

清 华 大 学

综 合 论 文 训 练

题目：亚超临界 RP-3 航空煤油热物
性研究

系 别：清华大学航天航空学院

专 业：能源与动力工程

姓 名：沈 扬

指导教师：曹炳阳 教授

2021 年 6 月 7 日

关于学位论文使用授权的说明

本人完全了解清华大学有关保留、使用学位论文的规定，即：学校有权保留学位论文的复印件，允许该论文被查阅和借阅；学校可以公布该论文的全部或部分内容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存该论文。

(涉密的学位论文在解密后应遵守此规定)

签 名： 沈扬 导师签名： 王 日 期 2021/6/17

中文摘要

在再生式冷却系统中，航空煤油被用作冷却剂去吸收机体产生的热量。在实际工作过程中，航空煤油往往处于亚超临界状态，其热物性变化规律与常温常压下有很大不同，因此准确地预测亚超临界航空煤油的各个热物性具有重要的实际意义。本文针对国产 RP-3 航空煤油，采用多种手段对其替代模型的构建方法及其热物性展开了研究，关注的热物性包括密度、定压比热容、粘度以及热导率。本文完成的主要工作如下：

构建了适用于计算 RP-3 航空煤油在亚超临界状态下热物性的 C4+ 替代模型。本文结合遗传算法与广义对应态法则，在四组分替代模型的基础上针对 RP-3 航空煤油的不同热物性分别进行了模型优化，同时考虑到裂解和自氧化过程对热物性的影响，进一步提出了模型的修正方法。基于所构建的替代模型，生成了 RP-3 航空煤油的热物性数据库，并开发了相应的热物性查询软件。

提出了基于神经网络的热物性模型构建方法，通过广义对应态法则获得的数据进行了模型训练，分别采用三组分模型、十组分模型以及 RP-3 航空煤油的实验数据对模型构建方法进行了验证，同时与所构建的 C4+ 替代模型进行了对比，比较了两种模型构建方法的特点和优劣。

采用分子动力学方法对航空煤油的热物性进行了研究，比较了不同分子力场的模拟准确性，验证了适用于模拟亚超临界状态下碳氢混合物热物性的最优分子力场。基于最优分子力场，所提出的替代模型进行了模拟，并与广义对应态法则的计算结果进行了对比，表明了两种方法在计算亚超临界煤油热物性上的有效性。

关键词：航空煤油；热物性；遗传算法；分子模拟；超临界

ABSTRACT

In regenerative cooling systems, aviation kerosene is often used as coolant to absorb heat from the engines. For scramjet applications, the pressure in cooling channels is often above the critical pressure of most aviation kerosene. Under such states, thermophysical properties of aviation kerosene are significantly different from those under normal temperatures and pressures, and it is of great practical significance to accurately predict thermophysical properties of aviation kerosene at sub-supercritical states. In this thesis, the methodology for surrogate fuel formulation and the thermophysical properties of aviation kerosene RP-3 including density, constant-pressure heat capacity, viscosity, and thermal conductivity are studied by various methods. In this thesis, the following work has been completed:

The C4+ surrogate models for thermophysical properties of aviation kerosene RP-3 are proposed by using genetic algorithm and extended-corresponding states principle based on the previous C4 surrogate model. Especially, the effects of pyrolysis and autoxidation reactions have been equivalently introduced to the corrections of the surrogate fuels. Based on the proposed surrogate models, the thermophysical database of aviation kerosene RP-3 are generated, and the software for querying the corresponding thermophysical properties is developed.

A methodology for surrogate fuel formulation via artificial neural network is developed. The neural network models are trained with the database calculated by extended-corresponding states principle. The methodology is validated with three-component surrogate model, ten-component surrogate model and experimental data of aviation kerosene RP-3. A comparison is conducted between surrogate models formulated with artificial neural network and C4+ surrogate models, and the characteristics of the two approaches are discussed.

The thermophysical properties of aviation kerosene RP-3 are studied by molecular dynamics simulation. The accuracy for the prediction of different thermophysical properties is compared between multiple force fields and the best one is selected. Thermophysical properties of the surrogate models developed in this thesis are simulated. The simulated results are compared with those calculated with extended-corresponding states

principle. The results indicate that both the two methods are effective in calculating thermophysical properties of sub-supercritical hydrocarbon mixtures.

Keywords: Aviation kerosene; thermophysical properties; genetic algorithm; molecular dynamic simulation; supercritical

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 研究背景	1
1.2 亚超临界流体热物性	2
1.2.1 超临界流体概述	2
1.2.2 RP-3 航空煤油热物性的实验研究	3
1.2.3 替代模型	6
1.3 本文主要内容	8
第 2 章 C4+ 模型构建	10
2.1 广义对应态法则	10
2.2 遗传算法	11
2.3 模型构建流程	13
2.3.1 组分选取	13
2.3.2 模型优化	14
2.3.3 模型修正	14
2.4 结果与讨论	15
2.4.1 密度	15
2.4.2 粘度	17
2.4.3 定压比热容	19
2.4.4 热导率	20
2.5 物性查询数据库及软件	22
2.6 本章小结	24
第 3 章 基于神经网络的热物性替代模型构建	26
3.1 人工神经网络	26
3.1.1 基本结构	26
3.1.2 反向传播算法	27
3.2 模型构建流程	28
3.3 神经网络模型训练	29

3.4 方法验证	30
3.4.1 三组分替代物模型	31
3.4.2 十组分替代模型	33
3.5 RP-3 航空煤油模型构建	36
3.5.1 密度	38
3.5.2 粘度	38
3.5.3 定压比热容	41
3.5.4 热导率	41
3.6 本章小节	43
第 4 章 煤油热物性的分子动力学模拟	45
4.1 分子动力学模拟	45
4.1.1 基本原理	45
4.1.2 势能函数	46
4.1.3 积分算法	46
4.1.4 控温控压算法	47
4.1.5 输运性质模拟	47
4.2 煤油热物性的分子模拟	48
4.2.1 模型构建流程	48
4.2.2 正癸烷的密度模拟	50
4.2.3 正癸烷的粘度模拟	51
4.3 航空煤油替代模型的物性模拟	53
4.3.1 密度模拟	53
4.3.2 粘度模拟	54
4.4 本章小节	55
第 5 章 总结与展望	56
5.1 本文研究工作总结	56
5.2 工作的思考与展望	57
插图索引	58
表格索引	60
参考文献	61

致 谢.....	67
声 明.....	68
附录 A 外文资料的书面翻译.....	69
在学期间参加课题的研究成果.....	109

第 1 章 绪论

1.1 研究背景

飞行器研究的一个主要方向是提高飞行速度，在大气层内，当飞行器的飞行速度超过 5 倍声速时，其就被称为高超声速飞行器^[1]。由于飞行隐蔽性强，飞行速度快，因此具有重要的战略意义以及应用价值^[2]。包括美国、俄罗斯在内的世界主要国家都把高超声速飞行技术列为了重点研发方向之一，并不断地加大投资和研发力度^[3]。

由于高超声速飞行器必须具有极高的速度和机动性，因此必须配备强力的动力推进系统，在飞行马赫数超过 5 时，传统的涡轮及涡喷发动机不再能够满足需要。在高超声速飞行器的研制中，比冲高、动力性能强的超燃冲压发动机是必不可少的一部分^[4]。由于飞行速度快，来流气体总温很高，同时伴随着燃烧室内燃料燃烧产生的热量，燃烧室内的温度相当高，甚至可以超过 3 000 K，同时壁面最高热流可以超过 $3 \text{ MW} \cdot \text{m}^{-2}$ ^[5]。一般的材料无法承受这样的极端热条件，因此超燃冲压发动机中的冷却技术也是研究的重点内容之一。

发动机中的热防护技术一般可以分为两类，一类是被动热防护技术，被动热防护不需要额外提供动力，只靠材料或者结构的设计将热量传递出去^[6]。另一类为主动热防护技术，通过采用冷却工质通过对流换热等方式对结构进行散热，其冷却能力一般要高于被动冷却技术。在主动热防护技术中，再生式冷却由于冷却效果较好，且不需要携带额外的冷却剂，同时燃料的热能得到了有效的利用，在目前得到了较为广泛的应用^[7]，如图 1.1 所示。其基本思路是在航空煤油进入燃烧室之前，先用作冷却剂在冷却通道内吸收热量^[8-11]，在流动吸热的过程中，煤油的温度也会逐渐增加^[12-13]，直至达到裂解温度。

对于超燃冲压发动机冷却系统，冷却通道内的压力一般在 3 MPa~7 MPa，高于大部分航空煤油的临界压力^[15]。在高压下，流体的热物性与常压情况有较大的区别^[16]，对压力和温度的变化也非常敏感，这也对分析煤油在冷却通道内流动与传热等过程带来了困难和挑战。因此，准确地预测航空煤油在亚超临界状态下的各个热物性随温度和压力的变化，对后续流动传热、喷注等过程的研究，以及发动机热管理系统的设计等具有重要的意义。下面本文先对亚超临界流体及其热物性变化规律做出基本的介绍，之后从实验研究和替代模型两方面，总结目前对于

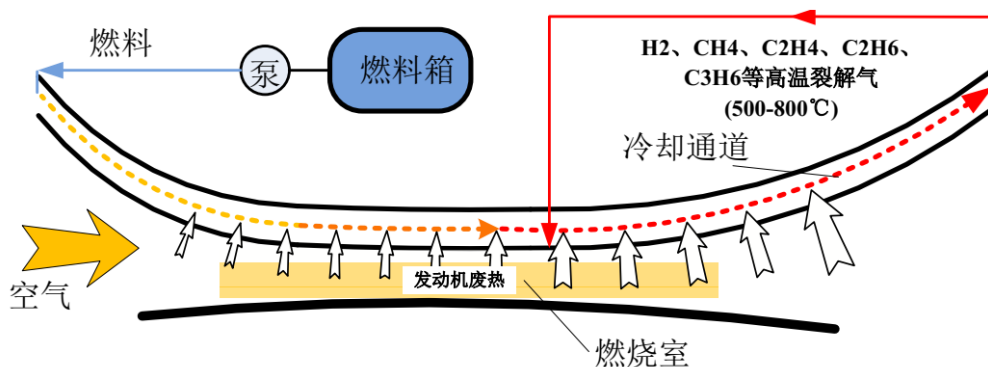


图 1.1 再生冷却工作过程示意图^[14]

RP-3 航空煤油热物性的研究情况。

1.2 亚超临界流体热物性

1.2.1 超临界流体概述

由于亚超临界流体的热物性变化规律具有相当程度的相似性，因此本文以研究较为充分的水为例，对亚超临界流体做出基本的介绍。水的临界温度 $T_c = 373.95\text{ }^{\circ}\text{C}$ ，临界压力 $P_{cr} = 22.064\text{ MPa}$ 。图1.2为水在不同温度和压力下的相态情况。

当压力小于临界压力、温度小于临界温度时，水有气态和液态的分别。将水蒸气逐渐加压至饱和蒸汽压时，水蒸汽会发生液化，直至全部变成液态水。而当温度超过临界温度时，此时无论如何对水蒸气加压，水蒸气都不会液化，气液两态的差别消失。将临界温度处水蒸气的饱和压力定义为水的临界压力，在相图中，温度和压力都达到临界值的位置被标记为临界点。

当压力超过临界压力时，虽然流体并没有气相和液相的分别，但是在某一温度前后，流体仍然有类似于液相和气相之间的分别，其热物性变化规律有较大的不同，将超临界压力下这一温度定义为拟临界温度。在拟临界温度附近流体各热物性均有较为显著的改变，尤其是定压比热容会突然上升，在温度超过拟临界值后有迅速下降。为方便对拟临界温度的定义，一般将这一峰值温度定义为该超临界压力下的拟临界温度，对应的压力和温度在相图中被表示为拟临界点^[17]，由拟临界点构成的曲线被标记为拟临界线。本文关注的主要是压力高于临界压力的 RP-3 航空煤油的热物性，为方便描述，在文中统一简称其处于亚超临界状态。

图1.3为不同压力下水的密度、定压比热容、粘度以及热导率随温度的变化情况。可以观察到各个热物性在临界点或拟临界点附近强烈的变化，其中密度、粘

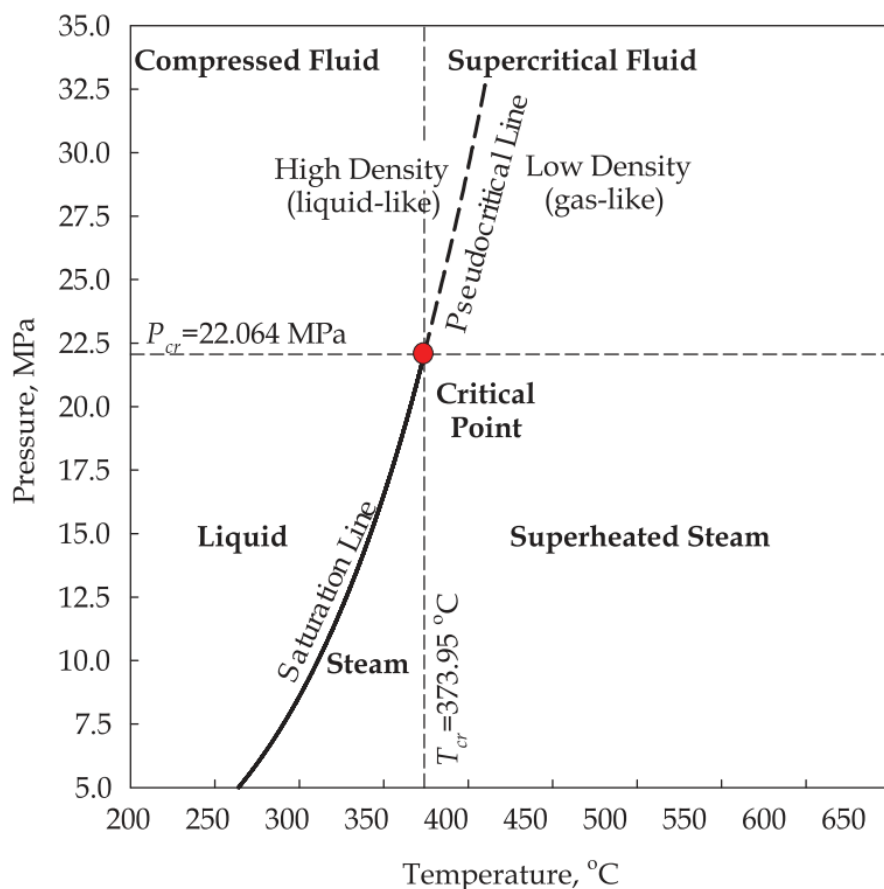
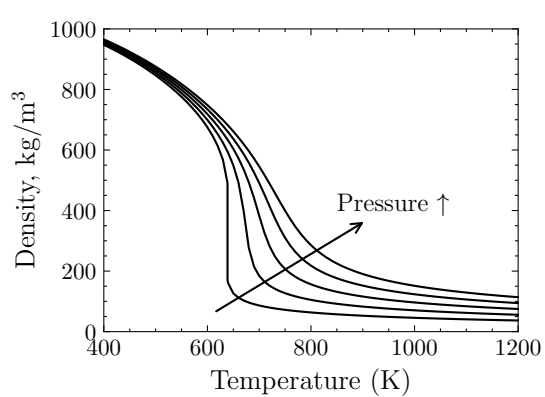


图 1.2 水的物质状态随温度和压力的变化情况^[17]

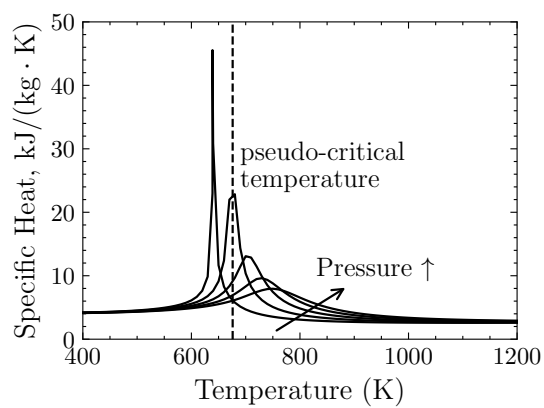
度、热导率有显著的降低，比热容在拟临界温度处出现一尖锐的峰值后又迅速下降，在远离拟临界点后，物性变化又逐渐变得平缓。总体而言，如图1.2所示，在拟临界线右侧的区域，流体呈现出类气相的性质，而在拟临界线左侧呈现出高密度的液相特点。同时可以注意到，随着压力的增加，在跨临界区域流体物性变化不再显著，且拟临界温度也随着压力的增加而相应升高。由于热物性对温度、压力十分敏感且在拟临界点附近变化非常剧烈，这也给准确预测流体在亚超临界状态下的各种热物性带来了困难和挑战。而由于航空煤油的真实构成非常复杂，既包含烷烃，也包含芳香烃等在内各式各样不同的组分^[18]，在实际加热过程中又会出现包括裂解、自氧化在内的各种物理化学变化^[19]，因此对其热物性的准确预测就更加困难。

1.2.2 RP-3 航空煤油热物性的实验研究

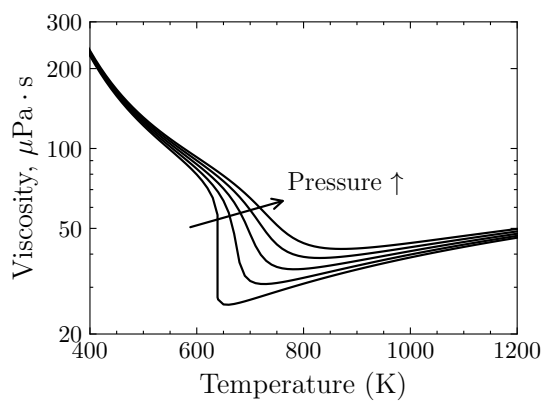
由于在亚超临界状态下流体的热物性变化十分显著，在高温高压下对航空煤油的物性进行测量也具有相当程度的难度，对不同热物性的测量方法也十分不同，



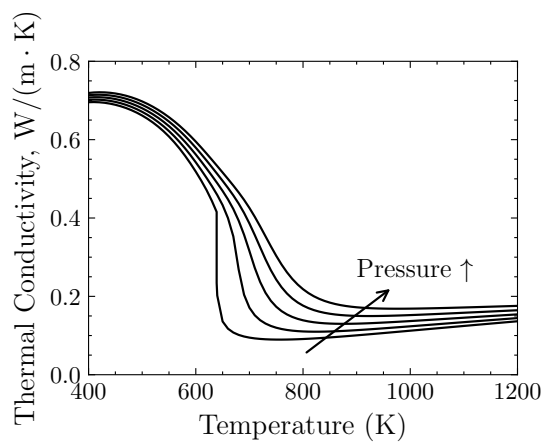
(a) 密度



(b) 定压比热容



(c) 粘度



(d) 热导率

图 1.3 20、30、40、50、60MPa下水的各热物性随温度的变化

因此目前对于 RP-3 航空煤油在亚超临界状态下的各热物性的实验测量结果还较为有限，某一种热物性的实验数据基本只有一组报道，且实验测量的压力范围也往往小于5 MPa。目前关于 RP-3 航空煤油主要有以下实验结果：

1. Deng et al.^[20] 采用一种基于质量守恒方程的密度测量方法，对温度范围为295 K~796 K，压力范围为压力为0.1 MPa~5 MPa的 RP-3 航空煤油的密度进行了测量。
2. Deng et al.^[21] 基于流体压降的原理测量了 RP-3 航空煤油在温度范围298 K~788 K，压力范围2.33 MPa~5 MPa的粘度进行了测量。
3. Deng et al.^[22] 用真空流量-热量测量仪对 RP-3 航空煤油在温度范围为292.1 K~823.9 K，压力范围2.4 MPa~5.98 MPa的定压比热容进行了测量。
4. Gao et al.^[23] 等发展了一种在高温高压条件下通过流动量热计测量定压比热容的方法，并测量了296.2 K~719.0 K和2.4 MPa~4.0 MPa的范围内 RP-3 航空煤油的定压比热容。
5. Xu et al.^[24] 采用瞬态热线法，测量了 RP-3 航空煤油在温度范围为285 K~513 K，压力范围为0.1 MPa~5 MPa的热导率。

图1.4绘制了3 MPa下 RP-3 航空煤油的各热物性的实验测量结果随温度的变化情况，其中热导率只有较低温度处的实验数据。据文献^[25] 中的报道，RP-3 航空煤油的临界压力约为2.34 MPa，临界温度约为646 K，因此在3 MPa下 RP-3 航空煤油已经出于超临界状态下。密度、粘度以及定压比热容在660 K附近均有明显的改变，密度、粘度均迅速降低，比热容突然上升后又迅速下降。上述的实验数据是本文对 RP-3 航空煤油替代模型研究的基础与计算结果的参考。

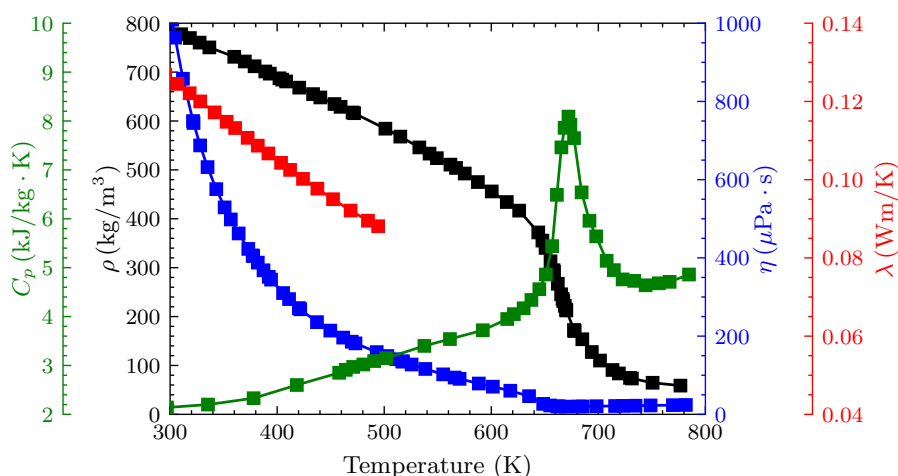


图 1.4 3 MPa下航空煤油 RP-3 各热物性实验测量值随温度的变化^[20-22,24]

1.2.3 替代模型

流体在亚超临界状态下的热物性对温度和压力极为敏感，由于实验测量的压力往往间隔较大，这种离散性也会导致各热物性数据的插值误差较大。而数值模拟的范围及区域可以任意选定，同时模拟结果可以得到实验无法获得的细节信息，对于进一步理解航空煤油的性质具有重要的意义。由于航空煤油的组成十分复杂，不可能对其所有的组分进行模拟，因此目前广泛采用替代模型的方法来对实际的航空煤油进行近似，即选取几种典型的组分构成简化的混合物，来代替实际复杂的航空煤油。在构建了合适的替代模型之后，即可采用特定的计算方法对所感兴趣的物性展开研究。

由于替代模型在燃料性质的研究中具有极其重要的意义，因此以往的研究人员从实验和模拟等方面对替代模型已经展开了大量的研究。针对不同种类的燃料如柴油^[26]、生物燃料^[27]、航空煤油^[18]等，由于其构成不同，因此其对应的替代燃料中所选取的组分和比例也有较为明显的差别。即使在同一类燃料中，根据燃料配比、生产工艺等的不同，不同燃料的替代模型彼此间的差异也较为明显^[18]。另一方面，即使是针对同一种燃料，根据所感兴趣的性质或者所研究的工况不同，所提出的替代模型之间的区别也比较大^[28]，彼此之间的可借鉴性也相对较小。

总体而言，针对同一种燃料的替代模型，大致可以分为物理模型和化学模型两类^[29]，其中物理模型主要用于模拟燃料的物理特性，比如密度、粘度、定压比热容、声速、热导率等性质，通过物理模型提供的性质参数，可以用于模拟航空煤油的储存、流动传热、喷注等过程的研究；而化学模型则主要用于预测航空煤油的化学性质，如层流火焰传播速度、着火延迟时间、以及化学反应速率等特性，以及用于裂解、燃烧反应机理等过程的研究^[30]。本文主要讨论 RP-3 航空煤油在亚超临界状态下热物性的变化，因此所关注的主要是物理替代模型。

为预测 RP-3 航空煤油的物理性质变化，国内外的学者已经做出了大量的研究，并提出了许多种基于不同组分的替代模型。范学军等^[29]基于 RP-3 航空煤油的成分分析，提出了由正癸烷、三甲基环己烷，以及正丙基苯组成的三组分替代物模型，计算结果表明在超临界压力下，该模型在预测流量时较为准确，然而针对粘度、比热容等热物性的模型计算结果与实验值仍存在较大的偏差；裴鑫岩等^[28]基于热物性变化的相似性，提出了由正癸烷、正十一烷，三甲基苯，以及 1-甲基-2-戊基环己烷构成的四组分替代物模型，虽然其可以定性地反应 RP-3 各热物性变化的趋势，但其计算结果与实验值的相对误差随着压力的提高而显著增大；为研究 RP-3 航空煤油在超临界压力下流动换热的情况,Zhong et al.^[15]提出了更为复杂的十组

分替代物模型，然而根据 Xu et al.^[31] 的对比分析表明，十组分替代模型在各个模型中的表现并不为最优，且会高估 RP-3 的准临界温度；Yu et al.^[32] 基于官能团与分子结构的匹配性，提出了由正十二烷、2,5-二甲基己烷、以及甲苯组成的三组分替代物模型，以同时预测 RP-3 航空煤油的物理性质和化学性质。计算结果表明该模型各物性的计算值与实验值吻合整体相对较好，但会低估 RP-3 航空煤油在超临界压力下的拟临界温度；为构建同时预测 RP-3 航空煤油物理性质及化学性质的替代模型，Liu et al.^[33] 通过优化方法匹配碳氢比、平均分子量、辛烷值、低位热值、密度以及粘度，提出了由正癸烷、正十二烷、异十六烷、甲基环己烷、甲苯构成的五组分替代物模型，但计算结果表明该模型预测常温常压下 RP-3 航空煤油的物理化学性质表现较好，而预测超临界状态下 RP-3 航空煤油各热物性的值与实验值差别较大。

表1.1列出了上述几种替代物模型关于密度、定压比热容、粘度以及热导率计算值和 RP-3 航空煤油实验值之间的相对偏差情况，其中压力范围为3 MPa~5 MPa，针对密度、定压比热容和粘度，比较的温度范围为300 K~750 K；针对热导率，由于目前的实验数据有限，比较的温度范围为300 K~500 K。从表中的结果可以看到，现有替代物模型预测 RP-3 航空煤油上述几个物性的相对偏差仍然较大，且往往一个模型预测一个物性的表现较好，却无法同时准确预测另一个物性，或者无法准确预测拟临界温度。且在温度较高时（如 $T > 690\text{ K}$ ），所有模型的计算结果与实验值的相对偏差均逐渐随着温度的增加而增大，甚至和实验值出现了完全不同的趋势。

表 1.1 不同替代模型各热物性的计算值与 RP-3 航空煤油实验值的平均相对偏差及最大偏差情况

作者	组分数目	ρ		η		C_p		λ		T_{pc}^c
		Max (%) ^a	Ave (%) ^b	Max (%)	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	
Mawid et al. ^[34]	4	108.86	12.85	115.53	23.51	31.68	14.62	13.36	10.56	✓
范学军 等 ^[29]	3	70.42	12.85	47.92	10.46	56.05	13.40	3.36	1.68	↓
Zhong et al. ^[15]	10	141.87	21.01	176.73	40.28	49.55	14.27	18.19	14.88	↑
裴鑫岩 等 ^[28]	4	123.77	23.34	136.81	28.95	31.12	13.47	11.46	7.99	✓
Yu et al. ^[32]	3	91.02	11.71	29.03	7.99	46.75	12.51	10.03	7.33	↓
Liu et al. ^[33]	5	109.04	12.00	77.56	31.12	41.91	13.39	5.57	3.46	↓

^a 最大相对偏差

^b 平均相对偏差

^c 拟临界温度, ✓, ↑, ↓ 分别代表准确预测、高估及低估

1.3 本文主要内容

从上述的讨论和分析可以看到, 现有替代物模型在预测 RP-3 航空煤油在亚超临界状态下的各个热物性上仍有一定的不足, 对模型构建方法以及热物性变化的研究上也相对较为缺乏。目前亟需针对 RP-3 航空煤油构建新的替代物模型, 用来准确计算其在亚超临界状态下的各种热物性。

已有的 RP-3 航空煤油的替代模型的主要是根据与实际煤油的构成相似性开发的, 这类替代模型可以整体上定性预测实际航空煤油的各种物理化学性质, 然而却损失了预测特定物性的精度与灵活性。由于航空煤油是由上百种物质构成的混合物, 仅用几种代表性组分必然难以准确地复现实际航空煤油的所有性质, 最终导致模型计算值和实验值相对偏差较大。而由于在研究航空煤油的传热或喷雾特性时, 关注的首要问题是准确地预测其各热物性随温度和压力的变化情况, 而较少涉及反应机理方面的研究, 因此实际上不需要建立一个统一的热物性模型。为不同的热物性开发不同的替代物模型, 具有获得最高精度以及灵活性的潜力, 将不同模型计算的热物性整合成一组数据库后, 可将其作为一个整体进行后续的流动以及传热分析。因此, 本文的研究目标主要包括以下几点:

1. 采用多种手段对航空煤油替代模型的构建方法及其热物性展开研究。
2. 针对不同热物性, 分别开发适用于 RP-3 航空煤油在亚超临界状态下的高精度热物性计算模型, 关注的物性主要包括 RP-3 航空煤油的密度、粘度、定压比热容及热导率。
3. 在新开发模型的基础上, 构建 RP-3 的热物性数据库, 并开发相应的热物性查询接口。

本篇论文各章按照如下的方式组织:

1. 第一章对超燃冲压发动机的发展及其冷却问题做出了介绍, 介绍了亚超临界流体热物性变化的一般规律, 并从实验和计算两方面介绍了亚超临界 RP-3 航空煤油的热物性的研究现状, 交代本论文研究的主要内容。
2. 第二章针对不同热物性, 采用遗传算法结合广义对应态法则, 通过最小化模型计算值和实验值间的相对偏差, 对 RP-3 航空煤油的热物性替代模型展开优化。同时为考虑裂解和自氧化过程对物性的影响, 对优化后的模型引入修正, 构建适用于计算 RP-3 航空煤油在亚超临界状态下的热物性的 C4+ 替代模型。最后介绍所开发的热物性查询接口 RP3thermalor。
3. 第三章讨论了基于人工神经网络的热物性模型构建方法, 用三组分替代模型、

十组分替代模型、以及 RP-3 航空煤油的热物性实验数据对所提出的方法进行了验证，同时与第二章中所提出的 C4+ 替代模型进行了对比，比较了不同模型构建方法的优劣。

4. 第四章采用分子动力学方法对航空煤油替代模型的热物性展开研究。基于超临界压力下正癸烷热物性的实验数据，比较了不同分子力场的表现，得到了适用于模拟亚超临界状态下烷烃热物性的最优分子力场。基于所获得的最优分子力场，对第二章中优化的热物性模型进行了模拟，并与广义对应态法则的计算结果进行了对比，说明两种方法在计算亚超临界碳氢混合物热物性上的有效性。

第 2 章 C4+ 模型构建

本章针对 RP-3 航空煤油的密度、定压比热容、粘度以及热导率, 结合遗传算法和广义对应态法则, 构建了单一热物性替代模型。首先在四组分模型基础上, 针对 RP-3 航空煤油的各个热物性进行了模型优化。同时为考虑裂解和自氧化过程对物性的影响, 在优化后的模型中进一步引入新的修正, 最终构建了适用于计算 RP-3 航空煤油在亚超临界状态下的热物性的 C4+ 替代模型。本章首先简要介绍遗传算法和广义对应态法则的基本原理, 之后给出了热物性模型优化的流程, 并分析了针对 RP-3 航空煤油各热物性的模型构建及计算结果, 最后介绍了所开发的热物性查询软件。

2.1 广义对应态法则

对应态法则^[35] 揭示了不同流体之间的相似性, 根据对应态原理, 如果两种流体分子满足严格共形的条件, 那么存在以下关系:

$$a_x^r(\rho_x, T_x) = a_0^r(\rho_x h_{x,0}, T_x/f_{x,0}), \quad (2-1)$$

其中 a 为残余海姆霍兹自由能, T 为绝对温度, ρ 为流体密度。下标 $x,0$ 分别指目标流体和参考流体。比例因子 $h_{x,0}$ 和 $f_{x,0}$ 被称为等效物质还原系数, 是两种流体临界参数的函数,

$$h_{x,0} = \frac{\rho_0^c}{\rho_x^c}, f_{x,0} = \frac{T_x^c}{T_0^c}, \quad (2-2)$$

其中下标 c 指代变量对应的临界值。基于上述表达式, 未知流体的热力学关系可以用性质已知的参考流体来计算。参考流体的性质可以用实验数据或状态方程、经验关系式等方式计算。然而只有球型、弱极性的流体分子满足上述对应态原理, 对于大部分真实流体, 该法则不再适用。因此, 在广义对应态法则中, 两个形状因子 $\theta_{x,0}, \phi_{x,0}$ 被引入到了比例因子中, 用以反映分子极性的影响,

$$\begin{aligned} f_{x,0} &= (T_x^c/T_0^c) \theta_{x,0}(T_x^*, V_x^*, \omega_x) \\ h_{x,0} &= (V_x^c/V_0^c) \phi_{x,0}(T_x^*, V_x^*, \omega_x), \end{aligned} \quad (2-3)$$

其中 V 指代对应流体的比容, 星号指代减去临界参数后的约化参数。 $\theta_{x,0}, \phi_{x,0}$ 是偏心因子 ω 以及约化变量 T_x^*, V_x^* 的函数。在混合物的情况下, 可以构造一等效的

假设纯流体，其标度因子通过范德瓦尔斯混合法则定义为

$$h_{x,0} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j h_{i,j} \quad (2-4)$$

及

$$f_{x,0} h_{x,0} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j f_{i,j} h_{i,j} \quad (2-5)$$

在方程中 x_i 指代组分 i 在混合物中的比例。交叉项被定义为:

$$f_{ij} = \sqrt{f_i f_j} (1 - k_{ij}) \quad (2-6)$$

及

$$h_{ij} = \left(h_i^{1/3} + h_j^{1/3} \right)^3 (1 - l_{ij}) / 8, \quad (2-7)$$

其中 k_{ij} 和 l_{ij} 为相互作用系数。对于广义对应态法则更多的细节，可参考文献^[36-37]。

对于输运参数包括粘度和热导率的计算，Ely 和 Hanley^[38-39] 提出的基于广义对应态法则的模型被广泛采用。在该模型中，未知流体的输运参数（如粘度）可以用参考流体单位的参数来计算，

$$\eta_x(\rho, T) = \eta_0(\rho_{x,0} h_{x,0}, T_{x,0} / f_{x,0}) F_\eta, \quad (2-8)$$

其中

$$F_\eta = \left(\frac{M_x}{M_0} \right)^{1/2} f_{x,0}^{1/2} h_{x,0}^{-2/3}, \quad (2-9)$$

M 为流体分子的摩尔质量。参考流体的粘度可以用以下经验表达式来描述:

$$\eta_0(\rho_0, T_0) = \eta_0^{(1)}(T_0) + \eta_0^{(2)}(T_0) \rho_0 + \Delta\eta_0(\rho_0, T_0) X_\eta, \quad (2-10)$$

