УДК 536.7 *Оригинальная статья*

Расчет P-ρ-T свойств инертных газов при помощи фрактального уравнения состояния в диапазоне температур от 500 до 3000 К

Р.А. Магомедов, Э.Н. Ахмедов

Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики – филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук

367030, Россия, Махачкала, пр-т. И. Шамиля, 39А

aen-code@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.256

Аннотация: В работе представлен расчёт изотерм уравнения состояния инертных газов: неона, аргона, криптона и ксенона в интервале температур от 500 до 3000 К. Расчёт произведён при помощи математической модели на основе фрактального уравнения состояния, которая ранее показала высокую эффективность при расчёте *P-ρ-T* свойств других веществ. Полученные результаты хорошо согласуются с литературными справочными данными. Определена зависимость подгоночного параметра α фрактального уравнения состояния от плотности для различных температур. Обнаружено, что для неона, криптона и ксенона плотностная зависимость α невелика, однако заметна температурная зависимость. Для аргона наоборот: плотностная зависимость α выражена сильнее, а температурная зависимость практически отсутствует. Для оценки эффективности фрактального уравнения состояния, произведен сравнительный анализ точности расчета по сравнению с классическим уравнением состояния реального газа. Показано, что точность классического уравнения уменьшается с увеличением давления. Фрактальное уравнение имеет высокую точность расчёта на всём исследуемом диапазоне температур и давлений.

Ключевые слова: математическое моделирование, фрактальное уравнение состояния, теплофизические свойства инертных газов, неон, аргон, криптон, ксенон, интегро-дифференцирование дробного порядка, программный расчётный модуль.

Магомедов Рамазан Абдуллаевич – старший научный сотрудник, Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики – филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук

Ахмедов Энвер Наримановичч – научный сотрудник, Институт проблем геотермии и возобновляемой энергетики – филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук

Original paper

Calculation of P-ρ-T properties of noble gases using the fractal state equation in the temperature range from 500 to 3000 K

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/2026.18.256

Abstract: This paper presents a calculation of the state equation isotherms for noble gases: neon, argon, krypton, and xenon in the temperature range from 500 to 3000 K. The calculation was performed using a mathematical model based on a fractal state equation, which has previously demonstrated high efficiency in calculating the *P-ρ-T* properties of other substances. The obtained results are in good agreement with literature reference data. The dependence of the fitting parameter α of the fractal state equation on density is determined for various temperatures. It is found that for neon, krypton, and xenon, the density dependence is small, but the temperature dependence is noticeable. For argon, the opposite is true: the density dependence is more pronounced, and the temperature dependence is almost absent. To evaluate the effectiveness of the fractal state equation, a comparative analysis of the

© Р.А. Магомедов, Э.Н. Ахмедов, 2026

calculation accuracy is performed and compared to the classical equation of state of a real gas. It is shown that the accuracy of the classical equation decreases with increasing pressure. The fractal equation has high calculation accuracy over the entire studied range of temperatures and pressures.
Keywords: mathematical modeling, fractal equation of state, thermophysical properties of inert gases, neon, argon, krypton, xenon, fractional integro-differentiation, software calculation module.

Ramazan A. Magomedov – Senior Researcher, Institute for Geothermal Research and Renewable Energy of the Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences, ORCID: 0000-0001-6224-6215
Enver N. Akhmedov – Researcher, Institute for Geothermal Research and Renewable Energy of the Joint Institute for High Temperatures of the Russian Academy of Sciences, ORCID: 0000-0003-4829-6034

Поступила в редакцию/received: 14.06.2026; после рецензирования/revised: 01.07.2026; принята/accepted: 02.07.2026.

1. Введение

В настоящее время инертные газы хорошо исследованы и широко применяются в различных отраслях промышленности: электронной, приборостроении, авиационной, космической, нефтегазовой, атомной, криогенике, металлургии и медицине. Это обусловлено свойствами инертных газов: химически инертны и стойки к ионизации. Тем не менее, актуальным остаётся вопрос построения математических моделей, способных с высокой точностью произвести расчёт изотерм уравнения состояния, особенно при высоких температурах и давлениях. Авторам данной работы инертные газы интересны с точки зрения калибровки программного модуля Fract EOS [1], реализующего расчётную модель на основе фрактального состояния, которая ранее показала высокую эффективность при расчёте $P-\rho-T$ свойств других веществ.

