



Прийнято 20.09.2025. Прорецензовано 20.10.2025. Опубліковано 26.12.2025.

УДК 622.691.4

DOI: 10.31471/1993-9868-2025-2(44)-70-89

МОДЕЛЮВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ ГАЗОВОДНЕВИХ СУМІШЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ ПАРАМЕТРІВ ВИТІКАННЯ ІЗ РОЗПОДІЛЬНИХ МЕРЕЖ

Копачук Н. В.

Старший майстер

Івано-Франківська філія ТОВ «Газорозподільні мережі України»

вул. Ленкавського, 20, м. Івано-Франківськ, 76010, Україна

<https://orcid.org/0009-0001-7642-7487>

e-mail: nazar.kopachuk-a18522@nung.edu.ua

Григорський С. Я.*

Кандидат геологічних наук, доцент

Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу

вул. Карпатська, 15, м. Івано-Франківськ, 76019, Україна

<https://orcid.org/0000-0001-6401-0345>

e-mail: stanislav.hryhorskyi@nung.edu.ua

Анотація. Розроблено та валідовано прості інженерні математичні моделі для визначення ключових термодинамічних властивостей, що є основою для підвищення точності прогнозування параметрів витікання газоводневих сумішей в умовах газорозподільних мереж. Для створення надійної бази еталонних даних, на основі якої проводилась розробка моделей, згенеровано вичерпний масив значень у програмному комплексі PVTsim Nova за фундаментальним рівнянням стану GERG-2008. Дослідженням охоплено п'ятдесят базових компонентних складів природного газу, що відображають варіативність його якості в реальних мережах України. Моделювання проведено для абсолютних тисків від 0,1 до 1,3 МПа та температур від 243,15 до 323,15 К, що повністю охоплює діапазон експлуатації розподільних мереж. Мольний вміст водню в складі газоводневої суміші варіювався від 0 до 20 %. На основі отриманих даних розроблено регресійні рівняння степеневого типу для розрахунку фактора стисливості, показника адіабати та швидкості звуку як функцій від тиску, температури, відносної густини суміші за повітрям та мольної концентрації водню. Розроблені моделі валідовано шляхом порівняння з еталонними даними. Встановлено високу точність та адекватність запропонованих рівнянь у всьому дослідженому діапазоні. Визначено, що для моделі фактора стисливості максимальна відносна похибка за модулем становить 0,44 %, а коефіцієнт детермінації – 0,995. Для показника адіабати відповідні значення складають 0,93 % та 0,914; для швидкості звуку – 1,5 % та 0,998. Аналіз розподілу похибок підтвердив стабільність моделей та виявив лише незначні систематичні зміщення для показника адіабати та швидкості звуку. Запропоновані математичні моделі мають просту аналітичну структуру та не потребують ітераційних процедур, що уможливило їх пряму імплементацію в інженерні методики для оперативного розрахунку параметрів витікання та виробничо-технологічних витрат і втрат газу у розподільних мережах.

Ключові слова: фактор стисливості; показник адіабати; швидкість звуку; газоводнева суміш; витікання газу; фундаментальне рівняння стану газу; виробничо-технологічні витрати та втрати.

Запропоноване посилання: Копачук, Н. В. & Григорський, С. Я. (2025). Моделювання властивостей газоводневих сумішей для прогнозування параметрів витікання із розподільних мереж. Нафтогазова енергетика, 2(44), 70-89. doi: 10.31471/1993-9868-2025-2(44)-70-89.

* Відповідальний автор



Copyright © The Author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

Вступ

Розвиток світової енергетики на сучасному етапі нерозривно пов'язаний із пошуком шляхів декарбонізації та підвищення енергетичної безпеки, що змушує провідні країни світу активно впроваджувати відновлювані джерела енергії. Одним із найбільш перспективних енергоносіїв у цьому контексті є водень, використання якого дозволяє значно скоротити викиди парникових газів [1]. Проте створення нової водневої інфраструктури є капіталомістким та довготривалим процесом. Тому найбільш реалістичною стратегією на найближчу перспективу є часткове заміщення природного газу воднем у вже існуючих газотранспортних та газорозподільних мережах [2, 3]. Цей підхід дозволяє не тільки поступово адаптувати енергетичну систему до нових видів палива, але й вирішувати стратегічні завдання щодо диверсифікації джерел енергопостачання, що є особливо актуальним для України.

Однак, транспортування газоводневих сумішей існуючою інфраструктурою створює низку значних технічних викликів. Це зумовлено суттєвою відмінністю фізико-хімічних властивостей водню від природного газу, зокрема його значно меншою густиною та об'ємною теплотою згоряння, вищою швидкістю горіння та ширшими межами вибуховості [4, 5]. Зміна компонентного складу робочого середовища безпосередньо впливає на всі технологічні процеси в газорозподільних мережах – від гідравлічних режимів транспортування до надійності та безпеки експлуатації обладнання [6]. Впровадження водню в газові мережі вимагає перегляду та адаптації існуючих нормативних документів та методик розрахунку, які були розроблені виключно для традиційного природного газу.

Одним із ключових аспектів безпечної та економічно ефективної експлуатації газорозподільних систем є точне визначення обсягів виробничо-технологічних витрат і втрат газу (ВТВ). Значну частку цих втрат становлять витоки, що виникають внаслідок аварійних ситуацій, нещільності з'єднань, а також регламентовані стравлювання газу через свічні трубопроводи [7, 8]. Процес витікання газу є складним газодинамічним явищем, параметри якого критично залежать від термодинамічних властивостей робочого середовища. Додавання водню до природного газу змінює ці властивості, що робить існуючі методики розрахунку об'ємів витоків неточними.

Таким чином, виникає гостра необхідність в адаптації існуючих та розробці нових інже-

нерних методик, які б дозволили оперативно та з достатньою точністю визначати ключові фізичні властивості газоводневих сумішей. Вирішення цієї задачі є важливим кроком на шляху до удосконалення методики розрахунку ВТВ газу та забезпечення надійної експлуатації газорозподільних мереж в умовах інтеграції водневих технологій.

Аналіз сучасних закордонних і вітчизняних досліджень і публікацій

Перехід до транспортування газоводневих сумішей існуючими трубопровідними мережами є предметом активних досліджень у світовій науковій спільноті. Ключову роль у цьому процесі відіграє існуюча газотранспортна та газорозподільна інфраструктура, адаптація якої для транспортування газоводневих сумішей є найбільш економічно обґрунтованим шляхом на першому етапі переходу [9]. У зв'язку з цим, українські науковці та інженери активно проводять дослідження, спрямовані на вивчення практичних аспектів та наслідків додавання водню до природного газу.

Перші в Україні практичні експерименти з транспортування воднево-газових сумішей у розподільних мережах були проведені на спеціалізованих полігонах АТ «Житомиргаз», «Вінницязгаз» та «Дніпропетровськгаз» [10, 11]. У ході цих випробувань досліджувалися суміші з концентрацією водню від 1% до 20%. Основна увага приділялася впливу на роботу кінцевого газового обладнання та забезпеченню герметичності системи. Окреме дослідження, представлене у роботі [12], було цілком присвячене критично важливому питанню герметичності газорозподільних мереж. Автори встановили, що найслабшими елементами системи є різьбові з'єднання та полімерні ущільнювачі, де спостерігалось найбільше зростання об'ємів витоків. Було експериментально підтверджено, що через меншу кінематичну в'язкість та малий розмір молекул водню, витоки газоводневої суміші значно перевищують витоки чистого метану за однакових умов, що вимагає перегляду існуючих нормативів та розробки нових методів контролю. Щодо оптимального складу суміші, перші експерименти не дали остаточної відповіді, однак концентрація до 20% була визнана як умовно безпечний максимум для подальших досліджень на існуючому обладнанні.

Поряд з практичними випробуваннями, фундаментальною науковою проблемою залишається коректне моделювання термодинамічних властивостей газоводневих сумішей, що є

основою для будь-яких газодинамічних розрахунків, визначення параметрів витікання та комерційного обліку газу. У роботі [13] досліджено вплив концентрації водню у діапазоні (0-100) % на фізичні і термодинамічні властивості газоводневих сумішей за умов газових мереж. Проте дослідження стосуються виключно стандартних фізичних умов, а їх результати не можуть бути використані при моделюванні властивостей суміші природного газу із воднем за інших термобаричних умов.

Комплексний огляд викликів, пов'язаних зі зміною фізичних властивостей газу при додаванні водню, представлений у роботах [14-16]. У зазначених наукових працях розрахунки ведуться, в основному, за фундаментальними рівняннями стану AGA-8 DC92, GERG-2008 та кубічними рівняннями Soave-Redlich-Kwong (SRK), Peng-Robinson (PR). Автори дійшли висновку, що для умов високих тисків кубічні рівняння стану дають суттєву похибку без спеціальних коефіцієнтів бінарної взаємодії, тоді як GERG-2008 забезпечує еталонну точність. Однак, для умов газорозподільних мереж питання точності та доцільності застосування тих чи інших моделей залишається відкритим. У роботі [17] показано, наскільки критично точне визначення властивостей суміші (зокрема, показника адіабати, густини та швидкості звуку) впливає на точність роботи стандартних засобів вимірювання витрати. Неправильне визначення цих параметрів може призвести до помилок у комерційному обліку газу, що сягають кількох відсотків. Аналогічно, для розрахунку параметрів витікання ключовими є фактор стисливості та швидкість звуку в суміші, які також суттєво залежать від концентрації водню. В Україні питання обліку технологічних втрат газу (ВТВ) регламентується відповідною методикою [8], однак її положення розроблені для традиційного природного газу, причому більшість розрахункових формул не враховують властивості реального газу.

Таким чином, аналіз сучасних публікацій виявляє наступне: вітчизняні дослідження наразі сконцентровані на важливих практичних аспектах сумісності обладнання та режимів роботи газових мереж, в той час як закордонні науковці глибоко вивчають складні моделі властивостей газів. Проте, існує очевидна науково-практична проблема: відсутність простих, надійних та адаптованих інженерних моделей для розрахунку ключових фізичних властивостей газоводневих сумішей саме для специфічних умов українських газорозподільних мереж. Розробка таких моделей, що базуються на ве-

рифікованих рівняннях стану, дозволить суттєво підвищити точність розрахунків витоків, і як наслідок, є необхідним кроком для удосконалення методики визначення ВТВ.

Висвітлення невирішених раніше частин загальної проблеми

Незважаючи на значний інтерес наукової спільноти до проблематики транспортування газоводневих сумішей, аналіз сучасних досліджень виявляє низку невирішених питань, що створюють перешкоди для практичного впровадження водневих технологій в існуючі газорозподільні мережі.

На сьогодні відсутні прості та водночас надійні інженерні моделі для прямого розрахунку ключових фізичних властивостей, що визначають параметри витікання газу. Для адекватного моделювання витоків та, як наслідок, для коректного розрахунку ВТВ, необхідно оперативно визначати три основні параметри суміші: фактор стисливості Z , показник адіабати k та швидкість звуку w_s . Наявні методики [8] або базуються на спрощені моделі ідеального газу, що є невиправданим для сумішей з воднем, або вимагають складних ітераційних розрахунків за допомогою відповідних рівнянь стану [18]. Таким чином, існує потреба в розробці спеціалізованих емпіричних формул, які б дозволили інженерам швидко та з достатньою точністю розраховувати ці три властивості, базуючись на легко вимірюваних параметрах (тиск, температура, компонентний склад).

Також значна частина опублікованих закордонних досліджень базується на обмеженій кількості компонентних складів газу. Найчастіше моделювання проводиться для практично бінарних сумішей «метан-водень» або для одного-двох типових складів природного газу. Такий підхід не враховує значної варіативності компонентного складу газу, що надходить у газорозподільні мережі України з різних джерел. Відповідно, результати та висновки, отримані на основі обмеженої вибірки, не можуть бути повною мірою екстрапольовані на всю різноманітність реальних умов експлуатації, що ставить під сумнів їхню універсальність.

Мета та завдання досліджень

Метою роботи є розроблення та обґрунтування простих інженерних математичних моделей для визначення ключових термодинамічних параметрів, необхідних для підвищення точності розрахунків процесів витікання газоводневих сумішей в умовах газорозподільних мереж.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі завдання:

1. На основі еталонного рівняння стану GERG-2008 сформулювати репрезентативний масив даних шляхом проведення багатоваріантних розрахунків фактора стисливості, показника адиабати та швидкості звуку для широкого діапазону компонентних складів, тисків та температур.

2. Розробити прості у використанні інженерні математичні моделі (регресійні рівняння) для визначення залежності кожної з фізичних властивостей від тиску, температури та компонентного складу (через відносну густину) газодневої суміші.

