

文章编号: 1000-8055(2023)04-0806-10

doi: 10.13224/j.cnki.jasp.20220836

基于人工神经网络模型的超临界 RP-3 热物性计算

陶凯航^{1,2}, 朱剑琴^{1,2}, 程泽源^{1,2}

(1. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191;
2. 北京航空航天大学 航空发动机气动热力国家级重点实验室, 北京 100191)

摘 要: 为准确得到超临界压力下 RP-3 的热物性, 基于人工神经网络(ANN)方法建立超临界 RP-3 的密度、黏度、比定压热容和导热系数的计算模型。以广义对应态法则计算得到的 RP-3 热物性结果训练神经网络, 并耦合了实验误差模型得到修正后的 ANN 模型。计算温度变化范围为 300~800 K, 压力变化范围为 3~6 MPa。结果表明: ANN 模型能准确地预测超临界 RP-3 的热物性, 且计算精度比广义对应态法则计算得到的结果提高了 16.3%。在压力为 5 MPa 的工况下, ANN 模型预测的密度、黏度、比定压热容和导热系数的回归系数均大于 0.99, 与实验结果平均相对误差分别为 1.5%、4.1%、0.9% 和 0.7%。

关 键 词: 超临界; 航空煤油 RP-3; 广义对应态法则; 人工神经网络模型; 热物性
中图分类号: V231 **文献标志码:** A

Calculation of thermophysical properties of supercritical RP-3 based on artificial neural network model

TAO Kaihang^{1,2}, ZHU Jianqin^{1,2}, CHENG Zeyuan^{1,2}

(1. School of Energy and Power Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China;
2. National Key Laboratory of Science and Technology on Aero Engine Aero-thermodynamics,
Beihang University, Beijing 100191, China)

Abstract: In order to accurately obtain the thermophysical properties of RP-3 under supercritical pressure, the calculation models of density, viscosity, specific heat capacity at constant pressure and thermal conductivity of supercritical RP-3 were established based on artificial neural network (ANN) method. The RP-3 thermophysical properties obtained by the extended corresponding state were used to train the neural network, and the modified ANN model was obtained by coupling the experimental error model. The calculated temperature range was 300—800 K, and the pressure range was 3—6 MPa. The results showed that the ANN model can accurately predict the thermophysical properties of supercritical RP-3, and the calculation accuracy was 16.3% higher than that of the extended corresponding state. At the pressure of 5 MPa, the regression coefficients of density, viscosity, specific heat capacity at constant pressure and thermal conductivity predicted by the ANN model were all greater than 0.99. The mean relative errors with the experimental results were 1.5%, 4.1%, 0.9% and 0.7%, respectively.

Keywords: supercritical; aviation kerosene RP-3; extended-corresponding-state law;
artificial neural network model; thermophysical properties

收稿日期: 2022-11-02

基金项目: 国家自然科学基金(52122604); 航空发动机气动热力国防科技重点实验室基金(2021-JCJQ-LB-062-0409)

作者简介: 陶凯航(1994—), 男, 博士生, 主要从事超临界流动换热方面的研究。E-mail: taokaihang@buaa.edu.cn

通信作者: 程泽源(1992—), 男, 副研究员, 博士, 主要从事航空动力高温部件燃油冷却技术的研究。E-mail: chengzeyuan@buaa.edu.cn

引用格式: 陶凯航, 朱剑琴, 程泽源. 基于人工神经网络模型的超临界 RP-3 热物性计算[J]. 航空动力学报, 2023, 38(4): 806-815. TAO Kaihang, ZHU Jianqin, CHENG Zeyuan. Calculation of thermophysical properties of supercritical RP-3 based on artificial neural network model[J]. Journal of Aerospace Power, 2023, 38(4): 806-815.

为了满足高马赫数飞行,一般采用超燃冲压发动机作为高超声速飞行器的动力装置^[1]。在飞行马赫数为8时,燃烧室内的总温达到3 100 K,超过了飞行器上所用材料的耐温极限。目前,主动再生冷却技术是最有效的热防护手段之一,即利用发动机自带的吸热型碳氢燃料对高温部位进行冷却,从而保证飞行器能够远距离长时间的可靠工作。再生冷却系统中航空燃料系统压力为3.45~6.89 MPa,而典型碳氢燃料的临界压力为2.39 MPa,临界温度为645.5 K^[2],因此再生冷却系统属于超临界压力系统,燃料在工作时将达到超临界状态,热物性会发生剧烈的变化从而使流动传热变得更加复杂。因此,准确预测超临界状态下碳氢燃料的热物性规律,对其流动传热的研究和发动机热管理系统设计具有重要的科学意义和工程价值。

碳氢燃料的组成成分十分复杂,以国产航空煤油 RP-3 为例,其成分超过300种。邓宏武等^[3-5]通过超临界碳氢燃料多功能流动与换热实验台测定了 RP-3 的密度、黏度、比定压热容在不同压力、不同温度下的数值。徐国强等^[6]基于瞬态热线法原理设计研制了一种适用于高温高压条件下测量 RP-3 导热系数的实验装置,对导热系数随温度的变化进行了测定。张志强等^[7]通过流动型比热容计和振动弦法分别测量 RP-3 的运动黏度。严俊杰等^[8]对超临界碳氢燃料在2 mm直径竖直圆管内的换热特性进行了研究,得到了浮升力影响下的对流换热实验关联式。

通过实验手段测量碳氢燃料热物性的成本较高,测试时间长,数据量少,且严格达到实验要求的边界条件困难。而广义对应态法则(extended corresponding state, ECS)^[9]在保证工质热物性精度的同时节约了时间和成本,被广泛应用于超临界流体的热物性研究。其基本原理是利用热力学上待求工质和参考工质的相似性,通过保证相对压力和相对温度来获得待求工质的物性。

