

DIN EN ISO 6976



ICS 75.060

Einsprüche bis 2015-07-15
Vorgesehen als Ersatz für
DIN EN ISO 6976:2005-09

Entwurf

**Erdgas –
Berechnung von Brenn- und Heizwert, Dichte, relativer Dichte und
Wobbeindex aus der Zusammensetzung (ISO/DIS 6976:2015);
Deutsche und Englische Fassung prEN ISO 6976:2015**

Natural gas –

Calculation of calorific values, density, relative density and Wobbe indices from composition (ISO/DIS 6976:2015);

German and English version prEN ISO 6976:2015

Gaz naturel –

Calcul du pouvoir calorifique, de la masse volumique, de la densité relative et de l'indice de Wobbe à partir de la composition (ISO/DIS 6976:2015);

Version allemande et anglaise prEN ISO 6976:2015

Anwendungswarnvermerk

Dieser Norm-Entwurf mit Erscheinungsdatum 2015-05-15 wird der Öffentlichkeit zur Prüfung und Stellungnahme vorgelegt.

Weil die beabsichtigte Norm von der vorliegenden Fassung abweichen kann, ist die Anwendung dieses Entwurfes besonders zu vereinbaren.

Stellungnahmen werden erbeten

- vorzugsweise online im Norm-Entwurfs-Portal des DIN unter www.entwuerfe.din.de bzw. für Norm-Entwürfe der DKE auch im Norm-Entwurfs-Portal der DKE unter www.entwuerfe.normenbibliothek.de, sofern dort wiedergegeben;
- oder als Datei per E-Mail an nmp@din.de möglichst in Form einer Tabelle. Die Vorlage dieser Tabelle kann im Internet unter www.din.de/stellungnahme oder für Stellungnahmen zu Norm-Entwürfen der DKE unter www.dke.de/stellungnahme abgerufen werden;
- oder in Papierform an den DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP), 10772 Berlin (Hausanschrift: Burggrafenstr. 6, 10787 Berlin).

Die Empfänger dieses Norm-Entwurfs werden gebeten, mit ihren Kommentaren jegliche relevanten Patentrechte, die sie kennen, mitzuteilen und unterstützende Dokumentationen zur Verfügung zu stellen.

Gesamtumfang 119 Seiten

DIN-Normenausschuss Materialprüfung (NMP)
DIN-Normenausschuss Gastechnik (NAGas)

Nationales Vorwort

Dieses Dokument (prEN ISO6976:2015) wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 193/SC 1 „Analysis of natural gas“ (Sekretariat: NEN) in Zusammenarbeit mit dem Technischen Komitee CEN/TC 238 „Prüfgase, Prüfdrucke und Gerätekategorien“ (Sekretariat: AFNOR) erarbeitet. Das zuständige nationale Gremium ist der Arbeitsausschuss NA 062-05-73 AA „Gasanalyse und Gasbeschaffenheit“ des DIN-Normenausschusses Materialprüfung (NMP).

Für die in diesem Dokument zitierten Internationalen Normen wird im Folgenden auf die entsprechenden Deutschen Normen hingewiesen:

ISO 6974-1	siehe	DIN EN ISO 6974-1
ISO 6974-2	siehe	DIN EN ISO 6974-2
ISO 14912	siehe	DIN EN ISO 14912

Um Zweifelsfälle in der Übersetzung auszuschließen, ist die englische Originalfassung der prEN ISO 6976 beigelegt. Die Nutzungsbedingungen für den deutschen Text des Norm-Entwurfes gelten gleichermaßen auch für den englischen Text.

Änderungen

Gegenüber DIN EN ISO 6976:2005-09 wurden folgende Änderungen vorgenommen:

- a) Norm technisch überarbeitet;
- b) Normative Verweisungen aufgenommen;
- c) Begriffe überarbeitet;
- d) Anhang A (Formelzeichen und Symbole) in den normativen Text übernommen.

Nationaler Anhang NA (informativ)

Literaturhinweise

DIN EN ISO 6974-1, *Erdgas — Bestimmung der Zusammensetzung und der zugehörigen Unsicherheit durch Gaschromatographie — Teil 1: Allgemeine Leitlinien und Berechnung der Zusammensetzung*

DIN EN ISO 6974-2, *Erdgas — Bestimmung der Zusammensetzung und der zugehörigen Unsicherheit durch Gaschromatographie — Teil 2: Unsicherheitsberechnungen*

DIN EN ISO 14912, *Gasanalyse — Umrechnung von Zusammensetzungsangaben für Gasgemische*

Erdgas — Berechnung von Brenn- und Heizwert, Dichte, relativer Dichte und Wobbeindex aus der Zusammensetzung (ISO/DIS 6976:2015)

Gaz naturel — Calcul du pouvoir calorifique, de la masse volumique, de la densité relative et de l'indice de Wobbe à partir de la composition (ISO/DIS 6976:2015)

Natural gas — Calculation of calorific values, density, relative density and Wobbe indices from composition (ISO/DIS 6976:2015)

ICS:

Deskriptoren:

Dokument-Typ: Europäische Norm
Dokument-Untertyp:
Dokumentstufe: parallele Umfrage
Dokumentsprache: D

