

О. М. Кондратенко, К. Р. Умеренкова, А. М. Левтеров, О. П. Строков, В. Ю. Колосков

УДОСКОНАЛЕННЯ МАТЕМАТИЧНОГО ОПИСАННЯ ТЕПЛОФІЗИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ АЛЬТЕРНАТИВНИХ МОТОРНИХ ПАЛИВ НА ОСНОВІ МОДИФІКОВАНОЇ ТЕРМОДИНАМІЧНОЇ ТЕОРІЇ ЗБУРЕНЬ. ЧАСТИНА 1

У дослідженні, метою якого було вдосконалення математичного апарату на основі модифікованої термодинамічної теорії збурень для описання теплофізичних характеристик альтернативних моторних палив зі сферичною конфігурацією взаємодіючих структурних елементів та довільного агрегатного стану, послідовно виконано побудову формальної схеми модифікованої теорії збурень, надано описання основних характеристик модельної системи, описано параметри потенціалів взаємодії компонентів альтернативного палива, отримано розрахунком теплофізичні властивості компонентів альтернативного палива, здійснено розрахунок термодинамічних властивостей компонентів альтернативного палива, проаналізовано та проілюстровано у виді ізотерм діаграм фазової рівноваги та таблиць даних із результатами розрахунку термодинамічних характеристик альтернативного палива та їх аналіз. Об'єктом дослідження є теплофізичні характеристики традиційних, альтернативних та сумішевих моторних палив, що перебувають у рідинному чи газоподібному агрегатному стані. Предметом дослідження є математичний апарат на основі модифікованої теорії збурень для описання теплофізичних характеристик моторних палив. Наукова новизна результатів дослідження полягає в тому, що вдосконалено математичний апарат на основі модифікованої термодинамічної теорії збурень для вичерпного описання всіх теплофізичних характеристик моторних палив будь-якого генезису, тобто традиційних, альтернативних та сумішевих, які перебувають як у рідинному, так і в газоподібному агрегатному стані, у частині зменшення часу розрахунку та зниження похибки отримання теплофізичних характеристик порівняно з довідниковими та експериментальними даними. Практичне значення результатів дослідження, полягає у тому, що вдосконалений математичний апарат придатний для надання точної інформації до складу набору вихідних даних у дослідженнях щодо виробництва, зберігання, перевезення, дистрибуції, використання моторних палив будь-якого генезису, які перебувають у різних агрегатних станах, а також прогнозування перебігу та результатів процесів забруднення атмосфери газоподібними продуктами повного й неповного горіння компонентів палив у камерах згорання теплових машин різного типу.

Ключові слова: теплофізичні властивості; традиційні моторні палива; альтернативні моторні палива; математична модель; технології захисту навколишнього середовища; екологічна безпека; енергоустановки; поршневі двигуни внутрішнього згорання.

Актуальність та постановка проблеми дослідження

У сучасному світі наявні декілька екологічних проблем, першоджерелами яких є енергоустановки (ЕУ) з поршневими двигунами внутрішнього згорання (ПДВЗ), серед яких особливого значення з огляду на тренди розвитку ринку енергоносіїв набуває вичерпання природних ресурсів – сировини для продукування моторних палив [1]. Ця проблема призводить до активного розвитку альтернативної енергетики, у тому числі й продукування альтернативних видів моторного палива [2], що тягне за собою цілий комплекс супутніх задач науково-технічного плану, зокрема щодо критеріального оцінювання паливно-екологічної ефективності такої конвертації [3–6], адаптації ПДВЗ до конвертації його на споживання альтернативного чи сумішевого моторного палива та дослідження показників роботи ПДВЗ на таких паливах [7] тощо. Окремим самостійним напрямом досліджень і невід'ємною складовою зазначених науково-дослідних робіт є визначення властивостей різного виду моторних палив, зокрема теплофізичних [8–11]. Результати визначення таких характеристик придатні також і для використання в дослідженнях

щодо забезпечення екологічної, пожежної та вибухової безпеки процесів переробки сировини на моторне паливо та його зберігання [12–14]. Такий напрям досліджень дозволяє відкласти запланований у країнах Європейського Союзу перехід на повне заміщення ЕУ з ПДВЗ на автотранспортні засоби з гібридним приводом рушія чи електромобілі [15].

З огляду на вищенаведені міркування можна зробити однозначний висновок про те, що обрана тема дослідження, результати якого викладені у статті, є актуальною, особливо з погляду перспективи розв'язання задач повоєнного відновлення економіки нашої країни.

Метою дослідження є вдосконалення математичного апарату на основі модифікованої теорії збурень для описання теплофізичних характеристик альтернативних моторних палив зі сферичною конфігурацією взаємодіючих структурних елементів та довільного агрегатного стану.

Проблемою дослідження є скорочення часу та підвищення точності отримання теплофізичних характеристик моторних палив у порівнянні з довідниковими та експериментальними даними.

Об'єктом дослідження є теплофізичні харак-

теристики альтернативних моторних палив зі сферичною конфігурацією взаємодіючих структурних елементів, що перебувають у рідинному чи газоподібному агрегатному стані.

Предметом дослідження є математичний апарат на основі модифікованої теорії збурень для описання теплофізичних характеристик моторних палив.

Методи дослідження. Аналіз науково-технічної, довідникової, нормативної, патентної літератури, модифікована схема термодинамічної теорії збурень, аналіз експериментальних даних, метод найменших квадратів.

Задачами дослідження є такі:

1. Побудова формальної схеми модифікованої теорії збурень.
2. Визначення основних характеристик моделі системи.
3. Визначення параметрів потенціалів взаємодії компонентів альтернативного палива.
4. Визначення теплофізичних властивостей компонентів альтернативного палива.
5. Визначення методики розрахунку термодинамічних властивостей компонентів альтернативного палива.
6. Отримання результатів розрахунку термодинамічних характеристик альтернативного палива та їх аналіз.

У цій, першій, частині дослідження наведено результати розв'язання задач №№ 1–3. Результати розв'язання задач №№ 4–6 виведені у наступній, другій, частині дослідження.

Побудова формальної схеми модифікованої теорії збурень

Експериментальні методи дослідження термодинаміки фазових переходів є найбільш достовірними джерелами інформації. Однак економічний чинник, пов'язаний з неспівставними матеріальними витратами й витратами часу на експериментальні та теоретичні дослідження теплофізичних процесів, посилює вагу методів і засобів математичного моделювання. У статті описано розроблену методику визначення параметрів рівноважного термодинамічного процесу – фазових рівноваг (ФР) та теплофізичних властивостей альтернативних палив (АП).

