

УДК 536.71

## Фундаментальное уравнение состояния n-октадекана

Д-р техн. наук И. С. АЛЕКСАНДРОВ<sup>\*</sup>,

д-р техн. наук А. А. ГЕРАСИМОВ<sup>1</sup>, Ю. А. КРЕЙЗА<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) n-октадекана в различных областях параметров состояния. Анализировались данные о термодинамических свойствах отечественных и зарубежных авторов, полученные как в прошлом веке, так и в последние годы. В результате критического анализа из них отобраны наиболее представительные и надежные. Проведенный анализ показал проблему, связанную с недостаточной экспериментальной исследованностью поверхности состояния n-октадекана, в частности, в сверхкритической и критической областях. С целью повышения численной устойчивости и повышения прогнозных возможностей разрабатываемого уравнения состояния авторами принято решение о включении расчетных значений ТДС в массив обрабатываемых экспериментальных данных. Расчетные данные были получены различными апробированными методиками в рамках теории термодинамического подобия и восполняли дефицит данных в неисследованных областях параметров состояния. Полученный гибридный массив данных составил основу для разработки фундаментального уравнения состояния (ФУС) n-октадекана. Для разработки ФУС применялся современный эвристический алгоритм, реализующий метод случайного поиска. Полученное уравнение надежно описывает все ТДС n-октадекана в диапазоне температур от тройной точки до 700 К при давлениях до 100 МПа. Уравнение состояния выражено в терминах одного из термодинамических потенциалов — свободной энергии Гельмгольца. Конфигурационная часть, описывающая свойства реального флюида, содержит 15 членов, из которых пять полиномиальных, пять экспоненциальных и пять термов Гаусса для описания свойств в широкой окрестности критической точки. Новое уравнение состояния удовлетворяет классическим условиям критической точки и физически верно описывает поведение производных термодинамического потенциала. Средние относительные отклонения расчетных значений ТДС по ФУС от экспериментальных данных имеют следующие значения: давление насыщенных паров —  $\pm 0,5\%$ , плотность насыщенной жидкости —  $\pm 0,3\%$ , изобарная теплоемкость —  $\pm 1,5\%$ , скорость звука в жидкой фазе —  $\pm 0,4\%$ , плотности жидкой фазы —  $\pm 0,4\%$ , плотности газовой фазы —  $\pm 0,9\%$ .*

**Ключевые слова:** n-октадекан, фундаментальное уравнение состояния, термодинамические свойства, плотность, теплоемкость.

### Информация о статье:

Поступила в редакцию 18.05.2025, одобрена после рецензирования 15.07.2025, принята к печати 22.07.2025

DOI: 10.17586/1606-4313-2025-24-3-90-97

Язык статьи — русский

### Для цитирования:

Александров И. С., Герасимов А. А., Крейза Ю. А., Григорьев Б. А. Фундаментальное уравнение состояния n-октадекана. // Вестник Международной академии холода. 2025. № 3. С. 90–97. DOI: 10.17586/1606-4313-2025-24-3-90-97

## Fundamental equation of state for n-octadecane

D. Sc. I. S. ALEKSANDROV<sup>\*</sup>, D. Sc. A. A. GERASIMOV<sup>1</sup>,

I. A. KREIZA<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 evaluation of the completeness of the experimental study on the thermodynamic properties (TDP) of n-octadecane in various ranges of state parameters has been carried out. Data on the thermodynamic properties of domestic and foreign authors, obtained both in the last century and in recent years, were analyzed. As a result of a critical analysis, the most representative and reliable ones were selected from them. The analysis conducted revealed a problem associated with insufficient experimental study of the state surface of n-octadecane, in particular, in the supercritical and critical regions. In order to increase the numerical stability and improve the predictive capabilities of the developed equation of state,*

the authors decided to include the calculated TDP values in the array of processed experimental data. The calculated data were obtained by various proven methods within the theory of thermodynamic similarity and compensated for the data deficit in unexplored areas of state parameters. The resulting hybrid data array formed the basis for developing the fundamental equation of state (FES) of n-octadecane. To develop the FES, a modern heuristic algorithm was used that implements the random search method. The resulting equation reliably describes all TDP of n-octadecane in the temperature range from the triple point to 700 K at pressures up to 100 MPa. The equation of state is expressed in terms of one of the thermodynamic potentials — the Helmholtz free energy. The configuration part, describing the properties of a real fluid, contains 15 terms, of which five are polynomial, five are exponential, and five are Gauss terms for describing the properties in a wide vicinity of the critical point. The new equation of state satisfies the classical conditions of the critical point and physically correctly describes the behavior of the derivatives of the thermodynamic potential. The average absolute deviations (AAD) of the calculated values of TDP according to the FES from experimental data have the following values: saturation vapor pressure —  $\pm 3.545\%$ , density of the saturated liquid —  $\pm 1.056\%$ , isobaric heat capacity of the liquid phase at the saturation line —  $\pm 1.315\%$ ; sound speed in liquid phase —  $\pm 0.4\%$ , liquid phase density —  $\pm 0.4\%$ , gas phase density —  $\pm 0.9\%$ .