STD Version 2.5a

Inhalt

Seite

Vorwort	4
Einleitung.....	5
1 Anwendungsbereich	6
2 Normative Verweisungen	7
3 Begriffe	7
4 Symbole und Einheiten	10
4.1 Größen	10
4.2 Tiefgestellter Index	11
4.3 Hochgestellter Index	11
5 Kurzbeschreibung	11
6 Verhalten idealer und realer Gase.....	12
6.1 Verbrennungsenthalpie.....	12
6.2 Berechnung des Realgasfaktors	12
7 Berechnung des molaren Brennwertes/Heizwertes	13
7.1 Brennwert	13
7.2 Heizwert	14
8 Berechnung des massenbezogenen Brennwertes/Heizwertes	14
8.1 Brennwert	14
8.2 Heizwert	15
9 Berechnung des volumenbezogenen Brennwertes/Heizwertes	15
9.1 Idealgas-Brennwert.....	15
9.2 Idealgas-Heizwert.....	16
9.3 Realgas-Brennwert	16
9.4 Realgas-Heizwert	16
10 Berechnung zugehöriger Eigenschaften	17
10.1 Relative Dichte des idealen Gases.....	17
10.2 Dichte des idealen Gases	17
10.3 Oberer Wobbeindex des idealen Gases	17
10.4 Unterer Wobbeindex des idealen Gases	18
10.5 Relative Dichte des realen Gases	18
10.6 Dichte des realen Gases	19
10.7 Oberer Wobbeindex des realen Gases	19
10.8 Unterer Wobbeindex des realen Gases	19
11 Unsicherheit der Berechnung	19
11.1 Grundsätze	19
11.2 Gleichungen für das Analyseverfahren.....	20
11.3 Eingabewerte für das Analyseverfahren	21
11.3.1 Zusammensetzung und zugehörige Unsicherheiten	21
11.3.2 Nicht zusammensetzungsbezogene Eingabewerte	21
11.4 Erweiterte Unsicherheit.....	22
11.5 Angabe der Ergebnisse.....	22
11.5.1 Allgemeines	22
11.5.2 Analyseverfahren.....	22
11.5.3 Allgemeines Verfahren	22
11.5.4 Kontingenzverfahren	23
11.6 Anwendung der Unsicherheit.....	23
12 Datentabellen	25

Anhang A (normativ) Werte für Hilfskonstanten	31
A.1 Gaskonstante	31
A.2 Atomgewichte der Elemente	31
A.3 Eigenschaften trockener Luft.....	32
A.4 Standard-Verdampfungsenthalpie von Wasser	33
Anhang B (normativ) Gleichungen für Berechnungen der Unsicherheit	34
B.1 Allgemeines	34
B.2 Molarer Brennwert.....	34
B.3 Massenbezogener Brennwert.....	34
B.4 Volumenbezogener Brennwert	35
B.5 Molarer Heizwert.....	35
B.6 Massenbezogener Heizwert	36
B.7 Volumenbezogener Heizwert.....	36
B.8 Dichte.....	37
B.9 Relative Dichte.....	37
B.10 Oberer Wobbeindex	38
B.11 Unterer Wobbeindex	39
Anhang C (informativ) Umrechnungsfaktoren	40
C.1 Allgemeines	40
C.2 Molarer Brennwert/Heizwert	40
C.3 Massenbezogener Brennwert/Heizwert.....	40
C.4 Volumenbezogener Brennwert/Heizwert sowie oberer und unterer Wobbeindex.....	40
C.5 Dichte.....	40
Anhang D (informativ) Beispielberechnungen	41
D.1 Allgemeines	41
D.2 Beispiel 1: Ein einfaches Gemisch aus fünf Komponenten.....	41
D.2.1 Allgemeines	41
D.2.2 Zusammensetzungsanalyse.....	41
D.2.3 Berechnung der molaren Masse.....	42
D.2.4 Berechnung des molaren Realgas-Volumens	42
D.2.5 Berechnung des molaren Brennwertes	43
D.2.6 Berechnung der Unsicherheit des molaren Brennwertes.....	44
D.2.7 Berechnung des massenbezogenen Brennwertes	45
D.2.8 Berechnung der Unsicherheit des massenbezogenen Brennwertes	45
D.2.9 Berechnung des volumenbezogenen Realgas-Brennwertes.....	47
D.2.10 Berechnung der Unsicherheit des volumenbezogenen Realgas-Brennwertes	47
D.3 Beispiel 2: Ein einfaches Gemisch, das Wasserdampf enthält	49
D.3.1 Allgemeines	49
D.3.2 Zusammensetzungsanalyse.....	49
D.3.3 Berechnung der molaren Masse.....	49
D.3.4 Berechnung des molaren Realgas-Volumens	49
D.3.5 Berechnung des molaren Brennwertes	50
D.3.6 Berechnung der Unsicherheit des molaren Brennwertes.....	51
D.3.7 Berechnung des massenbezogenen Brennwertes	52
D.3.8 Berechnung der Unsicherheit des massenbezogenen Brennwertes	52
D.3.9 Berechnung des volumenbezogenen Realgas-Brennwertes.....	54
D.3.10 Berechnung der Unsicherheit des volumenbezogenen Realgas-Brennwertes	54
D.3.11 Umrechnung in Nicht-SI-Einheiten	56
D.4 Beispiel 3: Ein komplexeres Gemisch aus elf Komponenten.....	56
D.4.1 Allgemeines	56
D.4.2 Zusammensetzungsanalyse.....	57
D.4.3 Eigenschaften und Unsicherheiten bei ISO-Standard-Referenzbedingungen.....	57
D.4.4 Eigenschaften und Unsicherheiten bei Referenzbedingungen von 25 °C/0 °C	59
Literaturhinweise	61

Vorwort

Dieses Dokument (prEN ISO 6976:2015) wurde vom Technischen Komitee ISO/TC 193 „Erdgas“ in Zusammenarbeit mit dem Technischen Komitee CEN/TC 238 „Prüfgase, Prüfdrucke und Gerätekategorien“ erarbeitet, dessen Sekretariat vom AFNOR gehalten wird.

Dieses Dokument ist derzeit zur parallelen Umfrage vorgelegt.

Diese Ausgabe wird EN ISO 6976:2005 ersetzen.

Anerkennungsnotiz

Der Text von ISO/DIS 6976:2015 wurde vom CEN als prEN ISO 6976:2015 ohne irgendeine Abänderung genehmigt.

Einleitung

Sowohl die internationale als auch die innerstaatliche Erdgasübergabe erfordern gewöhnlich eine genaue Bestimmung sowohl der Menge als auch der Qualität des gehandelten Gases. Diese Internationale Norm legt Verfahren für die Berechnung von Schlüsseigenschaften zur Beschreibung der Gasqualität fest, und zwar Brenn- und Heizwert, Dichte, relative Dichte sowie oberer und unterer Wobbeindex. Die Verfahren bieten die Mittel zur Berechnung dieser Eigenschaften und der zugehörigen Unsicherheiten für jedes Erdgas, Erdgas-austauschgas und ähnliche Brenngase bekannter Zusammensetzung bei allgemein üblichen Referenzbedingungen.