Для дослідження ФР у робочих тілах вуглеводневого типу застосований метод статистичної термодинаміки. Теплофізичні властивості визначені з застосуванням методів термодинамічної теорії збурень (ТЗ). Багатоконцентні вуглеводневі суміші розглядаються як сукупність часток різних розмірів, взаємодія між якими описується стандартним потенціалом Леннарда-Джонса (ЛД-потенціал).

Для опису фазових рівноваг створена математична модель, формалізована у вигляді сукупності алгебраїчних рівнянь, що описують рівновагу рідкої й парової фаз. У класичній термодинаміці стан системи описується за допомогою невеликої кількості параметрів, доступних безпосередньому вимірюванню. Між термодинамічними параметрами системи існує зв'язок, що встановлюється рівняннями стану, які виводяться емпірично. Макроопис стану, що застосовується в класичній термодинаміці, залишає поза розглядом молекулярну будову системи [9].

Реальне існування атомів і молекул, з яких побудовані докільні тіла, дозволяє застосовувати, поряд з макроописом стану, мікроскопічний опис, що характеризує систему за допомогою величин, що визначають стан кожної частинки. У випадку термодинамічної рівноваги властивості досліджуваних систем із часом мають невеликі коливання довкола середніх значень – флуктуації. При цьому параметри системи обчислюються як середні за часом. Статистико-механічний підхід полягає в заміні обчислення середніх за часом величин для реальної системи обчисленнями статистичних середніх за мікростанами всіх частинок. Постулат про рівність часових та статистичних середніх величин розглядається як основний постулат статистичної фізики. Моделювання фазових рівноваг у багатоконцентних молекулярних сумішах, стан яких визначається заданими значеннями температури, об'єму і складу, засновано на визначенні термодинамічного потенціалу – вільної енергії Гельмгольца F [9–11].

Величина вільної енергії F може бути записана у вигляді такого фундаментального виразу $F = -kT \ln z$. Статистична сума $z = \sum_n e^{-E_n/kT}$, де

$e^{-E_n/kT}$ – розподіл Гіббса у квантовій статистиці, що у класичній статистиці записується у вигляді інтеграла за фазовим простором $z = \int e^{-H(p,q)/kT} dH$.

Поводження термодинамічної системи описується гамільтоніаном $H(p,q)$, що являє собою суму кінетичної та потенційної енергії всіх частинок системи, де p_k – імпульс частинки; m – маса частинки; q – координати:

$$H(p, q) = \sum_{k=1}^N \frac{p_k^2}{2m_k} + U_N(q_1, q_2, \dots, q_n).$$

Інтеграл за всім фазовим простором може бути поділений на два інтеграли за імпульсами і координатами. Інтегрування по імпульсах дає відому з кінетичної теорії газів середню кінетичну енергію поступального руху ідеального газу $E = 3/2RT$. Основні труднощі статистичної механіки полягають у знаходженні конфігураційного інтеграла

$$z_Q = \frac{1}{N!} \int e^{-UN(q)/kT} dq. \text{ Щоб записати класичний}$$

розподіл Гіббса, необхідно знати залежність потенційної енергії взаємодії частинок від відстаней.

Фундаментальне значення при моделюванні фазових станів як моноречовин, так і сумішей має визначення природи й характеру міжмолекулярної взаємодії. Вона визначає відмінності реальної системи від ідеального газу. Один із головних внесків у сумарну взаємодію між молекулами дає дисперсійна взаємодія, що пояснює кореляцію в миттєвих розподілах електронної щільності молекул. Наближена теорія Лондона [16] пропонує для потенціалу дисперсійних сил притягання вираз, що пов'язує його поляризування α з частотами коливань молекул ν

$$u_{\alpha\beta} = -\frac{3}{2} \cdot \frac{h\nu_{\alpha}\nu_{\beta}}{\nu_{\alpha} + \nu_{\beta}} \cdot \frac{\alpha_{\alpha}\alpha_{\beta}}{r_{\alpha\beta}^6}, \quad (1)$$

або для однорідних молекул

$$u = -\frac{3}{4} \cdot h\nu_{\alpha} \cdot \frac{\alpha^2}{r^6}. \quad (2)$$

Більш строга теорія, що використовує метод збурень, надає можливість отримати якісно аналогічний вираз, де E – емпіричні постійні, що наближено дорівнюють енергії іонізації:

$$u_{\alpha\beta} = -\frac{3}{2} \cdot \frac{E_{\alpha}E_{\beta}}{E_{\alpha} + E_{\beta}} \cdot \frac{\alpha_{\alpha}\alpha_{\beta}}{r_{\alpha\beta}^6}, \quad (3)$$

Вирази (1–3) враховують взаємодії тільки миттєвих диполів, або, що те ж саме, тільки перші члени розкладання в методі збурень. З урахуванням членів більш високих порядків енергію дисперсійних взаємодій подають у вигляді ряду

$$u_{\text{дисп}} = -C_6 r^{-6} - C_8 r^{-8} - C_{10} r^{-10} + \dots, \quad (4)$$

де перший член пов'язують із взаємодіями миттєвих диполів, другий – із взаємодіями миттєвих диполя та квадрупольного й т.д. Коефіцієнти ряду (4) називають дисперсійними постійними.

Потенційна енергія міжмолекулярної взаємодії u залежить від конфігурації системи, тобто від дислокації молекул у просторі. При вивченні щільних систем постає питання про вид цієї функції для сукупності великої кількості частинок, однак основні відомості про міжмолекулярні взаємодії стосуються ізольованих пар частинок.

Молекулярно-статистична теорія зазвичай оперує модельними потенціалами, що містять невелику кількість параметрів. Розповсюдженими потенціалами в молекулярній теорії газових і рідких сумішей є:

1) моделі, у яких молекули виглядають як тверді тіла, найпростіша з них – потенціал твердих

сфер (ТС), де $d_{\alpha\beta} = 0,5(d_{\alpha\alpha} + d_{\beta\beta})$; $d_{\alpha\alpha}$ – діаметр ТС α -го компонента суміші:

$$u_{\alpha\beta}^{(0)}(r) = \begin{cases} \infty, & r < d_{\alpha\beta}; \\ 0, & r > d_{\alpha\beta}, \end{cases} \quad (5)$$

2) потенціали для частинок з «м'якою серцевиною», більш реалістично відбивають залежність енергії відштовхування від відстані, чим моделі ТС. До них належить ступеневий потенціал (n - m), а саме $u = ar^{-n} - br^{-m}$. Тут перший член означає відштовхування, другий притягування. Найпоширенішим видом ступеневого потенціалу є (12–6) або традиційний потенціал Леннарда-Джонса, що відноситься до числа кращих ефективних модельних потенціалів. Різні форми запису його:

$$u = ar^{-12} - br^{-6}; \quad (6)$$

$$u = \varepsilon[(r_0/r)^{12} - 2(r_0/r)^6]; \quad (7)$$

$$u_{\alpha\beta}(r) = \varepsilon_{\alpha\beta} \varphi(r/\sigma_{\alpha\beta}) = 4\varepsilon_{\alpha\beta} \left[\left(\sigma_{\alpha\beta}/r \right)^{12} - \left(\sigma_{\alpha\beta}/r \right)^6 \right], \quad (8)$$

де $u_{\alpha\beta}(\sigma_{\alpha\beta}) = 0$; $\varepsilon_{\alpha\beta}$ – глибина потенційної ями

взаємодії молекул α -го й β -го компонентів.