范学军等基于 ECS 针对国产航空煤油 RP-3 的三组分替代燃料^[10]和十组分替代燃料^[11]进行物性计算,与实验结果比较表明,ECS 能较好预测热物性的变化趋势,但在拟临界区域附近存在较大偏差。姚长鑫等^[12]提出以正十二烷、2,5-二甲基己烷和甲苯为组分的三组分替代燃料模型来反映 RP-3 的热物性,发现在低温段物性结果对实验物性的吻合程度较高,但在高温段预测精度有

所下降。程泽源等^[13]应用 ECS 对比了 RP-3 的五种组分替代模型在不同压力下物性随着温度的变化情况,发现三组分模型对实验数据的预测精度最高,但在比定压热容和密度的预测上还存在一定偏差。

基于 ECS 的预测模型可以提供丰富的物性数据库,但在临界区域的物性预测精度方面仍有不足。随着人工智能技术的广泛应用,燃料热物性计算也逐渐采用人工神经网络(artificial neural network, ANN)模型来实现对实验物性值更准确的预测。

郝爽^[14]使用 ANN 模型将柴油的物性(密度、运动黏度、闪点、十六烷值等)与柴油的相对分子质量和分子特征建立关联,构建了相对误差小于5%的物性预测模型。向鹏程等^[15]基于 ANN 模型,研究了制冷剂 R410a 的压力、密度、焓、熵随温度的变化情况,将预测的平均相对误差控制在1%左右。Kanat 和 Zhao 等^[16-17]分别建立了关于氧化物-水混合纳米流体热物性的 ANN 模型,实现对非线性规律热物性的较好预测效果。Li 等^[18]基于 ECS 得到的 RP-3 热物性数据建立了 ANN 模型,实现了对 ECS 计算的物性值的准确预测,同时降低了计算成本,但缺乏对 RP-3 实验值的对比验证。

国内外研究证明了使用 ANN 模型可有效进行燃料热物性预测,但基于超临界 RP-3 实验物性开展的 ANN 预测研究相对较少。本文以 ECS 计算得到 RP-3 热物性样本作为训练数据,探究了拓扑结构以及样本数据量对 ANN 模型精度和效率的影响,最终利用实验数据得到的误差模型修正了 ANN 模型,可以精准预测超临界压力下 RP-3 的热物性。

1 模型的建立

1.1 ANN 模型

目前 ANN 模型大多采用 Rumelhart 等^[19]提出的误差反向传播算法(back propagation, BP)。BP 神经网络是一种多层前馈网络,其结构如图1所示,分为输入层、隐藏层和输出层。图中 T 和 p 为输入层的物理量,分别为温度和压力; ρ 、 μ 、 c_p 和 λ 为输出层的物理量,分别为密度、黏度、比定压热容和导热系数。需通过输入和输出样本集对模型进行训练,即对网络节点的权重和偏置进行学习和调整。网络的一个计算单元原理可用以

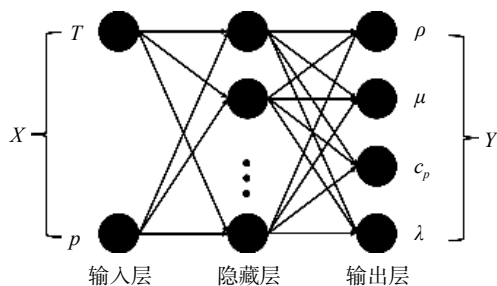


图 1 BP 神经网络结构图

Fig. 1 Structure diagram of BP neural network

下公式表示:

$$y_i = f \left(\sum_{j=1}^n w_{ji} x_j + b_i \right) \quad (1)$$

其中 y_i 为神经元 i 的输出, x_j 为神经元 j 的输出, x_j 通过权重 w_{ji} 连接到神经元 i , n 为连接神经元的总数, b_i 为 i 的偏置常数。前一层神经元通过权重和偏置常数的线性组合结果经过非线性激活函数 f 得到神经元 i 的输出, 本文采用的激活函数为 tansig 。

权重和偏置常数的修正如下所示:

$$w_{ji}^n(k+1) = w_{ji}^n(k) - \eta \frac{\partial F}{\partial w_{ji}^n} \quad (2)$$

$$b_i^n(k+1) = b_i^n(k) - \eta \frac{\partial F}{\partial b_i^n} \quad (3)$$

式中 F 代表神经网络的均方误差, 是反映实际输出与期望输出之间差异程度; k 代表修正次数; η 代表网络的学习率, 决定神经网络的收敛时间, 本文中学习率取值为 0.01。

理论上已证明, 借助激活函数, 含一个单隐藏层的 BP 神经网络可以拟合任意闭区间内的非线性映射^[20]。图 1 的单隐藏层神经网络的输出 Y (热物性参数) 和输入 X (温度、压力) 之间的数学表达为

$$Y = f[W_{ho} f_h(W_{ih} X + B_h) + B_o] \quad (4)$$

其中 i 、 h 、 o 分别代表输入层(input)、隐藏层(hidden)和输出层(output); W 代表权重矩阵; B 代表偏置矩阵。

1.2 数据库划分及模型修正

基于 ECS 计算得到的数据作为样本集, 数据信息包含温度、压力以及由温度、压力决定的四种热物性参数: 密度、黏度、比定压热容和导热系数。样本集中数据的温度范围为 300~800 K, 压力范围为 3~6 MPa。为了研究数据样本量对模

型精度和效率的影响, 按照温度间隔不同分为四类数据库, 其中第四类数据库在临界区(600~700 K)加密采样点, 如表 1 所示。每个数据库都划分成训练集和测试集两个部分, 其中 75% 的数据(3、4、6 MPa)作为训练集, 用于训练 BP 神经网络模型; 剩下 25% 的数据(5 MPa)为测试集, 用于验证模型的精度。

