

УДК 536.22

## Фундаментальное уравнение состояния пропилциклогексана

Е. А. БЕРКОВА<sup>1</sup>, д-р техн. наук И. С. АЛЕКСАНДРОВ<sup>1\*</sup>,д-р техн. наук А. А. ГЕРАСИМОВ<sup>1</sup>, д-р техн. наук Б. А. ГРИГОРЬЕВ<sup>2</sup><sup>1</sup>Калининградский государственный технический университет<sup>2</sup>РГУ нефти и газа (НИУ) имени И. М. Губкина

\*E-mail: igor.aleksandrov@klgtu.ru

Выполнен обзор и оценка полноты экспериментального исследования термодинамических свойств (ТДС) пропилциклогексана в различных областях параметров состояния. Процесс анализа экспериментальных данных о ТДС показал недостаточную исследованность в некоторых областях параметров. Для обеспечения численной устойчивости и физического поведения уравнения в неисследованных диапазонах параметров состояния, массив экспериментальных данных дополнялся расчетными данными. Расчетные данные о термодинамических свойствах пропилциклогексана получены апробированными методиками расчета в рамках теории термодинамического подобия. Фундаментальное уравнение состояния (ФУС) пропилциклогексана разработано на массиве экспериментальных и расчетных данных посредством современного математического алгоритма на базе метода случайного поиска. ФУС корректно и точно описывает все ТДС исследуемого вещества в диапазоне температур от тройной точки до 700 К при давлениях до 100 МПа. Уравнение выражено через один из термодинамических потенциалов — энергию Гельмгольца. Собственными переменными этого потенциала являются — приведенная температура и приведенная плотность. Уравнение содержит 11 слагаемых, из которых шесть полиномиальные и пять экспоненциальные. Уравнения состояния является эмпирическим, но, тем не менее, удовлетворяет классическим условиям критической точки и правилу Максвелла. Кроме этого, экстраполяционный характер уравнения подтверждается правильным описанием хода идеальных кривых и производных термодинамического потенциала. Средние относительные отклонения расчетных значений ТДС по ФУС имеют следующие значения: плотность жидкой фазы —  $\pm 0,31\%$ , давление насыщенных паров —  $\pm 0,42\%$ , плотность насыщенной жидкой фазы —  $\pm 0,18\%$ , изобарная теплоемкость жидкой фазы на линии насыщения —  $\pm 0,54\%$ ; скорость звука —  $\pm 0,17\%$ .

**Ключевые слова:** пропилциклогексан, фундаментальное уравнение состояния, термодинамические свойства.

### Информация о статье:

Поступила в редакцию 24.11.2023, одобрена после рецензирования 18.01.2024, принята к печати 05.02.2024

DOI: 10.17586/1606-4313-2024-23-1-85-91

Язык статьи — русский

### Для цитирования:

Беркова Е. А., Александров И. С., Герасимов А. А., Григорьев Б. А. Фундаментальное уравнение состояния

Пропилциклогексана // Вестник Международной академии холода. 2024. № 1. С. 85–91. DOI: 10.17586/1606-4313-2024-23-1-85-91

## Fundamental equation of state for propylcyclohexane

E. A. BERKOVA<sup>1</sup>, D. Sc. I. S. ALEKSANDROV<sup>1\*</sup>, D. Sc. A. A. GERASIMOV<sup>1</sup>, D. Sc. B. A. GRIGORIEV<sup>2</sup><sup>1</sup>Kaliningrad State Technical University<sup>2</sup>National University of Oil and Gas «Gubkin University»

\*E-mail: igor.aleksandrov@klgtu.ru

A review and evaluating the completeness of the experimental study on the thermodynamic properties (TDP) of propylcyclohexane in various ranges of state parameters has been carried out. The analysis revealed a lack of experimental data in some areas of the state surface. Therefore, in order to ensure the stability of the equation of state and good extrapolation qualities, some calculated data on thermodynamic properties obtained by various methods were used for unexplored areas. At the same time, proven methods of generalized calculation developed within the framework of the theory of thermodynamic similarity were used. A fundamental equation of state (FES) for propylcyclohexane is obtained, applicable in the temperature range from the triple point to 700 K at pressures up to 100 MPa. The equation is based on the hybrid array of experimental and calculated data using a heuristic algorithm based on the random search method. The equation describes the reduced Helmholtz potential in variables — reduced temperature and reduced density, contains 11 terms, of which six are polynomial and five are exponential. The equation satisfies the conditions of the critical point, Maxwell's rule and the rectilinear diameter, the positiveness of the heat capacity, and also correctly conveys the course of ideal curves and derivatives of the thermodynamic potential. The average relative deviations for the calculated values of TDP according

to the FES have the following values: density of the liquid phase —  $\pm 0.31\%$ , saturation vapor pressure —  $\pm 0.42\%$ , density of the saturated liquid phase —  $\pm 0.18\%$ , isobaric heat capacity of the liquid phase at the saturation line —  $\pm 0.54\%$ ; and sound speed —  $\pm 0.17\%$ .