У дипольному наближенні параметр b потенціалу (6) збігається з дисперсійною константою C_6 (4).

При розв'язанні задач у статистичній термодинаміці одним із найбільш ефективних є метод теорії збурень. Формальна математична схема цього методу представляє термодинамічні характеристики досліджуваних систем у вигляді рядів за параметрами, що характеризують відмінності реального (вихідного) потенціалу $u(r)$ від потенціалу $u_0(r)$ системи нульового наближення. У якості останнього звичайно використовується модель ТС. У цьому випадку метод має потужне підґрунтя у вигляді чисельних експериментів і точних аналітичних виразів для властивостей флюїду ТС.

Дослідження властивостей систем зі стандартними модельними потенціалами міжчастинкової взаємодії [17,18] стимулюється декількома обставинами. По-перше, перспективні моделі опису теплофізичних характеристик речовин апробуються спочатку, як правило, на таких модельних системах. Джерелом «експериментальних» даних при цьому є результати, одержані чисельними (комп'ютерними) методами – Монте-Карло й молекулярної динаміки. Перевага такої апробації полягає в тому, що вона визначає дійсні похибки теорії, тобто похибки, не пов'язані з довільним вибором потенціалів взаємодії (що має місце надалі при теоретичному описі властивостей реальних газів і рідин). По-друге, наявність результатів з властивостей модельних систем дозволяє використати такі системи як нульове наближення для реальних рідин (методи ТЗ).

Значні успіхи в розвитку статистичної механі-

ки модельної системи ТС обумовили виникнення методів ТЗ, що стали надійним інструментом теоретичного дослідження структури й термодинамічних властивостей газів, рідин і їхніх сумішей (розчинів). Аналітичні вираження для властивостей базисних систем, застосовуваних як нульові наближення для різних речовин і їхніх різних станів, забезпечують ефективний пошук фізично обґрунтованих залежностей для реальних молекулярних систем. Важливо й те, що застосування методу ТЗ має потужний фундамент у вигляді чисельних експериментів для базисних систем.

Основою методу ТЗ у статистичній термодинаміці щільних молекулярних систем є той факт, що їхні структурні властивості визначаються, головним чином, відштовхувальною взаємодією [17,18]. Таким чином є можливим урахувати термодинамічні ефекти сил притягання шляхом статистичного усереднення енергії притягання $u_1(r)$, розглянутої як збурення, по станах базисної системи з відштовхувальною взаємодією.

Обмежимося розглядом ізотропних вихідних потенціалів $u(r)$ та введемо функцію $u(r;\lambda) = u_0(r) + \lambda u_1(r)$, де $u_0(r)$ – базисний потенціал, $u_1(r)$ – збурення. Вільна енергія вихідної системи може бути представлена у вигляді λ -розкладання [19]. При використанні ТС-потенціала в якості $u_0(r)$ необхідно додатково врахувати його відмінності від вихідного потенціалу у відштовхувальній області в рамках схеми ТЗ і тим самим вирішити питання про величину основного параметра d . Оберемо $u_1(r)$ у вигляді

$$u_1(r) = \varepsilon \varphi_1(r) = \begin{cases} 0, & r < a(T^*); \\ u(r), & r > a(T^*), \end{cases} \quad (9)$$

за передумови, що розбивка вихідного потенціалу $u(r)$ на базисний (з м'яким відштовхуванням) і збурювання відбувається в «плаваючій» точці $a(T^*)$ [4]. Вибір (9) у такій схемі модифікованої теорії збурень (МТЗ) покликаний забезпечити температурну незалежність діаметра ТС d і тим самим потенціалу $u_0(r/d)$. У якості вихідного потенціалу використаємо реалістичний потенціал Леннард-Джонса $u(r) = \varepsilon \varphi(r) = 4 \varepsilon [(\sigma/r)^{12} + (\sigma/r)^6]$.

Завдання полягає в переході від базисного потенціалу до потенціалу ТС як нульового наближення. Уведемо функцію $u(r; a, d, \alpha, \gamma)$, що переходить при $\alpha = \gamma = 0$ в потенціал ТС діаметра d і при $\alpha = \gamma = 1$ – у вихідний ЛД-потенціал $u(r)$. Розкладаючи вільну енергію системи $f_{\alpha, \gamma}$ з потенціалом

$u(r; a, d, \alpha, \gamma)$ у ряд за ступенями α (параметру зворотного нахилу) і γ (параметру глибини потенціалу), отримаємо формулу (10), де f_0 та $g_0(r)$ – вільна енергія й радіальна функція розподілу (РФР) системи ТС:

$$\beta f_{\alpha, \gamma} = \beta f_0 + (1/2)\gamma\beta\rho \int u_1(r)g_0(r)dr - 2\pi\alpha\rho d^2 g_0(d) \left[d - \int_0^{a(T^*)} [1 - e^{-\beta u(r)}] dr \right] + \dots, \quad (10)$$

Схема МТЗ при обиранні діаметра (11) що анулює член першого порядку за α , забезпечує швидку збіжність ряду (10) у широких інтервалах ρ^* та T^* . Другий і наступні порядки за α можна знехтувати, зберігаючи лише розкладання за γ .

$$d = \xi\sigma = \int_0^{a(T^*)} [1 - e^{-\varphi(r)/T^*}] dr, \quad (11)$$

Подання $u_1(r)$ у вигляді (9) з «плаваючою» точкою a [20] дозволяє використати систему ТС постійного діаметра $d = \xi\sigma$ як нульове наближення. Розглядаючи (11) як рівняння, що визначає залежність $a(T^*)$, уявімо $a(T_\sigma^*) = \sigma$ для деякої температури T_σ^* . Для визначеності будемо спочатку розглядати область $T^* < 5$ ($T_\sigma^* = 5$ дає $\xi = 0,9274$), власне кажучи обмежену зверху температурами термічного розкладання (піролізу) граничних вуглеводнів, що входять до складу АП.

