Тепловые процессы в технике. 2024. Т. 16. № 8. С. 386–395 Thermal processes in engineering, 2024, vol. 16, no. 8, pp. 386–395

Научная статья УДК 621.45.022 URL: https://tptmai.ru/publications.php?ID=183185 EDN: https://www.elibrary.ru/KZMYLW

## Валидация расчетной методики определения кривой дистилляции для смесевых углеводородных топлив, включающих биокомпоненты

# К.Д. Цапенков<sup>1</sup><sup>∞</sup>, Ю.Г. Кураева<sup>1</sup>, Е.И. Сидорова<sup>1</sup>, А.Е. Штырлов<sup>1</sup>, В.В. Ястребов<sup>1</sup>, И.А. Зубрилин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Самарский университет, Самара, Россия <sup>⊠</sup>tsapenkov@inbox.ru

Аннотация. Данная работа посвящена актуальной теме внедрения биотоплив в авиационную отрасль, что является важным шагом к снижению углеродного следа и улучшению экологической ситуации. В рамках исследования проводится апробация расчетных методик определения давления насыщенных паров для различных видов топлива. Рассмотренные методики необходимы для расчетного определения кривой дистилляции по предложенному в данной работе алгоритму.

В статье представлен алгоритм расчетного определения кривых дистилляции многокомпонентных топлив, включающих как традиционные нефтяные углеводороды, так и биокомпоненты. Кроме того, работа включает обзор существующих расчетных методик, применяемых для определения давления насыщенных паров нефтяных углеводородов и оксигенатов при заданной температуре. Важной является возможность определения давления насыщенных паров в диапазоне температур, а не при ее конкретном значении, так как температура постоянно меняется в процессе построения кривой дистилляции. Приводятся справочные данные о давлении насыщенных паров различных топлив, которые используются для валидации расчетных методик. Особое внимание уделено новым экспериментальным данным о кривых дистилляции смесей, состоящих из нефтяных углеводородов и различных оксигенатов, таких как спирты, кетоны и альдегиды. Это расширяет понимание взаимодействия между компонентами и их влияния на характеристики топлива. С помощью представленных методик расчета давления насыщенных паров были построены расчетные кривые дистилляции, которые затем сопоставлены с результатами экспериментов. Помимо валидации на справочных данных представленные методики были проанализированы с точки зрения удобства их применения и точности при расчетном определении кривой дистилляции.

В результате проделанной работы, рекомендуется наиболее подходящая расчетная методика для построения кривой дистилляции смесей нефтяных углеводородов с оксигенатами, что может быть использовано при разработке суррогатов авиационных топлив для моделирования процессов нагрева и испарения. Некоторые расчетные кривые показали значительное отклонение от экспериментальных в начале графика, это может быть связано с тем, что для определения давления насыщенных паров смесей нефтяных углеводородов с оксигенатами необходимо применять коэффициенты активности, так как нефтяные углеводороды и оксигенаты представляют разные

<sup>©</sup> Цапенков К.Д., Кураева Ю.Г., Сидорова Е.И., Штырлов А.Е., Ястребов В.В., Зубрилин И.А., 2024

группы веществ. В дальнейших исследованиях планируется внедрение коэффициентов активности в методику расчетного определения давления насыщенных паров смесей нефтяных углеводородов с оксигенатами.

Ключевые слова: кривая дистилляции, биокомпоненты, давление насыщенных паров, расчетная методика

Финансирование. Данная работа финансировалась за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-29-00971) https://rscf.ru/project/23-29-00971/.