2. Модель расчёта

Используя математический аппарат интегро-дифференцирования дробного порядка [2, 3] можно обобщить классическую термодинамику и статистическую физику [4], в том числе и соотношения Максвелла [5]. Для вывода уравнения состояния и последующего расчета теплофизических свойств веществ, используется потенциал Гельмгольца. Исходя из производных дробного порядка для полного дробного дифференциала потенциала Гельмгольца

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

получим

$$P = -\frac{\Gamma(2-\alpha)}{V^{1-\alpha}}\frac{\partial^{\alpha}F}{\partial V^{\alpha}}\bigg|_{T}. \tag{2}$$

Здесь α – показатель производной дробного порядка $(0<\alpha\le 1)$, $F=-kT\ln Z$ – потенциал Гельмгольца, $Z=\sum_i \exp(-\varepsilon_i/kT)$ – статистическая сумма [4].

Производная дробного порядка определяется выражением:

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

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 [6]:

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

Здесь P – давление (Па), ρ – плотность (кг/м^3), $R_g = R/M$ – удельная газовая постоянная (Дж/(кг·К)), T – температура (К), B – второй вириальный коэффициент (м^3/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 [7]. 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. 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 приведен в работе [6].

3. Расчёт изотерм

В данной статье выше описанная методика применена для расчёта изотерм уравнения состояния инертных газов: неона (Ne), аргона (Ar), криптона (Kr) и ксенона (Xe) в диапазоне температур от 500 до 3000 К. Расчётные параметры указаны в Таблице 1.

Таблица 1. Параметры для расчёта изотерм уравнения состояния инертных газов.

Инертный газ	Молярная масса M, кг/моль	Атомная масса m, кг
Ne	$20{,}17977 \cdot 10^{-3}$	$3{,}35147 \cdot 10^{-26}$
Ar	$39{,}948 \cdot 10^{-3}$	$6{,}63352 \cdot 10^{-26}$
Kr	$83{,}7982 \cdot 10^{-3}$	$13{,}915 \cdot 10^{-26}$
Xe	$131{,}2937 \cdot 10^{-3}$	$21{,}80183 \cdot 10^{-26}$

В предлагаемой методике второй вириальный коэффициент B для каждой температуры считается постоянным и определяется из литературы [8]. Для того чтобы значения B были доступны для расчёта на всём диапазоне исследуемых температур с любым шагом температуры, табличные значения были аппроксимированы полиномом.

Предлагаемая модель на основе фрактального уравнения состояния является полуэмпирической, то есть, для точного описания экспериментальных данных требуется подгон. В отличие от многих других моделей, содержащих большое количество параметров, в предлагаемой методике подгоночным параметром является показатель производной дробного порядка α. Однако α может зависеть, как от плотности, так и от температуры, поэтому его нужно подгонять для каждой экспериментальной точки изотермы. В результате чего, для каждой температуры строится зависимость подгоночного параметра от плотности $\alpha(\rho)$. Затем эта зависимость, состоящая из значений α, подогнанных в конкретной точке, аппроксимируется полиномом и его коэффициенты загружаются в расчётный модуль. В результате становится возможным высокоточный расчёт изотермы уравнения состояния с любым шагом ρ. Следует отметить, что характер зависимости $\alpha(\rho)$ для различных веществ различен. Например, для диоксида углерода α зависит только от плотности и не зависит от температуры [9]. Для метана показано, что α зависит от плотности, а температурная зависимость слабовыражена и практически исчезает при приближении к 1000 К [10]. Водяной пар имеет более сложный характер зависимости $\alpha(\rho)$ [11].

Таблица 2. Подгоночные параметры полинома для вычисления α.