Питома (що припадає на одну частинку) вільна енергія вихідної системи $f \equiv f_{1,1}$ в термодинамічному стані (ρ^*, T^*) з урахуванням членів другого порядку (МТЗ-2) має вигляд [5]:

$$\beta f = \beta f_0 + \rho^* I_1 / T^* + \rho^* I_2 / T^{*2}, \quad (12)$$

де $\beta = 1/k$; f_0 – вільна енергія системи ТС; $\rho^* = \rho\sigma^3$; – зведена щільність числа часток.

Груповий інтеграл першого порядку

$$I_1 = (1/2) \int \varphi_1(x) g_0(x) dx = 2\pi \int_a^* \varphi(x) g_0(x) x^2 dx, x = r/\sigma. \quad (13)$$

Груповий інтеграл другого порядку виражається через групові інтегралі J_n від багаточасткових функцій розподілу системи нульового наближення [5]:

$$I_2 = -(1/4)J_1 - (1/2)\rho^* J_2 - (1/8)\rho^{*2} J_3. \quad (14)$$

Визначення основних характеристик модельної системи

Для опису рівняння стану (РС) і фазових рівноваг рідина-пара ЛД-системи, що моделює реальні системи – компоненти АП, обмежимося першим порядком теорії збурень (МТЗ-1), що забезпечує достатню точність для похідних енергії (12) за об'ємом (щільністю). Рівняння (11) для $a(T^*)$ розв'язано чисельними методами, на підставі чого протабульовані інтеграли I_1 та J_n у широких інтервалах станів – для щільності $0 \leq \rho^* \leq 1$, а для температури $0,3 \leq T^* \leq 5$. Для практичних розрахунків інтеграл I_1 може бути апроксимований виразом (15). Значення коефіцієнтів a_{ik} , отримані методом найменших квадратів, наведені в табл. 1 (максимальна похибка опису I_1 поліномом (15) – 0,05 %).

$$I_1 = I_1(\rho^*, T^*) = \sum_{i=0}^3 \sum_{k=0}^3 a_{ik} \rho^{*i} / T^*. \quad (15)$$

Таблиця 1. Значення коефіцієнтів a_{ik} у виразі (15)

T^*	i	a_{ik}			
		$k=0$	$k=1$	$k=2$	$k=3$
0,3...0,696	0	-0,8498	-9,2400	3,5832	-0,4612
	1	2,1493	3,5820	1,1501	0,1560
	2	-8,5320	-0,4782	-1,0255	0,0972
	3	6,5743	-0,2250	0,7208	-0,0659
0,696...5,0	0	-5,5896	-0,2681	-1,4458	0,2115
	1	-2,7573	8,9226	-6,2375	2,7819
	2	0,8321	-7,5416	2,1787	-1,3682
	3	1,5895	3,0889	-0,2246	0,2152

Для вільної енергії системи ТС, що входить до (12), можна застосувати рівняння Карнахана-Старлінга, що є одним із найкращих простих аналітичних виразів для f_0

$$\beta f_0 = (4 - 3\eta)\eta(1 - \eta)^{-2} + \beta f^{id}, \quad (16)$$

де $\eta = (\pi/6)\rho d^3 = (\pi/6)\xi^3 \rho^*$ – параметр упакування; $\beta f^{id} = \psi(T^*) + \ln \rho^*$ – ідеально-газова частина.

У загальному випадку $\psi = \beta h_0 - s_0 - 1$, функції $h_0(T)$, $s_0(T)$ для конкретних речовин наведені в літературі [21–28]; тут індекс «0» означає застосування ідеально-газових функцій (що дорівнюють ентальпії h й ентропії s однієї молекули).

Згідно з (12)–(16) вільну енергію в рамках МТЗ-1 наведемо у вигляді, зручному для розрахунків рівняння стану й рівноваги фаз рідина-пара

$$\beta f = \psi(T^*) + \ln \rho^* + \eta \frac{4 - 3\eta}{(1 - \eta)^2} + \frac{\rho^*}{T^*} (A_0 + A_1 \rho^* + A_2 \rho^{*2} + A_3 \rho^{*3}), \quad (17)$$

де $A_i(T^*) = a_{i0} + a_{i1}/T^* + a_{i2}/T^{*2} + a_{i3}/T^{*3}$.

Застосуємо схему МТЗ-1 для опису рівноваги фаз рідина-пара чистих компонентів. Ізотерми $f(v)$ (17) за низьких температур мають характерний ван-

дер-ваальсівський (S-подібний) вигляд, що свідчить про наявність фазового переходу. Рівновага фаз забезпечується рівністю тисків p та хімічних потенціалів μ співіснуючих фаз

$$\begin{cases} p(\rho_L^*, T^*) = p(\rho_V^*, T^*); \\ \beta \mu(\rho_L^*, T^*) = \beta \mu(\rho_V^*, T^*), \end{cases} \quad (18)$$

де ρ_L^* й ρ_V^* – зведені щільності L- і V-фаз; $\beta \mu = G/NkT$; G – енергія Гібса.

Детальні розрахунки виконані шляхом чисельного розв'язання системи рівнянь. При цьому хімічний потенціал обрано у вигляді, визначеному в задачі 1. Отримані згідно (18) значення щільності ρ_L^* рідкої фази ЛД-системи апроксимовані поліномом з середньою похибкою менш 0,02 %:

$$\bar{\delta} = \sum_{i=1}^N |\delta(T_i)| / N. \quad (19)$$

Значення коефіцієнтів ρ_n наведені в таблиці 2.

Таблиця 2. Значення коефіцієнтів рівняння (19)

T^*	ρ_0	ρ_1	ρ_2	ρ_3	ρ_4
0,3...0,7	1,15649	-0,60220	0,62217	-0,79500	0,33333
0,7...1,1	0,27876	3,18016	-5,58546	3,88417	-1,05417

Визначення параметрів потенціалів взаємодії компонентів альтернативного палива

Моделльні парні потенціали, що мають просту аналітичну форму й відбивають основні особливості міжмолекулярної взаємодії для широкого класу речовин, відіграють основну роль при статистико-механічному описі молекулярних систем. Велике поширення наразі одержав застосований нами ЛД-потенціал, що враховує за допомогою ефективних значень параметрів внески в макроскопічні властивості, обумовлені багаточастковими взаємодіями, неізотропністю силових полів, квантовими й іншими ефектами. Параметри потенціалів визначаються за різними експериментальними даними – про другий віріальний коефіцієнт, в'язкість, рівноважні термодинамічні властивості (щільність, внутрішня енергія). При описі теплофізичних характеристик компонентів АП та їх сумішей у рідкому й щільно-газовому станах необхідна наявність погоджених експериментальних даних про опорні властивості як для чистих компонентів (у тому числі для маловивчених рідких важких вуглеводнів), так і для їх сумішей у якнайбільш широких температурних інтервалах. Такі дані є для щільності рідини $D_L(T)$ на лінії рівноваги рідина-пара [19,20]. На підставі отриманої залежності (19) ортобаричної щільності рідкої фази ЛД-системи параметри ε , σ компонентів АП можуть бути визначені стандартним методом найменших квадратів – мінімізацією величини

