

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С. П. КОРОЛЕВА»  
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)

# РАСЧЕТ СВОЙСТВ СМЕСЕВЫХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ КАМЕР СГОРАНИЯ ГАЗОТУРБИННЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ

Рекомендовано редакционно-издательским советом федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева» в качестве учебного пособия для обучающихся по основной образовательной программе высшего образования по направлению подготовки 24.05.02 Проектирование авиационных и ракетных двигателей

САМАРА  
Издательство Самарского университета  
2022

УДК 621.431(075)

ББК 39.15я7

Р 248

Авторы: *К.Д. Цапенков, И.А. Зубрилин, М. Эрнандэс Моралес,  
С.С. Новичкова*

Рецензенты: канд. хим. наук, доц. В. И. Платонов,  
инженер-конструктор I категории, «ОДК-Кузнецов»  
Н. С. Миرون

**Р248 Расчет свойств смесевых углеводородных топлив при проектировании камер сгорания газотурбинных двигателей:** учебное пособие / *К.Д. Цапенков, И.А. Зубрилин, М. Эрнандэс Моралес, С.С. Новичкова.* – Самара: Издательство Самарского университета, 2022. – 68 с.

**ISBN 978-5-7883-1832-5**

Приводится методика расчета свойств смеси углеводородов, влияющих на процессы распыла, нагрева, испарения и горения топлива в камере сгорания ГТД.

Работа выполняется студентами бакалавриата, специалитета и аспирантуры института двигателей и энергетических установок с целью закрепления лекционного материала и ознакомления с методиками расчетов физических и химических свойств углеводородных топлив.

Разработано на кафедре теплотехники и тепловых двигателей Самарского университета.

УДК 621.431(075)

ББК 39.15я7

ISBN 978-5-7883-1832-5

© Самарский университет, 2022

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	6
1 ОПИСАНИЕ РЕШАЕМОЙ ПРОБЛЕМЫ.....	7
1.1 Характеристики, влияющие на распыл топлива.....	8
1.2 Характеристики, влияющие на нагрев и испарение распыленного топлива.....	9
1.3 Характеристики, влияющие на горение испаренного топлива.....	9
2 РАСЧЕТ МАССОВЫХ И МОЛЯРНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ХИМИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ СМЕСЕЙ.....	11
2.1 Расчет массовой доли компонента.....	11
2.2 Расчет молярной доли компонента.....	11
3 РАСЧЕТ СВОЙСТВ СМЕСИ, ВЛИЯЮЩИХ НА РАСПЫЛ ТОПЛИВА.....	13
3.1 Расчет плотности.....	13
3.1.1 Расчет плотности отдельных компонентов.....	13
3.1.2 Расчет плотности смеси.....	14
3.2 Расчет динамической вязкости.....	14
3.2.1 Расчет динамической вязкости отдельных компонентов.....	14
3.2.2 Расчет динамической вязкости смеси.....	15
3.3 Расчет коэффициента поверхностного натяжения.....	16
3.3.1 Расчет коэффициента поверхностного натяжения отдельных компонентов.....	16
3.3.2 Расчет коэффициента поверхностного натяжения смеси.....	16
4 РАСЧЕТ СВОЙСТВ СМЕСИ, ВЛИЯЮЩИХ НА НАГРЕВ И ИСПАРЕНИЕ РАСПЫЛЕННОГО ТОПЛИВА.....	18
4.1 Расчет критической температуры.....	19
4.2 Расчет критического давления.....	19
4.3 Расчет температуры кипения.....	20

4.4	Расчет критической плотности .....	20
4.5	Расчет давления насыщенных паров .....	21
4.5.1	Расчет давления насыщенных паров отдельных компонентов .....	21
4.5.2	Расчет давления насыщенных паров смеси .....	21
4.6	Расчет удельной теплоемкости .....	22
4.6.1	Расчет удельной теплоемкости отдельных компонентов .....	22
4.6.2	Расчет удельной теплоемкости смеси .....	22
4.7	Расчет теплопроводности .....	23
4.7.1	Расчет теплопроводности отдельных компонентов .....	23
4.7.2	Расчет теплопроводности смеси .....	23
5	<b>РАСЧЕТ СВОЙСТВ, ВЛИЯЮЩИХ НА ГОРЕНИЕ ИСПАРЕННОЙ СМЕСИ .....</b>	<b>25</b>
5.1	Расчет низшей теплотворной способности .....	25
5.1.1	Расчет НУ отдельных компонентов .....	25
5.1.2	Расчет НУ смеси .....	25
5.2	Расчет молекулярного веса .....	26
5.2.1	Расчет молекулярного веса отдельных компонентов .....	26
5.2.2	Расчет молекулярного веса смеси .....	26
5.3	Расчет молярного отношения водорода к углероду .....	27
5.3.1	Расчет Н/С отдельных компонентов .....	27
5.3.2	Расчет Н/С смеси .....	27
5.4	Определение рассчитанного цетанового числа .....	27
5.4.1	Определение DCN отдельных компонентов .....	27
5.4.2	Расчет DCN смеси .....	28
5.5	Расчет порогового индекса сажеобразования .....	28
5.5.1	Расчет TSI отдельных компонентов .....	28
5.5.2	Расчет TSI смеси .....	28
6	<b>ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СВОЙСТВ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ .....</b>	<b>29</b>
6.1	Определение плотности .....	29

6.2	Определение кинематической вязкости .....	30
6.3	Определение коэффициента поверхностного натяжения.....	30
6.4	Определение температуры кипения .....	31
6.5	Определение давления насыщенных паров .....	33
6.6	Определение удельной теплоемкости .....	34
6.7	Определение низшей теплотворной способности .....	35
6.8	Определение получаемого цетанового числа .....	36
6.9	Определение индекса сажеобразования.....	36
	СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....	38
	ПРИЛОЖЕНИЕ А.....	42
	ПРИЛОЖЕНИЕ Б .....	46
	ПРИЛОЖЕНИЕ В.....	59
	ПРИЛОЖЕНИЕ Г .....	60
	ПРИЛОЖЕНИЕ Д.....	62
	ПРИЛОЖЕНИЕ Е .....	63
	ПРИЛОЖЕНИЕ Ж.....	64
	ПРИЛОЖЕНИЕ З .....	65
	ПРИЛОЖЕНИЕ И.....	66

## ВВЕДЕНИЕ

Использование методов вычислительной гидрогазодинамики в сочетании с детальной химической кинетикой позволяют повысить точность прогностических моделей, используемых при проектировании камер сгорания двигателей различного назначения, работающих на многокомпонентном топливе. Так, например, топливо по типу авиационного керосина представляет собой сложную смесь различных химических компонентов, количество которых может достигать до нескольких сотен. Следовательно, подробное численное моделирование их горения по-прежнему недоступно. Наиболее распространенным вариантом решения этой проблемы является использование суррогатного топлива. Суррогатное топливо – смесь ограниченного числа химических компонентов, способных имитировать заданные физические и/или химические свойства целевого реального топлива (керосина, бензина, дизельного топлива и др.).

На сегодняшний день во многих работах по созданию суррогатов керосина признается сложность их формирования для описания физических и химическо-кинетических свойств одной модельной смеси.

Таким образом, целью данной работы является представление методики расчета свойств углеводородных топлив и обучение навыкам моделирования рабочего процесса в камерах сгорания газотурбинных двигателей, который включает определение свойств различных суррогатов и сравнение их со свойствами существующего топлива. Методики расчета свойств углеводородных топлив, представленные в данной работе, были валидированы с помощью экспериментальных и справочных данных [31].

## 1 ОПИСАНИЕ РЕШАЕМОЙ ПРОБЛЕМЫ

Характеристики топлива играют важную роль в протекании рабочего процесса в установках с горением, таких как газотурбинные двигатели и установки, промышленные печи, поршневые ДВС и др. В авиационных газотурбинных двигателях используются керосины различных марок, в зависимости от стандартов, установленных в странах производителях данного топлива. В РФ для дозвуковой авиации проводится пять марок топлива (ТС-1, Т-1, Т-1С, Т-2 и РТ), для сверхзвуковой – две (Т-6 и Т-8В). Наиболее распространённой маркой авиационного керосина является керосин марки ТС-1, который применяется как в гражданской, так и в военной технике. В камерах сгорания авиационных ГТД протекают одновременно несколько процессов, на которые оказывают влияние свойства топлива, а именно: процесс первичного распыла, то есть процесс при котором плёнка жидкости разрушается, образуя при этом капли разных диаметров; процесс нагрева и испарения капель; процесс горения испарённого топлива. Соответственно и свойства авиационного керосина можно разделить на три аналогичные группы, которые условно определим как: распыл, нагрев и испарение, горение. Несмотря на то, что существуют стандарты, определяющие характеристики авиационных топлив, в них не регламентируются отдельные свойства топлив, которые имеют существенное влияние на рабочий процесс в КС. С другой стороны, определённые стандартами свойства могут иметь некоторый разброс в значениях в зависимости от места производства, условий хранения и других факторов. Смесь ограниченного числа химических компонентов, способных имитировать заданные физические и/или химические свойства целевого реального топлива, называется суррогатным топливом.

Необходимость разработки суррогатов авиационных топлив была очень подробно и основательно сформулирована ещё в 2001 году в работе [1], где отмечена важность формирования суррогата, моделирующего как физические, так и химические свойства реального керосина. По результатам детального исследования авторов [2,3] были предложены характеристики суррогата и керосина, которые вполне доступны для

исследования без проведения дорогостоящих экспериментальных фундаментальных исследований, таких как структура пламени, время задержки воспламенения, образование сажи и скорость пламени многокомпонентных углеводородных топлив, но достаточно согласованы с характеристиками процесса горения. Эти характеристики суррогата (*Combustion properties target, CPT*) включают:

- отношение Н/С;
- молярная масса (M);
- производное цетановое число (DCN);
- пороговый индекс сажеобразования (TSI).

Помимо основных характеристик суррогат может характеризоваться дополнительными [4,5]:

- плотность ( $\rho$ );
- вязкость ( $\mu$ );
- коэффициент поверхностного натяжения ( $\sigma$ );
- критические параметры (температура, давление, плотность);
- температура кипения;
- удельная теплоемкость (C);
- теплопроводность (k);
- давление насыщенных паров (p);
- низшая теплотворная способность ( $H_u$ ).

## 1.1 Характеристики, влияющие на распыл топлива

Как жидкость авиационный керосин обладает следующими свойствами, влияющими на его распыл: плотность, кинематическая вязкость и коэффициент поверхностного натяжения жидкости. Плотность топлива зависит от его фракционного состава. При увеличении тяжёлых фракций, ароматических углеводородов и уменьшении содержания парафиновых углеводородов, плотность топлива повышается. Вязкость – это свойство жидкости оказывать сопротивление перемещению под действием внешних сил одному слою жидкости относительно другого. Поверхностное натяжение – это сила, с которой жидкость сопротивляется деформации своей поверхности.

## **1.2 Характеристики, влияющие на нагрев и испарение распыленного топлива**

Удельная теплоёмкость топлива показывает, какое количество теплоты необходимо подвести к топливу для того, чтобы нагреть его на один градус. Удельная теплоемкость керосина зависит от температуры – она увеличивается при нагревании этого топлива. Зависимость теплоемкости от температуры носит нелинейный характер. Кроме того, теплоемкость керосина также зависит и от давления. При повышении давления она уменьшается – при высоких температурах влияние давления усиливается.

Теплопроводность топлива – величина, характеризующая молекулярный перенос тепла, обусловленный неравномерностью температуры жидкости.

Насыщенный пар – это пар, находящийся в термодинамическом равновесии с жидкостью. Давление насыщенного пара связано определённой для данного вещества зависимостью от температуры. Когда внешнее давление падает ниже давления насыщенного пара, происходит испарение (кипение) жидкости; когда оно выше – напротив, конденсация.

## **1.3 Характеристики, влияющие на горение испаренного топлива**

Молярное отношение количества водорода к углероду – характеристика, которая определяет состав продуктов сгорания, теплотворную способность (для характерных керосину углеводородов имеется сильная зависимость между Н/С и низшей теплотворной способностью), а также адиабатическую температуру пламени, которая коррелирует со скоростью пламени.

Молярная масса во многом определяет молекулярную диффузию и имеет важное значение для неоднородных по составу смесей. Также было показано, что молярная масса коррелирует с характеристиками испарения топлива [28] и кинематической вязкостью [29].

Цетановое число – характеристика воспламеняемости дизельного топлива, определяющая период задержки горения рабочей смеси. Производное цетановое число (определенное по ГОСТ EN 15195) по своему значению соответствует цетановому числу, различия в названиях обусловлены разными методами измерения. Предельный индекс сажеобразования – интегральный показатель склонности топлива к образованию сажи [30].

Важной характеристикой авиационных топлив является теплота сгорания, которая показывает количество выделившейся тепловой энергии при полном сгорании топлива. Различают высшую теплоту сгорания, которая включает теплоту конденсации водяных паров, образующихся в процессе сгорания топлива, и низшую теплоту сгорания, при определении которой теплота, выделяющаяся при конденсации водяных паров, считается потерянной и поэтому не учитывается.

*Задание.* Выполнить расчет одного из представленных суррогатов (таблица А.1) и сравнить полученные свойства со свойствами авиационного керосина (таблица Б.1).

## 2 РАСЧЁТ МАССОВЫХ И МОЛЯРНЫХ КОНЦЕНТРАЦИЙ ХИМИЧЕСКИХ КОМПОНЕНТОВ СМЕСЕЙ

Для решения поставленной задачи необходимо знать состав смеси, который представлен в списке вариантов в объемных долях. Помимо объемных долей в расчетах используются массовые и молярные доли. В данной главе представлены соотношения, позволяющие рассчитать массовые и молярные доли компонентов в смеси, зная их объемные концентрации, плотность и молярную массу.

### 2.1 Расчет массовой доли компонента

$$y_i = V \cdot \frac{\rho_i}{\rho_{\text{см}}},$$

где  $y_i$  – массовая доля  $i$ -го компонента;

$V_i$  – объемная доля  $i$ -го компонента;

$\rho_i$  – плотность  $i$ -го компонента при нормальных атмосферных условиях,  $\text{кг}/\text{м}^3$  ;

$\rho_{\text{см}}$  – плотность смеси при нормальных атмосферных условиях,  $\text{кг}/\text{м}^3$  .

### 2.2 Расчет молярной доли компонента

$$\chi_i = \frac{\frac{y_i}{M_i}}{N_{\text{см}}},$$

где  $\chi_i$  – молярная доля  $i$ -го компонента;

$y_i$  – массовая доля  $i$ -го компонента;

$M_i$  – молярная масса  $i$ -го компонента,  $\text{г}/\text{моль}$  ;

$N_{\text{см}}$  – количество молей смеси, моль.