其中 $\eta_0^{(1)}$ 代表稀薄气体部分的粘度, $\eta_0^{(2)}$ 为粘度的一阶修正, $\Delta\eta_0$ 描述流体在高密度情况下的粘度修正。更多有关输运参数的计算方法可以参考文献^[38-39]。

在超临界压力下计算碳氢燃料热物理性质的扩展对应态方法已被广泛采用，本文使用 `supertrapp` 程序^[40] 计算替代模型的热力学和输运性质，该程序结合了广义对应态法则方法和碳氢化合物参数数据库，其有效性已在许多研究中得到证实^[41-44]。

2.2 遗传算法

一个最优化问题的提法可以分为两部分：

1. 针对所研究的问题构造一个合适的目标函数
2. 在满足一系列的有关约束下，找到一组参数，使得目标函数达到最优值

本文所讨论的热物性替代模型优化问题中，目标函数是针对 RP-3 航空煤油的某一热物性，各温度、压力处模型计算值和实验值之间相对误差之和，优化目标为使该误差函数达到最小。所想要找到的一组参数，就是替代模型中各组分的摩尔分数。参数所需满足的约束是各组分摩尔分数之和应为 1。

遗传算法^[45]是对自然选择压力下种群进化过程进行模拟，以求解最优化问题的一种算法。在一个生态系统中，一个种群存在性状各异的许多个体，适应环境的个体被保留，不适应环境的个体被淘汰。随着种群的繁衍，伴随着变异和基因重组，种群中会产生适应度越来越高的个体。在环境条件不变的情况下，种群最终发展到最适应环境的状态。

在遗传算法中，构造的目标函数代表着个体对环境的适应程度，每一组参数代表种群中的一个个体。因此模仿种群在自然选择下逐渐进化的过程，就是一族参数逐渐向能够使得目标函数达到最优值的参数的收敛过程。对于任何一个优化问题，只要能够定义适应度函数，均可采用遗传算法进行求解，因此遗传算法的应用非常广泛。遗传算法一般由以下几个步骤组成：种群初始化、评估适应度、选择个体、交叉变异等，其基本流程如图2.1所示。

自从遗传算法被提出以后，许多工作注重于提高算法的搜索能力，如小生境算法^[46]，并行重组退火算法^[47]，以及自适应遗传算法等^[48]。本文采用了确定性拥挤算法^[49]，来进行模型的迭代优化。研究表明确定性拥挤算法在各类复杂度的问题上的表现均较好^[50]。确定性拥挤算法比较不同个体之间的相似性，让相似的个体之间进行竞争并删除适应度较低的个体，以增强算法的局部搜索能力。确定性拥挤算法的伪代码如图2.2所示。

2.3 模型构建流程

2.3.1 组分选取

要开发航空煤油的替代模型，首先要确定的替代模型中包含的基础组分。若选取的组分过少，则可能会导致可调整的变量过少，使模型不具备能够准确地复现实际航空煤油热物性的可能性；而若选取的组分过多，则会导致优化自由度过大，

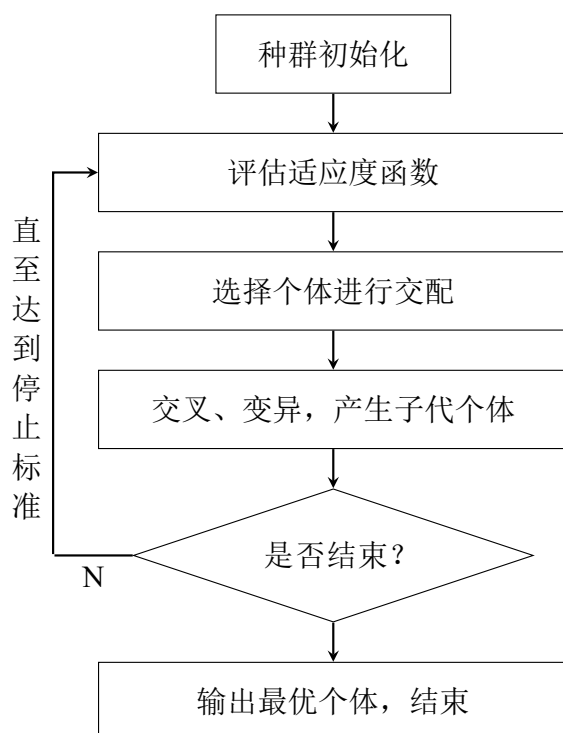


图 2.1 遗传算法流程图

随机生成 n 个个体；

Repeat for g generations:

Do $n/2$ times:

随机选取两个个体, p_1, p_2 ；

交叉、重组，生成两个子代 c_1, c_2 ；

if $d(p_1, c_1) + d(p_2, c_2) \leq [d(p_1, c_2) + d(p_2, c_1)]$ **then**

if $f(c_1) > f(p_1)$ **then** 用 c_1 替换 p_1 ；

if $f(c_2) > f(p_2)$ **then** 用 c_2 替换 p_2 ；

else

if $f(c_2) > f(p_1)$ **then** 用 c_2 替换 p_1 ；

if $f(c_1) > f(p_2)$ **then** 用 c_1 替换 p_2 ；

图 2.2 确定性拥挤算法示意图^[50]

难以找到最优解。Xu et al.^[31] 比较了典型的几种替代物模型在超临界压力下预测 RP-3 航空煤油的各个热物性的表现，并与已有的实验数据进行了对比，其研究结果表明 Mawid et al.^[34] 提出的四组分模型（以下简称为 C4 模型，组分如表2.1所示）各种替代物模型之中表现最好，可以准确地预测 RP-3 航空煤油在超临界压力下的拟临界温度，且可以相对较好地预测 RP-3 航空煤油的各个热物性变化。因此可以认为这四种组分是对 RP-3 航空煤油较好的近似，因此本文在模型构建时也选取和 C4 模型相同的四个组分。

表 2.1 C4 模型组分及摩尔分数

组分	化学式	摩尔分数
正癸烷	C ₁₀ H ₂₂	0.2030
正十二烷	C ₁₂ H ₂₆	0.3810
甲基环己烷	C ₇ H ₁₄	0.1470
正丁苯	C ₁₀ H ₁₄	0.2690

2.3.2 模型优化

优化的主要流程如图2.3所示。由于替代模型中含有四个组分，因此其可用三个 (0, 1) 之间的浮点数来表示。优化过程中采用格雷码编码来增强算法的局部搜索能力^[51]。在将编码转换为摩尔分数之后，调用 `supertapp` 计算对应替代模型各温度压力下的物性。适应度函数被定义为模型计算值和实验值各温度、压力下的相对偏差之和的倒数。热物性数据的实验值来自文献^[20-22,24]。基于适应度函数，模型可按照确定性拥挤算法定义的规则迭代优化。在一定的迭代次数过后，模型收敛到最优模型。为便于对优化流程进行控制以及调用 `supertrapp` 的 `fortran` 程序，本文未调用已有的优化库，而是基于 `python` 的 `Numpy`^[52] 等库编写了模型优化的整个过程及调用时的具体接口。

2.3.3 模型修正

在模型优化的基础上，为进一步提高替代模型的预测精度，本文进一步考虑了裂解和自氧化过程对物性的影响。裂解通常在相对较高的温度下发生（如 $T \geq 670\text{ K}$ ），煤油中的长链分子裂解成小分子有机物，从而对物性产生显著影响。自氧化是一种吸热过程，航空煤油与溶解氧相互作用的温度约为 $T \leq 530\text{ K}$ 。自氧化过程不会显著改变煤油的成分，而由于反应吸热，其对热容量会有显著影响^[28]。

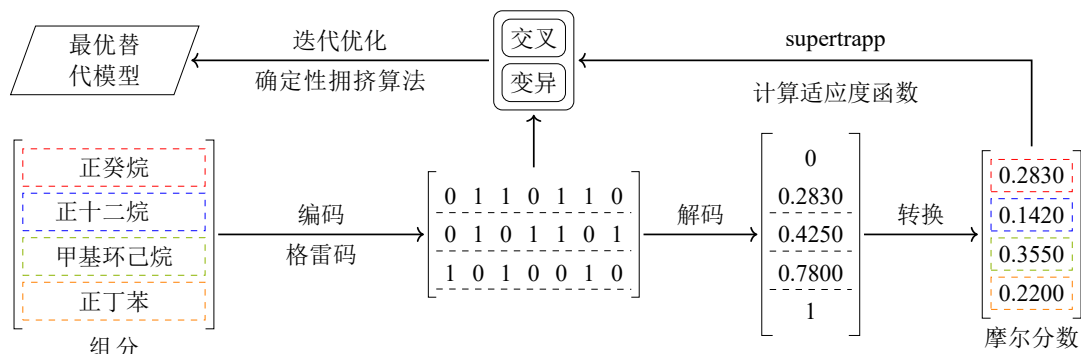


图 2.3 替代模型优化流程示意图

考虑到这两个过程对于热物性的影响，本文在优化后的替代模型中进一步引入修正，以降低模型计算值和实验值之间的偏差，如图2.4中所示。对于密度和粘度，在高温范围内将新的组分引入到优化的替代模型中（对于密度替代模型为环戊烷，对于粘度替代模型为正十八烷），以代表由裂解引起的成分变化。新组分不是真正的裂解产物，而是综合反映裂解对其性质的影响。新引入的组分的摩尔分数设定为温度和压力的函数。将 (T, P) 处使得模型计算值和实验值之间的相对偏差最小的新组分摩尔分数定义为最优摩尔分数，通过拟合最优摩尔分数，得到新组分的摩尔分数表达式 $f(T, P)$ 。由于比热容同时受到两个过程的显著影响，因此本文并没有在比热容模型引入新的组分，而是对计算结果进行了数值修正。由于缺乏高温下的实验数据，因此本文未对热导率模型进行进一步修正。当获得了高温区的实验数据后，可采用同样的方式进行处理。

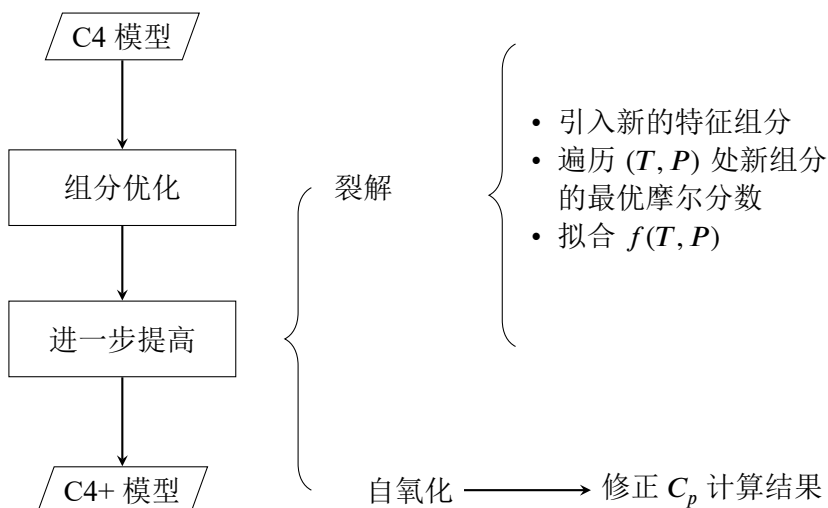


图 2.4 C4+ 模型构建流程示意图

2.4 结果与讨论

本部分将讨论针对密度、粘度、定压比热容以及热导率的 C4+ 模型的具体形式，并分析比较 C4 模型及 C4+ 模型计算值和实验值的相对误差。

2.4.1 密度

表 2.2 C4 模型与 C4+ 密度模型对比

组分	化学式	摩尔分数	
		C4	C4+ (ρ)
正癸烷	$C_{10}H_{22}$	0.2030	$0.6220 \times (1 - f(T))^a$
正十二烷	$C_{12}H_{26}$	0.3810	$0.1100 \times (1 - f(T))$
甲基环己烷	C_7H_{14}	0.1470	0
正丁苯	$C_{10}H_{14}$	0.2690	$0.2680 \times (1 - f(T))$
环戊烷	C_5H_{10}	0	$f(T)$

$$^a f(T) = \max(0.00767T - 5.29, 0)$$

表 2.2 表明了 C4 模型以及 C4+ 密度模型各组分及其摩尔分数。在优化后的 C4+ 模型中，正癸烷占据了最高的比例，甲基环己烷的摩尔分数变为 0。这说明正癸烷与 RP-3 航空煤油有较大幅度的相似性，在一定程度上也表明了正癸烷单组分模型也是航空煤油 RP-3 的一种替代模型的选择，和文献^[31]中的分析一致。此外，低密度组分环戊烷在高温时添加到了替代模型中，以减小在高温区由裂解引起的模型计算值与实验值之间的偏差。本文发现在实验值的温度和压力范围内，环戊烷的最优摩尔分数在不同的超临界压力下均近似随温度线性增长。因此，通过对函数系数进行拟合，得到在 C4+ 密度模型中环戊烷的摩尔分数函数表达式，

$$f(T) = \max(0.0076T - 5.29, 0), \quad (2-11)$$

其为温度的线性函数。 $f(T)$ 的最小值为 0，此时 C4+ 密度模型就是优化后的组分固定的包含三个组分的替代模型。

图 2.5 是 3 MPa 下两模型的密度计算值和实验值的对比，其中密度的实验值来自于文献^[20]，图中同样画出了两模型计算值与实验值的相对偏差。可以看出整体上，C4+ 密度模型计算值与实验值接近，且 C4 模型的相对偏差随着温度的升高而增大，模型的可靠性在 $T \geq 690 \text{ K}$ 后迅速下降，然而新构建的替代模型则仍具有较

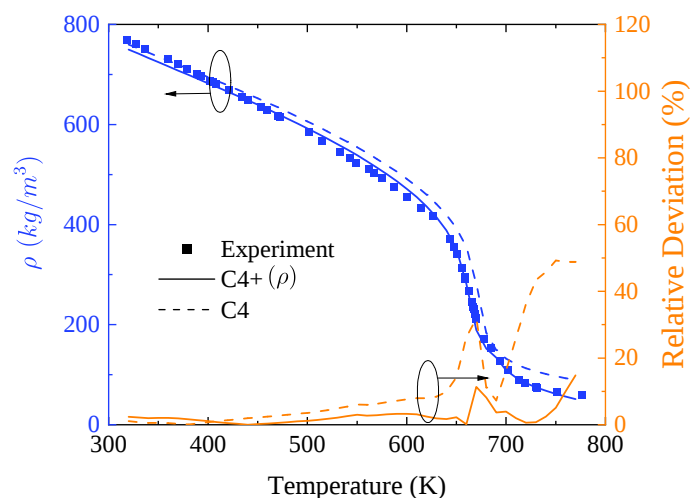


图 2.5 3 MPa 下 C4 模型和 C4+ 密度模型计算值与 RP-3 航空煤油密度实验值对比

好的预测能力，这表明了引入修正的必要性。

表 2.3 不同超临界压力下 C4 模型与 C4+ 密度模型的计算值与实验值的最大相对偏差与平均相对偏差对比

替代模型	3 MPa		4 MPa		5 MPa	
	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)
C4	11.43	49.22	17.56	108.06	10.73	99.25
C4+	2.66	14.83	3.21	14.33	4.07	13.77

表 2.3 列出了两模型计算值和实验值在不同超临界压力下的相对偏差情况，更加清晰地表明了本文新构建的替代模型相比原始 C4 模型的精度有了较大地提高。C4 模型的密度平均相对偏差大于 10% 且最大相对偏差高于 108%。然而新构建的 C4+ 模型的平均相对偏差小于 5%，且最大相对偏差也仅有 14.83%。模型预测精度的提高源自于优化及高温修正两部分的共同作用。

2.4.2 粘度

优化后的 C4+ 粘度模型各组分的摩尔分数如表 2.4 所示。优化后正癸烷的所占比例仍然保持最高，正丁苯的摩尔分数趋近于 0，这进一步说明了正癸烷与 RP-3 航空煤油的相似性。在温度较高时，将正十八烷引入到了 C4+ 粘度模型中，以增强模型在高温区的预测能力。在实验范围内，本文发现正十八烷的最优摩尔分数与温度和压力均近似呈线性关系。因此，通过对函数中的参数进行拟合，得到 C4+

表 2.4 C4 模型与 C4+ 粘度模型对比

组分	化学式	摩尔分数	
		C4	C4+ (η)
正癸烷	$C_{10}H_{22}$	0.2030	$0.6320 \times (1 - g(T, P))^a$
正十二烷	$C_{12}H_{26}$	0.3810	$0.1520 \times (1 - g(T, P))$
甲基环己烷	C_7H_{14}	0.1470	$0.2160 \times (1 - g(T, P))$
正丁苯	$C_{10}H_{14}$	0.2690	0
正十八烷	$C_{18}H_{38}$	0	$g(T, P)$

$$^a g(T, P) = \max(0.0054T - 0.19P - 2.97, 0)$$

粘度模型中正十八烷的摩尔分数函数为,

$$g(T, P) = \max(0.0054T - 0.19P - 2.97, 0), \quad (2-12)$$

其为温度和压力的线性函数。 $g(T, P)$ 的最小值为 0, 此时 C4+ 粘度模型就是组分固定的优化后的含三组分的替代模型。

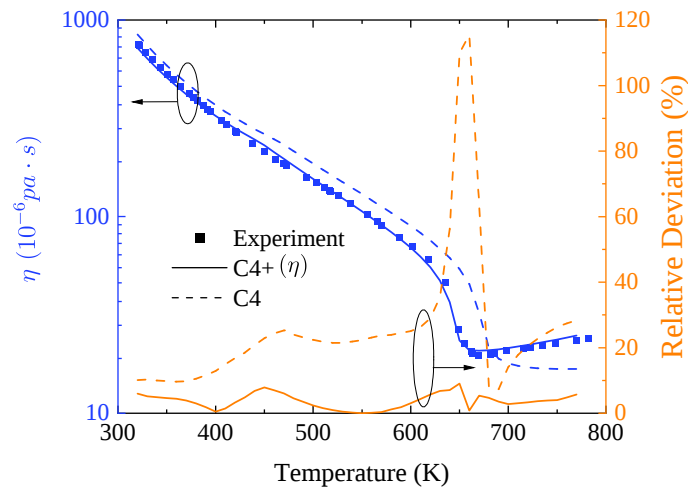


图 2.6 C4 模型和 C4+ 模型在 3 MPa 下粘度计算值和实验值对比

图 2.6 为 3 MPa 下两模型的粘度计算值和实验值的对比, 图中同样标注了模型计算值和实验值的相对偏差情况, 其中实验值来自文献^[21]。从图中可以看出新构建模型的表现相比 C4 模型有了较大的提高, 尤其是可以准确预测跨临界区域粘度的变化。此外, 由于修正的引入, 模型在高温区仍旧具有较好地预测能力。

在不同压力下详细的误差分析如表 2.5 所示。原始 C4 模型的平均相对误差始终大于 20%, 且在 3 MPa 下最大相对偏差大于 110%。然而 C4+ 模型的相对偏差和

表 2.5 不同超临界压力下 C4 模型与 C4+ 模型粘度计算值与实验值的最大相对偏差与平均相对偏差对比

替代模型	3 MPa		4 MPa		5 MPa	
	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)
C4	25.44	115.54	23.74	56.66	21.35	45.90
C4+	3.70	9.06	3.23	7.46	3.11	7.41

最大偏差分别小于 4% 及 10%。结果表明新构建的模型可以很好的还原 RP-3 航空煤油粘度的实验值。

2.4.3 定压比热容

表 2.6 C4 模型与 C4+ 比热容模型对比

组分	化学式	摩尔分数	
		C4	C4+ (C_p) ^a
正癸烷	$C_{10}H_{22}$	0.2030	0.6850
正十二烷	$C_{12}H_{26}$	0.3810	0.2913
甲基环己烷	C_7H_{14}	0.1470	0.0237
正丁苯	$C_{10}H_{14}$	0.2690	0

^a 计算结果乘以 R , $R = 7.78 \times 10^{-4}T + 0.7104$

表 2.6列出了优化后模型中各组分的摩尔分，其中正丁苯的摩尔分数变为 0 而正癸烷仍占据最高的比例。然而，由于裂解和自氧化过程，优化后模型的计算比热容仍然显著低于实验值。为进一步提高模型的预测精度，本文发现在任何压力下，计算比热容与实验值之比随着温度近似呈线性增加。因此，修正项

$$R = 7.78 \times 10^{-4}T + 0.7104, \quad (2-13)$$

由线性拟合得到。C4+ 模型最终比热容的计算结果是 R 和优化模型计算结果的乘积。

图 2.7展示了在3.02 MPa下两模型的定压比热容计算值与实验值的对比，其中实验值来自文献^[22]，图中同样标注了模型计算值和实验值之间的相对偏差。可以看到 C4 模型计算值与实验值的相对偏差随着温度的增加而增加，而新构建模型在

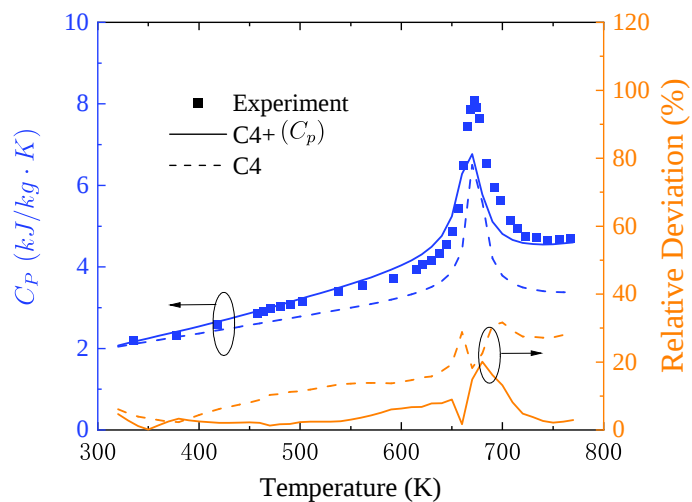


图 2.7 3.02 MPa 下 C4 模型和 C4+ 模型比热容计算值和实验值的对比

整个温度区间上都有着较好的表现。

表 2.7 不同超临界压力下 C4 模型与 C4+ 模型定压比热容的计算值与实验值的最大相对偏差与平均相对偏差对比

替代模型	3.02 MPa		4.02 MPa		4.98 MPa		5.98 MPa	
	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)
C4	14.38	31.86	14.00	27.96	15.06	28.40	14.86	28.89
C4+	4.61	20.07	2.35	10.24	4.70	2.24	1.65	5.81

表2.7列出了不同超临界压力下 C4 模型和 C4+ 模型定压比热容计算值与实验值的相对误差。结果表明新提出的 C4+ 模型相比原始 C4 模型精度有了较大提高，原始 C4 模型计算值与实验值的相对与最大偏差分别大于 14% 和 30%。然而新提出的模型的相对偏差始终小于 5%，最大相对偏差 20.34% 出现在3.02 MPa的拟临界点附近，主要是由与比热容的变化过于显著。

2.4.4 热导率

由于热导率实验值的最高温度范围小于500 K，因此仅进行了模型优化过程，而未进行进一步修正。在缺少实验值的情况下，为保证优化后模型仍能够准确预测拟临界温度，对优化过程做出了额外限制。若模型不能够准确预测拟临界温度，则适应度函数被直接设置为 0。优化后 C4+ 热导率模型中各组分的摩尔分数如表2.8所示。正丁苯在新模型中的摩尔分数超过 80%，同时，正癸烷和甲基环己烷的摩尔分数为 0。值得注意的是热导率优化模型中的各组分的摩尔分数和其他物性有着

表 2.8 C4 模型与 C4+ 热导率模型对比

组分	化学式	摩尔分数	
		C4	C4+ (λ)
正癸烷	$C_{10}H_{22}$	0.2030	0.1430
正十二烷	$C_{12}H_{26}$	0.3810	0
甲基环己烷	C_7H_{14}	0.1470	0
正丁苯	$C_{10}H_{14}$	0.2690	0.8570

较大区别，这可能是由于实验数据不足导致的。

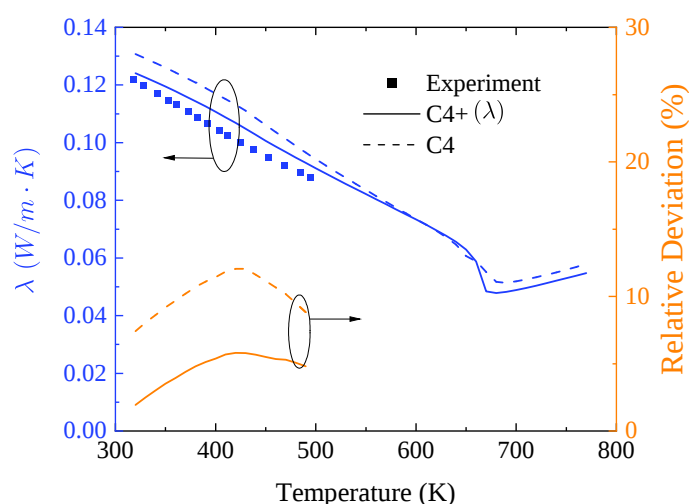


图 2.8 3 MPa 下 C4 模型与 C4+ 模型热导率计算值和 RP-3 实验值对比

图2.8比较了 C4 模型和 C4+ 模型在3 MPa下热导率的计算值与实验值及相对误差情况。热导率实验值来自文献^[24]。结果表明新构建的模型的精度相比于 C4 模型有所提升，同时，新模型仍能够准确地预测航空煤油 RP-3 的拟临界温度。

在不同超临界压力下对于热导率详细的误差分析如表2.5所示，其中用于分析的温度小于500 K。在各超临界压力下，C4 模型计算值和实验值的平均相对偏差大于 9%，最大相对偏差大于 12%。然而对于优化后的 C4+ 模型，计算值与实验值的平均偏差小于 5%，最大偏差也小于 7%。虽然在实验值的范围内，新构建的模型的预测精度更高，然而在高温区模型是否仍然准确，需要进一步的实验值确定。

表 2.9 不同超临界压力下 C4 模型与 C4+ 模型热导率的计算值与实验值的最大相对偏差与平均相对偏差对比

替代模型	3 MPa		4 MPa		5 MPa	
	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)	Ave (%)	Max (%)
C4	9.94	12.06	10.05	12.65	10.65	13.34
C4+	4.21	5.80	4.26	6.29	4.76	6.88

2.5 物性查询数据库及软件

基于所构建的 C4+ 替代模型，生成了压力范围为3 MPa~10 MPa，温度范围为300 K~750 K的密度、粘度、定压比热容、热导率以及热沉的数据库。基于所构建的数据库，开发了用于查询 RP-3 航空煤油热物性的软件 RP-3thermalor。由于热导率实验数据的温度小于500 K，因此对高于500 K的热导率计算结果并没有经过实验验证，因此无法评估计算结果的准确程度。但在获得了实验数据之后，可以按照同样的方法更新替代模型以及数据库，以对软件进行升级，软件的主体查询流程并不发生改变。

软件的基本使用流程如下所示，图2.9为软件的初始界面，初始界面中给出了5中可以选择的物性，包括密度、粘度、定压比热容、热导率以及热沉，假如使用者需要查询 RP-3 航空煤油的密度，则键入 0 后按回车键即可。

在输入想要查询的物性之后，软件给出了输入需要查询温度区间的提示，如图2.10所示。按照提示输入想要查询的温度的最小值、最大值以及间隔即可，用英文逗号分隔。

系统可以自动处理当间隔与最大值和最小值不匹配的情况。同时若用户输入的数值不合法，会有相应的提示以及正确的输入示例，不会出现因非法输入导致程序崩溃的现象，如图2.11

在用户输入了查询温度后，软件会要求用户输入所需要查询的压力范围（图2.12），同样按照提示输入想要查询压力的最小值，最大值以及间隔即可。若用户输入的数值不合法，会有相应的提示以及正确的输入示例，不会出现因非法输入导致程序崩溃的现象。

在用户输入了需要查询的物性，温度及压力范围后，系统会提示用户输入想要输出结果的文件名，在用户输入之后，系统会自动将结果输入到软件所在的文件夹中，并命名为用户所指定的文件名。同时，系统会提示用户是否需要继续查询，

```

*****
*              RP-3 Reference Database              *
*      Program RP3thermalor - Version 1.0          *
*
* Scope of application:                            *
*   Temperature Range: 300K - 750K                 *
*   Pressure range: 2Mpa - 10 Mpa                  *
*
* Included Properties:                             *
*   Density (kg/m^3)                               *
*   Viscosity (μPa.s)                             *
*   Cp (kJ/kg.K)                                   *
*   Thermal conductivity (W/m.K)                  *
*   Heat sink (kJ/kg)                             *
*
* Based on research sponsored by National Science and *
* Technology Major Project of the Ministry of Science *
* and Technology of China (2017-III-0005-0030)      *
*
*              All rights reserved.                *
*****

Please enter property number:

0 Density (kg/m^3)
1 Viscosity (μPa.s)
2 Cp (kJ/kg.K)
3 Thermal conductivity (W/m.K)
4 Heat sink (kJ/kg)

```

图 2.9 RP-3 航空煤油热物性查询软件界面

```

0
Please enter values of T min, T max and T inc, seperated by english comma.
Range: 300 - 750
Units: K

```

图 2.10 输入查询温度

```

300, 1000, 10
Illegal input!
Please enter correct T min, T max and T inc: (T min >= 300, T max <= 750)
For example: 300, 750, 10

```

图 2.11 输入非法温度后的提示

```
100, 100, 100
Illegal input!
Please enter correct P min, P max and P inc: (P min >= 2, P max <= 10)
For example: 3, 10, 0.5
```

图 2.12 输入查询压力

如果用户键入 Y，则返回初始界面；若用户键入 N，则程序自动退出，如图2.13所示。

```
Please enter the filename to store the results.
density.csv
The results have been stored in density.csv successfully.
Whether to calculate other properties? (Y/N)
```

图 2.13 保存输出文件

结果保存到.csv 文件中，图2.14为3.5 MPa下300 K~750 K的密度查询结果，在.csv 文件中按列排布，可方便地使用用于后续仿真模拟等。

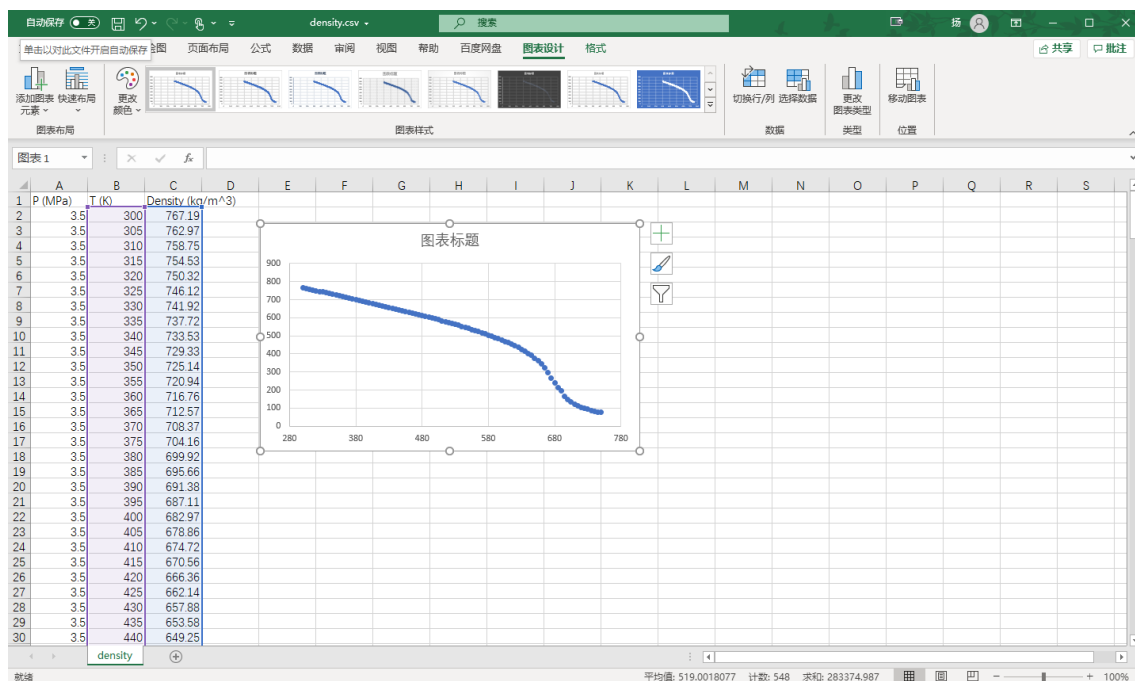


图 2.14 输出结果（3.5 MPa下 RP-3 航空煤油的密度变化）

2.6 本章小结

本章构建了适用于预测 RP-3 航空煤油在亚超临界状态下热物性的 C4+ 模型, C4+ 模型的详细形式如表2.10所示。模型中的基本组分包括正癸烷, 正十二烷, 甲基环己烷以及正丁苯。各组分的摩尔分数通过最小化对应物性模型计算值与实验值的相对误差优化得到。在优化后的模型基础上, 进一步引入了修正, 以反映裂解和自氧化过程对物性的影响。对于密度、粘度模型, 新组分引入到了优化模型中, 以反映裂解的影响; 对于定压比热容模型, 在计算结果中引入数值修正, 以同时反映裂解和自氧化过程的影响; 对于热导率模型, 由于目前缺少高温区的实验数据, 仅对模型做了优化。对比结果表明本部分所提出的 C4+ 模型可以较为准确地预测 RP-3 在超临界压力下的各个热物性。基于所构建的 C4+ 模型, 生成了热物性数据库, 并开发了 RP-3 航空煤油热物性查询软件 RP-3thermalor。

表 2.10 C4 模型与 C4+ 模型对比

组分	化学式	摩尔分数				
		C4	C4+			
			ρ	η	C_p^a	λ
正癸烷	$C_{10}H_{22}$	0.2030	$0.6220 \times (1 - f(T))^b$	$0.6320 \times (1 - g(T, P))^c$	0.6850	0.1430
正十二烷	$C_{12}H_{26}$	0.3810	$0.1100 \times (1 - f(T))$	$0.1520 \times (1 - g(T, P))$	0.2913	0
甲基环己烷	C_7H_{14}	0.1470	0	$0.2160 \times (1 - g(T, P))$	0.0237	0
正丁苯	$C_{10}H_{14}$	0.2690	$0.2680 \times (1 - f(T))$	0	0	0.8570
环戊烷	C_6H_{12}	0	$f(T)$	0	0	0
正十八烷	$C_{18}H_{38}$	0	0	$g(T, P)$	0	0

^a Multiply calculated data by $(7.78 \times 10^{-4}T + 0.7104)$

^b $f(T) = \max(0.00767T - 5.29, 0)$

^c $g(T, P) = \max(0.0054T - 0.19P - 2.97, 0)$

第3章 基于神经网络的热物性替代模型构建

本章首先介绍人工神经网络的一般原理，之后叙述了基于人工神经网络的热物性替代模型构建方法，在训练了神经网络模型后，用三组分替代模型、十组分替代模型、以及 RP-3 航空煤油热物性的实验数据对所提方法进行了验证，同时与第二章中所提出的 C4+ 替代模型进行了对比，比较了两种模型构建方法的特点与优劣。

