	44.24	44.11	44.02	44.34	43.36	40.53

2 构建方法

在构建代用组分时,为了快速获得可验证的混合燃料理化性质数据库,采用了 ASPEN 软件计算而得,再利用该数据库对神经网络进行训练和验证,得到候选组分的神经网络混合模型.基于此模型,通过优化算法自动、快速获得接近煤基喷气燃料性质的最优代用组分.

2.1 混合模型数据库

混合模型数据库主要包含两部分:6 种候选组分混合摩尔分数以及混合物 6 个目标性质.为了适应人工神经网络的训练和验证,建立了 110 组 6 种候选组分不同混合摩尔分数对应的 6 种理化性质的混合模型数据库.在 MATLAB 软件中随机产生 110 组 6 种候选组分混合摩尔分数,将这 110 组摩尔分数代入化工模拟软件 ASPEN 中,利用 NRTL(non-random two liquid)模型计算出混合物的目标性质^[15].NRTL 模型是利用基于同性粒子相斥和局部电中性两点假设的过量 Gibbs 能表达式描述完全电离的混合溶液电解质体系,经过不断的拓展和补充,NRTL 模型能很好地预测混合物的性质参数^[16].

2.2 神经网络混合模型

通过训练后得到的神经网络混合模型具有联想记忆和预测能力^[6],将根据 6 种候选组分混合摩尔分数的输入条件,计算出 6 种目标理化性质的输出结果,如图 1 所示.

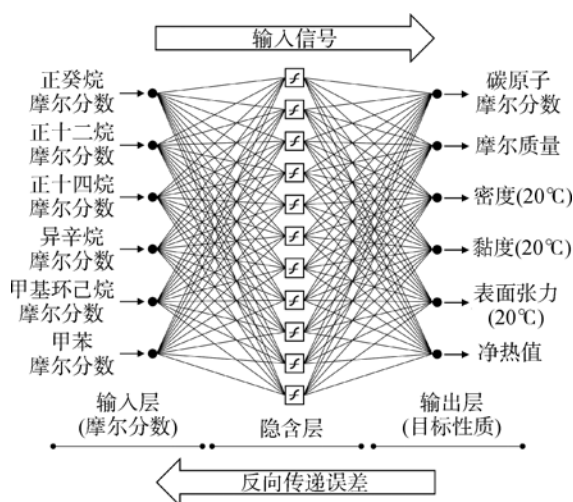


图 1 神经网络模拟混合模型的输入输出

Fig. 1 Input and output of neural network mixing model

为了获得满足混合燃料性质预测要求的神经网络模型,需要经过如下两个过程:

首先,确定神经网络输入层、输出层和隐含层节点数.实际问题是对 6 种候选组分组成的混合燃料的 6 种目标理化性质进行预测,以此确定神经网络的主要参数.本次求解的问题包含了 6 个输入项和 6 个输出项,因此神经网络输入层和输出层的节点数均为 6.利用式(1)确定神经网络的隐含层节点数^[17].

$$L < \sqrt{(m+n)} + a \quad (1)$$

式中 m 和 n 表示输入和输出的个数,即 $m=6$, $n=6$; L 代表神经网络的隐含层节点数; a 一般取 10.通过试算确定隐含层的最佳节点数,本文确定的神经网络隐含层节点数为 $L=11$.

其次,利用混合模型数据库训练神经网络.从 110 组混合模型数据库中随机选出 100 组数据,用来训练神经网络,其中各组分的摩尔分数定为输入,对应的目标性质为输出,生成具有预测能力的神经网络模型.隐含层每一个神经元计算带权重的输入层信号之和,并将计算结果和阈值(某一已知目标输出,设为 θ)比较,决定其传递给输出层的信号.

本文采用的 BP 神经网络使用 S 形激活函数将输入层摩尔分数值正向传递给隐含层.

$$X = \sum_{i=1}^6 x_i \omega_i - \theta \quad (2)$$

$$Y = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (3)$$

其中 X 是神经元的净权重输入之和, x_i 为第 i 个输入的值, ω_i 为第 i 个输入所占的权重, Y 是神经元传递给输出层的值^[9].

同理,隐含层神经元的输出值也是使用类似的激活函数正向传递给输出层神经元,让输出层计算目标性质预测值.