3. Оцінити адекватність та визначити похибку розроблених інженерних моделей шляхом порівняння отриманих за ними результатів з еталонними розрахунковими даними.

Висвітлення основного матеріалу дослідження

Ключовим етапом розробки будь-якої нової інженерної моделі є формування надійної та репрезентативної бази еталонних даних, на основі якої буде проводитись регресійний аналіз. У даному дослідженні для цієї мети було обрано фундаментальне рівняння стану GERG-2008.

Рівняння стану GERG-2008 на сьогодні є міжнародно визнаним "золотим стандартом" для розрахунку термодинамічних властивостей природного газу та його сумішей [18]. Його фундаментальна відмінність від кубічних моделей полягає в тому, що воно базується не на емпіричній апроксимації залежностей «тиск-об'єм-температура», а на більш складному та точному математичному апараті вільної енергії Гельмгольца як функції температури та густини [19].

Це дозволяє з високою точністю розраховувати не лише термічні (тиск, об'єм), але й калоричні (теплоємність, ентальпія, ентропія) властивості. Розрахунок ключових для даного дослідження параметрів відбувається за такими залежностями [18]:

– фактор стисливості

$$Z = 1 + \delta \cdot \alpha_{\delta}^r; \quad (1)$$

– показник адиабати

$$\kappa = \left(2 - \frac{1 - \delta^2 \cdot \alpha_{\delta\delta}^r}{1 + \delta \cdot \alpha_{\delta}^r} \right) \times \left[1 - \frac{\left(1 + \delta \cdot \alpha_{\delta}^r - \delta \cdot \tau \cdot \alpha_{\delta\tau}^r \right)^2}{\tau^2 \cdot \left(\alpha_{\tau\tau}^o + \alpha_{\tau\tau}^r \right) \cdot \left(1 + 2 \cdot \delta \cdot \alpha_{\delta}^r + \delta^2 \cdot \alpha_{\delta\delta}^r \right)} \right]; \quad (2)$$

– швидкість звуку у газовій суміші

$$w_s = \left\{ R \cdot T \cdot \left[1 + 2 \cdot \delta \cdot \alpha_{\delta}^r + \delta^2 \cdot \alpha_{\delta\delta}^r - \frac{\left(1 + \delta \cdot \alpha_{\delta}^r - \delta \cdot \tau \cdot \alpha_{\delta\tau}^r \right)^2}{\tau^2 \cdot \left(\alpha_{\tau\tau}^o + \alpha_{\tau\tau}^r \right)} \right] \right\}^{1/2}, \quad \frac{\text{м}}{\text{с}}, \quad (3)$$

де α – безрозмірна вільна енергія Гельмгольца, що є сумою ідеальної α^o та реальної α^r складової, які враховують відповідні властивості газової суміші;

α_{δ}^r , $\alpha_{\delta\delta}^r$, $\alpha_{\delta\tau}^r$, $\alpha_{\tau\tau}^o$, $\alpha_{\tau\tau}^r$ – часткові похідні від вільної енергії Гельмгольца

$$\alpha_{\delta}^r = \frac{\partial \alpha^r}{\partial \delta}, \quad \alpha_{\delta\delta}^r = \frac{\partial^2 \alpha^r}{\partial \delta^2}, \quad \alpha_{\delta\tau}^r = \frac{\partial^2 \alpha^r}{\partial \delta \partial \tau}, \quad (4)$$

$$\alpha_{\tau\tau}^o = \frac{\partial^2 \alpha^o}{\partial \tau^2}, \quad \alpha_{\tau\tau}^r = \frac{\partial^2 \alpha^r}{\partial \tau^2};$$

δ , τ – відповідно безрозмірні густина та обернена температура газової суміші;

R – питома газова стала, Дж/(кг·К);

T – абсолютна температура, К.

Водночас, така висока точність досягається за рахунок надзвичайної складності самої моделі, яка містить велику кількість специфічних коефіцієнтів для кожного з 21 компонентів суміші. Це робить її ручне застосування чи реалізацію в простих обчислювальних середовищах практично неможливим. Для створення репрезентативної вибірки використання спеціалізованого програмного забезпечення є єдиним можливим та простим шляхом.

Саме складність моделі GERG-2008 та необхідність проведення багатоваріантних розрахунків зумовили вибір програмного комплексу PVTsim Nova як основного обчислювального інструменту. PVTsim Nova – це спеціалізований програмний комплекс від данської компанії Calsep [20], що є промисловим стандартом для моделювання фазової поведінки та фізичних властивостей пластових флюїдів і товарних газів. Програма містить широкий набір термодинамічних моделей, від поширених кубічних рівнянь стану до передових фундаментальних моделей. Ключовою можливістю PVTsim Nova є здатність точно моделювати багатокомпонентні суміші з вмістом неуглеводневих компонентів, зокрема водню, та виконувати автоматизовані багатоваріантні розрахунки, що необхідно для генерації великих масивів даних для подальшого аналізу.

Таблиця 1 – Приклади компонентних складів природного газу, що використовувалися у дослідженні

Газ	Мольний склад газу, %									
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Метан	98,570	91,977	90,397	90,724	90,158	92,476	93,714	90,079	90,003	90,110
Етан	0,041	0,006	5,114	1,477	6,971	3,658	1,775	0,661	5,002	4,595
Пропан	0,485	1,741	0,001	1,810	0,311	0,159	1,253	2,998	0,118	1,830
Ізо-бутан	0,009	0,604	0,027	0,089	0,332	0,221	1,617	0,085	1,495	0,139
Н-бутан	0,013	0,028	0,347	0,199	0,032	0,210	0,344	0,384	0,351	1,639
Нео-пентан	0,408	0,022	0,099	0,168	0,114	0,395	0,043	0,125	0,042	0,005
Ізо-пентан	0,158	0,078	0,369	0,018	0,007	0,430	0,514	0,163	0,036	0,011
Н-пентан	0,006	0,283	0,027	0,276	0,036	0,120	0,002	0,012	0,149	0,003
Гексани та вищі	0,003	0,109	0,200	0,081	0,050	0,043	0,238	0,002	0,173	0,017
Кисень	0,019	0,195	0,160	0,035	0,020	0,056	0,032	0,027	0,195	0,120
Азот	0,223	4,452	2,767	4,930	0,208	0,234	0,465	3,614	1,066	0,001
Діоксид вуглецю	0,065	0,505	0,492	0,193	1,761	1,998	0,003	1,850	1,370	1,530

Примітка. Повні дані вибірки по компонентному мольному складу газу наведено за посиланням <https://cutt.ly/yrCwXKVI>

Ключові переваги програмного комплексу PVTsim Nova:

- *верифікована імплементация GERG-2008*: програма містить вбудований та визначений у промисловості модуль розрахунків за рівнянням GERG-2008, що гарантує достовірність отриманих еталонних даних.

- *можливість пакетних розрахунків*: PVTsim Nova дозволяє автоматизувати процес обчислень для тисяч комбінацій тиску, температури та складу суміші, що є необхідною умовою для формування великого масиву даних для регресійного аналізу.

- *робота з неуглеводневими компонентами*: програмний комплекс коректно враховує вплив водню на властивості суміші, використовуючи закладені в модель GERG-2008 коефіцієнти бінарної взаємодії.

Таким чином, використання PVTsim Nova дозволило сформулювати повний та достовірний еталонний масив даних, який є основою для подальшої розробки нових інженерних математичних моделей.

Для проведення розрахунків згенеровано $n_c = 50$ базових компонентних мольних складів природного газу без вмісту водню. Вміст усіх компонентів у досліджуваних пробах природного газу відповідає чинним нормативним вимогам [21, 22]. При цьому їхні мольні частки варіюються в межах допустимих діапазонів,

визначених цими стандартами. Компонентний склад репрезентативних проб природного газу наведено у таблиці 1.

Багатоваріантні розрахунки фізичних властивостей газоводневої суміші виконувались за таких діапазонів зміни вхідних параметрів:

- мольний вміст водню $x_{H_2} = (0...20)\%$ з кроком $\Delta x_{H_2} = 2\%$;

- абсолютний тиск $p = (0,1...1,3)$ МПа з кроком $\Delta p = 0,1$ МПа;

- абсолютна температура $T = (243,15...323,15)$ К з кроком $\Delta T = 5$ К.

Перерахунок мольних часток компонентів газоводневої суміші x'_i після змішування обчислювався за формулою

$$x'_i = (1 - x_{H_2}) \cdot x_i, \quad (5)$$

де x_i – мольна концентрація i -го компонента газу без вмісту водню;

x_{H_2} – мольний вміст водню у газоводневій суміші.

Тобто обчислення за програмою PVTsim Nova здійснювались для $n_p = 13$ значень абсолютного тиску, $n_T = 17$ значень для абсолютної температури, $n_c = 50$ значень компонентного складу газу, у кожному з яких крім базового було додатково по $n_{H_2} = 10$ складів із

вмістом водню. Тому загальний обсяг вибірки N становить

$$N = n_p \cdot n_T \cdot n_c \cdot (n_{H_2} + 1) = 121550.$$

Відповідно до стандарту [18] розширені невизначеності (похибки) розрахунку властивостей газової суміші для заданих вище термобаричних умов становлять: коефіцієнт реального газу та швидкість звуку 0,1 %; показник адіабати 0,2 %. Це свідчить про те, що вказані властивості газу визначені з досить високою точністю.

Для отримання математичних моделей розрахованих властивостей газоподібних сумішей використано один з найпоширеніших та фундаментальних методів, що використовується для оцінки параметрів регресійних моделей, а саме, метод найменших квадратів (МНК). Позначимо модельну функцію, яка характеризує фізичну властивість газу таким чином:

$$F_m = F_m(Q_f, A_f, B_f, C_f, D_f) = Q_f + A_f \cdot p^{B_f} \cdot T^{C_f} \cdot \Delta^{D_f}, \quad (6)$$

де Q_f, A_f, B_f, C_f, D_f – невідомі коефіцієнти, що визначаються на основі МНК та є функціями від мольного вмісту водню x_{H_2} ;

p, T, Δ – параметри газової суміші, відповідно абсолютний тиск, МПа, абсолютна температура, К, та безрозмірна густина ідеального газу за повітрям, що обчислюється за формулою

$$\Delta = \frac{\mu}{\mu_{air}}, \quad (7)$$

μ – молярна маса газоподібної суміші, що визначається на основі компонентного складу, кг/кмоль;

$\mu_{air} = 28,96546$ кг/кмоль – молярна маса сухого повітря стандартизованого компонентного мольного складу [23, 24].

Для спрощення обчислювального алгоритму введемо нову функцію

$$f_m = \ln(F_m - Q_f) = \ln A_f + B_f \cdot \ln p + C_f \cdot \ln T + D_f \cdot \ln \Delta. \quad (8)$$

Якщо провести серію замінів

$$A'_f = \ln A_f, \quad x = \ln p, \quad y = \ln T, \quad z = \ln \Delta, \quad (9)$$

то в результаті отримаємо лінійну функцію f_m відносно аргументів x, y, z із невідомими коефіцієнтами моделі A'_f, B_f, C_f, D_f за фіксованого значення параметра Q_f , тобто

$$f_m = A'_f + B_f \cdot x + C_f \cdot y + D_f \cdot z. \quad (10)$$

Мета методу найменших квадратів – мінімізувати цільову функцію

$$T_{func} = T_{func}(A'_f, B_f, C_f, D_f) = \sum_{j=1}^N (f_{mj} - f_j)^2 = \sum_{j=1}^N (A'_f + B_f \cdot x_j + C_f \cdot y_j + D_f \cdot z_j - f_j)^2, \quad (11)$$

де j – номер елемента вибірки даних щодо фізичної властивості газової суміші обсягом N значень, а також абсолютного тиску, температури та відносної густини газу;

f_j – функція, що містить розраховане значення фізичної властивості газу за заданих умов F_j

$$f = \ln(F - Q_f). \quad (12)$$

Для того, щоб знайти мінімум функції T_{func} , необхідно, щоб її часткові похідні по кожному з невідомих коефіцієнтів A'_f, B_f, C_f, D_f (при цьому Q_f фіксуємо) дорівнювали нулю

$$\left(\frac{\partial T_{func}}{\partial X} \right) \bigg|_{X=A'_f, B_f, C_f, D_f} = 0. \quad (13)$$