Для цитирования. Цапенков К.Д., Кураева Ю.Г., Сидорова Е.И., Штырлов А.Е., Ястребов В.В., Зубрилин И.А. Валидация расчетной методики определения кривой дистилляции для смесевых углеводородных топлив, включающих биокомпоненты // Тепловые процессы в технике. 2024. Т. 16. № 8. С. 386–395. URL: https://tptmai.ru/publications.php?ID=183185

Original article

### Validation of a calculation method for determining the distillation curve for mixed hydrocarbon fuels including biocomponents

K.D. Tsapenkov<sup>1⊠</sup>, Yu.G. Kuraeva<sup>1</sup>, E.I. Sidorova<sup>1</sup>, A.E. Shtyrlov<sup>1</sup>, V.V. Yastrebov<sup>1</sup>, I.A. Zubrilin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Samara University, Samara, Russia <sup>∞</sup>tsapenkov@inbox.ru

**Abstract.** This work addresses the current issue of introducing biofuels into the aviation industry, which is an important step towards reducing the carbon footprint and improving the environmental situation. The study tests calculation methods for determining the saturated vapour pressure for different types of fuel. The methods considered are necessary to calculate the distillation curve according to the algorithm proposed in this work.

The paper presents an algorithm for calculating the distillation curves of multi-component fuels, including both traditional petroleum hydrocarbons and bio-components. In addition, the work includes a review of existing calculation methods used to determine the saturated vapour pressure of petroleum hydrocarbons and oxygenates at a given temperature. It is important to be able to determine the saturated vapour pressure over a range of temperatures, rather than at a specific value, as the temperature is constantly changing during the process of plotting the distillation curve. Reference data on the saturated vapour pressure of various fuels are provided to validate the calculation methods. Special attention is given to new experimental data on the distillation curves of mixtures of petroleum hydrocarbons and various oxygenates such as alcohols, ketones and aldehydes. This extends the understanding of the interaction between the components and their effect on fuel properties. Using the saturated vapour pressure calculation methods presented, calculated distillation curves were plotted and compared with experimental results. In addition to validation on reference data, the presented methods were analysed in terms of ease of use and accuracy in calculating the distillation curve.

As a result of the work carried out, the most suitable calculation method for plotting the distillation As a result of the work carried out, the most suitable calculation method for plotting the distillation curve of mixtures of petroleum hydrocarbons with oxygenates is recommended, which can be used in the development of aviation fuel surrogates for modelling heating and evaporation processes. Some calculated curves showed a significant deviation from the experimental ones at the beginning of the graph, which may be due to the fact that to determine the saturated vapour pressure of mixtures of petroleum hydrocarbons with oxygenates it is necessary to use activity coefficients, since petroleum hydrocarbons and oxygenates represent different groups of substances. Further studies are planned to introduce activity coefficients into the methodology for calculating the saturated vapour pressure of mixtures of petroleum hydrocarbons with oxygenates.

Keywords: distillation curve, biocomponents, saturated vapor pressure, calculation method

**Funding.** This work was funded by a grant from the Russian Science Foundation (project no. 23-29-00971) https://rscf.ru/project/23-29-00971/.

**For citation.** Tsapenkov K.D., Kuraeva Yu.G., Sidorova E.I., Shtyrlov A.E., Yastrebov V.V., Zubrilin I.A. Validation of a calculation method for determining the distillation curve for mixed hydrocarbon fuels including biocomponents. *Thermal processes in engineering*. 2024, vol. 16, no. 8, pp. 386–395. (In Russ.). URL: https://tptmai.ru/publications.php?ID=183185

#### Введение

Увеличение численности населения, спроса на энергоносители, а также экологические проблемы, вызванные попаданием продуктов сгорания в атмосферу [1], вынуждают человечество искать замену традиционным источникам энергии, таким как нефть и газ.

Большое количество углекислого газа, выбрасываемого из-за сжигания углеводородов приводит к созданию парникового эффекта и других экологических проблем [2,3]. В связи с этим разрабатываются планы по внедрению альтернативного топлива в различные сектора промышленности, грузоперевозок и пассажироперевозок [4].

На сегодняшний день одним из перспективных альтернативных видов энергоносителя является биотопливо [5]. Использование биотоплива в качестве добавки к углеводородным топливам является одним из эффективных способов уменьшения выбросов вредных веществ, например, таких как СО, СО<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> и сажи [6, 7]. Международная ассоциация гражданской авиации постановила увеличить использование альтернативных источников энергии на 14 %, основной частью которого является биотопливо [8].

