

ОБЗОР МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ РАСЧЕТА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОКСИГЕНИРОВАННОГО УГЛЕВОДОРОДНОГО ТОПЛИВА

К. Д. Цапенков, Ю. Г. Кураева, Е. И. Сидорова, А. Е. Штырлов,
И. А. Зубрилин

Самарский национальный исследовательский университет им. акад. С. П. Королева, 443086 Самара,
tsapenkov@inbox.ru

Авиационные двигатели являются источником значительных выбросов парниковых газов, в частности CO_2 . В связи с ужесточением норм эмиссии ведутся поиски путей сокращения выбросов CO_2 авиацией. Одним из наиболее перспективных путей достижения этой цели является применение топлив из возобновляемых источников, например из растительного сырья. Для моделирования рабочего процесса камер сгорания авиационных двигателей при сжигании биотоплив и их смесей с нефтяными топливами требуется знание физико-химических свойств таких топлив. В данной работе проведен обзор существующих методик расчета физико-химических свойств кислородсодержащих биотоплив, включающих в себя эфиры, спирты и кетоны. Представленные методики валидированы на веществах, выступающих в качестве биодобавок к авиационному топливу, и проанализированы с точки зрения точности расчета и простоты их применения для исследования рабочего процесса в камерах сгорания.

Ключевые слова: физико-химические свойства, выбросы вредных веществ, биотоплива, расчетные методики, эфиры жирных кислот.

DOI 10.15372/FGV2023.9427
EDN GNWRWL

ВВЕДЕНИЕ

Антропогенные выбросы углекислого газа (CO_2) являются основным фактором увеличения концентрации CO_2 в атмосфере [1], что приводит к ряду серьезных экологических проблем, включая глобальное потепление и изменение климата. Из-за роста потребности в авиаперевозках количество вредных выбросов авиацией быстро возрастает. В 2016 г. Международная организация гражданской авиации (ICAO) запустила инициативу CORSIA (Схема компенсации и сокращения выбросов углекислого газа для международной авиации) с целью снижения выбросов CO_2 [2]. Международная ассоциация воздушного транспорта (IATA) и Группа действий по воздушному транспорту (ATAG) установили целевые показатели по сокращению выбросов CO_2 на 50 % к 2050 г. (относительно уровня 2005 г.) [3, 4].

Сокращение выбросов авиационными двигателями может быть достигнуто как за счет снижения спроса, так и за счет технических решений (например, повышения эффективности

производства и потребления топлива, развития альтернативных источников энергии). Настоящее исследование фокусируется на стратегии производства и применения альтернативных источников энергии как способе улучшения экологических характеристик авиационных двигателей по сравнению с таковыми на нефтяном топливе.

Авиационное топливо, полученное из биосырья (биотопливо), имеет хорошие перспективы в плане сокращения выбросов в авиационной промышленности [5]. Биотоплива, полученные по различным технологиям, за рубежом проходят сертификацию согласно регламенту Международного общества испытаний и материалов (ASTM) (ASTM D7566 — Стандартная спецификация для авиационного турбинного топлива, содержащего синтезированные углеводороды) или по эквивалентным стандартам; в Российской Федерации — соответственно ГОСТ 10227 [6]. При этом состав топлива практически не регламентируется. Таким образом, для дальнейшего развития авиационной отрасли необходимо иметь достаточную научно-техническую базу, позволяющую оце-

нить влияние как чистых биотоплив, так и их смесей с авиационным керосином на рабочий процесс двигателя. При этом первым этапом должна быть оценка влияния состава топлива на его физико-химические характеристики.

Целью данной работы является формирование базы данных расчетных методик определения свойств углеводородов, полученных из биосырья, и их валидация. Основное внимание в работе уделено так называемым оксигенированным углеводородам, включающим в себя спирты, эфиры и кетоны.

1. ВЛИЯНИЕ БИОТОПЛИВ НА ПРОЦЕССЫ В ГАЗОТУРБИННОМ ДВИГАТЕЛЕ

Сложноэфирные молекулы компонентов биотоплив по своему строению отличаются от углеводородов нефтяного топлива: в составе присутствуют атомы кислорода. Это приводит к снижению теплоты сгорания топлива, но позволяет добиться более полного сгорания топлива в двигателе, снижения выбросов токсичных веществ в атмосферу с отработавшими газами и увеличения цетанового числа топлива [7, 8].