表 1 数据集划分方式

Table 1 Database partition mode

编号	温度范围/K	温度间隔/K	压力/MPa	集合	数量
1	300~800	0.1	3、4、6	训练集	15 000
			5	测试集	5 000
2	300~800	1	3、4、6	训练集	1 500
			5	测试集	500
3	300~800	2	3、4、6	训练集	750
			5	测试集	250
4	300~600	1	3、4、6	训练集	4 200
	600~700	0.1			
	700~800	1			
			5	测试集	1 400

ECS 计算结果能得到充足的超临界 RP-3 数据样本, 弥补了实验数据量少的缺陷。但其训练得到的模型 M_{ecs} 在预测热物性趋势和精度上, 尤其是临界区域附近的精度有待提高。本文依据北京航空航天大学超临界碳氢燃料多功能流动与换热实验台上得到的超临界 RP-3 热物性的实验数据(EXP)对模型加以修正, 实验系统详见参考文献[21]。修正的实验数据包括密度、黏度、比定压热容和导热系数, 详见参考文献[3-6]。

根据 ECS 的数据和实验数据得到四种物性在 3、4、6 MPa 压力下随温度变化的相对误差曲线。通过 BP 神经网络学习以温度、压力作为输入, 物性相对偏差作为输出的误差模型 M_{error} , 最终将 M_{error} 耦合 M_{ecs} , 得到修正后的模型 M_{modified} , 耦合方式如下所示:

$$M_{\text{modified}} = \frac{M_{\text{ecs}}}{1 - M_{\text{error}}} \quad (5)$$

1.3 数据归一化

RP-3 四种热物性参数的数量级有很大的差别: 密度的量级一般在 10^2 (单位: kg/m^3); 黏度的量级一般在 $10^2 \sim 10^3$ (单位: $\mu\text{Pa}\cdot\text{s}$); 比定压热容的量级一般在 10^3 (单位: $\text{J}/(\text{kg}\cdot\text{K})$); 导热系数的量级一般在 $10^{-2} \sim 10^{-1}$ (单位: $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$)。由于不同的物性参数之间存在量级的差别, 神经网络预测

结果会有较大的误差, 因此使用神经网络分析时需要先归一化。

归一化处理目的是增加数据的内聚性, 减少离散性, 从而消除数据尺度差异对 ANN 模型学习能力和预测精度的影响。本文采用最小最大值归一化:

$$D^* = \frac{D - D_{\min}}{D_{\max} - D_{\min}} \quad (6)$$

将原始数据 D 转换到 $0 \sim 1$ 区间内的值, 得到归一化后的数据 D^* , 其中 $D_{\max}$ 为样本数据的最大值, $D_{\min}$ 为样本数据的最小值。

1.4 模型拓扑结构及评价指标

目前, 隐藏层节点个数的选取尚未找到固定的解析式, 往往是根据所关注的研究背景, 结合前人的设计经验以及研究人员的实验结果来确定其个数。本文 BP 神经网络隐藏层节点个数采用以下三种常用的经验关系式^[22-23] 来确定范围, 然后通过实验的方法最终确定其个数。

由 Kolmogorov 定理, 隐藏层节点个数和输入层的节点个数存在等量关系:

$$n_h = 2n_i + 1 \quad (7)$$

通过输入层和输出层的节点个数确定隐藏层节点个数:

$$n_h = \sqrt{n_i + n_o} + a \quad (8)$$

通过对输入层的节点个数取对数得到隐藏层节点个数:

$$n_h = \log_2 n_i \quad (9)$$

其中 n_h 表示隐藏层节点个数, n_i 表示输入层节点个数, n_o 表示输出层节点个数, a 是经验系数, 取值为 $1 \sim 10$ 。

本文以平均相对误差 E_{mr} 和回归系数 R^2 来评价 ANN 模型的性能。其中 K_d 和 K_p 分别是模型的预测值和实际值, $\bar{K}_d$ 是 K_d 的平均值。 K 表示样本数量。平均相对误差 E_{mr} 越小, 回归系数 R^2 的值越接近于 1, 表征模型的预测效果越好。

$$E_{mr} = \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K (|K_d - K_p| / K_p) \times 100\% \quad (10)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^K (K_d - K_p)^2}{\sum_{i=1}^K (\bar{K}_d - K_d)^2} \quad (11)$$

2 结果与讨论

2.1 基于 ECS 数据库建立的 M_{ecs} 模型

2.1.1 M_{ecs} 模型的拓扑结构

M_{ecs} 模型的输入层由两个神经元组成, 分别是温度和压力, 即 $n_i = 2$ 。输出层由四个神经元组成, 分别是密度、黏度、比定压热容和导热系数, 即 $n_o = 4$ 。结合式(7)~式(9)可知, 隐藏层节点个数为 $n_h = 3 \sim 12$ 。采用试错法探究 n_h 对 M_{ecs} 模型的预测效果的影响。

由图2可知, 当隐藏层节点个数为7时, 测试集的四种热物性参数的 E_{mr} 最小, 均小于15%, 且回归系数最大, 均大于0.99。过少的个数可能会产生欠拟合现象, 反之会导致模型过拟合, 隐藏层包含7个节点时模型对热物性参数非线性预测效果最佳。因此, 构建 M_{ecs} 模型拓扑结构中的输入层、隐藏层和输出层节点个数分别为2、7和4。