**Keywords:** propylcyclohexane, fundamental equation of state, thermodynamic properties.

#### Article info:

Received 24/11/2023, approved after reviewing 18/01/2024, accepted 05/02/2024

DOI: 10.17586/1606-4313-2024-23-1-85-91

Article in Russian

#### For citation:

Berkova E. A., Aleksandrov I. S., Gerasimov A. A., Grigoriev B. A. Fundamental equation of state for propylcyclohexane. *Journal of International Academy of Refrigeration*. 2024. No 1. p. 85–91. DOI: 10.17586/1606-4313-2024-23-1-85-91

### Введение

Среди различных категорий промышленно важных веществ в особую группу выделены углеводороды. Они являются важнейшим сырьем для различных отраслей промышленности. Обеспечение науки и промышленности надежной информацией о теплофизических свойствах веществ позволит реализовать программы экономии материалов, топлива, внедрить в производство оптимальные, с точки зрения различных экономических показателей, процессы.

Целью данного исследования является разработка надежных уравнений состояния технически важных углеводородов. Данные обо всех термодинамических свойствах вещества содержится в фундаментальном уравнении состояния, которое является аналитической формой хранения такой информации. Наличие надежного уравнения состояния дает возможность эффективно проводить расчеты на базе специализированного программного обеспечения, а также проводить моделирование свойств многокомпонентных смесей.

В качестве объекта исследования выбран нафтеновый углеводород — пропилциклогексан. Потребность в надежных данных о теплофизических свойствах данного вещества обусловлена его широким использованием в нефтепереработке и нефтехимии. Для характерного и хорошо исследованного нафтена из рассматриваемой группы веществ, циклогексана, авторами данной статьи уже разработано уравнение состояния [1]. Однако для других представителей данной группы веществ, в том числе пропилциклогексана, существует потребность в наличии точного уравнения состояния. Кроме этого, обработка данных по свойствам указанного вещества представляет и чисто научный интерес, так как может стать основой для обобщения данных по теплофизическим свойствам углеводородов различных гомологических рядов.

### Уравнение состояния пропилциклогексана

Наиболее удобной и компактной формой хранения информации о термодинамических свойствах (ТДС) веществ в аналитическом виде является уравнение состояния. Широкое применение получили эмпирические и полуэмпирические многоконстантные уравнения состояния. Эти уравнения наряду с высокой точностью расчета ТДС характеризуются также и физически верным описанием поверхности состояния, благодаря при-

менению мощных математических алгоритмов для их разработки. Диапазон применимости достаточно широк и охватывает температуры от тройной точки до начала термической деструкции при давлениях до 500 МПа и более. Уравнения в форме свободной энергии (энергии Гельмгольца)  $\alpha(\rho, T)$ , в зависимости от плотности  $\rho$  и температуры  $T$ , на сегодняшний день широко применяются как в зарубежной, так и в отечественной практике. Потенциал представлен в виде суммы двух вкладов идеально-газовой части  $\alpha^0(\delta, \tau)$  и избыточной части  $\alpha^r(\delta, \tau)$  и в безразмерном виде представлен уравнением

$$\frac{\alpha(\rho, T)}{RT} = \frac{\alpha^0(\rho, T) + \alpha^r(\rho, T)}{RT} = \alpha^0(\delta, \tau) + \alpha^r(\delta, \tau). \quad (1)$$

Избыточная часть потенциала, математическая форма которой определяется оптимизационным алгоритмом, представлена в виде разложения в ряд по степеням приведенной плотности  $\delta$  и приведенной температуры  $\tau$ . После процедуры оптимизации формы уравнения состояния избыточная часть содержит шесть полиномиальных и пять экспоненциальных членов и имеет следующий вид

$$\alpha^r(\delta, \tau) = \alpha_{Pol}^r + \alpha_{Exp}^r = \sum_{i=1}^6 n_i \delta^i \tau^i + \sum_{i=7}^{11} n_i \delta^i \tau^i \exp(-\gamma_i \delta^{p_i}), \quad (2)$$

где  $\delta = \rho/\rho_c$ ;  $\tau = T_c/T$  — приведенные плотность и температура;  $\rho_c, T_c$  — параметры приведения (характеристические константы), соответственно.

В частности, для пропилциклогексана приняты параметры критической точки:  $\rho_c = 2,06$  кмоль/м<sup>3</sup> и  $T_c = 630,8$  К.

Критические константы пропилциклогексана приняты по данным работы [2]. Критическая температура определялась как среднее значение по отобранным в [2] данным. Критическая плотность уточнялась при оптимизации формы и коэффициентов ФУС в пределах установленного в работе [2] допуска.