将目标性质的预测值与实际值比较,求得误差.根据该误差值,反向对隐含层神经元到输出层神经元的权重以及输入层到隐含层神经元的权重进行修改,得到新一轮的权重值.

如此循环迭代计算预测值误差并修改神经元权重,直到神经网络预测值误差满足精度要求,训练结束.

这样的神经网络模型无法用显式函数的形式表达,但其中隐含了从输入条件到输出结果的内在关系.最后用余下的 10 组数据对神经网络模型的预测误差进行分析.

图 2 展示了经过 100 组训练数据训练后的神经网络混合模型预测值和 ASPEN 软件原始值之

间的对比关系,横坐标为 ASPEN 软件原始值,纵坐标为神经网络混合模型预测值,均经过正则化处理.由图可知,训练后的神经网络混合模型对从碳原子摩尔分数到净热值这 6 个目标性质都能够很好地预测,与原始值差异很小,其标准差仅为 0.000 92.

而图 3 则展示了训练后的神经网络模型对余下 10 组验证数据的预测值和原始值之间的误差.横坐标表示 10 组样本序号,纵坐标是神经网络混合模型的预测值与原始值的相对误差,图中不同的曲线表示了 6 种不同的目标性质.可见,各目标性质的预测误差在 0.25% 内.总体来说,该神经网络混合模型具有较高的预测能力,可用于对混合燃料目标性质的预测.

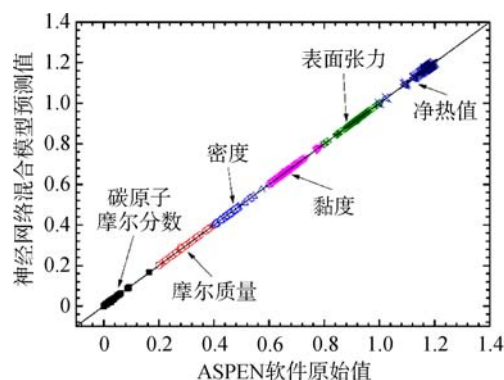


图 2 神经网络混合模型的目标值与预测值对比
Fig. 2 Comparison of target and predicted values of neural network mixing model

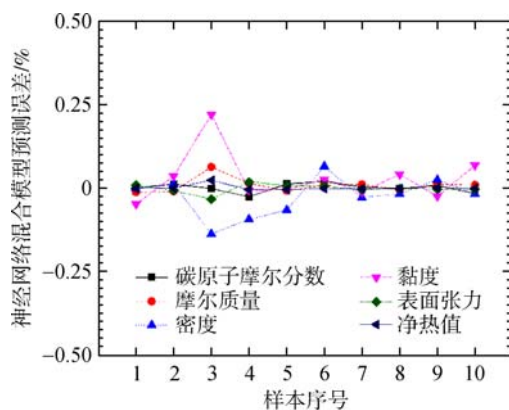


图 3 神经网络混合模型预测误差

Fig. 3 Prediction error of neural network mixing model

2.3 自动寻优

将煤基喷气燃料的 6 个目标性质作为优化目标,借助神经网络混合模型寻找到最优的 6 种碳氢化合物摩尔分数组分,即代用组分模型,当然摩尔分数存在 0~1 范围取值以及总和为 1 的约束

条件. 代用组分的性质数值与真实燃料的目标性质数值之间的相对平方差作为优化目标函数

$$S^2 = \sum_{j=1}^N \left[\frac{a_j - b_j}{b_j} \right]^2 \quad (4)$$

其中 j 为目标性质序号, a_j 是神经网络混合模型预估值, b_j 是煤基喷气燃料目标性质实验值, N 是目标特性的数量.

以 $S^2 < 0.005$ 作为目标函数可接受的误差. 本文选用了随机投点法作为优化算法, 求出满足条件的最优代用组分.