3.1 人工神经网络

3.1.1 基本结构

在各种机器学习算法中，人工神经网络（ANN）由于其结构清晰简单、适用范围广，因此得到了广泛地研究与讨论，并已经被用于解决各种各样的分类或回归问题。ANN 是一种模拟模仿生物神经结构的网络结构模型，模型中包含由若干个神经元组成的多层结构。通过学习不同层中不同神经元之间的连接强度，使得整个网络结构“记忆”其所接受的信息，并做出相应的预测。

一个基本的人工神经元模型由图3.1所示，神经元接收来自上一层的所有神经元的输出信号，由于与不同神经元的连接强度不同，因此在接收输出信号时，会对来自不同神经元的信号赋予不同的权重和偏置。在接收到来自其他节点的输入后，将总输入通过激活函数后，直接输出结果或者将输出继续传递给下一层的神经元。

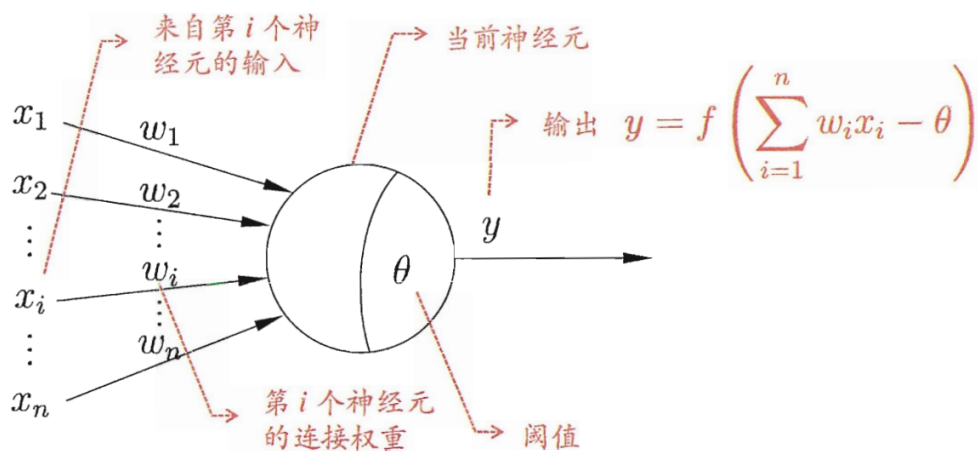


图 3.1 典型的人工神经元结构示意图^[53]

常见的激活函数有阶跃函数（式(3-2)）、sigmoid 函数（式(3-1)）等，其函数图像如图3.2所示，由于阶跃函数不连续，因此实际应用中常采用连续、可导的 sigmoid 函数作为激活函数。

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

$$\text{sgn}(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ 1, & x \geq 0 \end{cases} \quad (3-2)$$

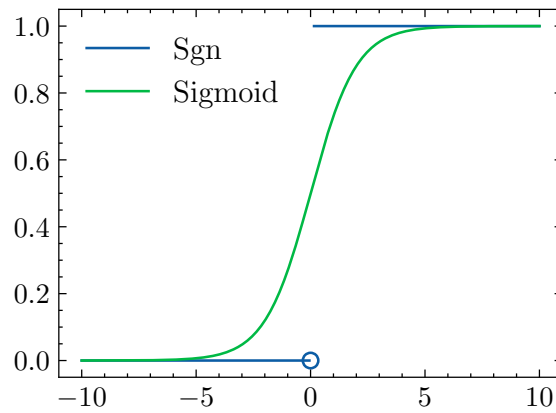


图 3.2 阶跃函数和 sigmoid 函数

一般的多层 ANN 由三部分构成，包括输入层、输出层以及中间若干层隐藏层，如图3.3所示。理论上，当神经网络的激活函数为非多项式函数且层数足够多时，对任何函数都可以作出近似^[54]。在实际应用过程中需要对隐藏层的层数以及每一层的节点数目进行选择 and 调整。

3.1.2 反向传播算法

初始的神经网络由于没有接收任何信息，因此其不具备预测能力，预测误差和实际值差异很大，而随着训练数据的逐渐输入，通过反向传播算法与梯度下降算法联合，调整网络中各结点的偏置和权重，逐渐减小相对误差。随着逐步迭代的进行，最终神经网络达到收敛，预测数据和期望值间的相对误差达到最小。有关反向传播算法的具体推导，读者可参考文献^[53]。

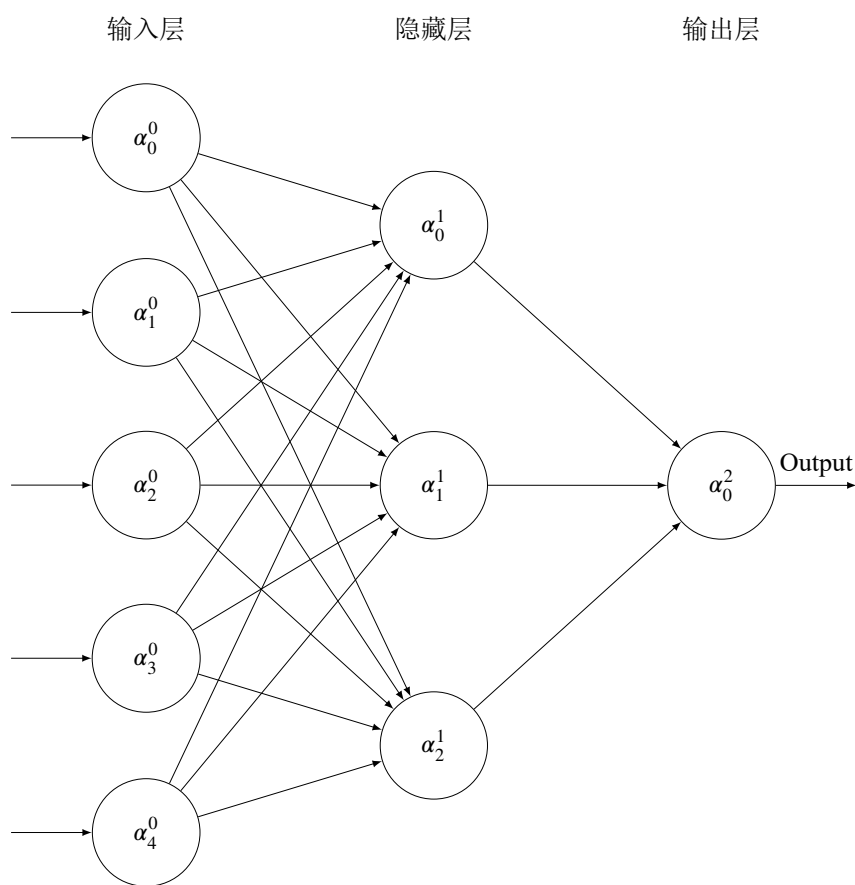


图 3.3 典型的神经网络结构示意图

3.2 模型构建流程

基于 ANN 的模型构建流程如图3.4所示，在本文的 ANN 模型中，输入为压力及该压力下各温度处的物性，由于在亚超临界状态下流体的热物性随温度变化幅度很大，因此在输入层对物性的值取对数，以使其分布更加平稳，减小数据间绝对差异；模型构建同样以四组分模型为基础，选取和四组分模型中同样的四个组分，ANN 输出为四个组分的摩尔分数，因此输出层共有四个节点。由于必须保证输出后各组分的摩尔分数之和为 1，因此在输出层后通过 softmax 函数归一化，最终得到通过该压力处的热物性变化曲线反推得的替代模型中各组分的摩尔分数。softmax 函数如式(3-3)所示，其中 i 代表第 i 个输出节点的值， K 为输出节点的总数目。神经网络的搭建以及训练过程采用开源深度学习库 Pytorch^[55] 进行。

$$\text{softmax}(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_{k=1}^K e^{x_k}} \quad (3-3)$$

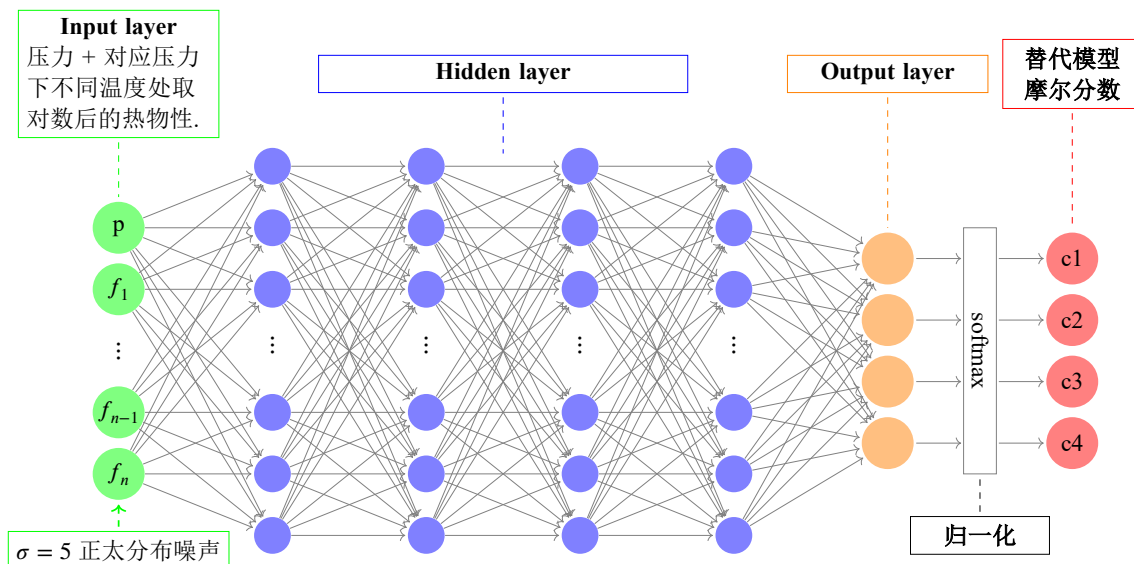


图 3.4 基于神经网络的替代模型构建流程示意图

3.3 神经网络模型训练

训练 ANN 模型的过程大致可以分为如下几步：

1. 同时随机生成 2 MPa~10 MPa 的压力和四种组分的摩尔分数
2. 调用 `supertrapp` 计算对应压力下对应模型不同温度处的热物性，构建训练集
3. 将对应的压力和物性输入到 ANN 中，将 ANN 预测的替代模型摩尔分数和生成的摩尔分数做比较，即可求得预测误差
4. 采用批量梯度下降方法，对 ANN 进行训练

由于实际航空煤油的热物性必然和模型计算值存在一定的差别，而 ANN 需要在训练集和预测集独立同分布的条件下表现才能较好，因此为增强模型鲁棒性，对输入数据施加高斯分布噪声。同时在 ANN 的每一层后执行批规范化 (Batch Normalization)^[56]，以进一步增强模型的稳定性和泛化能力。

图 3.5 为针对各热物性的 ANN 模型在训练过程中的训练集及预测集的均方误差 (MSE) 的变化，随着迭代次数的增加，ANN 逐渐达到收敛。值得注意的是，热导率 ANN 模型的 MSE 的下降并不明显，这主要是由于选取用于输入 ANN 的温度值限制在 500 K 之前，由于在拟临界温度之前热导率几乎不随压力变化，各个模

型间差异也并不大，导致问题的唯一性较差。

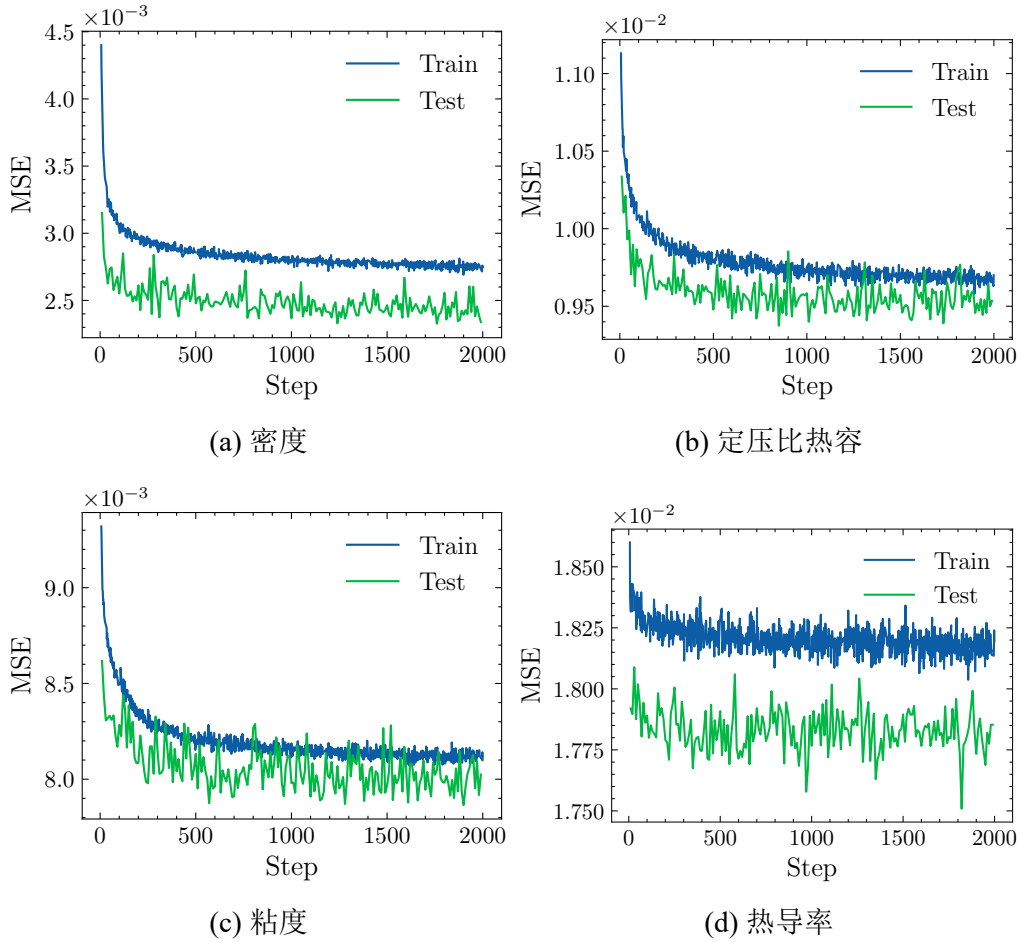


图 3.5 各模型训练过程中训练集误差与测试集误差随迭代次数的变化情况

3.4 方法验证

本部分分别采用不同超临界压力下，三组分替代物模型^[29]以及十组分替代物模型^[15]的密度、粘度的计算数据，输入给对所训练好的 ANN 模型中，检测所预测的四组分模型的结果，即等价于用所选取的四个组分去构建三组分混合物及十足分混合物的等效热物性替代模型，说明该模型构建方法的有效性，同时检验所选取的四组分的热物性覆盖能力。这两个替代模型的组分及摩尔分数如表3.1所示，其均被广泛地使用在 RP-3 航空煤油的对流换热研究中。

表 3.1 三组分和十组分替代模型组分及摩尔分数

组分	化学式	摩尔分数	
		C3	C10
正辛烷	C_8H_{18}	0	0.0600
正癸烷	$C_{10}H_{22}$	0.4900	0.1000
正十二烷	$C_{12}H_{26}$	0	0.2000
正十三烷	$C_{13}H_{28}$	0	0.0800
正十四烷	$C_{14}H_{30}$	0	0.1000
正十六烷	$C_{16}H_{34}$	0	0.1000
甲基环己烷	C_7H_{14}	0	0.2000
1,3-二甲基环戊烷	C_7H_{14}	0	0.0800
1,3,5-三甲基环己烷	C_9H_{18}	0.4400	0
丙基苯	C_9H_{12}	0.0700	0.0500
甲基萘	$C_{11}H_{10}$	0	0.0300

3.4.1 三组分替代物模型

图3.2分别为3 MPa~8 MPa用三组分模型密度计算结果输入给密度 ANN 模型后，输出的四个组份的摩尔分数。从结果可以看出，不同压力下预测的各组分的摩尔分数基本保持不变，均稳定在平均值附近。这说明对于理想情况下，在某一个压力下的物性变化曲线基本已经包含了这个混合物的组成信息。且对于所选取的四个组分来说，用其去对其他混合物构建替代模型时，各组分的摩尔分数最优解也相对较为单一，这使得在优化过程中算法比较容易找到全局最优解。

表 3.2 基于三组分模型密度的 ANN 预测结果

组分	3 MPa	4 MPa	5 MPa	6 MPa	7 MPa	8 MPa	Average
正癸烷	0.3955	0.3474	0.2982	0.2660	0.2606	0.2538	0.3036
正十二烷	0.1242	0.1343	0.1497	0.1653	0.1686	0.1640	0.1510
甲基环己烷	0.3159	0.3760	0.4151	0.4327	0.4386	0.4494	0.4046
正定苯	0.1644	0.1423	0.1370	0.1360	0.1322	0.1329	0.1408

图3.6为3 MPa~8 MPa下用 ANN 预测取平均值后的四组分替代模型的密度计算结果与三组分模型计算结果的对比。可以看到，在不同压力下四组分模型和三

组分模型的密度计算结果几乎完全一致，这说明 ANN 的模型预测效果很好，预测得到的模型是原有混合物的一个很好的近似。尽管备选四个组分与三组分模型中不完全相同，但是仍然可以通过调整各组分的摩尔分数，来实现对三组分模型密度的近似。这说明所选取的四个组分可能覆盖的热物性的范围较广，是构建航空煤油热物性替代模型的较好的选择。

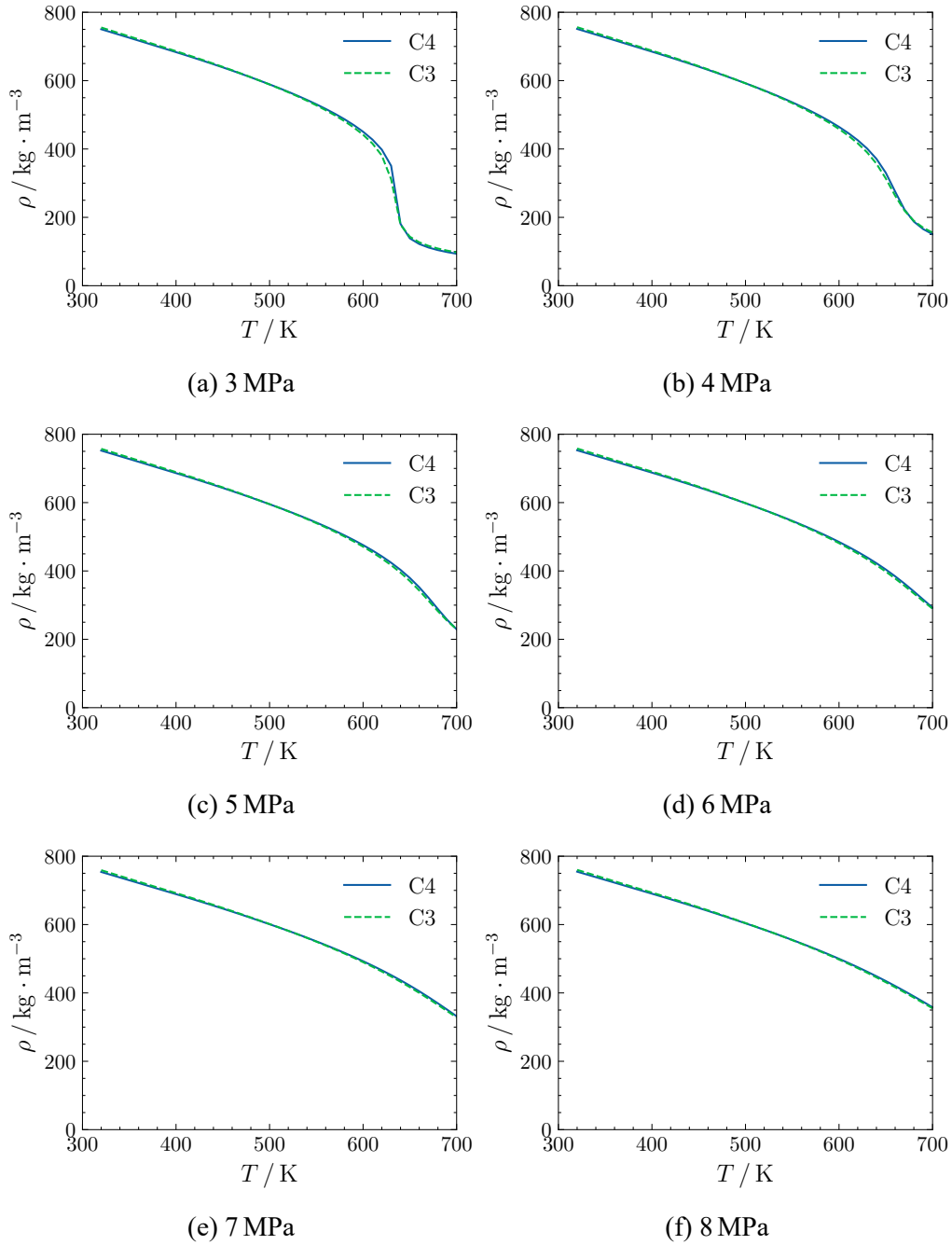


图 3.6 不同压力下取平均后的四组分模型与三组分模型密度计算结果的对比

图3.3为用三组分模型分别在3 MPa~8 MPa下计算的粘度输入给粘度 ANN 模型后, 预测得到的四组分摩尔分数。在压力小于等于6 MPa时, 各压力下预测得到的摩尔分数基本保持一致; 然而在压力高于6 MPa时, 预测的摩尔分数变化较大, 且除了正十二烷的摩尔分数均几乎为 0 外, 变动并没有呈现出一般的规律。这很可能是由于随着压力的增加, 压力对热物性的影响逐渐减小, 且流体热物性在跨临界区的突变现象也基本消失, 导致在物性变化曲线所携带的有效信息减少, 替代模型多解的情况开始出现。

表 3.3 基于三组分模型粘度的 ANN 预测结果

组分	3 MPa	4 MPa	5 MPa	6 MPa	7 MPa	8 MPa	Average
正癸烷	0.7537	0.7198	0.7234	0.7051	0.6015	0.5346	0.6730
正十二烷	0.0005	0.0007	0.0005	0.0004	0.0009	0.0007	0.0006
甲基环己烷	0.1755	0.2082	0.1926	0.2107	0.2971	0.3078	0.2320
正定苯	0.0703	0.0713	0.0835	0.0838	0.1004	0.1570	0.0944

图3.7为3 MPa~8 MPa下用 ANN 预测取平均值后的四组分替代模型的粘度计算结果与三组分模型计算结果的对比。可以看到, 在不同压力下四组分模型和三组分模型的密度计算结果几乎完全一致, ANN 预测得到的平均模型是三组分模型的很好的近似。从计算结果也可以明显地看到, 随着压力的增加, 粘度在跨临界区的反常变化几乎消失, 不同压力下粘度随温度的变化情况基本完全一致, 这也说明了压力高时摩尔分数预测波动变大的原因。

3.4.2 十组分替代模型

上一小节对三组分模型的 ANN 预测结果进行了讨论, 本节对更为复杂的十组分的情况进行讨论。表3.4为分别在3 MPa~8 MPa下, 用十组分模型密度计算结果输入给 ANN 模型后, 输出的四个组份的摩尔分数。从结果可以看出, 和三组分模型时的情况一致, 不同压力下预测的各组分的摩尔分数基本保持不变, 均稳定在平均值附近。

图3.8为3 MPa~8 MPa下用 ANN 预测取平均值后的四组分替代模型与十组分模型密度计算结果的对比。可以看到, 在不同压力下四组分模型和十组分模型的密度计算结果的一致性很好, 这说明十组分模型的密度变化可以完全用四个组分来进行近似, 即使包含了更多组分, 其所蕴含的信息并没有增加, 四个组分已经足够可以逼近大部分情况下混合物在超临界压力下密度的变化情况。

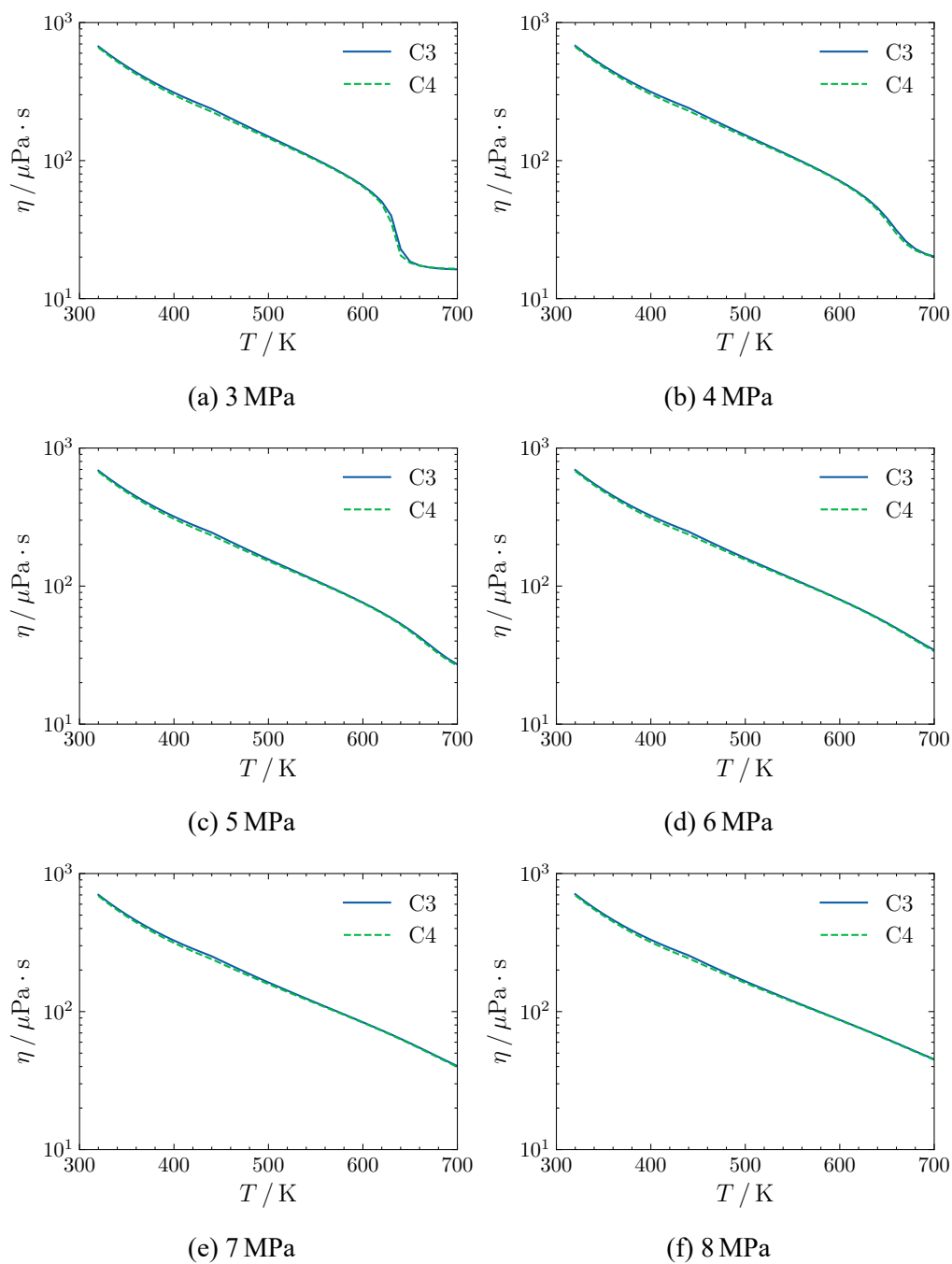


图 3.7 不同压力下 ANN 预测的四组分替代模型与三组分混合物粘度计算结果的对比

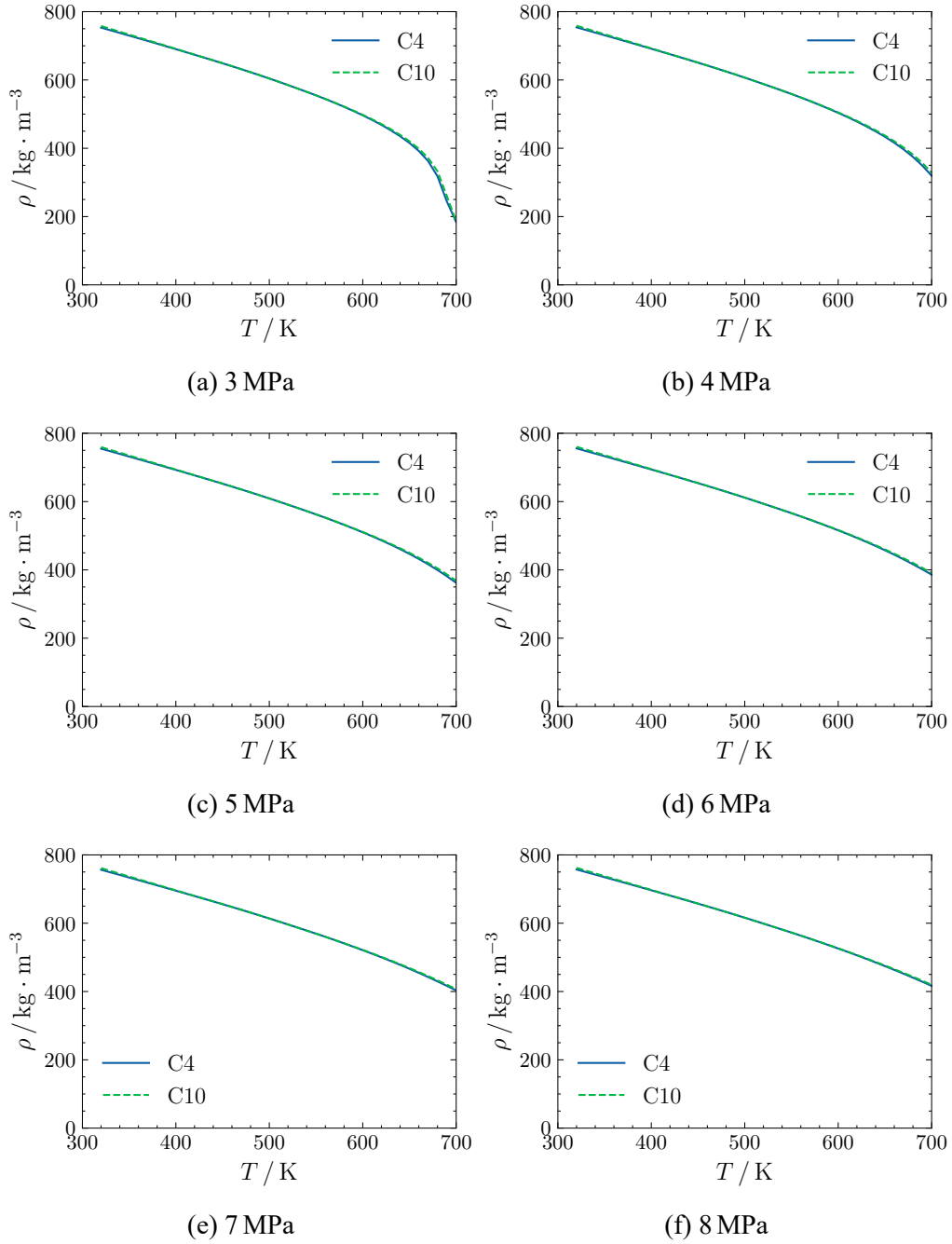


图 3.8 不同压力下 ANN 预测的四组分替代模型与十组分替代模型密度计算结果的对比

表 3.4 基于十组分模型密度的 ANN 预测结果

组分	3 MPa	4 MPa	5 MPa	6 MPa	7 MPa	8 MPa	Average
正癸烷	0.0892	0.0731	0.0924	0.1110	0.1212	0.1256	0.1021
正十二烷	0.6240	0.6691	0.6356	0.6045	0.5854	0.5715	0.6150
甲基环己烷	0.0641	0.0591	0.0642	0.0711	0.0762	0.0830	0.0696
正定苯	0.2227	0.1986	0.2078	0.2134	0.2172	0.2199	0.2133

图3.5为用十组分模型分别在3 MPa~8 MPa下计算的粘度输入给粘度 ANN 模型后, 预测得到的四组分摩尔分数。可以看到, 在各个压力下, 得到的摩尔分数预测结果偏差并不大。

表 3.5 基于十组分模型粘度的 ANN 预测结果

组分	3 MPa	4 MPa	5 MPa	6 MPa	7 MPa	8 MPa	Average
正癸烷	0.0036	0.0097	0.0098	0.0081	0.0066	0.0077	0.0076
正十二烷	0.7797	0.8065	0.8116	0.8203	0.8234	0.8297	0.8119
甲基环己烷	0.0595	0.0527	0.0505	0.0443	0.0416	0.0424	0.0485
正定苯	0.1572	0.1311	0.1280	0.1273	0.1284	0.1202	0.1320

图3.9为3 MPa~8 MPa下用 ANN 预测取平均值后的四组分替代模型的粘度计算结果与十组分模型计算结果的对比。可以看到, 在不同压力下四组分模型和十组分模型的粘度计算结果几乎完全一致, 这也进一步说明了引入更多的组分并没有起到实质上的作用。

从以上分析可以看出, 在构建航空煤油热物性的替代模型时, 所选取的组分应该满足以下两个标准: 一是在选取不同的摩尔分数分配时, 其热物性变化情况应该覆盖尽可能多的情况, 保证对于给定的煤油热物性的实验值变化曲线, 能够找到一组能够复现其变化的摩尔分数的解; 二是在满足上述条件下, 这一组解应该尽可能单一, 保证优化过程能够找到全局最优解。基于以上讨论, 可以认为本文所选取的四个组分, 是构建航空煤油热物性替代物模型的一组较好的选择。