Биотоплива на основе эфиров жирных кислот обладают следующими особенностями:

- высокое цетановое число, что обеспечивает низкую задержку воспламенения и хорошие характеристики сгорания [7, 9, 10];
- отсутствие соединений серы [8, 11];
- хорошая термическая стабильность благодаря отсутствию ароматических соединений;
- низкая склонность к образованию сажи [12];
- снижение смазывающей способности из-за отсутствия серы;
- повышенная вязкость;
- высокое содержание парафинов, негативно влияющих на низкотемпературные свойства [8];
- низкая термоокислительная стабильность;
- существенный разброс физико-химических свойств в зависимости от используемого сырья;
- пониженная теплота сгорания по сравнению с нефтяным топливом;
- низкое содержание ароматических углеводородов, что приводит к сокращению ресурса работы резинотехнических уплотнителей агрегатов силовой установки и летательного аппарата.

Перечисленные особенности оказывают серьезное влияние на процессы распыла и горения топлива, а также на его эксплуатационные характеристики. При моделировании этих про-

цессов физико-химические свойства биотоплив на основе эфиров жирных кислот учитываются в моделях химической кинетики путем введения в рассмотрение суррогатов. Использование биотоплив и их смесей с нефтяными топливами требует разработки методик определения свойств таких смесей.

2. РАСЧЕТ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ИНДИВИДУАЛЬНЫХ КОМПОНЕНТОВ БИОТОПЛИВ И ИХ СМЕСЕЙ

В качестве компонентов биотоплив широкое распространение получили сложные эфиры карбоновых кислот, которые образуются в реакции переэтерификации между триацилглицеринами и низкомолекулярными алифатическими спиртами [13].

2.1. Молекулярная масса биотоплив

Молекулярную массу чистых компонентов рассчитывают по молекулярной формуле вещества

$$M_i = \sum_{k=1}^n M'_k.$$

Среднюю молекулярную массу смесей известного состава независимо от химической природы компонентов находят по формуле [14]

$$M = 1 / \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{M_i}.$$

Здесь x_i — молярная доля компонента в смеси, M'_k — молекулярная масса k -го атома в молекуле.

2.2. Индекс сажеобразования

Для определения склонности топлива к сажеобразованию используют различные экспериментальные методики, наиболее распространенная среди них — определение по максимальной высоте некоптящего диффузионного пламени (SP). Для сопоставления результатов, полученных в различных лабораториях на разных приборах [12, 15], был введен пороговый индекс сажеобразования

$$TSI_i = a \frac{M_i}{SP_i} + b,$$

где a и b — константы экспериментальной установки, используемые для масштабирования TSI от 0 до 100.

Величина TSI хорошо работает в случае углеводородных топлив нефтяного происхождения. Однако для топлив, содержащих оксигенаты, наблюдаются расхождения. Установлено, что TSI неправильно учитывает относительно массы топлива содержащийся в нем кислород и не учитывает изменения в стехиометрическом соотношении топливо/воздух. В [16] был предложен новый индекс сажеобразования — расширенный кислородный индекс сажеобразования (OESI), который учитывает влияние содержащегося в топливе кислорода путем нормализации по стехиометрической потребности горения в кислороде из воздуха:

$$\text{OESI}_i = a' \left(\frac{z + m/4 - p/2}{\text{SP}} \right) + b',$$

где z , m и p — число атомов соответственно углерода, водорода и кислорода в молекуле, a' и b' — константы экспериментальной установки.

Для бескислородного топлива индексы OESI и TSI эквивалентно оценивают сажеобразование. Для кислородсодержащих топлив используется только индекс OESI. Как показали результаты [16], на склонность к сажеобразованию влияет не только наличие кислорода в молекуле, но и природа функциональной группы, в которую входит кислород. Установлено, что склонность к сажеобразованию в среднем снижается с увеличением содержания кислорода:monoоксигенированные < диоксигенированные < триоксигенированные группы.

2.3. Плотность

Важнейшей характеристикой топлива является плотность. Доставка топлива из топливного бака в двигатель обычно измеряется по объемному расходу, а энергия, выделяемая в камере сгорания, рассчитывается по массе. Оба параметра взаимосвязаны через плотность. Кроме того, данные по плотности также необходимы в расчетах, касающихся хранения, транспортировки, переработки топлива и т. д.