Nach dieser dritten Ausgabe von ISO 6976 berechnete Werte der verschiedenen Eigenschaften werden im Allgemeinen nur sehr geringfügig von den nach der zweiten Ausgabe von ISO 6976 (1995) berechneten Werten abweichen. In diesem Zusammenhang wird anerkannt, dass:

- a) die Übernahme der in dieser Ausgabe enthaltenen Überarbeitungen nicht ohne Kosten bleiben wird, da die Software von Messgeräten aktualisiert werden muss;
- b) sich der aufgezeichnete Energiegehalt und somit die in Rechnung gestellte Energie als Folge dieser Überarbeitungen geringfügig ändern wird;
- c) unbeabsichtigte Auswirkungen eintreten könnten, wenn die Überarbeitungen unkritisch angewendet werden, beispielsweise wenn die Überarbeitungen an Eingangspunkten eines Rohrleitungssystems, nicht aber den Ausgangspunkten angewendet werden, wodurch ein kostenträchtiges Ungleichgewicht bei der Abrechnung entstehen könnte; und
- d) kommerzielle, vertragliche, behördliche und gesetzliche Pflichten berücksichtigt werden müssen.

Aus diesen Gründen und in Abhängigkeit vom Anwendungsfall des Anwenders kann es angemessen sein, eine Bewertung der Auswirkungen durchzuführen, um den zeitlichen Ablauf und die Durchführung für die Anwendung der Festlegungen dieser Ausgabe von ISO 6976 zu vereinbaren.

1 Anwendungsbereich

Diese Internationale Norm legt Verfahren für die Berechnung von Brennwert, Heizwert, Dichte, relativer Dichte sowie oberem und unterem Wobbeindex von Erdgasen, Erdgasaustauschgasen und sonstigen Brenngasen fest, wenn die Zusammensetzung des Gases in Stoffmengenanteilen bekannt ist. Anhand der festgelegten Verfahren können die Eigenschaften des Gasgemisches bei allgemein üblichen Referenzbedingungen berechnet werden.

Für die Anwendung dieser Internationalen Norm müssen die eingegebenen Stoffmengenanteile genau 1 ergeben. Anleitungen zur Erfüllung dieser Anforderung sind ISO 6974-1 und ISO 6974-2 zu entnehmen. Alle Komponenten mit Stoffmengenanteilen von mehr als 0,000 05 sind zu berücksichtigen.

Ist die Zusammensetzung des Gases in Volumenanteilen bekannt, müssen diese zunächst nach ISO 14912 (5.1.2) in Stoffmengenanteile umgerechnet werden. Dabei ist jedoch zu beachten, dass die abgeleiteten Stoffmengenanteile größere Unsicherheiten als die ursprünglichen Volumenanteile aufweisen.

Die Berechnungsverfahren erfordern Werte für verschiedene physikalische Eigenschaften der reinen Komponenten; diese Werte werden gemeinsam mit den zugehörigen Unsicherheiten in Form von Tabellen und unter Angabe der jeweiligen Quellen bereitgestellt.

Es sind Verfahren zur Schätzung der Unsicherheiten der berechneten Eigenschaften angegeben.

Die Verfahren zur Berechnung der molaren, massen- oder volumenbezogenen Eigenschaftswerte gelten für alle Erdgase, Erdgasaustauschgase oder sonstigen in der Regel gasförmigen Brennstoffe mit der Ausnahme, dass die Berechnung der volumenbezogenen Eigenschaftswerte auf Gemische mit einem Realgasfaktor bei Referenzbedingungen größer als 0,9 beschränkt ist.

Beispielberechnungen für die empfohlenen Berechnungsverfahren sind in Anhang D angegeben.

ANMERKUNG 1 Die Qualifikationsmerkmale „superior“, „higher“, „upper“ und „total“ sind für die Anwendung dieser Internationalen Norm gleich bedeutend mit „gross“ (calorific value, Brennwert; Wobbe index, oberer Wobbeindex); ebenso sind „inferior“ und „lower“ gleich bedeutend mit „net“ (calorific value, Heizwert; Wobbe index, unterer Wobbeindex). Der Begriff „heating value“ ist gleich bedeutend mit „calorific value“ (Brennwert, Heizwert); „mass density“ und „specific density“ sind gleich bedeutend mit „density“ (Dichte); „specific gravity“ ist gleich bedeutend mit „relative density“ (relative Dichte); „Wobbe number“ ist gleich bedeutend mit „Wobbe index“ (Wobbeindex); „compressibility factor“ ist gleich bedeutend mit „compression factor“ (Realgasfaktor). Der Zahlenwert der dimensionslosen Größe Molekulargewicht entspricht dem der molaren Masse in $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$.

ANMERKUNG 2 Bei aliphatischen Kohlenwasserstoffen mit Kohlenstoffzahl 7 oder darüber sollte jedes Isomer mit einem Stoffmengenanteil $> 0,000\ 05$ mit dem normalen Isomer derselben Kohlenstoffzahl einbezogen werden.

ANMERKUNG 3 Beinhaltet die Anforderung des Anwenders den Austausch von beispielsweise einer Gruppe analytisch ungeklärter Komponenten mit C_{6+} oder C_{7+} durch eine einzelne Pseudo-Komponente, dann ist es die Aufgabe des Anwenders selbst, die Zusammensetzung der Stoffmengenanteile und damit die Eigenschaften dieser Pseudo-Komponente so festzulegen, dass sie für eine bestimmte Anwendung geeignet ist. So genanntes „Zuschauerwasser“ und „nicht brennbares Wasserstoffsulfid“ dürfen ebenfalls als Pseudo-Komponenten behandelt werden, indem die jeweiligen Werte der Verbrennungsenthalpie gleich 0 gesetzt werden.

ANMERKUNG 4 Es bestehen keine expliziten Grenzen der Zusammensetzung, für welche die in dieser Internationalen Norm beschriebenen Verfahren gelten. Allerdings setzt die Begrenzung der volumenbezogenen Berechnungen auf Gemische mit einem Realgasfaktor bei Referenzbedingungen größer als 0,9 implizite Grenzen für die Zusammensetzung.