В результаті отримуємо лінійну систему з чотирьох рівнянь із чотирма невідомими

$$\begin{cases} N \cdot A'_f + \left(\sum_{j=1}^N x_j \right) \cdot B_f + \left(\sum_{j=1}^N y_j \right) \cdot C_f + \left(\sum_{j=1}^N z_j \right) \cdot D_f = \sum_{j=1}^N f_j, \\ \left(\sum_{j=1}^N x_j \right) \cdot A'_f + \left(\sum_{j=1}^N x_j^2 \right) \cdot B_f + \left(\sum_{j=1}^N x_j \cdot y_j \right) \cdot C_f + \left(\sum_{j=1}^N x_j \cdot z_j \right) \cdot D_f = \sum_{j=1}^N x_j \cdot f_j, \\ \left(\sum_{j=1}^N y_j \right) \cdot A'_f + \left(\sum_{j=1}^N x_j \cdot y_j \right) \cdot B_f + \left(\sum_{j=1}^N y_j^2 \right) \cdot C_f + \left(\sum_{j=1}^N y_j \cdot z_j \right) \cdot D_f = \sum_{j=1}^N y_j \cdot f_j, \\ \left(\sum_{j=1}^N z_j \right) \cdot A'_f + \left(\sum_{j=1}^N x_j \cdot z_j \right) \cdot B_f + \left(\sum_{j=1}^N y_j \cdot z_j \right) \cdot C_f + \left(\sum_{j=1}^N z_j^2 \right) \cdot D_f = \sum_{j=1}^N z_j \cdot f_j. \end{cases} \quad (14)$$

Система рівнянь (14) розв'язується одним із класичних методів, наприклад матричним методом. Коефіцієнти математичної моделі (6)

будуть визначені в тому випадку, коли для фіксованого значення Q_f система (14) даватиме найкращий (оптимальний) загальний результат. Тобто коефіцієнт Q_f має бути підібрано таким чином, щоб сума квадратів похибок RSS ($RSS = T_{func}$) була мінімальною відповідно до виразу (11). З іншого боку, це означає, що коефіцієнт детермінації R^2 модельної функції набуває максимального значення

$$R^2 = 1 - \frac{RSS}{TSS} = 1 - \frac{T_{func}}{TSS} \rightarrow \max, \quad (15)$$

де TSS – загальна сума квадратів, що показує загальну варіативність у даних, що містять розраховані значення фізичної властивості газу F та допоміжної функції f

$$TSS = \sum_{j=1}^N (f_j - f_{avg})^2, \quad (16)$$

f_{avg} – середнє арифметичне значення допоміжної функції f для вибірки даних по конкретній фізичній властивості газу

$$f_{avg} = \frac{1}{N} \cdot \sum_{j=1}^N f_j. \quad (17)$$

Для реалізації обчислювальної частини дослідження по побудові математичних моделей було обрано мову програмування Python. Ключовими перевагами цього вибору є її відкритий вихідний код, чистий та лаконічний синтаксис, що значно спрощує розробку та верифікацію складних алгоритмів. Потужна наукова екосистема Python, що включає бібліотеки для нелінійної оптимізації та роботи з табличними даними, дозволила ефективно реалізувати ітераційний пошук параметрів математичної моделі та автоматизувати весь процес обробки експериментальних даних.

За наведеним вище алгоритмом розроблено програму GasModelFit. Процес роботи програми починається зі зчитування вихідних даних, отриманих за результатами розрахунків у PVTsim Nova, безпосередньо з електронних таблиць Excel (файли типу .xlsx, .csv). Цей етап реалізовано за допомогою бібліотеки Pandas, яка дозволяє ефективно імпортувати табличні дані та представляти їх у вигляді структурованих масивів для подальшої обробки. Після завантаження вихідних даних вони перетворюються на числові масиви за допомогою бібліотеки NumPy, що є основою для всіх математичних операцій у середовищі Python.

Центральним елементом програми є реалізація ітераційного алгоритму нелінійного ме-

тоду найменших квадратів для пошуку оптимальних параметрів моделі. Для цього використовується модуль *optimize*, що входить до складу наукової бібліотеки SciPy. У вказаному модулі містяться спеціальні функції, що реалізують обчислювально стійкі алгоритми [25, 26], такі як метод Левенберга-Марквардта та метод довірчих областей з відбиттям (Trust Region Reflective). Це дозволяє знаходити таку комбінацію коефіцієнтів, яка мінімізує суму квадратів відхилень між експериментальними значеннями фізичних властивостей газозводневої суміші та розрахованими за моделлю.

На завершальному етапі, після успішного знаходження оптимальних коефіцієнтів, програма розраховує модельні значення та проводить оцінку адекватності отриманої залежності. Для цього обчислюються ключові статистичні критерії, зокрема коефіцієнт детермінації, абсолютна та відносна похибки, що дозволяє кількісно оцінити точність апроксимації експериментальних даних розробленою математичною моделлю.

За результатами роботи програми GasModelFit отримуються набори значень коефіцієнтів A_f, B_f, C_f, D_f , причому

$A_f = \exp(A'_f)$. Ці коефіцієнти, у свою чергу, є функціями від мольної концентрації водню x_{H_2} у складі суміші газів.

Проведені розрахунки засвідчують, що коефіцієнти математичної моделі B_f, C_f, D_f майже не залежать від мольної концентрації водню в досліджуваному діапазоні. Тому їх можна вважати сталими при обчисленні коефіцієнта стисливості, показника адіабати та швидкості звуку в газі. Також для коефіцієнта реального газу параметр Q_f і для швидкості звуку параметр A_f є практично постійними.

Для показника адіабати коефіцієнти Q_f та A_f можна описати за допомогою полінома другого степеня від мольного вмісту водню. Параметр Q_f для швидкості звуку і параметр A_f для фактора стисливості лінійно залежать від концентрації водню.

Отримані емпіричні формули з високим ступенем достовірності апроксимації дають змогу розрахувати фізичні властивості газозводневих сумішей та мають такий вигляд:

– фактор стисливості (коефіцієнт реального газу)

Таблиця 2 – Результати оцінки точності математичних моделей фізичних властивостей газоводневої суміші за умов газорозподільних мереж

Фізична властивість газу	Абсолютна похибка		Відносна похибка, %		Коефіцієнт детермінації
	мінімальна	максимальна	мінімальна	максимальна	
Фактор стисливості	-0,0028	0,0041	-0,30	0,44	0,995
Показник адіабати	-0,012	0,011	-0,93	0,87	0,914
Швидкість звуку	-5,5	3,8	-1,50	1,01	0,998

$$Z = 1 - (4,06 - 2,67 \cdot x_{H_2}) \cdot 10^7 \cdot \frac{p \cdot \Delta^{1,91}}{T^{3,6}}; \quad (18)$$

– показник адіабати (ізоентропи)

$$\kappa = \left(7,26 \cdot 10^{-3} - 4,02 \cdot 10^{-4} \cdot x_{H_2} - 4,47 \cdot 10^{-4} \cdot x_{H_2}^2 \right) \times \left(1 + \frac{253 \cdot p^{1,48 \cdot 10^{-3}}}{T^{7,64 \cdot 10^{-2}} \cdot \Delta^{0,152}} \right), \quad (19)$$

– швидкість розповсюдження звукових коливань (адіабатна швидкість звуку)

$$w_s = \frac{114 \cdot T^{0,291}}{p^{2,38 \cdot 10^{-3}} \cdot \Delta^{0,353}} - 291 - 13,5 \cdot x_{H_2}, \frac{м}{с}, \quad (20)$$

де p – абсолютний тиск газу, МПа;

T – абсолютна температура газу, К;

Δ – безрозмірна відносна густина газу за повітрям, що обчислюється за формулою (7);

x_{H_2} – мольна концентрація водню у складі газової суміші.

Як частковий випадок можна отримати формули для розрахунку фізичних властивостей природного газу без вмісту водню, підставивши у відповідні залежності $x_{H_2} = 0$.

Тому емпіричні формули для обчислення властивостей природного газу за умов газорозподільних мереж мають вигляд:

– фактор стисливості

$$Z = 1 - 4,06 \cdot 10^7 \cdot \frac{p \cdot \Delta^{1,91}}{T^{3,6}}; \quad (21)$$

– показник адіабати

$$\kappa = 0,007 + \frac{1,84 \cdot p^{1,48 \cdot 10^{-3}}}{T^{7,64 \cdot 10^{-2}} \cdot \Delta^{0,152}}, \quad (22)$$

– швидкість розповсюдження звукових коливань (адіабатна швидкість звуку)

$$w_s = \frac{114 \cdot T^{0,291}}{p^{2,38 \cdot 10^{-3}} \cdot \Delta^{0,353}} - 291, \frac{м}{с}, \quad (23)$$

Зазначимо, що формули (18)-(20) справедливі для: абсолютного тиску газу від 0,1 МПа до 1,3 МПа; діапазону зміни температури від мінус 30 °С (243,15 К) до плюс 50 °С (323,15 К); мольного вмісту водню до 20 % та діапазону зміни відносної густини газу від 0,457 до 0,637.

У таблиці 2 наведено статистичні показники отриманих математичних моделей для розрахунку фізичних властивостей газоводневої суміші. На рисунках 1-3 зображено залежності модельних значень властивостей газової суміші від еталонних, що розраховані за фундаментальним рівнянням стану GERG-2008.

Аналіз результатів оцінки точності показує, що всі три розроблені математичні моделі є високоефективними для опису фізичних властивостей газоводневої суміші. Моделі для фактора стисливості та швидкості звуку демонструють виняткову точність, що підтверджується надзвичайно високими коефіцієнтами детермінації – 0,995 та 0,998 відповідно (рис. 1, 3). Це свідчить про майже ідеальний функціональний зв'язок між розрахунковими та еталонними даними.

Математична модель фактора стисливості є найбільш прецизійною, оскільки має найвужчий діапазон відносної похибки – від мінус 0,30 % до плюс 0,44 %. При цьому залежність показника адіабати (рис. 2), хоч і є достатньо точною ($R^2 = 0,914$), показує найнижчі результати серед трьох розроблених моделей. Вона має як найнижчий коефіцієнт детермінації, так і значний діапазон відносної похибки – від мінус 0,93 % до плюс 0,87 %.

Залежність для швидкості звуку (рис. 3), маючи найвищий коефіцієнт детермінації, водночас демонструє найбільший діапазон відносної похибки – від мінус 1,50 % до плюс 1,01 %. Це вказує на те, що модель ідеально описує загальну тенденцію, але в окремих випадках може давати найбільші відхилення.

На рисунках 4-12 наведено результати аналізу відносної похибки розроблених математичних моделей фізичних властивостей газоводневої суміші. Дослідження включає оцінку впливу ключових експлуатаційних параметрів: абсолютного тиску, абсолютної температури та мольного вмісту водню. Для візуалізації розподілу похибок використано діаграми типу «ящик з вусами» (box-and-whisker plot). Цей тип діаграм дозволяє наочно оцінити ключові статистичні характеристики вибірки даних:

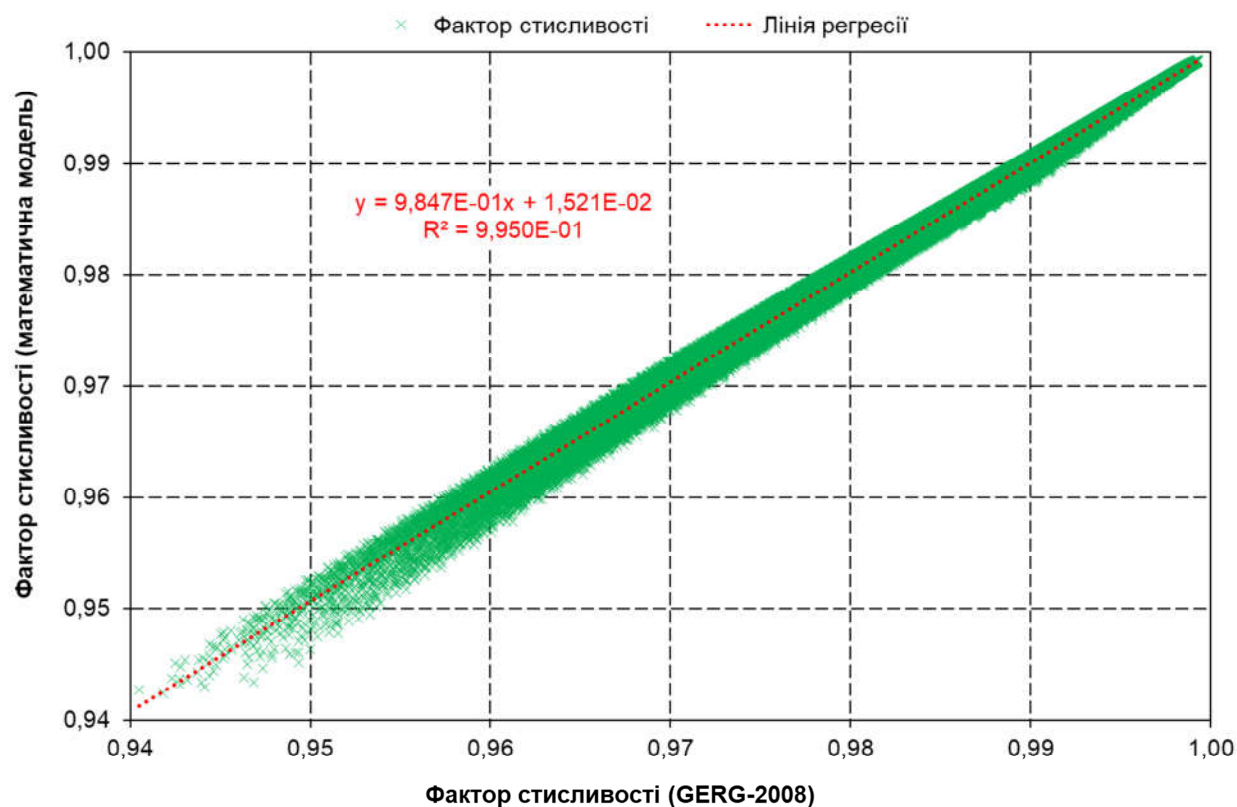


Рисунок 1 – Кореляційне поле значень фактора стисливості, розрахованих за розробленою моделлю та еталонним рівнянням стану GERG-2008