		a_0	$a_1 \cdot 10^{-7}$	$a_2 \cdot 10^{-8}$	$a_3 \cdot 10^{-12}$	$a_4 \cdot 10^{-15}$	$a_5 \cdot 10^{-18}$
Ne *T,* K	500	1,00001	-14,3878	-4,13463	-19,731	-37,9177	0
	1500	1,00001	-10,2552	-2,7934	-8,90874	-15,2405	0
	3000	1	-7,89558	-2,51477	6,78521	-31,8439	0
Ar *T,* K	500	0,99997	-15,8368	-4,96949	16,2731	-61,8815	0
	1500	0,999972	-80,2451	-4,22629	24,2269	-50,4023	0
	3000	1,00001	-86,7284	-2,601	-4,82858	-8,84463	0
Kr *T,* K	500	1	-1,4792	-1,27574	-4,81915	-0,430491	0
	1500	0,999183	136,411	-7,66898	186,247	-256,326	134,039
	3000	0,973474	2943,8	-128,071	2754,78	-2958,32	1258,71
Xe *T,* K	500	0,999989	-6,48495	-1,00981	5,75975	-5,61456	0
	1500	0,999809	31,8578	-1,4272	14,6741	-10,821	0
	3000	0,995378	463,339	-16,576	253,836	-150,648	0

На рис. 1 а-г представлена зависимость $\alpha(\rho)$ инертных газов для различных температур. Символами показаны значения, полученные путём подгона α под экспериментальные точки изотерм. Пунктиром показана

аппроксимация расчётных данных. Аппроксимационный полином имеет вид:

$$\alpha(\rho) = a_0 + a_1\rho + a_2\rho^2 + a_3\rho^3 + a_4\rho^4 + a_5\rho^5 . \quad (5)$$

В Таблице 2 представлены коэффициенты полинома (5) для некоторых температур. Как видно из рис. 1 с уменьшением плотности зависимость $\alpha(\rho)$ стремится к точке $\alpha = 1$. Это означает, что по мере разряжения газа, фрактальное уравнение состояния переходит в классическое уравнение состояния реального газа. С увеличением температуры линии $\alpha(\rho)$ для Ne, Kr, Xe ложатся выше. Для Kr и Xe наблюдается область низких плотностей, где $\alpha = 1$, которая увеличивается с увеличением температуры. Для Ar (см. рис. 1 б) с увеличением температуры линии $\alpha(\rho)$ ложатся ниже, но после 1000 К опять смещаются вверх и уменьшают кривизну. Тем не менее, во всём исследуемом интервале температур линии зависимости $\alpha(\rho)$ для аргона, практически сливаются в одну полосу. Можно считать, что температурная зависимость параметра α для аргона отсутствует. Однако плотностная зависимость выражена сильнее по сравнению с другими инертными газами.