Для расчета плотности жидкых сложных эфиров применимо классическое уравнение Рэкетта, которое с учетом модификаций Спенсера, Даннера и других имеет вид [17]

$$\rho = \frac{M}{\frac{RT_{cr}}{P_{cr}} Z_{RA}^{1+(1-T/T_{cr})^{2/7}}}.$$

Здесь P_{cr} — критическое давление, T_{cr} — критическая температура, Z_{RA} — коэффициент

сжимаемости Рэкетта, R — универсальная газовая постоянная. Данная модель очень сложна. В ней присутствуют критическая температура, критическое давление и коэффициент сжимаемости, которые, в свою очередь, требуют знания ацентрического фактора молекулы.

В [18] для прогнозирования плотности жидкости был предложен метод группового вклада (GCVOL):

$$\rho = \frac{1000M}{\sum n_i \Delta \nu_i},$$

где n_i — номер группы i , $\Delta \nu_i$ — молярный объем группы i . Данное уравнение использовалось для оценки плотности различных метиловых эфиров жирных кислот, при этом были скорректированы вклады $\Delta \nu_i$ и добавлены вклады двойных связей. Полученные результаты расчетов соответствуют экспериментальным данным при температурах ниже 373 К [19].

В литературе имеется ряд корреляционных уравнений, связывающих плотность с молекулярной массой (M_i) сложного эфира и наличием двойных связей (N_i) в молекуле. В работе [20] для расчета плотности жидких метиловых эфиров жирных кислот предложено уравнение

$$\rho_i = 881.86 - 0.065M_i + 11.91N_i \text{ [кг/м}^3\text{].}$$

Вычисленные по нему значения плотности метиловых эфиров жирных кислот и их смесей близки к экспериментальным данным при температурах 20 \div 30 $^{\circ}\text{C}$. Для того чтобы получать значения при нормируемой температуре 15 $^{\circ}\text{C}$, в работе [21] коэффициенты уравнения были скорректированы:

$$\rho_i = 881.84 - 0.047M_i + 12.2N_i.$$

Представленная корректировка позволила снизить погрешность расчета до 1.5 %.

Предложенное в работе [22] уравнение для расчета плотности при 20 $^{\circ}\text{C}$ сложных эфиров насыщенных и ненасыщенных кислот дает близкие результаты:

$$\rho_i = 0.8463 + 4.9/M_i + 0.0118N_i.$$

В работе [19] получены температурные зависимости плотности для эфиров жирных кислот. Для короткоцепочечных ($C_6 \div C_{12}$) жирных кислот

$$\rho = -0.546 - 0.0078z + 128.7/T - 3.093z/T.$$

Для длинноцепочечных кислот ($C_{12} \div C_{24}$)

$$\rho = -0.435 - 0.0025z + 85.98/T - 0.792z/T.$$

Рассчитанные по данным уравнениям значения плотности насыщенных метиловых эфиров жирных кислот как с короткой, так и с длинной цепью при $10 \div 100$ °С хорошо согласуются с опубликованными значениями, относительная погрешность не превышает 0.43 %.

В случае ненасыщенных кислот необходимо учитывать количество двойных связей в молекуле:

$$\rho = -0.435 - 0.0025z + 85.98/T - 0.792z/T - 0.00001N_i + 4N_i/T.$$

Плотность оксигенированных углеводородов может быть вычислена методом [23]:

$$\rho = AB^{-(1-T/T_{cr})^n},$$

где A, B — регрессионные коэффициенты.

2.4. Цетановое число

Для расчета цетанового числа метиловых эфиров жирных кислот можно использовать формулу из работы [20]

$$DCN_i = -4.92 + 0.3M_i - 22.8N_i$$

или из работы [22]

$$DCN_i = -7.8 + 0.302M_i - 20N_i.$$

2.5. Теплоемкость

Удельная теплоемкость оксигенированных углеводородов может быть рассчитана по формуле из [23]:

$$c_p = A + BT + CT^2 + DT^3,$$

где A, B, C, D — регрессионные коэффициенты.

В работе [24] показано, что модифицированный метод Роулинсона хорошо предсказывает удельную теплоемкость метиловых эфиров жирных кислот, с точностью до 3 %:

$$\frac{c_p - c_p^0}{R} = 1.45 + 0.45(1 - T_r)^{-1} + 0.25\omega \times [17.11 + 25.2(1 - T_r)^{1/3} + 1.742(1 - T_r)^{-1}].$$

Здесь $T_r = T/T_{cr}$,

$$T_{cr} = T_b \left[0.584 + 0.965 \sum \Delta_T - \left(\sum \Delta_T \right)^2 \right]^{-1},$$

$T_b = 218.49 \ln(z) - 6.933$ — нормальная температура кипения метиловых эфиров кислот. Значения Δ_T можно рассчитать путем суммирования групповых вкладов различных атомов или групп атомов, приведенных в [25]. Ацентрический фактор ω представлен в [25, 26] либо может быть рассчитан [27].