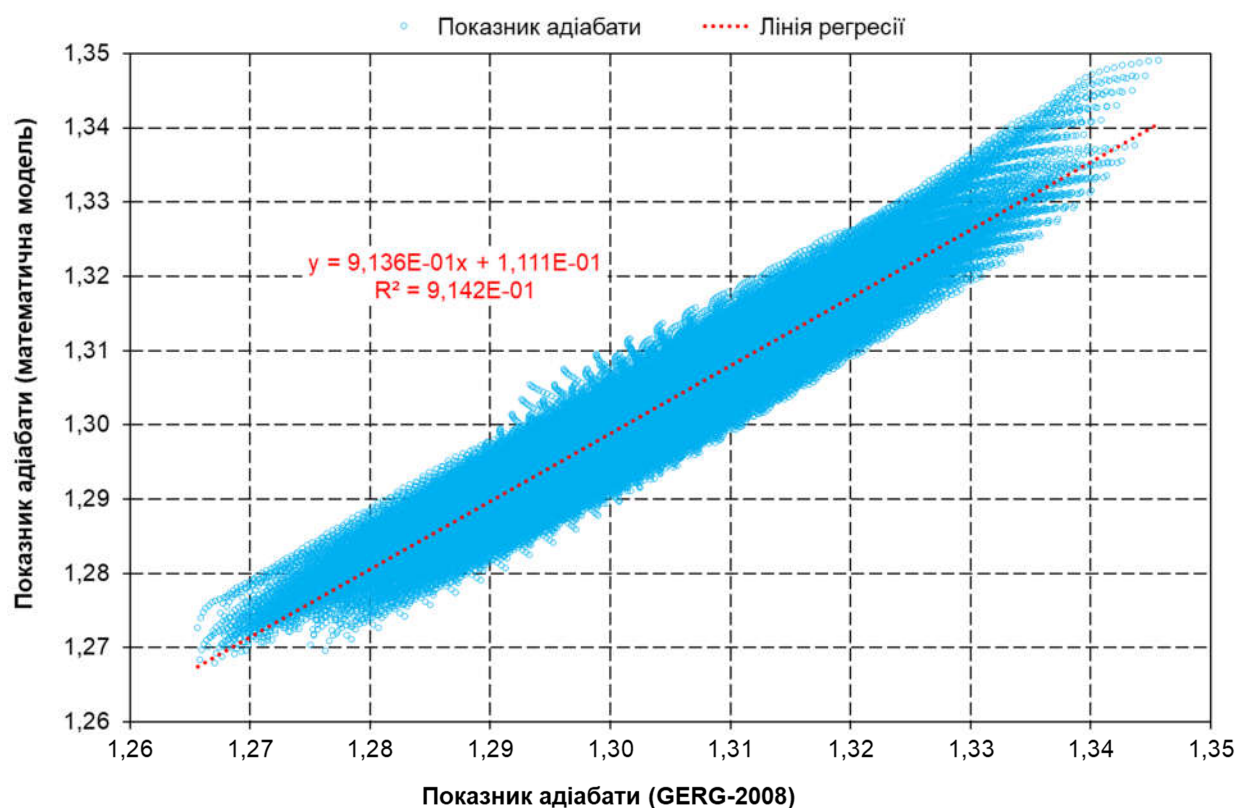


Рисунок 2 – Кореляційне поле значень показника адіабати, розрахованих за розробленою моделлю та еталонним рівнянням стану GERG-2008

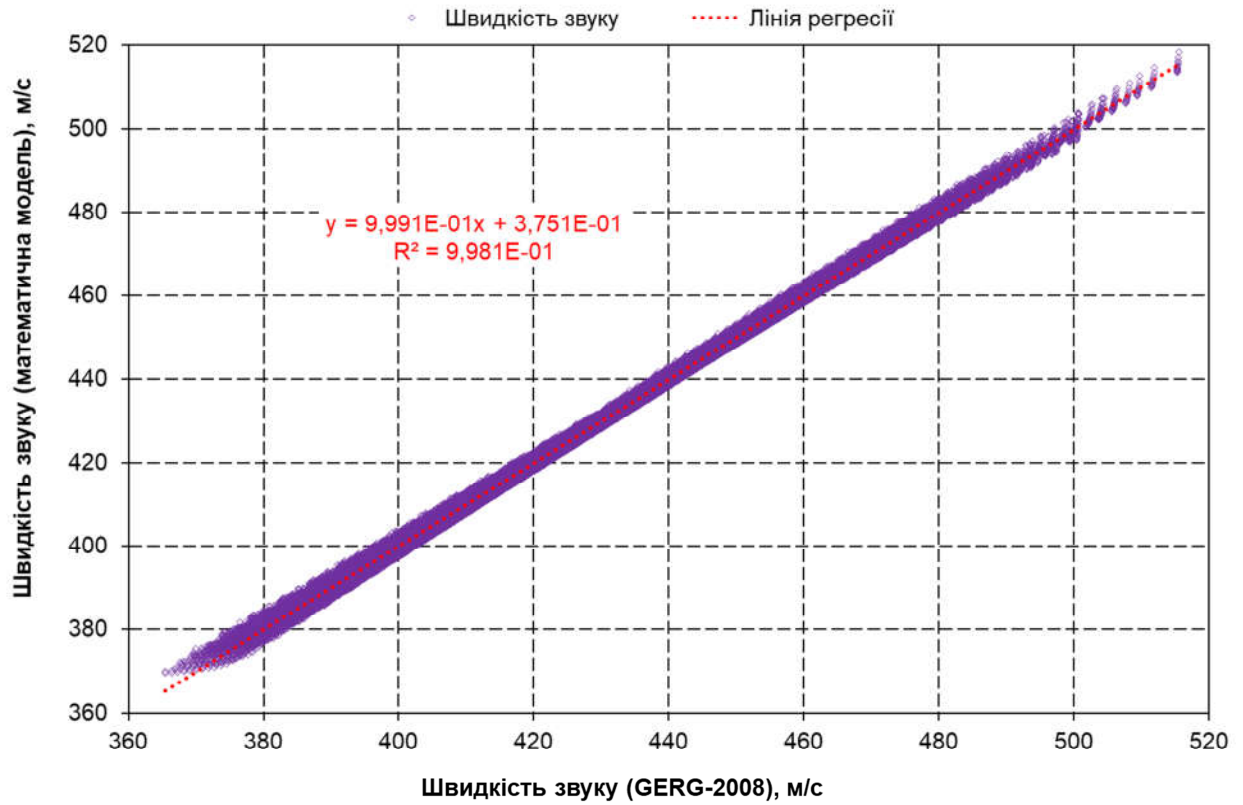


Рисунок 3 – Кореляційне поле значень швидкості звуку, розрахованих за розробленою моделлю та еталонним рівнянням стану GERG-2008

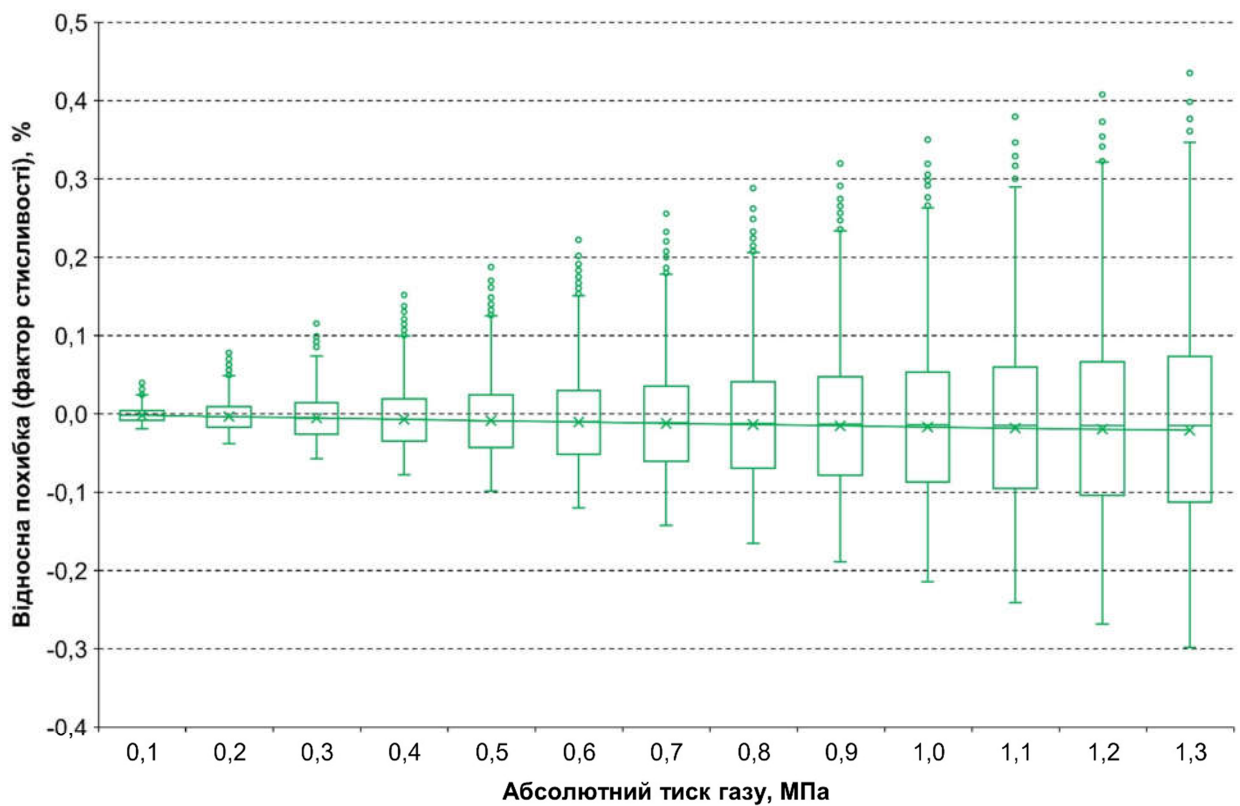


Рисунок 4 – Розподіл відносної похибки моделі фактора стисливості залежно від абсолютного тиску газу