3.5 RP-3 航空煤油模型构建

在本小节中, 采用 RP-3 航空煤油热物性的实验值, 输入到训练好的 ANN 模型中, 同时与第二章所提出的 C4+ 模型进行了对比。

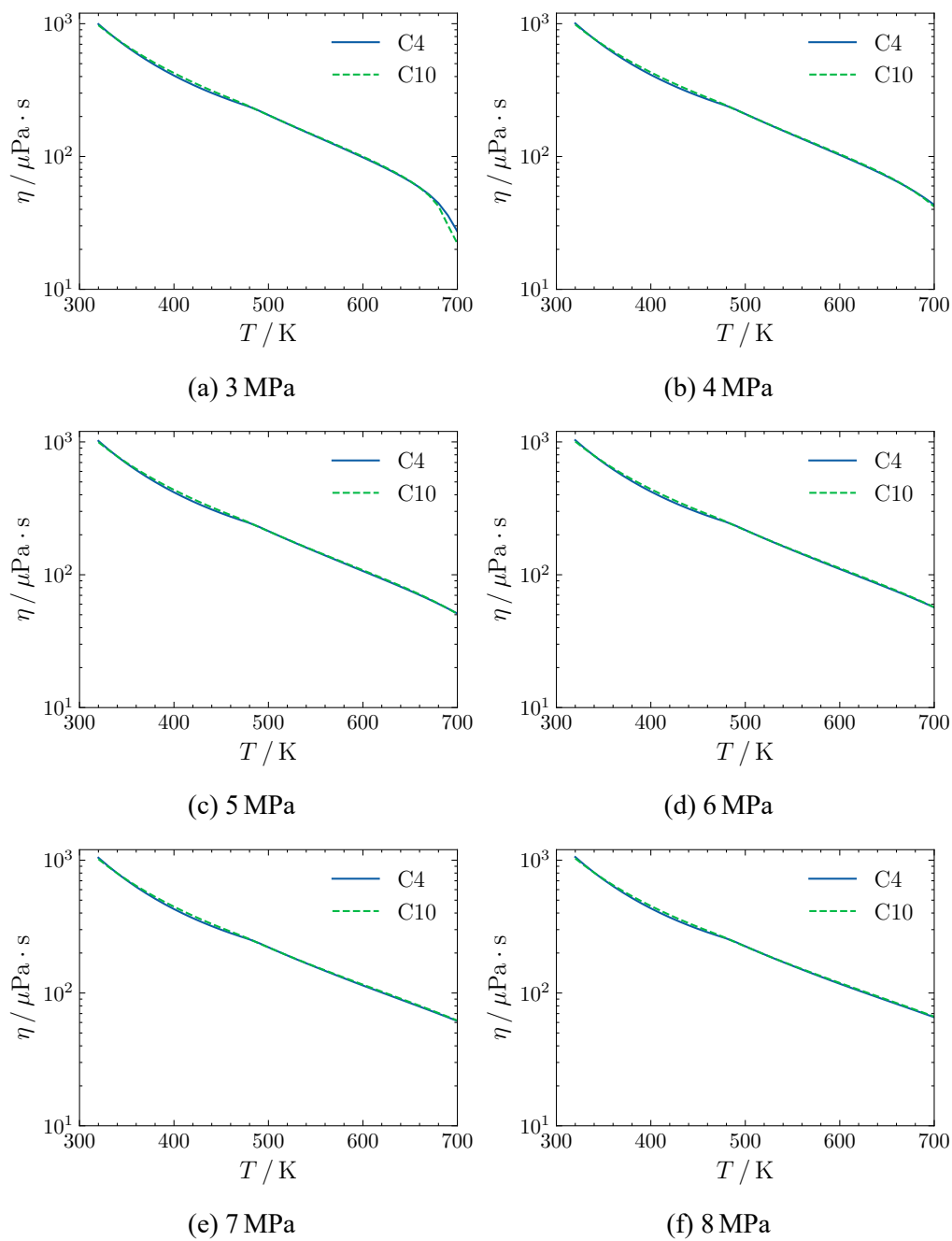


图 3.9 不同压力下 ANN 预测的四组分替代模型与十组分混合物粘度计算结果的对比

3.5.1 密度

表3.6为 ANN 构建的密度替代模型和 C4+ 模型的对比，可以看到不同压力下 ANN 预测的摩尔分数波动相对较大，这很可能是由于实验中存在的误差导致的。同时，采用 ANN 方法构建的模型（以下简称 ANN 模型）中各组分摩尔分数和 C4+ 模型相比有较大的差别。这表明说明了实际航空煤油在亚超临界状态下的密度的变化规律较易近似，替代模型组合不唯一造成的。

表 3.6 密度模型预测结果

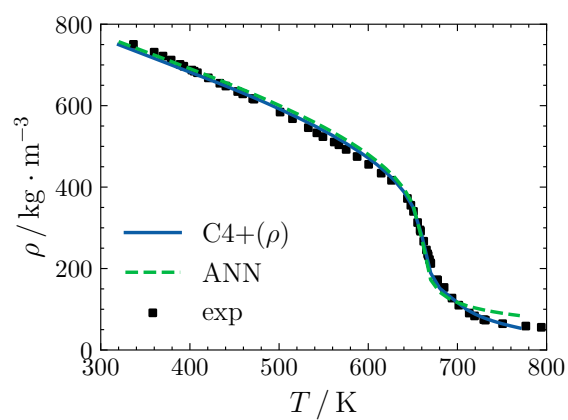
Species	ANN				C4+
	3 MPa	4 MPa	5 MPa	Average	
n-decane	0.4454	0.2988	0.2414	0.3285	0.6220
n-dodecane	0.2382	0.2210	0.2716	0.2436	0.1100
methycyclohexane	0.1348	0.2239	0.1583	0.1723	0
n-butylbenzene	0.1816	0.2563	0.3287	0.2556	0.2680

图3.10比较了不同压力下两模型的密度计算结果和实验值对比。在各个压力下，690 K之前 ANN 模型和 C4+ 密度模型计算的结果基本完全一致，这说明两种模型构建方法均可用于实际航空煤油的密度模型构建。而在温度大于690 K时，C4+ 密度模型的计算结果仍能够复现实验结果，而 ANN 模型的计算结果和实验值的偏差开始增大，这进一步说明了高温处计算结果的差异并不是由替代模型引起的，需要引入修正项以复现实验值。

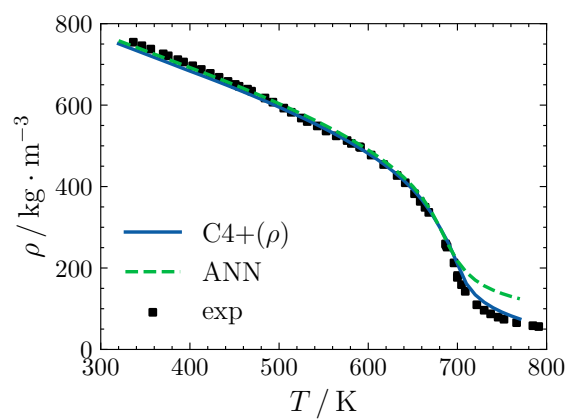
3.5.2 粘度

表3.7为 ANN 构建的粘度模型和 C4+ 模型各组分的摩尔分数对比。针对粘度，ANN 模型和 C4+ 粘度模型各组分的摩尔分数较为接近。其中，正癸烷占据了较大的比例，而正丁苯的摩尔分数均趋近于 0。同时，这说明相比于密度，真实航空煤油粘度的变化规律更难近似，其替代模型的最优解较为单一，而基于遗传算法和基于 ANN 的模型构建方法均能找到最优解。

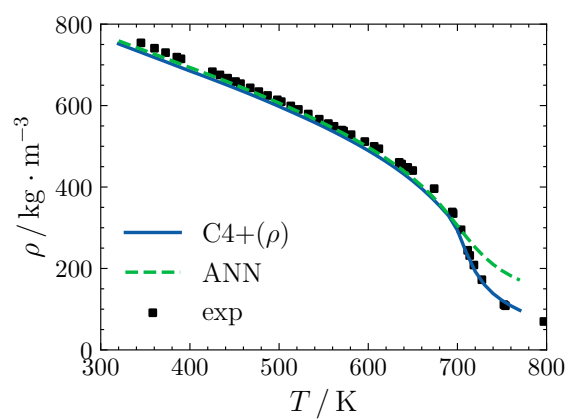
图3.11为下各个超临界压力下 ANN 模型和 C4+ 模型粘度计算值和 RP-3 航空煤油实验值的对比，可以看到在温度较低时，ANN 模型和 C4+ 模型的计算结果基本重合，与实验值吻合良好。而随着温度的升高，ANN 模型的粘度计算值与实验值的偏差开始增大，而 C4+ 模型则始终与实验值一致，这进一步说明了高温修正的必要性与有效性。



(a) 3 MPa

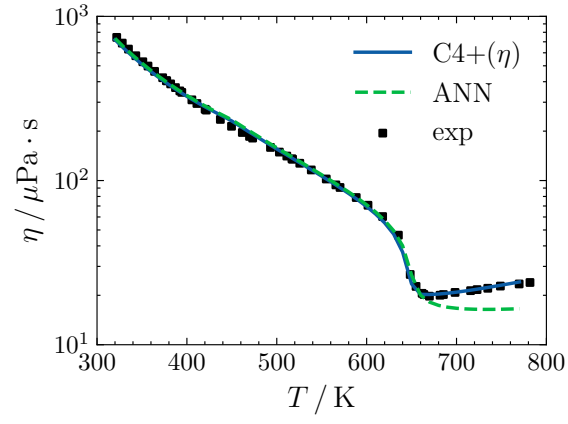


(b) 4 MPa

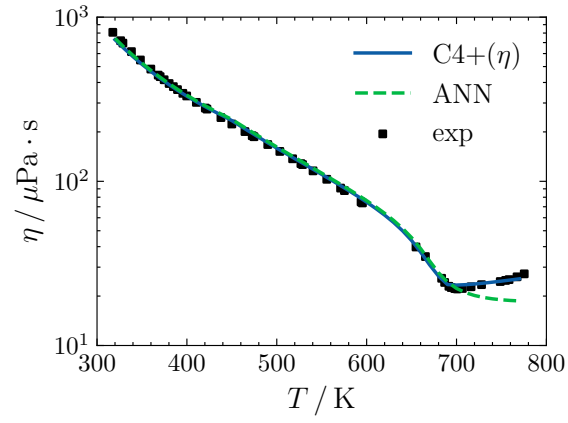


(c) 5 MPa

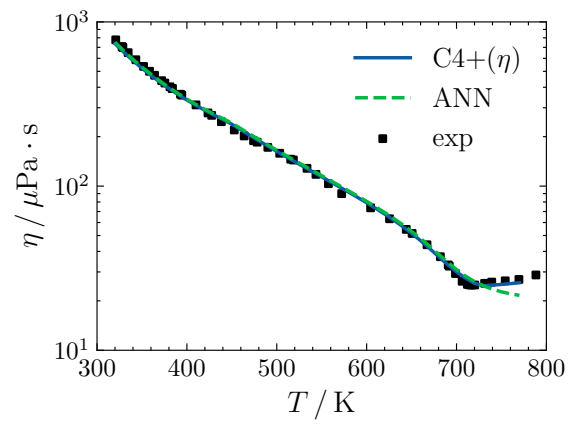
图 3.10 不同压力下密度 C4+ 模型以及 ANN 模型计算结果与实验值对比



(a) 3 MPa



(b) 4 MPa



(c) 5 MPa

图 3.11 不同压力下粘度 C4+ 模型以及 ANN 模型计算结果与实验值对比

表 3.7 粘度模型预测结果

Species	ANN				C4+
	3 MPa	4 MPa	5 MPa	Average	
n-decane	0.6814	0.5865	0.5190	0.5957	0.6320
n-dodecane	0.1928	0.1841	0.1875	0.1881	0.1520
methycyclohexane	0.1194	0.2239	0.2883	0.2106	0.2160
n-butylbenzene	0.0064	0.0055	0.0052	0.0056	0

3.5.3 定压比热容

表3.8为采用 GA 和 ANN 方法构建的定压比热容替代模型。在两模型中正丁苯的摩尔分数均变为 0，而在 GA 模型中，正癸烷的摩尔分数同样占据最高比例。但值得注意的是，ANN 模型中个压力下得到的摩尔分数结果相差非常大，这是由于实际航空煤油的比热容受到的外界影响很大，与模型计算值存在很大差别，此时训练集和预测集的分布有很大不同，导致 ANN 预测失效。

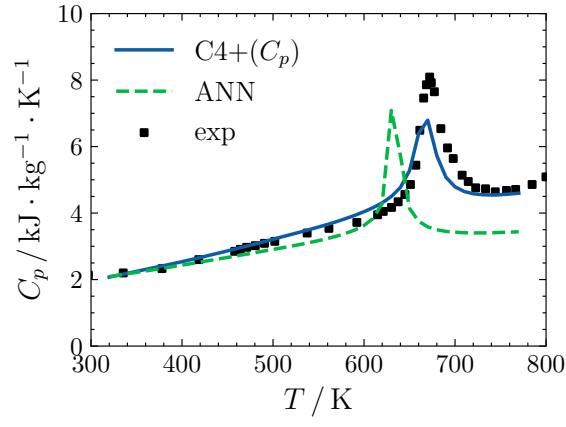
表 3.8 定压比热容模型预测结果

Species	ANN				C4+
	3 MPa	4 MPa	5 MPa	Average	
n-decane	0.0263	0.4717	0.5206	0.3396	0.6850
n-dodecane	0.6048	0.0134	0.0003	0.2071	0.2913
methycyclohexane	0.3687	0.5149	0.4702	0.4533	0.0237
n-butylbenzene	0	0	0	0	0

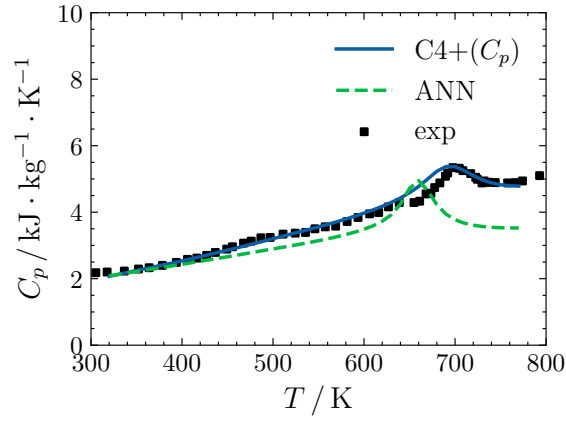
图3.12为下各模型的定压比热容计算值与实验值的对比，由于自氧化等原因使得模型计算比热容始终低于实际比热容，而用于训练 ANN 的训练集是理想情况下的比热容计算值，ANN 构建的替代模型无法很好地处理预测集与训练集差异较大的问题，因此所构建的模型无法准确预测拟临界温度，计算值与实验值的差异较大。

3.5.4 热导率

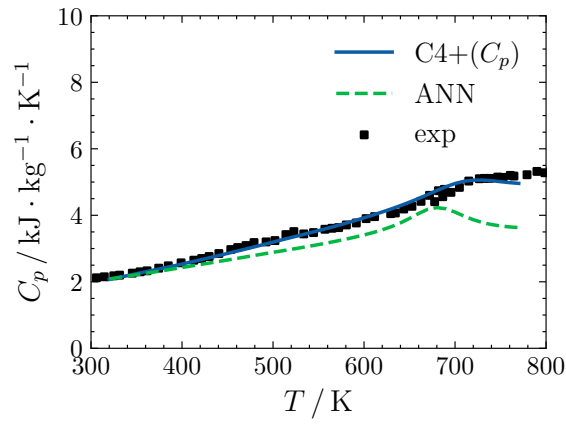
由于目前只有较低温度处的 RP-3 航空煤油的热导率实验数据，因此用于输入和训练 ANN 的实验数据也只采用 $T < 500\text{ K}$ 的热导率数值。表3.9为 ANN 方法构建的热导率替代模型与 C4+ 替代模型的对比。可以看到 C4+ 模型与 ANN 模型相



(a) 3 MPa



(b) 4 MPa



(c) 5 MPa

图 3.12 不同压力下定压比热容 C4+ 模型以及 ANN 模型计算结果与实验值对比

差很大，这也是由于实验数据过少，自由度过大所导致的。

表 3.9 热导率模型预测结果

Species	ANN				C4+
	3 MPa	4 MPa	5 MPa	Average	
n-decane	0.1174	0.1080	0.1229	0.1161	0.1430
n-dodecane	0.0508	0.0463	0.0579	0.0517	0
methycyclohexane	0.5651	0.5680	0.6437	0.5923	0
n-butylbenzene	0.2667	0.2778	0.1754	0.2400	0.8570

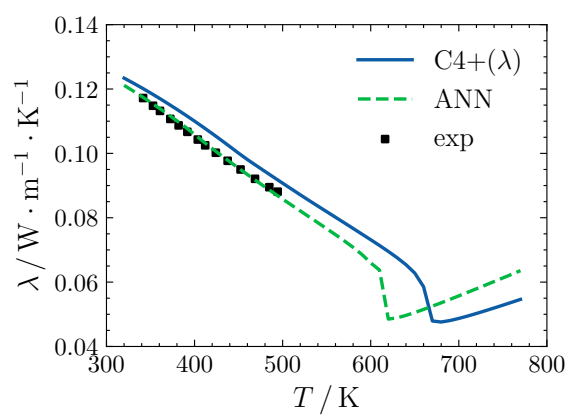
图3.13为不同超临界压力下 ANN 模型和 C4+ 模型热导率的计算结果与实验值的对比。可以看到虽然 ANN 模型的计算结果与实验值更加接近，但由于 ANN 的训练过程较为固定，难以像遗传算法一样对模型预测的假临界温度进行限制，因此 ANN 模型无法准确地预测 RP-3 航空煤油的拟临界点的位置。这说明针对在实际航空煤油的替代模型构建过程中，基于遗传算法的优化方法具有更高的灵活性。

3.6 本章小节

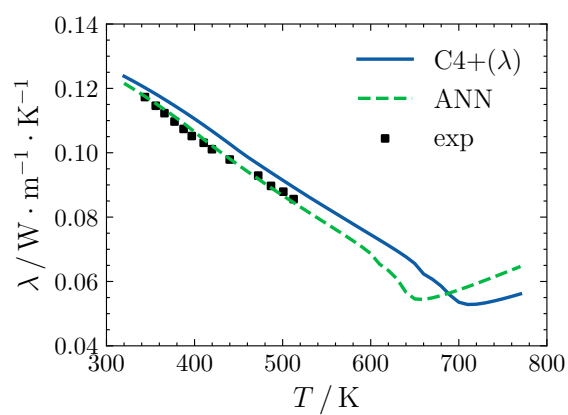
提出了基于人工神经网络的热物性模型构建方法，用三组分替代模型、十组分替代模型、以及 RP-3 航空煤油热物性的实验数据对所提方法进行了验证，同时与第二章中所提出的 C4+ 替代模型进行了对比。结果表明所选定的四个组分可以对三组分替代模型和十组分替代模型作出很好的近似，是构建替代模型较好的一个组合。

对于实际航空煤油，针对密度和粘度，两种方法均能构建高精度的替代模型；对于定压比热容，遗传算法能够构建更优的模型，神经网络由于泛化能力较差，其构建模型的预测精度反而不如原始模型；针对热导率，只采用 $T < 500\text{ K}$ 的实验数据进行了模型构建，其中遗传算法可以通过约束适应度函数，使得模型在提高精度的同时仍能准确预测拟临界温度，而神经网络则较难对其训练过程进行控制。

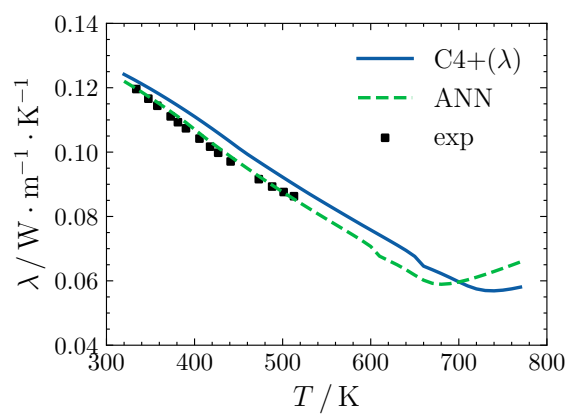
总体而言，基于遗传算法的模型构建方法更加稳定、灵活，更适合用于实际航空煤油热物性替代模型的构建；而基于神经网络的模型构建方法的鲁棒性较差，但模型构建速度要比遗传算法快几个数量级，可以适用于参数化快速生成大量模型，以研究替代模型的影响因素等。



(a) 3 MPa



(b) 4 MPa



(c) 5 MPa

图 3.13 不同压力下热导率 C4+ 模型以及 ANN 模型计算结果与实验值对比

第 4 章 煤油热物性的分子动力学模拟

本章采用分子动力学模拟对亚超临界状态下航空煤油的热物性展开了研究。首先介绍分子动力学的一般原理以及用于输运性质计算的 Green-Kubo 方法。之后以正癸烷作为参考对象，比较了不同分子力场模拟密度和粘度的准确程度。基于所得到的最优分子力场，对本文第二章所优化得到的 RP-3 的密度和粘度替代模型进行了模拟，并与基于广义对应态法则得到的计算结果进行了对比。

4.1 分子动力学模拟

4.1.1 基本原理

分子动力学模拟是一种基于计算各原子之间的受力求解运动方程，以获得体系在相空间中的运动轨迹，进而按照统计力学的原理即统计系统宏观特性的一种模拟方法。图4.1展示了一次分子模拟的主要流程^[57]。

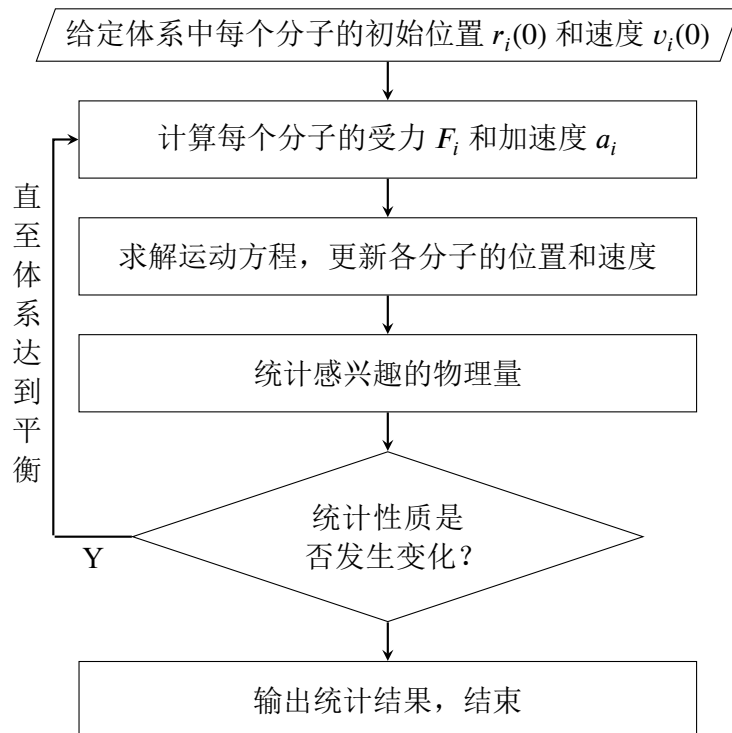


图 4.1 分子动力学模拟流程图

4.1.2 势能函数

势能函数是用来描述分子或原子之间相互作用能量和位置之间的关系的数学表达式，基于势能函数的导数，可以求得所受到的合力。以两体作用势为例，若定义两个原子之间的距离为 r_{ij} ，则粒子 j 作用在粒子 i 上的合力及 x 方向的分力分别为：

$$\begin{aligned} F(r_{ij}) &= -\frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}}, \\ F_x(r_{ij}) &= -\frac{\partial U(r_{ij})}{\partial x} = -\frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{\partial r_{ij}}{\partial x} = \frac{(x_i - x_j)}{r_{ij}} \frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}}, \end{aligned} \quad (4-1)$$

y 分量和 z 分量有类似的表达式。在计算得到受力之后，即可计算下一步各粒子的位置和速度。

一个复杂的分子体系，其间的相互作用非常复杂，包括范德华力、键结作用能、静电相互作用等等。一般而言，一个体系中包含的势能大体可以分为以下几个部分：^[58]

$$U = U_{nb} + U_b + U_\theta + U_\phi + U_\chi + U_{cl} \quad (4-2)$$

其中等式右边分别为范德华力（非键结势能）、键结势能、键角弯曲势能、二面角扭曲势能、离平面振动势能以及库伦相互作用势能。分子力场即是针对某些体系，给出这些相互作用势能的一般函数表达式；同时采用拟合实验数据等方式，确定表达式中具体的某些参数。

基于所研究体系的特点的不同，为了简化处理，不同分子力场可能略去了不同的势能项，而对所研究体系比较关键的势能又用较复杂的函数形式描述。同时，各个力场中参数的拟合方法也不尽相同，传统分子力场可能通过拟合某些物性的实验数据获得，而比如 `compass` 力场则直接对 DFT 计算数据进行拟合。各个分子力场均有其适用范围及优缺点，模拟结果的准确性很大程度上依赖于所选取的分子力场。尤其是针对亚超临界状态下碳氢混合物的分子动力学模拟，部分分子力场即使是针对有机物开发的，而由于力场中的参数是用常温常压下的实验数据拟合的，模拟的准确性也会大幅降低。因此，对于亚超临界航空煤油替代模型的热物性模拟，有必要对不同分子力场下模拟的准确性做出全面的评估。

4.1.3 积分算法

牛顿运动方程的积分是分子动力学模拟中最耗时的一部分，由于分子动力学模拟往往需要数十万甚至上百万步才能让体系达到平衡，因此必须采用稳定且精

度较高的数值算法对运动方程进行积分。速度形式的 Verlet 算法^[59]，因其具有二阶精度，且数值稳定性较好，且可以得到同一时间步上的位置与速度，因此被广泛采用：

1. 计算第 $n + 1/2$ 步的速度： $v_i^{n+1/2} = v_i^n + \frac{1}{2} \frac{dt F_i^n}{m_i}$
2. 计算第 $n + 1$ 步的位置： $r_i^{n+1} = r_i^n + v_i^{n+1/2} dt$
3. 计算第 $n + 1$ 步的速度： $v_i^{n+1} = v_i^{n+1/2} + \frac{1}{2} \frac{dt F_i^{n+1}}{m_i}$

4.1.4 控温控压算法

自然的分子动力学模拟按照牛顿运动方程进行积分，其等价于在 NVE 系综中进行模拟，即体系的总粒子数、体积和总能量保持不变。然而在许多实际情况下，常常需要在指定温度和压力下进行模拟，相当于系统出于 NPT 系综中，体系的原子数 N ，压力 P 及体系温度 T 保持恒定，这时候需要对原有的模拟进行相应的调整。在各种控温控压算法中，Nose-Hoover 方法^[60]通过引入阻尼系数，扩展体系的拉格朗日方程来实现在 NVT 或 NPT 系综中的模拟。该方法被广泛应用于各种非 NVE 系综的模拟，在大多数问题中被证明是一种有效、稳定的方法。

4.1.5 输运性质模拟

输运性质的分子动力学模拟一般可以分为非平衡分子动力学模拟 (NEMD) 和平衡分子动力学模拟 (EMD) 两种。NEMD 方法通过施加速度梯度或者温度梯度，统计体系稳定后的剪切力或热流，即可计算得出所研究体系的粘度以及热导率。由于实际的分子动力学模拟只能对较小体系展开研究，因此相比于宏观的真实状态，NEMD 方法必须施加极大的速度或者温度梯度，这往往存在更明显的尺寸效应。而 EMD 模拟方法基于线性响应理论，通过统计系统动力学变量在平衡态附近的涨落来计算输运性质，尺寸效应较小。Green-Kubo 理论指出输运系数可表示为相应物理量的自相关函数的积分。基于 Green-Kubo 公式，粘度可用如下的公式来计算：^[61]

$$\eta = \frac{V}{3k_B T} \int_0^\infty \sum_\alpha \sum_\beta \langle P_{\alpha\beta}(0) P_{\alpha\beta}(t) \rangle dt, \quad (4-3)$$

其中 η 是剪切粘度， V 和 T 分别代表体系的体积和温度。 k_B 为玻尔兹曼常数 $1.3806504 \times 10^{-23} \text{ J/K}$ 。 α, β 指代 x, y, z 方向。 $P_{\alpha\beta}(t)$ 为 t 时刻 $\alpha\beta$ 方向的压力

张量，其可用维里定理计算：

$$P_{\alpha,\beta}(t) = \frac{1}{V} \left[\sum_{i=1}^N m_i v_{i\alpha} v_{i\beta} + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N r_{ij\alpha} f_{ij\alpha} \right], \quad (4-4)$$

其中 N 为系统中模拟的分子数， m_i 为分子 i 的质量， $v_{i\alpha}$ 和 $v_{i\beta}$ 分别是分子 i 在 α 和 β 方向的速度分量， $r_{ij\alpha}$ 与 $f_{ij\alpha}$ 分别指代分子 i 与分子 j 之间在 α 方向的位移和作用力。在本文中，体系的粘度采用 EMD 模拟以及 Green-Kubo 公式计算。

4.2 煤油热物性的分子模拟

分子动力学模拟已被证明是研究亚超临界流体物性的有效方法。Liu et al.^[62], Yang et al.^[63,63,64] 等比较了 $\text{H}_2\text{-CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ 三元混合物的在超临界压力下的密度、粘度、热导率以及定压比热容的最佳力场，并采用 EMD 模拟对各热物性进行了模拟计算。其研究表明在选取了合适的分子力场之后，无论是热力学性质还是输运性质，模拟结果与实验结果均具有良好的一致性；Chen et al.^[65] 采用 opls-aa 力场和 EMD 模拟研究了超临界状态下甲烷、正己烷以及正十二烷的粘度，其模拟结果表明在该力场下，粘度模拟值和实验值值的最大相对偏差甚至超过了 100%；Chen et al.^[66] 采用 oplss-aa 力场和 EMD 模拟分析了不同超临界压力下正十二烷的粘度，其发现在压力较低时，模拟结果和实验结果的相对误差超过了 75%。上述的研究表明分子力场对于物性模拟结果有着至关重要的影响。然而目前对于超临界状态下烷烃物性的分子模拟，主要采取的力场仍然是 opls-aa 力场，尚缺乏针对不同分子力场之间系统的比较。此外，对于碳氢化合物的分子动力学模拟一般集中在单组份纯净物上，如正癸烷、正十二烷等，对于碳氢混合物的模拟的讨论尚不充分。

本章比较了三种典型分子力场的模拟表现，包括 trappe 力场^[67]、l-opls-aa 力场^[68] 以及 compass 力场^[69]。其中 trappe 力场是一种典型的粗粒化分子力场，在 trappe 力场中 CH_3 ， CH_2 都被视作一个假想的原子，因此其所需的计算量较小，但适用范围也相应较低；opls-aa 力场是一种典型的全原子分子力场，很多有机溶剂体系，都采用了该力场进行模拟，其也被广泛地用于烷烃的分子模拟中，l-opls-aa 力场是在 opls-aa 力场的基础上针对长链烷烃分子改进的分子力场，其对长链烷烃的模拟效果更好，准确性更高；compass 力场的势能函数相比于其他分子力场更为复杂，力场参数通过拟合第一性原理计算数据得到，其所需计算量更大。

4.2.1 模型构建流程

本文的模拟对象为包括长链烷烃、环烷烃及苯类物质的混合物。构建模拟体系的数据结构文件时主要流程如下：

1. 通过 gassview^[70] 绘制烷烃的分子结构，生成基本分子结构的 pdb 文件。
图4.2为所构建的正癸烷、正十二烷、甲基环己烷以及正丁苯的分子，其中正定苯中苯环内各碳原子以介于单双键之间的方式相连接，图中只是示意其连接结构，键结的具体信息由力场参数给定计算。由于 trappe 力场是粗粒化分子力场，无法对碳原子和氢原子进行识别，因此为其单独生成结构文件。
2. 通过 packmol^[71] 导入分子结构的 pdb 文件，随机进行空间排布，生成系统结构的 pdb 文件。系统 pdb 文件中包括系统中各原子的类型以及位置信息。
图4.3为未经修正的 C4+ 密度模型的模拟前系统内各分子的分布情况。在进行混合物的模拟时，所模拟系统的总分子数选取为 1000 个，其中各组分分子数目按照其摩尔分数比例选取。以密度 C4+ 模型为例，由于其由 62.2% 正癸烷、11% 正十二烷以及 26.8% 正定苯构成，因此模拟系统中共包含 622 个正癸烷分子，110 个正十二烷分子以及 268 个正定苯分子。
3. 在获得了系统结构的数据文件后，采用 moltemplate^[72] 对各原子分配其所需的力场参数，根据所选择力场的不同不同，分配的力场参数的形式与数值也有所不同。moltemplate 是一个开源的 lammps^[73] 前处理程序，既可以对数据结构文件中的分子进行复制、旋转等变化操作，也可以按照力场形式自定义势函数文件，最终导出成 lammps 所接受的输入文件。
4. 在力场参数、系统结构文件都设置完成后，采用 lammps 对体系进行分子动力学模拟。lammps 是一开源的大规模并行化分子动力学模拟软件，其可以对各种系综、相态的体系进行模拟，支持多种势函数，同时使用者可以根据需求扩展相应的输入接口，目前在分子模拟领域被广泛使用^[62]。

4.2.2 正癸烷的密度模拟

4.2.2.1 模拟细节

为减小尺寸影响，模拟中共采用 1000 个正癸烷分子。在指定温度下，体系先在 NVT 系综中模拟 50 ps，之后在 NPT 系综中模拟 50 ps，使体系达到平衡状态，之后继续模拟 50 ps 进行采样，最终将采样的 50 ps 内的密度平均结果作为模拟结果。由于体系离临界点较近，扰动较大，因此收敛较为困难。为保证体系能够达到平衡，在指定压力下，拟临界温度之前的模拟时间步长选取为 0.4 fs，拟临界温度之后的

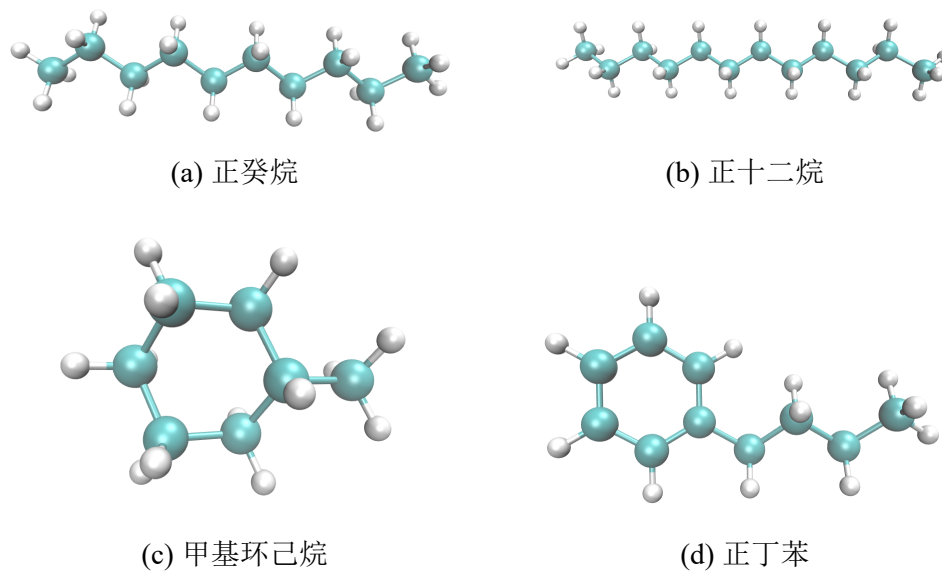


图 4.2 分子结构示意图

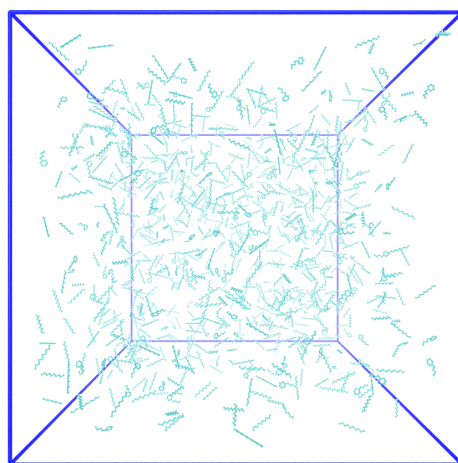


图 4.3 正癸烷、正十二烷、以及正定苯构成的模拟系统

模拟时间步长选取为0.1 fs

4.2.2.2 结果与讨论

图4.4为在3 MPa下采用不同分子力场得到的不同温度处密度模拟结果与实验值及 **supertrapp** 计算结果的对比。从结果可以看到，各个分子力场的模拟结果在300 K附近与实验值均较为接近，而随着温度的升高，**trappe** 力场和 **l-opls-aa** 力场的模拟结果与实验值的偏差逐渐增大，在拟临界温度附近的偏差尤为明显，**trappe** 力场和 **l-opls-aa** 力场无法捕捉到密度在拟临界点附近的剧烈变化。而随着温度的进一步升高，模拟结果又重新与实验值接近。而 **compass** 力场的模拟结果和 **supertrapp** 的计算结果与实验值始终吻合良好。上述结果表明 **compass** 力场和广义对应态法则均是模拟超临界烷烃密度有效的手段，而传统分子力场则不能胜任。