Одной из важных характеристик топлива является его кривая дистилляции. Кривая дистилляции (КД) показывает какое количество (объемная доля) топлива испаряется при определенной температуре, она влияет на состав паров топлива в различных частях камеры сгорания, что в свою очередь влияет на различные процессы, например, срыв пламени [9]. У биокомпонентов, как правило, диапазон температур кипения выше, чем у нефтяных углеводородов [10], что влияет на скорость образования и качественный состав топливо – воздушной смеси (ТВС).

При моделировании процессов нагрева и испарения топлива его кривая дистилляции задается через состав суррогата, используемого для имитации реального топлива. При формировании суррогата топлива важно иметь возможность расчетного определения его кривой дистилляции.

В применяемой методике, для расчетного построения графиков кривых дистилляции необходимо определять значение давления насыщенных паров (ДНП) смеси известного состава при различных температурах.

В данной работе проводится апробация различных методик расчетного определения ДНП с целью выбора наиболее подходящей для дальнейшего построения графиков кривых дистилляции.

#### 1. Описание методики построения кривых дистилляции

Суть данной методики заключается в разбиении исследуемого диапазона испарения на небольшие промежутки (рис. 1), при ручном расчете их количество обычно составляет 40–100, а при машинном 10000. Далее для каждого промежутка по итерациям проводится расчет условий (температура при заданном давлении), при которых происходит испарение смеси, в зависимости от состава. После определяется состав паров при рассчитанных условиях. От изначальной смеси отнимается часть, состав которой соответствует составу паров, а массовая доля определяется количеством промежутков. После этого проводится перерасчет состава и количества оставшейся жидкости. Процесс повторяется по очереди, для каждого промежутка. Главным отличием от действительной кривой является то, для любого промежутка, полученного в ходе разбиения, испарение происходит с одним и тем же составом паров, который определяется для начальной точки промежутка, на действительной кривой состав паров отличается в каждой точке. Условием, при котором в данной методике начинается испарение является равенство ДНП смеси внешнему давлению.



Рис. 1. Действительная и расчетная кривые дистилляции

## 2. Методики расчета давления насыщенных паров

Для построения кривых дистилляции необходимо знать ДНП в каждом рассчитываемом промежутке. Были, найдены несколько расчетных методик определения ДНП при заданной температуре, таких как методика Разносчикова [10], Yaws [12], Riedel [13] и корреляция Миллера [14]. Используя их, были получены значения ДНП различных нефтяных углеводородов, спиртов, альдегидов и кетонов.

Методика Yaws является обобщением справочных данных. Коэффициенты необходимые для расчета давления насыщенных паров, подбираются таким образом, чтобы значение соответствовало справочным данным а определенном диапазоне температур. Данная методика использовалась до настоящего времени для расчета кривой дистилляции.

#### Недостатки:

• Данная методика является эприрической;

• Работает в ограниченном диапазоне температур, однако зачастую в него укладывается диапазон дистилляции большинства углеводородов;

• База данных регрессионных коэффициентов не включает некоторые оксигенаты.

Для расчета давления насыщенных паров по данной методике используется следующая зависимость:

$$\lg(P_{\nu}) = A + \frac{B}{T} + C \times \lg(T) + D \times T + E \times T^{2}, \quad (1)$$

где *А*, *B*, *C*, *D*, *E* – регрессионные коэффициенты; *T* – температура, К.

Методика Разносчикова и корреляция Миллера схожи. Они используют температуру кипения и критические параметры исследуемого вещества для расчета давления насыщенных паров. Зависимость для расчета ДНП по корреляции Миллера представлена ниже.

$$\lg(P_{\nu}) = A - \frac{B}{T} + C_1 \times T + C_2 \times T^2, \qquad (2)$$

где 
$$A = 0,607 \times k \times \left(\frac{4 \times T_c}{T_b} - \left(\frac{T_c}{T_b}\right)\right)^2 - 1,448 \times k \times \left(\frac{T_c}{T_b} - \frac{T_b}{T_c}\right) + 2,888081;$$
  