Определение количества членов, численных значений показателей степени и коэффициентов в уравнении (2) производилось по алгоритму, реализующему эвристический метод случайного поиска [3]. Коэффициенты и показатели степени при температуре и плотности, определенные в процессе оптимизации формы ФУС (2), представлены в табл. 1.

Вклад ответственный за описание свойств в состоянии идеального газа определяется по соотношению

Таблица 1  
Коэффициенты и показатели степени  
ФУС (2) пропициклогексана

Table 1  
Coefficients and exponents  
for FES (2) of propylcyclohexane

<i>i</i>	<i>n<sub>i</sub></i>	<i>t<sub>i</sub></i>	<i>d<sub>i</sub></i>	<i>p<sub>i</sub></i>
1	0,1019764420406 · 10 <sup>1</sup>	0,2	1	–
2	–0,2586638538074 · 10 <sup>1</sup>	1,2	1	–
3	0,6291802757331	1,8	1	–
4	–0,2381653350393	1,5	2	–
5	0,1213674026649	0,3	3	–
6	0,3238210722341 · 10 <sup>–3</sup>	0,9	7	–
7	0,6277386514206	1,4	2	1
8	–0,1296130708734 · 10 <sup>–1</sup>	2,2	5	1
9	–0,6043857164847	3,7	1	2
10	–0,1596439635390	4,2	4	2
11	0,2239982397590	2,4	1	1
12	–0,5205063	1,7691	1	–
13	–0,1218961	4,0978	3	–

$$\alpha^0(\delta, \tau) = \frac{h_0^0 \tau}{RT_c} - \frac{s_0^0}{R} - 1 + \ln \frac{\delta \tau_0}{\delta_0 \tau} - \frac{\tau}{R} \int_{\tau_0}^{\tau} \frac{c_p^0}{\tau^2} d\tau + \frac{1}{R} \int_{\tau_0}^{\tau} \frac{c_p^0}{\tau} d\tau, \quad (3)$$

где  $\delta_0 = \rho_0 / \rho_c$ ;  $\tau_0 = T_c / T_0$ ;  $T_0, p_0$  — вспомогательные опорные точки ( $T_0 = 298,15$  К;  $p_0 = 101325$  Па), соответственно;  $\rho_0$  — плотность идеального газа при температуре  $T_0$  и давлении  $p_0$ ;  $h_0^0, s_0^0$  — соответственно энтальпия и энтропия в идеально-газовом состоянии при температуре  $T_0$ .

Для вычисления части свободной энергии  $\alpha^0(\delta, \tau)$  необходима корреляционная зависимость для теплоемкости идеального газа  $c_p^0$ . Нами предложена зависимость в форме (4). При разработке зависимости (4) аппроксимировались данные, полученные в Термодинамическом исследовательском центре [4].

$$c_p^0 = c_0 T^{c_1} + \sum_{k=1}^3 v_k \left( \frac{u_k}{T} \right)^2 \frac{\exp(u_k / T)}{[\exp(u_k / T) - 1]^2} \cdot \text{кДж}/(\text{кг} \cdot \text{К}). \quad (4)$$

Значения коэффициентов уравнения (4) для пропициклогексана представлены в табл. 2.

Таблица 2  
Значения коэффициентов в уравнении (4)

Table 2  
Coefficients in equation (4)

<i>c<sub>0</sub></i>	9,29427	<i>c<sub>1</sub></i>	0,385871
<i>v<sub>1</sub></i>	1,37051	<i>u<sub>1</sub></i>	173295
<i>v<sub>2</sub></i>	106,426	<i>u<sub>2</sub></i>	561,14
<i>v<sub>3</sub></i>	313,713	<i>u<sub>3</sub></i>	1919,52

Учитывая дефицит экспериментальных данных для исследуемого вещества и эмпирический характер уравнения состояния, возможны ограничения экстраполяционных возможностей уравнения. Также есть риск

роста ошибок расчета термодинамических свойств вне области параметров состояния, включающей исходные данные, использованные для построения уравнения. Более того, вид изолиний свойств в области экстраполяции может быть противоположен теоретически предсказываемому виду. Поэтому, для снижения риска возникновения указанных проблем и улучшения экстраполяционных возможностей уравнения массив экспериментальных данных дополнялся расчетными значениями ТДС. Расчетные данные получены обобщенными методами в рамках принципа соответственных состояний. Анализ показал, что, используя такой подход, удалось поднять верхнюю границу применимости уравнения состояния до температур начала термических превращений. При этом поведение расчетных термодинамических свойств хорошо согласуется с уравнением состояния. Вблизи тройной точки добиться полной гладкости изолиний затруднительно. Однако отклонения расчетных значений по уравнению состояния от сглаженных экспериментальных данных не превышают неопределенности экспериментального исследования в этой области.

Таким образом, расширение массива исходных данных за пределы области имеющих экспериментальных данных путем физически обоснованной экстраполяции позволяет расширить область применимости уравнения состояния и существенно улучшить воспроизведение термодинамической поверхности вещества.