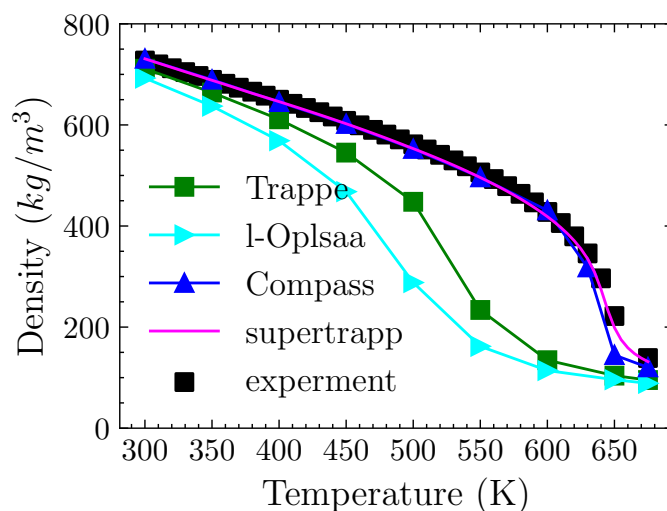


图 4.4 3 MPa下采用不同力场得到的正癸烷密度模拟结果

4.2.3 正癸烷的粘度模拟

4.2.3.1 模拟流程及细节

仍然采用由 1000 个分子构成的体系进行模拟。在指定温度和压力下，体系先在 NVT 系综中模拟50 ps，之后在 NPT 系综中模拟50 ps，使体系达到平衡状态。由于 Green-Kubo 公式需要提取动力学信息，因此为使体系按照自然的牛顿运动定律演化，将体系调整到 NVE 系综中弛豫50 ps，之后继续在 NVE 系综中模拟120 ps，计算压力张量的自相关函数，利用 Green-Kubo 公式计算粘度。拟临界温度之前的模拟时间步长选取为0.4 fs，拟临界温度之后的步长选取为0.1 fs。

在用 EMD 方法和 Green-Kubo 公式对输运参数进行模拟时，由于不可能真正

计算自相关函数到无穷远时间的积分，因此必须选取一个合理的自相关时间，对积分上限做截断。自相关时间过长，会显著增加所需的计算量；自相关时间过短，自相关函数还没有收敛到 0，会使得模拟结果误差较大。图4.5为采用 **compass** 力场模拟的300 K,3 MPa下正癸烷压力张量的归一化自相关函数随相关时间的变化，在12 000 fs左右自相关函数基本收敛到 0，考虑到不同的模拟下自相关函数可能会有所差别，最终选取自相关函数为15 000 fs。

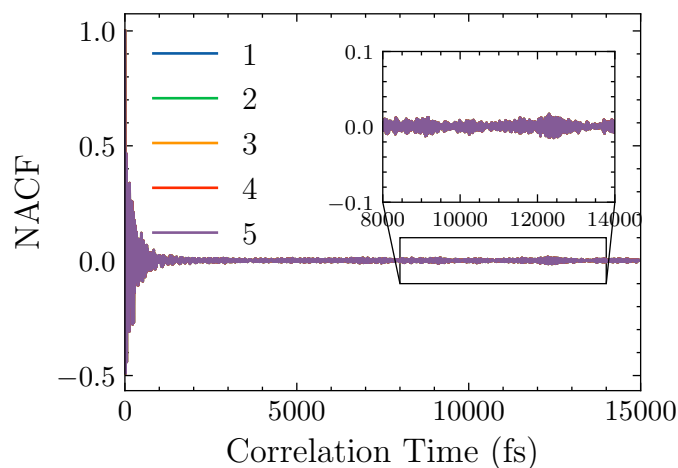


图 4.5 **compass** 力场模拟300 K, 3 MPa下正癸烷压力张量的自相关函数

由于不同独立运行的 EMD 模拟的不确定性，因此必须采用不同的初始速度进行多次模拟，将多次模拟的结果取平均值后，作为最终的模拟结果。图4.6为正癸烷在300 K, 3 MPa下采用 **compass** 力场的五次独立模拟的粘度计算结果。从结果可以看到不同独立模拟结果之间差异较大，但是其平均值基本稳定到一固定数值。

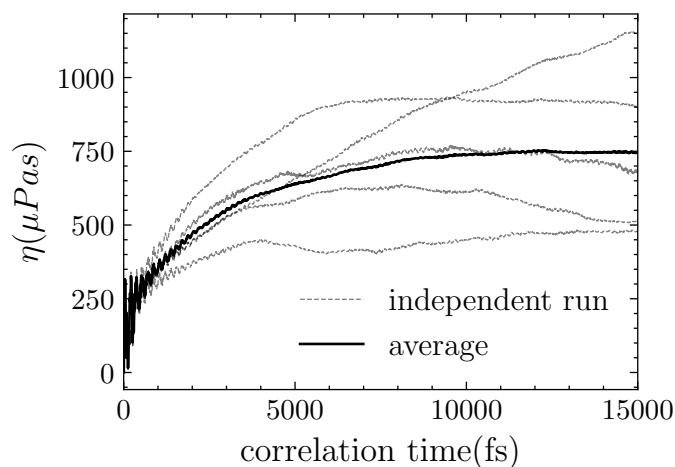


图 4.6 五次独立运行下 **compass** 力场模拟300 K, 3 MPa下正癸烷的粘度。

图4.6为3 MPa下采用不同力场得到的正癸烷粘度模拟结果与 supertrapp 计算结果和实验值的对比。可以看到即使在温度较低的情况下，采用 trappe 力场和 l-opls-aa 力场得到的模拟结果和实验值差异也比较大，这说明相对于热力学性质，输运性质模拟的准确性受到分子力场的影响更大。随着温度的升高，采用 trappe 力场和 l-opls-aa 力场得到的模拟结果和实验值之间的相对偏差持续增大，且相对误差在跨临界区域尤为明显。但采用 compass 力场得到的模拟结果和 supertrapp 计算结果和实验值吻合程度始终较好，这说明 compass 力场和广义对应态法则方法均可较好地用于亚超临界状态下烷烃的输运性质模拟。

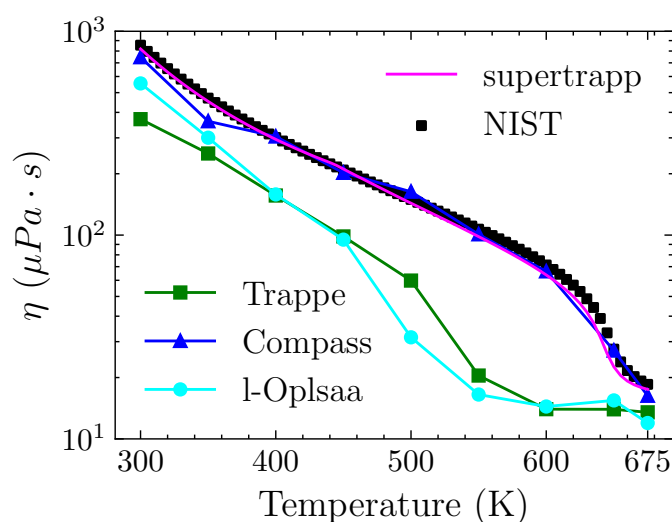


图 4.7 3 MPa下采用不同力场得到的正癸烷粘度模拟结果

4.3 航空煤油替代模型的物性模拟

4.3.1 密度模拟

图4.8为在3 MPa下采用 compass 力场在不同温度处的对优化后的 C4+ 密度模型的模拟结果与实验值及 supertrapp 计算结果的对比。从结果可以看到，模拟结果与 supertrapp 计算结果基本完全一致，且在690 K前与实验值吻合非常良好，这既说明了所构建模型的可靠性，也说明了基于 compass 力场的分子动力学模拟以及广义对应态法则方法，均可较好地预测航空煤油在亚超临界状态下的密度变化情况。在690 K后，模拟结果和 supertrapp 计算结果仍然基本一致，但均高于实验结果，且偏差随着温度的增加而增大。这说明计算结果在温度较高时和实验值的偏差并不是由计算方法引起的，航空煤油很可能已经发生了裂解。

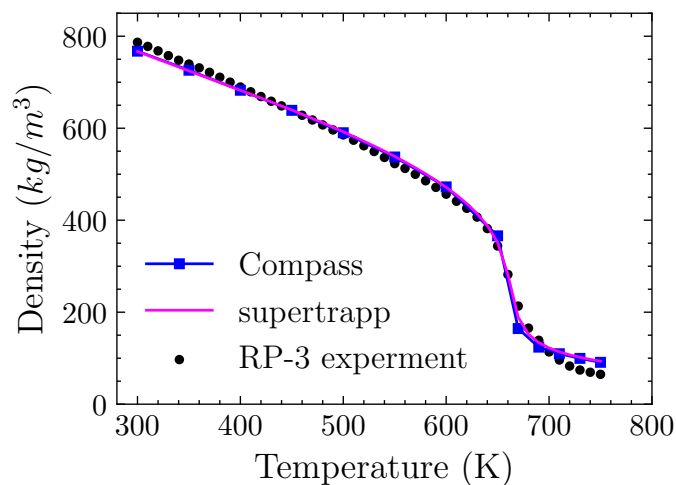


图 4.8 优化后密度模型的 compass 力场模拟结果与 supertrapp 计算结果及实验值对比

4.3.2 粘度模拟

图4.9为在3 MPa下采用 compass 力场在不同温度处对优化后的 C4+ 粘度模型的模拟结果与 supertrapp 计算结果及实验值的对比。在模拟的温度范围内，模拟结果和 supertrapp 计算的结果基本完全一致，这说明了两种方法均适可用于碳氢混合物在亚超临界状态下输运性质的计算，也说明了所构建的粘度模型可以较好地预测 RP-3 航空煤油在超临界压力下的粘度变化。在拟临界温度之后，随着温度的升高，粘度的计算结果与实验值的偏差逐渐增大，这说明在温度较高时 RP-3 航空煤油很可能已经发生了裂解，必须采用修正方法对模型计算值进行相应调整。

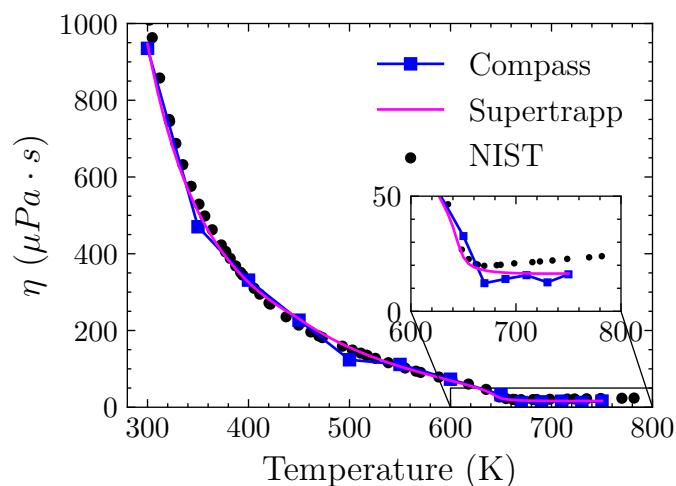


图 4.9 优化后粘度模型的 compass 力场模拟结果及 supertrapp 计算结果与实验值对比

4.4 本章小节

1. 采用三种典型分子力场：**l-opls-aa**、**trappe** 和 **compass** 力场，模拟了正癸烷在超临界压力下的密度和粘度，并将模拟结果与广义对应态法则计算结果和实验值进行了对比。结果表明采用 **compass** 力场的模拟结果与广义对应态法则计算结果和实验值基本一致，而 **l-oplass** 和 **trappe** 力场的模拟结果与实验值差异较大，无法用于模拟超临界压力下烷烃的热物性变化。
2. 采用 **compass** 力场对第二章所优化的密度和粘度模型进行了模拟，结果表明采用 **compass** 力场的模拟结果和广义对应态法则计算结果符合程度十分良好，证明了两种方法均可较好地用于超临界状态下烃类混合物的热物性计算，同时说明了所构建模型的可靠性。然而在温度较高时，计算结果和实验结果的差异逐渐增大，这进一步说明了 **RP-3** 航空煤油在温度较高时很可能已经发生了裂解，其热物性变化偏离理想情况。

第 5 章 总结与展望

5.1 本文研究工作总结

本文以国产 RP-3 航空煤油为研究对象,应用广义对应态法则、人工神经网络、分子动力学模拟以及遗传算法等手段,对其在亚超临界状态下的热物性以及替代模型的构建方法展开了研究。本文的主要研究结论如下:

1. 基于遗传算法和广义对应态法则,提出了针对航空煤油单一热物性的替代模型构建方法。同时考虑到裂解和自氧化过程对物性的影响,进一步提出了替代模型的修正方法,构建了适用于计算 RP-3 航空煤油在亚超临界状态下的热物性的 C4+ 模型。结果表明本文所构建的模型在已有的替代模型中精度最高,各热物性计算值与实验值的平均相对偏差小于 5%。基于 C4+ 替代模型模型,本文计算了 RP-3 航空煤油的热物性数据库,并开发了热物性查询软件 RP-3thermalor。
2. 提出了基于人工神经网络的热物性模型构建方法,用三组分替代模型、十组分替代模型、以及 RP-3 航空煤油热物性的实验数据对所提方法进行了验证,同时与第二章中基于遗传算法所提出的 C4+ 替代模型进行了对比。结果表明所选定的四个组分可以对三组分替代模型和十组分替代模型作出很好的近似,是构建替代模型较好的一个组合。对于实际航空煤油,针对密度和粘度,两种方法均能构建高精度的替代模型;对于定压比热容,遗传算法能够构建更优的模型,神经网络由于泛化能力较差,其构建模型的预测精度反而不如原始模型;针对热导率,只采用 $T < 500\text{ K}$ 的实验数据进行了模型构建,其中遗传算法可以通过约束适应度函数,使得模型在提高精度的同时仍能准确预测拟临界温度,而神经网络则较难对其训练过程进行控制。总体而言,基于遗传算法的模型构建方法更加稳定、灵活,更适合用于实际航空煤油热物性替代模型的构建;而基于神经网络的模型构建方法的鲁棒性较差,但模型构建速度要比遗传算法快几个数量级,可以适用于参数化快速生成大量模型,以研究替代模型的影响因素等。
3. 采用分子动力学模拟对航空煤油的密度和粘度进行了研究。比较了 trappe, l-oplsaa, compass 分子力场在模拟亚超临界烷烃热物性上的准确性,结果表明 compass 力场可以较为准确地预测超临界烷烃密度和粘度的变化,而其他

力场模拟结果的相对误差较大；采用 compass 力场对所优化的密度模型和粘度模型进行了模拟，模拟结果和广义对应态法则基本一致。在温度较低时，计算结果与实验值吻合程度良好；在温度较高时，计算结果和实验值的偏差开始增大。结果一方面表明了本文中所采用的两种热物性计算方法的有效性，另一方面也说明了本文所构建的热物性模型的可靠性及模型高温修正的必要性。

5.2 工作的思考与展望

本文评估替代模型的标准是模型计算值与航空煤油热物性的实验值之间的相对偏差。一方面由于 RP-3 航空煤油在亚超临界状态下热物性的实验测量值仍相对较少，因此实验值的不确定性也相对较大。在有了 RP-3 航空煤油热物性实验值更多报道后，需要采用更多的实验数据对替代模型进行重新构建，同时更新所生成的数据库。另一方面，在航空煤油热物性的计算中，可能引起的误差来源有很多，包括广义对应态法则的计算误差、不同生产条件下 RP-3 航空煤油的成分偏差、实验测量的误差，替代模型中不同的组分和摩尔分数也会显著影响热物性的计算结果。本文并没有对这些误差逐一进行考虑，而是将所有的误差都考虑进替代模型中，通过构建计算值与实验值偏差最小的替代模型，来获得与实验值最为接近的热物性数据库。在未来有必要对每一部分的误差情况仔细评估和分析。

另一方面，航空煤油是一种极其复杂的混合物，因此构建合理的简化替代物模型，是对其进行研究的基础和关键。但正如 Yu et al.^[74]所指出的，“... 显而易见，替代燃料的构建仍然是高度经验性、工程性的，在选取替代燃料组分以及匹配参数上仍然带有高度的主观随机性。”实际上无论是匹配碳氢比、摩尔质量还是官能团数目，以至于本文中直接匹配不同温度、压力处航空煤油的热物性，这些都只是唯象地提出替代模型的构建方法。在进行比较时，也只能用模型计算值和实验值的匹配程度来近似地评估各方法的适用性，并没有一套通用的理论来指导替代模型的构建，或是直接评估替代模型与实际燃料之间的关系。有关替代燃料理论的构建和总结，值得未来进一步地研究与讨论。

插图索引

图 1.1	再生冷却工作过程示意图 ^[14]	2
图 1.2	水的物质状态随温度和压力的变化情况 ^[17]	3
图 1.3	20、30、40、50、60MPa下水的各热物性随温度的变化.....	4
图 1.4	3 MPa下航空煤油 RP-3 各热物性实验测量值随温度的变化 ^[20-22,24]	5
图 2.1	遗传算法流程图	12
图 2.2	确定性拥挤算法示意图 ^[50]	13
图 2.3	替代模型优化流程示意图	14
图 2.4	C4+ 模型构建流程示意图	15
图 2.5	3 MPa下 C4 模型和 C4+ 密度模型计算值与 RP-3 航空煤油密度实验值对比	16
图 2.6	C4 模型和 C4+ 模型在3 MPa下粘度计算值和实验值对比.....	18
图 2.7	3.02 MPa下 C4 模型和 C4+ 模型比热容计算值和实验值的对比	19
图 2.8	3 MPa下 C4 模型与 C4+ 模型热导率计算值和 RP-3 实验值对比	21
图 2.9	RP-3 航空煤油热物性查询软件界面	22
图 2.10	输入查询温度.....	23
图 2.11	输入非法温度后的提示.....	23
图 2.12	输入查询压力.....	23
图 2.13	保存输出文件.....	24
图 2.14	输出结果（3.5 MPa下 RP-3 航空煤油的密度变化）	24
图 3.1	典型的人工神经元结构示意图 ^[53]	26
图 3.2	阶跃函数和 sigmoid 函数	27
图 3.3	典型的神经网络结构示意图	28
图 3.4	基于神经网络的替代模型构建流程示意图	29
图 3.5	各模型训练过程中训练集误差与测试集误差随迭代次数的变化情况	30
图 3.6	不同压力下取平均后的四组分模型与三组分模型密度计算结果的对比 ..	32
图 3.7	不同压力下 ANN 预测的四组分替代模型与三组分混合物粘度计算结果的对比	34

图 3.8	不同压力下 ANN 预测的四组分替代模型与十组分替代模型密度计算结果的对比	35
图 3.9	不同压力下 ANN 预测的四组分替代模型与十组分混合物粘度计算结果的对比	37
图 3.10	不同压力下密度 C4+ 模型以及 ANN 模型计算结果与实验值对比	39
图 3.11	不同压力下粘度 C4+ 模型以及 ANN 模型计算结果与实验值对比	40
图 3.12	不同压力下定压比热容 C4+ 模型以及 ANN 模型计算结果与实验值对比	42
图 3.13	不同压力下热导率 C4+ 模型以及 ANN 模型计算结果与实验值对比	44
图 4.1	分子动力学模拟流程图	45
图 4.2	分子结构示意图	49
图 4.3	正癸烷、正十二烷、以及正定苯构成的模拟系统	50
图 4.4	3 MPa 下采用不同力场得到的正癸烷密度模拟结果	51
图 4.5	compass 力场模拟 300 K, 3 MPa 下正癸烷压力张量的自相关函数	52
图 4.6	五次独立运行下 compass 力场模拟 300 K, 3 MPa 下正癸烷的粘度。	52
图 4.7	3 MPa 下采用不同力场得到的正癸烷粘度模拟结果	53
图 4.8	优化后密度模型的 compass 力场模拟结果与 supertrapp 计算结果及实验值对比	54
图 4.9	优化后粘度模型的 compass 力场模拟结果及 supertrapp 计算结果与实验值对比	54

表格索引

表 1.1	不同替代模型各热物性的计算值与 RP-3 航空煤油实验值的平均相对偏差及最大偏差情况	7
表 2.1	C4 模型组分及摩尔分数	14
表 2.2	C4 模型与 C4+ 密度模型对比	16
表 2.3	不同超临界压力下 C4 模型与 C4+ 密度模型的计算值与实验值的最大相对偏差与平均相对偏差对比	17
表 2.4	C4 模型与 C4+ 粘度模型对比	17
表 2.5	不同超临界压力下 C4 模型与 C4+ 模型粘度计算值与实验值的最大相对偏差与平均相对偏差对比	18
表 2.6	C4 模型与 C4+ 比热容模型对比	19
表 2.7	不同超临界压力下 C4 模型与 C4+ 模型定压比热容的计算值与实验值的最大相对偏差与平均相对偏差对比	20
表 2.8	C4 模型与 C4+ 热导率模型对比	20
表 2.9	不同超临界压力下 C4 模型与 C4+ 模型热导率的计算值与实验值的最大相对偏差与平均相对偏差对比	21
表 2.10	C4 模型与 C4+ 模型对比	25
表 3.1	三组分和十组分替代模型组分及摩尔分数	31
表 3.2	基于三组分模型密度的 ANN 预测结果	31
表 3.3	基于三组分模型粘度的 ANN 预测结果	33
表 3.4	基于十组分模型密度的 ANN 预测结果	36
表 3.5	基于十组分模型粘度的 ANN 预测结果	36
表 3.6	密度模型预测结果	38
表 3.7	粘度模型预测结果	41
表 3.8	定压比热容模型预测结果	41
表 3.9	热导率模型预测结果	43

参考文献

- [1] 解发瑜, 李刚, 徐忠昌. 高超声速飞行器概念及发展动态 [J]. 飞航导弹, 2004, 000(005): 27-31.
- [2] 张丽静, 刘东升, 于存贵, 等. 高超声速飞行器 [J]. 航空兵器, 2010(02): 13-16.
- [3] 张灿, 胡冬冬, 叶蕾, 等. 2017 年国外高超声速飞行器技术发展综述 [J]. 战术导弹技术, 2018.
- [4] 马继承. 碳氢燃料再生冷却超燃冲压发动机控制方法研究 [D]. 哈尔滨工业大学, 2020.
- [5] KOSAKA K, KUWAHARA T, OKAMOTO H, et al. Application of carbon-carbon composite to scramjet engines [J]. Proceedings of ISABE, 1989, 1: 359-364.
- [6] 邢亚娟, 孙波, 高坤, 等. 航天飞行器热防护系统及防热材料研究现状 [J]. 宇航材料工艺, 2018, 48(4): 9-15.
- [7] 王辉. 超燃冲压发动机再生冷却通道内近临界压力区流动与传热特性研究 [D]. 国防科技大学, 2017.
- [8] DANG G X, ZHONG F Q, ZHANG Y J, et al. Numerical study of heat transfer deterioration of turbulent supercritical kerosene flow in heated circular tube [J/OL]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2015, 85: 1003-1011. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.02.052>.
- [9] ZHANG C B, XU G Q, GAO L, et al. Experimental investigation on heat transfer of a specific fuel (RP-3) flows through downward tubes at supercritical pressure [J/OL]. Journal of Supercritical Fluids, 2012, 72: 90-99. <http://dx.doi.org/10.1016/j.supflu.2012.07.011>.
- [10] ZHU J Q, TAO K H, TAO Z, et al. Heat transfer degradation of buoyancy involved convective RP-3 hydrocarbon fuel in vertical tubes with various diameters under supercritical pressure [J/OL]. Applied Thermal Engineering, 2019, 163(February): 114392. <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2019.114392>.
- [11] TAO Z, LI L W, ZHU J Q, et al. Numerical investigation on flow and heat transfer characteristics of supercritical RP-3 in inclined pipe [J/OL]. Chinese Journal of Aeronautics, 2019, 32(8): 1885-1894. <https://doi.org/10.1016/j.cja.2019.05.007>.
- [12] ZHU J Q, TAO Z, DENG H W, et al. Numerical investigation of heat transfer characteristics and flow resistance of kerosene RP-3 under supercritical pressure [J/OL]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2015, 91: 330-341. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.07.118>.

- [13] FENG Y, QIN J, ZHANG S L, et al. Modeling and analysis of heat and mass transfers of supercritical hydrocarbon fuel with pyrolysis in mini-channel [J/OL]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2015, 91: 520-531. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2015.07.095>.
- [14] 章思龙. 碳氢燃料超燃冲压发动机再生/膜复合冷却特性研究 [J]. 哈尔滨工业大学, 2016: 1-z.
- [15] ZHONG F Q, FAN X J, YU G, et al. Heat transfer of aviation kerosene at supercritical conditions [J/OL]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 2009, 23(3): 543-550. DOI: 10.2514/1.41619.
- [16] HENDRICKS R C, SIMONEAU R J, SMITH R V. Survey of heat transfer to near-critical fluids [M]//*Advances in Cryogenic Engineering*. Springer, 1995: 197-237.
- [17] PIORO I, MOKRY S, DRAPER S. Specifics of thermophysical properties and forced-convective heat transfer at critical and supercritical pressures [J/OL]. *Reviews in Chemical Engineering*, 2011, 27(3-4): 191-214. DOI: 10.1515/REVCE.2011.501.
- [18] 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.
- [19] ROAN M A, BOEHMAN A L. The effect of fuel composition and dissolved oxygen on deposit formation from potential JP-900 basestocks [J/OL]. *Energy and Fuels*, 2004, 18(3): 835-843. DOI: 10.1021/ef034050b.
- [20] DENG H W, ZHANG C B, XU G Q, et al. Density measurements of endothermic hydrocarbon fuel at sub- and supercritical conditions [J/OL]. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 2011, 56(6): 2980-2986. DOI: 10.1021/jc200258g.
- [21] 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/OL]. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 2012, 57(2): 358-365. DOI: 10.1021/jc200901y.
- [22] 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/OL]. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 2012, 57(2): 263-268. DOI: 10.1021/jc200523a.
- [23] GAO X, WEN X, ZHOU H, et al. Novel measurement of isobaric specific heat capacity for kerosene rp-3 at high temperature and high pressure [J]. *Thermochimica Acta*, 2016, 638: 113-119.
- [24] XU G Q, JIA Z X, WEN J, et al. Thermal-Conductivity Measurements of Aviation Kerosene RP-3 from (285 to 513) K at Sub- and Supercritical Pressures [J/OL]. *International Journal of Thermophysics*, 2015, 36(4): 620-632. DOI: 10.1007/s10765-015-1840-4.

- [25] 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.
- [26] PITZ W J, MUELLER C J. Recent progress in the development of diesel surrogate fuels [J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 2011, 37(3): 330-350.
- [27] LELE A D, ANAND K, NARAYANASWAMY K. Surrogates for biodiesel: review and challenges [J]. *Biofuels*, 2017: 177-199.
- [28] 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(07): 774-779.
- [29] 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(002): 187-192.
- [30] 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.
- [31] XU K K, MENG H. Analyses of surrogate models for calculating thermophysical properties of aviation kerosene RP-3 at supercritical pressures [J/OL]. *Science China Technological Sciences*, 2015, 58(3): 510-518. DOI: 10.1007/s11431-014-5752-5.
- [32] YU J, GOU X L. Comprehensive surrogate for emulating physical and kinetic properties of jet fuels [J/OL]. *Journal of Propulsion and Power*, 2018, 34(3): 679-689. DOI: 10.2514/1.B36766.
- [33] LIU J, HU E J, ZENG W, et al. A new surrogate fuel for emulating the physical and chemical properties of RP-3 kerosene [J/OL]. *Fuel*, 2020, 259(September 2019): 116210. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.116210>.
- [34] MAWID M A, PARK T W, SEKAR B, et al. DEVELOPMENT OF DETAILED CHEMICAL KINETIC MECHANISMS FOR IGNITION/OXIDATION OF JP-8/JET-A/JP-7 FUELS [J]. *Proceedings of ASME Turbo Expo*, 2003: 1-12.
- [35] LELAND T W, CHAPPELEAR P S. the Corresponding States Principle—a Review of Current Theory and Practice [J/OL]. *Industrial & Engineering Chemistry*, 1968, 60(7): 15-43. DOI: 10.1021/ie50703a005.
- [36] HUBER M L, ELY J F. A predictive extended corresponding states model for pure and mixed refrigerants including an equation of state for r134a [J]. *International journal of refrigeration*, 1994, 17(1): 18-31.
- [37] FISHER G D, LEL T W. Corresponding States Principle Using Shape Factors [J/OL]. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 1970, 9(4): 537-544. DOI: 10.1021/i160036a003.
- [38] ELY J F, HANLEY H. Prediction of transport properties. 1. viscosity of fluids and mixtures [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 1981, 20(4): 323-332.

- [39] ELY J F, HARTLEY H J. Prediction of Transport Properties. 2. Thermal Conductivity of Pure Fluids and Mixtures [J/OL]. *Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals*, 1983, 22(1): 90-97. DOI: 10.1021/i100009a016.
- [40] HUBER M. Nist thermophysical properties of hydrocarbon mixtures database (supertrapp) [J]. *NIST Standard Reference Database*, 2003, 4.
- [41] JIANG R P, LIU G Z, ZHANG X W. Thermal cracking of hydrocarbon aviation fuels in regenerative cooling microchannels [J/OL]. *Energy and Fuels*, 2013, 27(5): 2563-2577. DOI: 10.1021/ef400367n.
- [42] YANG V. Modeling of supercritical vaporization, mixing, and combustion processes in liquid-fueled propulsion systems [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2000, 28(1): 925-942.
- [43] LI W, HUANG D, XU G Q, et al. Heat transfer to aviation kerosene flowing upward in smooth tubes at supercritical pressures [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2015, 85: 1084-1094.
- [44] HUANG D, WU Z, SUNDEN B, et al. A brief review on convection heat transfer of fluids at supercritical pressures in tubes and the recent progress [J]. *Applied Energy*, 2016, 162: 494-505.
- [45] HOLLAND J H, et al. Adaptation in natural and artificial systems: an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence [M]. MIT press, 1992.
- [46] MAHFOUD S W. Niching methods for genetic algorithms [D]. Citeseer, 1995.
- [47] ADLER D. Genetic algorithms and simulated annealing: A marriage proposal [C]//*IEEE International Conference on Neural Networks*. IEEE, 1993: 1104-1109.
- [48] SRINIVAS M, PATNAIK L M. Adaptive probabilities of crossover and mutation in genetic algorithms [J]. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 1994, 24(4): 656-667.
- [49] DE JONG K A. Analysis of the behavior of a class of genetic adaptive systems [R]. 1975.
- [50] MAHFOUD S W. A Comparison of Parallel and Sequential Niching Methods [J/OL]. In *Proceedings of the Sixth International Conference on Genetic Algorithms*, 1995: 136-143. <http://citeseer.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi=10.1.1.48.812>.
- [51] CARUANA R A, SCHAFFER J D. Representation and hidden bias: Gray vs. binary coding for genetic algorithms [M]//*Machine Learning Proceedings 1988*. Elsevier, 1988: 153-161.
- [52] HARRIS C R, MILLMAN K J, VAN DER WALT S J, et al. Array programming with numpy [J]. *Nature*, 2020, 585(7825): 357-362.
- [53] 周志华. 机器学习 [M]. 清华大学出版社, 2016.
- [54] LESHNO M, LIN V Y, PINKUS A, et al. Multilayer feedforward networks with a nonpolynomial activation function can approximate any function [J]. *Neural networks*, 1993, 6(6): 861-867.

- [55] PASZKE A, GROSS S, MASSA F, et al. Pytorch: An imperative style, high-performance deep learning library [J]. arXiv preprint arXiv:1912.01703, 2019.
- [56] IOFFE S, SZEGEDY C. Batch normalization: Accelerating deep network training by reducing internal covariate shift [C]//International conference on machine learning. PMLR, 2015: 448-456.
- [57] HEERMANN D W. 理论物理学中的计算机模拟方法 [M]. 北京大学出版社, 1996.
- [58] 陈正隆, 徐为人, 汤立达. 分子模拟的理论与实践 [M]. 化学工业出版社, 2007.
- [59] VERLET L. Computer" experiments" on classical fluids. ii. equilibrium correlation functions [J]. Physical Review, 1968, 165(1): 201.
- [60] EVANS D J, HOLIAN B L. The nose-hoover thermostat [J]. The Journal of chemical physics, 1985, 83(8): 4069-4074.
- [61] ALLEN M P, TILDESLEY D J. Computer simulation of liquids [M]. Oxford university press, 2017.
- [62] LIU Y B, CAO B Y. Thermodynamic models for h₂o-co₂-h₂ mixtures in near-critical and supercritical regions of water [J]. International Journal of Hydrogen Energy, 2020, 45(7): 4297-4304.
- [63] YANG X M, FENG Y M, JIN J H, et al. Molecular dynamics simulation and theoretical study on heat capacities of supercritical h₂o/co₂ mixtures [J]. Journal of Molecular Liquids, 2020, 299: 112133.
- [64] YANG X, FENG Y, XU J, et al. Numerical study on transport properties of the working mixtures for coal supercritical water gasification based power generation systems [J]. Applied Thermal Engineering, 2019, 162: 114228.
- [65] CHEN C, JIANG X, SUI Y. Prediction of transport properties of fuels in supercritical conditions by molecular dynamics simulation [J]. Energy Procedia, 2019, 158: 1700-1705.
- [66] CHEN C, JIANG X. Transport property prediction and inhomogeneity analysis of supercritical n-dodecane by molecular dynamics simulation [J]. Fuel, 2019, 244: 48-60.
- [67] MARTIN M G, SIEPMANN J I. Transferable potentials for phase equilibria. 1. united-atom description of n-alkanes [J/OL]. The Journal of Physical Chemistry B, 1998, 102(14): 2569-2577. DOI: 10.1021/jp972543+.
- [68] SIU S W I, PLUHACKOVA K, BÖCKMANN R A. Optimization of the opl_s-aa force field for long hydrocarbons [J/OL]. Journal of Chemical Theory and Computation, 2012, 8(4): 1459-1470. DOI: 10.1021/ct200908r.

- [69] SUN H. Compass:an ab initio force-field optimized for condensed-phase applications overview with details on alkane and benzene compounds [J/OL]. The Journal of Physical Chemistry B, 1998, 102(38): 7338-7364. DOI: 10.1021/jp980939v.
- [70] DENNINGTON R, KEITH T A, MILLAM J M. Gaussview Version 6 [Z]. 2019.
- [71] MARTÍNEZ L, ANDRADE R, BIRGIN E G, et al. Packmol: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations [J/OL]. Journal of Computational Chemistry, 2009, 30(13): 2157-2164. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/jcc.21224>. DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.21224>.
- [72] JEWETT A I, STELTER D, LAMBERT J, et al. Moltemplate: A tool for coarse-grained modeling of complex biological matter and soft condensed matter physics [J/OL]. Journal of Molecular Biology, 2021: 166841. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022283621000358>. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmb.2021.166841>.
- [73] Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics [J/OL]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1-19. DOI: 10.1006/jcph.1995.1039.
- [74] YU J, JU Y, GOU X. Surrogate fuel formulation for oxygenated and hydrocarbon fuels by using the molecular structures and functional groups [J]. Fuel, 2016, 166: 211-218.