S за параметрами E, \tilde{D}

$$S(E, \tilde{D}) = \sum_{i=1}^{ND} \left[D_L(T_i) / \tilde{D} - \sum_{k=0}^4 \rho_k \cdot (T_i/E)^k \right]^2, \quad (20)$$

де E, \tilde{D}, \tilde{P} – параметри приведення для температури, масової щільності й тиску, пов'язані з ε, σ за допомогою виразів

$$E = \varepsilon/k, \quad \tilde{D} = M/(N_A \sigma^3), \quad \tilde{P} = RE\tilde{D}, \quad (21)$$

де N_D – кількість опорних точок (температур); ρ_k – коефіцієнти рівняння (19); $N_A = n_A \cdot 10^{27}$ – число Авогадро ($n_A = 0,6022045$), 1/кмоль; $\sigma = \sigma_A \cdot 10^{-10}$, м; $R = R_0/M$, кДж/(кг·К); $R_0 = 8,31441$ – універсальна газова константа, кДж/(кмоль·К); M – молярна маса компонента, кг/кмоль.

Для параметрів \tilde{D} і \tilde{P} маємо:

$$\tilde{D} = 10^3/Q; \tilde{P} = RE/Q, \quad (22)$$

де $Q = n_A \sigma_A^3/M$.

Отримані згідно (20) значення ε, σ та інших параметрів компонентів АП наведені в табл. 3. При цьому використані дані про D_L : [19,20] для вуглеводнів C_i та N_2 ($C_i \equiv C_i H_{2i+2}$), [23] для CO_2 , [30] для H_2S, H_2O та C_6H_6 , [24,31] для O_2 , [31] для CO [29]. Величина N_D при цьому коливається від 6 до 8 в інтервалах від потрійної до критичної точок.

Таблиця 3. Параметри компонентів АП

Речовина	M , кг/кмоль	$E=\varepsilon/k$, К	$\sigma \cdot 10^{10}$, м	\tilde{D} , кг/м ³	\tilde{P} , МПа
CH ₄	16,0430	150,86	3,7424	508,27	39,739
C ₂ H ₆	30,0701	244,32	4,2263	661,47	44,685
C ₃ H ₈	44,0972	288,35	4,6623	722,55	39,283
n-C ₄ H ₁₀	58,1243	327,98	5,0281	759,28	35,622
i-C ₄ H ₁₀	58,1243	318,84	5,0538	747,76	34,104
n-C ₅ H ₁₂	72,151	362,01	5,3535	780,88	32,576
i-C ₅ H ₁₂	72,151	347,12	5,3457	784,30	31,373
C ₆ H ₁₄	86,172	398,23	5,6503	793,24	30,479
C ₇ H ₁₆	100,198	416,85	5,9059	807,72	27,939
C ₈ H ₁₈	114,224	433,61	6,1407	819,14	25,854
C ₉ H ₂₀	128,25	449,34	6,3642	826,20	24,068
C ₁₀ H ₂₂	142,276	465,52	6,5749	831,22	22,613
N ₂	28,0134	97,55	3,5996	997,38	28,877
CO ₂	44,011	228,36	3,5641	1614,24	69,640
H ₂ S	34,08	318,62	3,7581	1066,20	82,878
O ₂	31,9988	120,84	3,3806	1375,33	43,183
H ₂	2,016	37,00	2,9280	133,36	20,351
H ₂ O	18,015	547,62	3,3467	798,07	201,705
C ₆ H ₆	78,114	426,26	4,9963	1040,39	47,203

Висновки

Висновки за результатами дослідження, а також їх наукову новизну та практичне значення буде наведено у другій, завершальній, частині.

References:

1. Кондратенко О.М. Фізичне і математичне моделювання процесів у фільтрах твердих частинок у практиці

критеріального оцінювання рівня екологічної безпеки : монографія / О.М. Кондратенко, В.Ю. Колосков, Ю.Ф. Деркач, С.А. Коваленко. – Х.: Стиль-Издат (ФОП Бровін О.В.), 2020. – 522 с. 2. Парсаданов І.В. Підвищення якості і конкурентоспроможності дизелів на основі комплексного паливно-екологічного критерію: монографія. – Х.: Центр НТУ «ХПІ», 2003. – 244 с. 3. Kondratenko O.M. Determination of reference values of complex fuel and ecological criterion as the separate independent factor of ecological safety / O.M. Kondratenko, V.A. Andronov, V.Yu. Koloskov, O.O. Tkachenko, Ye.V. Kapinos // Двигуни внутрішнього згоряння. – 2021. – № 1. – pp. 75–85. – DOI: 10.20998/0419-8719.2021.1.10. 4. Kondratenko O. Development and Use of the Index of Particulate Matter Filter Efficiency in Environmental Protection Technology for Diesel-Generator with Consumption of Biofuels / O. Kondratenko, V. Andronov, V. Koloskov, O. Stokov // 2021 IEEE KhPI Week on Advanced Technology: Conference Proceedings (13–17 September 2021, NTU «KhPI», Kharkiv). – Kharkiv: NTU «KhPI», 2021. – pp. 239–244. – DOI: 10.1109/KhPI Week53812.2021.9570034. 5. Kondratenko O. Criteria based assessment of efficiency of conversion of reciprocating ICE of hybrid vehicle on consumption of biofuels / O. Kondratenko, V. Koloskov, S. Kovalenko, Y. Derkach, O. Stokov // 2020 IEEE KhPI Week on Advanced Technology, KhPI Week 2020: Conference Proceedings (05–10 October 2020, NTU «KhPI», Kharkiv). – Kharkiv: NTU «KhPI», 2020. – pp. 177–182. – DOI: 10.1109/KhPIWeek 51551.2020.9250118. 6. Kondratenko O. Criteria based assessment of the level of ecological safety of exploitation of electric generating power plant that consumes biofuels / O. Kondratenko, I. Mishchenko, G. Chernobay, Yu. Derkach, Ya. Suchikova // 2018 IEEE 3rd International International Conference on Intelligent Energy and Power Systems (IEPS–2018): Book of Papers (10–14 September, 2018, NTU «KhPI», Kharkiv). – Kharkiv: NTU «KhPI», 2018. – pp. 57–1–57-6. – DOI: 10.1109/IEPS.2018.8559570. 7. Marchenko A. Research of energy effectiveness and exhaust emissions of direct injection diesel engine running on RME and its blends with DO / A. Marchenko, I. Parsadanov, A. Prokhorenko et al. // Proceedings of the 12th International Conference Transport Means. – 2008. – pp. 312–319. 8. Levterov A. Thermodynamic properties of fatty acid esters in some biodiesel fuels / A. Levterov, A. Levterov. Functional Materials. – 2018. – Vol. 25, No. 2. – pp. 308–312. 9. Умеренкова К.Р. Перспективи використання альтернативних палив і методика визначення їх теплофізичних характеристик: монографія / К.Р. Умеренкова, В.Г. Борисенко // – Х.: НУЦЗУ, 2022. – 92 с. 10. Умеренкова К.Р. Визначення теплофізичних властивостей альтернативних моторних палив як аспект екологізації двигунів внутрішнього згоряння / К.Р. Умеренкова, А.М. Левтеров, О.М. Кондратенко // Проблеми техногенно-екологічної безпеки в сфері цивільного захисту: Матеріали Всеукраїнської науково-практичної конференції (08–09 грудня 2022 р., НУЦЗУ, Харків). – Х.: НУЦЗУ, 2022. – С. 162–165. 11. Umerenkova K.R., Borysenko V.G., Kondratenko O.M., Lievtierov A.M. Determination of thermophysical properties of alternative motor fuels as an aspect of environmental aspect of internal combustion engines / Problems of Emergency Situations: Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції (19 травня 2023 р., НУЦЗУ, Харків). – Х.: НУЦЗУ, 2023. с. 450–451. 12. Ablieieva I. Scientific and methodological approaches to assessing the safety of oil production complexes as potentially dangerous objects / I.