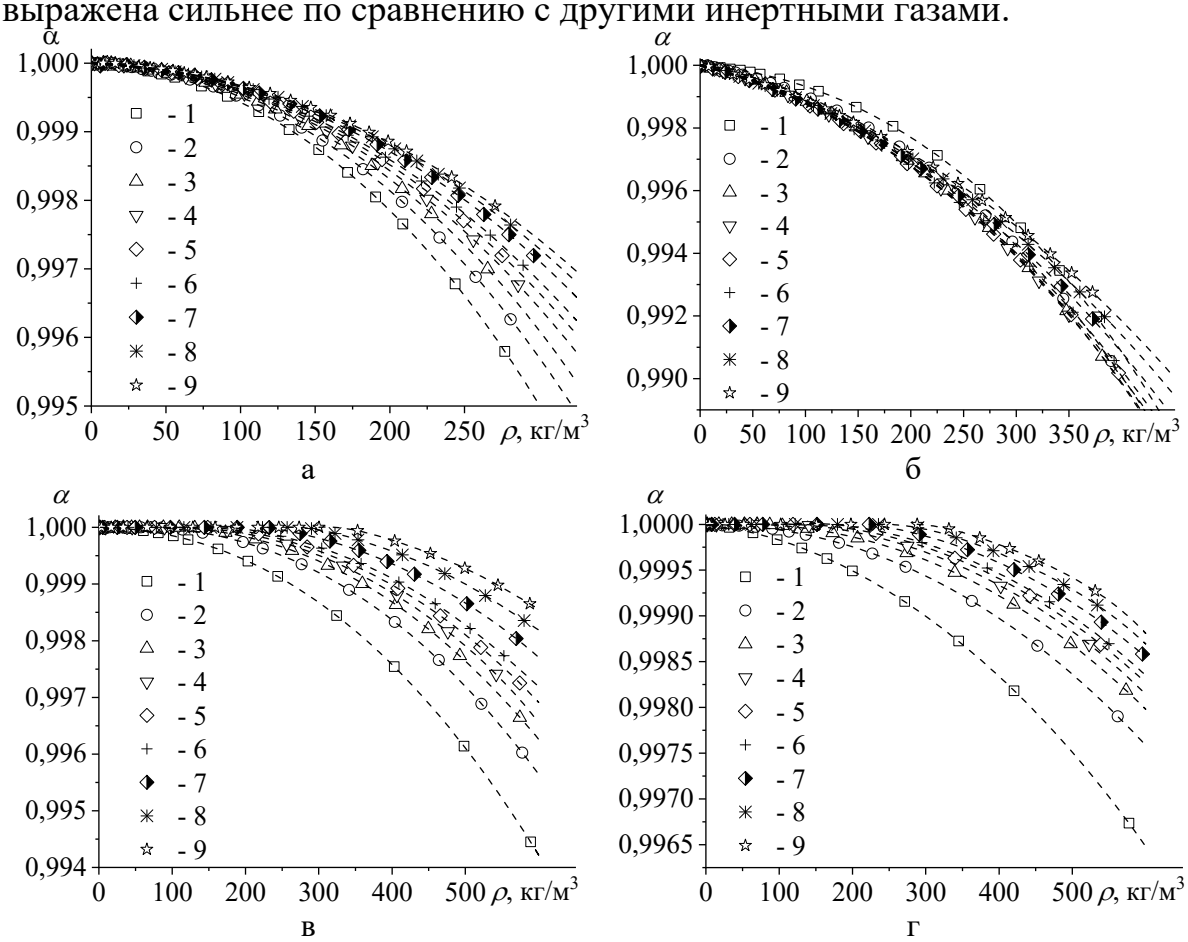

Рис. 1. Зависимость подгоночного параметра от плотности инертных газов. а – Ne, б – Ar, в – Kr, г – Xe. 1 – 500 К, 2 – 700 К, 3 – 900 К, 4 – 1100 К, 5 – 1300 К, 6 – 1500 К, 7 – 2000 К, 8 – 2500 К, 9 – 3000 К.

На рис. 2 а-г представлены диаграммы расчётных изотерм уравнения состояния инертных газов для интервала температур от 500 до 3000 К в сравнении со справочными данными. Символами показаны значения из [12]. Пунктирными линиями показан расчет фрактального уравнения для соответствующих температур. Как видно из рисунка, расчётные результаты хорошо согласуются со справочными данными.