$N_{\text{см}}$  в данной формуле – условная величина, ее можно рассчитать как 
$$N_{\text{см}} = \sum \frac{y_i}{M_i} .$$

Такие величины как плотность компонента и его молярная масса будут получены в следующих пунктах.

## **3 РАСЧЕТ СВОЙСТВ СМЕСИ, ВЛИЯЮЩИХ НА РАСПЫЛ ТОПЛИВА**

В данной главе представлены соотношения, позволяющие рассчитать такие свойства смеси как плотность, динамическая вязкость и поверхностное натяжение.

### **3.1 Расчет плотности**

#### ***3.1.1 Расчет плотностей отдельных компонентов***

Расчет плотности отдельных компонентов смеси проводится по формуле [6]:

$$\rho_i = 1000 \cdot A \cdot B^{-\left(1 - \frac{T}{C}\right)^n},$$

где  $\rho_i$  – плотность  $i$ -го компонента, кг/м<sup>3</sup> ;

$A, B, C, n$  – регрессионные коэффициенты  $i$ -го компонента;

$T$  – заданная температура, К.

Для определения регрессионных коэффициентов необходимо обратиться к справочнику [6]. В таблице 3 (страницы 109–197) нужно найти необходимые коэффициенты, ориентируясь по столбцам «FORMULA» и «CAS No». В некоторых справочниках идентификатором может служить название вещества

CAS номер – уникальный численный идентификатор химических соединений, внесённых в реестр Химической реферативной службы. Она присваивает этот идентификатор всем веществам, когда-либо упомянутым в литературе. Уникальный идентификатор предназначен для большего удобства поиска упоминаний в литературе за счёт устранения проблемы возможного различного наименования одного и того же химического соединения. В настоящее время практически все химические базы данных имеют поиск по регистрационному номеру CAS. Отдельные изомеры молекул также получают собственный номер CAS.

График, показывающий зависимость плотности компонентов от температуры строится в соответствии с рисунком Б.1 приложения Б только для компонентов заданной смеси.

### **3.1.2 Расчет плотности смеси**

Расчет плотности смеси проводится по формуле [7]:

$$\rho(T)_{\text{см}} = \sum V(T)_i \cdot \rho(T)_i,$$

где  $\rho(T)_{\text{см}}$  – плотность смеси, кг/м<sup>3</sup> ;

$V(T)_i$  – объёмная доля  $i$ -го компонента при заданной температуре  $T$ ;

$\rho(T)_i$  – плотность  $i$ -го компонента при заданной температуре, кг/м<sup>3</sup> .

График, показывающий зависимость плотности смеси от температуры, строится в соответствии с рисунком Б.2 приложения Б. Необходимо нанести на этот график экспериментальные данные о плотности керосина (таблица Б.1), и сделать выводы о соотношении плотностей и, следовательно, эксплуатационных свойствах заданной смеси и керосина.

## **3.2 Расчет динамической вязкости**

### **3.2.1 Расчет динамической вязкости отдельных компонентов**

Расчет динамической вязкости компонентов заданной смеси проводится по формуле [8]:

$$\mu_i = 0,001 \cdot 10^{\left( A + \frac{B}{T} + C \cdot T + D \cdot T^2 \right)},$$

где  $\mu_i$  – динамическая вязкость  $i$ -го компонента, Па · с ;

$A, B, C, D$  – регрессионные коэффициенты  $i$ -го компонента;

$T$  – заданная температура, К.

Для определения регрессионных коэффициентов необходимо обратиться к справочнику [8]. В таблице 3 (страницы 104–193) найти необходимые коэффициенты, ориентируясь по столбцам «FORMULA» и «CAS No».

График, показывающий зависимость вязкости от температуры строится в соответствии с рисунком Б.3 приложения Б только для компонентов заданной смеси.

### ***3.2.2 Расчет динамической вязкости смеси***

Расчет динамической вязкости смеси проводится по формуле [7]:

$$\ln(\mu(T)_{mix}) = \sum \chi_i \cdot \ln(\mu(T)_i) + 0,5 \cdot \sum \sum \chi_i \cdot \chi_j \cdot G_{ij},$$

где  $\mu(T)_{mix}$  – динамическая вязкость смеси при заданной температуре, Па · с ;

$\chi_i, \chi_j$  – молярная доля  $i$ -го и  $j$ -го компонентов;

$\mu(T)_i$  – динамическая вязкость  $i$ -го компонента при заданной температуре, Па · с ;

$G_{ij}$  – параметр бинарного взаимодействия (в данной работе принять равным нулю [9]).

График, показывающий зависимость динамической вязкости смеси от температуры, строится в соответствии с рисунком Б.4 приложения Б. Необходимо нанести на этот график экспериментальные данные о вязкости керосина (таблица Б.1) и сделать выводы о соотношении вязкостей и, следовательно, эксплуатационных свойствах заданного топлива и керосина.

### 3.3 Расчёт коэффициента поверхностного натяжения

#### 3.3.1 Расчет коэффициента поверхностного натяжения отдельных компонентов

Расчет коэффициента поверхностного натяжения компонентов проводится по формуле [6]:

$$\sigma(T)_i = A \cdot \left(1 - \frac{T}{B}\right)^n,$$

где  $\sigma(T)_i$  – поверхностное натяжение  $i$ -го компонента, мН/м;

$A, B, n$  – регрессионные коэффициенты  $i$ -го компонента;

$T$  – заданная температура, К.

Для определения регрессионных коэффициентов необходимо обратиться к таблице 21 (страницы 689–780) справочника [6].

График, показывающий зависимость коэффициента поверхностного натяжения компонентов от температуры строится в соответствии с рисунком Б.5 приложения Б только для компонентов заданной смеси.

#### 3.3.2 Расчет коэффициента поверхностного натяжения смеси

Расчет коэффициента поверхностного натяжения заданной смеси проводится по формуле [10]:

$$\sigma(T)_{\text{см}} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \beta^2 \cdot \left(\frac{\chi_i}{\rho(T)_i}\right) \cdot \left(\frac{\chi_j}{\rho(T)_j}\right) \cdot \left(\sigma(T)_i \cdot \sigma(T)_j\right)^{\frac{1}{2}},$$

где  $\sigma(T)_{\text{см}}$  – поверхностное натяжение смеси, мН/м;

$\chi_i, \chi_j$  – молярные доли  $i$ -го и  $j$ -го компонентов;

$\rho(T)_i, \rho(T)_j$  – плотность  $i$ -го и  $j$ -го компонентов при заданной температуре  $T$ , кг/м<sup>3</sup>;

$\sigma(T)_i \cdot \sigma(T)_j$  – поверхностное натяжение  $i$ -го и  $j$ -го компонентов при заданной температуре  $T$ , мН/м;

$\beta$  – коэффициент, равный

$$\frac{1}{\beta} = \sum_{i=1}^n \frac{\chi_i}{\rho(T)_i}.$$

Построение графика, показывающего зависимость коэффициента поверхностного натяжения смеси от температуры проводится соответствии с рисунком Б.6 приложения Б.

## 4 РАСЧЕТ СВОЙСТВ СМЕСИ, ВЛИЯЮЩИХ НА НАГРЕВ И ИСПАРЕНИЕ РАСПЫЛЕННОГО ТОПЛИВА

В данной главе представлены соотношения, позволяющие определить критические параметры компонентов смеси, ее удельную теплоемкость, теплопроводность и давление насыщенных паров.

Расчет критических параметров компонентов сопровождается определением структурного состава. Поиск структурной формулы проводится по CAS номеру компонента, для этого можно обратиться к электронному справочнику WebBook [27] (рисунок 4.1).

Регрессионные коэффициенты  $a$ ,  $b$ ,  $c$ ,  $d$  определяются в зависимости от рассчитываемого параметра ( $T_c$ ,  $p_c$  или  $T_b$ ), а коэффициенты для структурных групп представлены, начиная с четвертой строки таблицы В.1 [11], для каждой группы и так же различаются для разных рассчитываемых параметров.

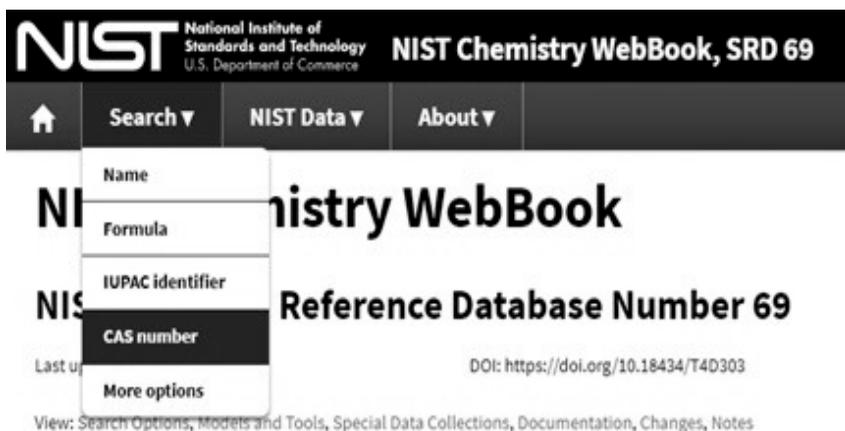


Рисунок 4.1 – Интерфейс электронного справочника WebBook

## 4.1 Расчёт критической температуры

Расчет критической температуры отдельных компонентов заданной смеси проводится по формуле [11]:

$$T_c = a \cdot \rho^b \cdot M_i^c + d + \sum_i N_i \cdot G_i,$$

где  $T_c$  – критическая температура компонента, К;

$a, b, c, d$  – регрессионные коэффициенты;

$\rho$  – плотность компонента при 20°C, кг/м<sup>3</sup>;

$M_i$  – молярная масса  $i$ -го компонента, г/моль;

$N_i$  – количество раз, которое  $i$ -я группа встречается в компоненте;

$G_i$  – коэффициент для  $i$ -й группы;

Все коэффициенты выбираются в соответствии с приложением В [11].

## 4.2 Расчёт критического давления

Расчет критического давления компонентов заданной смеси проводится по формуле [11]:

$$\rho_c = a \cdot \rho^b \cdot M_i^c + d + \sum_i N_i \cdot G_i,$$

где  $\rho_c$  – критическое давление компонента, bar;

$a, b, c, d$  – регрессионные коэффициенты;

$\rho$  – плотность компонента при 20°C, кг/м<sup>3</sup>;

$M_i$  – молярная масса  $i$ -го компонента, г/моль;

$N_i$  – количество раз, которое  $i$ -я группа встречается в компоненте;

$G_i$  – коэффициент для  $i$ -й группы;

Все коэффициенты выбираются в соответствии с приложением В [11].

### 4.3 Расчёт температуры кипения

Расчет температуры кипения отдельных компонентов заданной смеси проводится по формуле [11]:

$$T_b = a \cdot \rho^b \cdot M_i^c + d + \sum_i N_i \cdot G_i,$$

где  $T_b$  – температура кипения компонента, К;

$a, b, c, d$  – регрессионные коэффициенты;

$\rho$  – плотность компонента при 20°C, кг/м<sup>3</sup>;

$M_i$  – молярная масса  $i$ -го компонента, г/моль;

$N_i$  – количество раз, которое  $i$ -я группа встречается в компоненте;

$G_i$  – коэффициент для  $i$ -й группы.

Все коэффициенты выбираются в соответствии с приложением В [11].

### 4.4 Расчёт критической плотности

Расчёт критической плотности заданной смеси проводится по формуле [12]:

$$\rho_{кр} = \varphi_1 \cdot \rho_{п} \cdot g_{п} + \varphi_2 \cdot \rho_{н} \cdot g_{н} + \varphi_3 \cdot \rho_{а} \cdot g_{а},$$

где  $\rho_{кр}$  – критическая плотность, кг/м<sup>3</sup>;

$g_{п}, g_{н}, g_{а}$  – массовые доли в топливе парафиновых вместе с олефиновыми, нафтеновых и ароматических (в том числе бициклических) углеводородов соответственно;

$\rho_{п}, \rho_{н}, \rho_{а}$  – критические плотности парафиновых, нафтеновых и ароматических углеводородов при данном числе атомов углерода в молекуле, кг/м<sup>3</sup>. Определяются по графику (рисунок Г.1 приложения Г). Группа углеводорода определяется по его структурной формуле (рисунок Г.2 приложения Г).

$\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$  – поправочные коэффициенты, учитывающие стерический эффект молекулы, которые в первом приближении можно принимать равными  $\varphi_1 = 1,05$ ;  $\varphi_2 = 1,0$ ;  $\varphi_3 = 0,94$ .

## 4.5 Расчет давления насыщенных паров

### 4.5.1 Расчет давления насыщенных паров отдельных компонентов

Расчет давления насыщенных паров компонента выполняется с помощью номограммы, представленной на рисунках И.1 и И.2 приложения И [13]. На левой оси необходимо отметить температуру, при которой рассчитывается значение давления насыщенных паров, а на средней оси отметить температуру кипения. Прямая, соединяющая эти две точки, укажет значение давления насыщенных паров на правой оси. Для вычисления значений меньше 0,001 кПа существует формула [13]:

$$\rho(T)_i = \rho_{s(311K)} \cdot 10^{4,6 - (1430/T)},$$

где  $\rho(T)_i$  – давление насыщенных паров  $i$ -го компонента;

$\rho_{s(311K)}$  – давление насыщенных паров  $i$ -го компонента при 311 К;

$T$  – заданная температура, К.

Построение графика, показывающего зависимость давления насыщенных паров компонентов заданной смеси от температуры выполняется в соответствии с рисунком Б.7 приложения Б.

### 4.5.2 Расчет давления насыщенных паров смеси

Расчет давления насыщенных паров смеси проводится по формуле [14]:

$$\rho(T) = \sum \chi_i \cdot \rho(T)_i,$$

где  $\rho(T)$  – давление насыщенных паров смеси;

$\rho(T)_i$  – давление насыщенных паров  $i$ -го компонента;

$\chi_i$  – молярная доля  $i$ -го компонента.

Построение графика, показывающего зависимость давления насыщенных паров заданной смеси от температуры выполняется в соответствии с рисунком Б.8 приложения Б.

## 4.6 Расчет удельной теплоемкости

### 4.6.1 Расчет удельной теплоемкости отдельных компонентов

Расчет удельной теплоемкости компонентов заданной смеси выполняется по формуле [11]:

$$C(T)_i = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3,$$

где  $C(T)_i$  – удельная теплоёмкость  $i$ -го компонента,  $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$ ;

$A, B, C, D$  – регрессионные коэффициенты  $i$ -го компонента;

$T$  – заданная температура, К.

Построение графика, показывающего зависимость удельной теплоемкости компонентов заданной смеси от температуры выполняется в соответствии с рисунком Б.9 приложения Б.