- Ablieieva, L. Plyatsuk, I. Trunova, O. Burla, B. Krasulia // *Technogenic and ecological safety*. – 2022. – 11(1/2022) – pp. 8–17. – DOI: 10.52363/2522-1892.2022.1.2.
13. Суханов В.П. *Переработка нефти*. 2-е изд. перераб. и доп. / В.П. Суханов. – М.: Высшая школа, 1979. – 335 с.
14. Kondratenko O. Determination of emissions of vapour of flammable technical liquids from enterprise for their storing and distribution and rational adjustments of their breathing valves / O. Kondratenko, V. Koloskov, S. Kovalenko, Yu. Derkach, O. Botsmanovska, N. Podolyako // *Technogenic and ecological safety* – 2020. – № 8(2/2020). – pp. 17–31. – DOI: 10.5281/zenodo.4300753.
15. Марченко А.П. *Движуні внутрішнього згоряння та навколишнє середовище* / А.П. Марченко, І.В. Парсаданов, О.П. Строчков // *Движуні внутрішнього згоряння*. – 2022. – № 2. – С. 3–12. – DOI: 10.20998/0419-8719.2022.2.01.
16. Гирифельдер Дж. *Молекулярная теория газов и жидкостей* / Дж. Гирифельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд // – М.: Изд-во иностр. л-ры, 1961. – 930 с.
17. Barker J.A. *What is liquid? Understanding the states of matter* / J.A. Barker, D. Henderson // *Rev. Mod. Phys.* – 1976. – Vol. 48, N 4. – P. 587–671.
18. Крокстон К. *Физика жидкого состояния* / К. Крокстон // – М.: Мир, 1978. – 400 с.
19. Маринин В.С. *Теплофизика альтернативных энергоносителей* / В.С. Маринин. – Х.: Форт, 1999. – 212 с.
20. Маринин В.С. *О возможной модификации метода теории возмущений в статистической физике жидкостей* / В.С. Маринин, В.В. Паишков // *Укр. физ. журн.* – 1976. – Т. 21, № 10. – С. 1695–1700.
21. Гуревич Г.Р. *Справочная помощь по расчету фазового состояния и свойств газоконденсатных смесей* / Г.Р. Гуревич, А.И. Брусиловский. – М.: Надра, 1984. – 264 с.
22. Рид Р. *Свойства газов и жидкостей* / Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд. – Л.: Химия, 1982. – 592 с.
23. Алтунин В.В. *Теплофизические свойства двуокиси углерода* / В.В. Алтунин. – М.: Изд-во стандартов, 1975. – 546 с.
24. Сычев В.В. *Термодинамические свойства кислорода* / В.В. Сычев, А.А. Вассерман, А.Д. Козлов и др. – М.: Изд-во стандартов, 1981. – 306 с.
25. Сычев В.В. *Термодинамические свойства азота* / В.В. Сычев, А.А. Вассерман, А.Д. Козлов и др. – М.: Изд-во стандартов, 1977. – 352 с.
26. Сычев В.В. *Термодинамические свойства метана* / В.В. Сычев, А.А. Вассерман, В.А. Загорученко и др. – М.: Изд-во стандартов, 1979. – 348 с.
27. Сычев В.В. *Термодинамические свойства этана* / В.В. Сычев, А.А. Вассерман, В.А. Загорученко и др. – М.: Изд-во стандартов, 1982. – 304 с.
28. Сычев В.В. *Термодинамические свойства пропана* / В.В. Сычев, А.А. Вассерман, А.Д. Козлов и др. – М.: Изд-во стандартов, 1989. – 268 с.
29. Orrit J.E., Laupretre J.M. *Calculational method for the density of LNG* / J.E. Orrit, J.M. Laupretre // *Adv. Cry. Eng.* – 1978. – Vol.23. – P. 566–579.
30. Варгафтик Н.Б. *Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей* / Н.Б. Варгафтик. – М.: Наука, 1972. – 720 с.
31. Малков М.П. *Справочник по физико-техническим основам криогеники* / М.П. Малков, И.Б. Данилов, А.Г. Зельдович, А.Б. Фрадков. – М.: Энергоатомиздат, 1985. – 432 с.
- monografiya], Publ. Style-Izdat (FOP Brovin O.V.), Kharkiv, 522 p.
2. Parsadanov, I.V. (2003), *Improving the quality and competitive-ness of diesel engines based on complex fuel and ecological criteria: monograph* [Pidvishchennya yakosti i konkurentospromozhnosti dizeliv na osnovi kompleksnogo palivno-ekologichnogo kriteriyu: monografiya], Publ. NTU «KhPI», Kharkiv, 244 p.
3. Kondratenko, O.M., Andronov, V.A., Koloskov, V.Yu., Tkachenko, O.O., Kapinos, Ye.V. (2021), «Determination of reference values of complex fuel and ecological criterion as the separate independent factor of ecological safety». *Internal combustion engines*, 2021, № 1, pp. 75–85, DOI: 10.20998/0419-8719.2021.1.10.
4. Kondratenko, O., Andronov, V., Koloskov, V., Strokov, O. (2021), «Development and Use of the Index of Particulate Matter Filter Efficiency in Environmental Protection Technology for Diesel-Generator with Consumption of Biofuels», 2021 IEEE KhPI Week on Advanced Technology (13–17 September 2021): Conference Proceedings, Publ. NTU «KhPI», Kharkiv, 2021, pp. 239–244, DOI: 10.1109/KhPIWeek53812.2021.9570034.
5. Kondratenko, O., Mishchenko, I., Chernobay, G., Derkach, Yu., Suchikova, Ya. (2018), «Criteria based assessment of the level of ecological safety of exploitation of electric generating power plant that consumes biofuels», 2018 IEEE 3rd International International Conference on Intelligent Energy and Power Systems (IEPS–2018) (10–14 September 2018): Book of Papers, Publ. NTU «KhPI», Kharkiv, pp. 185–189, DOI: 10.1109/IEPS.2018.8559570.
6. Kondratenko, O., Koloskov, V., Strokov, O., Kovalenko, S., Derkach, Yu. (2020), «Criteria based assessment of efficiency of conversion of reciprocating ICE of hybrid vehicle on consumption of biofuels», 2020 IEEE KhPI Week on Advanced Technology (05 – 10 October 2020): Conference Proceedings, Publ. NTU «KhPI», Kharkiv, pp. 177–182, DOI: 10.1109/KhPI Week51551. 2020.9250118.
7. Marchenko, A., Parsadanov, I., Prokhorenko, A. et al. (2008), «Research of energy effectiveness and exhaust emissions of direct injection diesel engine running on RME and its blends with DO», *Proceedings of the 12th International Conference Transport Means*, pp. 312–319.
8. Levterov, A., Levterov, A. (2018), «Thermodynamic properties of fatty acid esters in some biodiesel fuels», *Functional Materials*, Vol. 25, No. 2, pp. 308–312.
9. Umerenkova K.R., Borysenko V.G. (2022) *Prospects for the use of alternative fuels and methods of determining their thermophysical characteristics: monograph* [Perspektyvy vykorystannia alternatyvnykh palyv i metodyka vyznachennia yikh teplofizychnykh kharakterystyk: monografija]. Kharkiv, NUCDU, 92 p.
10. Umerenkova K.R., Lievtierov A.M., Kondratenko O.M. (2022) «Determination of thermophysical properties of alternative motor fuels as an aspect of greening of internal combustion engines» [Vyznachennia teplofizychnykh vlastyvostei alternatyvnykh motornykh palyv yak aspekt ekolohizatsii dvyhunyv vnutrishnoho zghoriannia], *Problems of technogenic and ecological safety in the field of civil protection: Materials of the All-Ukrainian scientific and practical conference* (December 08–09, 2022, NUCDU, Kharkiv) Kharkiv, NUCDU, pp. 162–165.
11. Umerenkova K.R., Borysenko V.G., Kondratenko O.M., Lievtierov A.M. (2023) «Determination of thermophysical properties of alternative motor fuels as an aspect of environmental aspect of internal combustion engines», *Problems of Emergency Situations: Materials of the International Scientific and Practical Conference*, (19 May 2023, NUCDU, Kharkiv), Kharkiv, NUCDU, pp. 450–451.
12. Ablieieva, I., Plyatsuk, L., Trunova, I., Burla, O., Krasulia, B. (2022), «Scientific and methodological approaches to assessing the safety of oil production complexes as potentially dangerous objects», *Technogenic and ecological safety*, 2022, 11 (1/2022), pp. 8–17, DOI: 10.52363/2522-1892.2022.1.2.
13. Surhanov, V.P. (1979), *Oil refining*. 2nd ed. revised and added. [Pererabotka nefi. 2 izd. ispr. i dop.], Publ. Vysshaya shkola, Moscow. 335 p.
14. Kondratenko, O., Koloskov, V., Kovalenko, S., Derkach, Yu., Botsmanovska, O., Podolyako, N. (2020), *Determination of emissions of vapour of flammable technical liquids from enterprise for their storing and distribution and rational adjustments of their breathing valves*, *Technogenic and ecological safety*, 8(2/2020), pp. 17–31, DOI: 10.5281/zenodo.4300753.
15. Marchenko A.P., Parsadanov I.V., Strokov O.P. (2022) «Internal combustion engines and the environment» [Dvyhuny vnutrishnoho zghoriannia ta navkolyshnie seredovyshche], *Internal Combustion Engines*, № 2, pp. 3–12, DOI: 10.20998/0419-8719.2022.2.01.
16. Girshpelder J., Kertiss Ch.,

