

УДК 536.7

Оригинальная статья

Расчёт изобар уравнения состояния диоксида углерода и метана в интервале давлений от 2 до 20 МПа

Р.А. Магомедов, Э.Н. Ахмедов

Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики – филиал
ФГБУН Объединенного института высоких температур Российской академии наук
367030, Россия, Махачкала, пр-т. И. Шамиля, 39А
aen-code@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.373

Аннотация: В работе представлен расчёт изобар уравнения состояния диоксида углерода и метана в диапазоне давлений от 2 до 20 МПа при помощи фрактального уравнения состояния и программного модуля Fract EOS. Ранее было показано, что для диоксида углерода температурная зависимость подгоночного параметра α отсутствует. Для метана выяснено, что температурная зависимость не значительна и ослабевает при приближении к 1000 К. Это позволило для данных веществ аппроксимировать зависимость α от плотности полиномом и использовать его в расчётах при любых температурах. Далее, для того чтобы применить предлагаемую модель для расчёта изобар данных веществ, было рассчитано множество изотерм с небольшим шагом температуры. Затем, на каждой изотерме выбрана точка с необходимым давлением. Полученные результаты показывают хорошее согласие с экспериментальными данными. Предложенное уравнение состояния подходит для исследования важных для промышленности веществ, таких как диоксид углерода и метан.

Ключевые слова: уравнение состояния, интегро-дифференцирование дробного порядка, соотношения Максвелла, потенциал Гельмгольца, статистическая сумма, диоксид углерода, метан, изобара, теплофизические свойства.

1. Введение

В настоящее время активно ведутся исследования диоксида углерода (CO_2) и метана (CH_4) [1-6]. Оба вещества используются во многих областях промышленности: металлургии, машиностроении, химической промышленности, пищевой промышленности, производстве лазеров, а также в медицине и быту.

Экономическое развитие и индустриализация стран ведет к увеличению количества автомобилей и соответственно выбросу выхлопных газов в атмосферу. Все возрастающее производство (более 80% автотранспорта до сих пор работают на бензине (дизеле), особенно в развивающихся странах) и обслуживание автомобилей увеличивают промышленные выбросы и приводят к изменению климата, что ведет к созданию альтернативных источников энергии, в том числе так называемой «зеленой» энергетики. Составляющими такой энергетики является водородная энергетика (получение водорода и производства ДВС на водороде для автотранспорта) и получение синтетических топлив для автомобилей (моторов). Для промышленного производства водорода и синтетических моторных топлив могут быть использованы диоксид углерода и метан. Обе технологии получили развитие в начале XXI века в

© Р.А. Магомедов, Э.Н. Ахмедов, 2024

странах ЕС, США и Канаде [7].

Ввиду выше изложенного, актуальным остаётся вопрос изучения теплофизических свойств углекислого газа и метана, в том числе построения математических моделей, способных с высокой точностью произвести расчёт изотерм и изобар уравнения состояния.

2. Модель расчёта

Используя математический аппарат интегро-дифференцирования дробного порядка [8, 9] можно обобщить классическую термодинамику и статистическую физику [10], в том числе и соотношения Максвелла [11]. Для вывода уравнения состояния и последующего расчета теплофизических свойств веществ, используется потенциал Гельмгольца.

Исходя из производных дробного порядка для полного дробного дифференциала потенциала Гельмгольца

$$d^\alpha F = -\frac{P \cdot V^{1-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} dV^\alpha, \quad (1)$$

получим

$$P = -\frac{\Gamma(2-\alpha)}{V^{1-\alpha}} \frac{\partial^\alpha F}{\partial V^\alpha} \Big|_T. \quad (2)$$

Здесь α – показатель производной дробного порядка ($0 < \alpha \leq 1$), $F = -kT \ln Z$ – потенциал Гельмгольца, $Z = \sum_i \exp(-\varepsilon_i / kT)$ – статистическая сумма [10].