### 4.6.2 Расчет удельной теплоемкости смеси

Расчет удельной теплоемкости заданной смеси проводится по формуле [11]:

$$C(T)_{\text{см}} = \sum_{i=1}^n \chi_i \cdot C(T)_i,$$

где  $C(T)_{\text{см}}$  – теплоёмкость смеси,  $\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}$ ;

$\chi_i$  – молярная доля  $i$ -го компонента;

$C(T)_i$  – теплоёмкость  $i$ -го компонента при заданной температуре  $T$ ,

$$\frac{\text{Дж}}{\text{моль} \cdot \text{К}}.$$

Построение графика, показывающего зависимость удельной теплоемкости заданной смеси от температуры выполняется в соответствии с рисунком Б.10 приложения Б.

## 4.7 Расчет теплопроводности

### 4.7.1 Расчет теплопроводности отдельных компонентов

Расчет теплопроводности компонентов заданной смеси проводится по формуле [15]:

$$k(T)_i = A + B \cdot T + C \cdot T^2,$$

где  $k(T)_i$  – теплопроводность  $i$ -го компонента,  $\frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$ ;

$A, B, C$  – регрессионные коэффициенты  $i$ -го компонента;

$T$  – заданная температура, К.

Построение графика, показывающего зависимость теплопроводности компонентов заданной смеси от температуры выполняется в соответствии с рисунком Б.11 приложения Б.

### 4.7.2 Расчет теплопроводности смеси

Расчет теплопроводности смеси проводится по формуле [11]:

$$k(T)_{\text{см}} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \Phi_i \Phi_j \cdot \frac{2 \cdot k_i k_j}{k_i + k_j},$$

где  $k(T)_{\text{см}}$  – теплопроводность смеси,  $\frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$ ;

$k_i, k_j$  – теплопроводность  $i$ -го и  $j$ -го компонентов;

$\Phi_i, \Phi_j$  – параметр, равный:

$$\Phi_i = \frac{\frac{\chi_i}{\rho(T)_i}}{\sum_{j=1}^n \frac{\chi_j}{\rho(T)_j}},$$

$\chi_i, \chi_j$  – молярные доли  $i$ -го и  $j$ -го компонентов;

$\rho(T)_i, \rho(T)_j$  – плотность  $i$ -го и  $j$ -го компонентов,  $\text{кг}/\text{м}^3$ .

Построение графика, показывающего зависимость теплопроводности заданной смеси от температуры выполняется в соответствии с рисунком Б.12 приложения Б.

## 5 РАСЧЕТ СВОЙСТВ СМЕСИ, ВЛИЯЮЩИХ НА ГОРЕНИЕ ИСПАРЕННОЙ СМЕСИ

В данной главе представлены соотношения, позволяющие рассчитать такие свойства смеси как низшая теплотворная способность, молярная масса, молярное отношение водорода к углероду, производное цетановое число и пороговый индекс сажеобразования.

### 5.1 Расчет низшей теплотворной способности

#### 5.1.1 Расчет $Hu$ отдельных компонентов

Расчет  $Hu$  компонентов заданной смеси проводится по формуле [Формула Менделеева]:

$$Hu_i = 33,91 \cdot \frac{M_C \cdot C}{M_C \cdot C + M_H \cdot H} + 125,6 \cdot \frac{M_H \cdot H}{M_C \cdot C + M_H \cdot H},$$

где  $Hu_i$  – низшая теплотворная способность топлива,  $\frac{\text{МДж}}{\text{кг}}$ ;

$M_C, M_H$  – молярная масса углерода и водорода, соответственно,  $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$ ;

$C, H$  – количество атомов углерода и водорода в  $i$ -ом компоненте/

#### 5.1.2 Расчет $Hu$ смеси

Расчет  $Hu$  заданной смеси проводится по формуле [16]:

$$Hu_{mix} = \sum y_i \cdot Hu_i,$$

где  $Hu_{mix}$  – низшая теплотворная способность смеси,  $\frac{\text{кДж}}{\text{кг}}$ ;

$y_i$  – массовая доля  $i$ -го компонента;

$Hu_i$  – низшая теплотворная способность  $i$ -ого компонента,  $\frac{\text{кДж}}{\text{кг}}$ .

## 5.2 Расчет молекулярного веса

### 5.2.1 Расчет молекулярного веса отдельных компонентов

Для углеводорода с известной химической формулой молярная масса определяется как масса молекулы вещества. Для этого берется стандартный атомный вес элементов, входящих в молекулу, умножается на количество атомов соответствующего элемента в молекуле и умножается на 1 г/моль, константу молярной массы.

$$M_i = M_C \cdot C + M_H \cdot H,$$

где  $M_i$  – молярная масса  $i$ -го компонента,  $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$ ;

$M_C, M_H$  – молярная масса углерода и водорода, соответственно,  $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$ ;

$C, H$  – количество атомов углерода и водорода в  $i$ -ом компоненте.

### 5.2.2 Расчет молекулярного веса смеси

Для смеси углеводородов известного состава расчет молярной массы будет проводиться по формуле:

$$M_{\text{см}} = \sum \chi_i \cdot M_i,$$

где  $M_{\text{см}}$  – молярная масса смеси,  $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$ ;

$M_i$  – молярная масса  $i$ -го компонента,  $\frac{\text{г}}{\text{моль}}$ ;

$\chi_i$  – молярная доля  $i$ -го компонента смеси.

## 5.3 Расчет молярного отношение водорода к углероду

### 5.3.1 Расчет H/C отдельных компонентов

Расчет H/C компонентов заданной смеси проводится по формуле:

$$\frac{H}{C_i} = \frac{H}{C},$$

где  $H/C_i$  – молярное отношение водорода к углероду  $i$ -го компонента;  
 $C, H$  – количество атомов углерода и водорода в  $i$ -ом компоненте.

### 5.3.2 Расчет H/C смеси

Расчет H/C заданной смеси проводится по формуле:

$$\frac{H}{C_{см}} = \frac{\sum \left( \frac{H \cdot M_H \cdot y_i}{M_i} \right)}{M_H} \Bigg/ \frac{\sum \left( \frac{C \cdot M_C \cdot y_i}{M_i} \right)}{M_C},$$

где  $H/C_{см}$  – молярное отношение водорода к углероду заданной смеси;

$H/C_i$  – молярное отношение водорода к углероду  $i$ -го компонента;

$y_i$  – массовая доля  $i$ -го компонента смеси.

$M_C, M_H$  – молярная масса углерода и водорода, соответственно,

$\frac{г}{моль}$ ;

$C, H$  – количество атомов углерода и водорода в  $i$ -ом компоненте.

## 5.4 Определение рассчитанного цетанового числа

### 5.4.1 Определение DCN отдельных компонентов

DCN каждого компонента выбирается в соответствии со справочником (приложение Д).

### **5.4.2 Расчет DCN смеси**

Расчет DCN заданной смеси проводится по формуле [16]:

$$DCN_{см} = \sum V_i \cdot DCN_i,$$

где  $DCN_{см}$  – DCN смеси;

$V_i$  – объемная доля  $i$ -го компонента;

$DCN_i$  – DCN  $i$ -го компонента.

## **5.5 Расчет порогового индекса сажеобразования**

### **5.5.1 Расчет TSI отдельных компонентов**

Для оценки склонности топлива к образованию сажи используется пороговый индекс сажеобразования, который изменяется в диапазоне от 0 до 100.

TSI каждого компонента выбирается в соответствии со справочником (приложение Е).

### **5.5.2 Расчет TSI смеси**

Расчет TSI заданной смеси проводится по формуле [17]:

$$TSI_{см} = \sum \chi_i \cdot TSI_i,$$

где  $TSI_{см}$  – TSI смеси;

$TSI_i$  – TSI  $i$ -го компонента;

$\chi_i$  – молярная доля  $i$ -го компонента смеси.

## 6 ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СВОЙСТВ УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ

### 6.1 Определение плотности

Плотность углеводородов определяется в соответствии с ГОСТ 3900 [18]. Сущность метода заключается в погружении ареометра в испытуемый продукт, снятии показания по шкале ареометра при температуре определения и пересчете результатов на плотность при температуре 20 °С.

1. Цилиндр для ареометров устанавливают на ровной поверхности. Пробу испытуемого продукта наливают в цилиндр, имеющий ту же температуру, что и проба, избегая образования пузырьков и потерь от испарения. Пузырьки воздуха, которые образуются на поверхности, снимают фильтровальной бумагой.
2. Температуру поддерживают постоянной, с погрешностью не более 0,2 °С.
3. Чистый и сухой ареометр медленно и осторожно опускают в цилиндр с испытуемым продуктом, поддерживая ареометр за верхний конец, не допуская смачивания части стержня, расположенной выше уровня погружения ареометра.
4. Когда ареометр установится, и прекратятся его колебания, отсчитывают показания по шкале (рисунок 6.1).

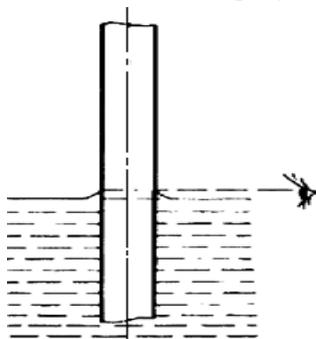


Рисунок 6.1 – Снятие показаний ареометра

## 6.2 Определение кинематической вязкости

Вязкость определяется в соответствии с ГОСТ Р 53708 [19].

Сущность метода заключается в определении времени истечения определенного объема жидкости под воздействием силы тяжести через капилляр калиброванного вискозиметра при воспроизводимом напоре и строго контролируемой и известной температуре. Кинематическую вязкость находят как произведение измеренного времени истечения и постоянной калибровки вискозиметра.

Необходимы два таких определения для получения среднего значения кинематической вязкости как результата ее определения.

## 6.3 Определение коэффициента поверхностного натяжения

Коэффициент поверхностного натяжения определяется в соответствии с ГОСТ 50003 [20].

Измеряется максимальная сила, которую необходимо приложить в вертикальном направлении к рамке или кольцу (рисунок 2, б), контактирующему с поверхностью исследуемой жидкости, находящейся в измерительном стакане, чтобы отделить его от этой поверхности, или к пластине (рисунок 6.2, а), одна кромка которой контактирует с поверхностью для вытягивания образующейся пленки.

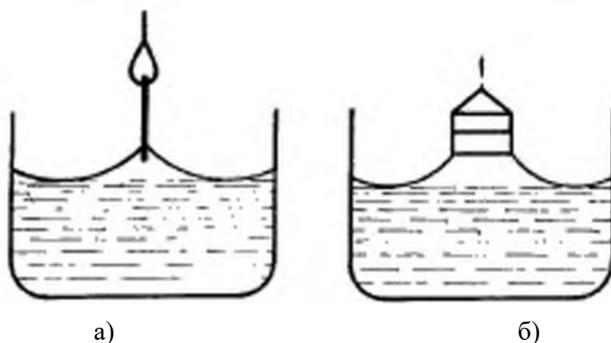


Рисунок 6.2 – Измерение коэффициента поверхностного натяжения

## 6.4 Определение температуры кипения

Температура кипения определяется в соответствии с ГОСТ 18995.6 [21].

Прибор для определения температуры кипения (рисунок 6.3), состоит из круглодонной колбы 1 с отростком, к которому присоединяют с помощью пробки обратный холодильник. В колбу вставляют насадку 3 с отверстиями, а в нее помещают термометр 2. Прибор помещают в баню 4 с жидким теплоносителем или обогревают электронагревателем с закрытой спиралью.

В пробирку прибора помещают 1–1,5 см испытуемой жидкости (туда же помещают небольшой кусочек прокаленного, пористого, неглазурованного фарфора или маленькие, запаянные с одной стороны стеклянные капилляры) и укрепляют в ней при помощи корковой пробки термометр так, чтобы ртутный резервуар находился на высоте 2 см над уровнем жидкости в пробирке.

В колбу прибора наливают жидкий теплоноситель так, чтобы уровень его был выше уровня жидкости в пробирке, и нагревают.

За 10–15 °С до предполагаемой температуры кипения скорость нагрева уменьшают до 2 °С в минуту. При дальнейшем нагревании температура повышается и, достигнув определенной точки, некоторое время остается постоянной.

За температуру кипения принимают наблюдаемую постоянную температуру, приведенную к нормальному давлению.

Если испытуемая жидкость легколетучая или разлагается при нагревании, то колбу с жидким теплоносителем следует предварительно без препарата нагреть до 10–15 °С ниже предполагаемой температуры кипения.

За результат анализа принимают среднее арифметическое результатов двух параллельных определений, абсолютное расхождение между которыми не должно превышать расхождение, равное 0,1 °С.

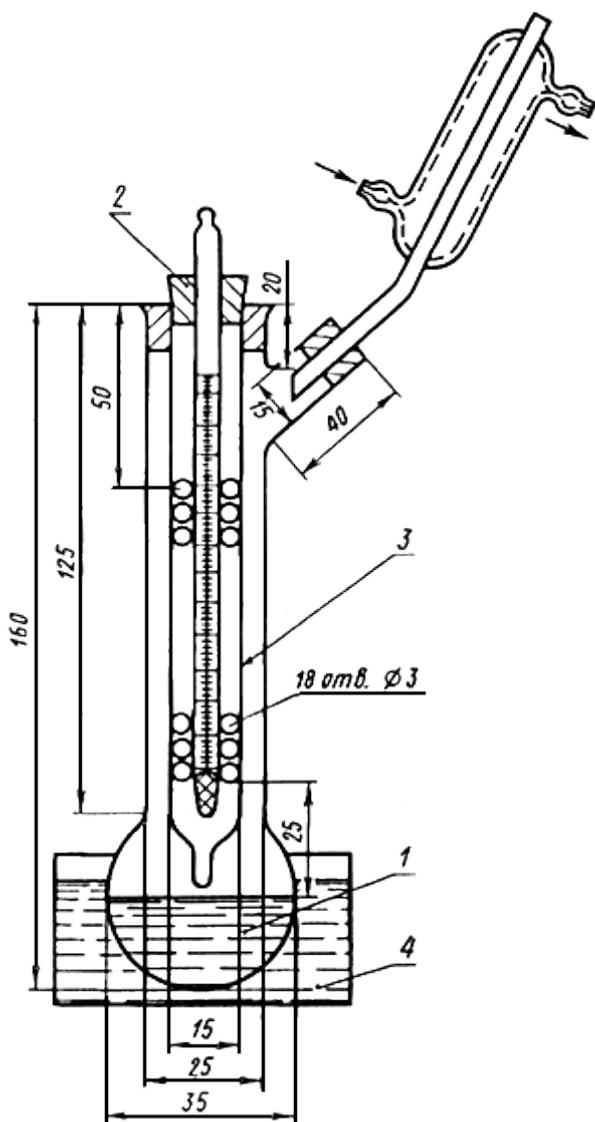


Рисунок 6.3 – Прибор для определения температуры кипения

## 6.5 Определение давления насыщенных паров

Давление насыщенных паров определяется в соответствии с ГОСТ 1756 [22]. Прибор для определения давления насыщенных паров – бомба Рейда (рисунок 6.4).