致 谢

感谢导师曹炳阳教授对我的指导和帮助！曹老师在工作态度、科学思维、工作方法上都给我很多指导和建议，这对我以后的学习和工作有很多帮助。曹老师的支持和鼓励，实验室丰富的资源与宽松的环境，使我能够顺利完成毕业论文，并从中学习到很多有益的知识和经验。

感谢钟北京教授及彭惠生博士帮助我获得了本科期间的第一段科研经历。感谢日本东北大学 Atsuki Komiya 教授在访学期间在科研、生活等各个方面对我的鼓励和帮助，两个月的交流使我收获良多。感谢 Komiya 实验室 Kanda、Ogasawara 等同学对我在日本访学期间科研及生活上的帮助！感谢周红老师、刘源斌师兄、李含灵师兄和课题组其他师兄师姐的帮助！感谢李章涛、韦盛富、李洪达等同学平日的交流，感谢班主任陈海昕和辅导员陈贤亮对我生活上的帮助！感谢陈慧娴的歌曲陪伴我写完毕业论文！感谢父母和家人多年以来的养育和栽培，父母和家人是我始终的依靠。

感谢包括 python 社区、GitHub 社区等在内的所有开源项目的维护者，无论是底层的 linux 内核、gcc 编译器到 Numpy 等科学计算库，还是 lammmps、openfoam 等大规模软件，开源项目为科学和工程的发展做出了巨大的贡献，我也在开源社区中也收获了最多的动力和知识，开放、共享的开源精神给予了我极大的鼓励和触动。正如鄂维南院士所说的，科学研究也的确应当从自给自足的「小农作坊」模式转变到大平台式的「安卓」模式了，大家一起努力，建设一个属于大家的开源社区，共同推动学科和社区的发展，这种“All for one, one for all”式的开源精神无疑是振奋人心的。

本课题承蒙国家科技重大专项（2017-III-0005-0030）资助，特此致谢。

声 明

本人郑重声明：所呈交的学位论文，是本人在导师指导下，独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本学位论文的研究成果不包含任何他人享有著作权的内容。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

签 名： 沈扬 日 期： 2021-6-7

附录 A 外文资料的书面翻译

扩展热阻问题的研究进展

目录

A.1 摘要	70
A.2 简介	70
A.3 按年代顺序的研究总结	73
A.3.1 1980 年以前的扩展热阻问题研究	74
A.3.2 1980-1990 年间扩展热阻问题研究	75
A.3.3 1990-2000 年间的扩展热阻问题研究	75
A.3.4 2000 年以后的扩展热阻问题研究	76
A.4 问题陈述	78
A.5 从正交系统到各向同性系统的转换	80
A.6 圆形热流通道扩展热阻问题的求解	82
A.7 带有偏心热源的矩形通道	84
A.8 顶部平面有同轴热源的矩形通道	87
A.9 多层系统的求解	87
A.9.1 存在界面接触热阻的复合系统	88
A.9.2 理想热沉、存在界面接触热阻的复合系统	88
A.9.3 没有界面接触热阻的多层系统	89
A.9.4 理想热沉、没有界面接触热阻的复合系统	89
A.10 影响系数法	89
A.11 在 x, y, z 方向上具有不同热导率的通道	90
A.12 热导率随温度变化的情况	93
A.12.1 第一类边界条件	93
A.12.2 第二类边界条件	94
A.12.3 第三类边界条件	94
A.13 沿热沉平面对流换热系数改变的二维热流通道	95
A.14 解析解和有限元仿真的对比	98

A.15 总结.....	99
参考文献.....	99

A.1 摘要

扩展热阻问题在过去的六十年间已经被许多研究人员所讨论。本文对过去 50 年间关于扩展热阻问题的研究按年代的顺序展开介绍，其中着重描述了过去十年关于扩展热阻问题的研究进展。由于 2003 年出版的一书中已经对该问题做出了系统性的综述，因此本文的重点是最近的进展。为保证论文的一致性，本文中矩形平板和圆柱形圆盘散热器分别被称为矩形热流通道（flux channels）和圆形热流通道（flux tubes）^①。本文着重介绍了以下几种情况下的扩展热阻，对于多层矩形热流通道和圆形热流通道，包括是否考虑接触热阻、热沉边界采用固定或变化的对流换热系数、热沉平面是否只有部分热流出口、正交各向异性的热导率、温度依赖的热导率等。

A.2 简介

热设计工程师们感兴趣的是能够准确计算器件的扩展热阻，以对电子器件以及多个热点相接触的散热片上的热行为作出有效的模拟。当热量从一片小的区域通过导热的方式扩散到大区域或热沉中时，扩展热阻会产生。在与散热源或散热片接触比很小的电子封装中，扩展成为总热阻的主要来源之一，复杂微器件的热分析日益成为一项重要的研究问题。在这些应用中，正交各向异性性质、界面热阻以及热导率的温度依赖关系等对于扩展热阻的预测十分重要。

扩展热阻是一种出现在不同横截面的热传导中的热阻。扩展热阻（spreading resistance）或者收缩热阻（contraction resistance）的大体意思是一样的，因此这两个描述经常被交替得使用。当热量从一个较小的区域传递到较大的区域时，主要采用扩展热阻的描述；而当热量从一个较大的区域传递到较小的区域时，常采用收缩热阻的描述^[1]。对于一个稳态的导热问题，温度场的控制方程为拉普拉斯方程：

$$\nabla^2 T = 0 \quad (\text{A-1})$$

在半无限大的区域中，热量从一个有限的区域进入，在没有任何边界限制的情

^① 热流通道实际上就是导热的固体介质

况下，将扩展到整个半无限大空间中，如图A-1所示。在这些系统中，扩展热阻可以用热源的平均温度 $(\bar{T}_s)$ ，远离热源的热沉温度 $(T_{z \rightarrow \infty})$ ，以及总热流量 (Q) ^[2-3] 计算。扩展热阻公式具有如下的形式^[4]：

$$R_t = (\bar{T}_s - T_{z \rightarrow \infty}) / Q = \bar{\theta} / Q \quad (\text{A-2})$$

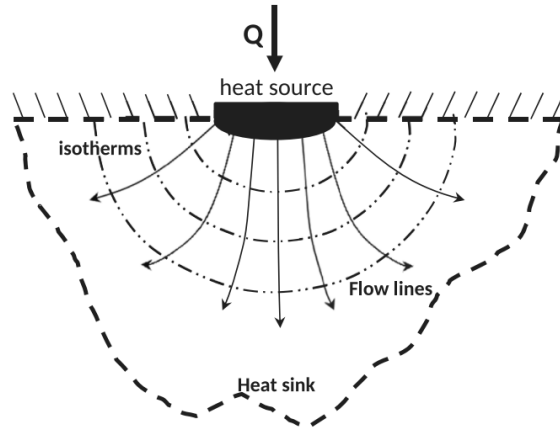


图 A-1 半空间上任意形状的热源

热源的平均温度可以用如下积分计算：

$$\bar{T}_s = \frac{1}{A_s} \iint_{A_s} T(x, y, 0) dA_s \quad (\text{A-3})$$

对于有限的区域，扩展热阻依赖于系统的边界条件。比如对于一个在圆形热流通道上圆形截面的热源，柱面是绝热边界条件。此时在距离热源较近的区域内，热流线是弯曲且受限的。在远离热源的区域，热流线又变得平行于圆形热流通道的轴线。温度在距离热源的区域是多维的（即截面上温度分布不均匀），在远离热源的区域又变成一维的（即截面上各处温度相等）^[5]，这个系统如图A-2所示，可以看到热流线和等温线是正交的。这个系统的温度分布可以通过在给定边界条件后求解拉普拉斯方程得到。

对于绝热边界的圆形通道或者通道，总热阻由一维热阻和扩展热阻组成：

$$R_t = R_{1D} + R_s \quad (\text{A-4})$$

此外，多层器件的一维热阻可以用如下公式计算：

$$R_{1D} = \sum_{i=1}^N \frac{t_i}{k_i A_a} + \frac{1}{h A_a} \quad (\text{A-5})$$

总热阻可以用热源的平均温度 $(\bar{T}_s)$ ，远离热源的热沉温度 $(T_{z \rightarrow \infty})$ ，以及总

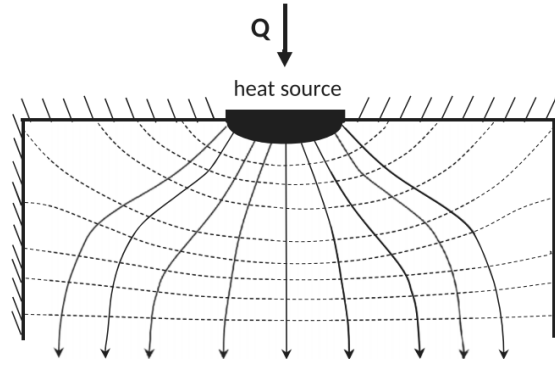


图 A-2 在圆形通道或者通道上任意形状的热源

热流量 (Q) 计算:

$$R_t = \frac{\bar{T}_s - T_{z \rightarrow \infty}}{Q} \quad (\text{A-6})$$

一维热阻可以用如下公式计算:

$$R_{1D} = \frac{\bar{T}_{z=0} - T_{z \rightarrow \infty}}{Q} \quad (\text{A-7})$$

因此扩展热阻计算公式, 最早由 Mikic 和 Rohsenow^[6] 提出, 有如下的形式:

$$R_s = R_t - R_{1D} = \frac{\bar{T}_s - T_{z \rightarrow \infty}}{Q} - \frac{\bar{T}_{z=0} - T_{z \rightarrow \infty}}{Q} \quad (\text{A-8})$$

$$R_s = \frac{\bar{T}_s - \bar{T}_{z=0}}{Q} \quad (\text{A-9})$$

值得注意的是当热源的面积和通道或圆形通道的截面积相同时, 扩展热阻会消失。然而, 在许多同时具有两种热阻的电子器件中, 扩展热阻仍然是热阻的主要部分。在进行电子器件热圆形通道的设计时, 扩展热阻应当被作为一个主要的考虑因素^[1]。

半导体微电子器件可以假设为与热源和热沉相接触的有限区域。为了计算这一有限区域的温度场, 在边界条件给定时, 这一区域的温度分布应当满足拉普拉斯方程。对于各向同性系统, 热导率在各个方向都是相等的。然而对于正交各向异性系统 (orthotropic system), 热导率在不同方向的值不同, 此时拉普拉斯方程变为:

$$\nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (\text{A-10})$$

对于解析模型, 系统的几何形状通常都被简化为通道 (矩形) 或者圆形通道

(圆形)。多层的电子器件被看作是多层的通道或者圆形通道。由于边界条件或者性质的不同，在模拟不同体系时发展了不同的方法。同时，在扩展热阻问题的研究中，涉及到了许多不同的因素，包括建模方法、几何结构、系统的性质和边界条件等。图A-3展示了对扩展热阻问题建模时需要考虑的几个重要因素。

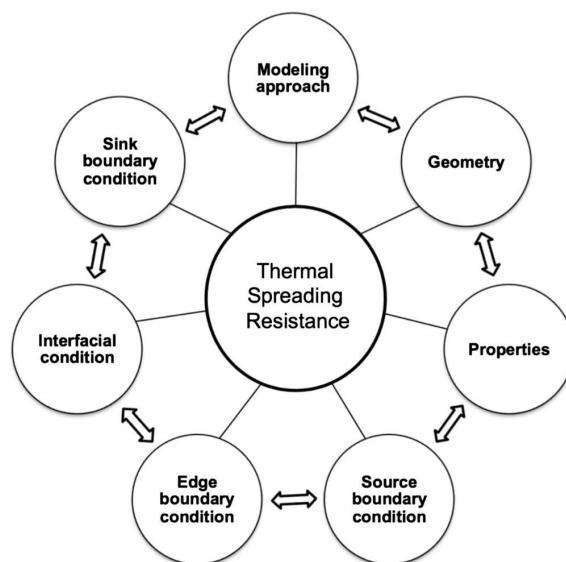


图 A-3 对扩展热阻问题建模时的几个重要因素

A.3 按年代顺序的研究总结

对扩展热阻问题的研究从 1960 年开始^[7]。关于扩展热阻问题不同的解析模型^[5,7-8]，数值模型^[9-12]，以及实验研究^[13-14]有了报道。对不同的体系，例如单层^[8,15-16]以及多层系统^[12,17-19]，轴对称系统^[20-22]以及非轴对称系统^[15,19,23-25]进行了研究。其中多层系统被假设为完美接触^[17]和存在接触热阻^[19]。主要研究的几何形状包括矩形通道^[23]和圆形通道状通道^[26]。进一步地，系统的性质各向同性^[8-9,15-16,23,27-28]以及正交各向异性^[4,19,29]也进行了研究。热导率随温度变化的情况也有研究^[12,30-33]。不同的热源排布及边界条件也有涉及，包括单热源系统^[1,8,23,34-35]以及多热源系统^[19,24]。同心热源^[36]以及偏心热源^[11,15,19,23]的情况也被不同的研究人员所讨论。壁面的边界条件设置为绝热边界条件^[17]或者对流边界条件^[8,16]。热沉边界被假设为等温边界^[7,37]或者对流边界^[1,19,38-40]。同时，在大多数文献中，热沉边界的对流换热系数都被假设为常数^[16,19,23,25]。最近，也有研究讨论了对流换热系数沿着热沉边界变化的情况^[8,15]。本文按年代简要介绍了从 Kennedy 开创性工作以来的几十年内，关于扩展热阻问题一些最有影响力的工作。

A.3.1 1980 年以前的扩展热阻问题研究

Kennedy^[7] 在 1960 年开始了半导体中关于扩展热阻问题的研究。他得到了一个具有同心均匀热源以及等温热沉边界的有限体积圆柱体的解析解, Kennedy 用图的形式描述了不同几何参数对这个圆柱状半导体中扩展热阻的影响。他研究了三种不同壁面边界条件以及热沉边界条件下的算例。这三个算例中都假设热源中的热流是均匀的, 假设热源截面中剩余的部分是绝热的。他用图展示结果的主要原因是在当时数值求解方程仍然是不方便的。因此他用图的方式呈现结果, 以便其他的热设计工程师使用。Mikic^[2] 考虑了在半无限大区域中的接触热阻。Mikic 和 Rohsenow^[6] 研究了对称、同心圆柱接触时的收缩热阻, 并且对等温接触时的收缩热阻得到了一个无穷级数表达式。Cooper 等^[41] 提出了接触热阻的概念, 并且基于等温接触点引入了热收缩参数。他们提到名义上两个平整的平面相互接触, 实际上只有几个离散的点真正发生了接触。他们研究了两个固体理想接触以及只有几个离散的点接触时的扩展热阻。为研究这个问题, 他们使用了弹性变形理论, 并且提出了一个函数, 已考虑表面突出的点的影响。Yovanovich 等^[42] 基于宏观收缩和微观收缩热阻的线性叠加, 得到了一个计算真空中光滑的球体和粗糙平面的总接触热阻。他还提出了一个焊点最小热阻的相关关系。

在 1970 年后, 许多研究人员讨论了各向同性的半无限大区域、通道、以及圆形通道中瞬态和稳态的扩展或收缩热阻的理论模型。Yovanovich^[43] 考虑了接触的抛物面之间的收缩热阻, 推导了圆柱^[44] 和半空间^[45] 上的圆形接触通量收缩热阻的一般表达式。然后, 研究了在绝缘半空间^[46] 上具有恒定通量的任意形状与环形圆形通道^[47] 环形接触以及环形接触^[45] 引起的收缩热阻。

Schneider 等^[48-49] 等考虑了一个薄的圆形盘子在一个半空间上的瞬态热行为, 以及两个半无限大物体通过一个小的圆形部分接触的瞬态热行为。Brude 和 Yovanovich^[50] 理论上获得了一个光滑圆球之间以及粗糙平面之间稳态的收缩热阻。Ellison^[13] 使用理论及经验公式得到了一个具有挤制铝材热沉的通过强迫对流冷却的陶瓷电子封装的热行为。他使用理论和经验方法评估了热传导和对流换热的特性。他考虑的物理参数主要包括热导率、底层厚度、芯片维度、电极传到以及热沉的性质, 比如肋片长度、空气速度和排布等。

Yovanovich 等^[43] 研究了双通的, 平面的, 接触面积有着恒定热流通量的, 分别被共轴圆、方形以及等边三角形限制的稳态扩展热阻。他们提出了多层圆盘由上表面圆形部分热流引起的收缩热阻的一般解^[18]。

A.3.2 1980-1990 年间扩展热阻问题研究

在这十年中, 扩展热阻问题的不同方面都有所研究。瞬态情况下的扩展热阻^[51-52] 以及稳态和瞬态收缩热阻^[20] 都有人分析。对于半空间任意情况的接触条件下的扩展热阻问题, 有一些解析和数值方法被提出^[9,38-39,53-56]。此外, 对于矩形热流通道和圆形热流通道中的扩展热阻问题研究都有所进展^[10,36,54-58]。此外, 表面层对收缩热阻的影响^[14], 以及圆形接触情况下接触边界条件对于收缩热阻的影响也有研究^[59]。这些问题的基本概念会在下面几段中进行介绍。

Yovanovich 等^[53] 建立了任意单个或多个热源区域下收缩热阻的解析-数值解。此外, 椭球面接触的扩展热阻模型^[58] 和半无限大区域任意均匀热源的瞬态热传导问题也有所研究^[52]。

Martin 等^[9] 数值获得了各向同性半空间内任意形状的平面接触下的扩展热阻。此外, Rozon 等^[10] 数值研究了不同材料界面间的几何效应。Negus 和 Yovanovich^[36,54] 提出了用于求解同心圆形热流通道具有均匀热流情况下的扩展热阻的解析-数值模型, 并且计算了等温接触下圆形热流通道中的收缩热阻。此外, Negus 等分析了各向异性粗糙表面的扩展热阻, 并且得到了半空间上圆形等温热源和等热流热源情况下收缩热阻的解析解。

Drygen 等分析了涂层对稳态及瞬态半空间上具有任意轴对称形状的热源下的扩展热阻的影响。Saabas 和 Yovanovich 提出了用于求解圆形接触条件下的扩展热阻的经验-数值模型。Yovanovich 回顾了热接触和跳跃以及连接热导对于点、线以及一致粗糙表面的接触。Lemczyk 和 Yovanovich 研究了半空间上圆形热源的扩展热阻, 并且分析了它随比奥数的变化。此外, 他们对一般的多层问题进行了建模。Fisher 和 Yovanovich 从解析和实验两方面研究了和涂层表面弹性接触的球中的扩展热阻。Negus 等使用热源面积的平方根无量纲化扩展热阻, 并且给出了相应的经验公式。

A.3.3 1990-2000 年间的扩展热阻问题研究

在这一段时间, 发表了许多关于扩展热阻的解析和数值研究的工作。Muzychka 等, Yovanovich 等, 以及 Mantelli 和 Yovanovich 研究了工业应用中的扩展热阻问题。此外, Yovanovich 和 Muzychka 等系统研究了多层系统中的扩展热阻问题。

Lee 等建立了焊点中扩展热阻的解析模型。Mantelli 和 Yovanovich 讨论了卫星中的扩展热阻问题。Lee 等和 Song 等研究了不同热沉条件下电子器件中的扩展热阻。Das 和 Sadhal 通过包含随机分布接触的方形区域中对两个随机接触的固体之

间的扩展热阻做了研究。Lam 和 Fischer 提出了正交各向异性矩形热流通道中的解析解。他们分析了不同面内和面向热导率比值下的扩展热阻。

Ellison 分析了矩形、多层、离散热源的电路板和微电子封装中的热行为。他研究了傅里叶级数方法，并且通过使用集总参数热阻解决了这些方法的一些限制。他还提出了基于傅里叶级数展开的具有离散热源的多层矩形热流通道的解析解。他考虑的边界条件是绝热壁面以及对流冷却。此外，他还总结了已发表的一些研究，并且将傅里叶级数展开与集成热展开方法耦合，通过网络连接权重预测了衬底的表面温度和热损失。Muzychka 等提出了等温或者等热流条件下对于多层半无限大圆形热流通道中的扩展热阻的解析解。

Yovanovich 和 Teertstra 提出了圆形热流通道中扩展热阻的数值解。Yovanovich 得到了半无限大导体中等热流热源下的收缩热阻。他考虑了任意热流接触形状的瞬态扩展热阻。此外，Yovanovich 等回顾了对圆形热流通道、半空间以及多层通道中的扩展热阻建模问题。最终，他给出了具有对流或导热热沉的有限多层矩形热流通道的扩展热阻的一般表达式。

A.3.4 2000 年以后的扩展热阻问题研究

2000 年以后，扩展热阻的不同方面从解析和数值两方面被研究。这些研究中，比较典型的有：不同类型的圆形热流通道^[4,25,60-62]，矩形热流通道^[4,23,25,60-61]，扇形结构^[35]，半空间^[2,62-65]；各向同性材料^[17,23,60]，各向异性材料^[66]，正交各向异性材料^[4,17,60,67]，热导率随温度变化的情况^[62]；单热源以及多热源系统^[24]；同心以及偏心热源的情况^[4,11,23,25]；等热流^[23,35,64]，等温^[65?]，逆抛物线^[35]，抛物线^[35]的热流分布；热源的质心和平均温度^[17]；椭圆或 chaotuoyuan^[2,63-65]，条状或圆形^[25]，矩形^[25,63]，以及等边三角形热源^[11]；侧端冷却以及终端冷却，边界冷却，热源平面对流，以及单层或多层系统。

Ying 和 Toh, Wang 和 Yan 以及 Rahmani 和 Shokouhmand 等对扩展热阻进行了数值研究。Ying 和 Toh 等研究了各向异性材料的扩展热阻，Wang 和 Yan 等数值研究了在圆形热流通道上的偏心圆、偏心矩形和等边三角形热源，分析了偏心度、形状和部分边界热源条件的影响。Rahmani 和 Shokouhmand 等数值研究了在热导率随温度变化的情况下，各向同性半空间和圆形热流通道中的扩展热阻。Ellison 研究了矩形平板中心上矩形热源的情况。边界是绝热的，热沉为自然对流冷却。他给出了一些情况下扩展热阻的表达式，并且表明这些方程很容易数值求解。Vermeersch 和 De Mey 研究了矩形通道内的扩展热阻随自然对流换热系数的变化关系。Sadeghi

等发展了一个通用的模型，用于计算不同几何形状下的扩展热阻。

工业实际应用中的扩展热阻也有研究。Ying 和 Toh 从解析和数值两方面研究了各向异性的电子器件中的扩展热阻。Kim 等建立了一个预测多电子器件多热源情况下扩展热阻的关联式。Karmalkar 等提出了一个曲线拟合模型，以快速地评估集成电路中不同几何形状下的扩展热阻。处于这个目的，他们用一维热阻标准化了扩展热阻，并且用接触面积拟合了所提出的标准化扩展热阻。他们提出了形式简单的封闭的公式，并用无穷级数及有限元方法进行了验证。他们还针对同心和偏心热源情况下的矩形热流通道和圆形热流通道构建了曲线拟合模型。为对偏心圆形热流通道建模，他们把几何等效地转换到了矩形热流通道。Culham 等分析了在设计热沉肋片以及多层电路板时材料性质和扩展热阻所起到的影响。Lasance 研究了用于计算 LED 中扩展热阻的不同方法。Guan 等提出了一个近似模型，以求解多层衬底的锥形结构中的扩展热阻问题。

Muzychka 等求解了一系列有着不同几何形状、边界条件、物性变化规律的扩展热阻问题。他们分析了各向同性、正交各向异性、同心热源、偏心热源、矩形热流通道、圆形热流通道情况中的扩展热阻。他们得到了有着抛物线、逆抛物线、均匀热流分布的多层均匀扇形结构中的扩展热阻的通解。此外，他们回顾了多层正交各向异性系统中的扩展热阻问题，并对这些系统提出了简单的变换求解方法。他们分析了在半空间上静态以及移动的矩形或椭圆形热源，结果表明如果热源面积的平方根被用来无量纲化扩展热阻，那么这是一个若形式的函数。此外，他们获得了各向同性的多层矩形热流通道和圆形热流通道中扩展热阻。他们考虑了边界冷却对矩形和圆形通道中扩展热阻的影响。他们提出了多层的有着偏心矩形热源的扩展热阻的解。他们还分析了偏心热源和不同热流分布对扩展热阻的影响。此外，Muzychka 还发展了影响系数法，以求解离散热源情况下多层系统中的扩展热阻及热源平均温度。此外，热源平面存在对流的情况他们也进行了考虑。最近，Muzychka 等分析了存在层间接触热阻的多层系统中的扩展热阻。

Yovanovich 提出了有限体积圆柱中扩展热阻的解。在他和 Marrota 写的书的一章中，对扩展热阻问题做了详细的介绍。此外，Yovanovich 还写了一篇综述文章，来回顾他对扩展热阻问题 40 年的研究^[68]。

Gholami 和 Bahrami 研究了热导率各向异性下矩形薄片中的扩展热阻。最近，Razavi 等研究了沿热沉平面换热系数发生变化的情况。

A.4 问题陈述

对于电子器件的解析建模来说，系统的几何形状通常被简化为一个矩形通道或者圆形通道状通道。因为电子器件是由多层构成的，因此它经常被简化为多层的矩形通道、圆盘或者圆形通道状通道的。此外，每一层的材料经常是被认为各向异性的，及面向和法向的热导率是不同的。同时，不同层之间可能会存在接触热阻。这些系统的几何形状如图A-4,A-5所示。

界面的接触热阻可以用接触热导 h_c 来描述， h_c 是考虑了接触区域名义厚度、热导率等等后的等效热导。当相接触的两层的厚度远远大于界面的厚度时，这种简化方式是有效的。因此，可以得到总热阻的表达式为：

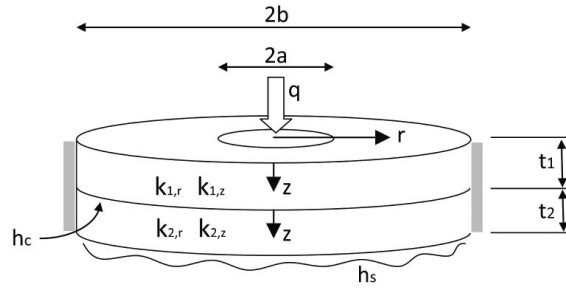


图 A-4 多层圆形通道，接触热阻为 h_c ，正交各向异性的热导率

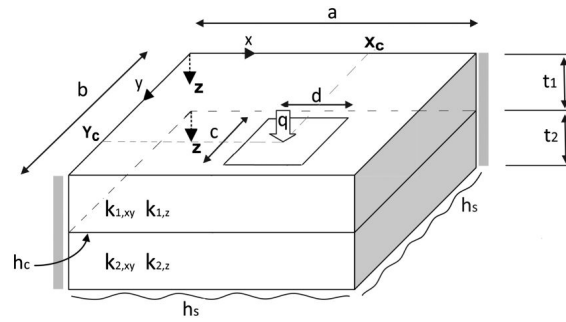


图 A-5 多层通道，接触热阻为 h_c ，正交各向异性的热导率

$$R_t = \frac{t_i}{k_i A_b} = \frac{1}{h_c A_b} \Rightarrow h_c = \frac{k_i}{t_i} \quad (\text{A-11})$$

无论是矩形通道还是圆形通道，其坐标系统都局限在每一层中，以便于对面向和法向的不同热导率建模。每一个系统中的控制方程都是拉普拉斯方程。变量 θ 被定义为超过热沉温度部分的约化温度： $\theta = T - T_f$ 。对于矩形通道，基于笛卡尔坐标系的拉普拉斯方程可以写为：

$$\begin{aligned} k_{1,xy} \left(\frac{\partial^2 \theta_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial y^2} \right) + k_{1,z} \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial z^2} &= 0, 0 < z < t_1 \\ k_{2,xy} \left(\frac{\partial^2 \theta_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial y^2} \right) + k_{2,z} \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial z^2} &= 0, 0 < z < t_2 \end{aligned} \quad (\text{A-12})$$

对于圆形通道，基于柱坐标系，拉普拉斯方程可以写为：

$$\begin{aligned} k_{1,r} \left(\frac{\partial^2 \theta_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \theta_1}{\partial r} \right) + k_{1,z} \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial z^2} &= 0, 0 < z < t_1 \\ k_{2,r} \left(\frac{\partial^2 \theta_2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \theta_2}{\partial r} \right) + k_{2,z} \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial z^2} &= 0, 0 < z < t_2 \end{aligned} \quad (\text{A-13})$$

其中 $k_{1,xy}, k_{2,xy}, k_{1,r}, k_{2,r}$ 为面向热导率， $k_{1,z}, k_{2,z}$ 为法向热导率。

关于系统在热源平面的边界条件，热源区域可以使用等热流边界条件，热源平面的其他区域可以使用绝热边界条件：

$$\begin{aligned} -k_{1,z} \frac{\partial \theta_1}{\partial z} \Big|_{z=0} &= q, \quad \text{Over source region} \\ -k_{1,z} \frac{\partial \theta_1}{\partial z} \Big|_{z=0} &= 0, \quad \text{Outside source region} \end{aligned} \quad (\text{A-14})$$

沿着界面接触区域，存在以下热流量守恒的边界条件：

$$k_{1,z} \frac{\partial \theta_1}{\partial z} \Big|_{z=t_1} = k_{2,z} \frac{\partial \theta_2}{\partial z} \Big|_{z=0} \quad (\text{A-15})$$

此外，由于接触热阻导致的温度跳跃可以用如下的边界条件来表示：

$$-k_{1,z} \frac{\partial \theta_1}{\partial z} \Big|_{z=t_1} = h_c [\theta_1(x, y, t_1) - \theta_2(x, y, 0)] \quad (\text{A-16})$$

Flux channel

$$-k_{1,z} \frac{\partial \theta_1}{\partial z} \Big|_{z=t_1} = h_c [\theta_1(r, t_1) - \theta_2(r, 0)] \quad (\text{A-17})$$

Flux tube

沿着热沉平面的边界条件可以写为：

$$-k_{2,z} \frac{\partial \theta_2}{\partial z} \Big|_{z=t_2} = h_s \theta_2(x, y, t_2) \quad (\text{A-18})$$

Flux channel

$$-k_{2,z} \frac{\partial \theta_2}{\partial z} \Big|_{z=t_2} = h_s \theta_2(r, t_2), \quad \text{Flux tube} \quad (\text{A-19})$$

在系统的边界为绝热边界条件，对于矩形通道，有：

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial x} \Big|_{x=0,c} = 0, i = 1, 2 \quad (\text{A-20})$$

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial y} \Big|_{y=0,d} = 0, i = 1, 2 \quad (\text{A-21})$$

对于圆形通道：

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, i = 1, 2 \quad (\text{A-22})$$

$$\frac{\partial \theta_i}{\partial r} \Big|_{r=b} = 0, i = 1, 2 \quad (\text{A-23})$$

在接下来的部分中，讨论了从正交各项异性系统到各向同性系统的转笔那，简要地介绍了在过去十年中发展起来的无穷级数解。大部分系统完全可以就用两层来进行建模。对于多层系统，可以采用由 Bagnall 等^[69] 发展的递归方法。

A.5 从正交系统到各向同性系统的转换

为了帮助获得各向异性系统的解，系统可以用拉伸坐标的方式转换到各向同性系统^[4,19]。矩形通道中每一层的等效各向同性性质可以用如下的变量来描述：

$$\zeta = \frac{z}{\sqrt{(k_{1,z}/k_{1,xy})}} \quad \text{Top layer of the flux channel} \quad (\text{A-24})$$

$$\varsigma = \frac{z}{\sqrt{(k_{2,z}/k_{2,xy})}} \quad \text{Bottom layer of the flux channel} \quad (\text{A-25})$$

通过使用变量 ζ 和 ς ，每层中的等效热导率和温度可以被定义为：

$$\begin{aligned}
k_1 &= \sqrt{k_{1,xy}k_{1,z}}, \bar{t}_1 = \frac{t_1}{\sqrt{(k_{1,z}/k_{1,xy})}}, \text{ Top layer of the flux channel} \\
k_2 &= \sqrt{k_{2,xy}k_{2,z}}, \bar{t}_2 = \frac{t_2}{\sqrt{(k_{2,z}/k_{2,xy})}}, \text{ Bottom layer of the flux channel}
\end{aligned} \tag{A-26}$$

对于圆形通道:

$$\begin{aligned}
k_1 &= \sqrt{k_{1,r}k_{1,z}}, \bar{t}_1 = \frac{t_1}{\sqrt{(k_{1,z}/k_{1,r})}}, \text{ Top layer of the flux tube} \\
k_2 &= \sqrt{k_{2,r}k_{2,z}}, \bar{t}_2 = \frac{t_2}{\sqrt{(k_{2,z}/k_{2,r})}}, \text{ Bottom layer of the flux tube}
\end{aligned} \tag{A-27}$$

通过对 k_1 和 k_2 的定义, 可以将正交各向异性的拉普拉斯方程转变为各向同性的形式。对于矩形通道来说, 转换后的控制方程为:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \theta_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial \zeta^2} &= 0, 0 < \zeta < \bar{t}_1 \\
\frac{\partial^2 \theta_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial \zeta^2} &= 0, 0 < \zeta < \bar{t}_2
\end{aligned} \tag{A-28}$$

对于圆形通道:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial^2 \theta_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \theta_1}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \theta_1}{\partial \zeta^2} &= 0, 0 < \zeta < \bar{t}_1 \\
\left(\frac{\partial^2 \theta_2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \theta_2}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial \zeta^2} &= 0, 0 < \zeta < \bar{t}_2
\end{aligned} \tag{A-29}$$

边界条件也应该相应地进行转换。沿着热源平面有:

$$\begin{aligned}
-k_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=0} &= q, \\
\text{Over source region} \\
-k_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=0} &= 0, \quad \text{Outside source region}
\end{aligned} \tag{A-30}$$

沿着接触界面:

$$\begin{aligned}
k_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=\bar{t}_1} &= k_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=0}, \quad \text{Condition of equality of flux} \\
-k_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=\bar{t}_1} &= h_c [\theta_1(x, y, \bar{t}_1) - \theta_2(x, y, 0)], \quad \text{Temperature drop for flux channel} \\
-k_1 \frac{\partial \theta_1}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=\bar{t}_1} &= h_c [\theta_1(r, \bar{t}_1) - \theta_2(r, 0)], \quad \text{Temperature drop for flux tube}
\end{aligned} \tag{A-31}$$

沿着热沉平面:

$$\begin{aligned} -k_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=\bar{t}_2} &= h_s \theta_2(x, y, \bar{t}_2) \quad , \text{Flux channel} \\ -k_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial \zeta} \Big|_{\zeta=\bar{t}_2} &= h_s \theta_2(r, \bar{t}_2) \quad , \text{Flux tube} \end{aligned} \quad (\text{A-32})$$