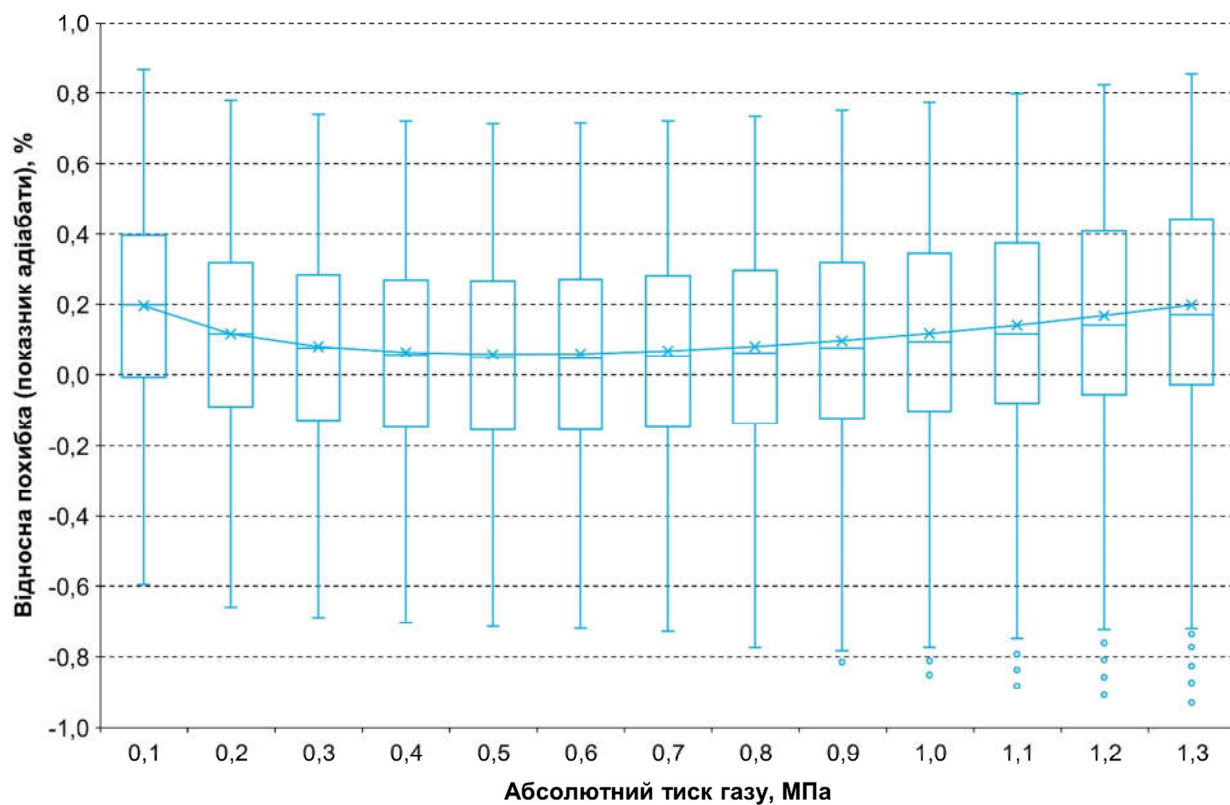


Рисунок 5 – Розподіл відносної похибки моделі показника адіабати залежно від абсолютного тиску газу

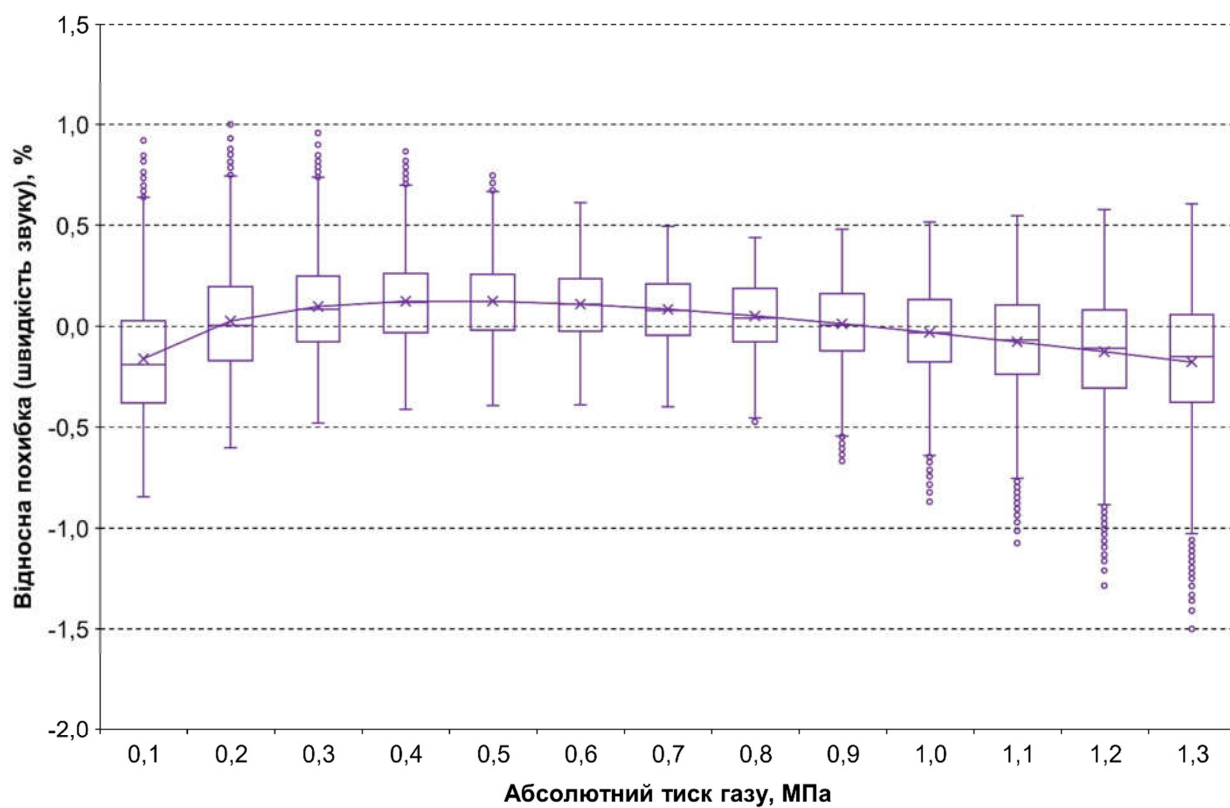


Рисунок 6 – Розподіл відносної похибки моделі швидкості звуку залежно від абсолютного тиску газу

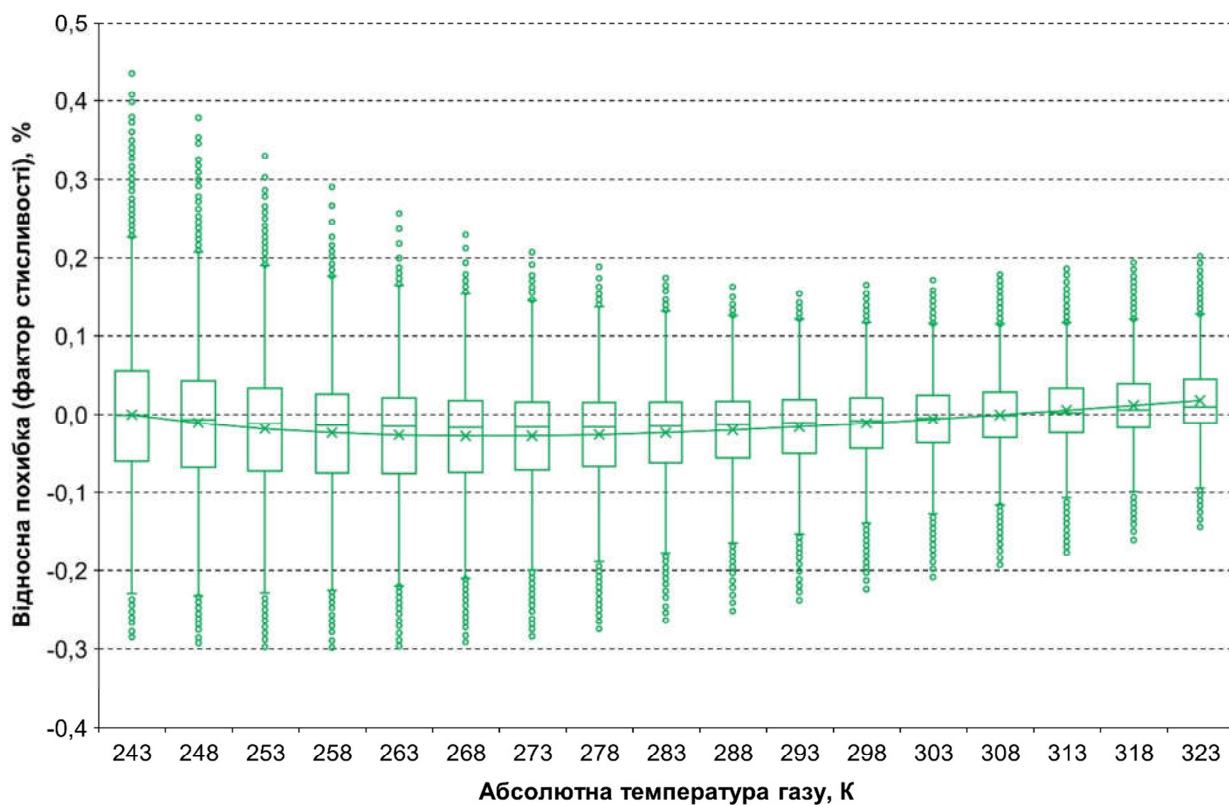


Рисунок 7 – Розподіл відносної похибки моделі фактора стисливості залежно від абсолютної температури газу

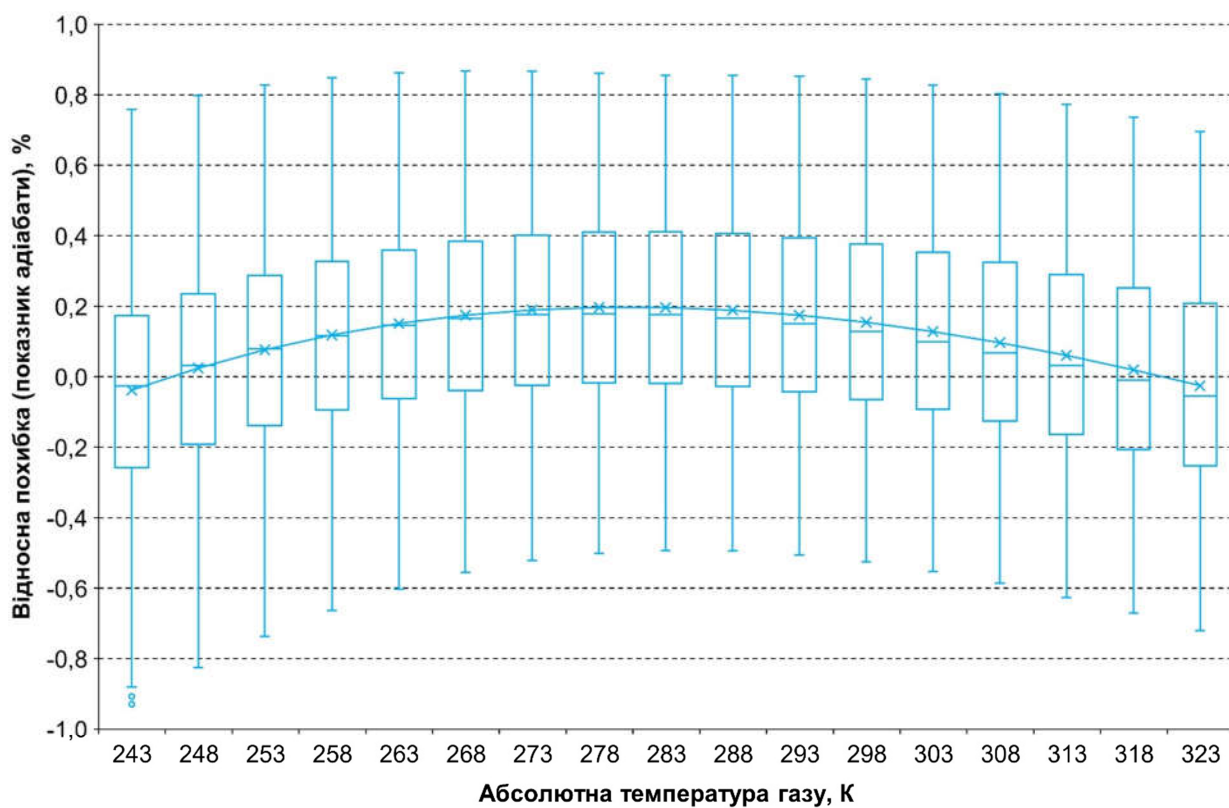


Рисунок 8 – Розподіл відносної похибки моделі показника адіабати залежно від абсолютної температури газу