Теплоемкость идеального газа c_p^0 оценивается с использованием метода групповых вкладов Джобака:

$$c_p^0 = \left(\sum_j n_j \Delta a - 37.93 \right) + \left(\sum_j n_j \Delta b + 0.210 \right) T + \left(\sum_j n_j \Delta c - 0.000391 \right) T^2 + \left(\sum_j n_j \Delta d + 2.06 \cdot 10^{-7} \right) T^3,$$

где $\Delta a, \Delta b, \Delta c, \Delta d$ — параметры, полученные на основе вклада метильных, алкильных и сложноэфирных групп, присутствующих в метиловом эфире.

На основании расчетов, выполненных для метиловых эфиров жирных кислот предложено уравнение второго порядка, связывающее удельную теплоемкость с молекулярной массой эфира [24]:

$$c_p = -1E - 0.6(M_i)^2 + 247.1M_i + 1.9291,$$

где E — регрессионный коэффициент.

Для этиловых эфиров n -алкановых кислот в работе [28] получена зависимость теплоемкости от числа атомов углерода zn в материнской кислоте:

$$c_p(298.15 \text{ K}) = 107.937 + 29.920zn.$$

2.6. Теплопроводность

В [23] предложено рассчитывать теплопроводность оксигенированных углеводородов следующим образом [23]:

$$K = A + BT + CT^2.$$

Теплопроводность сложных эфиров оценивается с помощью корреляции Састри [24]:

$$K = T_b a^m,$$

где $m = 1 - \left(\frac{1 - T_r}{1 - T_{br}}\right)^n$, T_{br} — приведенная температура к нормальной температуре кипения, константы a и n принимают значения соответственно 0.16 и 0.2 согласно рекомендациям Састири [25]. Теплопроводность при нормальной температуре кипения является аддитивным параметром, рассчитанным на основе вклада метильных, алкильных и сложноэфирных групп.

Теплопроводность жидкостей может быть определена по методике Латини [27]:

$$K = \frac{A(1 - T_r)^{0.38}}{T_r^{1/6}}, \quad A = \frac{A^* T_b^\alpha}{M^\beta T_{cr}^\gamma}.$$

Для эфиров $A^* = 0.0415$, $\alpha = 1.2$, $\beta = 1.0$, $\gamma = 0.167$.

2.7. Вязкость

Для расчета вязкости оксигенированных углеводородов можно воспользоваться методикой [23]:

$$\lg(\mu) = A + B/T + CT + DT^2.$$

Для расчета кинематической вязкости топлива при 40 °C, содержащего сложные эфиры, в работе [22] предложено соотношение

$$\eta = \exp \left(\sum x_i \ln(\eta_i) \right) [\text{мм}^2/\text{с}],$$

где вязкость i -го сложного эфира рассчитывается по формуле

$$\ln(\eta_i) = -12.53 + 2.496 \ln(M_i) - 0.178 N_i.$$

Расчет кинематической вязкости сложных эфиров можно провести по уравнению [20]

$$\eta_i = -5.59 + 0.03644 M_i + 0.784 N_i$$

или по скорректированному уравнению для метиловых эфиров [20]

$$\eta_i = -5.59 + 0.0398 M_i + 0.782 N_i.$$

Вязкость смеси при температуре 40 °C равна

$$\eta = \sum_{i=1}^n \eta_i x_i.$$

В [27] предложена линейная зависимость между логарифмом вязкости и обратной величиной температуры:

$$\ln \frac{\mu}{\rho_L M} = A + \frac{B}{T},$$

где ρ_L — плотность при 20 °C, г/см³. Значения констант A и B рассчитываются методом группового вклада [25].