 $B = 0,980 \times k \times T_c;$   
 $C_1 = \frac{-1,448 \times k}{T_c};$   
 $C_1 = \frac{0,607 \times k}{T_c^2};$   
 $k = \frac{r_T}{4,567 \times T_{\rm kp} \times \left(1 - \frac{T}{T_{\rm kp}}\right)^{0,38}};$ 

*P<sub>v</sub>* – рассчитываемое давления насыщенных паров, мм. рт. ст.;

T – температура, К;

*T<sub>c</sub>* - критическая температура вещества, К;

 $T_b$  - температура кипения вещества, К.

В методике Разносчикова ДПН определяется по уравнению:

$$lg\left(\frac{P_{\nu}}{P_{c}}\right) = \left(\beta - 0.015 + 1.397 \times \left(\frac{T}{T_{c}} - \delta\right)^{2} + 5.813 \times \left(\frac{T}{T_{c}} - \delta\right)^{4}\right) \times \left(1 - \frac{T_{c}}{T}\right),$$
(3)

где  $\beta = \frac{T_b}{T_c - T_b} \times \lg(0.9869 \times P_c) - фактор корре$ ляции;

 $\delta = -0,1018 + 0,3806 \times \beta - 0,02861 \times \beta^2$  — параметр вещества;

 $P_v$  – рассчитываемое давления насыщенных паров, мм. рт. ст.;

T – температура, при которой производится расчет, К;

*T<sub>c</sub>* - критическая температура вещества, К;

*T<sub>b</sub>* - температура кипения вещества, К;

 $P_c$  - критическое давление вещества, Па.

Данные методики удобны для использования, поскольку для определенного вещества необходимо возможно один раз рассчитать значение коэффициентов, после чего их пересчет не требуется, так как они не зависят от температуры, при которой проводятся расчет.

Методика Riedel схожа по физическому смыслу с вышеперечисленными методами расчета ДНП. Но при ее использовании возникает сложность в расчете, связанная с необходимостью пересчета коэффициентов для каждой итерации, так как они зависят от температуры.

$$\lg(P_r) = A - \frac{B}{T_r} + C \times \lg(T_r) + D \times T_r^6, \qquad (4)$$

где  $A = 35 \times D$ ;

$$B = -36 \times D;$$
  

$$C = \alpha_c - 42 \times D;$$
  

$$D = K \times (\alpha_c - 3,758);$$
  

$$\alpha_c = \frac{3,758 \times \psi + \ln(P_c/1,01325)}{K \times \psi - \ln(T_{br})};$$
  

$$\psi = -35 + \frac{36}{T_{br}} + 42 \times \ln(T_{br}) + T_{br}^{-6};$$

K = 0,838;

*P<sub>r</sub>* – приведенное давления насыщенных паров;

 $T_r$  – приведенная температура, К;

*T<sub>c</sub>* - критическая температура вещества, К;

 $T_{br}$  – приведенная температура кипения вещества, К.

В табл. 1, представлены результаты расчета ДНП для различных нефтяных углеводородов и оксигенатов по всем представленным ранее методикам, а также их сравнение со справочными данными [15].

Габлица 1. Сравнение расчетных значений ДНП со справочными
данными (при температуре 25 °C)