ANMERKUNG 5 Da der Stoffmengenanteil des gesamten vorhandenen Wassers gewöhnlich nicht aus der chromatographischen Analyse hervorgeht, ist es übliche Praxis, die physikalischen Eigenschaften auf der Grundlage von trockenem Gas zu berechnen und die Auswirkungen von Wasserdampf in einem gesonderten Verfahren zu berücksichtigen. Ist der Stoffmengenanteil von Wasserdampf jedoch bekannt, können die Berechnungen der Eigenschaften vollständig nach den hierin beschriebenen Verfahren durchgeführt werden. Die Auswirkungen von Wasserdampf auf Brenn- oder Heizwert, unabhängig davon, ob letzterer in direkter Messung oder durch Berechnung bestimmt wird, sind im Technischen Bericht ISO/TR 29922 [1] beschrieben.

2 Normative Verweisungen

Die folgenden Dokumente sind für die Anwendung dieses Dokuments erforderlich. Bei datierten Verweisungen gilt nur die in Bezug genommene Ausgabe. Bei undatierten Verweisungen gilt die letzte Ausgabe des in Bezug genommenen Dokuments (einschließlich aller Änderungen).

ISO 6974-1:2013, *Natural gas — Determination of composition and associated uncertainty by gas chromatography — Part 1: General guidelines and calculation of composition*

ISO 6974-2:2013, *Natural gas — Determination of composition and associated uncertainty by gas chromatography — Part 2: Uncertainty calculations*

ISO 14912:2003, *Gas analysis — Conversion of gas mixture composition data*

ISO/IEC Guide 99-12:2007, *International vocabulary of metrology — Basic and general concepts and associated terms (VIM)*, Joint Committee for Guides in Metrology, JCGM 200:2008 (BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP, OIML), 90+xii p

3 Begriffe

Für die Anwendung dieser Internationalen Norm sind die Definitionen metrologischer Begriffe (Unsicherheit, Genauigkeit, Präzision, Richtigkeit, systematische Abweichung, Wiederholpräzision und Vergleichpräzision) dem Internationalen Wörterbuch der Metrologie (VIM) zu entnehmen.

Zusätzlich gelten die folgenden Begriffe.

3.1

Brennwert

Wert an Wärme, der bei einer vollständigen Verbrennung mit Sauerstoff einer vorgegebenen Gasmenge abgegeben werden würde, wobei der Druck p_1 , bei dem die Reaktion stattfindet, konstant bleibt, und alle Verbrennungsprodukte auf die gleiche, vorgegebene Temperatur t_1 der Ursprungsprodukte zurückgeführt werden; dabei liegen alle diese Produkte im gasförmigen Zustand vor, mit Ausnahme von Wasser, das bei t_1 in den flüssigen Zustand kondensiert

ANMERKUNG Bei molarer Angabe der Gasmenge wird der Brennwert mit $(Hc)_G(t_1, p_1)$ bezeichnet; der massenbezogene Brennwert wird mit $(Hm)_G(t_1, p_1)$ bezeichnet. Wird die Gasmenge volumenbezogen angegeben, wird der Brennwert mit $(Hv)_G(t_1, p_1; t_2, p_2)$ bezeichnet, wobei t_2 und p_2 die Referenzbedingungen für die Volumenmessung des Gases sind (siehe Bild 1).

3.2

Heizwert

Wert an Wärme, der bei einer vollständigen Verbrennung mit Sauerstoff einer vorgegebenen Gasmenge abgegeben werden würde, wobei der Druck p_1 , bei dem die Reaktion stattfindet, konstant bleibt, und alle Verbrennungsprodukte auf die gleiche, vorgegebene Temperatur t_1 der Ursprungsprodukte zurückgeführt werden; dabei liegen alle diese Produkte im gasförmigen Zustand vor

ANMERKUNG Molarer, massenbezogener und volumenbezogener Heizwert werden entsprechend mit $(Hc)_N(t_1, p_1)$, $(Hm)_N(t_1, p_1)$ bzw. $(Hv)_N(t_1, p_1; t_2, p_2)$ bezeichnet.

3.3

Dichte

Quotient aus der Masse einer Gasprobe und deren Volumen unter gegebenen Druck- und Temperaturbedingungen

3.4

relative Dichte

Quotient aus der Dichte eines Gases und der Dichte trockener Luft mit Referenzzusammensetzung bei den gleichen gegebenen Temperatur- und Druckbedingungen

ANMERKUNG Der Begriff ideale relative Dichte findet Anwendung, wenn sowohl Gas als auch Luft als Medien betrachtet werden, die dem idealen Gasgesetz gehorchen (siehe 3.8); der Begriff reale relative Dichte findet Anwendung, wenn sowohl Gas als auch Luft als reale Medien betrachtet werden (siehe 3.9). Zu der festgelegten Referenzzusammensetzung trockener Luft siehe ISO/TR 29922 [1].

3.5

oberer Wobbeindex

Quotient aus dem volumenbezogenen Brennwert bei gegebenen Referenzbedingungen und der Quadratwurzel aus der relativen Dichte bei gleichen gegebenen Referenzbedingungen für die Volumenmessung

ANMERKUNG Im allgemeinen Gebrauch und in Abwesenheit einer anderen Bezeichnung wird der Begriff Wobbeindex als gleichbedeutend mit der hier als oberer Wobbeindex bezeichneten Größe verwendet.

3.6

unterer Wobbeindex

der Quotient aus dem volumenbezogenen Heizwert bei gegebenen Referenzbedingungen und der Quadratwurzel aus der relativen Dichte bei gleichen gegebenen Referenzbedingungen für die Volumenmessung

3.7

Umwandlungsenthalpie

freiwerdende Wärmemenge, die beim Übergang einer Substanz oder eines Systems von einem (Anfangs-)Zustand in einen anderen (End-)Zustand anfällt

ANMERKUNG 1 Eine *positive* Wärmefreisetzung entspricht nach thermodynamischer Konvention einer numerisch identischen *negativen* Enthalpieänderung.