**Keywords:** n-octadecane, fundamental equation of state, thermodynamic properties, density, heat capacity.

**Article info:**

Received 18/05/2025, approved after reviewing 15/07/2025, accepted 22/07/2025

DOI: 10.17586/1606-4313-2025-24-3-90-97

Article in Russian

**For citation:**

Aleksandrov I. S., Gerasimov A. A., Kreiza I. A., Grigoriev B. A. Fundamental equation of state for n-octadecane. *Journal of International Academy of Refrigeration*. 2025. No 3. p. 90-97. DOI: 10.17586/1606-4313-2025-24-3-90-97

**Введение**

Уровень и эффективность фундаментальных и прикладных исследований, качество процессов и выпускаемой промышленностью продукции в большей степени определяется достоверностью данных, характеризующих свойства наиболее важных для науки и промышленности веществ. Углеводороды различного строения являются промышленно важными веществами. Они являются важнейшим сырьем для нефтехимической, пищевой и микробиологической промышленности, для производства высокооктановых топлив.

В качестве объекта исследования в данной работе выбран представитель нормальных алканов — н-октадекан. Активное использование нормальных н-алканов в различных отраслях промышленности диктует высокие требования к качеству теплофизической информации, необходимой на всех стадиях технологических процессов с участием данных веществ и их смесей. Кроме этого, обработка и обобщение данных по свойствам веществ данного гомологического ряда представляет и чисто научный интерес.

Учитывая дороговизну и трудоемкость эксперимента, и широкую номенклатуру углеводородов, необходимо развитие надежных методов расчета ТДС промышленно важных веществ. Решением этой задачи является получение единых для жидкой и газовой фаз уравнений состояния, опирающихся на массив надежных согласованных разнородных данных. В данной работе такая задача решена применительно к нормальному октадекану.

**Уравнение состояния**

Получение согласованных и надежных данных о термодинамических свойствах технически важных веществ должно иметь строгое теоретическое обоснование и для этой цели применимы единые уравнения состояния, описывающие ТДС вещества в газовой, жидкой фазах и на линиях фазовых равновесий. В отече-

ственной и зарубежной практике активно применяются уравнения, выраженные в форме зависимости термодинамического потенциала — свободной энергии Гельмгольца  $\alpha(\rho, T)$  от собственных переменных — плотности  $\rho$  и температуры  $T$ . Безразмерный вид этой зависимости  $\alpha(\delta, \tau)$  представлен в виде суммы идеально-газовой части  $\alpha^0(\delta, \tau)$  и избыточной части  $\alpha^r(\delta, \tau)$  и описывается уравнением:

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

Конечная форма для избыточной части свободной энергии получена в данной работе в ходе обработки массива разнородных данных об исследуемом углеводороде и содержит пять полиномиальных, пять экспоненциальных и пять гауссовых члена и имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \alpha^r(\delta, \tau) &= \alpha^r_{Pol} + \alpha^r_{Exp} + \alpha^r_{Gaus} = \\ &= \sum_{i=1}^5 n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} + \sum_{i=6}^{10} n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} \exp(-\delta^{t_i}) + \\ &+ \sum_{i=11}^{15} n_i \delta^{d_i} \tau^{t_i} \exp(-\eta_i (\delta - \varepsilon_i)^2 - \beta_i (\tau - \gamma_i)^2) \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\delta = \rho/\rho_c$ ,  $\tau = T_c/T$  — приведенные плотность и температура, соответственно;  $\rho_c$ ,  $T_c$  — параметры приведения. Для н-октадекана это критические параметры:  $\rho_c = 0,9120$  кмоль/м<sup>3</sup> и  $T_c = 748,20$  К.

Определение коэффициентов и степеней, а также оптимизация формы уравнения (2) производилось по методу [1, 2]. Критические свойства н-октадекана принимались по данным [3] с небольшой коррекцией в процессе оптимизационной процедуры в пределах допусков, указанных в [3]. Коэффициенты и показатели степени при температуре и плотности, определенные в процессе оптимизации формы ФУС (2), представлены в табл. 1.

Безразмерная идеально-газовая часть свободной энергии Гельмгольца определяется по соотношению

Таблица 1

## Показатели степени и коэффициенты ФУС (2) n-октадекана

Table 1

## Exponents and coefficients for FES (2) of n-octadecane

$i$	$n_i$	$t_i$	$d_i$	$l_i$	$\eta_i$	$\beta_i$	$\gamma_i$	$\varepsilon_i$
1	0,0422658439	1,32317	4	0				
2	2,3717826065	0,23722	1	0				
3	-4,3094512553	0,99191	1	0				
4	-0,4080476525	0,05791	2	0				
5	0,4016749265	0,41896	3	0				
6	-2,6908447902	1,89796	1	2				
7	-0,9194547071	0,63938	3	2				
8	0,1456710377	0,03179	2	1				
9	-1,4158268442	2,14588	2	2				
10	-0,0540676839	1,24215	7	1				
11	4,5592092108	1,20206	1	2	-0,64117	-0,51826	1,33615	0,75091
12	-0,358290129	2,57668	1	2	-0,99706	-0,95445	1,15892	1,61797
13	-0,8289388205	1,72406	3	2	-1,02551	-0,22760	1,39782	0,47354
14	-0,2554005905	0,65940	2	2	-1,18185	-0,33725	1,32838	1,30166
15	-0,7494980321	3,41325	2	2	-0,93721	-2,01728	0,75978	0,45384

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

где  $R=8,314472$  Дж/(моль·К);  $\delta_0 = \rho_0 / \rho_c$ ;  $\tau_0 = T_c / T_0$ ;  $T_0, p_0$  — вспомогательная опорная точка ( $T_0=310$  К;  $p_0=101325$  Па);  $\rho_0$  — 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 расчета функции  $\alpha^0$  необходимы данные об изобарной теплоемкости в состоянии идеального газа  $c_p^0$ . Было принято уравнение, опубликованное в статье Ружечки и Майера [4], которое надежно описывает имеющиеся данные о  $c_p^0$  в широком диапазоне температур.

$$c_p^0 = m_0 + \sum_{k=1}^2 m_k \left( \frac{\theta_k}{T} \right)^2 \frac{\exp(\theta_k / T)}{[\exp(\theta_k / T) - 1]^2}, \text{ кДж/(кг·К)}. \quad (4)$$

Значения коэффициентов уравнения (4) для n-октадекана представлены в табл. 2.