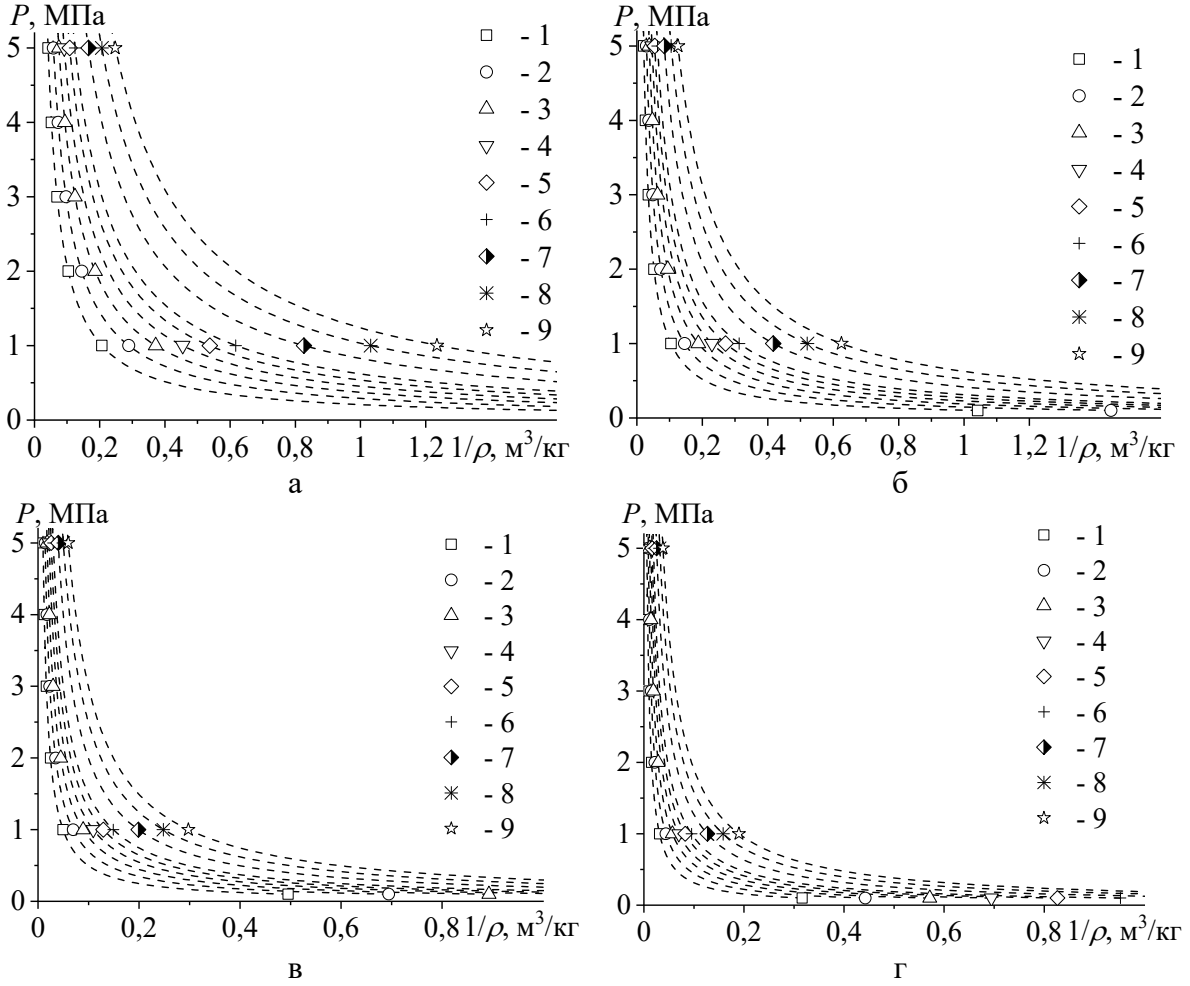

Рис. 2. Изотермы уравнения состояния инертных газов. Символы – справочные данные из [12], линии – расчёт. а – *Ne*, б – *Ar*, в – *Kr*, г – *Xe*. 1 – 500 К, 2 – 700 К, 3 – 900 К, 4 – 1100 К, 5 – 1300 К, 6 – 1500 К, 7 – 2000 К, 8 – 2500 К, 9 – 3000 К.

Чтобы оценить эффективность фрактального уравнения состояния, для каждой точки уравнения с известными экспериментальными данными, была определена относительная погрешность расчёта давления $\delta P = \left[\left(P_{clc} - P_{lit} \right) / P_{lit} \right] \cdot 100\%$, где P_{clc} – расчетное значение давления, P_{lit} – справочные данные давления из [12]. Затем, для каждой изотермы была рассчитана средняя квадратическая относительная ошибка $\tilde{\sigma} = \left[\left(\delta P_1^2 + \delta P_2^2 + \ldots + \delta P_N^2 \right) / N \right]^{1/2}$, где N – число точек изотермы, $\delta P_1, \delta P_2, \ldots, \delta P_N$ – относительная погрешность расчёта в точках изотермы. Аналогичная

оценка погрешности произведена для классического уравнения состояния, то есть при $\alpha = 1$. В результате, $\tilde{\sigma}$ фрактального уравнения колеблется в диапазоне от 0,007 до 0,6148% для всех расчётов по инертным газам. $\tilde{\sigma}$ классического уравнения находится в диапазоне от 0,5223 до 4,9321%. Следует отметить, что данные, приведённые в литературе, также имеют свою погрешность относительно экспериментальных значений. При расчете фрактального уравнения состояния справочные данные [12] считаются эталонными, так как уравнение подгоняется под них. Поэтому при определении относительной погрешности, погрешность самих литературных данных не учитывалась.

4. Заключение

Таким образом, произведён расчёт изотерм фрактального уравнения состояния инертных газов: неона, аргона криптона и ксенона в диапазоне температур от 500 до 3000 К. Полученные расчеты показали хорошее согласие с литературными справочными данными. Путем подгона получена зависимость показателя производной дробного порядка α от плотности. Обнаружено, что при низких плотностях для всех исследуемых газов α стремится к единице. Для Ne, Kr и Xe плотностная зависимость α невелика, однако заметна температурная зависимость. Для Ar наоборот: плотностная зависимость α выражена сильнее, а температурная зависимость практически отсутствует. Произведено сравнение погрешности расчёта фрактального и классического уравнений. Фрактальное уравнение показывает высокую точность на всём исследуемом диапазоне температур и давлений. Не смотря на то, что инертные газы хорошо описываются классическим уравнением, переход к фрактальному уравнению позволяет ещё больше повысить точность. Сложность применения фрактального уравнения, компенсируется его высокой точностью. Для расчёта фрактального уравнения разработано специальное программное обеспечение Fract EOS [1].