Для расчетов использовались следующие методики. Плотность жидкой фазы на линии насыщения за пределами экспериментального исследования рассчитывалась по двум уравнениям: уравнению Филиппова [5] и уравнению Железного [6]. Принимались средние значения, при этом расчетные данные хорошо согласуются между собой во всем диапазоне температур. Указанные уравнения описывают имеющиеся экспериментальные данные со средним квадратичным отклонением соответственно 0,064% и 0,055%. Для расчета плотности газовой фазы в диапазоне температур 530–700 К применена обобщенная форма уравнения состояния Ли и Кесслера [7].

Давление насыщенных паров за пределами экспериментального исследования рассчитывалось по двум обобщенным уравнениям Зиа и Тодоса [8] и Фроста — Колкуорфа — Тодоса [9]. Для сравнения с ФУС принимались средние значения. Данные о плотности и изобарной теплоемкости в критической области рассчитывались по двум кроссоверным уравнениям состояния [10, 11].

Для повышения численной устойчивости уравнения и его тестирования при сверхкритических параметрах возможно использование данных молекулярного моделирования. Такой подход возможен при наличии требуемых вычислительных мощностей и оптимизированных потенциалов межмолекулярного взаимодействия. Такой подход уже был реализован авторами данной статьи при разработке и тестировании уравнений состояния *n*-тетрадекана и *n*-пентадекана [1].

### Анализ полученных результатов

Результаты сравнения разработанного уравнения состояния с экспериментальными и расчетными данными о термодинамических свойствах пропициклогексана представлены в табл. 3.

Таблица 3

Результаты сравнения данных о термодинамических свойствах пропилциклогексана со значениями, рассчитанными по ФУС (1)–(3)

Table 3

Results of Comparison of Thermodynamic Properties for propylcyclohexane with values calculated according to FES (1)–(3)

Год	Первый автор, источник	Точки	Диапазон параметров		Среднее относительное отклонение, %		
			$T$ , К	$p$ , МПа	жид.	газ	крит.
<i><math>p</math>, <math>v</math>, <math>T</math>-данные</i>							
2008	Лаесек [12]	162	270–470	0,1–40	0,134	–	–
2000	Френкель [2]	4	323–383	30	0,478	–	–
2023	Расчет по [7]	65	520–700	0,6–25	–	0,604	–
2023	Расчет по [10]	99	625–650	2,6–4,7	–	–	1,446
Давление насыщенных паров							
1945	Виллингхэм [13]	20	345–430	–	–	0,166	–
1949	Форциатти [14]	20	346–431	–	–	0,140	–
1995	Мокбел [15]	24	233–452	–	–	0,940	–
2023	Расчет по [8, 9]	90	233–630	–	–	0,496	–
Энтальпия испарения							
2000	Френкель [2]	2	298	–	–	0,444	–
Плотность насыщенной жидкой фазы							
2018	Прак [16]	8	293–363	–	0,150	–	–
1944	Гаррет [17]	8	280–310	–	0,205	–	–
2023	Расчет по [5, 6]	27	180–628	–	0,288	–	–
Теплоемкость на линии насыщения $c_s$							
1965	Финк [18]	47	188–380	–	0,544	–	–
2023	Расчет по [5, 6]	24	390–600	–	1,299	–	–
Теплоемкость при постоянном давлении $c_p$							
2023	Расчет по [5, 6]	99	625–650	2,6–4,7	–	–	6,592
Скорость звука							
2008	Лаесек [12]	8	278–343	0,101	0,166	–	–

Заметим, что  $p$ ,  $v$ ,  $T$ -зависимость пропилциклогексана исследована только в жидкой фазе. За основу при разработке уравнения состояния принимались данные Лаясека [12]. В работе [12] приведены значения плотности в диапазоне параметров 270–470 К и 0,1–40 МПа. Чистота исследуемого образца составляла 96,68%. Неопределенность измерения варьировалась от 0,07 до 0,14%. Расчетные данные по [2] для плотности пропициклогексана в жидкой фазе приводятся в узком диапазоне параметров 323–383 К и 30 МПа. Как видно из таблицы 3, указанные данные описываются с отклонением 0,48%.

Исследования давления насыщенных паров представлены работами [13]–[15]. Как правило, исследовался узкий диапазон температур. Данные Мокбела [15] являются наиболее широкодиапазонными из представленных в обзоре. В работе [15] нижний предел исследования по температуре составляет 233 К, верхний предел — 452 К. Неопределенность измерения автор оценивает в 0,2% при давлениях свыше 1 кПа и 1,0% при более низких давлениях. Исследовался образец с чистотой 98%. Данные [15] непосредственно включались в обработку при построении уравнения состояния.

Плотность насыщенной жидкости исследована не в полном объеме [16, 17]. При разработке уравнения за основу были приняты данные Прака [16], как наиболее широкодиапазонные. Среднее относительное отклонение

расчетных значений плотности жидкой фазы на линии насыщения по ФУС составляет 0,18% (табл. 3).