Таблица 2

## Значения коэффициентов в уравнении (4)

Table 2

## Coefficient values in equation (4)

$m_0$	287,36648	$\theta_0$	—
$m_1$	306,88739	$\theta_1$	2823,3681
$m_2$	560,4830	$\theta_2$	1359,8298

Особенности поверхности состояния n-октадекана, связанные с высокими параметрами характеристических констант (нормальная точка кипения, критические параметры), обуславливают проведение экспериментальных исследований и, как следствие, наличие информации о ТДС в жидкой фазе. Поэтому нами было принято решение дополнить массив экспериментальных данных

расчетными значениями ТДС. Массивы расчетных данных генерировались на основе прогнозных методов, прошедших неоднократную апробацию. Такой подход известен и позволяет обеспечить численную устойчивость и, как следствие, хорошую экстраполяцию ФУС за пределы экспериментально исследованных областей поверхности состояния n-октадекана.

## Анализ полученных результатов

В табл. 3 представлен перечень экспериментальных исследований по годам и авторам, диапазоны параметров и количество экспериментальных и расчетных точек, а также результаты сравнения этих данных с предлагаемым ФУС.

Расчетные данные о давлении насыщенных паров были получены по двум обобщенным методикам. Первая — это обобщенное уравнение Чмыхало [12], которое аттестовано ГСССД. Вторая — уравнению Леммона [13] (NIST, USA). В оптимизационную процедуру включались средние значения по двум методикам.

Учитывая то, что данные о плотности насыщенной жидкой фазы носят обрывочный характер и получены разными методами в узком температурном диапазоне, нами была произведена их обработка интерполяционными уравнениями до 523 К ( $\pm 0,043\%$ ) для получения сглаженных данных пригодных для обработки. Для неисследованной экспериментально области применялись расчетные данные по двум моделям — уравнению Железного [21] и Филиппова [22].

Массив данных о плотности жидкой фазы пополнялся расчетными значениями, полученными по обобщенному уравнению состояния [29] для n-алканов. Диапазон расчетов ограничивался условием  $\rho/\rho_c > 2$ . В критической области, ограниченной условием при  $|\rho/\rho_c - 1| < 0,5$ , использовались авторские кроссоверные уравнения [30, 31]. И для газовой фазы плотность рассчитывалась по обобщенному вириальному уравнению состояния [32] и обобщенному

Таблица 3

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

Table 3

Comparison of thermodynamic properties data for n-octadecane with the values calculated according to FES (1)–(3)

Год	Первый автор, источник	Точки	Интервал по температуре и давлению		Среднее относительное отклонение %		
			T, К	p, МПа	жид.	газ	крит.
<b>Давление насыщенных паров</b>							
1986	Аллеманд [5]	11	335–440			3,025	
1882	Крафт [6]	6	447–590			2,646	
1979	Макник [7]	10	324–361			3,545	
1994	Морган [8]	17	413–588			0,604	
1955	Майерс [9]	23	375–568			2,748	
1996	Виторн [10]	16	333–467			2,082	
1968	Анонимус [11]	5	389–446			2,504	
	Расчет [12],[13]	50	292–722			0,499	
<b>Плотность насыщенной жидкой фазы</b>							
1958	Катлер [14]	5	333–408		0,313		
1947	Шисслер [15]	3	310–372		0,155		
1970	Финденег [16]	6	301–333		0,095		
1882	Крафт [6]	4	303–372		0,123		
1941	Калингаерт [17]	3	313–373		0,234		
1950	Букланд [18]	6	333–553		1,056		
1955	Катлер [19]	5	311–408		0,277		
1992	Грааф [20]	10	303–522		0,531		
	Расчет [21],[22]	50	500–720		0,294		
<b>P, V, T-данные</b>							
2004	Кадвелл [23]	49	323–473	0,1–92,2	0,469		
2000	Вурфлингер [24]	51	303–343	0,1–190	0,170		
1955	Катлер [14]	53	333–408	0,1–551,3	0,615		
2011	Ву [25]	31	323–522	7–257	0,717		
2012	Каризнови [26]	24	323–448	1,9–9,5	0,289		
2013	Каризнови [27]	10	373	1,01–10	0,450		
2013	Норози [28]	11	323	0,1–10	0,222		
	Расчет [29]	324	310–730	0,1–100	0,954		
	Расчет [30, 31]	58	750–790	1,35–3,0			9,032
	Расчет [32],[33]	21	740–780	0,3–1,35		0,883	
<b>Изобарная теплоемкость C<sub>p</sub></b>							
1967	Мессерли [34]	11	304–379	p <sub>v</sub>	0,978		
2000	Ванмителбург [35]	38	307–401	0,101	0,562		
1996	Дурупт [36]	6	373–473	0,101	1,315		
	Расчет [37]	44	310–710	p <sub>v</sub>	0,216		
	Расчет [30],[31]	58	750–790	1,4–3,0			8,44
<b>Скорость звука</b>							
2000	Плантиер [38]	8	313–383	p <sub>v</sub>	0,277		
2000	Дутор [39]	141	313–383	0,1–149,5	0,547		