2.8. Теплота сгорания

Для расчета высшей теплотворной способности метиловых эфиров жирных кислот в работе [20] предложено уравнение

$$\text{HHV}_i = 25.7 + 0.057 M_i - 3.16 N_i.$$

Для сложных эфиров используется выражение из работы [22]

$$\text{HHV}_i = 46.19 - \frac{1794}{M_i} - 0.21 N_i.$$

2.9. Давление насыщенных паров

Расчет давления насыщенных паров оксигенированных углеводородов может быть проведен по методике [23]:

$$\lg(P) = A + B/T + C \lg(T) + D T + E T^2.$$

2.10. Коэффициент поверхностного натяжения

Коэффициент поверхностного натяжения оксигенированных углеводородов определяется по формуле из [23]

$$\sigma = A(1 - T/B)^n.$$

Для прогнозирования свойств топлив, состоящих из смеси ископаемых углеводородов, необходимо знать их количественный состав, который может быть известен при формировании суррогатов (модельных топлив) либо определен по данным хроматографии для смесей неизвестного состава. Обычно для расчета большинства физико-химических характеристик смеси применяются правила аддитивности, т. е. свойства изменяются пропорционально долям компонентов в смеси. В случае, когда ископаемые углеводороды смешиваются с биокомпонентами, свойство аддитивности не всегда применимо, поэтому необходимо экспериментальное исследование свойств таких смесей.

3. АНАЛИЗ И ВЫБОР НАИБОЛЕЕ ПОДХОДЯЩИХ РАСЧЕТНЫХ МЕТОДИК

В табл. 1 представлены результаты расчетов плотности при температуре 20 °C. Методики [19–22] применимы только для расчета метиловых эфиров, из них наименьшую погрешность имеет методика [20] со средним отклонением от справочных данных [29] 0.76 %. Методика [18] самая простая, но характеризуется самым высоким отклонением (11.65 % в

среднем). Методика [17] очень сложна для применения, отклонение от справочных данных в среднем составляет 3.84 %. Методика [23] имеет самое низкое отклонение 0.17 % и достаточно проста для применения.

В табл. 2 представлены результаты расчетов цетанового числа и низшей теплоты сгорания. Все методики сопоставимы по сложности и применимы только для метиловых эфиров. Наименьшее отклонение от справочных данных по цетановому числу (2.43 %) дает

Таблица 1
Валидация методик расчета плотности

Вещество	ρ , кг/м ³ (20 °C)							
	[29]	[17]	[18]	[20]	[21]	[22]	[19]	[23]
Метилолеат	873.9	922.2	876.5	874.5	880.1	874.6	883.2	873.8
Метилпальмитат	852.0	914.1	870.4	864.3	869.1	864.4	870.8	858.7
Диэтиловый эфир малоновой кислоты	1 055	1 011	999.4	—	—	—	—	1 055
Метилэтилкетон	805.0	796.4	796.8	—	—	—	—	804.8
Метанол	791.8	782.2	1 183	—	—	—	—	792.0

Таблица 2
Валидация методик расчета цетанового числа и низшей теплоты сгорания

Вещество	DCN			HHV _i , МДж/кг		
	[30]	[20]	[22]	[29, 30]	[20]	[22]
Метилолеат	55.7	61.20	61.70	40.09	39.44	39.93
Метилпальмитат	81.08	76.20	73.90	42.35	41.12	39.56
Диэтиловый эфир малоновой кислоты	—	—	—	—	—	—
Метилэтилкетон	—	—	—	33.89	—	—
Метанол	3.25	—	—	22.69	—	—

Таблица 3
Валидация методик расчета теплоемкости, коэффициента поверхностного натяжения и давления насыщенных паров

Вещество	c_p , кДж/(кг · К) (20 °C)			σ , Н/м (25 °C)		P , мм. рт. ст (25 °C)	
	[29]	[23]	[24]	[29]	[23]	[29]	[23]
Метилолеат	—	2.098	2.108	0.03130	0.03131	$6.29 \cdot 10^{-6}$	$6.287 \cdot 10^{-6}$
Метилпальмитат	1.754	—	2.099	0.02956	—	$6.04 \cdot 10^{-5}$	—
Диэтиловый эфир малоновой кислоты	1.874	1.773	—	0.03130	0.03133	0.19	0.2687
Метилэтилкетон	—	2.201	—	0.02384	0.02396	90.6	95.50
Метанол	—	2.481	—	0.02220	0.02355	127.0	126.0

Таблица 4
Валидация методик расчета теплопроводности

Вещество	K , Вт/(м · К) (25 °C)		
	[29]	[23]	[27]
Метилолеат	—	0.1152	0.1007
Метилпальмитат	—	0.1695	0.1078
Диэтиловый эфир малоновой кислоты	—	0.1251	0.1267
Метилэтилкетон	0.1428	0.1472	—
Метанол	0.2013	0.2023	—

методика [22], а по низшей теплоте сгорания — методика [20] (2.26 %).