ANMERKUNG 2 Im Kontext dieser Internationalen Norm darf Folgendes festgestellt werden:

Verbrennungsenthalpie – in diesem Fall ist der Anfangszustand der eines unverbrannten stöchiometrischen Gemisches von Reaktionspartnern und der Endzustand ist der der Verbrennungsprodukte bei denselben Temperatur- und Druckbedingungen;

Standard-Verdampfungsenthalpie – hierbei ist der Anfangszustand der eines flüssigen Stoffes im Sättigungszustand und der Endzustand ist der desselben Stoffes im hypothetischen Zustand eines idealen Gases bei derselben Temperatur;

Enthalpieänderung – hierbei ist der Anfangszustand der eines Gases oder Gasgemisches bei Temperatur T_1 und der Endzustand ist der desselben Gases oder Gasgemisches bei demselben Druck aber einer anderen Temperatur T_2 ; und

Enthalpiekorrektur (Restenthalpie) – hierbei ist der Anfangszustand der eines Gases oder Gasgemisches im hypothetischen Idealgaszustand und der Endzustand ist der desselben Gases oder Gasgemisches bei denselben Temperatur- und Druckbedingungen im Realgaszustand.

3.8

ideales Gas

Gas, das dem idealen Gasgesetz entspricht

ANMERKUNG Das ideale Gasgesetz darf wie folgt ausgedrückt werden:

$$p \cdot V^0 = R \cdot T \quad (1)$$

Dabei ist

p der absolute Druck;

T die thermodynamische Temperatur;

V das Volumen, das ein Mol idealen Gases einnimmt (ideales molares Volumen); und

R die Gaskonstante, in abgestimmten Einheiten.

3.9

reales Gas

Gas, das vom volumenbezogenen Idealzustand abweicht

ANMERKUNG Kein reales Gas gehorcht dem idealen Gasgesetz. Abweichungen vom volumenbezogenen Idealzustand dürfen in Form der Zustandsgleichung ausgedrückt werden

$$p \cdot V^0 = Z(p, T) \cdot R \cdot T \quad (2)$$

Dabei ist

V das Volumen, das ein Mol realen Gases einnimmt (reales molares Volumen); und

$Z(T, p)$ eine Variable, die häufig annähernd 1 ist und als Realgasfaktor bezeichnet wird (siehe 3.10).

3.10

Realgasfaktor

Quotient aus dem tatsächlichen (realen) Volumen einer gegebenen Gasmenge bei gegebenem Druck und Temperatur und deren Volumen, wie er sich aus dem idealen Gasgesetz (für gleichen Druck und Temperatur) berechnet

3.11

Referenzbedingungen für die Verbrennung

ausgewiesene(r) Temperatur t_1 und Druck p_1 , bei der/dem der Brennstoff angenommenerweise verbrannt wird

3.12

Referenzbedingungen für die Volumenmessung

ausgewiesene(r) Temperatur t_2 und Druck p_2 , bei der/dem das zu verbrennende Brennstoffvolumen angenommenerweise bestimmt wird

ANMERKUNG 1 Die Referenzbedingungen für Volumenmessung und Verbrennung müssen nicht a priori gleich sein (siehe Bild 1).

ANMERKUNG 2 Weltweit wird ein Bereich von Referenzbedingungen angewendet.

ANMERKUNG 3 In dieser gesamten Norm ist die Verwendung von 15,55 °C als Kürzel vorgesehen für den genauen Celsiuswert für 60 °F, d. h. 15,55⁵/₉ oder 15,55(periodisch) °C.