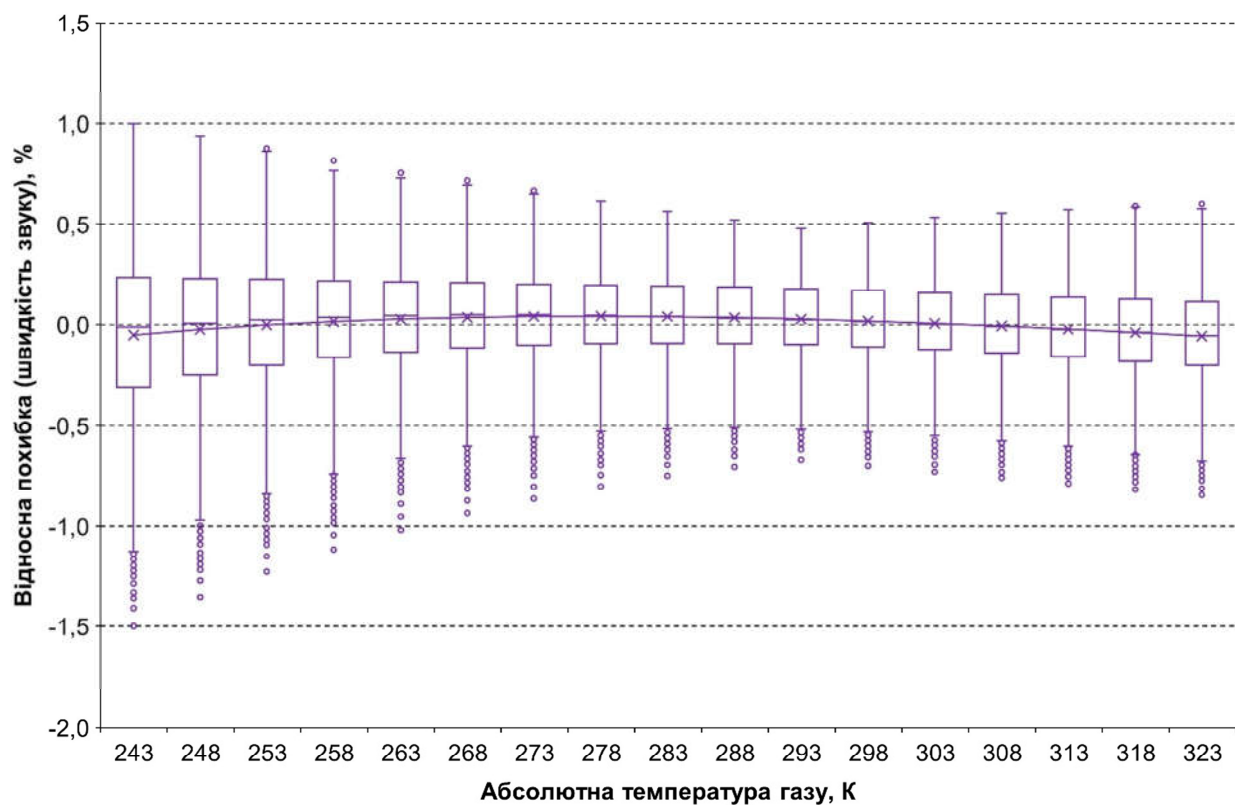


Рисунок 9 – Розподіл відносної похибки моделі швидкості звуку залежно від абсолютної температури газу

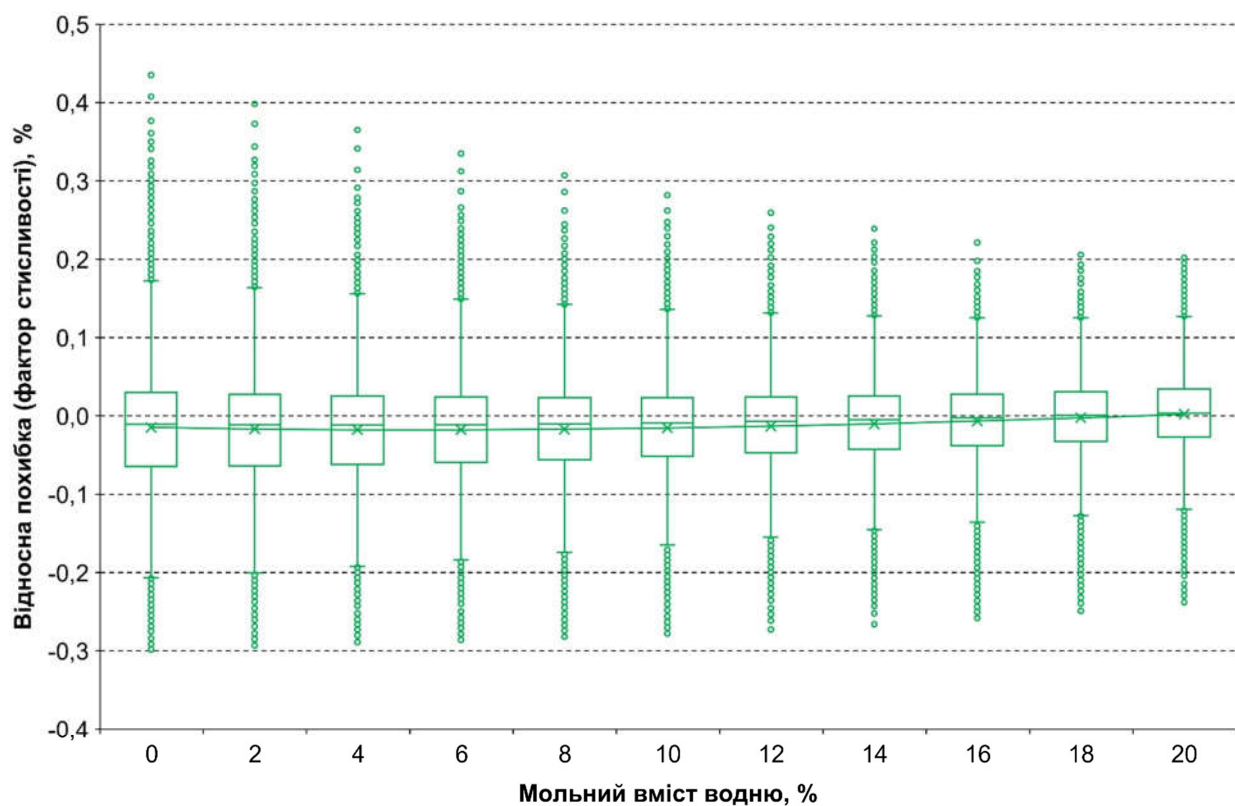


Рисунок 10 – Розподіл відносної похибки моделі фактора стисливості залежно від мольного вмісту водню

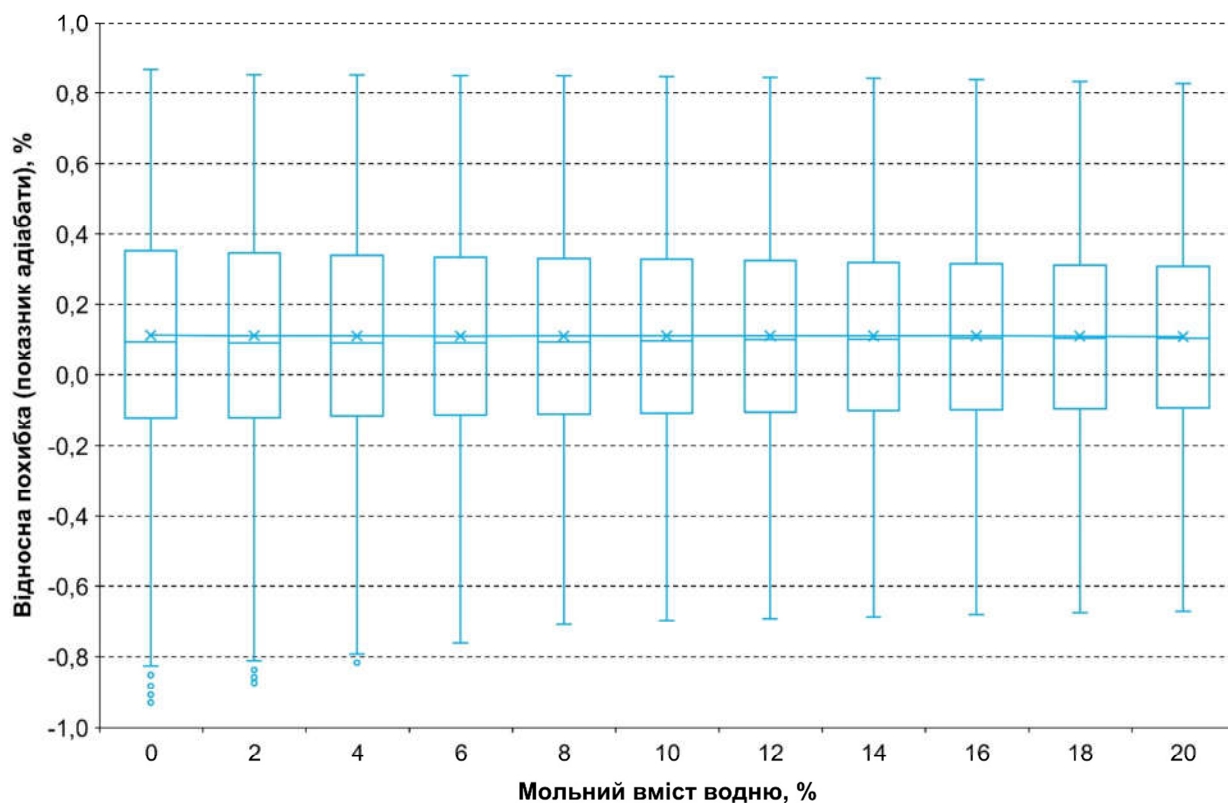


Рисунок 11 – Розподіл відносної похибки моделі показника адіабати залежно від мольного вмісту водню

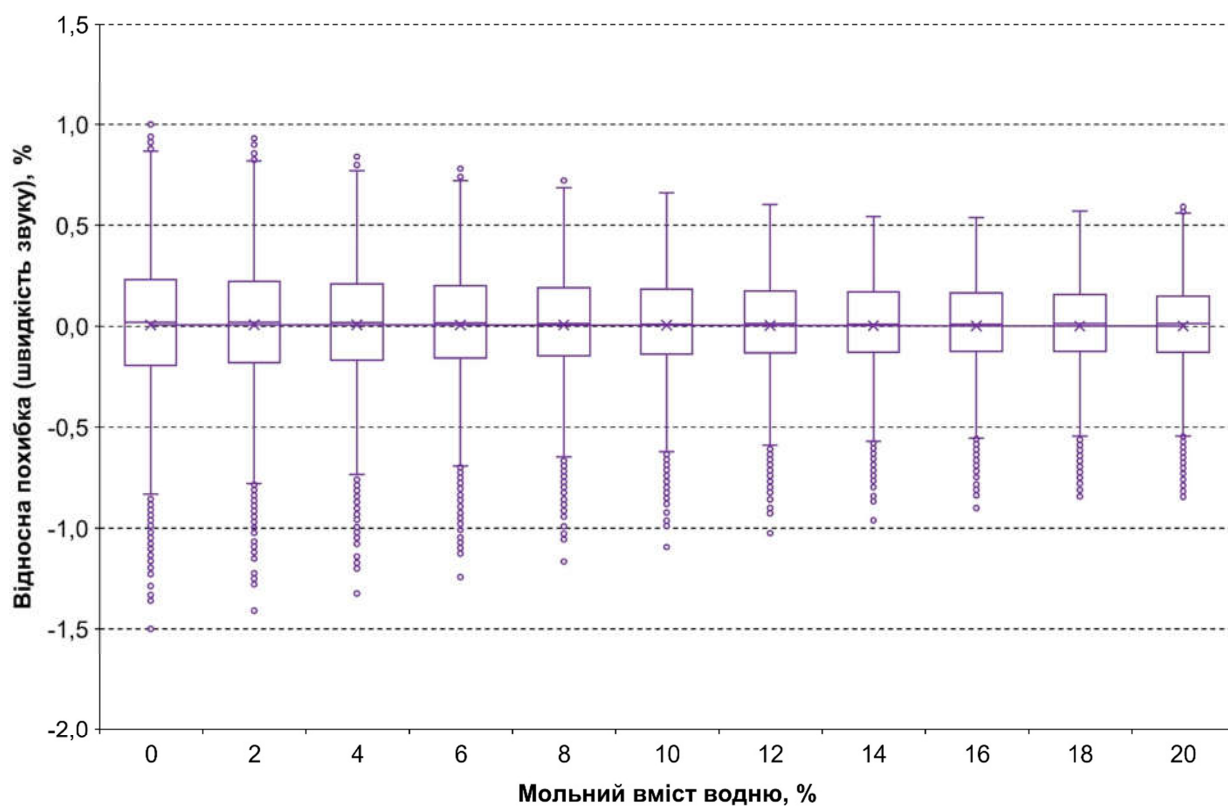


Рисунок 12 – Розподіл відносної похибки моделі швидкості звуку залежно від мольного вмісту водню

– «ящик» (the box) представляє собою інтерквартильний розмах IQR , в межах якого знаходиться 50 % центральних значень вибірки. Нижня межа ящика є першим квартилем Q_1 , що відсікає 25 % найменших значень, а верхня – третім квартилем Q_3 , що відсікає 75 % значень;

– лінія всередині «ящика» – це медіана Q_2 , яка ділить усю вибірку даних навпіл;

– хрестик «x» всередині «ящика» позначає середнє арифметичне значення, що дозволяє оцінити симетрію розподілу (відхилення середнього від медіани);

– лінія середніх значень, що з'єднує хрестики, наочно ілюструє динаміку зміни систематичної похибки (середнього зміщення) моделі залежно від досліджуваного параметра;

– «вуса» (the whiskers) – лінії, що виходять з ящика та візуалізують розмах даних за межами центральної частини, зазвичай до значень, що не виходять за межі $1,5 \cdot IQR$ від першого Q_1 та третього Q_3 квартилів;

– окремі точки за межами «вусів» є викидами (outliers) – аномальними значеннями, що суттєво відрізняються від основної маси даних;

Для моделі фактора стисливості (рис. 4) середнє значення похибки близьке до нуля в усьому діапазоні, що свідчить про відсутність систематичного зміщення. Однак, спостерігається чітка тенденція до збільшення розкиду похибки (зниження прецизійності) зі зростанням тиску.