В табл. 3 представлены результаты расчетов удельной теплоемкости, коэффициента поверхностного натяжения и давления насыщенных паров. Методика [24] для расчета теплоемкости, в отличие от методики [23], применима только для метиловых эфиров. Справочных данных для оценки точности методик расчета теплоемкости недостаточно, в дальнейших исследованиях эти пробелы должны быть заполнены результатами экспериментальных исследований. Методика [23] для расчета коэффициента поверхностного натяжения имеет среднее отклонение от справочных данных 1.69 %. Методика [23] для расчета давления насыщенных паров дает среднее отклонение от справочных данных 11.92 %.

В табл. 4 представлены результаты расчетов теплопроводности. Справочных данных для оценки точности методик [23, 27, 29] недостаточно, но из имеющихся данных видно, что методика [23] характеризуется невысоким

средним отклонением от справочных данных (1.55 %).

В табл. 5 представлены результаты расчетов вязкости. Методики [21, 22] применимы только для метиловых эфиров, из них методика [21] более точная (среднее отклонение от справочных данных 14.15 %). Методика [20] применима только для эфиров (метиловых и этиловых) и имеет среднее отклонение от справочных данных 19.19 %. Методики [23, 27] применимы для всех углеводородов, из них методика [23] более точная (среднее отклонение от справочных данных 11.62 %).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен обзор существующих методик определения физико-химических свойств окисгенированных углеводородов. Представлены методики расчета молекулярной массы биотоплив, индекса сажеобразования, плотности, цетанового числа, теплоемкости, теплопроводности, вязкости, низшей теплоты сгорания, давления насыщенных паров и коэффициента поверхностного натяжения.

Молекулярная масса компонента однозначно определяется исходя из молекулярной формулы вещества, а для смесей известного состава, независимо от химической природы компонентов, среднюю молекулярную массу рассчитывают по молярным долям компонентов в смеси. Расширенный кислородный индекс сажеобразования рассчитывается по максимальной высоте некоптящего пламени, которая определяется экспериментально. При вычислении плотности наиболее предпочтительной является методика [23], характеризуемая

Таблица 5
Валидация методик расчета вязкости

Вещество	μ , сСт (20 °C)			η , сП (20 °C)			
	[29]	[23]	[27]	[22]	[20]	[21]	[29]
Метилолеат	5.630	5.275	9.152	6.442	4.478	5.998	6.992
Метилпальмитат	3.680	4.999	6.740	4.320	4.254	4.265	5.174
Диэтиловый эфир малоновой кислоты	2.15	1.960	1.985	2.038	—	1.031	—
Метилэтилкетон	0.3960	0.4159	0.4182	0.4919	—	—	—
Метанол	0.5820	0.5698	0.8276	0.7358	—	—	—

Примечание. 1 сП = 10^{-3} Па · с, 1 сСт = 10^{-6} м²/с.

наименьшим средним отклонением от справочных данных (0.16 %). Представленные методики расчета цетанового числа применимы только для метиловых эфиров жирных кислот, из них наименьшее отклонение от справочных данных (2.43 %) дает методика [22]. Из рассмотренных методик определения теплопемкости методика [24] применима только для метиловых эфиров жирных кислот, методика [23] универсальна, но справочных данных для оценки этих методик оказалось недостаточно. Справочных данных для оценки точности методик расчета теплопроводности [23, 27] также недостаточно, но исходя из имеющихся данных, а также из того факта, что методика [23] универсальна, ее можно рекомендовать к применению. Из обсуждаемых методик определения вязкости методика [23] отличается наибольшей точностью (среднее отклонение от справочных данных 11.62 %), также следует отметить, что эта методика применима для всех групп углеводородных топлив. Представленные методики расчета низшей теплоты сгорания применимы только для метиловых эфиров жирных кислот, из них наименьшее отклонение от справочных данных (2.26 %) имеет методика [20]. Методики [23] для расчета коэффициента поверхностного натяжения и давления насыщенных паров применимы для всех групп углеводородных топлив, их средние отклонения от справочных данных составляют 1.69 и 11.92 % соответственно.