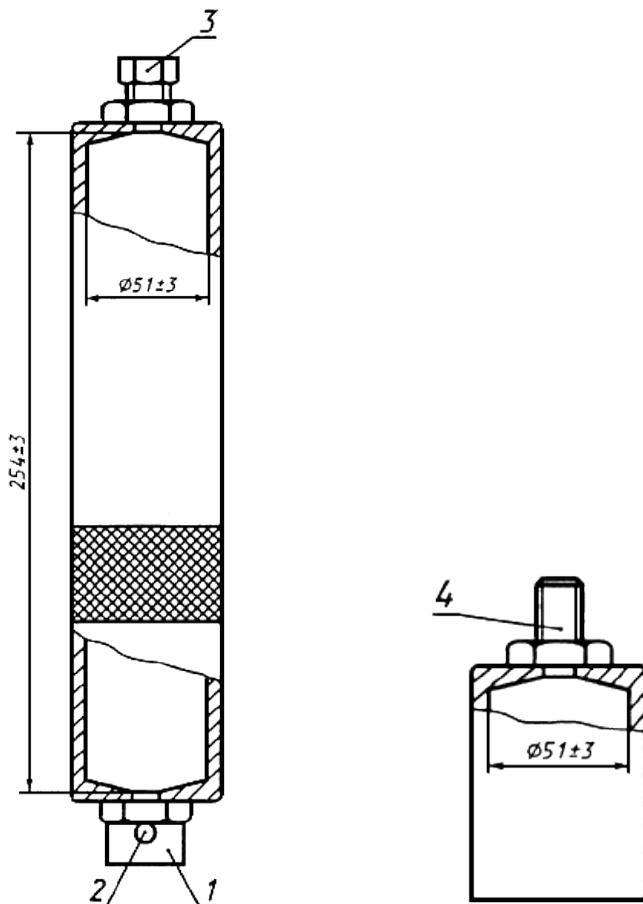


Рисунок 6.4 – Бомба Рейда

Бомба состоит из двух камер – воздушной (верхняя) и жидкостной (нижняя).

Верхняя секция или воздушная камера представляет собой цилиндрический сосуд с внутренним диаметром  $(51\pm 3)$  мм и длиной  $(254\pm 3)$  мм и слегка наклонными внутренними поверхностями краев, обеспечивающими полное опорожнение сосуда при вертикальном положении. На одном конце воздушной камеры следует предусмотреть переходник 3, диаметром не менее 5 мм, чтобы принять 6-мм соединение. На другом конце воздушной камеры следует предусмотреть отверстие 1, диаметром около 13 мм, для соединения с жидкостной камерой, а также вентиляционное отверстие 2. Переходники на концах отверстий не должны препятствовать полному осушению камеры.

Нижняя секция или жидкостная камера представляет собой цилиндрический сосуд таким же внутренним диаметром, как воздушная камера, и таким объемом, чтобы соотношение объемов воздушной и жидкостной камер было 3,95-4,05.

На одном конце жидкостной камеры предусмотрено отверстие 4 диаметром около 13 мм для соединения с воздушной камерой. Внутренняя поверхность камеры, прилегающей к переходнику, должна быть с уклоном для обеспечения полной осушки камеры при переворачивании. Другой конец жидкостной камеры должен быть полностью закрыт.

Жидкостную камеру аппарата наполняют охлажденной пробой испытуемого продукта и подсоединяют к воздушной камере при температуре  $37,8$  °С. Аппарат погружают в баню с температурой  $(37,8\pm 0,1)$  °С и периодически встряхивают до достижения постоянного давления, которое показывает манометр, соединенный с аппаратом. Показание манометра, скорректированное соответствующим образом, принимают за давление насыщенных паров по Рейду.

## **6.6 Определение удельной теплоемкости**

Удельная теплоемкость определяется в соответствии с ГОСТ Р 57712 [23]. Испытательная установка состоит из вертикально установленной трубчатой печи с термостатическим контролем и водозаполненного адиабатного калориметра (рисунок 6.5).

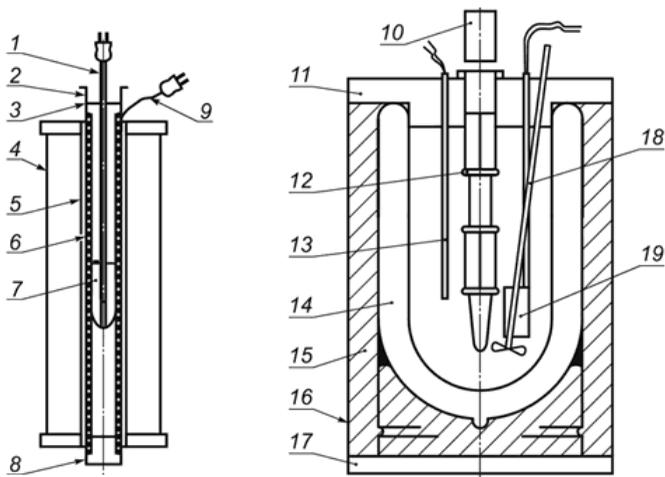


Рисунок 6.5 – Испытательная установка для определения удельной теплоемкости: 1 – термопара печи; 2 – выключатель сброса; 3 – крышка; 4 – печь; 5 – керамическая трубка; 6 – стальная трубчатая вставка; 7 – тара для образца; 8 – нижняя заглушка; 9 – термопара управления печью; 10 – соединительная трубка; 11 – переходная крышка с покрытием из фольги; 12 – удерживающий кожух; 13 – медно-константановая термопара; 14 – сосуд Дьюара; 15 – изоляция; 16 – наружный стакан; 17 – переходное основание; 18 – стеклянная мешалка; 19 – нагреватель

Представленная установка служит для определения энтальпии образца при заданной температуре. Количество испытаний зависит от требуемой точности результата. Рекомендуется проводить не менее пяти измерений.

Удельную теплоемкость определяют, как частную производную изменения энтальпии образца по температуре.

## 6.7 Определение низшей теплотворной способности

Низшая теплотворная способность топлив определяется в соответствии с ГОСТ 21261 [24].

Сущность метода заключается в полном сжигании массы испытуемого жидкого топлива в калориметрической бомбе в среде сжатого ки-

слорода и измерении количества теплоты, выделившейся при сгорании топлива и вспомогательных веществ, а также при образовании водных растворов азотной и серной кислот в условиях испытания.

В данном методе определяется высшая теплота сгорания, а низшая получается расчетным путем.

## **6.8 Определение получаемого цетанового числа**

Для определения DCN используется ГОСТ EN 15195 [25].

Порцию испытуемого топлива вводят в камеру сгорания постоянного объема сжатым воздухом. Датчики определяют начало впрыска и начало воспламенения в каждом однократном цикле. Полная процедура испытания состоит из 15 предварительных циклов, обеспечивающих установление равновесия аппаратуры, и 32 последующих циклов для получения значения задержки воспламенения. Значение средней задержки воспламенения (ID) этих 32 циклов используют для вычисления получаемого цетанового числа (DCN). Значение DCN, полученное настоящим методом, соответствует значению цетанового числа CN, получаемого в результате полноразмерных испытаний моторным методом по EN ISO 5165.

## **6.9 Определение индекса сажеобразования**

TSI определяется расчетным путем, с помощью максимальной высоты некопящего пламени, которая измеряется в соответствии с ГОСТ 4338 [26].

Метод заключается в сжигании пробы топлива в закрытой лампе со шкалой. Максимальную высоту некопящего пламени испытуемого топлива измеряют перед появлением дыма.

Лампа для определения высоты некопящего пламени приведена на рисунке 6.6, она должна отвечать следующим требованиям:

- верхний конец направляющей фитиля должен точно совпадать с нулевой отметкой на шкале;

- шкала должна быть нанесена белыми линиями на черном стекле по обе стороны белой или черной полосы шириной 2 мм. Диапазон шкалы 50 мм, цена деления 1 мм, оцифровка через каждые 10 мм и цена большого деления 5 мм;
- лампа должна иметь устройство, позволяющее равномерно регулировать высоту пламени в пределах не менее 10 мм;
- стекло в дверце лампы должно иметь вогнутую форму для предотвращения многократных отражений;
- соединение между основанием и резервуаром горелки должны быть непроницаемым для топлива.

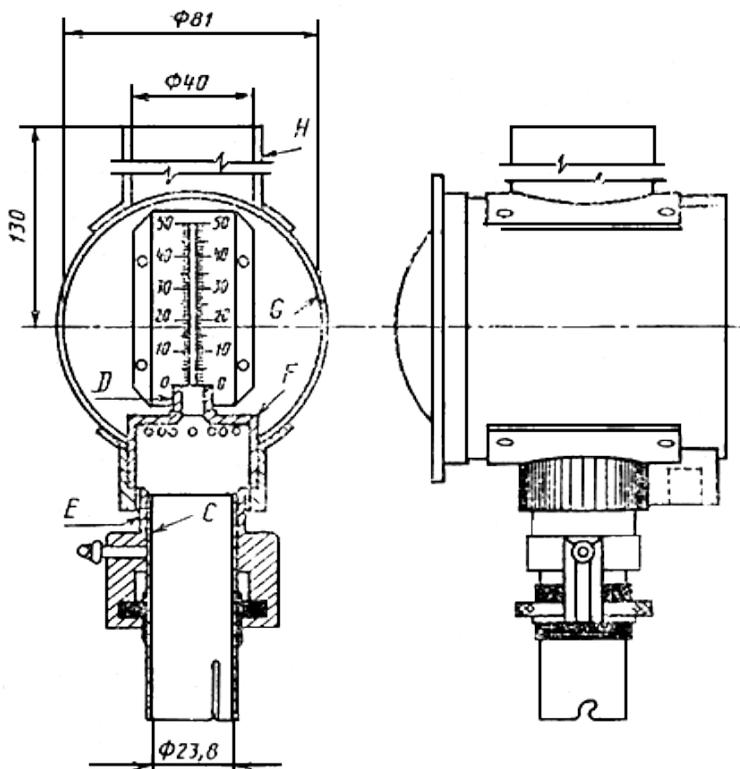


Рисунок 6.6 – Лампа для определения высоты некоптящего пламени:

- 1 – резервуар; 2 – втулка для резервуара; 3 – камера;  
4 – направляющая фитиля; 5 – шкала; 6 – вытяжная труба

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Edwards, T. Surrogate Mixtures to represent complex aviation and rocket fuels [Text] / T. Edwards, L. Maurice // Journal of propulsion and Power, 2001. – V. 17, №2. – P. 461–466.
2. Dooley, S. A jet fuel surrogate formulated by real fuel properties [Text] / S. Dooley, S.H. Won, M. Chaos, J. Heyne, Y. Ju, F.L. Dryer, K. Kumar, C. Sung, H. Wang, M.A. Oehlschlaeger, R.J. Santoro, T. A. Litzinger // Combust Flame, 2010. – V. 157, № 12. – P. 2333–2339.
3. Dooley, S. The experimental evaluation of a methodology for surrogate fuel formulation to emulate gas phase combustion kinetic phenomena [Text] / S. Dooley, S.H. Won, J. Heyne, T.I. Farouk, Y. Ju, F.L. Dryer, K. Kumar, X. Hui, C.-J. Sung, H. Wang, M. A. Oehlschlaeger, V. Iyer, S. Iyer, T. A. Litzinger, R. J. Santoro, T. Malewicki, K. Brezinsky // Combust. Flame, 2012. – V. 159, № 4. – P. 1444–1466.
4. Yu, W. Development of an optimization methodology for formulating both jet fuel and diesel fuel surrogates and their associated skeletal oxidation mechanisms [Text] / W. Yu, F. Zhao, W Yang, K. Tay, H. Xu. // Fuel, 2018 – V. 231 – P. 361–372.
5. Patrick G. Szymkowicz. Development of a Diesel Surrogate Fuel Library / Patrick G. Szymkowicz, Jesús Benajes // Fuel. – Vol. 222, 2018. – P. 21–34. – ISSN 0016-2361.
6. Thermophysical properties of chemicals and hydrocarbons / Yaws Carl L. Yaws. – 2008.
7. Development and validation of surrogates for RP-3 jet fuel based on chemical deconstruction methodology / Ang Li, Zhenyingnan Zhang, Xiaogang Cheng, Xingcai Lu, Lei Zhu, Zhen Huang. – 2020.
8. Transport properties of chemicals and hydrocarbons. Viscosity, Thermal conductivity, and Diffusivity of C1 to C100 organics / Carl L. Yaws. – 2009.
9. Perry's Chemical Engineers' Handbook / Don W. Green, Robert H. Perry. – 2008.

10. Development and validation of surrogates for RP-3 jet fuel based on chemical deconstruction methodology / Ang Li, Zhenyingnan Zhang, Xiaogang Cheng, Xingcai Lu, Lei Zhu, Zhen Huang. – 2020.

11. Retzekas E. et. al. (2002). Prediction of Physical Properties of Hydrocarbons, Petroleum, and Coal Liquid Fractions. Industrial & Engineering Chemistry Research. – 41(6). – P. 1695–1702.

12. Дубовкин Н.Ф. Физико-химические и эксплуатационные свойства ракетных топлив / Н.Ф. Дубовкин [и др.]. – М.: Химия, 1985. – 240 с.

13. Братков А.А. Теоретические основы химмотологии [Текст] / А.А. Братков // Химия, Москва. – 1985. – 320 с.

14. Давление насыщенных паров для нефти / Ф.Ш. Хафизов, А.В. Краснов // Электронный научный журнал «Нефтегазовое дело». – 2012. – №3.

15. Carl L. Yaws. Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds [Текст] / C.L. Yaws. – 2003. – 2078 с.

16. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel / Doohyun Kim, Jason Martz, Angela Violi. - 2014.

17. Sooting characteristics of surrogates for jet fuels / Mensch Amy, Santoro Robert, Litzinger Thomas, Litzinger, Lee S. – 2010.

18. ГОСТ 3900-85. Нефть и нефтепродукты. Методы определения плотности [Текст]. – Введ. 1987-01-01. – М.: Издательство стандартов, 1985. – 36 с.

19. ГОСТ Р 53708-2009. Нефтепродукты. Жидкости прозрачные и непрозрачные. Определение кинематической вязкости и расчёт динамической вязкости [Текст]. – Введ. 2011-01-01. – М.: Издательство стандартов, 2009. – 20 с.

20. ГОСТ 50003-92. Вещества поверхностно-активные. Определение поверхностного натяжения путем вытягивания жидких пленок [Текст]. Введ. 1993-07-01. – М.: Издательство стандартов, 1992.