Название вещества	CAS №	Спра- вочное ДНП, мм рт. ст	ДНП по методу Yaws, мм рт. ст.	ДНП по корреля- ции Мил- лера, мм рт. ст.	ДНП по методу Разносчи- кова, мм рт. ст.	ДНП по методу Ridel, мм рт. ст.
Гексан	110-54-3	153	0,004 (504,9%)	151,7 (0,37%)	151,7 (0,88%)	149,5 (2,29%)
Гептан	142-82-5	46	5,254 (148,71%)	46,04 (0,09%)	46,2 (0,43%)	44,76 (2,69%)
Декан	124-18-5	1,43	1,166 (1,26%)	0,91 (36,25%)	1,429 (0,09%)	1,425 (0,37%)
Додекан	112-40-3	0,135	0,42 (1,57%)	0,11 (20,32%)	0,138 (2,5%)	0,153 (13,2%)
Изоцетан	4390-04-9	1	-	0,02 (98,07%)	0,091 (90,86%)	0,095 (90,46%)
Циклогек- сан	108-87-2	46	5,276 (117,3%)	42,13 (8,41%)	47,37 (2,98%)	46,21 (0,46%)
Тетрадекан	629-59-4	0,015	0,145 (0,82%)	0,008 (48,69%)	0,026 (72,76%)	0,31 (106,02%)
Бензол	71-43-2	94,8	7,227 (182,44%)	88,93 (6,20%)	98,23 (3,62%)	97,88 (3,24%)
Ксилол	95-47-6	6,65	2,733 (11,71%)	6,168 (7,25%)	6,509 (2,12%)	6,585 (0,98%)
Пропило- вый спирт	71-23-8	21	3,735 (16,96%)	20,42 (2,78%)	20,42 (2,77%)	18,22 (13,25%)
Изопропи- ловый спирт	67-63-0	45,4	5,25 (85,43%)	41,47 (8,66%)	43,21 (4,83)	41,91 (7,69%)
Изобута- нол	78-83-1	10,4	2,769 (16,96%)	9,902 (4,79%)	13,43 (29,15%)	15,25 (46,66%)
2-бутанон	78-93-3	90,6	7,423 (199,4%)	93,75 (3,48%)	88,18 (2,68%)	88,43 (2,4%)
3 - пента- нон	96-22-0	37,7	4,797 (88,24%)	34,34 (8,91%)	35,76 (5,14%)	35,62 (5,51%)
Бутаналь	123-72-8	11	7,411 (245,5%)	111,9 (0,84%)	114,7 (3,32%)	114,2 (2,84%)
Пентаналь	110-62-3	26	4,645 (53,79%)	33,8 (29,99%)	33,12 (27,34%)	33,19 (27,66%)
Среднее отклонение, %			111,7%	17,82%	15,72%	20,36%

Как видно из табл. 1, методика Разносчикова имеет наименьшую погрешность для расчета ДНП. Однако целью данного исследования является выявление наиболее подходящей методики для построения КД. Поэтому, все представленные методики расчета давления насыщенных паров были использованы для построения КД для дальнейшего сравнения экспериментальными данными.

#### 3. Сравнение расчетных кривых дистилляции с экспериментальными

Экспериментальные данные о кривых дистилляции исследуемых образцов были получены с помощью прибора АРН – ЛАБ – 11 (рис. 2). Эксперименты проводился в соответствии с ГОСТ Р 53707 [16]. Для определения применимости методик расчета давления насыщенных паров, определялись по три кривые дистилляции смесей нефтяных углеводородов с биокомпонентами (с объемным содержанием биокомпонента 25 %, 50 % и 75 %).



Рис. 2. Прибор для построения кривых дистилляции АРН – ЛАБ – 11

Используя представленные методики расчета ДНП, были построены КД смесей:

• 25 % 1-Пропанол (пропиловый спирт) + 75 % тетрадекан

• 50 % 1-Пропанол (пропиловый спирт) + 50 % тетрадекан

• 75 % 1-Пропанол (пропиловый спирт) + 25 % тетрадекан

• 25 % 2-пропанол (изопропиловый спирт) + 75 % тетрадекан

• 50 % 2-пропанол (изопропиловый спирт) + 50 % тетрадекан

• 75 % 2-пропанол (изопропиловый спирт) + 25 % тетрадекан

• 25 % 2-метил-1-пропанол (изобутанол) + 75 % тетрадекан

• 50 % 2-метил-1-пропанол (изобутанол) + 50 % тетрадекан

• 75 % 2-метил-1-пропанол (изобутанол) + 25 % тетрадекан

• 25 % 2-бутанон (этилметилкетон) + 75 % тетрадекан

• 50 % 2-бутанон (этилметилкетон) + 50 % тетрадекан

• 75 % 2-бутанон (этилметилкетон) + 25 % тетрадекан

- 25 % 3-пентанон + 75 % тетрадекан
- 50 % 3-пентанон + 50 % тетрадекан
- 75 % 3-пентанон + 25 % тетрадекан