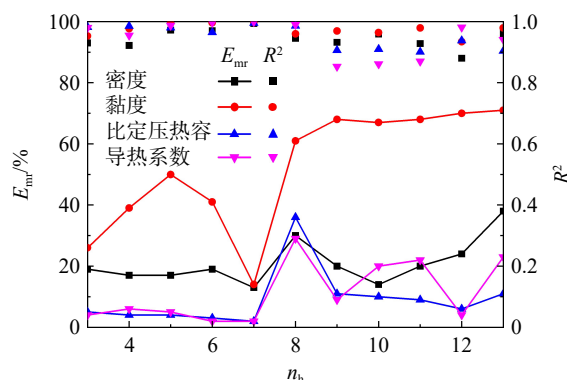


图2 隐藏层节点个数对模型精度的影响

Fig. 2 Influence of the number of hidden layer nodes on the model accuracy

2.1.2 数据库对 M_{ecs} 模型的影响

将表1所示的四类数据库分别训练 M_{ecs} 模型, 图3显示了不同数据库训练的热物性模型精度, 分别为预测的密度、黏度比定压热容、导热系数平均相对误差分别在 $0 \sim 2\%$ 、 $2\% \sim 5\%$ 和大于 5% 的占比。从图中可以发现预测密度和黏度时, 第四类数据库(临界区加密采样点)精度最高, 平均相对误差小于 2% 的预测点占比均大于 90% ; 第三类数据库(温度间隔为 2 K)精度最低, 平均相对误差小于 2% 的预测点占比均为 80% 左右。预测比定压热容时四类数据库均有较高的精度, 预测导热系数时除了第三类数据库其余数据库预测点平均相对误差小于 2% 的占比均大于 96% 。此外从图中还可以发现, 四类数据库在预测密度和黏度时均有一部分数据点的平均相对误差大

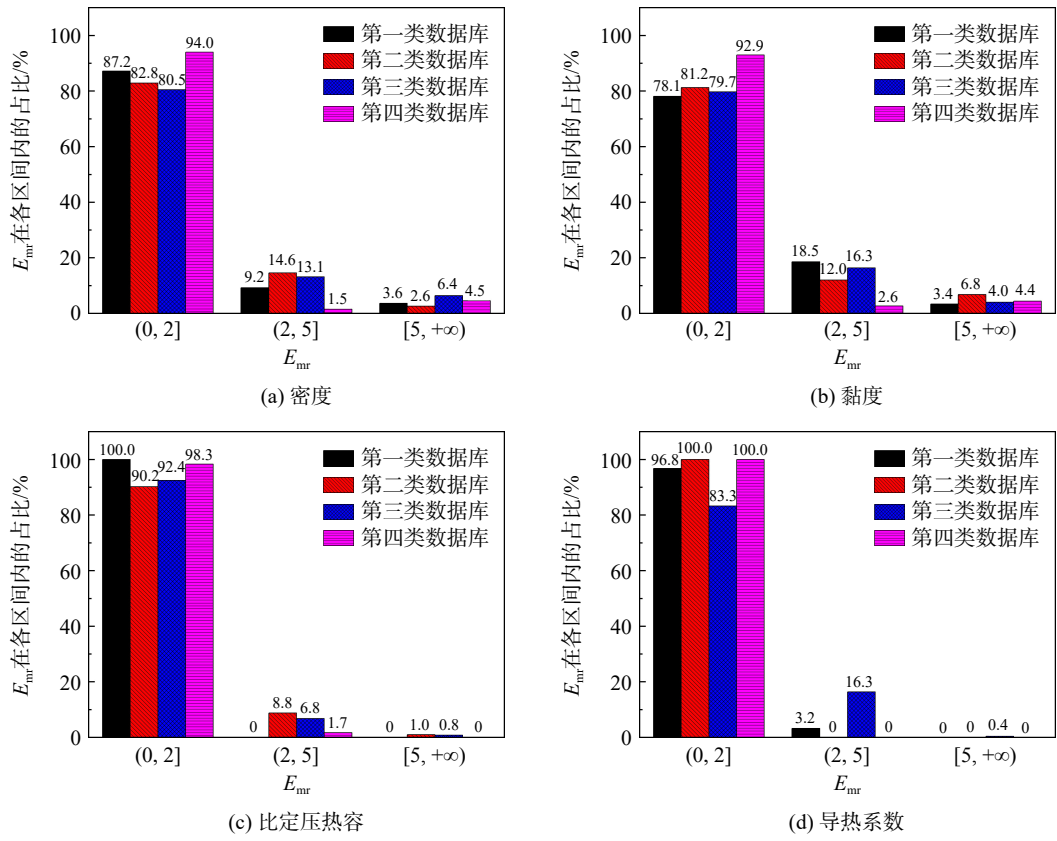


图 3 不同数据库对模型精度的影响
Fig. 3 Influence of different database on model accuracy

于 5%, 而预测导热系数和比定压热容时几乎所有预测点平均相对误差均小于 5%。

图 3 显示了整体温度范围内 (300~800 K) 四类数据库对模型预测精度影响, 还需要考察临界区 (600~700 K) 的精度高低。表 2 展示了四类数据库在临界区平均相对误差小于 2% 的预测点占比以及训练模型收敛时的迭代步长。从表 2 可知第一类数据库 (温度间隔为 0.1 K) 和第四类数据库在临界区对 RP-3 热物性预测效果最好, 而第二类数据库 (温度间隔为 1 K) 和第三类数据库在预测临界区的密度、黏度、比定压热容时均有较大的偏差。

模型收敛时的迭代步长与模型的拓扑结构、数据量有关。从表 2 中可以发现, 第一类数据库的迭代步长最大, 所需要的计算资源和时间成本最高, 这是因为其样本数量最多。综合考虑模型在整体、临界区的预测精度和迭代步长, 第四类数据库即临界区加密采样点的方式最优。

2.2 误差模型 M_{error} 的建立

同文中第 2.1.1 节, M_{error} 模型的输入层由两个神经元组成, 分别是温度和压力。输出层由四种热物性参数的相对误差 α 组成, 包含密度相对误

表 2 600~700 K 范围内预测值平均相对误差小于 2% 的比例与模型收敛的迭代步长

Table 2 Proportion of mean relative error of predicted value less than 2% at temperature of 600—700 K and model convergence step

编号	平均相对误差小于 2% 的占比/%				迭代步长
	密度	黏度	比定压热容	导热系数	
1	100	100	100	100	602
2	83	81	76	100	98
3	63	59	92	100	44
4	100	100	100	100	239