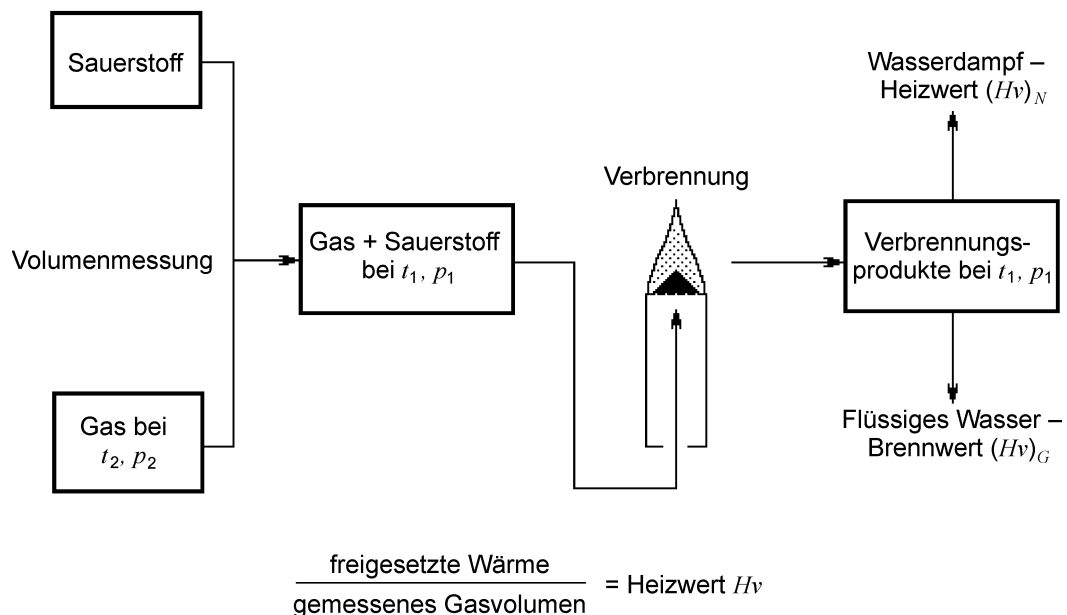


**Bild 1 — Volumenbezogener Brennwert/Heizwert —
Referenzbedingungen für die Volumenmessung und für die Verbrennung**

4 Symbole und Einheiten

4.1 Größen

Symbol	Bedeutung	Einheit
A	Atommasse	$\text{kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$
a	Atomindex für Kohlenstoff für die verallgemeinerte Molekülart $\text{C}_a\text{H}_b\text{N}_c\text{O}_d\text{S}_e$	—
b	Atomindex für Wasserstoff für die verallgemeinerte Molekülart $\text{C}_a\text{H}_b\text{N}_c\text{O}_d\text{S}_e$	—
c	Atomindex für Stickstoff für die verallgemeinerte Molekülart $\text{C}_a\text{H}_b\text{N}_c\text{O}_d\text{S}_e$	—
D	Dichte	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
d	Atomindex für Sauerstoff für die verallgemeinerte Molekülart $\text{C}_a\text{H}_b\text{N}_c\text{O}_d\text{S}_e$	—
e	Atomindex für Schwefel für die verallgemeinerte Molekülart $\text{C}_a\text{H}_b\text{N}_c\text{O}_d\text{S}_e$	—
F	Funktion, die Eigenschaft Y erzeugt	—
G	relative Dichte	—
H_c	molarer Brennwert/Heizwert	$\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
H_m	massenbezogener Brennwert/Heizwert	$\text{MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$
H_v	volumenbezogener Brennwert/Heizwert	$\text{MJ} \cdot \text{m}^{-3}$
k	Erweiterungsfaktor	—
L	molare Enthalpie der Verdampfung von Wasser	$\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
M	molare Masse	$\text{kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$
N	Anzahl der Komponenten in einem Gemisch	—
n	Anzahl der Bestimmungen in einem Datensatz von Werten	—
p	Druck (absolut)	kPa
q	genaue Eingabegröße für die Berechnung von Y	(variabel)
R	molare Gaskonstante	$\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
r	Korrelationskoeffizient	—
s	Summenfaktor	—
T	thermodynamische (absolute) Temperatur	K
t	Celsius-Temperatur	°C
$U(Y)$	erweiterte Unsicherheit von Y	(variabel)

Symbol	Bedeutung	Einheit
$u(Y)$	Standardunsicherheit von Y	(variabel)
V	molares Volumen	$\text{m}^3 \cdot \text{mol}^{-1}$
W	Wobbeindex	$\text{MJ} \cdot \text{m}^{-3}$
x	Stoffmengenanteil	—
Y	allgemeine (nicht spezifizierte) physikalische Eigenschaft	(variabel)
y	ungenauere Eingabegröße für die Berechnung von Y	(variabel)
Z	Realgasfaktor	—

4.2 Tiefgestellter Index

Symbol	Bedeutung
G	gross (Brennwert oder oberer Wobbeindex)
i	fortlaufender Zählwert Komponentenkennzeichnung
j	fortlaufender Zählwert Komponentenkennzeichnung
k	fortlaufender Zählwert
m	fortlaufender Zählwert
N	net (Heizwert oder unterer Wobbeindex)
n	fortlaufender Zählwert
Luft	für Luft
1	Referenzzustand für die Verbrennung
2	Referenzzustand für die Volumenmessung

4.3 Hochgestellter Index

Symbol	Bedeutung
0	für den Idealgaszustand

5 Kurzbeschreibung

Angegeben sind Verfahren zur Berechnung von Brenn- und Heizwert, Dichte, relativer Dichte sowie oberem und unterem Wobbeindex von beliebigen Erdgasen, Erdgasaustauschgasen oder sonstigen Brenngasen bekannter Stoffmengen Zusammensetzung.

Dabei werden bei diesen Verfahren für Brenn- und Heizwert Gleichungen verwendet, in denen für jede einzelne Molekülart des Gasgemisches der tabellierte Wert des molaren Brennwertes für ideale Gase entsprechend dem jeweiligen Stoffmengenanteil gewichtet wird; all diese Terme werden dann zur über den „Stoffmengenanteil gemittelten“ molaren Größe des idealen Gasgemisches summiert. Weitere Gleichungen sind angegeben für die Umrechnung dieser Größe in den Heizwert des idealen Gases sowie anschließend in entweder den massen- oder den volumenbezogenen Brennwert/Heizwert des idealen Gases.

Bei diesen Verfahren werden ebenso für die Dichte und die relative Dichte Gleichungen verwendet, in denen für jede einzelne Molekülart des Gasgemisches der tabellierte Wert der molaren Masse entsprechend dem jeweiligen Stoffmengenanteil gewichtet wird; all diese Terme werden dann zur über den „Stoffmengenanteil gemittelten“ Größe summiert. Gleichungen sind angegeben für die Umrechnung dieser über den „Stoffmengenanteil gemittelten“ molaren Masse in die Dichte oder die relative Dichte des idealen Gases.

Die Werte für die Dichte und die relative Dichte des realen Gases werden dann durch Anwendung eines volumenbezogenen Korrekturfaktors (Realgasfaktor) bestimmt; eine Vorschrift für dessen Berechnung ist angegeben.

Beim Brennwert/Heizwert ist die Umrechnung vom Idealgaszustand in den Realgaszustand prinzipiell etwas weniger einfach. Zunächst sollte eine kleine Enthalpiekorrektur (Restenthalpie) auf den molaren Brennwert/Heizwert des idealen Gases angewendet werden, um den molaren Brennwert/Heizwert des realen Gases zu ermitteln. Für die Anwendung dieser Norm wurde diese Enthalpiekorrektur jedoch als so klein geschätzt, dass sie gerechtfertigterweise vernachlässigbar ist (siehe ISO/TR 29922 [1]).

Aufgrund der Vernachlässigung der Enthalpiekorrektur werden die molaren und massenbezogenen Brennwerte des realen Gases praktisch den entsprechenden Werten des idealen Gases gleichgesetzt. Für die Bestimmung des volumenbezogenen Brennwertes/Heizwertes des realen Gases anhand der entsprechenden Werte des idealen Gases ist jedoch der vorstehend erwähnte volumenbezogene Korrekturfaktor (Realgasfaktor) anzuwenden.

Abschließend sind Gleichungen für die Berechnungen des oberen und des unteren Wobbeindex entweder des realen oder des idealen Gases anhand der sonstigen hier betrachteten Eigenschaften angegeben.

In Abschnitt 12 sind tabellierte Werte für die maßgebenden physikalischen Eigenschaften der reinen Komponenten von Erdgas für jede der allgemein üblichen Referenzbedingungen angegeben. Beispielberechnungen sind in Anhang D angegeben.