• 25 % бутаналь (бутиральдегид) + 75 % тетрадекан

• 50 % бутаналь (бутиральдегид) + 50 % тетрадекан

• 75 % бутаналь (бутиральдегид) + 25 % тетрадекан

 • 25 % пентаналь (валериановый альдегид) + 75 % тетрадекан

• 50 % пентаналь (валериановый альдегид) + 50 % тетрадекан

• 75 % пентаналь (валериановый альдегид) + 25 % тетрадекан

На рисунках 3–23 представлены графики экспериментальных и расчетных кривых дистилляции для исследуемых смесей. Методики Yaws, Миллера, Разносчикова и Riedel указаны как метод 1, 2, 3, 4 соответственно. В процентах указаны объемные доли компонентов в смеси.



**Рис. 3.** Кривые дистилляции смеси 25 % 1-пропанол + 75 % тетрадекан



**Рис.** 4. Кривые дистилляции смеси 50 % 1-пропанол + 50 % тетрадекан



**Рис. 5.** Кривые дистилляции смеси 75 % 1-пропанол + 25 % тетрадекан



**Рис. 6.** Кривые дистилляции смеси 25 % 2-пропанол + 75 % тетрадекан



**Рис. 7.** Кривые дистилляции смеси 50 % 2-пропанол + 50 % тетрадекан



**Рис. 8.** Кривые дистилляции смеси 75 % 2-пропанол + 25 % тетрадекан



**Рис. 9.** Кривые дистилляции смеси 25 % 2-метил-1-пропанол + 75 % тетрадекан



Рис. 10. Кривые дистилляции смеси 50 % 2-метил-1-пропанол + 50 % тетрадекан



Рис. 11. Кривые дистилляции смеси 75 % 2-метил-1-пропанол + 25 % тетрадекан



**Рис. 12.** Кривые дистилляции смеси 25 % 2-бутанон + 75 % тетрадекан



Рис. 13. Кривые дистилляции смеси 50 % 2-бутанон + 50 % тетрадекан



Рис. 14. Кривые дистилляции смеси 75 % 2-бутанон + 25 % тетрадекан



**Рис. 15.** Кривые дистилляции смеси 25 % 3-пентанон + 75 % тетрадекан



**Рис. 16.** Кривые дистилляции смеси 50 % 3-пентанон + 50 % тетрадекан



**Рис. 17.** Кривые дистилляции смеси 75 % 3-пентанон + 25 % тетрадекан



**Рис. 18.** Кривые дистилляции смеси 25 % бутаналь + 75 % тетрадекан



**Рис. 19.** Кривые дистилляции смеси 50 % бутаналь + 50 % тетрадекан



**Рис. 20.** Кривые дистилляции смеси 75 % бутаналь + 25 % тетрадекан



**Рис. 21.** Кривые дистилляции смеси 25 % пентаналь + 75 % тетрадекан



**Рис. 22.** Кривые дистилляции смеси 50 % пентаналь + 50 % тетрадекан



Рис. 23. Кривые дистилляции смеси 75 % пентаналь + 25 % тетрадекан

Значения средних отклонений расчетных графиков КД от экспериментальных, для различных методик расчета ДНП, приведены в табл. 2.

Таблица 2. Отклонение расчетных графиков кривых дистилляции от экспериментальных

Методика	Методика	Корреляция	Методика	Mетодика
	Yaws	Миллера	Разносчикова	Riedel
Среднее от- клонение, %	3,49	3,15	3,77	2,79

Все представленные методики показали похожие результаты при расчетном построении кривых дистилляции, а наибольшее отклонение от экспериментальных кривых были получены для альдегидов и кетонов. При построении кривых дистилляции смесей с пентаналем, результаты, полученные по методике Riedel, значительно отличались от остальных и имели большее отклонение от экспериментальных данных.