Теплоемкость пропилциклогексана исследована на линии насыщения в работе Финка [18]. Исследования проводились калориметрическим методом, неопределенность измерения составляла ~ 0,4%. Указанные данные описываются новым уравнением с отклонениями близкими к погрешности эксперимента.

Скорость звука исследована только в работе [12]. Измерения выполнялись в узком интервале температур при атмосферном давлении. Точность описания скорости звука уравнением (1) составляет 0,166%.

Экспериментальные данные о ТДС в критической области отсутствуют. Однако при разработке уравнения учитывались классические условия равенства производных первого и второго порядков от давления по температуре нулю на критической изотерме. Поэтому в широкой окрестности критической точки уравнение верно описывает поверхность состояния, но с большими неопределенностями. Что же касается описания критической аномалии непосредственно, то для этого применимы уравнения состояния, полученные в рамках масштабной теории, а эмпирические уравнения состояния здесь неприменимы по определению.

Результаты отклонений псевдоэкспериментальных (расчетных) значений от значений, полученных по урав-

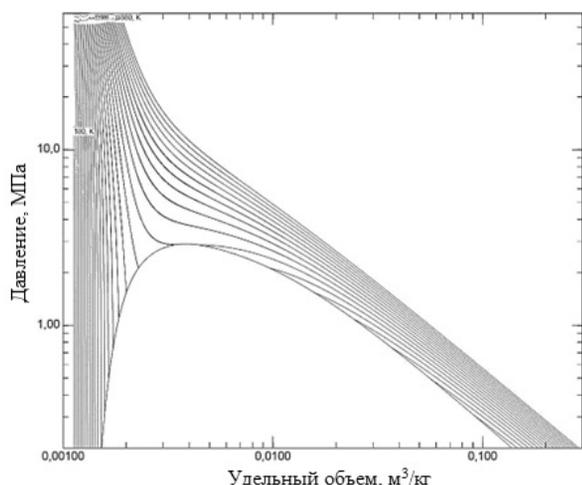


Рис. 1. Диаграмма давление — объем для пропициклогексана

Fig. 1. Pressure — volume diagram for propylcyclohexane

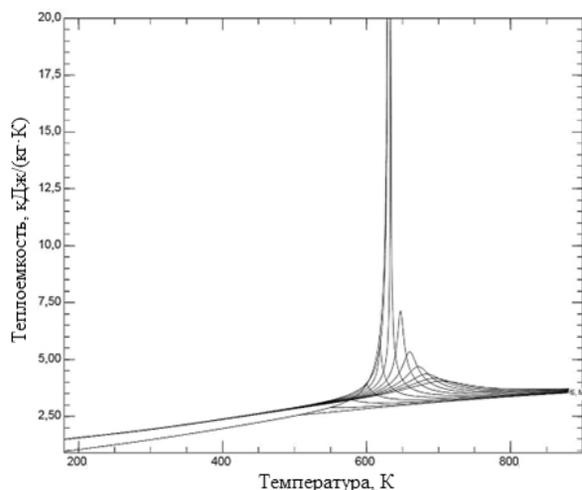


Рис. 2. Диаграмма теплоемкость — температура для пропициклогексана

Fig. 2. Isobaric heat capacity — temperature diagram for ethylcyclohexane

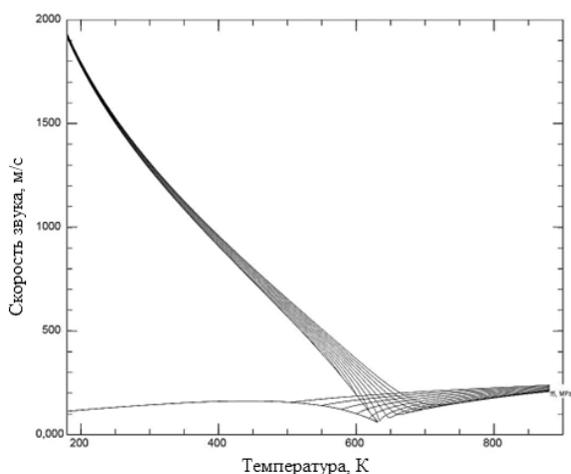


Рис. 3. Диаграмма скорость звука — температура для пропициклогексана

Fig. 3. Sound velocity — temperature chart for propylcyclohexane

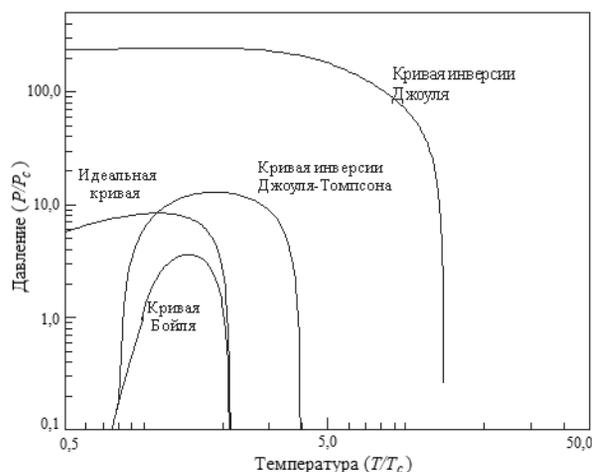


Рис. 4. Поведение идеальных кривых пропициклогексана

Fig. 4. Behavior of ideal curves of propylcyclohexane

нению состояния (1), подтверждают их термодинамическую согласованность. При этом расчетные данные использовались для сравнения и контроля, но не включались в обработку. Тем не менее, предлагаемое уравнение состояния пропициклогексана характеризуется численной устойчивостью и высокой точностью описания ТДС. Экстраполяционные возможности уравнения подтверждаются диаграммами состояния, представленными на рис. 1–4. На рис. 1 ход изотерм имеет физически правильный характер. Что особенно важно, взаимных пересечений изотерм при высоких давлениях не наблюдается. На рис. 2 наблюдаются характерные максимумы теплоёмкости на различных изобарах, достигая бесконечно большого значения на критической изобаре. На рис. 3 изобары при низких температурах имеют гладкий вид и не меняют наклон, а значение скорости звука в критической точке стремится к минимуму. Физически верное поведение «идеальных кривых» подтверждает хорошие экстраполяционные возможности нового уравнения состояния.

Физически верное описание поверхности состояния пропициклогексана уравнением состояния при дефиците экспериментальных данных обеспечивалось применением современного математического алгоритма многомерной оптимизации, основанного на методе случайного поиска [1]. Алгоритм имеет ряд преимуществ перед градиентными методами и активно применяется для решения такой комплексной задачи как построение уравнения состояния оптимизированной формы. При этом численная реализация достаточно проста и дает возможность эффективно решать задачи нелинейной условной оптимизации. Говоря об условной оптимизации, имеется в виду применение многочисленных ограничений в виде неравенств, благодаря которым и достигается правильный ход изолиний, в частности, на рис. 1–4. Таким образом, осуществляется поиск условного минимума целевой функции, при котором расчетная поверхность состояния максимально соответствует реальной поверхности.