6 Verhalten idealer und realer Gase

6.1 Verbrennungsenthalpie

Die grundlegendsten der für die Berechnung von Brenn- und Heizwerten erforderlichen physikalischen Größen sind die molaren Idealgas(Standard)-Verbrennungsenthalpien (molarer Idealgas-Brennwert/Heizwert) für die reinen Komponenten des Gases. Diese Größen werden durch komplexe Funktionen der Temperatur dargestellt; die erforderlichen Werte sind somit von der Referenztemperatur für die Verbrennung t_1 abhängig. Aus praktischen Gründen ist nicht vorgesehen, dass der Anwender die Berechnungen, die die entsprechenden Werte für eine beliebige Referenztemperatur der Verbrennung liefern, selbst durchführen sollte. Stattdessen sind Tabellenwerte für die Temperaturen $t_1 = 25\text{ °C}$, 20 °C , $15,55\text{ °C}$ (60 °F , siehe 3.12, Anmerkung 3), 15 °C (59 °F) und 0 °C angegeben. Die Herleitungen der in Abschnitt 12, Tabelle 3, aufgeführten Werte sind in ISO/TR 29922 [1] erörtert; wichtig ist, dass alle fünf Werte für jeden beliebigen Stoff in thermodynamischer Hinsicht wechselseitig konsistent sind.

6.2 Berechnung des Realgasfaktors

Für jeden volumenbezogenen Brennwert/Heizwert ist eine Realgas-Korrektur erforderlich, um der Abweichung des Realgasvolumens vom Idealgaszustand Rechnung zu tragen. Diese Korrektur ist in der Regel nicht vernachlässigbar und ebenfalls bei der Berechnung der Dichte, der relativen Dichte und des Wobbeindex erforderlich. ISO/TR 29922 [1] erörtert die Hintergrundinformationen dazu, wie die Korrekturen für das Volumen im Nicht-Idealgaszustand anzuwenden sind, sowie die angewendeten Grundsätze und rechtfertigt verwendete Vereinfachungen, welche die Durchführung leicht handhabbarer Berechnungen wie in nachstehender Gleichung (3) ermöglichen.

Diese Korrektur für das Volumen im Nicht-Idealgaszustand erfolgt durch Anwendung des Realgasfaktors Z für das Gemisch. Die Formel für den Realgasfaktor Z bei Referenzbedingungen für die Volumenmessung, der für die Berechnungen in den Abschnitten 7 bis 10 dieser Internationalen Norm erforderlich ist, lautet (siehe [1]):

$$Z(t_2, p_2) = 1 - \left(\frac{p_2}{p_0} \right) \times \left[\sum_{j=1}^N x_j \cdot s_j(t_2, p_0) \right]^2 \quad (3)$$

Dabei ist $p_0 = 101,325 \text{ kPa}$ (14,695 95 psi) und der Referenzdruck für die Volumenmessung p_2 wird in denselben Einheiten angegeben. Die Summierung erfolgt über alle N Komponenten des Gemisches und die Gleichung gilt für den Bereich $90 < p_2/\text{kPa} < 110$ ($13,05 < p_2/\text{psi} < 15,95$). Die Werte des so genannten Summenfaktors $s_j(t_2, p_0)$ sind in Abschnitt 12, Tabelle 2, für die vier allgemein interessierenden Referenztemperaturen für die Volumenmessung angegeben, und zwar für alle in dieser Internationalen Norm betrachteten Komponenten von Erdgas und Erdgas austauschenden Gasen. Die Herleitungen dieser Werte sind detailliert in ISO/TR 29922 [1] beschrieben.

ANMERKUNG Gleichung (3) darf auch für die Berechnung von Werten des Realgasfaktors reiner Komponenten verwendet werden, was allerdings nicht notwendigerweise zum genauesten möglichen Ergebnis führt. Insbesondere wird diese Gleichung weder für die Realgasfaktoren von Wasserstoff, Helium oder Neon mit $Z > 1$ noch für die bei den Referenzbedingungen für die Volumenmessung gasförmigen Komponenten, wie z. B. die höheren Kohlenwasserstoffe, annehmbare Ergebnisse liefern. Der Anwender sollte die Gebrauchstauglichkeit einer jeden derartigen Berechnung in Betracht ziehen, bevor er diese außerhalb des Kontextes dieser Internationalen Norm durchführt. Definitive Werte des Realgasfaktors für verschiedene reine Komponenten, nämlich die sogenannten Permanentgase, sind in ISO/TR 29922 [1] angegeben.

7 Berechnung des molaren Brennwertes/Heizwertes

7.1 Brennwert

Der molare Brennwert eines Gemisches bekannter Zusammensetzung bei einer Temperatur t_1 ist wie folgt zu berechnen:

$$(Hc)_G(t_1) = (Hc)_G^0(t_1) = \sum_{j=1}^N x_j \cdot [(Hc)_G^0]_j(t_1) \quad (4)$$

Dabei ist

$(Hc)_G^0(t_1)$ der molare Idealgas-Brennwert des Gemisches;

$(Hc)_G(t_1)$ der molare Realgas-Brennwert des Gemisches;

$[(Hc)_G^0]_j(t_1)$ der molare Idealgas-Brennwert der Komponente j ,

und

x_j der Stoffmengenanteil der Komponente j .

ANMERKUNG 1 Werte für $[(Hc)_G^0]_j$ sind druckunabhängig; folglich ist der Referenzdruck für die Verbrennung p_1 irrelevant und wird in dem angegebenen Variablenverzeichnis weggelassen.

ANMERKUNG 2 Der molare Idealgas-Brennwert/Heizwert eines Gases oder Gasgemisches ist in diesem Dokument als eine positive Größe definiert. Die in Tabelle 3 angegebenen Werte sind numerisch gleich den molaren Standard-Verbrennungsenthalpien, die jedoch konventionell als negative Größen dargestellt werden (siehe 3.7).

Zahlenwerte für $[(Hc)_G^0]_j(t_1)$ für $t_1 = 25\text{ °C}$ sind in Abschnitt 12, Tabelle 3, angegeben; diese Werte für $[(Hc)_G^0]_j(25)$ sind den in ISO/TR 29922 [1] aufgeführten Original-Literaturquellen entnommen. Die Werte für $[(Hc)_G^0]_j(t_1)$ für andere Temperaturen ($t_1 = 20\text{ °C}$, $15,55\text{ °C}$, 15 °C und 0 °C) sind ebenfalls in Tabelle 3 angegeben; diese Werte wurden von den Werten für 25 °C entsprechend den Verfahren nach ISO/TR 29922 [1] abgeleitet.