Производная дробного порядка определяется выражением:

$$\frac{\partial^\alpha F(V)}{\partial V^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \frac{\partial}{\partial V} \int_0^V \frac{F(v)}{(V-v)^\alpha} dv. \quad (3)$$

Для $\alpha=1$ выражения (1)-(2) совпадают с соответствующими выражениями традиционной термодинамики. Для $\alpha \neq 1$, исходя из выражения для статистической суммы газа и выражения (2), можно получить следующее однопараметрическое фрактальное уравнение состояния со вторым вириальным коэффициентом для реальных газов [12]:

$$P = \rho R_g T \left\{ 1 + \rho B + (1-\alpha) \left[\ln \left(\frac{eM}{\rho N_A} \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \right) + \psi(1) - \psi(2-\alpha) - \rho B \right] \right\}. \quad (4)$$

Здесь P – давление (Па), ρ – плотность (кг/м³), $R_g = R/M$ – удельная газовая постоянная (Дж/(кг·К)), T – температура (К), B – второй вириальный коэффициент (м³/кг), e – экспонента, M – молярная масса (кг/моль), N_A – число Авогадро (моль⁻¹), m – масса молекулы (атома) (кг), k – постоянная Больцмана (Дж/К), $\hbar$ – постоянная Планка (Дж·с), $\psi(x) = \Gamma'(x)/\Gamma(x)$ – логарифмическая производная Гамма-функции [13]. Слагаемые внутри скобок выражения (4), при подстановке единиц измерения, преобразуются в безразмерный результат. Множители под

логарифмом также, после подстановки единиц измерения, дают безразмерный результат. Единицей измерения произведения $\rho R_g T$ является Паскаль. Таким образом, Формула (4) не является интерполяционной, а есть аналитическое выражение для фрактального уравнения состояния, полученное, используя математический аппарат интегро-дифференцирования дробного порядка. При $\alpha=1$ уравнение (4) преобразуется в классическое уравнение состояния реального газа. Можно утверждать, что переход к дробной производной в термодинамике означает неявный учет взаимодействия между частицами, поскольку уравнение состояния (4) является фрактальным уравнением состояния, отличным от уравнения состояния идеального газа.

Подробно вывод уравнения состояния приведён в работах [12, 14].

3. Расчёт изобар

Важным преимуществом предлагаемой модели, в отличие от других моделей, которые могут содержать десятки подгоночных параметров, является то, что в нашем случае, подгоночным является только показатель производной дробного порядка α . Однако, с его определением могут возникать трудности. Так в работах [15, 16], на примере водяного пара, показано, что α зависит, как от плотности вещества, так и от его температуры. Поэтому α нужно подгонять для каждой экспериментальной точки изотермы. В результате, для каждой температуры мы имеем целое семейство немного отличающихся расчётных изотерм. Характер зависимости α от плотности и температуры для различных веществ различен, что вероятно обусловлено разными теплофизическими свойствами веществ. В работе [17] показано, что для диоксида углерода α зависит только от плотности и не зависит от температуры. Похожие результаты получены и для метана. Выяснено, что температурная зависимость α в случае метана не значительна и ослабевает при приближении к 1000 К. Это позволяет для данных веществ аппроксимировать зависимость $\alpha(\rho)$ полиномом и использовать его в расчётах при любых температурах. Тогда, рассчитав множество изотерм с небольшим шагом температуры, можно перейти к изобарам, находя на каждой изотерме точку с необходимым давлением.

Для диоксида углерода расчётные параметры следующие: молярная масса $M(\text{CO}_2)=44,01 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, молекулярная масса $m(\text{CO}_2)=7,308 \cdot 10^{-26}$ кг. На рис. 1 показан результат расчёта для давлений 2, 5, 10 и 20 МПа в сравнении с экспериментом. Символами отмечены данные из [18], линиями показан расчёт. Как видно из рисунка, расчёт хорошо согласуется с экспериментом.

Для метана использованы следующие расчётные параметры:

молярная масса $M(\text{CH}_4)=16,043 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, молекулярная масса $m(\text{CH}_4)=2,664 \cdot 10^{-26}$ кг. На рис. 2 показан результат расчёта для давлений 2, 5, 10 и 20 МПа. Символами отмечены данные из [19, 20], линиями показан расчёт. Для CH_4 слабая температурная зависимость α приводит к небольшим отклонениям расчёта при малых температурах и высоких давлениях.