В результате проделанной работы, для построения кривых дистилляции смесей нефтяных углеводородов и биокомпонентов к применению рекомендуется корреляция Миллера, так как:

• методика Yaws имеет ограничения, связанные с температурой и наличием регрессионных коэффициентов

• методика Riedel хуже остальных показала себя при построении КД смесей с пентаналем

• корреляция Миллера и методика Разносчикова имеют схожие результаты по определению ДНП и построению КД, однако корреляция Миллера проще в применении и не имеет в своем выражении больших степеней (что может привести к увеличению погрешности при ошибке в определении критической температуры), как методика Разносчикова.

#### Заключение

В данной работе были апробированы методики расчета давления насыщенных паров для различных нефтяных углеводородов, спиртов, альдегидов и кетонов. Расчетные данные были сравнены со справочными, а также использованы для построения кривых дистилляции.

Методика Разносчикова показала самое низкое среднее отклонение (15,72 %) расчетного давления насыщенных паров чистых компонентов от справочных данных из представленных методик.

Для построения расчетных кривых дистилляции смесей нефтяных углеводородов и биокомпонентов к применению была рекомендована корреляция Миллера, при ее применении среднее отклонение расчетных кривых от экспериментальных составило 3,15 %.

В дальнейших исследованиях планируется доработка методики построения кривых дистилляции смесей нефтяных углеводородов с оксигенатами, которая позволит уменьшить расхождение в левой части графика (начало кривой).

Данная работа финансировалась за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-29-00971) https://rscf.ru/project/23-29-00971/.

#### Список источников

- Air pollution and climate change as grand challenges to sustainability / Afifa [et al.] // Science of The Total Environment. 2024. V. 928. pp. 172370. DOI: 10.1016/j.scito tenv.2024.172370
- Evaluating the climate impact of aviation emission scenarios towards the Paris agreement including COVID-19 effects / V. Grewe [et al.] // Nature Communications. 2021. V. 12. pp. 3841. DOI: 10.1038/s41467-021-24091-y
- Quantifying aviation's contribution to global warming / M. Klower // Environmental Research Letters. 2021. V. 16. pp. 104027. DOI 10.1088/1748-9326/ac286e
- Carbon Offsetting and Reduction Scheme for International Aviation (CORSIA): [сайт]. URL: https:// www.icao.int/environmental-protection/CORSIA/Pages/ default.aspx

- Nurdiawati A., Urban F. Decarbonising the refinery sector: A socio-technical analysis of advanced biofuels, green hydrogen and carbon capture and storage developments in Sweden // Energy Research & Social Science. 2022. V. 84. pp. 102358. DOI: 10.1016/j.erss.2021. 102358
- Biofuel blending reduces particle emissions from aircraft engines at cruise conditions / R.H. Moore // Nature. 2017. V. 543. pp. 411–415.
- Hook M., Tang X. Depletion of fossil fuels and anthropogenic climate change – A review // Energy Policy. 2013. V. 52, pp. 797–809. DOI: 10.1016/j.enpol.2012. 10.046
- The ICAO Environmental Report 2022. URL: https://www. icao.int/environmental-protection/Documents/Environm entalReports/2022/ICAO%20EN%20Report%202022% 20F4.pdf
- Preferential vaporization impacts on lean blow-out of liquid fueled combustors / S.H. Won // Combustion and Flame. 2019. V. 205, pp. 295–304. DOI: 10.1016/j.com bustflame.2019.04.008
- Alptekin E, Canakci M. Characterization of the key fuel properties of methyl ester – diesel fuel blends // Fuel. 2009. V. 88. pp. 75–80. DOI: 10.1016/j.fuel.2008.05.023
- Разносчиков В.В., Демская И.А. Математическая модель расчета теплофизических свойств синтетического жидкого топлива // Труды МАИ. 2012. № 50. С.24.
- Yaws L. Yaws' handbook of thermodynamic and physical properties of chemical compounds: Physical, thermodynamic and transport properties for 5,000 organic chemical compounds: monography. Norwich: Knovel, 2003. 2078 p.
- Saxena P., Patel J., Joshipura M.H. Comparison of various methods for the estimation of vapor pressure of fatty acid methyl and ethyl esters (FAAE's) // Fuel. 2016. V. 182. pp. 842–849. DOI: 10.1016/j.fuel.2016.06.017
- Хафизов Ф.Ш., Краснов А.В. Давление насыщенных паров для нефтепродуктов // Нефтегазовое дело. 2012. № 3. С. 406–413.
- 15. PubChem: [сайт]. URL: https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/
- ГОСТ Р 53707-2009. Нефтепродукты. Метод дистилляции при атмосферном давлении. М.: Стандартинфор, 2011. 48 с.