### Заключение

Разработано фундаментальное уравнение состояния технически важного углеводорода — пропициклогексана. Уравнение описывает все термодинамические свойства исследуемого вещества с высокой точностью в диапазоне температур от тройной точки до 700 К при давлениях до 100 МПа. Для экспериментально неисследованных областей термодинамической поверхности пропициклогексана были получены расчетные значения ТДС на основе независимых методов, прошед-

ших тщательную апробацию. Массив экспериментальных данных, используемых для разработки и тестирования уравнения состояния, дополнялся расчетными данными. Результаты расчетов по уравнению состояния и сравнения с этими данными позволяет сделать вывод об их высокой точности и термодинамической согласованности. Таким образом, новое фундаментальное уравнение состояния пропициклогексана является численно устойчивым и обладает хорошим экстраполяционным поведением.

### Литература

1. Александров И. С. Моделирование термодинамических свойств и фазовых равновесий углеводородов и многокомпонентных углеводородных смесей на основе фундаментальных уравнений состояния: Автореф. дис. ... док. техн. наук. Казань, 2020. 53 с.
2. Frenkel M. NIST Standard Reference Database 103b: Thermo-Data Engine (TDE), Version 3.0 / M. Frenkel, R. D. Chirico, V. Diky, et. al. National Institute of Standards and Technology, Standard Reference Data Program: Gaithersburg, 2000.
3. Александров И. С., Григорьев Б. А., Герасимов А. А. Современный подход к разработке фундаментальных уравнений состояния технически важных рабочих веществ. В сб. науч. статей: Актуальные вопросы исследований пластовых систем месторождений углеводородов в 2-х ч. Ч. 1. М.: Газпром ВНИИГАЗ, 2011. С. 124–137.
4. Marsh K. N., Wilhoit R. C., Frenkel M., Yin D. TRC Thermodynamic Properties of Substances in the Ideal Gas State // Thermodynamics Research Center. 1994.
5. Жидкие углеводороды и нефтепродукты / Под ред. М. И. Шахпоронова, Л. П. Филиппова. Москва: Изд-во МГУ, 1989. 192 с.
6. Железный В. П., Никулина А. С., Григорьев Б. А. Новые структурно-аддитивные методы прогнозирования теплофизических свойств углеводородов // Научно-технический сборник. Вести газовой науки. 2013. № 1 (12). С. 54–62.
7. Lee B. I., Kesler M. G. A generalized thermodynamic correlation based on three-parameter corresponding states // American Institute of Chemical Engineers Journal. 1975. V. 21, No. 3. pp. 510–527.
8. Zia T., Thodos G. Reduced Vapor Pressure Equation for Hydrocarbons // The Chemical Engineering Journal. 1978. V. 16. pp. 41–49.
9. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей: Справочное пособие. Ленинград: Химия, 1982. 592 с.
10. Герасимов А. А., Григорьев Б. А. Обобщенное кроссоверное уравнение состояния в широкой окрестности критической точки // Теплофизика высоких температур. 1993. Т. 31, № 2. С. 25.
11. Герасимов А. А. Новое обобщенное кроссоверное уравнение состояния в широкой окрестности критической точки // Известия КГТУ. 2003. № 3. С. 30–37.
12. Laesecke A., Outcalt S. L., Brumback K. J. Density and speed of sound measurements of methyl- and propylcyclohexane // Energy Fuels. 2008. Vol. 22. pp. 2629–2636.
13. Willingham C. B., Taylor W. J., Pignocco J. M., Rossini F. D. Vapor pressures and boiling points of some paraffin, alkylcyclopentane, alkylcyclohexane, and alkylbenzene hydrocarbons // Journal of Research of the National Bureau of Standards. 1945. Vol. 35. pp. 219–244.