3 代用组分

通过上述构建目标与方法, 获得了煤基喷气燃料的代用组分模型, 摩尔分数为 11.46% 正癸烷、23.29% 正十二烷、49.87% 正十四烷、6.66% 异辛烷和 8.72% 甲基环己烷, 不含甲苯. 根据神经网络混合模型, 该代用组分的目标性质与煤基喷气燃料的理化性质差异对比见表 3, 差异均在 4% 在内, 预计可以较好地模拟真实燃料性能. 该

表 3 代用组分和煤基喷气燃料的理化性质对比

Table 3 Comparison of physico-chemical properties of coal-based jet fuel and surrogate

参数	燃料类型		模拟误差/%
	代用组分	煤基喷气燃料	
碳原子摩尔分数	0.3176	0.3154	0.70
摩尔质量/(g/mol)	171.1	173.2	1.21
密度(20℃)/(kg/m ³)	725.2	754.3	3.86
黏度(20℃)/(mPa·s)	1.275	1.302	2.09
表面张力(20℃)/(N/m)	0.02526	0.02467	2.39
净热值/(MJ/kg)	44.04	43.68	0.82

代用组分只有 5 组分, 不含芳香烃, 这与煤基喷气燃料的组成和性质特点是相符的.

4 实验验证

构建的代用组分是以理化性质为目标的, 雾化性能是影响液雾燃烧的首要因素之一, 为了验证代用组分与真实燃料的雾化性能差异, 将采用燃烧室中的空气雾化喷嘴进行实验验证.

4.1 雾化实验简介

雾化实验在图 4 所示的实验装置中进行^[18]. 其中, 旋流器是内外双旋流器结构, 内旋流器为旋流数为 0.91 的斜切孔式旋流器, 以流动方向为基准, 其旋向为右旋; 外旋流器是旋流数为 0.93 的径向叶片式旋流器, 以流动方向为基准, 其旋向为左旋. 燃油喷嘴采用空心喷雾锥型离心喷嘴.

液体燃料经过离心喷嘴和旋流器文氏管与空气混合雾化, 利用马尔文激光粒度测试仪^[19]测量空气雾化喷嘴下游的索太尔平均直径, 该设备的测量误差小于 1%. 实验在常温常压下进行, 离心喷嘴供油压力 p_i 从 0.1~1 MPa, 旋流器空气降压范围从 0~2000 Pa.

4.2 雾化实验结果

从图 5、图 6 和图 7 中可以看出, 代用组分和真实煤基喷气燃料的 SMD 值非常接近, 误差为 ±5%. 因为其影响雾化的燃料密度、黏度和表面张力等理化性质误差在 4% 以内. 但同时也会发现, 当空气气压降为 2000 Pa, 供油压力 p_i 小于 0.2 MPa 时, 两者之间的差异略大, 达到 6.5%, 真实燃料的雾化颗粒度 SMD 更小, 有可能导致不同的燃烧室点火特性. 这在该代用组分应用过程中是需要注意的.

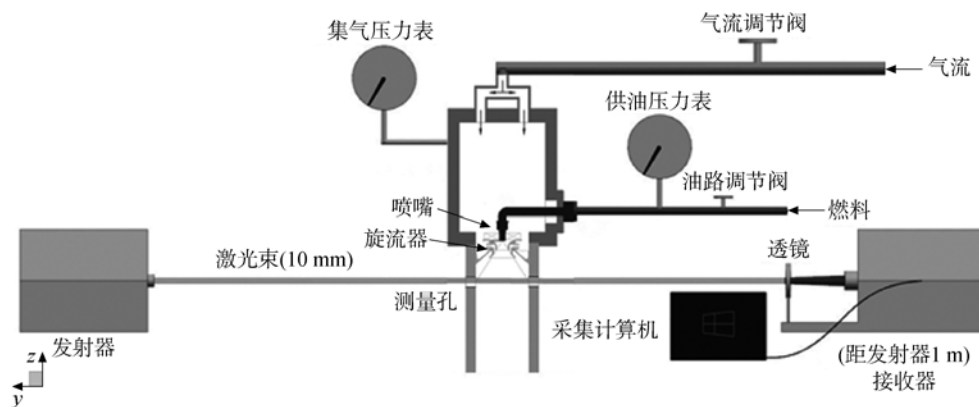


图 4 马尔文激光粒度测量系统

Fig. 4 Malvern laser particle size measurement system

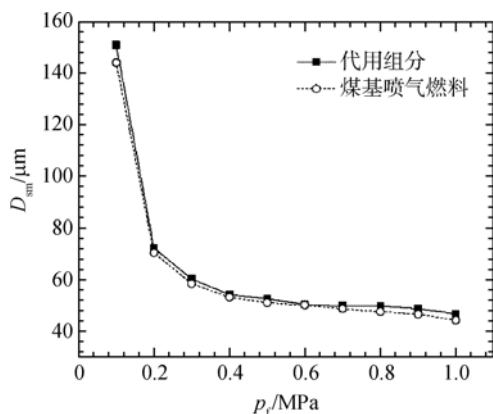


图 5 煤基喷气燃料和代用组分雾化 SMD 对比
(空气压降为 0 Pa)