#### References

- Afifa, Arshad K, Hussain N, Ashraf MH, Saleem MZ. Air pollution and climate change as grand challenges to sustainability. Science of The Total Environment. 2024; 928:172370. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2024.172370
- Grewe V, Gangoli RA, Gronstedt T, et al. Evaluating the climate impact of aviation emission scenarios towards the Paris agreement including COVID-19 effects. Nature

Communications. 2021;12:3841. DOI: 10.1038/s41467-021-24091-y

- Klower M, Allen MR, Lee DS, Proud SR, Gallagher L, Skowron A. Quantifying aviation's contribution to global warming. Environmental Research Letters. 2021;16: 104027. DOI 10.1088/1748-9326/ac286e
- Carbon Offsetting and Reduction Scheme for International Aviation (CORSIA). Available from: https://www.icao. int/environmental-protection/CORSIA/Pages/default.aspx [Accessed 15 June 2015].
- Nurdiawati A, Urban F. Decarbonising the refinery sector: A socio-technical analysis of advanced biofuels, green hydrogen and carbon capture and storage developments in Sweden. Energy Research & Social Science. 2022;84:102358. DOI: 10.1016/j.erss.2021.102358
- 6. Moore RH, Thornhill KL, Weinzierl B, et al. Biofuel blending reduces particle emissions from aircraft engines at cruise conditions. Nature. 2017;543:411–415.
- Hook M, Tang X. Depletion of fossil fuels and anthropogenic climate change – A review. Energy Policy. 2013;52:797-809. DOI: 10.1016/j.enpol.2012.10.046
- The ICAO Environmental Report 2022. Available from: https://www.icao.int/environmental-protection/Documents/ EnvironmentalReports/2022/ICAO%20ENV%20Report %202022%20F4.pdf [Accessed 11 May 2024].
- Won SH, Rock N, Lim SJ, et al. Preferential vaporization impacts on lean blow-out of liquid fueled combustors. Combustion and Flame. 2019;205:295-304. DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.04.008
- Alptekin E, Canakci M. Characterization of the key fuel properties of methyl ester – diesel fuel blends. Fuel. 2009;88:75–80. DOI: 10.1016/j.fuel.2008.05.023
- 11. Raznoschikov VV, Demskaja IA. Mathematical model for calculating thermophysical properties of synthetic liquid fuel. Trudy MAI. 2012;(50):24. (In Russ.)
- 12. Yaws L. Yaws' handbook of thermodynamic and physical properties of chemical compounds: Physical, thermodynamic and transport properties for 5,000 organic chemical compounds. Norwich: Knovel; 2003. 2078 p.
- Saxena P, Patel J, Joshipura MH. Comparison of various methods for the estimation of vapor pressure of fatty acid methyl and ethyl esters (FAAE's). Fuel. 2016;182: 842–849. DOI: 10.1016/j.fuel.2016.06.017
- Hafizov FSh, Krasnov AV. Saturated vapor pressure for petroleum products. Neftegazovoe delo. 2012;(3):406-413. (In Russ.)
- 15. PubChem. Available from: https://pubchem.ncbi.nlm.nih. gov/ [Accessed 11 May 2024].
- 16. GOST R 53707-2009. Petroleum products. Distillation method at atmospheric pressure. (In Russ.)