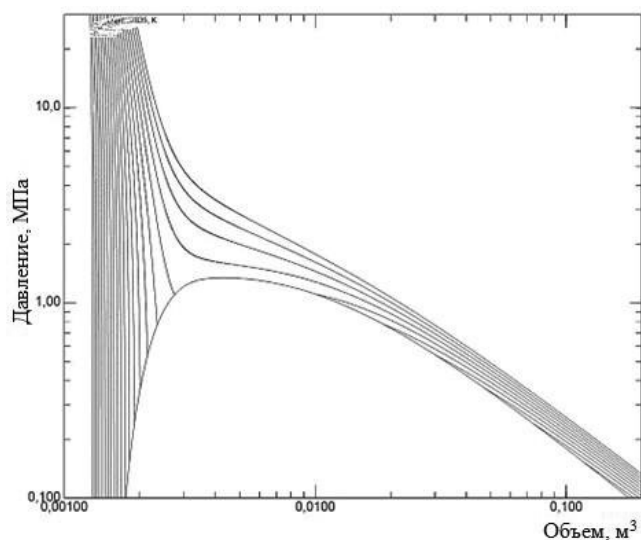


Рис. 1. Диаграмма давление — объем для *n*-октадекана

Fig. 1. Pressure — volume diagram for *n*-octadecane

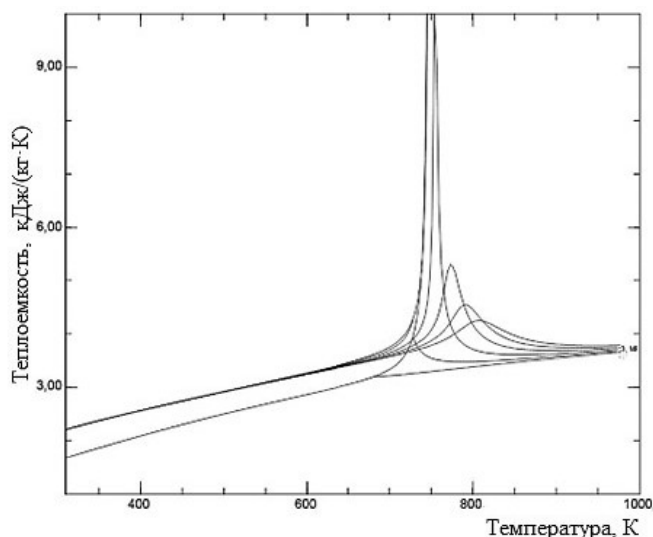


Рис. 2. Диаграмма теплоемкость — температура для *n*-октадекана

Fig. 2. Isobaric heat capacity-temperature diagram for *n*-octadecane

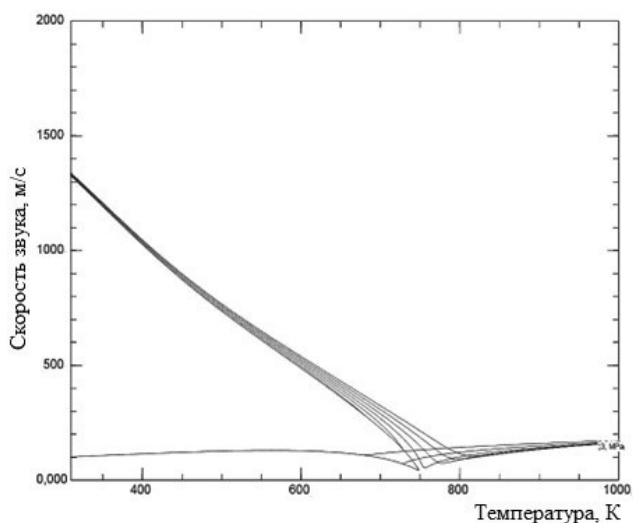


Рис. 3. Диаграмма скорость звука — температура для *n*-октадекана

Fig. 3. Sound velocity-temperature chart for *n*-octadecane

уравнению Ли и Кеслера [33] при  $\rho/\rho_c < 0,5$ . Как и в случае с данными на линии насыщения, при расчете по двум моделям в обработку включались средние значения.

Обобщенное уравнение для нормальных алканов [37] применялось нами для получения массива расчетных значений об изобарной теплоемкости в состоянии насыщенной жидкости. Методика [5] применялась для получения расчетных данных о плотности насыщенной газовой фазы. Изобарная теплоемкость в критической области получена по уравнениям состояния [30, 31].

Диаграммы состояния, рассчитанные по предлагаемому уравнению состояния *n*-октадекана показаны на рис. 1–3. Как видно из диаграмм правильный ход изолиний обеспечивается новым ФУС далеко за пределы экспериментально исследованных областей, что обеспечивает хорошие экстраполяционные возможности, которые важны, в том числе, для расчета свойств смесей.

Анализируя табл. 3, видно, что ФУС разрабатывалось на достаточно ограниченном массиве. Большая часть данных сравнивалась с уравнением, но не в минимизируемый функционал не включалась. Для давления паров с высокой точностью описываются только данные Моргана [8]. Причиной служат температурные диапазоны, в которых проводились экспериментальные исследования. Как правило, это температуры ниже нормальной точки кипения, при которых абсолютные значения давлений крайне малы. Однако расчетные данные [12, 13] описываются ФУС с высокой точностью с отклонением 0,499%. В итоге погрешность описания давления насыщенных паров составляет 0,5%.