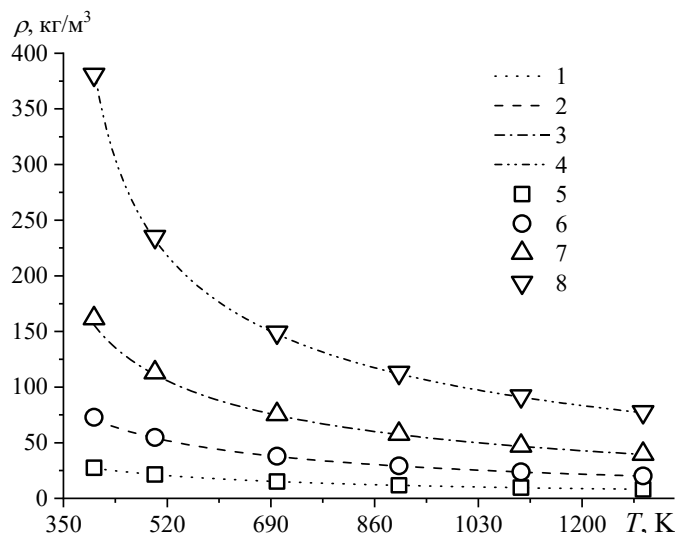


Рис. 1. Изобары уравнения состояния CO_2 в сравнении с экспериментом. Линии 1 – 4 представляют расчёт для 2, 5, 10 и 20 МПа. Символы 5 – 8 отвечают данным из [18] для 2, 5, 10 и 20 МПа.

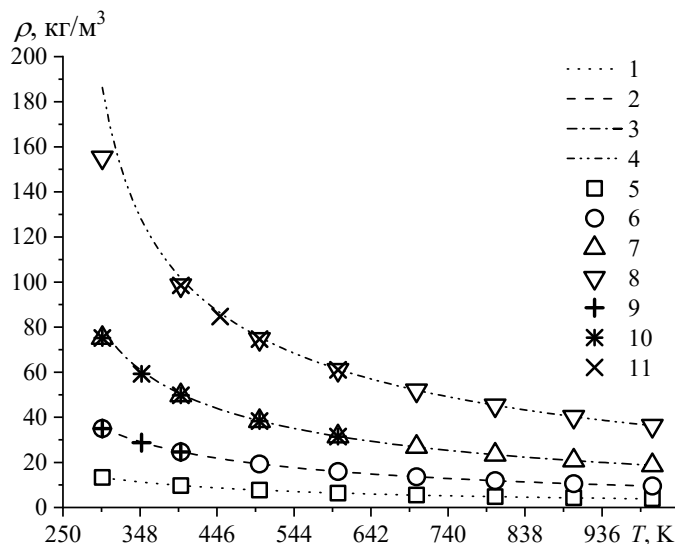


Рис. 2. Изобары уравнения состояния CH_4 в сравнении с экспериментом. Линии 1 – 4 представляют расчёт для 2, 5, 10 и 20 МПа. Символы 5 – 8 отвечают данным из [19] для 2, 5, 10 и 20 МПа. Символы 9 – 11 отвечают данным из [20] для 5, 10 и 20 МПа.

Полином, аппроксимирующий зависимость $\alpha(\rho)$, использованный в расчётах, имеет следующий вид:

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^{b_0}. \quad (5)$$

Здесь переменная x означает плотность ρ , а $f(x)$ – показатель

производной дробного порядка α . Точные значения коэффициентов полинома (5), использованные для расчёта изобар CO_2 , следующие:

$$a_0 = 0,999995, a_1 = -9,45736 \cdot 10^{-6}, a_2 = -1,52417 \cdot 10^{-11}, b_0 = 3,31645.$$