Fig. 5 Comparison of SMD of coal-based jet fuel and surrogate (air pressure drop of 0 Pa)

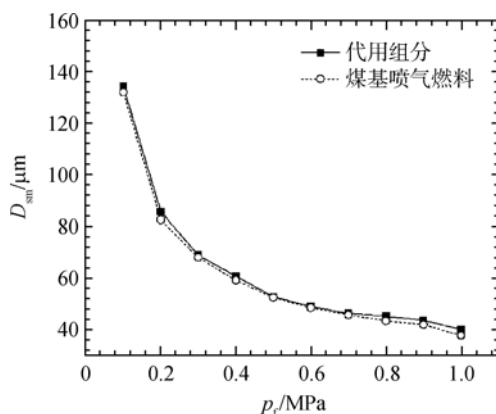


图 6 煤基喷气燃料和代用组分雾化 SMD 对比
(空气压降为 500 Pa)

Fig. 6 Comparison of SMD of coal-based jet fuel and surrogate (air pressure drop of 500 Pa)

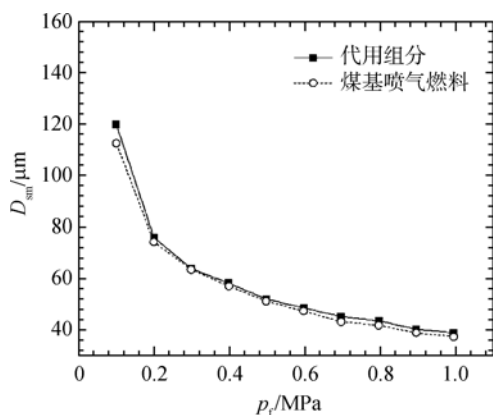


图 7 煤基喷气燃料和代用组分雾化 SMD 对比
(空气压降为 2000 Pa)

Fig. 7 Comparison of SMD of coal-based jet fuel and surrogate (air pressure drop of 2000 Pa)

5 结 论

本文提出了基于神经网络混合模型的煤基喷气燃料代用组分构建方法. 同时, 重点针对煤基喷气燃料的雾化特性, 以碳原子摩尔分数、摩尔质量、净热值以及 20℃ 下的密度、黏度和表面张力 6 种理化性质为目标构建了煤基喷气燃料的 5 组分代用组分模型, 具有较好地模拟真实燃料理化性质的能力, 同时采用空气雾化喷嘴的雾化实验, 在不同的空气压降和供油压力下验证了该代用组分的雾化性能, 其 SMD 与真实煤基喷气燃料非常接近. 但该代用组分的化学反应特性还需进一步验证.

未来, 可以将燃料的理化性质和燃烧性质等大量的实验数据纳入代用组分构建方法, 比如挥发性、十六烷值、烟点等, 这是神经网络混合模型的优势, 可获得更接近于真实燃料的代用组分模型, 据此发展相应的喷雾模型和反应机理, 有助于更深刻地理解燃料组成对燃烧性能的影响机制.

需要注意的是, 尽管神经网络混合模型具有良好的预测能力, 但其行为类似于“黑箱”, 缺乏对物理机制的描述, 对此应有充分的认识. 此外, 并不是所有的混合燃料目标性质都具有复杂的非线性混合关系, 比如碳原子摩尔分数和摩尔质量采用线性显式函数完全足够, 因此更合理的混合模型应该是显式和隐式相结合的方式.