Экспериментальные исследования плотности в однофазной области, представленные в табл. 3, охватывают область жидких состояний вещества. В разработку уравнения состояния включались расчетные данные [29] и часть экспериментальных данных [14, 23, 24, 25]. Важно отметить, что не вошедшие в опорный массив экспериментальные данные хорошо описываются уравнением состояния. Итоговое численное значение точности описания уравнением состояния плотности в жидком состоянии и на линии насыщения можно оценить в 0,4%. Сравнение с расчетными значениями [32, 33] плотности *n*-октадекана в паровой фазе, линию насыщения, позволяет оценить погрешность ФУС в описании данной области параметров состояния плотности в 1,0%.

Исходя из отклонений табл. 3 для изобарной теплоемкости видно, что ФУС описывает экспериментальные данные [37] с отклонениями близкими к погрешности эксперимента. Численную оценку погрешности ФУС в описании теплоемкости можно определить в 1,5%. Данные о скорости звука в жидкой фазе немногочисленны и передаются уравнением со средним отклонением в 0,4%.

Поведение ФУС в широкой окрестности критической точки определяется специальными членами (термами Гаусса) в уравнении (2). Константы  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\eta$ ,  $\varepsilon$  в этих членах оптимизировались исходя из имеющихся экспериментальных данных. Массив расчетных  $P$ ,  $V$ ,  $T$  и  $C_p$ ,  $P$ ,  $T$ -данных [30, 31] использовался только для сравнения и оценки поведения ФУС в критической области. Характерно, что характер и величина отклонений в описании расчетных данных сходные со значениями, которые могли быть получены для экспериментальных данных в критической области.

### Заключение

Выполнено обобщение и анализ экспериментальных исследований по термическим, калорическим и акустическим свойствам технически важного нормального алкана — н-октадекана. На основе проведенного анализа сформированы массивы согласованных разнородных данных, которые составили базу для разработки нового фундаментального уравнения состояния исследуемого вещества. Для оценки и контроля применимости уравнения состояния в экспериментально не исследованных областях параметров и повышения его численной устойчивости массивы экспериментальных данных дополнялись расчетными данными, полученными апробированными прогнозными методами.

На основе сформированного массива гибридных данных разработано уравнение состояния н-октадекана,

пригодное для расчета широкого набора свойств во всем диапазоне от тройной точки до начала термических превращений. Выполненное сравнение со всеми имеющимися экспериментальными и расчетными данными, говорит о высокой точности нового уравнения состояния. Численные значения отклонений близки к точности экспериментального определения соответствующих термодинамических свойств. Для оценки экстраполяционных возможностей нового уравнения выполнен расчет и построение различных диаграмм состояния. Анализ поверхности состояния, основанных на полученных диаграммах, позволяет сделать вывод о том, что ФУС н-октадекана физически верно передает ход всех изолиний в широкой области параметров состояния, включая экспериментально не исследованные области.

### Литература

1. Александров И. С. Моделирование термодинамических свойств и фазовых равновесий углеводородов и многокомпонентных углеводородных смесей на основе фундаментальных уравнений состояния: Автореф. дис. ... докт. техн. наук. Казань, 2020. 53 с.
2. Беркова Е. А., Александров И. С., Герасимов А. А., Григорьев Б. А. Фундаментальное уравнение состояния пропициклогексана // Вестник Международной академии холода. 2024. № 1. С. 85–91. DOI: 10.17586/1606-4313-2024-23-1-85-91
3. Ambrose D. Vapor-Liquid Critical Properties of Elements and Compounds. 2. Normal Alkanes/D. Ambrose, C. Tsonopoulos // *J. Chem. Eng. Data*. 1995. Vol. 40, no 3. P. 531–546.
4. Ruzicka K. Simultaneous Treatment of Vapor Pressures and Related Thermal data Between The Triple and Normal Boiling Temperatures for n-Alkanes C5 — C20/K. Ruzicka, V. Majer // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 1994. Vol. 23, no 1. P. 1–39.
5. Allemant N. Measurement of the vapor pressure of hydrocarbons C10 to C18 n-alkanes and n-alkylbenzenes in the range 3–1000 pascal./N. Allemant, J. Jose, J. C. Merlin // *Thermochimica Acta*. 1986. V. 105. P. 79–90.
6. Krafft F. On Nineteen Higher Normal Paraffins and a Simple Volume Law for Liquids that form Drops I. // *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* 1882. V. 15. P. 1687–711.
7. Macknick A. B. Vapor Pressures of High-Molecular-Weight Hydrocarbons / A. B. Macknick, J. M. Prausnitz // *J. Chem. Eng. Data*. 1979. Vol. 24, № 3. P. 175–178.
8. Morgan D. L. Direct Vapor Pressure Measurements of Ten n-Alkanes in the C (10) — C (28) Range/D. L. Morgan, R. Kobayashi // *Fluid Phase Equilib.* 1994. V. 97. P. 211–242.
9. Myers H. S. Measurement and Correlation of Vapor Pressure Data for High Boiling/H. S. Myers, M. R. Fenske // *Hydrocarbons. Ind. Eng. Chem.* 1955. V. 47, No. 8. P. 1652–1658.
10. Viton C. Vapor Pressure of Normal Alkanes from Decane to Icosane at Temperatures from 244 K to 469 K and Pressures from 0.4 Pa to 164 kPa, ELDDATA: The International Electronic/C. Viton, M. Chavret, E. Behar, J. Jose // *Journal of Physico-Chemical Data*. 1996. V. 2. P. 215–224.
11. Anonymous R. Properties of hydrocarbon of high molecular weight Am. Pet. Inst. Res. Proj. 42, 1968, Penn. State Univ.
12. Чмыhalo П. А. Методика расчетного определения давления насыщенного пара н-алканов (C1 — C100) и водорода на линии кипения. ДССДД 7–2005. Киев, 2005. 34 с.