В дальнейшем планируется формирование расширенной базы данных физико-химических свойств оксигенированных углеводородов за счет проведения экспериментальных исследований.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 23-69-10006, <https://rscf.ru/project/23-69-10006/>).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Canadell J. G., Le Quéré C., Raupach M. R., Field C. B., Buitenhuis E. T., Ciais P., Conway T. J., Gillett N. P., Houghton R. A., Marland G. Contributions to accelerating atmospheric CO₂ growth from economic activity, carbon intensity, and efficiency of natural sinks // Proc. Nat. Acad. Sci. — 2007. — V. 104. — P. 18866–18870. — DOI: 10.1073/pnas.0702737104.
2. ICAO document CORSIA sustainability criteria for CORSIA eligible fuels. The development of sustainability criteria, 2021. — <https://www.icao.int/environmental-protection/CORSIA/Documents/ICAO%20document%202005%20-%20Sustainability%20Criteria%20-%20November%202021.pdf>.
3. Air Transport Action Group (ATAG). Sustainable aviation fuel (SAF). — International Air Transport Association, 2019. — <https://atag.org/>.
4. International Air Transport Association (IATA). Aircraft technology roadmap to 2050. — IATA, 2017. — <https://www.iata.org/contentassets/8d19e716636a47c184e7221c77563c93/aircraft-technology-net-zero-roadmap.pdf>.
5. IRENA. Biofuels for aviation: Technology brief. — IRENA, 2017. — https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Publication/2017/IRENA_Biofuels_for_Aviation_2017.pdf.
6. ГОСТ 10227-2013. Топлива для реактивных двигателей. Технические условия. — Введ. 01.10.2014. — М.: Стандартинформ, 2014.
7. Subramaniam M., Solomon J. M., Nadanakumar V., Anaimuthu S., Sathyamurthy R. Experimental investigation on performance, combustion and emission characteristics of DI diesel engine using algae as a biodiesel // Energy Rep. — 2020. — V. 6. — P. 1382–1392. — DOI: 10.1016/j.egyr.2020.05.022.
8. Alalwan H. A., Alminshid A. H., Aljaafari H. A. S. Promising evolution of biofuel generations. Subject review // Renewable Energy Focus. — 2019. — V. 28. — P. 127–139. — DOI: 10.1016/j.ref.2018.12.006.
9. Lam J. E., Mohamed A. R., Lup A. N. K., Koh M. K. Palm fatty acid distillate derived biofuels via deoxygenation: Properties, catalysts and processes // Fuel Process. Technol. — 2022. — V. 236. — 107394. — DOI: 10.1016/j.fuproc.2022.107394.
10. Sekhar S. C., Karuppasamy K., Vedaraman N., Kabeel A. E., Sathyamurthy R., Elkelawy M., Bastawissi H. A. E. Biodiesel production process optimization from *Pithecellobium dulce* seed oil: Performance, combustion, and emission analysis on compression ignition engine fuelled with diesel/biodiesel blends // Energy Convers. Manag. — 2018. — V. 161. — P. 141–154. — DOI: 10.1016/j.enconman.2018.01.074.
11. Deepalika, Kumar V., Kumar Choudhary A. A comparative review on evaluation of performance, combustion, and emission characteristics