21. ГОСТ 18995.6-73. Продукты химические органические. Методы определения температуры кипения [Текст]. Введ. 1974-07-01. – М.: Издательство стандартов, 1998.

22. ГОСТ 1756-2000. Нефтепродукты. Определение давления насыщенных паров [Текст]. – Введ. 2001-07-01. – М.: Издательство стандартов, 2000. – 15 с.

23. ГОСТ 57712-2017 Метод определения удельной теплоемкости [Текст]. – Введ. 2018-02-01. – М.: Издательство Стандартиформ, 2000.

24. ГОСТ 21261-91. Нефтепродукты. Метод определения высшей теплоты сгорания и вычисление низшей теплоты сгорания [Текст]. – Введ. 1992-07-01. – М.: Издательство Стандартиформ, 2006.

25. ГОСТ EN 15195-2014. Нефтепродукты жидкие средние дистиллятные топлива [Текст]. – Введ. 2017-01-01. – М.: Издательство стандартов, 2014. – 23 с.

26. ГОСТ 4338-91. Топливо для авиационных газотурбинных двигателей. Определение высоты некопящего пламени [Текст]. – Введ. 1993-01-01. – М.: Издательство стандартов, 1991. – 11 с.

27. NIST Chemistry WebBook [Электронный ресурс]. – URL: <https://webbook.nist.gov/chemistry/>

28. Goossens, A. G. Prediction of Molecular Weight of Petroleum Fractions [Text] / A.G. Goossens // Industrial & Engineering Chemistry Research, 1996. – V. 35, № 3. – P. 985–988.

29. Yu, J. Surrogate fuel formulation for oxygenated and hydrocarbon fuels by using the molecular structures and functional groups [Text] / J. Yu, Y. Ju, X. Gou // Fuel, 2016. – V. 166. – P. 211–218.

30. Won, S.H. Reconstruction of chemical structure of real fuel by surrogate formulation based upon combustion property targets [Text] / S.H. Won, F.M. Haas, S. Dooley, T. Edwards, F.L. Dryer // Combust. Flame, –2017. – V. 183. – P. 39–49.

31. Humer, S. Experimental and kinetic modeling study of combustion of JP-8, its surrogates and reference components in laminar nonpremixed flows [Text] / S. Humer, A. Frassoldati, S. Granata, T. Faravelli, E. Ranzi,

R. Seiser // Proceedings of the Combustion Institute, 2007. –V. 31, № 1. – P. 393–400.

32. Colket, M.B. Development of an Experimental Database and Kinetic Models for Surrogate Jet Fuels [Text] / M.B. Colket, T. Edwards, S. Williams, N.P. Cernansky, D.L. Miller, F.N. Egolfopoulos, P. Lindstedt, K. Seshadri, F.L. Dryer, C.K. Law, D. Friend, D.B. Lenhert, H. Pitsch, A. Sarofim, M. Smooke, W. Tsang // AIAA, 2007. – № 770. – P. 1–25.

33. Lindstedt, R.P. Detailed chemical-kinetic model for aviation fuels [Text] / R.P. Lindstedt, L.Q. Maurice // J. Propulsion and Power, 2000. – V. 16, N. 2. – P. 187–195.

34. Kim, D. A surrogate for emulating the physical and chemical properties of conventional jet fuel [Text] / D. Kim, J. Martz, A. Violi // Combustion and Flame, 2014. – V. 161, I. 6. – P. 1489–1498.

35. Jing Liu. A new surrogate fuel for emulating the physical and chemical properties of RP-3 kerosene [Text] / Jing Liua, Erjiang Hua, Wen Zengb, Weilin Zheng // Fuel, 2020. – V. 259.

36. Vasu, S.S. Jet fuel ignition delay times: Shock tube experiments over wide conditions and surrogate model predictions [Text] / S.S. Vasu, D.F. Davidson, R.K. Hanson // Combust. Flame, 2008. – V. 152, № 1. – P. 125–143.

37. Семенихин А.С. Кинетический механизм горения суррогата керосина [Текст] // Семенихин А.С., Идрисов Д.В., Григорьев Е.М., Матвеев С.С., Гураков Н.И., Зубрилин И.А., Чечет И.В., Матвеев С.Г. // Процессы горения, теплообмена и экологии тепловых двигателей, 2019. – С. 77–78.

## ПРИЛОЖЕНИЕ А

Таблица А.1 – Список вариантов

	1	2	3	4	5	6
CAS#	2007 Surrogate C [31]	2007 Surrogate D [32]	2007 Surrogate E [32]	2000 Lindstedt [33]	2017 Won Surrogate 1 [30]	2012 Dooley 2nd generation POSF 4658 [3]
124-18-5		50%	34%	94,6%		
112-40-3	60%				59,6%	50,7%
629-59-4						
111-65-9						
540-84-1					18,1%	26,2%
591-76-4						
4390-04-9						
108-87-2	20%					
1678-93-9		25%	33%			
104-51-8		25%	33%			
95-47-6	20%					
71-43-2				5,4%		
108-88-3						
103-65-1						17,5%
108-67-8					22,3%	5,6%
592-27-8						

Продолжение таблицы А.1

	7	8	9	10	11	12
Вариант	2002 Violi №3	2010 Dooley Ind generation POSF 4658 [2]	2020 Li S1 [10]	2020 Li S2 [10]	2016 Yu New1stG [29]	2016 Yu New2stG [29]
CAS#	Формула					
124-18-5	C10H22	51,2%			64,1%	
112-40-3	C12H26	73,5%	6,6%	20,6%		59,1%
629-59-4	C14H30					
111-65-9	C8H18					
540-84-1	C8H18	5,5%	32,9%		20,2%	19,7%
591-76-4	C7H16					
4390-04-9	C16H34		50%	28,6%		
108-87-2	C7H14	10%				
1678-93-9	C10H20					
104-51-8	C10H14					
95-47-6	C8H10		9,8%	7%		
71-43-2	C6H6	1%				
108-88-3	C7H8	10%	15,9%		15,7%	
103-65-1	C9H12					17,7%
108-67-8	C9H12					3,5%
592-27-8	C8H18		1,5%	3,3%		
91-17-8	C10H18		32,1%	40,5%		

Продолжение таблицы А.1

	Вариант	13	14	15	16	17
CAS#	Формула	2014 Kim UM1 [34]	2014 Kim UM2 [34]	2020 Liu [35]	2007 Surrogate A [32]	2007 Surrogate B [32]
124-18-5	C10H22			14%	60%	60%
112-40-3	C12H26	47,2%	36%	11,7%		
629-59-4	C14H30					
111-65-9	C8H18					
540-84-1	C8H18					
591-76-4	C7H16					
4390-04-9	C16H34	23,5%	22,8%	45,3%		
108-87-2	C7H14	16%		23,6%	20%	20%
1678-93-9	C10H20					
104-51-8	C10H14					
95-47-6	C8H10					20%
71-43-2	C6H6					
108-88-3	C7H8	13,3%	14,4%	5,4%	20%	
103-65-1	C9H12					
108-67-8	C9H12					
592-27-8	C8H18					
91-17-8	C10H18		26,8%			

Продолжение таблицы А.1

	Вариант	18	19	20	21
CAS#	Формула	SU 1 [37]	SU 2 [37]	SU 4	SU 5
124-18-5	C10H22	30,0%	20,0%	52,7%	
112-40-3	C12H26	20,0%	40,0%		45,8%
629-59-4	C14H30				
111-65-9	C8H18				
540-84-1	C8H18				
591-76-4	C7H16				
4390-04-9	C16H34	15,0%		20,5%	
108-87-2	C7H14	20,0%		10,6%	
1678-93-9	C10H20		25,0%		11,4%
104-51-8	C10H14				
95-47-6	C8H10	10,0%			
71-43-2	C6H6		15,0%		42,8%
108-88-3	C7H8				
103-65-1	C9H12				
108-67-8	C9H12				
592-27-8	C8H18				
91-17-8	C10H18				
119-64-2	C10H12	5,0%		16,2%	

## ПРИЛОЖЕНИЕ Б

Таблица Б.1 – Свойства керосина

№	Свойство топлива	Процессы в КС	Значения
1.	Плотность при 20°С, кг/м <sup>3</sup>	Распыл	786,4
2.	Плотность при 30°С, кг/м <sup>3</sup>	Распыл	779,0
3.	Плотность при 40°С, кг/м <sup>3</sup>	Распыл	771,9
4.	Плотность при 50°С, кг/м <sup>3</sup>	Распыл	764,2
5.	Вязкость при 20°С, Па·с	Распыл	0,00118
6.	Вязкость при 30°С, Па·с	Распыл	0,00100
7.	Вязкость при 40°С, Па·с	Распыл	0,00087
8.	Вязкость при 50°С, Па·с	Распыл	0,00077
9.	Коэффициент поверхностного натяжения при 20°С, мН/м	Распыл	24
10.	Критическая температура, К	Нагрев и испарение	647
11.	Критическое давление, кПа	Нагрев и испарение	2420
12.	Критическая плотность, кг/м <sup>3</sup>	Нагрев и испарение	250
13.	Давление насыщенных паров при 20°С, мм рт.ст.	Нагрев и испарение	33
14.	HU, МДЖ/кг	Горение	43,4
15.	MW, г/моль	Горение	144
16.	H/C	Горение	1,97
17.	DCN	Горение	41,7
18.	TSI	Горение	21,8