绝热边界条件保持不变。

A.6 圆形热流通道扩展热阻问题的求解

本章简述了顶面同心热源的各向同性圆柱形散热器的通解。在获得了解后，可以将其扩展到多层系统中。各向同性圆形通道的拉普拉斯方程为：

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \theta}{\partial r} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^2} = 0 \quad (\text{A-33})$$

通过分离变量法，可以得到具有如下形式温度场的通解：

$$\begin{aligned} \theta(r, z) = A_0 + B_0 z + [A_1 J_0(\lambda r) + B_1 Y_0(\lambda r)] [A_2 \cosh(\lambda z) \\ + B_2 \sinh(\lambda z)] \end{aligned} \quad (\text{A-34})$$

前两项代表均匀的一维热传导。为仅考虑解的扩展部分，暂时忽略掉前两项。基于均匀热传导的热阻可以加到扩展热阻上，以得到总热阻 $R_t = R_{1D} + R_s$ 。带入中心线的边界条件 (公式A-22) 可以得到 $B_1 = 0$ 。系统的特征值可以用公式A-23得到：

$$\frac{d}{dr} (J_0(\lambda r)) \Big|_{r=b} = -\lambda J_1(\lambda r) \Big|_{r=b} = J_1(\lambda b) = 0 \quad (\text{A-35})$$

特征值为：

$$\delta_n = \lambda_n b = 3.8317, 7.0156, 10.1735, 13.2327, \dots \quad (\text{A-36})$$

为了获得更多的特征值，其中每两个特征值之间都相差一个 π ， $\sigma_i - \sigma_{i-1} = \pi$ 。此时扩展部分的解可以写为：

$$\theta_s(r, z) = \sum_{n=1}^{\infty} J_0(\lambda_n r) (A_n \cosh(\lambda_n z) + B_n \sinh(\lambda_n z)) \quad (\text{A-37})$$

通过使用 $z = t$ 的边界条件，未知系数 A_n 和 B_n 之间的关系可以用扩展函数 ϕ

来表示:

$$B_n = -A_n \left(\frac{\lambda_n \tanh(\lambda_n t) + (h_s/k_1)}{\lambda_n + \frac{h_s}{k_1} \tanh(\lambda_n t)} \right) = -A_n \phi \quad (\text{A-38})$$

此时解变为:

$$\theta_s(r, z) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n J_0(\lambda_n r) (\cosh(\lambda_n z) - \phi \sinh(\lambda_n z)) \quad (\text{A-39})$$

最后一个边界条件是沿着热源平面的, 代入边界条件后得到:

$$A_n = \frac{(q/k_1) \int_0^a J_0(\lambda_n r) r \, dr}{\lambda_n \phi \int_0^b J_0^2(\lambda_n r) r \, dr} = \frac{2qa J_1(\delta_n(a/b))}{\phi k_1 \delta_n^2 J_0^2(\delta_n)} \quad (\text{A-40})$$

将 A_n 的表达式带入温度的表达式中, 得到了最终扩展部分的解为:

$$\theta_s(r, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2qa J_1(\delta_n(a/b))}{\phi k_1 \delta_n^2 J_0^2(\delta_n)} \right) J_0\left(\delta_n \frac{r}{b}\right) \left(\cosh\left(\delta_n \frac{z}{b}\right) - \phi \sinh\left(\delta_n \frac{z}{b}\right) \right) \quad (\text{A-41})$$

热源平面的温度分布, $z = 0$ 为:

$$\theta_s(r, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2qa J_1(\delta_n(a/b))}{\phi k_1 \delta_n^2 J_0^2(\delta_n)} \right) J_0\left(\delta_n \frac{r}{b}\right) \quad (\text{A-42})$$

热源区域的平均温度为:

$$\bar{\theta}_s = \frac{1}{\pi a^2} \int_0^a \theta(r, 0) 2\pi r \, dr = \frac{4qb}{k_1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_1^2(\delta_n(a/b))}{\phi \delta_n^3 J_0^2(\delta_n)} \quad (\text{A-43})$$

扩展热阻的表达式为:^[6]

$$R_s = \frac{\bar{\theta}_s - \bar{\theta}_{cp}}{Q} = \frac{4b}{k_1 \pi a^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_1^2(\delta_n(a/b))}{\phi \delta_n^3 J_0^2(\delta_n)} \quad (\text{A-44})$$

其中 $\bar{\theta}_{cp}$ 为热源平面的平均温度。总热阻为:

$$R_t = R_{1D} + R_s = \frac{t_1}{k_1 \pi b^2} + \frac{1}{h_s \pi b^2} + \frac{4b}{k_1 \pi a^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_1^2(\delta_n(a/b))}{\phi \delta_n^3 J_0^2(\delta_n)} \quad (\text{A-45})$$

把这个解扩展为包含界面热阻的多层系统中时，唯一需要改变的就是重新定义扩展函数， ϕ 。

对于带有偏心热源的圆形通道，在获得未知系数及通解的特征值时存在一定困难(式A-34)。对于这些情况，圆形的几何可以被转化为方形，然后用简单的封闭的公式可以获得扩展热阻^[25,70-71]。

A.7 带有偏心热源的矩形通道

各向同性的矩形通道的通解可以用分离变量法得到^[19]。求解的大致流程和前一章中基本一致，系统的特征值， λ_m 和 σ_n 以及 β_{mn} ，被定义为：

$$\lambda_m = \frac{m\pi}{a}, \quad \delta_n = \frac{n\pi}{b}, \quad \beta_{mn} = \sqrt{\lambda_m^2 + \delta_n^2} \quad (\text{A-46})$$

通解的形式为：

$$\begin{aligned} \theta(x, y, z) = & A_0 + B_0 z \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} \cos(\lambda_m x) [A_1 \cosh(\lambda_m z) + B_1 \sinh(\lambda_m z)] \\ & + \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\delta_n y) [A_2 \cosh(\delta_n z) + B_2 \sinh(\delta_n z)] \\ & + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_m x) \cos(\delta_n y) [A_3 \cosh(\beta_{mn} z) + B_3 \sinh(\beta_{mn} z)] \end{aligned} \quad (\text{A-47})$$

其中 $A_0 + B_0 z$ 代表解中均匀的部分，扩展热阻部分的形式为傅里叶展开^[23]。通过代入热沉平面的边界条件，傅里叶系数可以用扩展函数 ϕ 来表示：

$$B_i = -\phi(\gamma_n) A_i, \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{A-48})$$

沿热沉平面对流换热边界条件的扩展函数为：

$$\phi(\gamma_n) = \frac{\gamma_n \tanh(\gamma_n \bar{t}_1) + (h_s/k_1)}{\gamma_n + (h_s/k_1) \tanh(\gamma_n \bar{t}_1)} \quad (\text{A-49})$$

其中 γ_n 用 $\lambda_m, \sigma_n, \beta_{mn}$ 替代。对于理想热沉， $h_s \rightarrow \infty$ ，代表恒定热沉温度为：

$$\phi(\gamma_n) = \coth(\gamma_n \bar{t}_1) \quad (\text{A-50})$$

剩下的系数可以通过代入热源平面的边界条件获得。通过代入 $z = 0$ 的边界条件，可以得到：

$$\begin{aligned} A_m &= \frac{Q}{bck_1 \lambda_m \phi(\lambda_m)} \frac{\int_{X_c-(c/2)}^{X_c+(c/2)} \cos(\lambda_m x) dx}{\int_0^a \cos^2(\lambda_m x) dx} \\ &= \frac{2Q [\sin((2X_c + c)/2) \lambda_m] - \sin((2X_c - c)/2) \lambda_m]}{abck_1 \lambda_m^2 \phi(\lambda_m)} \end{aligned} \quad (\text{A-51})$$

$$\begin{aligned} A_n &= \frac{Q}{adk_1 \delta_n \phi(\delta_n)} \frac{\int_{Y_c-(d/2)}^{Y_c+(d/2)} \cos(\delta_n y) dy}{\int_0^b \cos^2(\delta_n y) dy} \\ &= \frac{2Q [\sin((2Y_c + d)/2) \delta_n] - \sin((2Y_c - d)/2) \delta_n]}{abdk_1 \delta_n^2 \phi(\delta_n)} \end{aligned} \quad (\text{A-52})$$

$$\begin{aligned} A_{mn} &= \frac{Q}{cdk_1 \beta_{mn} \phi(\beta_{mn})} \frac{\int_{Y_c-(d/2)}^{Y_c+(d/2)} \int_{X_c-(c/2)}^{X_c+(c/2)} \cos(\lambda_m x) \cos(\delta_n y) dx dy}{\int_0^b \int_0^a \cos^2(\lambda_m x) \cos^2(\delta_n y) dx dy} \\ A_{mn} &= \frac{16Q \cos(\lambda_m X_c) \sin((1/2)\lambda_m c) \cos(\delta_n Y_c) \sin((1/2)\delta_n d)}{abcdk_1 \beta_{mn} \lambda_m \delta_n \phi(\beta_{mn})} \end{aligned} \quad (\text{A-53})$$

解中均匀系数部分的系数为：

$$A_0 = \frac{Q}{ab} \left(\frac{\bar{t}_1}{k_1} + \frac{1}{h_s} \right), \quad B_0 = -\frac{Q}{k_1 ab} \quad (\text{A-54})$$

为计算热阻，需要计算平均热源温度。热源平面 ($z = 0$) 的温度分布用通解的形式可以写为：^[19]

$$\begin{aligned} \theta(x, y, 0) &= A_0 + \sum_{m=1}^{\infty} A_m \cos(\lambda_m x) + \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos(\delta_n y) \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{mn} \cos(\lambda_m x) \cos(\delta_n y) \end{aligned} \quad (\text{A-55})$$

其中

$$A_m = \frac{4Q \cos(\lambda_m X_c) \sin(\lambda_m(c/2))}{abck_1 \lambda_m^2 \phi(\lambda_m)} \quad (\text{A-56})$$

$$A_n = \frac{4Q \cos(\delta_n Y_c) \sin(\delta_n(d/2))}{abdk_1 \delta_n^2 \phi(\delta_n)} \quad (\text{A-57})$$

$$A_{mn} = \frac{16Q \cos(\lambda_m X_c) \sin((1/2)\lambda_m c) \cos(\delta_n Y_c) \sin((1/2)\delta_n d)}{abcdk_1 \beta_{mn} \lambda_m \delta_n \phi(\beta_{mn})} \quad (\text{A-58})$$

热源平面的约化温度可以对式A-55积分得到：

$$\begin{aligned} \bar{\theta}_s = & A_0 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} A_m \frac{\cos(\lambda_m X_c) \sin((1/2)\lambda_m c)}{\lambda_m c} \\ & + 2 \sum_{n=1}^{\infty} A_n \frac{\cos(\delta_n Y_c) \sin((1/2)\delta_n d)}{\delta_n d} \\ & + 4 \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{mn} \frac{\cos(\delta_n Y_c) \sin((1/2)\delta_n d) \cos(\lambda_m X_c) \sin((1/2)\lambda_m c)}{\lambda_m c \delta_n d} \end{aligned} \quad (\text{A-59})$$

其中 X_c 和 Y_c 是热源中心点的坐标。

矩形通道的总热阻可以用热源平面的平均温度来定义：

$$R_t = \frac{\bar{\theta}_s}{Q} = R_{1D} + R_s \quad (\text{A-60})$$

其中一维热阻为：

$$R_{1D} = \frac{1}{ab} \left(\frac{\bar{t}_1}{k_1} + \frac{1}{h_s} \right) \quad (\text{A-61})$$

扩展热阻为：

$$\begin{aligned} R_s = & \frac{2}{Q} \sum_{m=1}^{\infty} A_m \frac{\cos(\lambda_m X_c) \sin((1/2)\lambda_m c)}{\lambda_m c} \\ & + \frac{2}{Q} \sum_{n=1}^{\infty} A_n \frac{\cos(\delta_n Y_c) \sin((1/2)\delta_n d)}{\delta_n d} \\ & + \frac{4}{Q} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{mn} \frac{\cos(\delta_n Y_c) \sin((1/2)\delta_n d) \cos(\lambda_m X_c) \sin((1/2)\lambda_m c)}{\lambda_m c \delta_n d} \end{aligned} \quad (\text{A-62})$$

矩形通道内多热源的形况可以采用叠加方法进行求解^[19,23]。

A.8 顶部平面有同轴热源的矩形通道

在电子器件中，一类最常见的几何形状是矩形通道顶部平面中心处具有热源^[16,27]。这是上一章中的一种特殊情况，如图A-6所示。

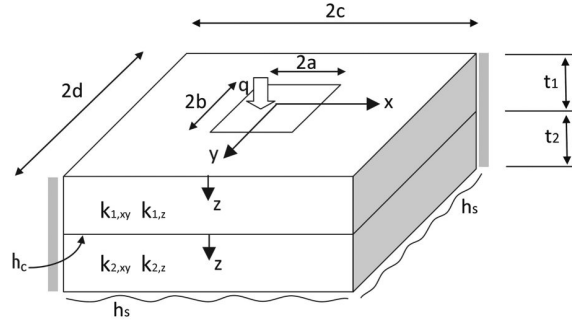


图 A-6 多层矩形通道，正交各向异性系统，顶部热源在矩形的中心，界面接触热导为 h_c

为便于使用对称性，热源和矩形通道的长度和宽度分别被设为 $2a, 2b, 2c, 2d$ ^[26]。问题的特征值为：

$$\lambda_m = \frac{m\pi}{c}, \quad \delta_n = \frac{n\pi}{d}, \quad \beta_{mn} = \sqrt{\lambda_m^2 + \delta_n^2} \quad (\text{A-63})$$

总热阻包含一维热阻和扩展热阻两部分，分别为：

$$R_{1D} = \frac{1}{4cd} \left(\frac{\bar{t}_1}{k_1} + \frac{1}{h_s} \right) \quad (\text{A-64})$$

$$\begin{aligned} R_s = & \frac{1}{2a^2cdk_1} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin^2(a\lambda_m)}{\phi(\lambda_m) \lambda_m^3} + \frac{1}{2b^2cdk_1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin^2(b\delta_n)}{\phi(\delta_n) \delta_n^3} \\ & + \frac{1}{a^2b^2cdk_1} \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin^2(a\lambda_m) \sin^2(b\delta_n)}{\phi(\beta_{mn}) \lambda_m^2 \delta_n^2 \beta_{mn}} \end{aligned} \quad (\text{A-65})$$

A.9 多层系统的求解

矩形通道和圆形通道的解可以扩展到多层系统的情况^[19]。唯一的区别就是扩展函数的定义。多层系统中的扩展函数在下面几个小节给出。值得指出的是，下面不同情况下的截面面积的定义是不同，可以用如下方式计算：

$$A_b = \pi b^2, \quad \text{Base area for the cylindrical flux tube} \quad (\text{A-66})$$

$$A_b = a.b, \quad \text{Base area for the general flux channel} \quad (\text{A-67})$$

$$A_b = 2c2d, \quad \text{Base area for the flux channel with central source} \quad (\text{A-68})$$

为了对多层系统进行建模，Bagnall 等^[69]提出了一些扩展方法，基本的流程都是一样的，但是采用递归方法考虑了每一层对其他层扩展函数的影响。

A.9.1 存在界面接触热阻的复合系统

对于矩形通道或圆形通道存在界面接触热阻的情况，扩展函数为：

$$\phi = \frac{C_1 + C_2 \tanh(\gamma_n \bar{t}_1)}{C_1 \tanh(\gamma_n \bar{t}_1) + C_2} \quad (\text{A-69})$$

其中

$$C_1 = \left[\gamma_n \tanh(\gamma_n \bar{t}_2) + \frac{h_s}{k_2} \right] \quad (\text{A-70})$$

并且

$$C_2 = \frac{k_1}{k_2} \left[\gamma_n \left(1 + \frac{h_s}{h_c} \right) + \left(\frac{h_s}{k_2} + \frac{\gamma_n^2 k_2}{h_c} \right) \tanh(\gamma_n \bar{t}_2) \right] \quad (\text{A-71})$$

此外，一维热阻 R_{1D} 也会随着不同层间的热导率以及接触热阻发生变化：

$$R_{1D} = \frac{1}{A_b} \left(\frac{\bar{t}_1}{k_1} + \frac{1}{h_c} + \frac{\bar{t}_2}{k_2} + \frac{1}{h_s} \right) \quad (\text{A-72})$$

A.9.2 理想热沉、存在界面接触热阻的复合系统

理想热沉 $h_s \rightarrow \infty$ 的扩展函数为：

$$\phi = \frac{1 + ((\gamma_n k_1)/h_c) \tanh(\gamma_n \bar{t}_1) + (k_1/k_2) \tanh(\gamma_n \bar{t}_2) \tanh(\gamma_n \bar{t}_1)}{\gamma_n (k_1/h_c) + (k_1/k_2) \tanh(\gamma_n \bar{t}_2) + \tanh(\gamma_n \bar{t}_1)} \quad (\text{A-73})$$

一维热阻为：

$$R_{1D} = \frac{1}{A_b} \left(\frac{\bar{t}_1}{k_1} + \frac{1}{h_c} + \frac{\bar{t}_2}{k_2} \right) \quad (\text{A-74})$$

A.9.3 没有界面接触热阻的多层系统

理想界面的扩展函数为：

$$\phi = \frac{[\gamma_n \tanh(\gamma_n \bar{t}_2) + (h_s/k_2)] + (k_1/k_2) [\gamma_n + (h_s/k_2) \tanh(\gamma_n \bar{t}_2)] \tanh(\gamma_n \bar{t}_1)}{[\gamma_n \tanh(\gamma_n \bar{t}_2) + (h_s/k_2)] \tanh(\gamma_n \bar{t}_1) + (k_1/k_2) [\gamma_n + (h_s/k_2) \tanh(\gamma_n \bar{t}_2)]} \quad (\text{A-75})$$

一维热阻为：

$$R_{1D} = \frac{1}{A_b} \left(\frac{\bar{t}_1}{k_1} + \frac{\bar{t}_2}{k_2} + \frac{1}{h_s} \right) \quad (\text{A-76})$$

A.9.4 理想热沉、没有界面接触热阻的复合系统

此时扩展函数的形式是最简单的：

$$\phi = \frac{1 + (k_1/k_2) \tanh(\gamma_n \bar{t}_2) \tanh(\gamma_n \bar{t}_1)}{\tanh(\gamma_n \bar{t}_1) + (k_1/k_2) \tanh(\gamma_n \bar{t}_2)} \quad (\text{A-77})$$

一维热阻为：

$$R_{1D} = \frac{1}{A_b} \left(\frac{\bar{t}_1}{k_1} + \frac{\bar{t}_2}{k_2} \right) \quad (\text{A-78})$$

上述式子中面积的部分需要根据所分析的系统代入相应的值。

A.10 影响系数法

Muzychka^[17] 提出了影响系数法 (influence coefficient method)，以求解通道中的扩展热阻问题。在这个方法中，使用了矩阵方法取求解问题。在热源数目超过 5 个时，这个方法可以大幅减少计算时间。不久后，Muzychka 等^[19] 把解扩展到了多层系统中，分别考虑了是否有层间接触热阻的情况。基于这个方法，第 j 个热源引起的约化温度为：

$$\begin{aligned}\bar{\theta}_j &= \bar{\theta}_{1j} + \bar{\theta}_{2j} + \cdots + \bar{\theta}_{N_s j} = Q_1 \bar{f}_{1j} + Q_2 \bar{f}_{2j} + \cdots + Q_{N_s} \bar{f}_{N_s j} \\ &= \sum_{i=1}^{N_s} Q_i \bar{f}_{i,j}\end{aligned}\quad (\text{A-79})$$

其中,

$$\begin{aligned}\bar{f}_{ij} &= B_0^i + \sum_{m=1}^{\infty} B_m^i \frac{2 \cos(\lambda_m X_{c,j}) \sin((1/2)\lambda_m c_j)}{\lambda_m c_j} \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} B_n^i \frac{2 \cos(\delta_n Y_{c,j}) \sin((1/2)\delta_n d_j)}{\delta_n d_j} \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} B_{mn}^i \frac{4 \cos(\delta_n Y_{c,j}) \sin((1/2)\delta_n d_j) \cos(\lambda_m X_{c,j}) \sin((1/2)\lambda_m c_j)}{\lambda_m c_j \delta_n d_j}\end{aligned}\quad (\text{A-80})$$

影响系数 f_{ij} 受到位置和周围热源的面积影响。约化温度可以写成如下的形式:

$$\begin{Bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \theta_3 \\ \vdots \\ \theta_{N_s} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & \cdots & f_{1N_s} \\ f_{21} & f_{22} & \cdots & f_{2N_s} \\ f_{31} & f_{32} & \cdots & f_{3N_s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_{N_s 1} & f_{N_s 2} & \cdots & f_{N_s N_s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_3 \\ \vdots \\ Q_{N_s} \end{bmatrix} \Rightarrow \{\theta\} = [F_{ij}] [Q] \quad (\text{A-81})$$

其中 F_{ij} 为影响系数矩阵。在这个方法中, 存在互易特性:

$$f_{ij} = f_{ji} \quad (\text{A-82})$$

通过利用互易特性, 当热源数目超过 5 时, 计算时间可以大幅减小。总体上, 对于一个有 N 个热源的系统, 需要计算的系数数目为 $(N_s^2 + N_s)/2$.

A.11 在 x, y, z 方向上具有不同热导率的通道

Gholami 和 Bahrami^[72] 等研究了在不同方向上有不同热导率的石墨材料的扩展热阻。他们所讨论的系统为矩形通道, 其中热量只能从热源平面以及热沉平面中离散的几个位置流入和流出。除了热源和热沉的热流出口外, 其余部分都是绝缘的, 如图??所示。他们简要介绍了一个热源入口和一个热沉出口时的解, 之后通过叠加方法, 将这个解扩展到了多热源和多热沉出口的情况。

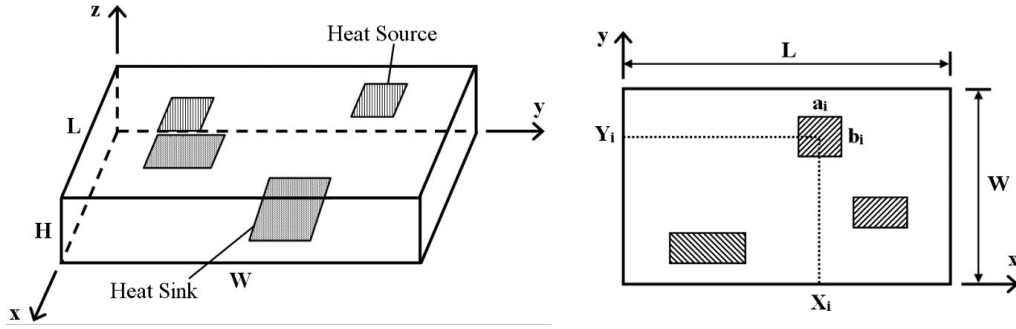


图 A-7 具有多个热点、各向异性的矩形结构

控制方程和边界条件可以用如下的无量纲参数来定义：

$$\epsilon = \frac{W}{L}, \epsilon_H = \frac{H}{L}, x^* = \frac{x}{L}, y^* = \frac{y}{W}, z^* = \frac{z}{H} \quad (A-83)$$

$$a_i^* = \frac{a_i}{L}, b_i^* = \frac{b_i}{W}, q_{i(x,y)}^* = \frac{LW q_{i(x,y)}}{Q_0}, \theta = \frac{Lk_0}{Q_0} (T - T_0)$$

$$\kappa_x = \sqrt{\frac{k_0}{k_x}}, \kappa_y = \sqrt{\frac{k_0}{k_y}}, \kappa_z = \sqrt{\frac{k_0}{k_z}}, R^* = Lk_z R \quad (A-84)$$

其中 Q_0 是任意的参考热流, k_0 是任意的参考热导率。无量纲形式的控制方程和边界条件可以表示为：

$$\nabla^2 \theta = \frac{1}{\kappa_x^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^{*2}} + \frac{1}{\epsilon^2 \kappa_y^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^{*2}} + \frac{1}{\epsilon_H^2 \kappa_z^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial z^{*2}} = 0 \quad (A-85)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial x^*} &= 0 \quad \text{at} \quad x^* = 0, \quad x^* = 1 \\ \frac{\partial \theta}{\partial y^*} &= 0 \quad \text{at} \quad y^* = 0, \quad y^* = 1 \end{aligned} \quad (A-86)$$

热源和热沉边界用第二类边界条件来表示, 沿着热源平面有：

$$\begin{aligned} \frac{\partial \theta}{\partial x^*} &= 0 \quad \text{at} \quad x^* = 0, \quad x^* = 1 \\ \frac{\partial \theta}{\partial y^*} &= 0 \quad \text{at} \quad y^* = 0, \quad y^* = 1 \end{aligned} \quad (A-87)$$

沿着热沉平面,

$$\text{at } z^* = 1 \rightarrow \begin{cases} \frac{\partial \theta}{\partial z^*} = \frac{\kappa_z^2 \epsilon_H}{\epsilon} q'_{i(x,y)}^* & \text{at spotidomain,} \\ \frac{\partial \theta}{\partial z^*} = 0 & \text{at remainder} \end{cases} \quad (A-88)$$

通解的形式可以用分离变量法得到：

$$\begin{aligned}
\theta = & A_0 z^* + \sum_{m=1}^{\infty} \cos(\lambda \kappa_x x^*) [A_m \cosh(\lambda \epsilon_H \kappa_z z^*) + B_m \sinh(\lambda \epsilon_H \kappa_z z^*)] \\
& + \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\delta \epsilon \kappa_y y^*) [A_n \cosh(\delta \epsilon_H \kappa_z z^*) + B_n \sinh(\delta \epsilon_H \kappa_z z^*)] \\
& + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \cos(\lambda \kappa_x x^*) \cos(\delta \epsilon \kappa_y y^*) [A_{mn} \cosh(\beta \epsilon_H \kappa_z z^*) \\
& + B_{mn} \sinh(\beta \epsilon_H \kappa_z z^*)]
\end{aligned} \tag{A-89}$$

其中系统的特征值为：

$$\lambda = \frac{m\pi}{\kappa_x}, \quad \delta = \frac{n\pi}{\kappa_y \epsilon}, \quad \beta = \sqrt{\lambda^2 + \delta^2} \tag{A-90}$$

为了代入沿着热源和热忱平面离散的第二类边界条件，采用了二维傅里叶展开。对于一个只有一个处于顶部平面（用上标 t 表示）的热源，一个处于底部平面（用上标 b 表示）的热沉的系统来说，解中各系数为：

$$\begin{aligned}
A_0 &= \frac{\kappa_z^2 \epsilon_H}{\epsilon} s_{00}^t = \frac{\kappa_z^2 \epsilon_H}{\epsilon} s_{00}^b, \quad B_m = \frac{2\kappa_z s_{m0}^t}{\epsilon \lambda}, \quad B_n = \frac{2\kappa_z s_{0n}^t}{\epsilon \delta} \\
B_{mn} &= \frac{4\kappa_z s_{mn}^t}{\epsilon \beta}, \quad A_m = \frac{2\kappa_z}{\epsilon \lambda} (S_{m0}^b \operatorname{csch}(\lambda \epsilon_H) - s_{m0}^t \coth(\lambda \epsilon_H)) \\
A_n &= \frac{2\kappa_z}{\epsilon \delta} (S_{0n}^b \operatorname{csch}(\delta \epsilon_H) - s_{0n}^t \coth(\delta \epsilon_H)) \\
A_{mn} &= \frac{4\kappa_z}{\epsilon \beta} (S_{mn}^b \operatorname{csch}(\beta \epsilon_H) - s_{mn}^t \coth(\beta \epsilon_H))
\end{aligned} \tag{A-91}$$

其中多出的系数是通过傅里叶展开获得的：

$$\begin{aligned}
s_{00}^{t/b} &= \iint_{t/b} q_{(x,y)}^* dx^* dy^*, \quad s_{m0}^{t/b} = \iint_{t/b} q_{(x,y)}^* \cos(\lambda \kappa_x x^*) dx^* dy^* \\
s_{0n}^{t/b} &= \iint_{t/b} q_{(x,y)}^* \cos(\delta \epsilon \kappa_y y^*) dy^* dx^* \\
s_{mn}^{t/b} &= \iint_{t/b} q_{(x,y)}^* \cos(\lambda \kappa_x x^*) \cos(\delta \epsilon \kappa_y y^*) dx^* dy^*
\end{aligned} \tag{A-92}$$

A.12 热导率随温度变化的情况

一些半导体材料的热导率是依赖于温度的。在实际系统的热分析中，应该考虑热导率的温度依赖关系。Bagnall 等^[12] 通过基尔霍夫变换，求解了温度依赖热导率情况下的热传导问题。非线性稳态的热传导方程为：

$$\nabla \cdot (k \nabla T) = 0 \quad (\text{A-93})$$

其中 $k = k(T)$ 是依赖于温度的。为把这个方程转换为拉普拉斯方程，可以定义一个表观温度 θ_a ：

$$\theta_a = T_0 + \frac{1}{k_0} \int_{T_0}^T k(\tau) d\tau \quad (\text{A-94})$$

基于表观温度的定义，非线性的热传导方程可以转换为拉普拉斯方程：

$$\nabla^2 \theta_a = 0 \quad (\text{A-95})$$

所有的边界条件都应该被相应用表观温度来表示。基于上述的转换，可以直接用之前的求解办法解决这个问题。最终，得到的表观温度应该通过基尔霍夫逆变换转换回非线性的温度。方法的具体流程可以参考文献^[12]。

A.12.1 第一类边界条件

为了便于阐释对第一类边界条件做基尔霍夫变换的过程，可以假设热导率随温度线性变化 $k(T) = U + VT$ 。这种情况下，基于表观温度的表达式，可以获得变换后的第一类边界条件：

$$\begin{aligned} \theta_a &= T_0 + \frac{1}{k_0} \int_{T_0}^T k(\tau) d\tau = T_0 + \frac{1}{k_0} \int_{T_0}^T (U + V\tau) d\tau \\ &= T_0 + \frac{1}{k_0} \left(UT + \frac{1}{2} VT^2 - UT_0 - \frac{1}{2} VT_0^2 \right) \end{aligned} \quad (\text{A-96})$$

可以看到，表观温度在热导率随温度变化的问题中，被转换成了真实温度的复杂的表达式。因此，对第一类边界条件采用基尔霍夫变换后会在扩展热阻问题的求解过程中增加一些复杂度。

A.12.2 第二类边界条件

第二类边界条件为热流边界条件：

$$-\rightarrow \mathbf{q} = -\rightarrow \mathbf{n} \cdot k \nabla T \quad (\text{A-97})$$

基于表观温度，第二类边界可以写为：

$$k \nabla T = k_0 \nabla \theta_a \quad (\text{A-98})$$

因此，基于表观温度的热流保持了和真实温度下的热流的同样形式：

$$-\rightarrow \mathbf{q} = -\rightarrow \mathbf{n} \cdot k \nabla T = -\rightarrow \mathbf{n} \cdot k_0 \nabla \theta_a \quad (\text{A-99})$$

A.12.3 第三类边界条件

第三类边界条件可以写为：

$$-\rightarrow \mathbf{n} \cdot k \nabla T = h (T - T_\infty) \quad (\text{A-100})$$

正如上部分所讨论的，应该分别满足 $-\rightarrow \mathbf{n} \cdot k \nabla T = -\rightarrow \mathbf{n} \cdot k_0 \nabla \theta_a$ 以及 $T = K^{-1} \{ \theta_a \} \neq \theta_a$ 。因此对流边界条件是 θ_a 的非线性函数：

$$-\rightarrow \mathbf{n} \cdot k_0 \nabla \theta_a = h (K^{-1} \{ \theta_a \} - T_\infty) \neq h (\theta_a - T_\infty) \quad (\text{A-101})$$

由于这种非线性，基尔霍夫变换不能够应用于第三类边界条件中。最近，Bagnall 等^[12] 提出了一种近似求解第三类边界条件的方法。在矩形热流通道和圆形热流通道 的情况下，真实温度和表观温度都被假设为与热沉平面温度近似相等。为了获得何时的参考温度 T_0 ，这个问题被假设为一维、顶部为热源平面的热流边界条件，底部为热沉平面的对流换热边界条件。因此，参考温度被假设为：

$$\theta_a \approx T_0 = \bar{T}_{\text{base}} = \frac{Q}{A_b} \frac{1}{h_s} + T_\infty \quad (\text{A-102})$$

半导体中，热导率的温度依赖关系一般可以表示为：

$$k(T) = k_{\text{ref}} \left(\frac{T_{\text{ref}}}{T} \right)^n \quad (\text{A-103})$$

对于多层系统，应用基尔霍夫变换的限制为在各层中，温度依赖关系中的指数 n 应该相等。在热导率随温度变化的情况下，矩形热流通道或者圆形热流通道中的温度可以通过基尔霍夫逆变换得到。对于 $n > 1$ 的半导体，真实温度为：

$$T = K \{ \theta_a \}^{-1} = T_0 \left[1 + \frac{(\theta_a - T_0)(1 - n)}{T_0} \right]^{(1/1-n)} \quad (\text{A-104})$$

具体的过程可以参考 Bagnall 等人的工作^[12]。

A.13 沿热沉平面对流换热系数改变的二维热流通道

热沉平面的对流换热系数在过去的研究中都被认为是不变的。然而，热沉形状的设计是为了将热量从系统的热点中散去。因此，在大多数电子器件中，热沉平面的换热系数都不是常数。Razavi 等^[8,15] 考虑了沿热沉平面换热系数不同的热流通道。他们研究的系统如图A-8,-A-10所示。

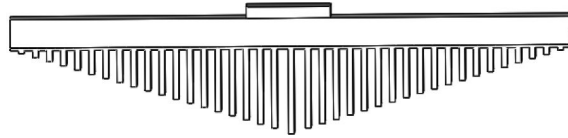


图 A-8 变换热系数的对称热流通道

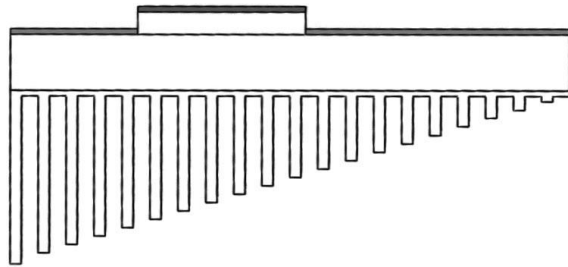


图 A-9 变换热系数的非对称的热流通道

如上文所提到的，热沉边界条件是变换热系数的对流冷却边界：

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial z} \right|_{z=t} = -\frac{h(x)}{k} \theta \quad (\text{A-105})$$

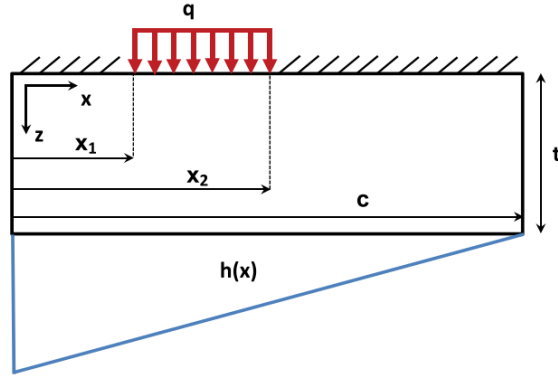


图 A-10 沿热沉平面换热系数呈线性变化的热流通道

通解的形式为：

$$\theta(x, z) = \sum_{n=1}^{\infty} \cos(\lambda_n x) (C_n \cosh(\lambda_n z) + D_n \sinh(\lambda_n z)) \quad (\text{A-106})$$