- of biodiesel blends enriched with hydrogen, additives and their combined effect // *Thermal Sci. Eng. Prog.* — 2023. — V. 46. — 102185. — DOI: 10.1016/j.tsep.2023.102185.
12. **Lemaire R., Lapalme D., Seers P.** Analysis of the sooting propensity of C-4 and C-5 oxygenates: Comparison of sooting indexes issued from laser-based experiments and group additivity approaches // *Combust. Flame.* — 2015. — V. 162, N 9. — P. 3140–3155. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2015.03.018.
13. **Zhou Y., Remón J., Jiang Z., Matharu A. S., Hu C.** Tuning the selectivity of natural oils and fatty acids/esters deoxygenation to biofuels and fatty alcohols: A review // *Green Energy Environ.* — 2022. — V. 8, N 3. — P. 722–743. — DOI: 10.1016/j.gee.2022.03.001.
14. **Моисеев А. В.** Расчетные методы определения физико-химических свойств углеводородных систем, нефтей и нефтепродуктов: Примеры и задачи: учеб. пособие / под ред. А. В. Моисеева. — Комсомольск-на-Амуре: ГОУВПО «КнАГТУ», 2010.
15. **Jiao Q., Anderson J. E., Wallington T. J., Kurtz E. M.** Smoke point measurements of diesel-range hydrocarbon-oxygenate blends using a novel approach for fuel blend selection // *Energy Fuels.* — 2015. — V. 29, N 11. — P. 7641–7649. — DOI: 10.1021/acs.energyfuels.5b01624.
16. **Barrientos E. J., Lapuerta M., Boehman A. L.** Group additivity in soot formation for the example of C-5 oxygenated hydrocarbon fuels // *Combust. Flame.* — 2013. — V. 160, N 8. — P. 1484–1498. — DOI: 10.1016/j.combustflame.2013.02.024.
17. **García M., Alba J.-J., Gonzalo A., Sánchez J. L., Araujo J.** Density of alkyl esters and its mixtures: A comparison and improvement of predictive models // *Fuel.* — 2013. — V. 103. — P. 232–238. — DOI: 10.1016/j.fuel.2012.07.049.
18. **Elbro H. S., Fredenslund A., Rasmussen P.** Group contribution method for the prediction of liquid densities as a function of temperature for solvents, oligomers, and polymers // *Ind. Eng. Chem. Res.* — 1991. — V. 30, N 12. — P. 2576–2582. — DOI: 10.1021/ie00060a011.
19. **Phankosol S., Sudaprasert K., Lilitchan S., Aryusuk K., Krisnangkura K.** Estimation of density of biodiesel // *Energy Fuels.* — 2014. — V. 28, N 7. — P. 4633–464. — DOI: 10.1021/ef501031z.
20. **Srinivasan G. R., Jambulingam R.** Theoretical prediction of thermo-physical properties of beef tallow based biodiesel // *FME Trans.* — 2020. — V. 48, N 3. — P. 600–610. — DOI: 10.5937/fme2003600R.
21. **Романцова С. В., Гладышева И. В., Вервекина Н. В., Нагорнов С. А., Ликсутина А. П., Романцов С. Н.** Расчет физико-химических и эксплуатационных характеристик биодизельного топлива, синтезированного из жидких и твердых жиров // *Наука в центральной России.* — 2021. — № 4 (52). — С. 124–137. — DOI: 10.35887/2305-2538-2021-4-124-137. — EDN: EVCSMW.
22. **Ramírez-Verduzco L. F., Rodríguez-Rodríguez J. E., Jaramillo-Jacob A. R.** Predicting cetane number, kinematic viscosity, density and higher heating value of biodiesel from its fatty acid methyl ester composition // *Fuel.* — 2012. — V. 91, N 1. — P. 102–111. — DOI: 10.1016/j.fuel.2011.06.070.
23. **Yaws' handbook of thermodynamic and physical properties of chemical compounds** / C. L. Yaws (Ed.). — Norwich, NY: Knovel, 2003.
24. **Anand K., Sharma R. P., Mehta P. S.** A comprehensive approach for estimating thermo-physical properties of biodiesel fuels // *Appl. Therm. Eng.* — 2011. — V. 31, N 2-3. — P. 235–242. — DOI: 10.1016/j.applthermaleng.2010.09.003.
25. **Poling B. E., Prausnitz J. M., O'Connell J. P.** *The Properties of Gases and Liquids.* — 4th ed. — New York: McGraw-Hill, 1987.
26. **Daubert T. E., Danner R. P.** *Physical and Thermodynamic Properties of Pure Chemicals: Data Compilation.* — Washington, DC: Taylor & Francis, 1989.
27. **An H., Yang W. M., Maghbouli A., Chou S. K., Chua K. J.** Detailed physical properties prediction of pure methyl esters for biodiesel combustion modeling // *Appl. Energy.* — 2013. — V. 102. — P. 647–656. — DOI: 10.1016/j.apenergy.2012.08.009.
28. **Богатищева Н. С., Файзуллин М. З., Никитин Е. Д.** Теплоемкость и температуропроводность этиловых эфиров н-алкановых кислот — компонентов биодизельного топлива // *Журн. физ. химии.* — 2017. — Т. 91, № 9. — С. 1484–1490. — DOI: 10.7868/S0044453717090084. — EDN: ZFUJWD.
29. **PubChem** [Электронный ресурс]. — <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/> (дата обращения: 25.10.2023).
30. **Compendium of Experimental Cetane Numbers** [Электронный ресурс]. — <https://www.nrel.gov/docs/fy17osti/67585.pdf> (дата обращения: 25.10.2023).