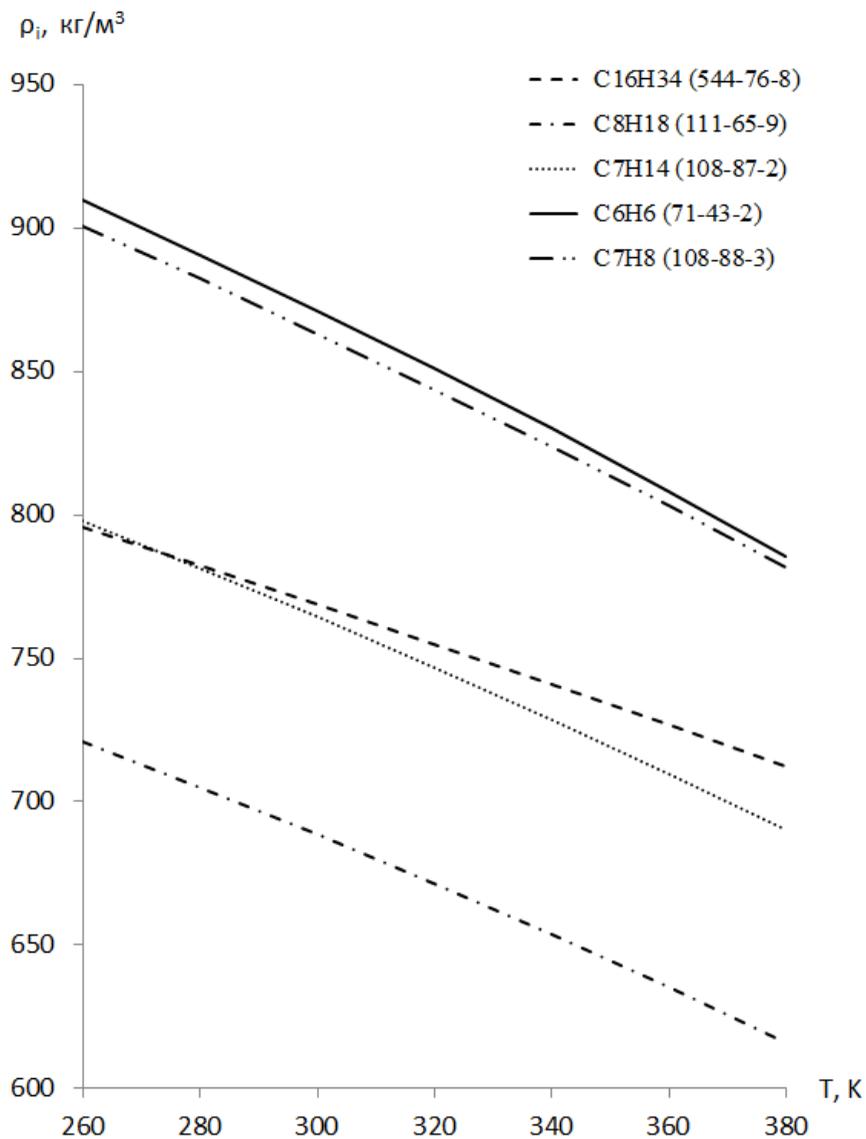


Рисунок Б.1 – Пример графика зависимости плотности компонентов от температуры

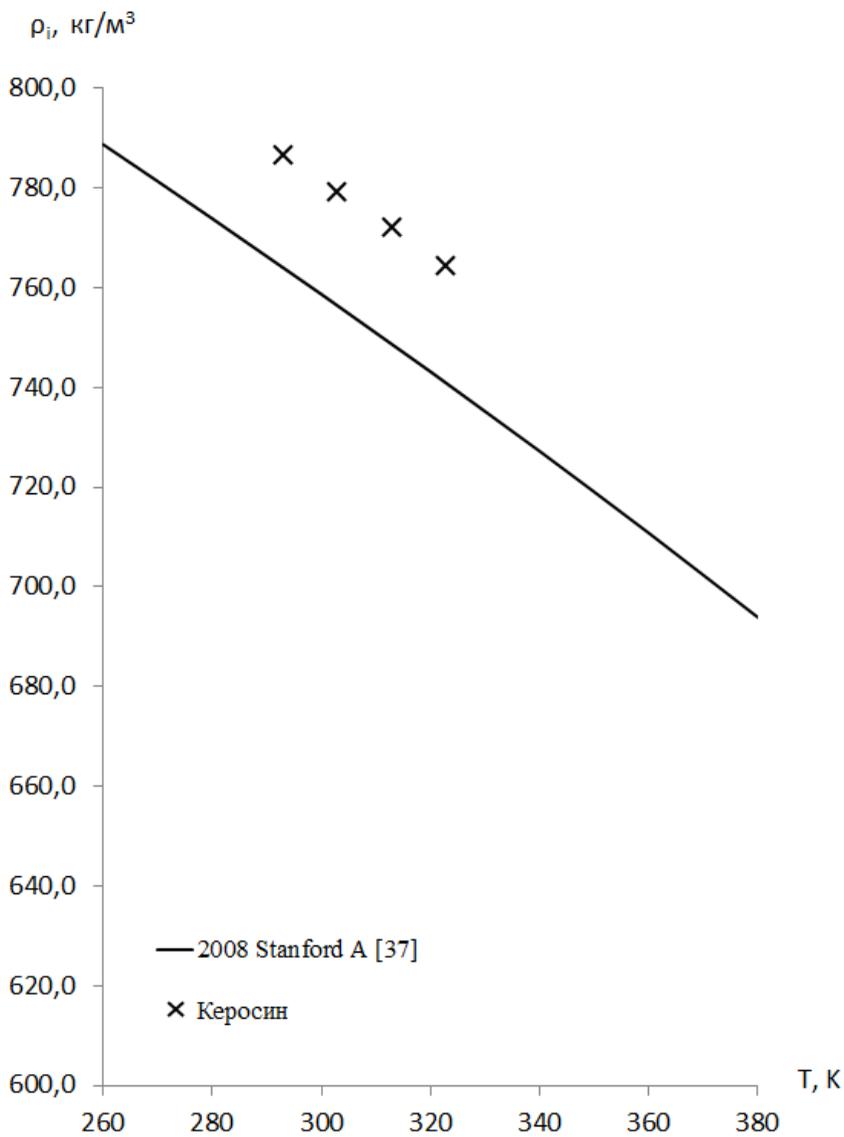


Рисунок Б.2 – Пример графика зависимости плотности смеси от температуры

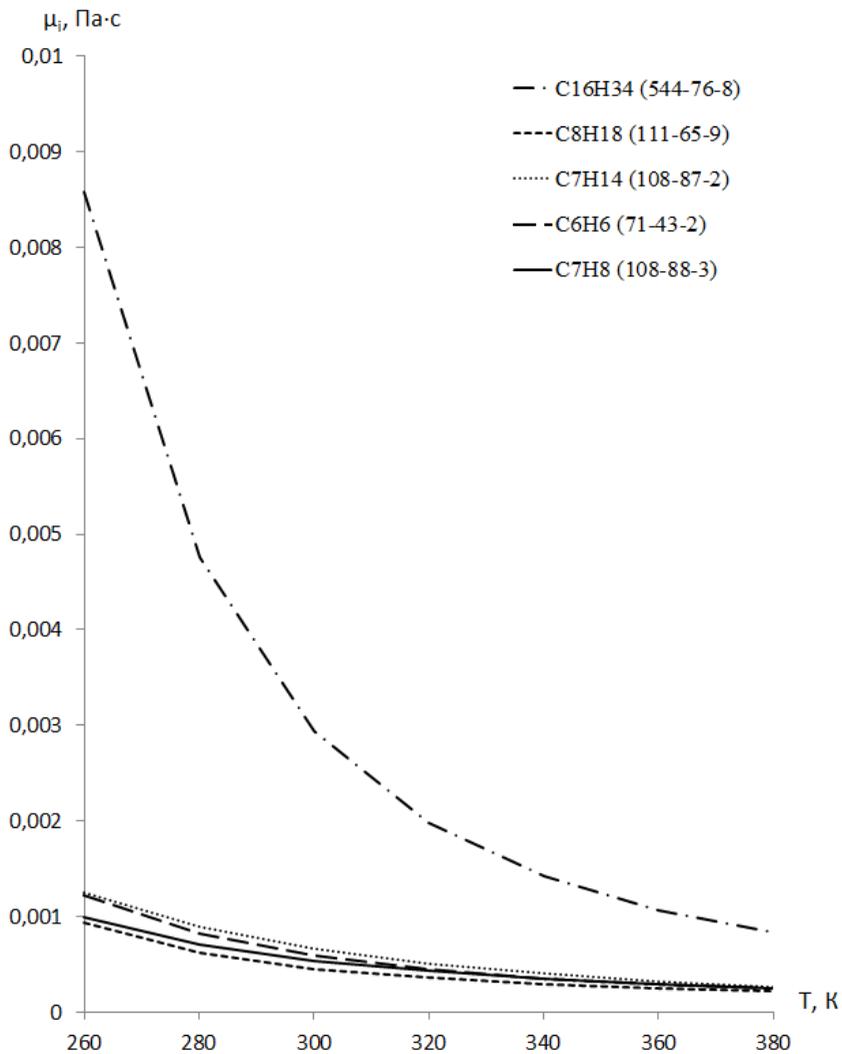


Рисунок Б.3 – Пример графика зависимости динамической вязкости компонентов от температуры

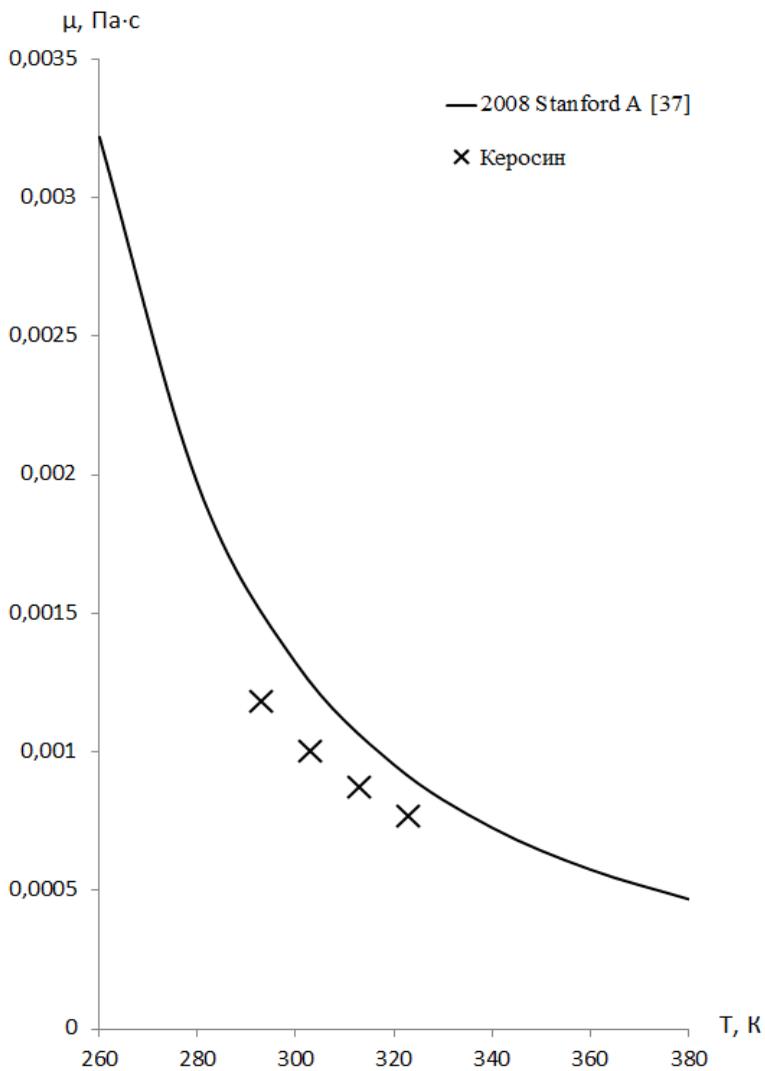


Рисунок Б.4 – Пример графика зависимости динамической вязкости смеси от температуры

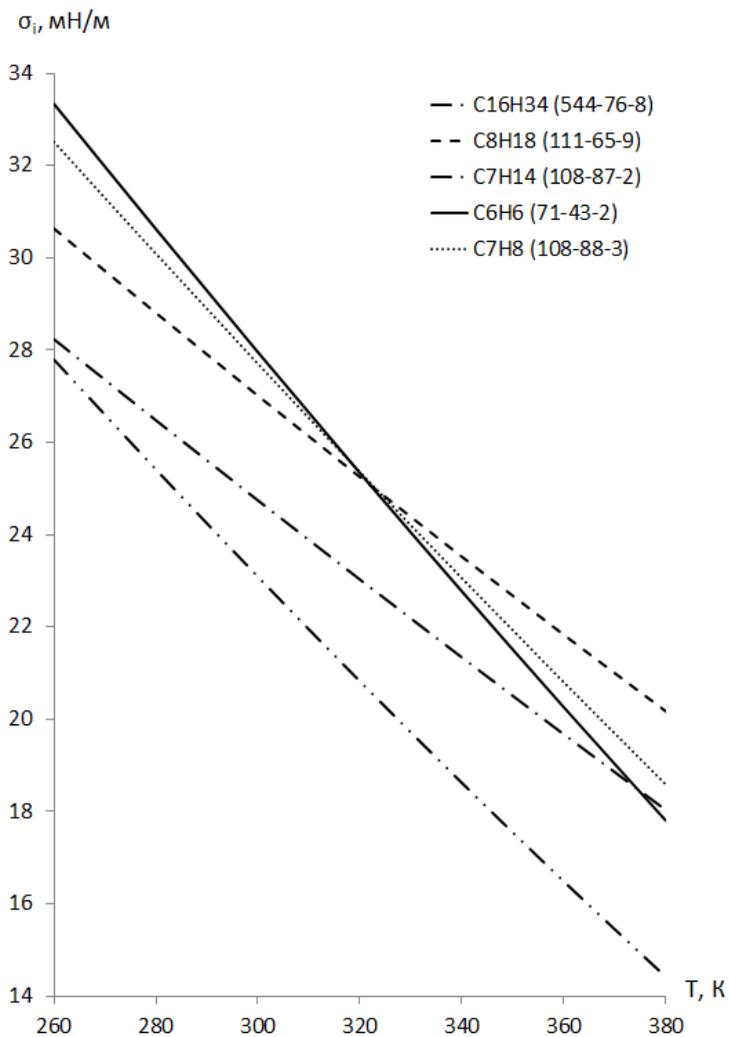


Рисунок Б.5 – Пример графика зависимости коэффициента поверхностного натяжения компонентов от температуры

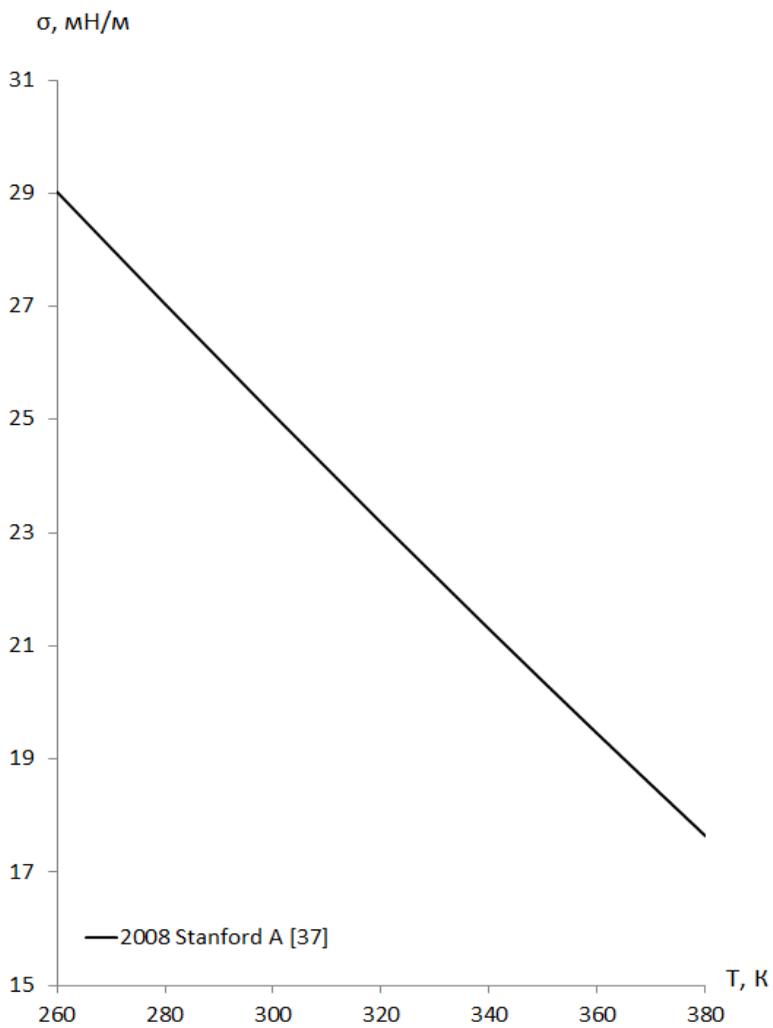


Рисунок Б.6 – Пример графика зависимости коэффициента поверхностного натяжения смеси от температуры

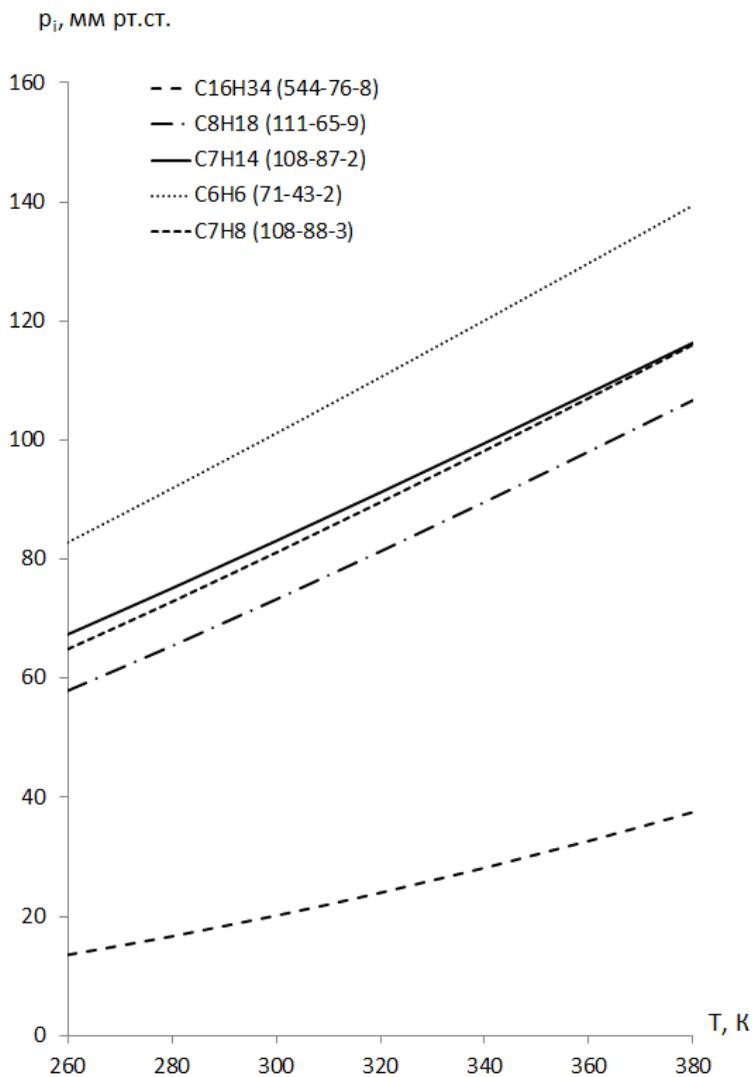


Рисунок Б.7 – Пример графика зависимости давления насыщенных паров компонентов от температуры