### 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. (in Russian)
2. 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: 10.17586/1606-4313-2024-23-1-85-9 (in Russian)
3. Ambrose D. Vapor-Liquid Critical Properties of Elements and Compounds. 2. Normal Alkanes/D. Ambrose, C. Tsonopoulos. *J. Chem. Eng. Data*. 1995. Vol. 40, no 3. P. 531–546.
4. Ruzicka K. Simultaneous Treatment of Vapor Pressures and Related Thermal data Between The Triple and Normal Boiling Temperatures for n-Alkanes C5 — C20/K. Ruzicka, V. Majer. *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 1994. Vol. 23, no 1. P. 1–39.
5. Allemant N. Measurement of the vapor pressure of hydrocarbons C10 to C18 n-alkanes and n-alkylbenzenes in the range 3–1000 pascal./N. Allemant, J. Jose, J. C. Merlin. *Thermochimica Acta*. 1986. V. 105. P. 79–90.
6. Krafft F. On Nineteen Higher Normal Paraffins and a Simple Volume Law for Liquids that form Drops I. *Ber. Dtsch. Chem. Ges.* 1882. V. 15. P. 1687–711.
7. Macknick A. B. Vapor Pressures of High-Molecular-Weight Hydrocarbons / A. B. Macknick, J. M. Prausnitz. *J. Chem. Eng. Data*. 1979. Vol. 24, № 3. P. 175–178.
8. Morgan D. L. Direct Vapor Pressure Measurements of Ten n-Alkanes in the C (10) — C (28) Range/D. L. Morgan, R. Kobayashi. *Fluid Phase Equilib.* 1994. V. 97. P. 211–242.
9. Myers H. S. Measurement and Correlation of Vapor Pressure Data for High Boiling/H. S. Myers, M. R. Fenske // *Hydrocarbons. Ind. Eng. Chem.* 1955. V. 47, No. 8. P. 1652–1658.
10. Viton C. Vapor Pressure of Normal Alkanes from Decane to Icosane at Temperatures from 244 K to 469 K and Pressures from 0.4 Pa to 164 kPa, ELDDATA: The International Electronic/C. Viton, M. Chavret, E. Behar, J. Jose. *Journal of Physico-Chemical Data*. 1996. V. 2. P. 215–224.
11. Anonymous R. Properties of hydrocarbon of high molecular weight Am. Pet. Inst. Res. Proj. 42, 1968, Penn. State Univ.
12. Chmyhalo P. A. Methodology for computational determination of saturated vapor pressure of n-alkanes (C1 — C100) and hydrogen at the boiling line. DSSD 7–2005/P. A, Chmyhalo. Kiev. 2005. 34 p.