差 α_ρ 、黏度相对误差 α_μ 、比定压热容相对误差 α_{c_p} 和导热系数相对误差 α_λ 。采用试错法探究 n_h 对 M_{error} 模型的预测效果的影响, 发现当 n_h 数值为 9 时模型的四类热物性参数的回归系数均大于 0.99。

图 4 为显示了在 5 MPa 压力下, 超临界 RP-3 的热物性参数相对误差 α 与 M_{error} 模型预测值的对比。从图中可以看出, α_ρ 在 -130%~10% 区间变化, 在拟临界点前相对误差较小, 在拟临界后相对误差逐渐增大; α_μ 在 -20%~30% 区间变化,

在拟临界点前呈负增长趋势,拟临界点后先减小后增大; α_{c_p} 变化较为平稳,在 10% 以内的区间波动; α_λ 在 20% 以内的区间变化,随着温度增加呈现缓慢增加后减小,在拟临界点后相对误差趋于 0%。从图中可知,误差模型 M_{error} 预测的结果 $M_{\text{error},\rho}$ 、 $M_{\text{error},\mu}$ 、 M_{error,c_p} 、 $M_{\text{error},\lambda}$ 能准确地反映出四种热物性参数相对误差的变化趋势和大小。

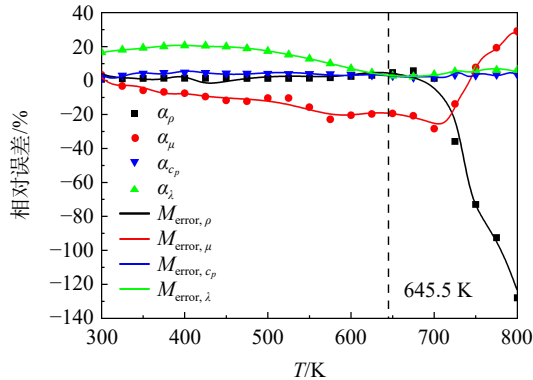


图 4 5 MPa 压力下热物性参数相对误差与 M_{error} 模型预测值的对比

Fig. 4 Comparison between the relative error of thermo-physical parameters and the predicted value of M_{error} model at pressure of 5 MPa

2.3 修正后的 ANN 模型预测精度分析

2.3.1 密度

在 3、4、6 MPa 压力下, ECS 模型预测 RP-3 密度的结果与实验值的相对误差如图 5 所示。从图中可以看出 ECS 模型在低温区(300~600 K)对密度的预测表现很好。但从临界区(600~700 K)开始相对误差逐渐增大,且在 800 K 达到最大相对误差。从图中还可以发现随着压力的增加,相对误差的数值逐渐减小。

图 6 显示了在 5 MPa 压力下, ANN、ECS 模型预测 RP-3 密度结果与实验值的对比。从图中可以看出 ANN 模型预测趋势和大小更加接近实验值,而 ECS 模型在 600 K 以后出现偏差,偏差值先增大后减小,在 700 K 以后逐渐增大且高估了密度。表 3 列举了两种预测模型在低温区、临界区和高温区的平均相对误差(E_{mr})和相对误差最大值(E_{max})。从表 3 可知,在三个温度区域内 ANN 模型对密度的预测精度均高于 ECS 模型,ANN 模型在整体温度范围内 E_{mr} 为 1.5%,预测精度相比 ECS 模型提高了 21.2%; E_{max} 为 8.0%,相对误差最大值出现在高温区。这可能是由于实验中 RP-3 在高温下发生裂解反应生成多种小分子物质相关,从而导致预测的密度在高温区出现

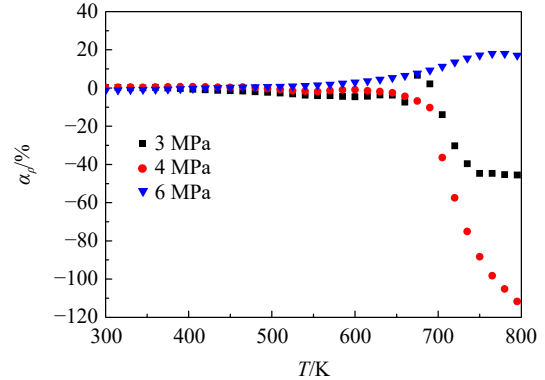


图 5 RP-3 密度在 3、4、6 MPa 压力下的相对误差曲线
Fig. 5 Relative error curves of RP-3 density at pressure of 3, 4, 6 MPa

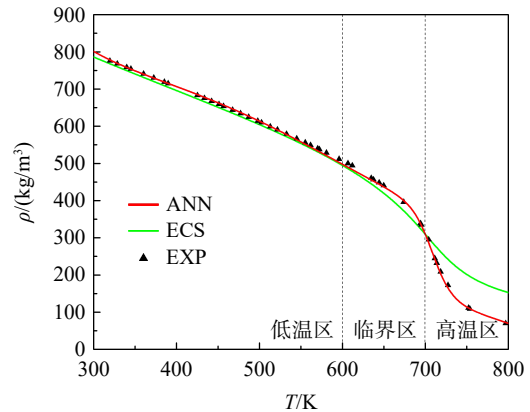


图 6 5 MPa 压力下 ANN 模型、ECS 模型预测 RP-3 密度与实验值的对比

Fig. 6 Comparison of ANN model, ECS model and experimental value of RP-3 density at pressure of 5 MPa

表 3 ECS 模型和 ANN 模型预测密度的结果

Table 3 Results of predicted density of ECS model and ANN model

区间	模型	$E_{\text{mr}}/\%$	$E_{\text{max}}/\%$
低温区 (300~600 K)	ECS	1.3	2.4
	ANN	0.4	1.8
临界区 (600~700 K)	ECS	4.0	5.9
	ANN	1.3	2.2
高温区 (700~800 K)	ECS	65.7	127.9
	ANN	2.7	8.0
全区间	ECS	23.7	127.9
	ANN	1.5	8.0