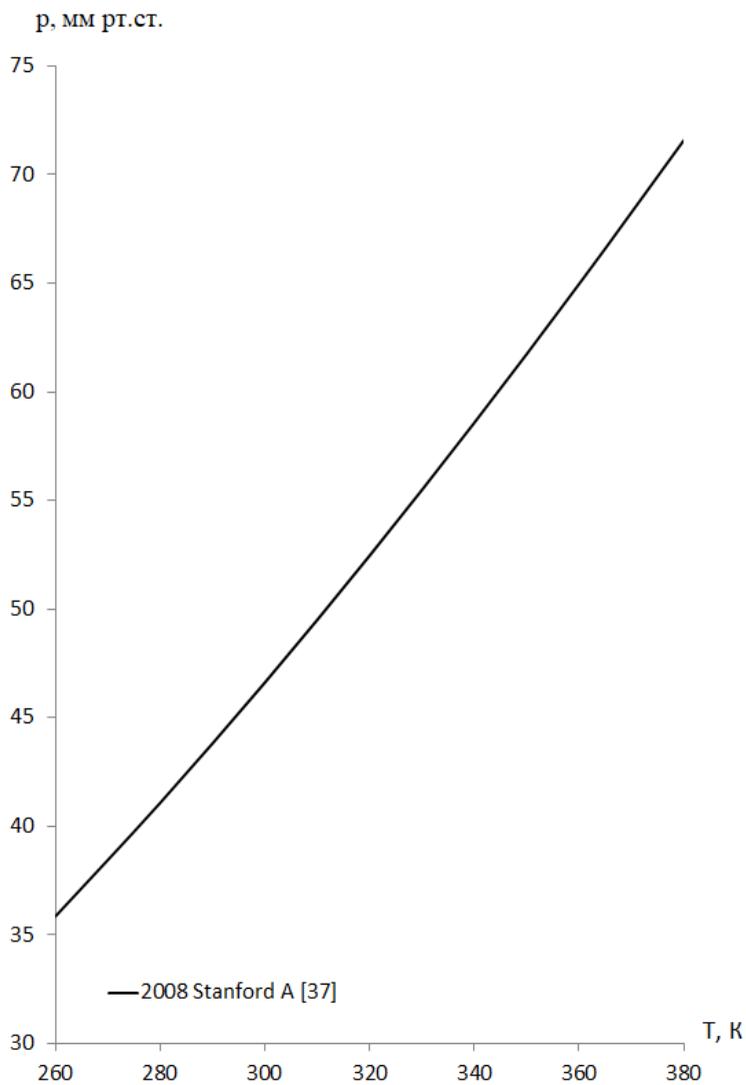


Рисунок Б.8 – Пример графика зависимости давления насыщенных паров смеси от температуры

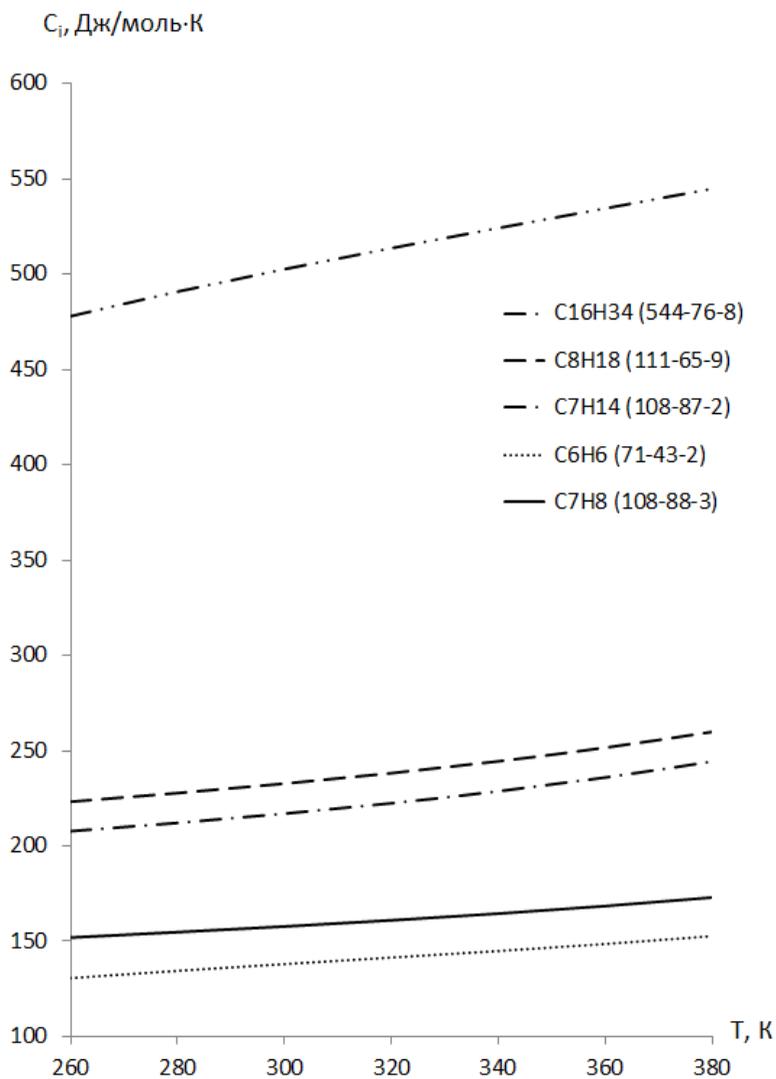


Рисунок Б.9 – Пример графика зависимости  
удельной теплоемкости компонентов от температуры

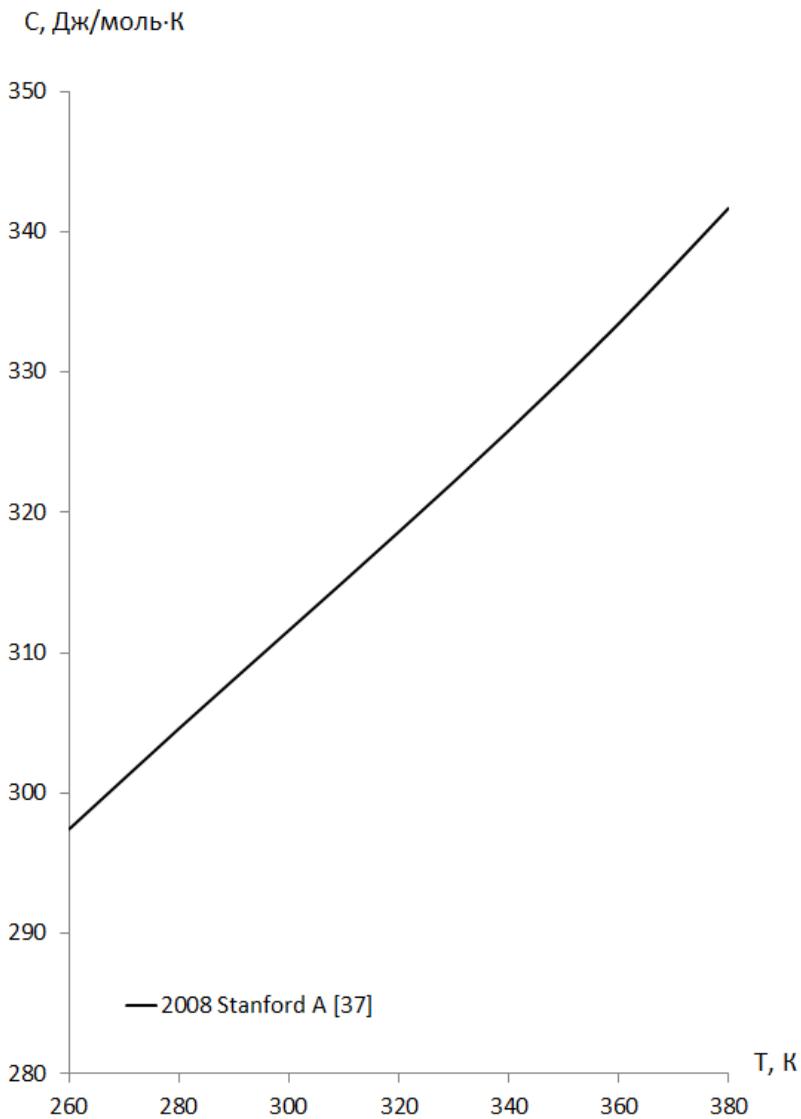


Рисунок Б.10 – Пример графика зависимости удельной теплоемкости смеси от температуры

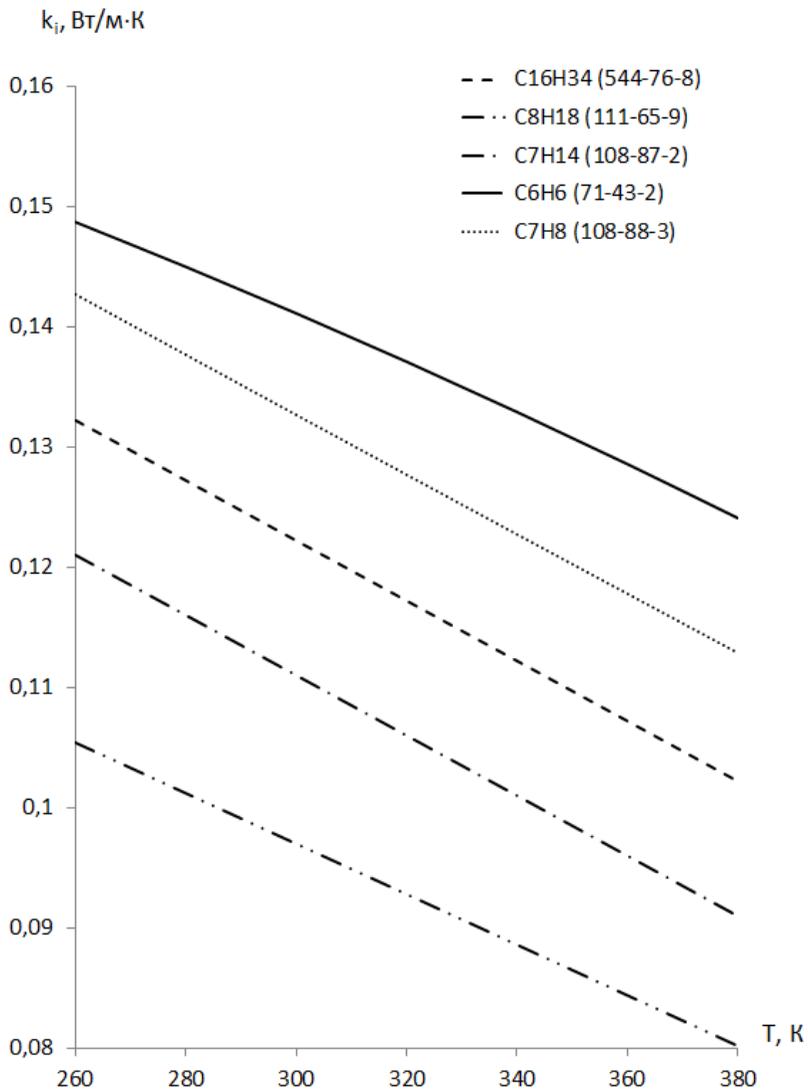


Рисунок Б.11 – Пример графика зависимости теплопроводности компонентов от температуры

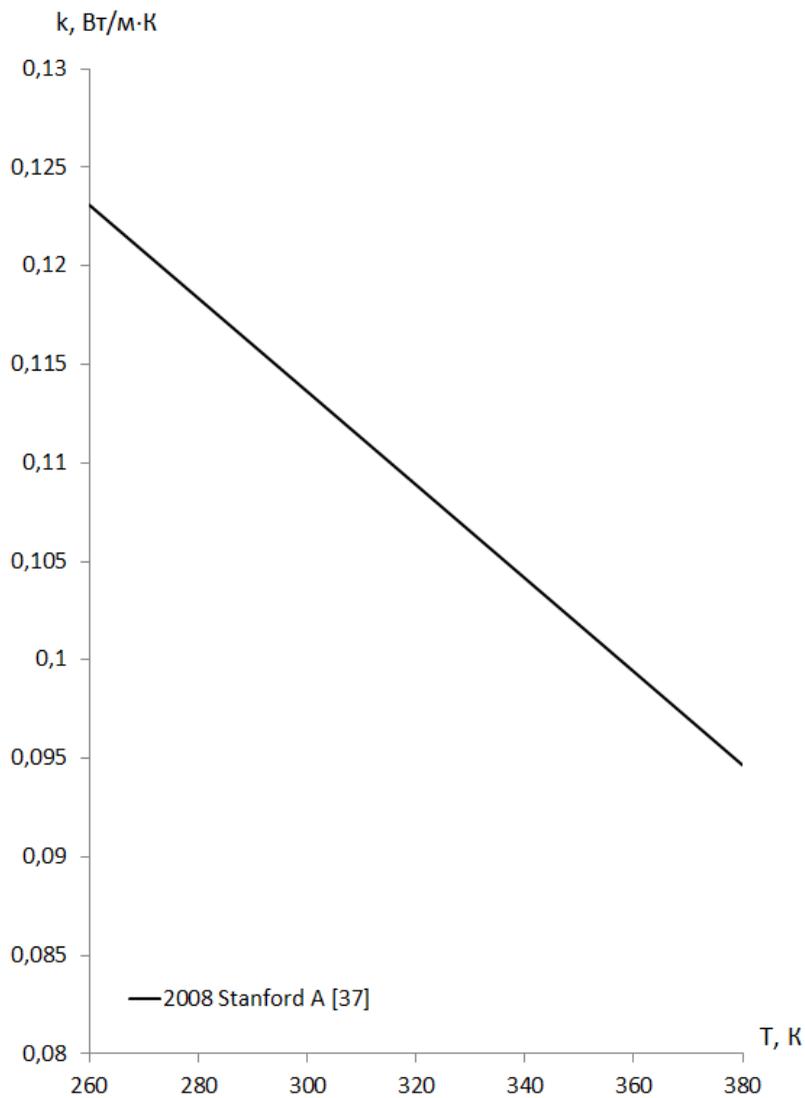


Рисунок Б.12 – Пример графика зависимости теплопроводности смеси от температуры

## ПРИЛОЖЕНИЕ В

Таблица В.1 – Коэффициенты для определения критической температуры [11]