Залежність показника адіабати (рис. 5) має невелику, але нелінійну систематичну похибку (зміщення в бік додатних значень), що вказує на схильність моделі до завищення результату. При цьому розкид похибки є стабільним і практично не залежить від тиску.

Розподіл похибки для моделі швидкості звуку (рис. 6) характеризується складною нелінійною систематичною похибкою та значно більшим розкидом значень порівняно з іншими моделями. Помітною є наявність значної кількості викидів у бік від'ємних значень при високих тисках, що вказує на схильність моделі до заниження результатів за цих умов.

Аналіз рисунка 7 засвідчує, що прецизійність моделі фактора стисливості суттєво залежить від температури. Найменший розкид похибки спостерігається в діапазоні 273–298 К, тоді як при низьких та високих температурах точність моделі погіршується, особливо при 243 К. Систематичне зміщення при цьому є незначним.

Для моделі показника адіабати (рис. 8) виявлено чітку параболічну залежність систематичної похибки від температури: при крайніх значеннях температури похибка близька до нуля, а в середньому діапазоні спостерігається її зростання до плюс 0,2 %. Розкид значень при цьому залишається стабільним у всьому діапазоні температур.

Похибка моделі швидкості звуку (рис. 9) не демонструє чіткої залежності від температури за розкидом. Однак модель характеризується стабільно великим розкидом значень та значною кількістю негативних викидів, що підтверджує її загальну низьку прецизійність та схильність до заниження результатів незалежно від температурних умов.

Модель фактора стисливості (рис. 10) демонструє покращення прецизійності зі збільшенням вмісту водню. Найбільший розкид похибки спостерігається для чистого природного газу (без водню), а з ростом концентрації водню він помітно звужується. Систематична похибка при цьому залишається близькою до нуля.

Поведінка моделі показника адіабати (рис. 11) є стабільною і практично не залежить від вмісту водню. Як систематична похибка (стале завищення на плюс 0,12 %), так і розкид значень залишаються майже незмінними в усьому діапазоні концентрацій водню.

Розподіл похибки для швидкості розповсюдження звукових коливань (рис. 12) є практично ідентичним як для чистого природного газу, так і для сумішей з 20% водню, що свідчить про системний характер похибок самої моделі.

Висновки

1. Для розробки регресійних моделей згенеровано фундаментальну базу даних, що налічує понад 121 тисячу розрахункових точок, для фактора стисливості, показника адіабати та швидкості звуку. Цей масив даних, отриманий за еталонним рівнянням стану GERG-2008, охоплює широкий діапазон складів газоводневих сумішей, тисків, температур та відносної густини, що забезпечило високу репрезентативність вибірки.

2. На основі проведених багатоваріантних розрахунків розроблено прості інженерні моделі у вигляді нелінійних регресійних рівнянь для оперативного розрахунку фізичних властивостей газоводневих сумішей. Запропоновані рівняння, на відміну від ітераційних обчислень за фундаментальними рівняннями стану, мають пряму аналітичну структуру, що робить їх зручними для практичного застосування.

3. Проведена валідація підтвердила високу прогностичну здатність розроблених моделей. Максимальна відносна похибка для фактора стисливості не перевищує 0,44 % (коефіцієнт детермінації 0,995), для показника адіабати – 0,93 % (0,914), а для швидкості розповсюдження звукових коливань – 1,5 % (0,998), що є прийнятним для більшості інженерних задач. Отримані залежності можна також використувати для природного газу без вмісту водню.

4. Розроблені математичні моделі є готовим інструментом для подальшого удосконалення методики розрахунку параметрів витікання природного газу та газоводневих сумі-

шей із розподільних мереж. Перспективним напрямом є їхня імплементація у нормативні документи, що стосуються розрахунку виробничо-технологічних витрат та втрат газу, для підвищення точності розрахунків в умовах інтеграції водневих технологій.

Подяки

Відсутні.

Конфлікт інтересів

Відсутній.

Список використаних джерел

1. Hydrogen Blending into Natural Gas Pipeline Infrastructure: Review of the State of Technology: technical report / National Renewable Energy Laboratory. Golden, 2022. 71 p. URL: <https://www.nrel.gov/docs/fy23osti/81704.pdf> (дата звернення: 21.10.2025).
2. Regulation (EU) 2024/1789 of the European Parliament and of the Council of 13 June 2024 on the internal markets for renewable and natural gases and for hydrogen. *Official Journal of the European Union*. 2024. L, 2024/1789. URL: https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/?uri=uriserv:OJ.L_.2024.1789.01.0001.01.ENG (дата звернення: 21.10.2025).
3. Green Hydrogen Vision for Ukraine. GH2 Green Hydrogen Organisation. 2024. URL: <https://gh2.org/countries/ukraine> (дата звернення: 21.10.2025).
4. Melaina M. W., Antonia O., Penev M. Blending Hydrogen into Natural Gas Pipeline Networks: A Review of Key Issues. *NREL Technical Report*. 2013. 131 p. URL: <https://docs.nrel.gov/docs/fy13osti/51995.pdf> (дата звернення: 21.10.2025).
5. Haeseldonckx D., D'haeseleer W. The use of the natural-gas pipeline infrastructure for hydrogen transport in a sustainable energy system. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2007. Vol. 32, Iss. 10–11. P. 1381–1386. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2006.10.018](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2006.10.018).
6. Середюк М. Д., Великий С. В. Аналіз методів визначення газодинамічної енерговитратності газових мереж населених пунктів. *Нафтогазова енергетика*. 2022. № 2(38). С. 51–61. DOI: [10.31471/1993-9868-2022-2\(38\)-51-61](https://doi.org/10.31471/1993-9868-2022-2(38)-51-61).
7. Wang Z., Sun J., Liu Z., Wang J. Numerical Research on Leakage Characteristics of Pure Hydrogen/Hydrogen-Blended Natural Gas in Medium- and Low-Pressure Buried Pipelines. *Energies*. 2024. Vol. 17, Iss. 12. P. 2951. DOI: [10.3390/en17122951](https://doi.org/10.3390/en17122951).
8. Про затвердження Методики визначення розмірів нормативних та виробничо-технологічних втрат/витрат природного газу при здійсненні розподілу природного газу: Постанова Національної комісії, що здійснює державне регулювання у сферах енергетики та комунальних послуг від 06.11.2020 № 2033. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/v2033874-20> (дата звернення: 21.10.2025).
9. Никоноров О. Роль газотранспортної інфраструктури України в розвитку водневої енергетики. *Нафтогазова галузь України*. 2020. № 5(47). С. 3–8. URL: https://www.ukrenergexport.com/sites/default/files/2021-02/bulletin_hydrogen_1.pdf (дата звернення: 21.10.2025).
10. Костогриз К., Височанський І., Колесник С. Перші випробування українських газових мереж на водні. *Нафтогазова галузь України*. 2020. № 5(47). С. 24–28. https://www.naftogaz.com/ckeditor_assets/Галузевий%20журнал/Journal-Naftogazova-galuz-05-2020.pdf
11. Казда С., Уніговський Л. Наукове супроводження експериментів транспортування сумішей водню та природного газу розподільними газопроводами. *Нафтогазова галузь України*. 2020. № 5(47). С. 9–14. https://www.naftogaz.com/ckeditor_assets/Галузевий%20журнал/Journal-Naftogazova-galuz-05-2020.pdf

12. Карпаш М. О., Олійник А. П., Райтер П. М., Яворський А. В., Уніговський Л. М. Дослідження герметичності газорозподільних мереж при транспортуванні водню. *Нафтогазова галузь України*. 2020. № 6. С. 24–28. https://www.naftogaz.com/ckeditor_assets/Галузевий%20журнал/Journal-Naftogazova-galuz-05-2020.pdf

13. Середюк М. Д., Великий С. В. Вплив концентрації водню на властивості газозводневих сумішей та газодинамічні процеси в розподільних газових мережах. *Нафтогазова енергетика*. 2023. № 2(40). С. 25–37. DOI: [10.31471/1993-9868-2023-2\(40\)-25-37](https://doi.org/10.31471/1993-9868-2023-2(40)-25-37).

14. Ghafri S. A., Alkhalidi M., Charif A. New Correlation for Hydrogen-Natural Gas Mixture Compressibility Factor. In: *Mechanics, Simulation and Control*. Cham: Springer, 2015. P. 667–674. (Applied Mechanics and Materials; vol. 761). DOI: [10.1007/978-3-319-17527-0_79](https://doi.org/10.1007/978-3-319-17527-0_79).

15. Accurate experimental (p, ρ, T) data of natural gas mixtures for the assessment of reference equations of state when dealing with hydrogen-enriched natural gas / D. Lozano-Martín et al. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2018. Vol. 43, № 49. P. 22356–22374. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2018.10.057](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.10.057).

16. Experimental (ρ, P, T) data of $\text{H}_2 + \text{CH}_4$ mixtures at temperatures from 278 to 398 K and pressures up to 56 MPa / A. Al-Malah et al. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2024. Vol. 65. P. 719–731. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2024.04.220](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.04.220).

17. Impact of hydrogen injection on thermophysical properties and measurement reliability in natural gas networks / M. Cecchini et al. *E3S Web of Conferences*. 2021. Vol. 312. P. 01004. DOI: [10.1051/e3sconf/202131201004](https://doi.org/10.1051/e3sconf/202131201004).

18. ДСТУ EN ISO 20765-2:2022 (EN ISO 20765-2:2018, IDT; ISO 20765-2:2015, IDT). Природний газ. Обчислювання термодинамічних властивостей. Частина 2. Однофазні властивості (газ, рідина та щільний плин) для розширених діапазонів застосування. [Чинний від 2023-12-28]. Київ: ДП «УкрНДНЦ», 2022. 124 с.

19. Kunz O., Wagner W. GERG-2008: A New Equation of State for Natural Gas and Other Mixtures. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 2012. Vol. 57, № 11. P. 3032–3091. DOI: [10.1021/je300655b](https://doi.org/10.1021/je300655b).

20. Calsep: official web-site. URL: <https://www.calsep.com> (дата звернення: 28.08.2025).

21. Кодекс газотранспортної системи: затв. постановою Національної комісії, що здійснює державне регулювання у сферах енергетики та комунальних послуг, від 30.09.2015 № 2493 (у редакції постанови НКРЕКП від 18.10.2024 № 1928). URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z1378-15> (дата звернення: 21.10.2025).

22. Кодекс газорозподільних систем: затв. постановою Національної комісії, що здійснює державне регулювання у сферах енергетики та комунальних послуг, від 30.09.2015 № 2494 (у редакції постанови НКРЕКП від 06.09.2024 № 1668). URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z1379-15> (дата звернення: 21.10.2025).

23. ДСТУ EN ISO 6976:2020 (EN ISO 6976:2016, IDT; ISO 6976:2016, IDT). Природний газ. Обчислення теплоти згоряння, густини, відносної густини та числа Воббе на основі компонентного складу. [Чинний від 2021-01-01]. Київ: ДП «УкрНДНЦ», 2020. 83 с.

24. ISO/TR 29922:2012. Natural gas – Supporting information on the calculation of physical properties according to ISO 6976. Geneva: International Organization for Standardization, 2012. 120 с. URL: <https://www.iso.org/standard/45233.html> (дата звернення: 21.10.2025).