偏差。

2.3.2 黏度

在 3、4、6 MPa 压力下, ECS 模型预测 RP-3 黏度的结果与实验值的相对误差如图 7 所示。从

图中可以看出在 3、4 MPa 压力下, ECS 模型的相对误差呈现负增长的趋势, 在 650 K 左右达到极值, 之后逐渐减小到 0 然后增长。在 6 MPa 压力下, ECS 模型的相对误差在 10%~20% 之间平稳波动。

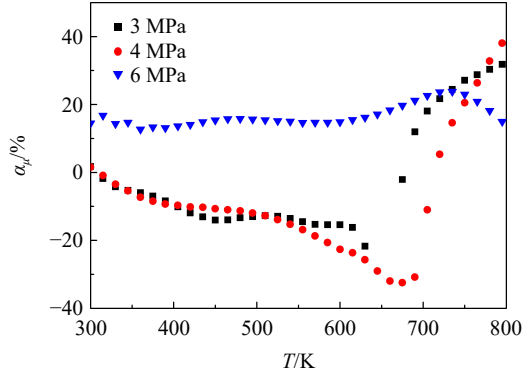


图 7 RP-3 黏度在 3、4、6 MPa 下的相对误差曲线
Fig. 7 Relative error curves of RP-3 viscosity at pressure of 3, 4, 6 MPa

图 8 显示了在 5 MPa 压力下, ANN、ECS 模型预测 RP-3 黏度结果与实验值的对比。从图中可以看出两种模型均能很好体现黏度变化的趋势和大小, 但 ANN 模型更接近实验值。表 4 列举了两种预测模型在低温区、临界区和高温区的 E_{mr} 和 E_{max} 。从表中可以看出, 在三个温度区域内 ANN 模型对黏度的预测精度均高于 ECS 模型, ANN 模型在整体温度范围内 E_{mr} 为 4.1%, 预测精度相比 ECS 模型提高了 12.1%; E_{max} 为 18.5%, 相对误差最大值出现在高温区。

2.3.3 比定压热容

在 3、4、6 MPa 下, ECS 模型预测 RP-3 比定

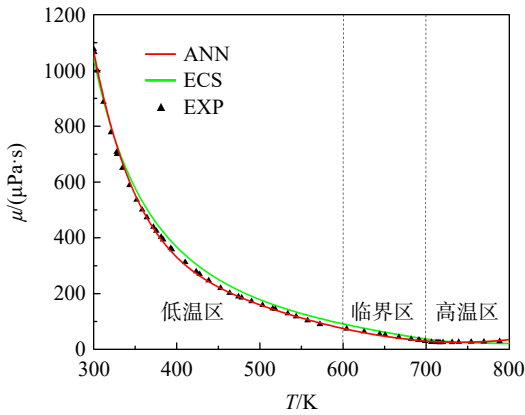


图 8 5 MPa 下 ANN 模型、ECS 模型预测 RP-3 黏度与实验值的对比
Fig. 8 Comparison of ANN model, ECS model and experimental value of RP-3 viscosity at pressure of 5 MPa

表 4 ECS 模型和 ANN 模型预测黏度的结果
Table 4 Results of predicted viscosity of ECS model and ANN model

区间	模型	$E_{mr}/\%$	$E_{max}/\%$
低温区 (300~600 K)	ECS	10.5	23.2
	ANN	1.8	5.4
临界区 (600~700 K)	ECS	20.8	28.4
	ANN	5.9	9.0
高温区 (700~800 K)	ECS	17.3	31.2
	ANN	4.7	18.5
全区间	ECS	16.2	31.2
	ANN	4.1	18.5

压热容的结果与实验值的相对误差如图 9 所示。在低温区和高温区, 各压力下比定压热容的相对误差均在 10% 以内。在临界区时, ECS 模型预测 3 MPa 下 RP-3 的比定压热容出现较大的波动, 相对误差从 -15% 增长至 25%, 这可能是 RP-3 在 3 MPa 时接近临界压力, 比定压热容突然增大达到峰值^[13], 而 ECS 模型不能很好地捕捉到临界区域比定压热容的峰值。

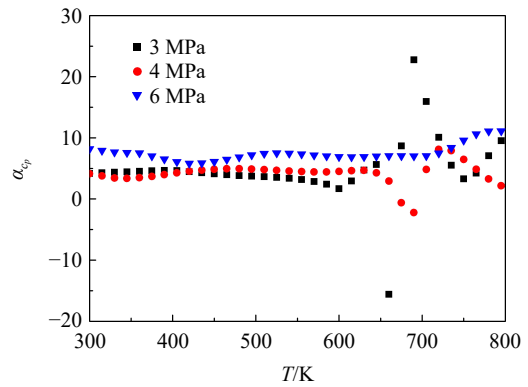


图 9 RP-3 比定压热容在 3、4、6 MPa 下的相对误差曲线
Fig. 9 Relative error curves of RP-3 specific heat capacity at constant pressure at pressure of 3, 4, 6 MPa

图 10 显示了在 5 MPa 压力下, ANN、ECS 模型预测 RP-3 比定压热容结果与实验值的对比。从图中可以看出 ANN 模型能很好地预测比定压热容趋势和大小, 而 ECS 模型虽然能预测变化趋势, 但在预测精度上远低于 ANN 模型, 且 ECS 模型和实验值的偏差随温度增加而增大。从表 5 可知, ECS 模型在三个温度区域的 E_{mr} 和 E_{max} 逐渐增大, ANN 模型在各个区域的预测精度均远远高于 ECS 模型。ANN 模型在整体温度范围内 E_{mr} 为 0.9%, 预测精度相比 ECS 模型提高了 23.9%; E_{max} 为 2.6%, 相对误差最大值出现在高温区。