При расчёте изобар CH_4 для определения подгоночного параметра α в каждой точке, также использовался полином (5). Несмотря на то, что для метана помимо плотностной зависимости α , наблюдается слабая температурная зависимость, в расчётах она не учитывалась. Все расчёты для метана проведены с использованием зависимости $\alpha(\rho)$, полученной для температуры 1000 К. Точные значения коэффициентов полинома (5), использованные для CH_4 , следующие:

$$a_0 = 0,999921, a_1 = 6,97999 \cdot 10^{-6}, a_2 = -1,49715 \cdot 10^{-7}, b_0 = 2,26417.$$

В итоговом выражении для уравнения состояния (4) используется второй вириальный коэффициент B . В рамках данной модели, его значения считаются постоянными и для каждой температуры определяются из литературы. Для CO_2 значения B взяты из [21], для CH_4 – из [19]. Так как, при расчёте изобары, температура меняется с маленьким шагом, литературные значения B также требуются для всех промежуточных температур. Однако в литературных источниках значения B приведены только для ключевых температур. Поэтому, для определения промежуточных данных, литературные значения были аппроксимированы полиномом. Для аппроксимации также использовался полином (5). В этом случае переменная x означает температуру T , а $f(x)$ – второй вириальный коэффициент B . Значения подгоночных констант для CO_2 следующие:

$$a_0 = 10,9442 \cdot 10^{-4}, a_1 = -2,11498 \cdot 10^{-8}, a_2 = -5,38253, b_0 = -1,30157.$$

В случае CH_4 подгоночные константы имеют следующие значения:

$$a_0 = 21,7694 \cdot 10^{-4}, a_1 = 3,50391 \cdot 10^{-7}, a_2 = -18,4744, b_0 = -1,43853.$$

4. Заключение

Таким образом, произведён расчёт изобар уравнения состояния диоксида углерода и метана в диапазоне давлений от 2 до 20 МПа при помощи фрактального уравнения состояния и специально разработанного программного обеспечения Fract EOS [22]. Благодаря тому, что для CO_2 подгоночный параметр α в исследуемом диапазоне температур зависит только от плотности и не зависит от температуры, а для CH_4 температурная зависимость α не значительна и ослабевает при приближении к 1000 К, стало возможным легко перейти от расчёта изотерм к изобарам. Для этого произведён расчёт множества изотерм с небольшим шагом температуры и на каждой изотерме выбрана точка с необходимым давлением. В каждой точке уравнения состояния значение α

определялось из полинома, аппроксимирующего его плотностную зависимость. Результаты расчёта хорошо согласуются с экспериментальными данными. Для CH_4 слабая температурная зависимость α приводит к небольшим отклонениям расчёта при малых температурах и высоких давлениях.

Полученные результаты показывают эффективность применения фрактального однопараметрического уравнения состояния для исследования веществ, таких как диоксид углерода и метан.

Библиографический список:

1. Каплун, А.Б. Метод расчета термодинамических свойств диоксида углерода в области давлений до 200 МПа / А.Б. Каплун, А.Б. Мешалкин // Журнал физической химии. – 2019. – Т. 93. – Вып. 9. – С. 1289-1296. DOI: 10.1134/S0044453719090085.
2. Lees, E.W. Gas diffusion electrodes and membranes for CO₂ reduction electrolyzers / E.W. Lees, B.A.W. Mowbray, F.G.L. Parlane, C.P. Berlinguette // Nature Reviews Materials. – 2022. – V. 7. – I. 1. – P. 55-64. DOI: 10.1038/s41578-021-00356-2.
3. Al Rowaihi, I. A two-stage biological gas to liquid transfer process to convert carbon dioxide into bioplastic / I. Al Rowaihi, B. Kick, S.W. Grötzinger et al. // Bioresource Technology Reports. – 2018. – V. 1. – P. 61-68. DOI: 10.1016/j.biteb.2018.02.007.
4. Баянов, И.М. Моделирование процесса горения гидрата метана с учетом неполного испарения выделившейся воды при его диссоциации / И.М. Баянов, И.К. Гималтдинов, М.В. Столповский // Теплофизика высоких температур. – 2023. – Т. 61. – Вып. 2. – С. 251-257. DOI: 10.31857/S0040364423020011.
5. Yang, H. Methane concentration measurement method in rain and fog coexisting weather based on TDLAS / H. Yang, X. Bu, Y. Song, Y. Shen // Measurement. – 2022. – V. 204. – Art. № 112091. DOI: 10.1016/j.measurement.2022.112091.
6. Sussmann, R. Strategy for high-accuracy-and-precision retrieval of atmospheric methane from the mid-infrared FTIR network / R. Sussmann, F. Forster, M. Rettinger, N. Jones // Atmospheric Measurement Techniques. – 2011. – V. 4. – I. 9. – P. 1943-1964. DOI: 10.5194/amt-4-1943-2011.
7. Брагинский, О.Б. Альтернативные моторные топлива. Мировые тенденции и выбор для России / О.Б. Брагинский // Российский химический журнал. – 2008. – Т. LI. – № 6. – С. 137-146.
8. Самко, С.Г. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения / С.Г. Самко, А.А. Килбас, О.И. Маричев. – Минск: Наука и техника, 1987. – 688 с.
9. Kilbas, A.A. Theory and applications of fractional differential equations / A.A. Kilbas, H.M. Srivastava, J.J. Trujillo. – North-Holland, Amsterdam: Elsevier, 2006. – 540 p.
10. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика в 10 т. Т. 5, Ч. 1: Статистическая физика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2002. – 616 с.
11. Сивухин, Д.В. Общий курс физики: в 5 т. Т. 2: Термодинамика и молекулярная физика / Д.В. Сивухин. – М.: Физматлит, 2005. – 544 с.
12. Meilanov, R.P. Thermodynamics in fractional calculus / R.P. Meilanov, R.A. Magomedov // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. – 2014. – V. 87. – I. 6. – P. 1521-1531. DOI: 10.1007/s10891-014-1158-2.
13. Янке, Е. Специальные функции и формулы, графики, таблицы / Е. Янке, Ф. Эдме, Ф. Лёш; пер. с 6-го перераб. нем. изд. под ред. Л.И. Седова. – М.: Наука, 1964. – 344 с.
14. Magomedov, R.A. Generalization of thermodynamics in of fractional-order derivatives and calculation of heat-transfer properties of noble gases / R.A. Magomedov, R.R. Meilanov, R.P. Meilanov et al. // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. – 2018. – V. 133. – I. 2. – P. 1189-1194. DOI: 10.1007/s10973-018-7024-2.
15. Магомедов, Р.А. Зависимость изотермы водяного пара от точности определения подгоночного параметра / Р.А. Магомедов, Э.Н. Ахмедов // Инженерно-физический журнал. – 2023. – Т. 96. – № 4. – С. 1062-1067.
16. Магомедов, Р.А. Расчёт Р-р-Т свойств водяного пара в диапазоне температур от 773 К до 1673 К / Р.А. Магомедов, Э.Н. Ахмедов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 298-306. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.298.
17. Магомедов, Р.А. Расчёт Р-р-Т Свойств CO₂ в диапазоне температур от $T = 400$ К до $T = 1700$ К /

- Р.А. Магомедов, Э.Н. Ахмедов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С. 274-281. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.274.
18. Алтунин, В.В. Таблицы стандартных справочных данных. Диоксид углерода жидкий и газообразный: ГСССД 96-86 / В.В. Алтунин. – М.: Издательство стандартов, 1986, 25 с.
19. **Сычев, В.В.** Термодинамические свойства метана: ГСССД. Серия монографии / В.В. Сычев, А.А. Вассерман, В.А. Загорученко и др. – М.: Издательство стандартов, 1979, 348 с.
20. **Frolov, S.M.** Real-gas properties of n-alkanes, O₂, N₂, H₂O, CO, CO₂, and H₂ for diesel engine operation conditions / S.M. Frolov, N.M. Kuznetsov, C. Krueger // *Russian Journal of Physical Chemistry B*. – 2009. – V. 3. – I. 8. – P. 1191-1252. DOI: 10.1134/S1990793109080090.
21. Физические величины. Справочник / под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергия. 1991. – 1232 с.
22. **Свидетельство № 2021661219 Российская Федерация.** Fract EOS / Э.Н. Ахмедов, Р.А. Магомедов, А.А. Аливердиев; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук. – № 2021617802; заявл. 24.05.2021; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ 07.07.2021. – 1 с.