13. Lemmon E. W. Critical Properties and Vapor Pressure Equation for Alkanes  $C_nH_{2n+2}$ : Normal Alkanes With  $n \leq 36$  and isomers for  $n=4$  Through  $n=9$ /E. W. Lemmon, A. R. H. Goodwin // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 2000. Vol. 29, no 1. P. 1–39.
14. Cutler W. G. Study of the compressions of several high molecular weight hydrocarbons/W. G. Cutler, R. H. McMickle, W. Webb, R. W. Schlessler // *J. Chem. Phys.* 1958. V. 29, No. 4. P. 727–740.
15. Schiessler R. W. Twelfth Meeting. // *Am. Pet. Inst. Res. Proj.* 1947. June. Vol. 42.
16. Findenegg G. H. Density and coefficient of expansion of some liquid alkanes. Dichte und ausdehnungskoeffizient einiger flüssiger alkanes. // *Monatshefte für Chemie*. 1970. Vol. 101. P. 1081–1088.
17. Calingaert G. Homologous series of alkanes density and its temperature coefficient/G. Calingaert, H. A. Beatty, R. C. Kuder, G. W. Thomson // *Ind. Eng. Chem.* 1941. V. 33. P. 103.
18. Buckland Seyer W. F. Personal Commun. 1950. Dec. 21.
19. Cutler W. G. Ph. D. Thesis, Pennsylvania State University, University Park, PA, 1955.
20. Graaf G. H., Smit H. J., Stamhuis E. J. Gas-liquid solubilities of the methanol synthesis components in various solvents // *J. Chem. Eng. Data*. 1992. V. 37. P. 146.
21. Железный В. П. Новые структурно-аддитивные методы прогнозирования теплофизических свойств углеводородов/В. П. Железный, А. С. Никулина, Б. А. Григорьев // Научно-технический сборник. Вести газовой науки. 2013. № 1 (12). С. 54–62.
22. Филиппов Л. П. Методы расчета и прогнозирования свойств веществ. М.: Изд-во МГУ, 1988. 252 с.
23. The viscosity and density of n-dodecane and n-octadecane at pressures up to 200 MPa and temperatures up to 473 K/D. R. Caudwell [et al.] // *Int. J. Thermophys.* 2004. Vol. 25, no 5. P. 1339–1352.
24. Wurflinger A. Thermodynamic measurements on n-hexadecane ( $C_{16}H_{34}$ ) and n-heptadecane ( $C_{17}H_{36}$ ) at elevated pressures/A. Wurflinger, M. Sandmann, Naturforsch A. // *Phys. Sci.* 2000. V 55A. P. 533–538.
25. Wu Y. Experimental measurements and equation of state modeling of liquid densities for long-chain n-alkanes at pressures to 265 MPa and temperatures to 523 K/Y. Wu, B. Bamgbade, K. Liu, M. A. McHugh, H. Baled, R. M. Enick, W. Burgess, D. Tapriyal, B. D. Morreale // *Fluid Phase Equilib.* 2011. V. 311. P. 17–24.
26. Kariznovi M., Nourozieh H. Measurement and equation of state prediction of vapor — liquid equilibrium and physical properties for the system methane+n-octadecane. // *J. Fluid Phase Equilib.* 2012. V. 314. P. 102–106.
27. Kariznovi M., Nourozieh H. Experimental results and thermodynamic investigation of carbon dioxide solubility in heavy liquid hydrocarbons and corresponding phase properties. // *J. Fluid Phase Equilib.* 2013. V. 339. P. 105–111.
28. Nourozieh H., Bayestehparvin B., Kariznovi M., Abedi J. Equilibrium Properties of (Carbon Dioxide+n-Decane +n-Octadecane) Systems: Experiments and Thermodynamic Modeling. // *J. Chem. Eng. Data*. 2013. V. 58. P. 1236–1243.
29. Курумов Д. С. Термические свойства n-алканов и фракций Мангышлакской нефти в жидком и газообразном состоянии: Дис. ... докт. техн. наук. Грозный, 1991. 440 с.
30. Герасимов А. А. Обобщенное кроссоверное уравнение состояния в широкой окрестности критической точки/А. А. Герасимов, Б. А. Григорьев // *Теплофизика высоких температур*. 1993. Т. 31, № 2. С. 25–33.
13. Lemmon E. W. Critical Properties and Vapor Pressure Equation for Alkanes  $C_nH_{2n+2}$ : Normal Alkanes With  $n \leq 36$  and isomers for  $n=4$  Through  $n=9$ /E. W. Lemmon, A. R. H. Goodwin. *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 2000. Vol. 29, no 1. P. 1–39.
14. Cutler W. G. Study of the compressions of several high molecular weight hydrocarbons/W. G. Cutler, R. H. McMickle, W. Webb, R. W. Schlessler. *J. Chem. Phys.* 1958. V. 29, No. 4. P. 727–740.
15. Schiessler R. W. Twelfth Meeting. *Am. Pet. Inst. Res. Proj.* 1947. June. Vol. 42.
16. Findenegg G. H. Density and coefficient of expansion of some liquid alkanes. Dichte und ausdehnungskoeffizient einiger flüssiger alkanes. *Monatshefte für Chemie*. 1970. Vol. 101. P. 1081–1088.
17. Calingaert G. Homologous series of alkanes density and its temperature coefficient/G. Calingaert, H. A. Beatty, R. C. Kuder, G. W. Thomson. *Ind. Eng. Chem.* 1941. V. 33. P. 103.
18. Buckland Seyer W. F. Personal Commun. 1950. Dec. 21.
19. Cutler W. G. Ph. D. Thesis, Pennsylvania State University, University Park, PA, 1955.
20. Graaf G. H., Smit H. J., Stamhuis E. J. Gas-liquid solubilities of the methanol synthesis components in various solvents. *J. Chem. Eng. Data*. 1992. V. 37. P. 146.
21. Zhelezny V. P., Nikulina A. S., Grigoriev B. A. New structural-additive methods for predicting the thermophysical properties of hydrocarbons. *Scientific and technical collection. Vesti gazovoy nauki*. 2013. No. 1 (12). pp. 54–62. (in Russian)
22. Filippov L. P. Methods of calculation and predicting matter properties. Moscow, MSU publishing. 1988. 252 p. (in Russian)
23. The viscosity and density of n-dodecane and n-octadecane at pressures up to 200 MPa and temperatures up to 473 K/D. R. Caudwell [et al.]. *Int. J. Thermophys.* 2004. Vol. 25, no 5. P. 1339–1352.
24. Wurflinger A. Thermodynamic measurements on n-hexadecane ( $C_{16}H_{34}$ ) and n-heptadecane ( $C_{17}H_{36}$ ) at elevated pressures/A. Wurflinger, M. Sandmann, Naturforsch A. *Phys. Sci.* 2000. V 55A. P. 533–538.
25. Wu Y. Experimental measurements and equation of state modeling of liquid densities for long-chain n-alkanes at pressures to 265 MPa and temperatures to 523 K/Y. Wu, B. Bamgbade, K. Liu, M. A. McHugh, H. Baled, R. M. Enick, W. Burgess, D. Tapriyal, B. D. Morreale. *Fluid Phase Equilib.* 2011. V. 311. P. 17–24.
26. Kariznovi M., Nourozieh H. Measurement and equation of state prediction of vapor — liquid equilibrium and physical properties for the system methane+n-octadecane. *J. Fluid Phase Equilib.* 2012. V. 314. P. 102–106.
27. Kariznovi M., Nourozieh H. Experimental results and thermodynamic investigation of carbon dioxide solubility in heavy liquid hydrocarbons and corresponding phase properties. *J. Fluid Phase Equilib.* 2013. V. 339. P. 105–111.
28. Nourozieh H., Bayestehparvin B., Kariznovi M., Abedi J. Equilibrium Properties of (Carbon Dioxide+n-Decane +n-Octadecane) Systems: Experiments and Thermodynamic Modeling. *J. Chem. Eng. Data*. 2013. V. 58. P. 1236–1243.
29. Kurumov D. S. Thermal properties of n-alkanes and Mangyshlaks oil fractions at liquid and gaseous state: D. Sc. Dissertation. Grozny. 1991. 440 p. (in Russian)
30. 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. 25–33. (in Russian)