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание № 075-00270-26-00).

Библиографический список:

1. **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.
2. **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.
3. **Kilbas, A.A.** Theory and applications of fractional differential equations / A.A. Kilbas, H.M. Srivastava, J.J. Trujillo. – North-Holland, Amsterdam: Elsevier, 2006. – xv+523 p.
4. **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.
5. **Сивухин, Д.В.** Общий курс физики: в 5 т. Т. 2: Термодинамика и молекулярная физика / Д.В. Сивухин. – М.: Физматлит, 2005. – 544 с.
6. **Мейланов, Р.П.** Термодинамика в дробном исчислении / Р.П. Мейланов, Р.А. Магомедов // Инженерно-физический журнал. – 2014. – Т. 87. – № 6. – С. 1455-1465.
7. **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.
8. **Бабичев, А.П.** Физические величины: Справочник. / А.П. Бабичев, Н.А. Бабушкина, А.М. Братковский и др.; под ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
9. **Магомедов, Р.А.** Расчёт P-ρ-T Свойств CO_2 в диапазоне температур от $T = 400$ K до $T = 1700$ K / 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.
10. **Магомедов, Р.А.** Расчет изотерм метана в интервале температур от 300 K до 1000 K на основе фрактального уравнения состояния / Р.А. Магомедов, Э.Н. Ахмедов // Вестник ОИВТ РАН. – 2023. – Т. 11. – № 3. – С. 54-57.
11. **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.
12. **Зубарев, В.Н.** Теплофизические свойства технически важных газов при высоких температурах и давлениях: Справочник / В.Н. Зубарев, А.Д. Козлов, В.М. Кузнецов и др. – М.: Энергоатомиздат, 1989. –232 с.

References:

1. Akhmedov E.N., Magomedov R.A., Aliverdiev A.A. Fract EOS. Certificate RF, no 2021661219, 2021. (In Russian).
2. Samko S.G., Kilbas A.A., Marichev O.I. *Integraly 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).
3. Kilbas A.A., Srivastava H.M., Trujillo J.J. *Theory and applications of fractional differential equations*. North-Holland, Amsterdam, Elsevier, 2006, xv+523 p.
4. 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).
5. 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).
6. 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.
7. Jahnke E., Edme F., Lösch F. *Tafeln, höherer funktionen seschste auflage neubearbeitet.* Stuttgart, Verlagsgesellschaft, 1960, XII+318 s.
8. Babichev A.P., Babushkina N.A., Bratkovsky A.M. et al. *Fizicheskie velichiny: Spravochnik [Physical Quantities: Handbook], ed. by I.S. Grigoriev, E.Z. Meilikhov*. Moscow: Energoatomizdat Publ., 1991, 1232 p. (In Russian).
9. Magomedov R.A., Akhmedov E.N. Raschet P-ρ-T svoistv CO_2 v diapazone temperature ot $T = 400$ K do $T = 1700$ K [Calculation of CO_2 P-ρ-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).
10. Magomedov R.A., Akhmedov E.N. Raschet izoterm metana v intervale temperatur ot 300 K do 1000 K na osnove fraktal'nogo uravneniya sostoyaniya [Calculation of methane isotherms in the temperature range from 300 K to 1000 K based on the fractal state equation], *Vestnik Obedinennogo Instituta Vysokih Temperatur [Bulletin of the Joint Institute for High Temperatures]*, 2023, vol. 11, issue 3, pp. 54-57. (In Russian).
11. 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.
12. Zubarev V.N., Kozlov A.D., Kuznetsov V.M. *Teplofizicheskie svojstva tekhnicheski vazhnykh gazov pri vysokikh temperaturakh i davleniyakh: Spravochnik. [Thermophysical Properties of Technically Important Gases at High Temperatures and Pressures: Handbook]*. Moscow: Energoatomizdat Publ., 1989, 232 p. (In Russian).