References:

1. Kaplun A.B., Meshalkin A.B. Calculating the thermodynamic properties of carbon dioxide in the range of pressures up to 200 MPa, *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2019, vol. 93, no. 9, pp. 1641-1648. DOI: 10.1134/S0036024419090073.
2. Lees E.W., Mowbray B.A.W., Parlane F.G.L., Berlinguette C.P. Gas diffusion electrodes and membranes for CO₂ reduction electrolyzers, *Nature Reviews Materials*, 2022, vol. 7, no. 1, pp. 55-64. DOI: 10.1038/s41578-021-00356-2.
3. Al Rowaihi I., Kick B., Grötzinger S.W. et al. A two-stage biological gas to liquid transfer process to convert carbon dioxide into bioplastic, *Bioresource Technology Reports*, 2018, vol. 1, pp. 61-68. DOI: 10.1016/j.biteb.2018.02.007.
4. Bayanov I.M., Gimaltdinov I.K., Stolpovsky M.V. Simulation of the combustion process of methane hydrate taking into account incomplete evaporation of released water during its dissociation, *High Temperature*, 2023, vol. 61, issue 2, pp. 229-234. DOI: 10.1134/S0018151X23020013.
5. Yang H., Bu X., Song Y., Shen Y. Methane concentration measurement method in rain and fog coexisting weather based on TDLAS, *Measurement*, 2022, vol. 204, art. no. 112091. DOI: 10.1016/j.measurement.2022.112091.
6. Sussmann R., Forster F., Rettinger M., Jones N. Strategy for high-accuracy-and-precision retrieval of atmospheric methane from the mid-infrared FTIR network, *Atmospheric Measurement Techniques*, 2011, vol. 4, issue 9, pp. 1943-1964. DOI: 10.5194/amt-4-1943-2011.
7. Braginskiy O.B. Al'ternativnye motornye topliva. Mirovye tendentsii i vybor dlya Rossii [Alternative motor fuels. Global trends and choices for Russia], *Rossiiskiy khimicheskiy zhurnal [Russian Chemical Journal]*, 2008, vol. LII, no. 6, pp. 137-146. (In Russian).
8. Samko S.G., Kilbas A.A., Marichev O.I. *Integrals i proizvodnye drobnogo poryadka i nekotorye ikh prilozheniya [Fractional integrals and derivatives and some of their applications]*. Minsk, Nauka i tekhnika Publ., 1987, 688 p. (In Russian).
9. Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J. *Theory and applications of fractional differential equations*. North-Holland, Amsterdam, Elsevier, 2006, 540 p.
10. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Teoreticheskaya fizika. Tom 5, Chast' 1: Statisticheskaya fizika* [Theoretical physics. Vol. 5, Part 1: Statistical physics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2002, 616 p. (In Russian).
11. Sivukhin D.V. *Obschiy kurs fiziki. Tom 2: Termodinamika i molekulyarnaya fizika* [General course of physics. Vol. 2: Thermodynamics and molecular physics]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2005, 544 p. (In Russian).
12. Meilanov R.P., Magomedov R.A. Thermodynamics in fractional calculus, *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2014, vol. 87, issue 6, pp. 1521-1531. DOI: 10.1007/s10891-014-1158-2.
13. Jahnke E., Edme F., Lösch F. *Tafeln, höherer funktionen seschste auflage neubearbeitet*. Stuttgart, Verlagsgesellschaft, 1960, XII+318 s.
14. Magomedov R.A., Meilanov R.R., Meilanov R.P. et al. Generalization of thermodynamics in of fractional-order derivatives and calculation of heat-transfer properties of noble gases, *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2018, vol. 133, issue 2, pp. 1189-1194. DOI: 10.1007/s10973-018-7024-2.
15. Magomedov R.A., Akhmedov E.N. Water vapor isotherm as a function of the accuracy of determination of an adjustable parameter, *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, 2023, vol. 96, issue 4, pp. 1060-1065. DOI: 10.1007/s10891-023-02770-5.
16. Magomedov R.A., Akhmedov E.N. Raschet P-p-T svoistv vodyanogo para v diapazone temperature ot 773 K

do 1673 K [Water vapor P-p-T properties calculation in the temperature range from 773 K to 1673 K], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2022, issue 14, pp. 446-452. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.298. (In Russian).