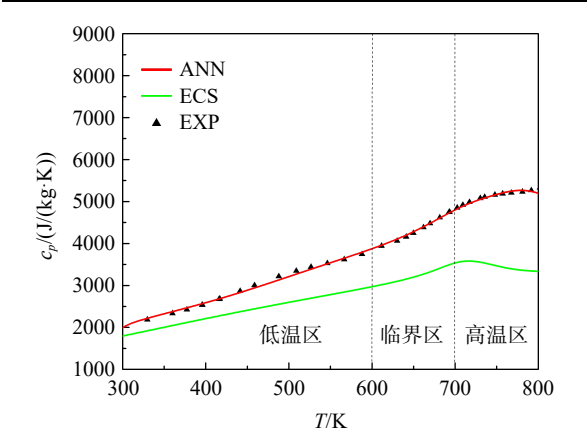


图 10 5 MPa 下 ANN 模型、ECS 模型预测 RP-3 比定压热容与实验值的对比

Fig. 10 Comparison of ANN model, ECS model and experimental value of RP-3 specific heat capacity at constant pressure at pressure of 5 MPa

表 5 ECS 模型和 ANN 模型预测比定压热容的结果
Table 5 Results of predicted specific heat capacity at constant pressure of ECS model and ANN model

区间	模型	$E_{mr}/\%$	$E_{max}/\%$
低温区 (300~600 K)	ECS	17.2	22.6
	ANN	1.4	2.2
临界区 (600~700 K)	ECS	24.8	26.7
	ANN	0.6	1.0
高温区 (700~800 K)	ECS	32.4	37.2
	ANN	0.6	2.6
全区间	ECS	24.8	37.2
	ANN	0.9	2.6

2.3.4 导热系数

在 3、4、6 MPa 压力下，ECS 模型预测 RP-3 导热系数的结果与实验值的相对误差如图 11 所示。从图中可以看出，各个压力下 ECS 模型的相对误差呈现先增大后减小再增大，最后逐渐平稳的趋势。其中 3、4 MPa 压力下的相对误差趋势和大小大致相同，而 6 MPa 下预测 RP-3 导热系数的相对误差在低温区和临界区高于 3、4 MPa 下的结果，在高温区趋于一致。

图 12 显示了在 5 MPa 压力下，ANN、ECS 模型预测 RP-3 导热系数结果与实验值的对比。从图中可以看出 ANN 模型能很好地预测比定压热容趋势和大小，而 ECS 模型与实验值的偏差在 300 K 时最大，然后呈现逐渐减小的趋势，在 650 K 附近和实验值偏差最小，之后随温度增大偏差逐渐增大。从表 6 可知，ECS 模型的偏差主

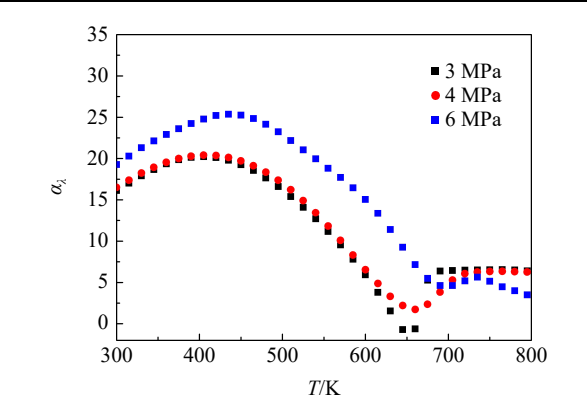


图 11 RP-3 导热系数在 3、4、6 MPa 下的相对误差曲线

Fig. 11 Relative error curves of RP-3 thermal conductivity at pressure of 3, 4, 6 MPa

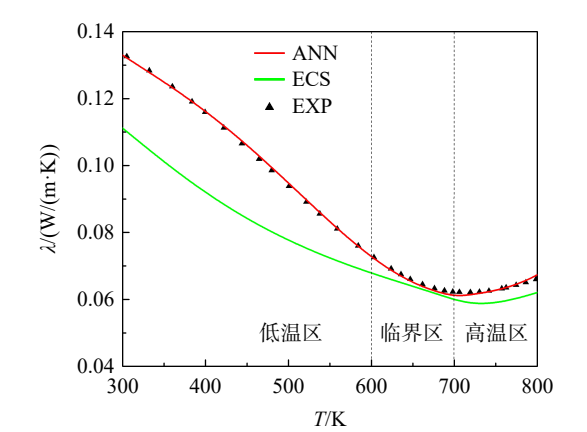


图 12 5 MPa 下 ANN 模型、ECS 模型预测 RP-3 导热系数与实验值的对比

Fig. 12 Comparison of ANN model, ECS model and experimental value of RP-3 thermal conductivity at pressure of 5 MPa

表 6 ECS 模型和 ANN 模型预测导热系数的结果
Table 6 Results of predicted thermal conductivity of ECS model and ANN model

区间	模型	$E_{mr}/\%$	$E_{max}/\%$
低温区 (300~600 K)	ECS	17.1	20.6
	ANN	0.5	0.9
临界区 (600~700 K)	ECS	3.6	7.1
	ANN	0.9	1.6
高温区 (700~800 K)	ECS	5.6	6.2
	ANN	0.8	1.9
全区间	ECS	8.8	20.6
	ANN	0.7	1.9

要在低温区和高温区。在三个温度区域内 ANN 模型预测导热系数的精度均远远高于 ECS 模型，ANN 模型在整体温度范围内 E_{mr} 为 0.7%，预测精

度相比 ECS模型提高了 8.1%; $E_{\max}$ 为 1.9%, 相对误差最大值出现在高温区。

3 结 论

本文对采用 ANN 模型对超临界 RP-3 热物性的预测进行了研究, 并对比了 ECS 模型和实验数据, 评估了神经网络的精度, 主要的结论如下所示:

1) ECS 模型预测超临界 RP-3 的黏度上有较好的精度, 但在预测密度、比定压热容和导热系数上有较大的偏差。

2) ANN 模型预测超临界 RP-3 的热物性比 ECS 模型更精确, 密度、黏度、比定压热容和导热系数的平均相对误差分别为 1.5%、4.1%、0.9% 和 0.7%, 回归系数均大于 0.99。