代入右侧边界条件，可以得到：

$$\lambda_n \sin(\lambda_n c) = \frac{h_e}{k} \cos(\lambda_n c) \quad (\text{A-107})$$

设 $Bi_e = (h_e c/k)$ 及 $\sigma_n = \lambda_n c$ ，则系统的特征值可以写成：

$$\delta_n \sin(\delta_n) = Bi_e \cos(\delta_n), n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A-108})$$

通过代入热沉平面的边界条件，可以建立 C_n 和 D_n 和扩展函数的关系：

$$\begin{aligned} D_n &= -C_n \left(\frac{\lambda_n \sinh(\lambda_n t) + (h(x)/k) \cosh(\lambda_n t)}{\lambda_n \cosh(\lambda_n t) + (h(x)/k) \sinh(\lambda_n t)} \right) \\ D_n &= -C_n \phi_n(x) \end{aligned} \quad (\text{A-109})$$

由于换热系数依赖于位置 x ，扩展函数也是 x 的函数。对于多层系统，扩展函数的形式会更加复杂。现在，通解中唯一的未知数是 C_n ：

$$\theta(x, z) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \cos(\delta_n(x/c)) (\cosh(\delta_n(z/c)) - \phi_n(x) \sinh(\delta_n(z/c))) \quad (\text{A-110})$$

为了得到 C_n ，不能够采用正交各向异性的性质，因为此时扩展函数是依赖于 x 的。作者采用了最小二乘法去对热源平面的边界条件：

$$\begin{aligned}
I_N = & \int_0^{x_1} \left[-k \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=0} - f(x) \right] dx \\
& + \int_{x_1}^{x_2} \left[-k \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=0} - g(x) \right]^2 dx \\
& + \int_{x_2}^c \left[-k \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=0} - p(x) \right]^2 dx
\end{aligned} \tag{A-111}$$

其中，

$$\begin{aligned}
f(x) &= -k \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, 0 < x < x_1 \\
g(x) &= -k \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=0} = q, x_1 < x < x_2 \\
p(x) &= -k \frac{\partial \theta}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, x_2 < x < c
\end{aligned} \tag{A-112}$$

把式A-112代入式A-111中，得到：

$$\begin{aligned}
I_N = & \int_0^{x_1} \left[-k \sum_{n=1}^{\infty} -C_n \left(\frac{\delta_n}{c} \right) \phi_n(x) \cos \left(\frac{\delta_n x}{c} \right) - 0 \right]^2 dx \\
& + \int_{x_1}^{x_2} \left[-k \sum_{n=1}^{\infty} -C_n \left(\frac{\delta_n}{c} \right) \phi_n(x) \cos \left(\frac{\delta_n x}{c} \right) - q \right]^2 dx \\
& + \int_{x_2}^c \left[-k \sum_{n=1}^{\infty} -C_n \left(\frac{\delta_n}{c} \right) \phi_n(x) \cos \left(\frac{\delta_n x}{c} \right) - 0 \right]^2 dx
\end{aligned} \tag{A-113}$$

最后一个未知数 C_n 可以用数值程序去通过最小化 I_N 来求解：

$$\frac{\partial I_N}{\partial C_n} = 0 \quad n = 1, 2, \dots, N \tag{A-114}$$

最终，热阻可以通过热源平均温度来定义：

$$R_t = \frac{\bar{\theta}_s}{Q} = \frac{c}{q(x_2 - x_1)^2 d} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{C_n (\sin((\delta_n x_2/c)) - \sin((\delta_n x_1/c)))}{\delta_n} \tag{A-115}$$

其中 d 是热流通道的宽度。

A.14 解析解和有限元仿真的对比

在这一章中，通过一个案例比较了无穷级数解析解和有限元分析的结果^[19]。这个案例是一个高电子迁移率的氮化镓晶体管，其几何和排布情况如图A-11所示。

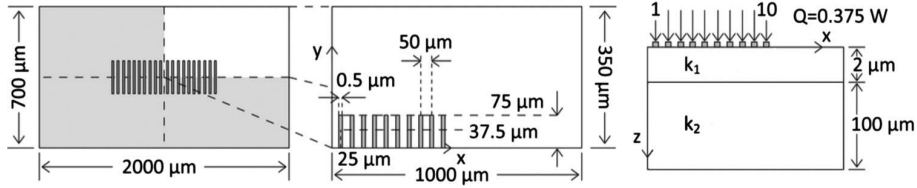


图 A-11 10 个热源的两层氮化镓排布

在器件的顶层，有 10 个长度为 0.5 mm，宽度为 75 mm，彼此距离为 50 mm 的热源。器件的顶层是各项同性的，热导率为 $k_1 = 150 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}$ 。底层是正交各向异性的， $k_{2,xy} = 490 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}$, $k_{2,z} = 390 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}$ 。两层之间存在界面热导 $h_c = 9.28 \times 10^7 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}$ ，热沉的对流换热系数和温度分别为： $h_s = 3.27 \times 10^5 \text{ W/m}^2\text{K}$, $T_f = 20^\circ\text{C}$ 。分别由解析解和 FEA 计算的热源平均以及质心温度如表A-1所示^[19]。两种方法结果的差别小于 0.1%。

表 A-1 热源平均及质心温度

Source number	Average temperature, °C		Centroidal temperature, °C	
	Analytical	FEA	Analytical	FEA
1	132.071	131.988	136.818	136.869
2	131.761	131.678	136.506	136.556
3	131.131	131.048	135.874	135.923
4	130.164	130.080	134.900	134.948
5	128.826	128.741	133.551	133.599
6	127.067	126.982	131.773	131.823
7	124.808	124.723	129.481	129.530
8	121.912	121.828	126.520	126.570
9	118.094	118.010	122.562	122.612
10	112.515	112.431	116.603	116.652

为比较两种方法的计算效率，图A-12展示了这两种方法所需的计算时间。无论热源数目如何改变，解析模型大概只需要 22s 的时间去计算，然而当热源数目从 2 个增加到 10 个时，FEA 所需要的时间从 4 分钟增加到了 8 小时。因为热源的尺度相比于系统其他的特征长度很小，因此必须在热源附近画极密的网格。尽管 FEA 方法更加灵活，但是它的计算时间要远长于解析模型，尤其是在包括多个离散热源的热传导问题中。

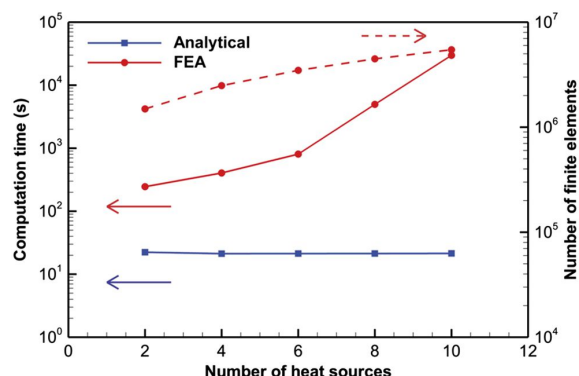


图 A-12 解析方法和有限元方法所需的计算时间

A.15 总结

在过去 60 年间，研究人员针对扩展热阻的很多方面展开了研究。由于问题的复杂性，每篇文献所研究的对象，都在几何、性质或者边界条件上做出了一定程度的简化。尽管提出了大量的模型，但仍有一些缺陷是应该被解决的。作者认为，以下几种情况是值得进一步研究的：

1. 边界条件更加灵活的情况，比如沿着热沉平面分别指定不同的换热系数。在电子器件中，这是一个很实际的边界条件。比如热沉平面与冷却通道相连，或者系统中存在不同高度或者距离不同的肋片时。
2. 在热源和热沉平面具有多个指定的热流进入或流出的多层系统。
3. 在热沉平面热传递特性更加复杂的多层系统。
4. 考察在热传递情况更加复杂的多层系统中，正交各向异性性质和热导率的温度依赖性对问题的影响。
5. 此外，进一步研究不同方向具有不同热导率的情况也会进一步增加以往发表文章的价值。

参考文献

- [1] S. Lee, S. Song, V. Au, and K.P. Moran. Constriction/spreading resistance model for electronics packaging. *ASME/JSME Thermal Engineering Conference*, 4:199–206, 1995. cited By 288.
- [2] E. Sadeghi, M. Bahrami, and N. Djilali. Analytic solution of thermal spreading resistance: Generalization to arbitrary-shape heat sources on a half-space. volume 1, pages 265–275, 2009. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-70149087984&partnerID=40&md5=41af7cdaa6f5b5ac4ebabbe8830f8893>. cited By 2.
- [3] H.S. Carslaw and J.C. Jaeger. *Conduction of Heat in Solids*, 1959. cited By 25962.

- [4] Y.S. Muzychka, M.M. Yovanovich, and J.R. Culham. Thermal spreading resistance in compound and orthotropic systems. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 18(1):45–51, 2004. doi: 10.2514/1.1267. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-1142293789&doi=10.2514%2f1.1267&partnerID=40&md5=48f8f48d6d93afab59943d9cc57b88db>. cited By 70.
- [5] M.M. Yovanovich and E.E. Marotta. Thermal spreading and contact resistances. *Heat Transfer Handbook*, pages 261–393, 2003. cited By 122.
- [6] B.B. Mikic and W.M. Rohsenow. Thermal contact resistance. *Thermal Contact Resistance*, 1966. cited By 89.
- [7] D.P. Kennedy. Spreading resistance in cylindrical semiconductor devices. *Journal of Applied Physics*, 31(8):1490–1497, 1960. doi: 10.1063/1.1735869. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0000296338&doi=10.1063%2f1.1735869&partnerID=40&md5=e72e7e98b0677e62030a83807e769ddf>. cited By 186.
- [8] M. Razavi, Y.S. Muzychka, and S. Kocabiyik. Thermal resistance in a rectangular flux channel with nonuniform heat convection in the sink plane. *Journal of Heat Transfer*, 137(11), 2015. doi: 10.1115/1.4030885. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84939127717&doi=10.1115%2f1.4030885&partnerID=40&md5=aa915687875c5e1a0570f6ff1d331f22>. cited By 7.
- [9] K.A. Martin, M.M. Yovanovich, and Y.L. Chow. Method of moments formulation of thermal constriction resistance of arbitrary contacts. 1984. doi: 10.2514/6.1984-1745. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85088620208&doi=10.2514%2f6.1984-1745&partnerID=40&md5=9d80053c008f21fe93de7156e8472beb>. cited By 5.
- [10] B.J. Rozon, P.F. Galpin, G.E. Schneider, and M.M. Yovanovich. Effect of geometry on the contact conductance of contiguous interfaces. 1984. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0021316784&partnerID=40&md5=0a9ac0f09ca213e5f6a2395c48baaebed>. cited By 3.
- [11] A.L. Wang and C.P. Yan. Influence of heat source characteristics on dimensionless thermal spreading resistance. volume 402, 2012. doi: 10.1088/1742-6596/402/1/012045. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84874314359&doi=10.1088%2f1742-6596%2f402%2f1%2f012045&partnerID=40&md5=f6f37743d8d7d2eaac615a8fe86dc7ac>. cited By 1.
- [12] K.R. Bagnall, Y.S. Muzychka, and E.N. Wang. Application of the kirchhoff transform to thermal spreading problems with convection boundary conditions. *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology*, 4(3):408–420, 2014. doi: 10.1109/TCPMT.2013.2292584. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84896394109&doi=10.1109/TCPMT.2013.2292584>.

1109%2fTCPMT.2013.2292584&partnerID=40&md5=00ff560353691b7f72d2b233c580c88b. cited By 33.

- [13] G.N. Ellison. The thermal design of an lsi single-chip package. *IEEE Transactions on Parts, Hybrids, and Packaging*, 12(4):371–378, 1976. doi: 10.1109/TPHP.1976.1135155. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0017246441&doi=10.1109%2fTPHP.1976.1135155&partnerID=40&md5=94dec965217e431b34bad31753ad102b>. cited By 28.
- [14] N.J. Fisher and M.M. Yovanovich. Thermal constriction resistance of sphere/layered flat contacts: Theory and experiment. *Journal of Heat Transfer*, 111(2):249–256, 1989. doi: 10.1115/1.3250671. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0024664775&doi=10.1115%2f1.3250671&partnerID=40&md5=db63d7b9db920205727141b004e55527>. cited By 14.
- [15] M. Razavi, Y.S. Muzychka, and S. Kocabiyik. Thermal spreading resistance in a flux channel with arbitrary heat convection in the sink plane. volume 8B, 2014. doi: 10.1115/IMECE2014-37364. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84926483601&doi=10.1115%2fIMECE2014-37364&partnerID=40&md5=ab246692f865f60daa30ad31d77453c5>. cited By 3.
- [16] Y.S. Muzychka, M.M. Yovanovich, and J.R. Culham. Influence of geometry and edge cooling on thermal spreading resistance. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 20(2):247–255, 2006. doi: 10.2514/1.14807. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-33744533680&doi=10.2514%2f1.14807&partnerID=40&md5=012de3942c2f0473bfc77a2d2fe13b58>. cited By 52.
- [17] Y.S. Muzychka. Influence coefficient method for calculating discrete heat source temperature on finite convectively cooled substrates. *IEEE Transactions on Components and Packaging Technologies*, 29(3):636–643, 2006. doi: 10.1109/TCAPT.2006.880477. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-33748531292&doi=10.1109%2fTCAPT.2006.880477&partnerID=40&md5=bf41ea3231a8a1aace705f730b434009>. cited By 42.
- [18] M.M. Yovanovich, C.H. Tien, and G.E. Schneider. General solution of constriction resistance within a compound disk. *Progress in Astronautics and Aeronautics: Heat Transfer, Thermal Control, and Heat Pipes*, 70:47–62, 1980. cited By 24.
- [19] Y.S. Muzychka, K.R. Bagnall, and E.N. Wang. Thermal spreading resistance and heat source temperature in compound orthotropic systems with interfacial resistance. *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology*, 3(11):1826–1841, 2013. doi: 10.1109/TCPMT.2013.2269273. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-4888007601&doi=10.1109%2fTCPMT.2013.2269273&partnerID=40&md5=baade5bc975e4af371dbf987b5e0dd94>. cited By 54.

- [20] J.R. Dryden, M.M. Yovanovich, and A.S. Deakin. The effect of coatings on the steady-state and short time constriction resistance for an arbitrary axisymmetric flux. *Journal of Heat Transfer*, 107(1):33–38, 1985. doi: 10.1115/1.3247398. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0022012521&doi=10.1115%2f1.3247398&partnerID=40&md5=f02adb383dc5ce273c58d63cfcf1e181>. cited By 11.
- [21] M.M. Yovanovich. Thermal resistances of circular source on finite circular cylinder with side and end cooling. *Journal of Electronic Packaging, Transactions of the ASME*, 125(2 SPEC.): 169–177, 2003. doi: 10.1115/1.1568124. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0141718600&doi=10.1115%2f1.1568124&partnerID=40&md5=fa51e968456d0f956502e820e825cb68>. cited By 35.
- [22] D. Guan, M. Marz, and J. Liang. Analytical solution of thermal spreading resistance in power electronics. *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology*, 2(2):278–285, 2012. doi: 10.1109/TCPMT.2011.2162515. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84859073057&doi=10.1109%2fTCPMT.2011.2162515&partnerID=40&md5=497c144559224b0a12354ad71b342f2c>. cited By 12.
- [23] Y.S. Muzychka, J.R. Culham, and M.M. Yovanovich. Thermal spreading resistance of eccentric heat sources on rectangular flux channels. *Journal of Electronic Packaging, Transactions of the ASME*, 125(2 SPEC.):178–185, 2003. doi: 10.1115/1.1568125. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0141495195&doi=10.1115%2f1.1568125&partnerID=40&md5=87a543f6724645725e3d9a11c16905d6>. cited By 174.
- [24] H.K. Yun, Y.K. Seo, and H.R. Gwang. Evaluation of spreading thermal resistance for heat generating multi-electronic components. volume 2006, pages 258–264, 2006. doi: 10.1109/ITHERM.2006.1645351. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-33845563711&doi=10.1109%2fITHERM.2006.1645351&partnerID=40&md5=614b338f516c38c31ff63f6636444ee7>. cited By 5.
- [25] S. Karmalkar, P.V. Mohan, H.P. Nair, and R. Yeluri. Compact models of spreading resistances for electrical/thermal design of devices and ics. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 54(7): 1734–1743, 2007. doi: 10.1109/TED.2007.899371. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-34447316993&doi=10.1109%2fTED.2007.899371&partnerID=40&md5=9fc0928d9bb416f8c90b96eaaaf6655b>. cited By 19.
- [26] Y.S. Muzychka. Thermal spreading resistance in compound orthotropic circular disks and rectangular channels with interfacial resistance. 2013. doi: 10.2514/6.2013-2641. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85087534754&doi=10.2514%2f6.2013-2641&partnerID=40&md5=d279d91a604a03288fe1c50e775c8a2e>. cited By 3.

- [27] S. Dong, Q. Zhou, M. Wang, X. Jiang, and J. Yang. Analysis of thermal spreading resistance in high power led package and its design optimization. pages 1056–1060, 2011. doi: 10.1109/ICEPT.2011.6067010. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-81355139551&doi=10.1109%2fICEPT.2011.6067010&partnerID=40&md5=d797f633edd6e9ca4eac614b395e619e>. cited By 9.
- [28] G.N. Ellison. Maximum thermal spreading resistance for rectangular sources and plates with nonunity aspect ratios. *IEEE Transactions on Components and Packaging Technologies*, 26(2):439–454, 2003. doi: 10.1109/TCAPT.2003.815088. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0042887579&doi=10.1109%2fTCAPT.2003.815088&partnerID=40&md5=cecb2156276ae145a1516a44b13693cb>. cited By 69.
- [29] T.T. Lam and W.D. Fischer. Thermal resistance in rectangular orthotropic heat spreaders. volume 26 3, pages 891–896, 1999. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0347032687&partnerID=40&md5=478134276f4c423d3837ab9679b469cf>. cited By 8.
- [30] A.G. Kokkas. Thermal analysis of multiple-layer structures. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 21(11):674–681, 1974. doi: 10.1109/T-ED.1974.17993. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0016127309&doi=10.1109%2fT-ED.1974.17993&partnerID=40&md5=da1210335af3a0de17faa69380d21378>. cited By 123.
- [31] W.B. Joyce. Thermal resistance of heat sinks with temperature-dependent conductivity. *Solid State Electronics*, 18(4):321–322, 1975. doi: 10.1016/0038-1101(75)90085-4. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0016496045&doi=10.1016%2f0038-1101%2875%2990085-4&partnerID=40&md5=4dda95d24e7fa3776f5edbe01548df89>. cited By 109.
- [32] F. Bonani and G. Ghione. On the application of the kirchhoff transformation to the steady-state thermal analysis of semiconductor devices with temperature-dependent and piecewise inhomogeneous thermal conductivity. *Solid State Electronics*, 38(7):1409–1412, 1995. doi: 10.1016/0038-1101(94)00255-E. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0029345471&doi=10.1016%2f0038-1101%2894%2900255-E&partnerID=40&md5=7fdbebbd8791f5c8e4a92a1d6aad60e4>. cited By 69.
- [33] P. Hui and H.S. Tan. On the effect of nonlinear boundary conditions for heat conduction in diamond heat spreaders with temperature-dependent thermal conductivity. *IEEE Transactions on Components Packaging and Manufacturing Technology Part A*, 20(4):537–540, 1997. doi: 10.1109/95.650945. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0031352891&doi=10.1109%2f95.650945&partnerID=40&md5=499a685dd99ea0a18cf0ab68503902c0>. cited By 5.

- [34] Gordon Ellison. Extensions of a closed form method for substrate thermal analyzers to include thermal resistances from source-to-substrate and source-to-ambient. pages 140–148, 1991. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0026105925&partnerID=40&md5=242e2bd3922ebed0647f18910c978b27>. cited By 6.
- [35] Y.S. Muzychka, M. Stevanović, and M.M. Yovanovich. Thermal spreading resistances in compound annular sectors. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 15(3):354–359, 2001. doi: 10.2514/2.6615. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0035620721&doi=10.2514%2f2.6615&partnerID=40&md5=70691da018f946251e665b9165c3e360>. cited By 18.
- [36] K.J. Negus and M.M. Yovanovich. Constriction resistance of circular flux tubes with mixed boundary conditions by linear superposition of neumann solutions. 1984. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0021312275&partnerID=40&md5=bedd9508e9b110e72b2ffdc78ceb5d6b>. cited By 16.
- [37] M.M. Yovanovich, J.R. Culham, and P.M. Teertstra. Modeling thermal resistances of diamond spreaders on copper heat sinks. *Proceedings of the International Conference on Electronics Packaging*, pages 318–332, 1996. cited By 2.
- [38] T.F. Lemczyk and M.M. Yovanovich. Thermal constriction resistance with convective boundary conditions-1. half-space contacts. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31(9): 1861–1872, 1988. doi: 10.1016/0017-9310(88)90200-1. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0024073668&doi=10.1016%2f0017-9310%2888%2990200-1&partnerID=40&md5=3883c4b92190becda87edf7c37e7cc3f>. cited By 19.
- [39] T.F. Lemczyk and M.M. Yovanovich. Thermal constriction resistance with convective boundary conditions-2. layered half-space contacts. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31(9):1873–1883, 1988. doi: 10.1016/0017-9310(88)90201-3. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0024071082&doi=10.1016%2f0017-9310%2888%2990201-3&partnerID=40&md5=06ccb79a90f05404d7e704cc18c71b82>. cited By 14.
- [40] M.M. Yovanovich, J.R. Culham, and P. Teertstra. Analytical modeling of spreading resistance in flux tubes, half spaces, and compound disks. *IEEE Transactions on Components Packaging and Manufacturing Technology Part A*, 21(1):168–176, 1998. doi: 10.1109/95.679046. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0032026019&doi=10.1109%2f95.679046&partnerID=40&md5=79c9d8c5977c48f807dd856dd687e212>. cited By 67.
- [41] M.G. Cooper, B.B. Mikic, and M.M. Yovanovich. Thermal contact conductance. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 12(3):279–300, 1969. doi: 10.1016/0017-9310(69)90011-8. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0014479476&doi=10.1016%2f0017-9310%2869%2990011-8&partnerID=40&md5=a1bb6cf0b7ee837180fe654a4eca4862>. cited By 675.

- [42] M.M. Yovanovich. Overall constriction resistance between contacting rough, wavy surfaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 12(11):1517–1520, 1969. doi: 10.1016/0017-9310(69)90031-3. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0037877438&doi=10.1016%2f0017-9310%2869%2990031-3&partnerID=40&md5=ea3d6a403dda42b9f487c0fba5b08829>. cited By 38.
- [43] M.M. Yovanovich. Thermal constriction resistance between contacting metallic paraboloids: Application to instrument bearings. *Proceedings of Heat Transfer and Spacecraft Thermal Control*, 24:337–358, 1971. cited By 26.
- [44] M.M. Yovanovich. General expressions for constriction resistances due to arbitrary flux distributions at non-symmetric, coaxial contacts. pages 1–7, 1975. doi: 10.2514/6.1975-188. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85072734072&doi=10.2514%2f6.1975-188&partnerID=40&md5=4679f68e359f8796b41806f5bd392fe3>. cited By 3.
- [45] M.M. Yovanovich and G.E. Schneider. Thermal constriction resistance due to a circular annular contact. *Thermal Constriction Resistance due to a Circular Annular Contact*, pages 76–142, 1976. cited By 6.
- [46] M.M. Yovanovich, S.S. Burde, and J.C. Thompson. Thermal constriction resistance of arbitrary planar contacts with constant flux. *Thermophysics of Spacecraft and Outer Planet Entry Probes*, 56:127–139, 1977. cited By 47.
- [47] M.M. Yovanovich. General thermal constriction parameter for annular contacts on circular flux tubes. *AIAA Journal*, 14(6):822–824, 1976. doi: 10.2514/3.7158. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0016963664&doi=10.2514%2f3.7158&partnerID=40&md5=747f8988da5f0e095d5de6c47608da48>. cited By 8.
- [48] G.E. Schneider, A.B. Strong, and M.M. Yovanovich. "transient heat flow from a thin circular disk". *Proc. AIAA 10th Thermophysics Conf.*, 1975. cited By 4.
- [49] G.E. Schneider, A.B. Strong, and M.M. Yovanovich. Transient thermal response of two bodies communicating through a small circular contact area. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 20(4):301–308, 1977. doi: 10.1016/0017-9310(77)90150-8. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0017478769&doi=10.1016%2f0017-9310%2877%2990150-8&partnerID=40&md5=497b87e5cde6519bdc845be8db3ca168>. cited By 30.
- [50] S.S. Burde and M.M. Yovanovich. Thermal resistance at smooth-sphere/rough-flat contacts: Theoretical analysis. *Progress in Astronautics and Aeronautics, Thermophysics and Thermal Control*, 65:83–102, 1978. cited By 9.
- [51] M.M. Yovanovich, K.J. Negus, and J.C. Thompson. Transient temperature rise of arbitrary contacts with uniform flux by surface element methods. *22nd Aerospace Sciences Meeting*, 1984. cited By 2.

- [52] P.J. Turyk and M.M. Yovanovich. Transient constriction resistance for elemental flux channels heated by uniform flux sources. *22nd Heat Transfer Conference*, 1984. cited By 1.
- [53] H.H. Yovanovich, J.C. Thompson, and K.J. Negus. Thermal resistance of arbitrarily shaped contacts. pages 1072–1082, 1983. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0020901656&partnerID=40&md5=b744c476900f8465b6d1660a50107923>. cited By 7.
- [54] K.J. Negus and M.M. Yovanovich. Application of the method of optimized images to steady three-dimensional conduction problems. 1984. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0021604441&partnerID=40&md5=9a2798b3fca6c94de9fc879dbcdad530>. cited By 10.
- [55] K.J. Negus, M.M. Yovanovich, and J.W. Devaal. Development of thermal constriction resistance for anisotropic rough surfaces by the method of infinite images. 1985. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0021865805&partnerID=40&md5=e996b4c15a6f97470384773c3c1e0105>. cited By 5.
- [56] H.J. Saabas and M.M. Yovanovich. Application of sem and superposition techniques to circular microcontacts distributed over elliptical contours on circular flux tubes and half-spaces. *20th Thermophysics Conference*, 1985. cited By 2.
- [57] K.J. Negus, M.M. Yovanovich, and J.V. Beck. On the nondimensionalization of constriction resistance for semi-infinite heat flux tubes. *Journal of Heat Transfer*, 111(3):804–807, 1989. doi: 10.1115/1.3250755. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0024715892&doi=10.1115%2f1.3250755&partnerID=40&md5=fb4b514ecf94708916b4640ba32ccfe1>. cited By 63.
- [58] M.M. Yovanovich, G.R. McGee, and M.H. Schankula. Ellipsoidal thermal constriction model for crowned cylinder/flat elastic contacts. 1984. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0021308597&partnerID=40&md5=94afde8156bea62c8ca9ef6cb91f8b51>. cited By 2.
- [59] K.J. Negus, M.M. Yovanovich, and J.C. Thompson. Thermal constriction resistance of circular contacts on coated surfaces: Effect of contact boundary conditions. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1985. cited By 3.
- [60] Y.S. Muzychka, M.M. Yovanovich, and J.R. Culham. Thermal spreading resistances in rectangular flux channels part i - geometric equivalences. 2003. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84896800143&partnerID=40&md5=7b930e2f2c0c22c433cb1837cb09a57d>. cited By 13.
- [61] Y.S. Muzychka, J.R. Culham, and M.M. Yovanovich. Thermal spreading resistances in rectangular flux channels part ii - edge cooling. 2003. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84896791651&partnerID=40&md5=3abb125e4b7f6cf2f8fab9eb1cd6dcd1>. cited By 23.

- [62] Y. Rahmani and H. Shokouhmand. A numerical study of thermal spreading/constriction resistance of silicon. pages 482–486, 2012. doi: 10.1109/ITHERM.2012.6231470. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84866165322&doi=10.1109%2fITHERM.2012.6231470&partnerID=40&md5=b513629071540bbe7405de613c9149cd>. cited By 6.
- [63] Y.S. Muzychka and M.M. Yovanovich. Thermal resistance models for non-circular moving heat sources on a half space. *Journal of Heat Transfer*, 123(4):624–632, 2001. doi: 10.1115/1.1370516. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0035423045&doi=10.1115%2f1.1370516&partnerID=40&md5=fc7c94f903447306144c573be333ce68>. cited By 44.
- [64] S.K. Bhullar and J.L. Wegner. Thermal spreading resistance of isoflux hyperellipse on a half-space. *Proceedings of the International MultiConference of Engineers and Computer Scientists*, 2, 2009. cited By 1.
- [65] E. Sadeghi, M. Bahrami, and N. Djilali. Thermal spreading resistance of arbitrary-shape heat sources on a half-space: A unified approach. *IEEE Transactions on Components and Packaging Technologies*, 33(2):267–277, 2010. doi: 10.1109/TCAPT.2010.2043843. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-77953475943&doi=10.1109%2fTCAPT.2010.2043843&partnerID=40&md5=9f8ca069c845f3547f6d9300ad2d6572>. cited By 16.
- [66] T.M. Ying and K.C. Toh. Heat spreading resistance model for anisotropic thermal conductivity materials in electronic packaging. volume 1, pages 314–321, 2000. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0033694476&partnerID=40&md5=edc51b0afb9b69efd70f8c9d2222797b>. cited By 25.
- [67] Y.S. Muzychka, M.M. Yovanovich, and J.R. Culham. Application of thermal spreading resistance in compound and orthotropic systems. 2001. doi: 10.2514/6.2001-366. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85088759850&doi=10.2514%2f6.2001-366&partnerID=40&md5=d2fde35d41791195d6589da214a4b8be>. cited By 9.
- [68] M.M. Yovanovich. Four decades of research on thermal contact, gap, and joint resistance in microelectronics. *IEEE Transactions on Components and Packaging Technologies*, 28(2): 182–206, 2005. doi: 10.1109/TCAPT.2005.848483. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-21044442560&doi=10.1109%2fTCAPT.2005.848483&partnerID=40&md5=1bfc85fa3d67f58ca15317962166c679>. cited By 236.
- [69] K.R. Bagnall, Y.S. Muzychka, and E.N. Wang. Analytical solution for temperature rise in complex multilayer structures with discrete heat sources. *IEEE Transactions on Components, Packaging and Manufacturing Technology*, 4(5):817–830, 2014. doi: 10.1109/TCPMT.2014.2299766. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84900857620&doi=10.1109%2fTCPMT.2014.2299766&partnerID=40&md5=ec9e41f859add464e2fcdcfbc8ede9ea>. cited By 43.

- [70] S. Song, S. Lee, and V. Au. Closed-form equation for thermal constriction/spreading resistances with variable resistance boundary condition. *IEPS Conference*, pages 111–121, 1994. cited By 103.
- [71] S. Karmalkar, P.V. Mohan, and B.P. Kumar. A unified compact model of electrical and thermal 3-d spreading resistance between eccentric rectangular and circular contacts. *IEEE Electron Device Letters*, 26(12):909–912, 2005. doi: 10.1109/LED.2005.859627. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-29244442949&doi=10.1109%2fLED.2005.859627&partnerID=40&md5=7d34147d3df59a6d43d07d87653fa180>. cited By 7.
- [72] A. Gholami and M. Bahraini. Thermal spreading resistance inside anisotropic plates with arbitrarily located hotspots. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 28(4):679–686, 2014. doi: 10.2514/1.T4428. URL <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84907685133&doi=10.2514%2f1.T4428&partnerID=40&md5=acbdc7c4883a995c2d640b24f3235b86>. cited By 16.

书面翻译对应的原文索引

- [1] M Razavi, YS Muzychka, and S Kocabiyik. Review of advances in thermal spreading resistance problems. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 30(4):863–879, 2016.

在学期间参加课题的研究成果

个人简历

1998 年 8 月 29 日出生于黑龙江省嫩江县。

2017 年 9 月考入清华大学航天航空学院学习至今。

在学期间完成的相关学术成果

学术论文：

- [1] Shen Y, Liu Y B, Cao B Y. C4+ Surrogate Models for Thermophysical Properties of Aviation Kerosene RP-3 at Supercritical Pressures[J]. Energy & Fuels, 2021.
- [2] 沈扬, 刘源斌, 曹炳阳. 超临界 RP-3 航空煤油热物性替代模型研究 [J]. 工程热物理学报, 2021.
- [3] 沈扬, 刘源斌, 曹炳阳. RP-3 亚超临界热物性替代模型研究. 中国工程热物理学会传热传质学术年会, 广州, 2020.

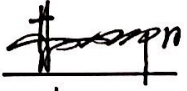
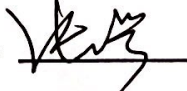
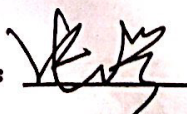
专利：

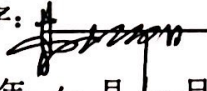
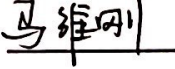
- [4] 曹炳阳, 沈扬, 刘源斌. 一种构建用于 RP-3 航空煤油的物性计算模型的方法, 专利号: 202110601352.2

软件著作权：

- [5] 曹炳阳, 沈扬, 刘源斌. RP-3 航空煤油热物性计算软件 [简称 RP3thermalor]V1.0, 登记号: 2021R11S0544950.

综合论文训练记录表

学生姓名	沈扬	学号	2017011726	班级	航 76
论文题目	亚超临界 RP-3 航空煤油热物性研究				
主要内容以及进度安排	主要内容: 1. 研究 RP-3 航空煤油的替代模型构建方法 2. 构建精度高、适用于计算亚超临界状态下 RP-3 航空煤油热物性的替代模型 3. 基于所构建的模型, 对 RP-3 航空煤油的热物性展开研究 进度安排: 第一部分: 进行模型优化, 同时提出模型修正方法, 构建 RP-3 航空煤油热物性模型 C4+ 第二部分: 探讨基于神经网络的热物性模型构建方法, 与模型优化方法做比较 第三部分: 采用分子动力学模拟方法对其热物性展开研究, 比较不同分子力场的模拟结果 指导教师签字:  考核组组长签字:  年 月 日				
中期考核意见	通过. 考核组组长签字:  2021 年 4 月 12 日				

指导教师评语	沈杨的综合论文训练题目源于两机专项，研究亚超临界航空煤油的模型，他建立了C4+模型(优于之前的模型)、探讨了神经网络建模，还采用分子动力学模拟开展了混合物热物性研究，发表SCI论文1篇，申请了专利和软件著作权，取得了很好成绩。2021年5月30日 指导教师签字: 
评阅教师评语	沈杨同学在综合论文训练中研究了航空煤油的替代模型构建，并对RP-3航空煤油的热物性进行了计算并提出模型修正方法。论文写作规范，条理清晰，整个综合论文训练过程沈杨同学勤奋认真，达到了很好的综合训练效果。 评阅教师签字:  2021年5月31日
答辩小组评语	通过。 答辩小组组长签字:  2021年6月1日

总成绩: A

教学负责人签字: 王海东

2021年6月1日