17. Magomedov R.A., Akhmedov E.N. Raschet P-p-T svoistv CO₂ v diapazone temperature ot $T=400$ K do $T=1700$ K [Calculation of CO₂ P-p-T properties in the temperature range from $T=400$ K to $T=1700$ K], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2023, issue 15, pp. 274-281. DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.274. (In Russian).

18. Altunin V.V. GSSSD 96-86. *Tablitsy standartnykh spravochnykh dannykh. Dioksid ugleroda zhidkij i gazoobraznyj* [Tables of standard reference data. Carbon dioxide liquid and gaseous]. Moscow, IPK Standartov Publ., 1986, 25 p. (In Russian).

19. Sychev V.V., Vasserman A.A., Zagoruchenko V.A. et al. *Termodinamicheskie svoistva metana: GSSSD. Seriya monografii* [Thermodynamic properties of methane: GSSSD. Monograph series]. Moscow, IPK Standartov Publ., 1979, 348 p. (In Russian).

20. Frolov S.M., Kuznetsov N.M., Krueger C. Real-gas properties of n-alkanes, O₂, N₂, H₂O, CO, CO₂, and H₂ for diesel engine operation conditions, *Russian Journal of Physical Chemistry B*, 2009, vol. 3, issue 8, pp. 1191-1252. DOI: 10.1134/S1990793109080090.

21. *Fizicheskie velichiny. Spravochnik* [Physical quantities. Handbook], ed. by I.S. Grigor'eva, E.Z. Mejlikhova, Moscow, Energiya Publ., 1991, 1232 p. (In Russian).

22. Akhmedov E.N., Magomedov R.A., Aliverdiev A.A. Fract EOS. Certificate RF, no 2021661219, 2021. (In Russian).

Original paper

**Calculation of state equation isobars of carbon dioxide and methane in pressure interval
from 2 to 20 MPa**

R.A. Magomedov, E.N. Akhmedov

*Institute for Geothermal Research and Renewable Energy of the Joint Institute for High Temperatures of
the Russian Academy of Sciences, Makhachkala, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.373

Abstract: The paper presents the calculation results for the state equation isobars of carbon dioxide and methane in the pressure range from 2 to 20 MPa. The calculations have been performed by using the fractal equation of state and the Fract EOS software. It was previously shown that for carbon dioxide there is no temperature dependence of the fitting parameter α . For methane, it was found that the temperature dependence is not significant and weakens approaching to 1000 K. This allowed for considered substances to approximate the dependence of α on the density by a polynomial and use it in calculations at any temperature. Next, in order to apply the proposed model for calculating isobars, a set of isotherms with a small temperature step has been calculated. Then, a point with the required pressure was selected on each isotherm. The obtained results show a good agreement with experimental data. The proposed equation of state is suitable for studying industrially important substances such as carbon dioxide and methane.

Keywords: *equation of state, integral-differentiation of fractional order, Maxwell relations, Helmholtz potential, partition function, carbon dioxide, methane, isobar, isotherm, thermophysical properties.*

Магомедов Рамазан Абдуллаевич – старший научный сотрудник, Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики – филиал ФГБУН Объединенного института высоких температур Российской академии наук

Ахмедов Энвер Нариманович – научный сотрудник, Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики – филиал ФГБУН Объединенного института высоких температур Российской академии наук

Ramazan A. Magomedov – Senior Researcher, Institute for Geothermal Researches and Renewable Energy, Institute for Geothermal Research and Renewable Energy of the Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences

Enver N. Akhmedov – Researcher, Institute for Geothermal Researches and Renewable Energy, Institute for Geothermal Research and Renewable Energy of the Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences

Поступила в редакцию/received: 11.08.2024; после рецензирования/revised: 02.09.2024; принята/accepted 07.09.2024.