### References

1. Alexandrov I. S. Modeling of thermodynamic properties and phase equilibria of hydrocarbons and multicomponent hydrocarbon mixtures based on fundamental equations of state: D. Sc. theses. Kazan, 2020. 53 p.
2. Frenkel M. NIST Standard Reference Database 103b: Thermo-Data Engine (TDE), Version 3.0 / M. Frenkel, R. D. Chirico, V. Diky, et. al. National Institute of Standards and Technology, Standard Reference Data Program: Gaithersburg, 2000.
3. Aleksandrov I. S., Gerasimov A. A., Grigoriev B. A. A modern approach to the development of fundamental equations of state of technically important working substances. In the collection of scientific articles: Topical issues of research of reservoir systems of hydrocarbon deposits in 2 parts. Part 1. Moscow: Gazprom VNIIGAZ, 2011. pp. 124–137. (in Russian)
4. Marsh K. N., Wilhoit R. C., Frenkel M., Yin D. TRC Thermodynamic Properties of Substances in the Ideal Gas State. *Thermodynamics Research Center*. 1994.
5. Liquid hydrocarbons and oil products / Ed. M. I. Shakhporonova, L. P. Filippov. Moscow: Publishing House of Moscow State University, 1989. 192 p. (in Russian)
6. Zhelezny V. P., Nikulina A. S., Grigoriev B. A. New structural-additive methods for predicting the thermophysical properties of hydrocarbons. Scientific and technical collection. News of gas science. 2013. No. 1 (12). pp. 54–62. (in Russian)
7. Lee B. I., Kesler M. G. A generalized thermodynamic correlation based on three-parameter corresponding states. *American Institute of Chemical Engineers Journal*. 1975. V. 21, No. 3. pp. 510–527.
8. Zia T., Thodos G. Reduced Vapor Pressure Equation for Hydrocarbons. *The Chemical Engineering Journal*. 1978. V. 16. pp. 41–49.
9. Reed R., Prausnitz J., Sherwood T. Properties of gases and liquids: a reference guide. Leningrad: Chemistry, 1982. 592 p. (in Russian)
10. Gerasimov A. A., Grigoriev B. A. Generalized crossover equation of state in a wide vicinity of the critical point. *Thermophysics of High Temperatures*. 1993. V. 31, No. 2. p. 25. (in Russian)
11. Gerasimov A. A. New generalized crossover equation of state in a wide neighborhood of the critical point. *Izvestiya KSTU*. 2003. No. 3. pp. 30–37. (in Russian)
12. Laesecke A., Outcalt S. L., Brumback K. J. Density and speed of sound measurements of methyl- and propylcyclohexane. *Energy Fuels*. 2008. Vol. 22. pp. 2629–2636.
13. Willingham C. B., Taylor W. J., Pignocco J. M., Rossini F. D. Vapor pressures and boiling points of some paraffin, alkylcyclopentane, alkylcyclohexane, and alkylbenzene hydrocarbons. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*. 1945. Vol. 35. pp. 219–244.