参考文献:

- [1] 白凤华, 苏海全, 张玉龙, 等. F-T 合成技术生产替代燃料对环境的影响及对策[J]. 环境工程学报, 2008, 2(12): 1719-1723.
BAI Fenghua, SU Haiquan, ZHANG Yulong, et al. Environmental impact and relevant prevention countermeasure for using F-T synthesis technology to produce alternative fuels[J]. Chinese Journal of Environmental Engineering, 2008, 2(12): 1719-1723. (in Chinese)
- [2] 白尔铮. 费托合成燃料的经济性及发展前景[J]. 化工进展, 2004, 23(4): 370-374.
BAI Erzhen. Economics and prospects of FT synfuels[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2004, 23(4): 370-374. (in Chinese)
- [3] Edwards T, Maurice L Q. Surrogate mixtures to represent complex aviation and rocket fuels[J]. Journal of Propulsion and Power, 2001, 17(2): 461-466.
- [4] 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.
- [5] 王玉秀. 由等张比容及克分子体积求表面张力[J]. 天然气

- 化工设计,1979(1):87-89.
- [6] 王俊清. BP神经网络及其改进[J]. 重庆工学院学报, 2007,21(3):75-77.
- WANG Junqing. BP neural network and its improvement [J]. Journal of Chongqing Institute of Technology, 2007, 21(3):75-77. (in Chinese)
- [7] Rocabrundo-Valdés C I, Ramírez-Verduzco L F, Hernández J A. Artificial neural network models to predict density, dynamic viscosity, and cetane number of biodiesel[J]. Fuel, 2015, 147:9-17.
- [8] Barradas-Filho A O, Barros A K D, Labidi S, et al. Application of artificial neural networks to predict viscosity, iodine value and induction period of biodiesel focused on the study of oxidative stability[J]. Fuel, 2015, 145:127-135.
- [9] 黄丽. BP神经网络算法改进及应用研究[D]. 重庆:重庆师范大学, 2008.
- HUANG Li. BP neural network algorithm improvement and application research[D]. Chongqing:Chong Qing Normal University, 2008. (in Chinese)
- [10] 柳松青. MATLAB神经网络BP网络研究与应用[J]. 计算机工程与设计, 2003, 24(11):81-83, 88.
- LIU Songqing. Research and application on MATLAB BP neural network [J]. Computer Engineering and Design, 2003, 24(11):81-83, 88. (in Chinese)
- [11] 黄勇, 林宇震, 樊未军, 等. 燃烧与燃烧室[M]. 北京:北京航空航天大学出版社, 2009.
- [12] Rizk N K. Fuel atomization effects on combustor performance[R]. AIAA-2004-3540, 2004.
- [13] Lefebvre H, Ballal D R. Gas turbine combustion[M]. 3rd ed. Boca Raton: CRC Press Incorporation, 2010.
- [14] Han L, Liu G, Zhang X. Alternative jet fuel from hydroisomerization of coal-based Fischer-Tropsch middle distillates[J]. American Chemical Society: Division of Energy and Fuels, 2012(57):817-818.
- [15] 徐建新, 张洪起, 刘继东, 等. 电解质 NRTL 模型的研究进展及应用[J]. 化工进展, 2013, 32(9):2023-2029.
- XU Jianxin, ZHANG Hongqi, LIU Jidong, et al. Research progress and application of electrolyte NRTL model[J]. Chemical Industry and Engineering progress, 2013, 32(9): 2023-2029. (in Chinese)
- [16] 夏云龙, 项曙光. 电解质 NRTL 模型的发展及应用[J]. 河北化工, 2004, 27(1):9-12.
- XIA Yunlong, XIANG Shuguang. The development and application of the electrolyte NRTL model [J]. Hebei Chemical Industry, 2004, 27(1):9-12. (in Chinese)
- [17] 王小川, 史峰, 郁磊, 等. MATLAB神经网络43个案例分析[M]. 北京:北京航空航天大学出版社, 2013.
- [18] 霍伟业, 林宇震, 张驰, 等. 正癸烷作为航空煤油雾化过程代理燃料的研究[J]. 航空动力学报, 2016, 31(1):188-195.
- HUO Weiye, LIN Yuzhen, ZHANG Chi, et al. Research on *n*-decane as surrogate fuel of aviation kerosene in atomization process[J]. Journal of Aerospace Power, 2016, 31(1): 188-195. (in Chinese)
- [19] 杨晔, 张镇西, 蒋大宗. 微粒直径及直径分布的激光测量技术[J]. 激光技术, 1997, 21(2):122-127.
- YANG Ye, ZHANG Zhenxi, JIANG Dazong. Laser techniques of measuring particles size and their size distribution[J]. Laser Technology, 1997, 21(2):122-127. (in Chinese)

(编辑:王碧琚)