31. Герасимов, А. А. Новое обобщенное кроссоверное уравнение состояния в широкой окрестности критической точки/А. А. Герасимов // Известия КГТУ. 2003. № 3. С. 30–37.
32. Reid R. C. The properties of gases and liquids/Reid R. C., Prausnitz J. M., Sherwood T. K. New York: McGraw-Hill, 1977. 688 p.
33. Lee B. I. A generalized thermodynamic correlation based on three-parameter corresponding states/B. I. Lee, M. G. Kesler // American Institute of Chemical Engineers Journal. 1975. V. 21, No. 3. P. 510–527.
34. Messerly J. F. Low-Temperature Thermal Data for n-Pentane, n-Heptadecane and n-Octadecane. Revised Thermodynamic Functions for their n-Alkanes, C5 — C18/J. F. Messerly, G. B. Guthrie, S. S. Todd, H. L. Finke // J. Chem. Eng. Data. 1967. V. 12. P. 338–46.
35. van Miltenburg J. C. Fitting the heat capacity of liquid n-alkanes: New measurements of n-heptadecane and n-octadecane. // Thermochim. Acta, 2000. V. 343. P. 57–62.
36. Durupt N., Aoulmi A., Bouroukba M., Rogalski M. Heat capacities of liquid long-chain alkanes. // Thermochim. Acta. 1996. V. 274. P. 73–80.
37. Герасимов А. А. Новые обобщенные уравнения для расчета изобарной теплоемкости углеводородов на линии насыщения/А. А. Герасимов, Б. А. Григорьев, М. А. Кузнецов // Теплофизика высоких температур. 2001. Т. 39, № 3. С. 426–433.
38. Plantier F. Isentropic thermophysical properties of pure n-paraffins as a function of temperature and chain length/F. Plantier, J. L. Daridon, B. Lagourette, C. Boned // High Temp. High Pressures. 2000. V. 32. P. 305–310.
39. Dutour S., Daridon J. L., Lagourette B. Pressure and temperature dependence of the speed of sound and related properties in normal octadecane and nonadecane. // Int. J. Thermophys. 2000. V. 21. P. 173.
31. 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)
32. Reid R. C. The properties of gases and liquids/Reid R. C., Prausnitz J. M., Sherwood T. K. New York: McGraw-Hill, 1977. 688 p.
33. Lee B. I. A generalized thermodynamic correlation based on three-parameter corresponding states/B. I. Lee, M. G. Kesler. *American Institute of Chemical Engineers Journal*. 1975. V. 21, No. 3. P. 510–527
34. Messerly J. F. Low-Temperature Thermal Data for n-Pentane, n-Heptadecane and n-Octadecane. Revised Thermodynamic Functions for their n-Alkanes, C5 — C18/J. F. Messerly, G. B. Guthrie, S. S. Todd, H. L. Finke. *J. Chem. Eng. Data*. 1967. V. 12. P. 338–46.
35. van Miltenburg J. C. Fitting the heat capacity of liquid n-alkanes: New measurements of n-heptadecane and n-octadecane. *Thermochim. Acta*, 2000. V. 343. P. 57–62.
36. Durupt N., Aoulmi A., Bouroukba M., Rogalski M. Heat capacities of liquid long-chain alkanes. *Thermochim. Acta*. 1996. V. 274. P. 73–80.
37. Gerasimov A. A. New generalized equation for calculation of isobaric heat capacity at saturation line // A. A. Gerasimov, B. A. Grigoriev, M. A. Kuznetsov. *High temperature thermophys.* 2001. V. 39. No. 3. P. 426–433. (in Russian)
38. Plantier F. Isentropic thermophysical properties of pure n-paraffins as a function of temperature and chain length/F. Plantier, J. L. Daridon, B. Lagourette, C. Boned. *High Temp. High Pressures*. 2000. V. 32. P. 305–310.
39. Dutour S., Daridon J. L., Lagourette B. Pressure and temperature dependence of the speed of sound and related properties in normal octadecane and nonadecane. *Int. J. Thermophys.* 2000. V. 21. P. 173.

### Сведения об авторах

#### Александров Игорь Станиславович

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

#### Герасимов Анатолий Алексеевич

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

#### Крейза Юлия Александровна

Аспирант Калининградского государственного технического университета, 236022, Калининград, Советский пр., 1, Yuliya.krejza@klgtu.ru, ORCID: 0009-0007-8039-2743

#### 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., 65, кор. 1, B\_Grigoriev@vniigaz.gazprom.ru, ORCID: 0000-0002-8691-6962

### Information about authors

#### Alexandrov Igor S.

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

#### Gerasimov Anatoly A.

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

#### Krejza Iuliia A.

Graduate student of Kaliningrad State Technical University, Russia, 236022, Kaliningrad, Sovetsky pr., 1, Yuliya.krejza@klgtu.ru, ORCID: 0009-0007-8039-2743

#### 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», Russia, 119991, Moscow, Leninsky pr., 65, bld. 1, B\_Grigoriev@vniigaz.gazprom.ru, ORCID ID: 0000-0002-8691-6962