25. Nocedal J., Wright S. J. *Numerical Optimization*. 2nd ed. New York: Springer, 2006. 664 p.

26. Beck A. *Introduction to Nonlinear Optimization: Theory, Algorithms, and Applications with Python and MATLAB*. 2nd ed. Philadelphia: SIAM, 2024. 489 p. DOI: [10.1137/1.9781611977797](https://doi.org/10.1137/1.9781611977797).

References

1. National Renewable Energy Laboratory. (2022). *Hydrogen Blending into Natural Gas Pipeline Infrastructure: Review of the State of Technology* (Technical Report). Golden. URL: <https://www.nrel.gov/docs/fy23osti/81704.pdf>

2. European Parliament and Council. (2024, June 13). *Regulation (EU) 2024/1789 of the European Parliament and of the Council of 13 June 2024 on the internal markets for renewable and natural gases and for hydrogen*. Official Journal of the European Union. L, 2024/1789.

3. GH2 Green Hydrogen Organisation. (2024). *Green Hydrogen Vision for Ukraine*. URL: <https://gh2.org/countries/ukraine>

4. Melaina, M. W., Antonia, O., & Penev, M. (2013). *Blending Hydrogen into Natural Gas Pipeline Networks: A Review of Key Issues* (NREL Technical Report). URL: <https://docs.nrel.gov/docs/fy13osti/51995.pdf>
5. Haeseldonckx, D., & D'haeseleer, W. (2007). The use of the natural-gas pipeline infrastructure for hydrogen transport in a sustainable energy system. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(10–11), 1381–1386. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2006.10.018](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2006.10.018)
6. Serediuk, M. D., & Velykyi, S. V. (2022). Analiz metodiv vyznachennia hazodynamichnoi enerhovytratnosti hazovykh merezh naselenykh punktiv [Analysis of methods for determining the gas-dynamic energy consumption of gas networks populated points]. *Oil and Gas Power Engineering*, (2)38, 51–61. DOI: [10.31471/1993-9868-2022-2\(38\)-51-61](https://doi.org/10.31471/1993-9868-2022-2(38)-51-61) [in Ukrainian]
7. Wang, Z., Sun, J., Liu, Z., & Wang, J. (2024). Numerical Research on Leakage Characteristics of Pure Hydrogen/Hydrogen-Blended Natural Gas in Medium- and Low-Pressure Buried Pipelines. *Energies*, 17(12), 2951. DOI: [10.3390/en17122951](https://doi.org/10.3390/en17122951)
8. Natsionalna komisiia, shcho zdiisniue derzhavne rehuliuвання u sferakh enerhetyky ta komunalnykh posluh. (2020). *Pro zatverdzhennia Metodyky vyznachennia rozmiriv normatyvnykh ta vyrobnycho-tekhnologichnykh vtrat/vytrat pryrodnoho hazu pry zdiisnenni rozpodilu pryrodnoho hazu* [On the approval of the Methodology for determining the sizes of normative and production and technological losses/expenditures of natural gas during the distribution of natural gas] Document v2033874-20, valid, current version — Revision on October 9, 2025, on the basis - v1587874-25. URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/v2033874-20> [in Ukrainian]
9. Nykonorov, O. (2020). Rol hazotransportnoi infrastruktury Ukrainy v rozvytku vodnevoi enerhetyky [The role of gas transport infrastructure of Ukraine in the development of hydrogen energy]. *Oil&gas industry of Ukraine*, 5(47), 3–8. URL: https://www.ukrenergexport.com/sites/default/files/2021-02/bulletin_hydrogen_1.pdf [in Ukrainian]
10. Kostohryz, K., Vysochanskyi, I., & Kolesnyk, S. (2020). Pershi vyprobuвання ukraïnskykh hazovykh merezh na vodni [The first tests of Ukrainian gas networks on hydrogen]. *Oil&gas industry of Ukraine*, 5(47), 24–28. https://www.naftogaz.com/ckeditor_assets/%D0%93%D0%B0%D0%BB%D1%83%D0%B7%D0%B5%D0%B2%D0%B8%D0%B9%20%D0%B6%D1%83%D1%80%D0%BD%D0%B0%D0%BB/Journal-Naftogazova-galuz-05-2020.pdf [in Ukrainian]
11. Kazda, S., & Unihovskyi, L. (2020). Naukove suprovodzhennia eksperymentiv transportuvannia sumishei vodniu ta pryrodnoho hazu rozpodilnymy hazoprovodamy [Scientific support of experiments on the transportation of hydrogen and natural gas mixtures through distribution gas pipelines]. *Oil&gas industry of Ukraine*, 5(47), 9–14. https://www.naftogaz.com/ckeditor_assets/%D0%93%D0%B0%D0%BB%D1%83%D0%B7%D0%B5%D0%B2%D0%B8%D0%B9%20%D0%B6%D1%83%D1%80%D0%BD%D0%B0%D0%BB/Journal-Naftogazova-galuz-05-2020.pdf [in Ukrainian]
12. Karpash, M. O., Oliinyk, A. P., Raiter, P. M., Yavorskyi, A. V., & Unihovskyi, L. M. (2020). Doslidzhennia hermetychnosti hazorozpodilnykh merezh pry transportuvanni vodniu [Estimation of probabilities of occurrence of factors of negative influence at emergency explosion of hydrogen and hydrogen-gas mixes]. *Naftogazova haluz Ukrainy*, 6, 24–28. https://www.naftogaz.com/ckeditor_assets/%D0%93%D0%B0%D0%BB%D1%83%D0%B7%D0%B5%D0%B2%D0%B8%D0%B9%20%D0%B6%D1%83%D1%80%D0%BD%D0%B0%D0%BB/Journal-Naftogazova-galuz-05-2020.pdf [in Ukrainian]
13. Serediuk, M. D., & Velykyi, S. V. (2023). Vplyv kontsentratsii vodniu na vlastyvyosti hazovodniovykh sumishei ta hazodynamichni protsesy v rozpodilnykh hazovykh merezhakh [Influence of hydrogen concentration on the properties of gas-hydrogen mixtures and gas-dynamic processes in gas distribution networks]. *Oil and Gas Power Engineering*, 2(40), 25–37. DOI: [10.31471/1993-9868-2023-2\(40\)-25-37](https://doi.org/10.31471/1993-9868-2023-2(40)-25-37) [in Ukrainian]
14. Ghafri, S. A., Alkhalidi, M., & Charif, A. (2015). New Correlation for Hydrogen-Natural Gas Mixture Compressibility Factor. In *Mechanics, Simulation and Control*, 761, 667–674. Springer. DOI: [10.1007/978-3-319-17527-0_79](https://doi.org/10.1007/978-3-319-17527-0_79)
15. Lozano-Martín, D., et al. (2018). Accurate experimental (p, ρ, T) data of natural gas mixtures for the assessment of reference equations of state when dealing with hydrogen-enriched natural gas. *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(49), 22356–22374. DOI: [10.1016/j.ijhydene.2018.10.057](https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.10.057)

16. Al-Malah, A., et al. (2024). Experimental (ρ , P, T) data of $\text{H}_2 + \text{CH}_4$ mixtures at temperatures from 278 to 398 K and pressures up to 56 MPa. *International Journal of Hydrogen Energy*, 65, 719–731. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2024.04.220
17. Cecchini, M., et al. (2021). Impact of hydrogen injection on thermophysical properties and measurement reliability in natural gas networks. *E3S Web of Conferences*, 312, 01004. DOI: 10.1051/e3sconf/202131201004
18. Derzhstandart Ukrainy. (2022). *DSTU EN ISO 20765-2:2022 (EN ISO 20765-2:2018, IDT; ISO 20765-2:2015, IDT). Pryrodnyi haz. Obchysliuvannia termodynamichnykh vlastyvostei. Chastyna 2. Odnofazni vlastyvosti (haz, ridyna ta shchilnyi plyn) dlia rozshyrenykh diapazoniv zastosuvannia* [Natural gas. Calculation of thermodynamic properties. Part 2. Single-phase properties (gas, liquid and dense fluid) for extended application ranges]. DP «UkrNDNTs». https://online.budstandart.com/ua/catalog/doc-page.html?id_doc=116893 [in Ukrainian]
19. Kunz, O., & Wagner, W. (2012). GERG-2008: A New Equation of State for Natural Gas and Other Mixtures. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 57(11), 3032–3091. DOI: 10.1021/je300655b
20. Calsep: official web-site. (n.d.). Retrieved October 22, 2025, from <https://www.calsep.com>
21. Natsionalna komisiia, shcho zdiisniuie derzhavne rehuliuвання u sferakh enerhetyky ta komunalnykh posluh. (2015). *Kodeks hazotransportnoi systemy* [Gas Transmission System Code] (Postanova № 2493). URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z1378-15> [in Ukrainian]
22. Natsionalna komisiia, shcho zdiisniuie derzhavne rehuliuвання u sferakh enerhetyky ta komunalnykh posluh. (2015). *Kodeks hazorozpodilnykh system* [Gas Distribution Systems Code] (Postanova № 2494). URL: <https://zakon.rada.gov.ua/laws/show/z1379-15> [in Ukrainian]
23. Derzhstandart Ukrainy. (2020). *DSTU EN ISO 6976:2020 (EN ISO 6976:2016, IDT; ISO 6976:2016, IDT). Pryrodnyi haz. Obchyslennia teploty zhoriantia, hustyny, vidnosnoi hustyny ta chysla Vobbe na osnovi komponentnoho skladu* [Natural gas. Calculation of calorific value, density, relative density and Wobbe index from compositional analysis]. DP «UkrNDNTs». [in Ukrainian]
24. International Organization for Standardization. (2012). *ISO/TR 29922:2012. Natural gas – Supporting information on the calculation of physical properties according to ISO 6976*. Geneva. URL: <https://www.iso.org/standard/45233.html>
25. Nocedal, J., & Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization* (2nd ed.). Springer.
26. Beck, A. (2024). *Introduction to Nonlinear Optimization: Theory, Algorithms, and Applications with Python and MATLAB* (2nd ed.). SIAM. DOI: 10.1137/1.9781611977797

MODELLING THE PROPERTIES OF GAS-WATER MIXTURES FOR FORECASTING LEAKAGE PARAMETERS FROM DISTRIBUTION NETWORKS

Kopachuk N. V.

Senior Workman

Ivano-Frankivsk Branch of LLC "Gas Distribution Networks of Ukraine"

Lenkavskogo Str., 20, Ivano-Frankivsk, 76010, Ukraine

<https://orcid.org/0009-0001-7642-7487>

e-mail: nazar.kopachuk-a18522@nung.edu.ua

Hryhorskyi S. Ya.

Candidate of geological sciences, associate professor

Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas

Karpatska Str., 15, Ivano-Frankivsk, 76019, Ukraine

<https://orcid.org/0000-0001-6401-0345>

e-mail: stanislav.hryhorskyi@nung.edu.ua

Abstract. Simple engineering mathematical models have been developed and validated to determine the key thermodynamic properties that form the basis for improving the accuracy of predicting leakage parameters of hydrogen-natural gas mixtures under the conditions of gas distribution networks. To create a reliable benchmark database for model development, a comprehensive array of values was generated in the PVTsim Nova software package using the fundamental GERG-2008 equation of state. The study encompassed fifty base component compositions of natural gas, reflecting the variability of its quality in the real networks of Ukraine. The modeling was performed for absolute pressures from 0.1 to 1.3 MPa and temperatures from 243.15 to 323.15 K, which fully covers the operating range of distribution networks. The molar content of hydrogen in the gas mixture varied from 0 to 20%. Based on the obtained data, power-law regression equations were developed to calculate the compressibility factor, adiabatic index, and speed of sound as functions of pressure, temperature, the relative density of the mixture with respect to air, and the molar concentration of hydrogen. Validation of the developed models was conducted by comparison with the benchmark data, establishing the high accuracy and adequacy of the proposed equations throughout the entire investigated range. It was determined that for the compressibility factor model, the maximum absolute relative error is 0.44%, and the coefficient of determination is 0.995. For the adiabatic index, the corresponding values are 0.93% and 0.914; for the speed of sound – 1.5% and 0.998. An analysis of the error distribution confirmed the stability of the models and revealed only minor systematic biases for the adiabatic index and speed of sound, which depend on the hydrogen content. The proposed mathematical models have a simple analytical structure and do not require iterative procedures, allowing for their direct implementation into engineering methodologies for the rapid calculation of leakage parameters and production-technological expenditures and losses of gas in distribution networks.

Keywords: compressibility factor; adiabatic index; speed of sound; gas-hydrogen mixture; gas leakage; fundamental equation of state of gas; production and technological costs and losses.