Bibliography (translated):

1. Kondratenko, O.M., Koloskov, V.Yu., Derkach, Yu.F., Kovalenko, S.A. (2020), *Physical and mathematical modeling of processes in particulate filters in the practice of criteria for assessing the level of environmental safety: monograph* [Fizichne i matematichne modelyuvannya procesiv u fil'trah tverdih chastinok u praktici kriterial'nogo ocinyuvannya rivnya ekologichnoї bezpeki :

Bird R. (1961) *Molecular theory of gases and liquids* [Molekulyarnaya teoriya gazov i zhidkostey], Moscow, Publ. Izd-vo Inostr. Lit., 930 p. 17. Barker J.A., Henderson D. (1976) «What is liquid? Understanding the states of matter», *Rev. Mod. Phys.*, Vol. 48, N 4, pp 587–671. 18. Krockstone K. (1978) *Physics of the liquid state* [Fizika zhidkogo sostoyaniya], Moscow, Mir, 400 p. 19. Marinin V.S. (1999) *Thermophysics of alternative energy carriers* [Teplofizika alternativnykh energonositeley], Kharkiv, Fort, 212 p. 20. Marinin V.S., Pashkov V.V. (1976) «On a possible modification of the perturbation theory method in the statistical physics of fluids» [O vozmozhnoy modifikatsii metoda teorii vozmuscheniy v statisticheskoy fizike zhidkostey], *Ukr. Phys. Journal*, Vol. 21, № 10, pp. 1695–1700. 21. Gurevich G.R., Brusilovskii A.I. (1984) *Reference help for calculating the phase state and properties of gas-condensate mixtures* [Spravochnaya pomoshch po raschetu fazovogo sostoyaniya i svoystv gazokondensatnykh smesey], Moscow, Nedra, 264 p. 22. Rid R., Prausnitz J., Sherwood T. (1982) *Properties of gases and liquids* [Svoystva gazov i zhidkostey], Leningrad, Khimia, 592 c. 23. Altunin V.V. (1975) *Thermophysical properties of carbon dioxide* [Teplofizicheskie svoystva dyuokisi ugleroda], Moscow, Publ. Izd-vo Standartov, 546 p. 24. Sychev V.V., Wasserman A.A., Kozlov A.D. and etc. (1981) *Thermodynamic properties of oxygen*