3) ANN 模型预测密度、黏度、比定压热容和导热系数的相对误差最大值均出现在高温区, 这可能与 RP-3 在高温下发生裂解反应有关, 下一步将从 RP-3 高温区的热物性入手, 寻找更精准的热物性模型。

参考文献:

- [1] CURRAN E T. Scramjet engines: the first forty years[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2001, 17(6): 1138-1148.
- [2] 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 heat-absorbing hydrocarbon fuel RP-3 imitation JP-7[J]. *Journal of Fuel Chemistry*, 2006, 34(4): 466-470. (in Chinese)
- [3] DENG H W, ZHANG C B, XU G Q, et al. Density measurement of endothermic hydrocarbon fuel at sub- and supercritical conditions[J]. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 2011, 56(6): 2980-2986.
- [4] DENG H W, ZHANG C B, XU G Q, et al. Viscosity measurement of endothermic hydrocarbon fuel from (398 to 788 K) under supercritical pressure conditions[J]. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 2012, 57(2): 358-365.
- [5] 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 region[J]. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 2012, 57(2): 263-268.
- [6] XU G Q, JIA Z X, WEN J, et al. Thermal-conductivity measurements of aviation kerosene RP-3 from (285 to 513 K) at supercritical pressures[J]. *International Journal of Thermophysics*, 2015, 36: 620-632.
- [7] 张志强, 郝毓雅, 陈战斌. 航空喷气燃料 RP-3 运动黏度特性研究[J]. *现代机械*, 2020, 215(1): 38-40.
ZHANG Zhiqiang, HAO Yuya, CHEN Zhanbin. Study on the kinematic viscosity characteristics of aviation jet fuel RP-3[J]. *Modern Machinery*, 2020, 215(1): 38-40. (in Chinese)
- [8] 严俊杰, 刘耘州, 闫帅, 等. 超临界压力下碳氢燃料在竖直圆管内对流换热实验研究[J]. *工程热物理学报*, 2016, 37(11): 2385-2392.
YAN Junjie, LIU Yunzhou, YAN Shuai, et al. Experimental study of convective heat transfer of hydrocarbon fuel in a vertical circular tube under supercritical pressure[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2016, 37(11): 2385-2392. (in Chinese)
- [9] HEMPERT F, BOBLEST S, ERTL T, et al. Simulation of real gas effects in supersonic methane jets using a tabulated equation of state with a discontinuous Galerkin spectral element method[J]. *Computers and Fluids*, 2017, 145: 167-179.
- [10] 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)
- [11] ZHONG F Q, FAN X J, YU G, et al. Heat transfer of aviation kerosene at supercritical conditions[J]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2009, 23(3): 543-550.
- [12] 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 Changxin, YU Jin. A physical surrogate fuel model for RP-3 aviation kerosene and applications[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2020, 41(4): 934-941. (in Chinese)
- [13] 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.
CHENG Zeyuan, ZHU Jianqin, JIN Zhao. Study of RP-3 substitution model for heat-absorbing hydrocarbon fuel[J]. *Journal of Aerospace Power*, 2016, 31(2): 391-398. (in Chinese)
- [14] 郝爽. 基于人工神经网络模型的燃油物性预测与敏感性分析研究[D]. 辽宁 大连: 大连理工大学, 2021.
HAO Shuang. Research on fuel physical properties prediction and sensitivity analysis based on artificial neural network model[D]. Dalian Liaoning: Dalian University of Technology, 2021. (in Chinese)
- [15] 向鹏程, 申江. 基于 BP 神经网络的 R404A 物性参数计算[J]. *冷藏技术*, 2018, 41(4): 45-49.
XIANG Pengcheng, SHEN Jiang. BP neural network-based calculation of physical properties parameters of R404A[J]. *Refrigeration Technology*, 2018, 41(4): 45-49. (in Chinese)
- [16] KANAT Z E, OZDIL N. Application of artificial neural network (ANN) for the prediction of thermal resistance of knitted fabrics at different moisture content[J]. *Journal of the Textile Institute*, 2018, 109(3): 1-7.
- [17] ZHAO N, LI Z. Experiment and artificial neural network prediction of thermal conductivity and viscosity for alumina-water nanofluids[J]. *Materials*, 2017, 10(5): 552.1-552.16.
- [18] LI B, LEE Y C, YAO W, et al. Development and application of ANN model for property prediction of supercritical kerosene[J]. *Computers and Fluids*, 2020, 209: 104665.1-104665.18.
- [19] RUMELHART D E, MCCLELLAND J L, GROUP T P. Parallel distributed processing: Vol. 1[M]. Bradford, UK: Encyclopedia of Database Systems, 1987.
- [20] HORNIK K. Approximation capabilities of multilayer feedforward

- networks[J]. *Neural Networks*, 1991, 4(2): 251-257.
- [21] 张春本, 邓宏武, 徐国强, 等. 超临界压力下航空煤油RP-3焓值的测量及换热研究[J]. *航空动力学报*, 2010, 25(2): 331-335.
- ZHANG Chunben, DENG Hongwu, XU Guoqiang, et al. Measurement of RP-3 enthalpy and heat transfer of aviation kerosene at supercritical pressure[J]. *Journal of Aerospace Power*, 2010, 25(2): 331-335. (in Chinese)
- [22] 焦斌, 叶明星. BP神经网络隐藏层单元数确定方法[J]. *上海电机学院学报*, 2013, 16(3): 113-116.
- JIAO Bin, YE Mingxing. Method for determining the number of hidden layer units in BP neural networks[J]. *Journal of Shanghai Institute of Electrical Engineering*, 2013, 16(3): 113-116. (in Chinese)
- [23] MAJUMDAR A K, SINGHAL A K, SPALDING D B. Numerical modeling of wet cooling tower: Part 1 mathematical and physical models[J]. *Journal of Heat and Mass Transfer*, 1983, 105(4): 728-735.

(编辑: 陈 越)