Параметр/группа	$T_K$ (K)	$T_{кр}$ (K)	$p_{кр}$ (bar)
<b>a</b>	50.4965	106.7092	4651.7280
<b>b</b>	0.6591	0.8746	1.1815
<b>c</b>	0.4875	0.4016	-1.0412
<b>d</b>	37.45	101.26	5.28
<b>CH<sub>3</sub></b>	-7.73	-3.0	-0.78
<b>-CH<sub>2</sub>-</b>	-4.78	-9.16	-0.14
<b>&gt;CH-</b>	-8.08	-24.96	0.52
<b>&gt;C&lt;</b>	-12.28	-30.90	2.33
<b>=CH<sub>2</sub></b>	-8.88	-8.24	0.35
<b>=CH-</b>	-4.57	-6.35	-0.95
<b>=C&lt;</b>	-4.51	-22.15	-0.47
<b>=C=</b>	0.58	15.72	нет
<b>≡CH</b>	-9.79	-13.22	-4.24
<b>≡CH-</b>	-3.44	4.64	-4.24
<b>-CH<sub>2</sub>- (кольцо)</b>	-8.39	-8.74	0.21
<b>&gt;CH- (кольцо)</b>	-13.12	-19.38	0.02
<b>&gt;C&lt; (кольцо)</b>	-27.55	-41.36	1.75
<b>=CH- (кольцо)</b>	-11.09	-13.41	0.20
<b>=C&lt; (кольцо)</b>	-5.53	-14.68	0.48

## ПРИЛОЖЕНИЕ Г

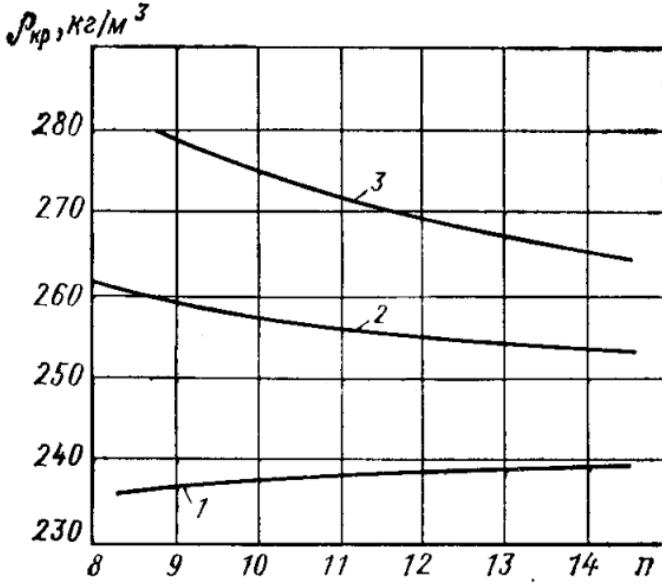


Рисунок Г.1 – График для определения критических плотностей компонентов (1 – парафиновых и олефиновых, 2 – нафтеновых и 3 – ароматических) в зависимости от числа атомов углерода  $n$  [12]



Парафины



Изопарафины



Олефины



Нафтены



Ароматические

Рисунок Г.2 – Примеры структурных формул углеводородов различных групп

## ПРИЛОЖЕНИЕ Д

Таблица Д.1 – Значение DCN для некоторых компонентов

CAS #	Формула компонента	Формула компонента	DCN	Источник
124-18-5	C10H22	n-decane	66.35	[13]
112-40-3	C12H26	n-dodecane	73.45	[13]
629-59-4	C14H30	n-tetradecane	90.05	[13]
111-65-9	C8H18	n-octane	61.3	[13]
540-84-1	C8H18	iso-octane	18.9	[13]
591-76-4	C7H16	2-Methylhexane	43.5	[13]
4390-04-9	C16H34	iso-cetane	14.625	[13]
108-87-2	C7H14	methylcyclohexane	22.475	[13]
1678-93-9	C10H20	butylcyclohexane	47.8	[13]
104-51-8	C10H14	butylbenzene	12.45	[13]
95-47-6	C8H10	o-xylene	8.3	[16]
71-43-2	C6H6	benzene	14.3	[14]
108-88-3	C7H8	Toluene	6	[16]
103-65-1	C9H12	n-Propylbenzene	8.9	[15]
108-67-8	C9H12	1,3,5-Trimethylbenzen	8	[16]
592-27-8	C8H18	2-methylheptane	49.8	[13]
91-17-8	C10H18	Decalin	36.2	[13]

## ПРИЛОЖЕНИЕ Е

Таблица Е.1 – Значение TSI для некоторых компонентов

CAS #	Формула компонента	Название компонента	TSI	Источник
124-18-5	C <sub>10</sub> H <sub>22</sub>	n-decane	<b>5,4</b>	[17]
112-40-3	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	n-dodecane	<b>7</b>	[17]
629-59-4	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	n-tetradecane	33.83	[17]
111-65-9	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	n-octane	3.2	[18]
540-84-1	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	iso-octane	5.6	[18]
591-76-4	C <sub>7</sub> H <sub>16</sub>	2-Methylhexane	3.2	[18]
4390-04-9	C <sub>16</sub> H <sub>34</sub>	iso-cetane	22	[17]
108-87-2	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub>	methylcyclohexane	6.4	[17]
1678-93-9	C <sub>10</sub> H <sub>20</sub>	butylcyclohexane	17.16	[17]
104-51-8	C <sub>10</sub> H <sub>14</sub>	butylbenzene	54.5	[17]
95-47-6	C <sub>8</sub> H <sub>10</sub>	o-xylene	47.6	[17]
71-43-2	C <sub>6</sub> H <sub>6</sub>	benzene	31	[17]
108-88-3	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub>	Toluene	40	[17]
103-65-1	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	n-Propylbenzene	52	[17]
108-67-8	C <sub>9</sub> H <sub>12</sub>	1,3,5-Trimethylbenzen	61	[17]
592-27-8	C <sub>8</sub> H <sub>18</sub>	2-methylheptane	3.5	[18]
91-17-8	C <sub>10</sub> H <sub>18</sub>	Decalin	22	[1]

## ПРИЛОЖЕНИЕ Ж

Таблица Ж.1 – Коэффициенты для определения теплоемкости [11]

CAS #	Формула компонента	A	B	C	D
124-18-5	C10H22	<b>79.74</b>	1.693	-4.529E-03	4.977E-06
112-40-3	C12H26	<b>84.49</b>	2.036	-5.098E-03	5.219E-06
629-59-4	C14H30	111.8	2.209	-5.256E-03	5.087E-06
111-65-9	C8H18	29.05	0.5802	-5.710E-05	-1.955E-07
540-84-1	C8H18	122.8	0.7949	-2.498E-03	3.565E-06
591-76-4	C7H16	118.2	0.7128	-2.313E-03	3.449E-06
4390-04-9	C16H34	89.10	2.706	-6.148E-03	5.752E-06
108-87-2	C7H14	103.7	0.4622	-1.397E-03	2.055E-06
1678-93-9	C10H20	182.0	0.5122	-1.229E-03	1.721E-06
104-51-8	C10H14	140.2	0.7201	-1.892E-03	2.307E-06
95-47-6	C8H10	56.46	0.9493	-2.490E-03	2.684E-06
71-43-2	C6H6	-31.66	1.304	-3.608E-03	3.824E-06
108-88-3	C7H8	83.70	0.5167	-1.491E-03	1.973E-06
103-65-1	C9H12	123.5	0.6197	-1.688E-03	2.161E-06
108-67-8	C9H12	83.64	0.8786	-2.319E-03	2.599E-06
592-27-8	C8H18	135.0	0.8146	-2.518E-03	3.542E-06
91-17-8	C10H18	140.2	0.9253	-2.239E-03	2.388E-06

### ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Таблица 3.1 – Коэффициенты для определения теплопроводности [15]

CAS #	Формула компонента	A	B	C
124-18-5	C10H22	<b>0.222</b>	-3.256E-04	1.128E-07
112-40-3	C12H26	<b>0.229</b>	-3.593E-04	2.000E-07
629-59-4	C14H30	0.196	-2.000E-04	0
111-65-9	C8H18	0.223	-3.299E-04	5.469E-08
540-84-1	C8H18	0.160	-2.100E-04	0
591-76-4	C7H16	0.186	-2.500E-04	0
4390-04-9	C16H34	0.197	-2.500E-04	0
108-87-2	C7H14	0.156	-1.094E-04	-1.200E-07
1678-93-9	C10H20	0.169	-2.000E-04	0
104-51-8	C10H14	0.191	-2.336E-04	6.838E-08
95-47-6	C8H10	0.187	-1.469E-04	-1.226E-07
71-43-2	C6H6	0.183	-8.207E-05	-1.921E-07
108-88-3	C7H8	0.210	-2.856E-04	2.692E-08
103-65-1	C9H12	0.194	-2.413E-04	5.926E-08
108-67-8	C9H12	0.195	-2.033E-04	0
592-27-8	C8H18	0.190	-2.567E-04	0
91-17-8	C10H18	0.160	-1.477E-04	0

## ПРИЛОЖЕНИЕ И

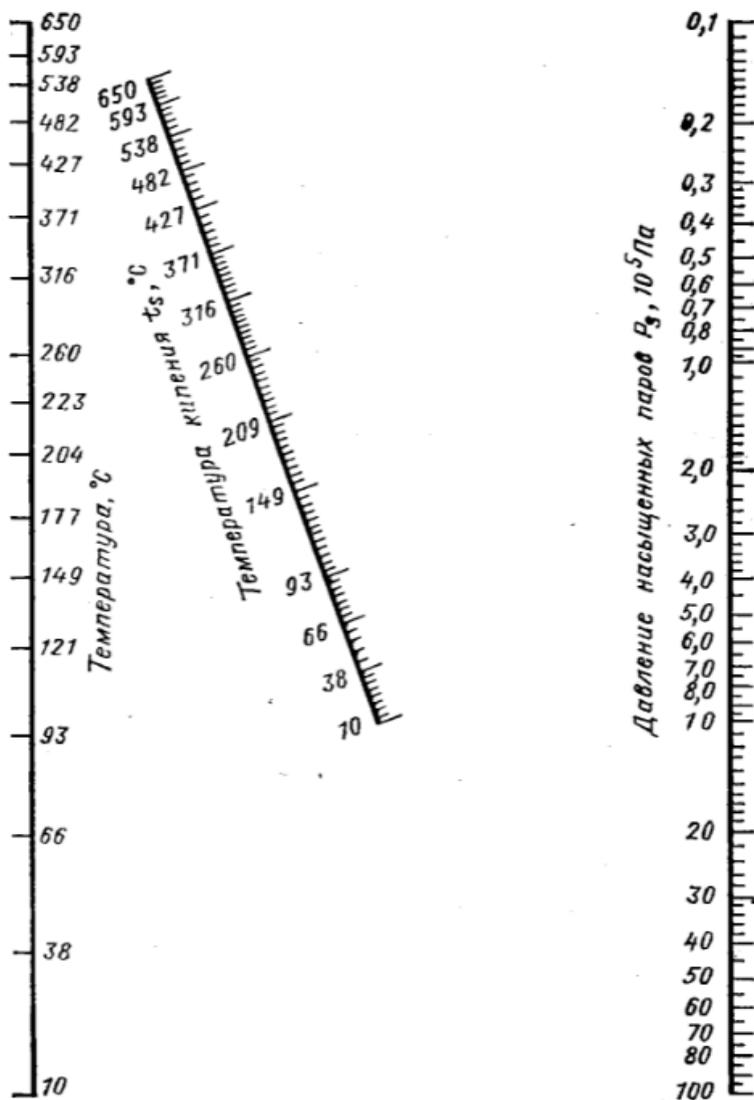


Рисунок И.1 – Номограмма определения давления насыщенных паров [13]

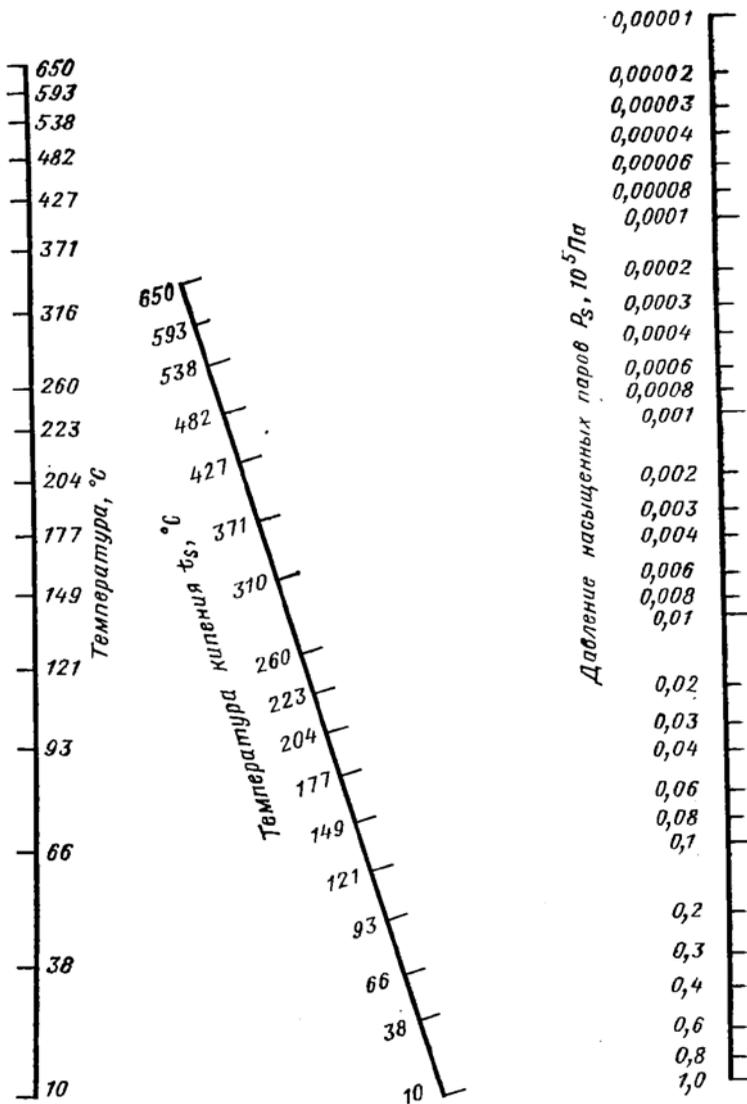


Рисунок И.2 – Номограмма определения давления насыщенных паров [13]

*Учебное издание*

***Цапенков Константин Дмитриевич  
Зубрилин Иван Александрович  
Эрнандэс Моралес Марио  
Новичкова Софья Сергеевна***

**РАСЧЕТ СВОЙСТВ СМЕСЕВЫХ  
УГЛЕВОДОРОДНЫХ ТОПЛИВ  
ПРИ ПРОЕКТИРОВАНИИ КАМЕР СГОРАНИЯ  
ГАЗОТУРБИННЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ**

*Учебное пособие*

Редакционно-издательская обработка  
И.И. Спиридоновой

Подписано в печать 15.12.2022. Формат 60x84 1/16.  
Бумага офсетная. Печ. л. 4,25.  
Тираж 25 экз. Заказ № . Арт. – 28(Р2УП)/2022

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«САМАРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АКАДЕМИКА С.П. КОРОЛЕВА»  
(САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)  
443086, Самара, Московское шоссе, 34.

---

Издательство Самарского университета.  
443086, Самара, Московское шоссе, 34.