14. Forziati A. F., Norris W. R., Rossini F. D. Vapor pressures and boiling points of sixty API-NBS hydrocarbons // *Journal of Research of the National Bureau of Standards*. 1949. Vol. 43. Pp. 555–563.
15. Mokbel I., Rauzy E., Loiseleur H., Berro C., Jose J. Vapor pressures of 12 alkylcyclohexanes, cyclopentane, butylcyclopentane and trans-decahydronaphthalene down to 0.5 Pa. Experimental results, correlation and prediction by an equation of state // *Fluid Phase Equilibria*. 1995. Vol. 108. pp. 103–120.
16. Prak D. J. L., Mungan A. L., Cowart J. S., Trulove P. C. Densities, Viscosities, Speeds of Sound, Bulk Moduli, Surface Tensions, and Flash Points of Binary Mixtures of Ethylcyclohexane or Methylcyclohexane with n-Dodecane or n-Hexadecane at 0.1 MPa // *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2018. Vol. 63. pp. 1642–1656.
17. Garrett A. B. Scientific report. American Petroleum Institute Research Project 45. 1944. Ohio State University.
18. Finke H. L., Messerly J. F., Todd S. S. Thermodynamic Properties of n-Propyl-, n-Butyl-, and n-Decyl-Substituted Cyclohexane from 10 to 370 K // *Journal of Physical Chemistry*. 1965. Vol. 69. pp. 2094–2100.
14. Forziati A. F., Norris W. R., Rossini F. D. Vapor pressures and boiling points of sixty API-NBS hydrocarbons. *Journal of Research of the National Bureau of Standards*. 1949. Vol. 43. pp. 555–563.
15. Mokbel I., Rauzy E., Loiseleur H., Berro C., Jose J. Vapor pressures of 12 alkylcyclohexanes, cyclopentane, butylcyclopentane and trans-decahydronaphthalene down to 0.5 Pa. Experimental results, correlation and prediction by an equation of state. *Fluid Phase Equilibria*. 1995. Vol. 108. pp. 103–120.
16. Prak D. J. L., Mungan A. L., Cowart J. S., Trulove P. C. Densities, Viscosities, Speeds of Sound, Bulk Moduli, Surface Tensions, and Flash Points of Binary Mixtures of Ethylcyclohexane or Methylcyclohexane with n-Dodecane or n-Hexadecane at 0.1 MPa. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2018. Vol. 63. pp. 1642–1656.
17. Garrett A. B. Scientific report. American Petroleum Institute Research Project 45. 1944. Ohio State University.
18. Finke H. L., Messerly J. F., Todd S. S. Thermodynamic Properties of n-Propyl-, n-Butyl-, and n-Decyl-Substituted Cyclohexane from 10 to 370 K. *Journal of Physical Chemistry*. 1965. Vol. 69. pp. 2094–2100.

### Сведения об авторах

#### Беркова Елена Анатольевна

Старший преподаватель кафедры энергетики Калининградского государственного технического университета, 236022, Калининград, Советский пр-т, 1, elena.berkova@klgtu.ru, ORCID ID: 000-0003-2990-9800

#### Александров Игорь Станиславович

Д. т. н., доцент; директор института морских технологий, энергетики и строительства Калининградского государственного технического университета, 236022, Калининград, Советский пр-т, 1, igor.aleksandrov@klgtu.ru, ORCID ID: 0000-0002-6486-7389

#### Герасимов Анатолий Алексеевич

Д. т. н., профессор; профессор кафедры строительства Калининградского государственного технического университета, 236022, Калининград, Советский пр-т, 1, anatoliy.gerasimov@klgtu.ru, ORCID ID: 0000-0002-1993-5207

#### Григорьев Борис Афанасьевич

Д. т. н., член-корреспондент РАН, профессор, заведующий кафедрой (базовой) исследования нефтегазовых пластовых систем (на базе ООО «Газпром ВНИИГАЗ») РГУ нефти и газа (НИУ) имени И. М. Губкина, 119991, Москва, Ленинский пр-т, 65, кор. 1, B\_Grigoriev@vniigaz.gazprom.ru, ORCID ID: 0000-0002-8691-6962

### Information about authors

#### Berkova Elena A.

Senior Lecturer of Department of Energy of Kaliningrad State Technical University, 236022, Kaliningrad, Sovetsky pr-t, 1, elena.berkova@klgtu.ru, ORCID ID: 000-0003-2990-9800

#### Aleksandrov Igor S.

D. Sc., Associate professor, Director of the Institute of Marine Technologies, Energy and Construction of Kaliningrad State Technical University, 236022, Kaliningrad, Sovetsky pr-t, 1, igor.aleksandrov@klgtu.ru, ORCID ID: 0000-0002-6486-7389

#### Gerasimov Anatoly A.

D. Sc., Professor, Professor of the Department of Construction of Kaliningrad State Technical University, 236022, Kaliningrad, Sovetsky pr-t, 1, anatoliy.gerasimov@klgtu.ru, ORCID ID: 0000-0002-1993-5207

#### Grigoriev Boris A.

D. Sc., corresponding member of the Russian Academy of Sciences, Professor, Head of the Department of (Basic) Research of Oil and Gas Reservoir Systems (on the basis of Gazprom VNIIGAZ LLC) of National University of Oil and Gas «Gubkin University», 119991, Moscow, Leninsky pr-t, 65, bld. 1, B\_Grigoriev@vniigaz.gazprom.ru, ORCID ID: 0000-0002-8691-6962



Статья доступна по лицензии  
Creative Commons «Attribution-NonCommercial»