[Termodinamicheskie svoystva kisloroda] Moscow, Publ. Izd-vo Standartov, 306 p. 25. Sychev V.V., Wasserman A.A., Kozlov A.D. and etc. (1977) *Thermodynamic properties of nitrogen* [Termodinamicheskie svoystva azota] Moscow, Publ. Izd-vo Standartov, 352 p. 26. Sychev V.V., Wasserman A.A., Zagoruchenko V.A. and etc. (1979) *Thermodynamic properties of methane* [Termodinamicheskie svoystva metana] Moscow, Publ. Izd-vo Standartov, 348 p. 27. Sychev V.V., Wasserman A.A., Zagoruchenko V.A. and etc. (1982) *Thermodynamic properties of ethane* [Termodinamicheskie svoystva etana] Moscow, Publ. Izd-vo Standartov, 304 p. 28. Sychev V.V., Wasserman A.A., Kozlov A.D. and etc. (1989) *Thermodynamic properties of propane* [Termodinamicheskie svoystva propana] Moscow, Publ. Izd-vo Standartov, 268 p. 29. Orrit J.E., Laupretre J.M. (1978) «Calculational method for the density of LNG», *Adv. Cry. Eng.*, Vol.23, pp. 566–579. 30. Vargaftik N.B. (1972) *Handbook on thermophysical properties of gases and liquids* [Spravochnik po teplofizicheskim svoystvam gazov i zhidkostey], Moscow, Nauka, 720 p. 31. Malkov M.P., Danilov I.B., Zeldovich A.G., Fradkov A.B. (1985) *Handbook of physical and technical foundations of cryogenics* [Spravochnik po fiziko-tekhnicheskim osnovam kriogeniki], Moscow, Energoatomizdat, 432 p.

Received to the editorial office 25.05.2023

Kondratenko Olexandr Mykolayovych – D.Sc.(Eng.), Associate Professor, Professor of Department of Applied Mechanics and Environment Protection Technologies of Faculty of Technogenic and Ecological Safety, National University of Civil Protection of Ukraine of SES of Ukraine, Kharkiv, Ukraine, e-mail: kongratenkoom2016@gmail.com, ORCID ID: 0000-0001-9687-0454, Scopus ID: 57144373800, ResearcherID: D-7346-2018, Google Scholar ID: 0iIbJMcAAAAJ.

Umerenkova Ksenia Rostyslavivna – Cand.Sc.(Eng.), Associate Professor, Lecturer of Department of Physical and Mathematical Disciplines of Faculty of Technogenic and Ecological Safety, National University of Civil Protection of Ukraine of SES of Ukraine, Kharkiv, Ukraine, e-mail: kruukr1946@ukr.net, ORCID ID: 0000-0002-3654-4814, Scopus ID: 16318085300, Google Scholar ID: 0JdUAAAAJ.

Liev tierov Anton Mykhailivych – Cand.Sc.(Eng.), Senior Researcher, Senior Researcher of Department of Hydrogen Energetics of A.M. Pidgorny Institute for Mechanical Engineering Problems of NAS of Ukraine, Kharkiv, Ukraine, e-mail: antmix1947@gmail.com, ORCID ID: 0000-0001-5308-1375, Scopus ID: 55795527600, Google Scholar ID: 7tyvcX0AAAAJ.

Strokov Olexandr Petrovych – D.Sc.(Eng.), Professor, Professor of Department of Automobile Transport and Transport Technologies of the Kremenchuk Branch of the Classical Private University, Kremenchuk, Ukraine, Full Member of the Engineering Academy of Ukraine, Member of the National Union of Journalists of Ukraine, e-mail: ataman1946@ukr.net, Scopus ID: 57144561500.

Koloskov Volodymyr Yuriyovych – Cand.Sc.(Eng.), Associate Professor, Head of Department of Applied Mechanics and Environment Protection Technologies of Faculty of Technogenic and Ecological Safety, National University of Civil Protection of Ukraine of SES of Ukraine, Kharkiv, Ukraine, e-mail: koloskov_v@ukr.net, ORCID ID: 0000-0002-9844-1845, Scopus ID: 57203686820, Google Scholar ID: gP6w7a8AAAAJ

IMPROVEMENT OF THE MATHEMATICAL DESCRIPTION OF THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF ALTERNATIVE MOTOR FUELS BASED ON THE MODIFIED THERMODYNAMIC THEORY OF DISTURBANCE. PART 1

Kondratenko O. M., Umerenkova K. R., Liev tierov A. M., Strokov O. P., Koloskov V. Yu.

In the study, the purpose of which was to improve the mathematical apparatus based on the modified thermodynamic perturbation theory for describing the thermophysical characteristics of alternative motor fuels with a spherical configuration of interacting structural elements and an arbitrary aggregate state, the formal scheme of the modified perturbation theory was consistently constructed, the main characteristics of the model system were described, the parameters of the interaction potentials of the alternative fuel components were described, the thermophysical properties of the alternative fuel components were obtained by calculation, the thermodynamic properties of the alternative fuel components were calculated, the results of the calculation of the thermodynamic characteristics of the alternative fuel were analyzed and illustrated in the form of isotherm of phase equilibrium diagrams and data tables. The object of the study is the thermophysical characteristics of traditional, alternative and mixed motor fuels in a liquid or gaseous aggregate state. The subject of the study is a mathematical apparatus based on the modified thermodynamic perturbation theory for describing the thermophysical characteristics of motor fuels. The scientific novelty of the study results lies in the fact that a mathematical apparatus based on a modified perturbation theory has been improved for a comprehensive description of all thermophysical characteristics of motor fuels of any genesis, i.e. traditional, alternative and mixed, which are in both liquid and gaseous aggregate states in terms of reducing the calculation time and reducing the error of obtaining thermophysical characteristics in comparison with reference and experimental data. The practical significance of the research results is that the improved mathematical apparatus is marketable for providing accurate information to the composition of the initial data set in research on the production, storage, transportation, distribution, use of motor fuels of any genesis, which are in different states, as well as forecasting the course and results of processes of atmospheric pollution by gaseous products of complete and incomplete combustion of fuel components in combustion chambers of various types of heat engines.

Key words: thermophysical properties; traditional motor fuels; alternative motor fuels; mathematical model; environmental protection technologies; ecological safety; power plants; reciprocating internal combustion engines