7.2 Heizwert

Der molare Heizwert eines Gemisches bekannter Zusammensetzung bei einer Temperatur t_1 ist wie folgt zu berechnen:

$$(Hc)_N(t_1) = (Hc)_N^0(t_1) = (Hc)_G^0(t_1) - \sum_{j=1}^N x_j \cdot \frac{b_j}{2} \cdot L^0(t_1) \quad (5)$$

Dabei ist

$(Hc)_N^0(t_1)$ der molare Idealgas-Heizwert des Gemisches;

$(Hc)_N(t_1)$ der molare Realgas-Heizwert des Gemisches;

$L^0(t_1)$ die Standard-Enthalpie der Verdampfung von Wasser bei t_1 ;

und

b_j die Anzahl der vorliegenden Wasserstoffatome in jedem Molekül der Komponente j (Wasserstoffatomindex).

Werte für $L^0(t_1)$ sind in Anhang A für 25 °C , 20 °C , $15,55\text{ °C}$, 15 °C und 0 °C angegeben. Werte für b_j sind in Abschnitt 12, Tabelle 1, angegeben.

8 Berechnung des massenbezogenen Brennwertes/Heizwertes

8.1 Brennwert

Der massenbezogene Brennwert eines Gemisches bekannter Zusammensetzung bei einer Temperatur t_1 ist wie folgt zu berechnen:

$$(Hm)_G(t_1) = (Hm)_G^0(t_1) = \frac{(Hc)_G^0(t_1)}{M} \quad (6)$$

Dabei ist

$(Hm)_G^0(t_1)$ der massenbezogene Idealgas-Brennwert des Gemisches;

$(Hm)_G(t_1)$ der massenbezogene Realgas-Brennwert des Gemisches;

und

M die molare Masse des Gemisches, die wie folgt zu berechnen ist:

$$M = \sum_{j=1}^N x_j \cdot M_j \quad (7)$$

Dabei ist

M_j die molare Masse der Komponente j .

Werte für die molare Masse aller in dieser Internationalen Norm berücksichtigten Komponenten sind in Abschnitt 12, Tabelle 1, angegeben.

8.2 Heizwert

Der massenbezogene Heizwert eines Gemisches bekannter Zusammensetzung bei einer Temperatur t_1 ist wie folgt zu berechnen:

$$(Hm)_N(t_1) = (Hm)_N^0(t_1) = \frac{(Hc)_N^0(t_1)}{M} \quad (8)$$

Dabei ist

$(Hm)_N^0(t_1)$ der massenbezogene Idealgas-Heizwert des Gemisches;

und

$(Hm)_N(t_1)$ der massenbezogene Realgas-Heizwert des Gemisches.

9 Berechnung des volumenbezogenen Brennwertes/Heizwertes

9.1 Idealgas-Brennwert

Der volumenbezogene Idealgas-Brennwert eines Gemisches bekannter Zusammensetzung bei einer Verbrennungstemperatur t_1 sowie bei einer Temperatur t_2 und einem Druck p_2 für die Volumenmessung ist wie folgt zu berechnen:

$$(Hv)_G^0(t_1; t_2, p_2) = \frac{(Hc)_G^0(t_1)}{V^0} \quad (9)$$

Dabei ist

$(Hv)_G^0(t_1; t_2, p_2)$ der volumenbezogene Idealgas-Brennwert des Gemisches;

V^0 das ideale molare Volumen des Gemisches, das wie folgt zu berechnen ist

$$V^0 = R \cdot T_2 / p_2 \quad (10)$$

R die Gaskonstante (siehe A.1); und

T_2 die absolute Temperatur.

9.2 Idealgas-Heizwert

Der volumenbezogene Idealgas-Heizwert eines Gemisches bekannter Zusammensetzung bei einer Verbrennungstemperatur t_1 sowie bei einer Temperatur t_2 und einem Druck p_2 für die Volumenmessung ist wie folgt zu berechnen:

$$(Hv)_N^0(t_1; t_2, p_2) = \frac{(Hc)_N^0(t_1)}{V^0} \quad (11)$$

Dabei ist $(Hv)_N^0(t_1; t_2, p_2)$ der volumenbezogene Idealgas-Heizwert des Gemisches.

9.3 Realgas-Brennwert

Der volumenbezogene Realgas-Brennwert eines Gemisches bekannter Zusammensetzung bei einer Verbrennungstemperatur t_1 sowie bei einer Temperatur t_2 und einem Druck p_2 für die Volumenmessung ist wie folgt zu berechnen:

$$(Hv)_G(t_1; t_2, p_2) = \frac{(Hc)_G^0(t_1)}{V} \quad (12)$$

Dabei ist

$(Hv)_G(t_1; t_2, p_2)$ der volumenbezogene Realgas-Brennwert des Gemisches; und

V das molare Realgas-Volumen des Gemisches, das wie folgt zu berechnen ist:

$$V = Z(p_2, t_2) \cdot R \cdot T_2 / p_2 \quad (13)$$

$Z(t_2, p_2)$ der Realgasfaktor bei den Referenzbedingungen für die Volumenmessung.

Der Realgasfaktor $Z(t_2, p_2)$ ist nach Gleichung (3) zu berechnen unter Verwendung von Werten für $s_j(t_2, p_2)$, die für einzelne reine Stoffe in Abschnitt 12, Tabelle 2, angegeben sind. Für die Anwendung dieser Internationalen Norm ist diese Berechnung ausschließlich anwendbar bei $Z > 0,9$.

9.4 Realgas-Heizwert

Der volumenbezogene Realgas-Heizwert eines Gemisches bekannter Zusammensetzung bei einer Verbrennungstemperatur t_1 sowie bei einer Temperatur t_2 und einem Druck p_2 für die Volumenmessung ist wie folgt zu berechnen:

$$(Hv)_N(t_1; t_2, p_2) = \frac{(Hc)_N^0(t_1)}{V} \quad (14)$$

Dabei ist $(Hv)_N(t_1; t_2, p_2)$ der volumenbezogene Realgas-Heizwert des Gemisches.

10 Berechnung zugehöriger Eigenschaften

10.1 Relative Dichte des idealen Gases

Die relative Dichte eines idealen Gases ist vom jeweiligen Referenzzustand unabhängig und wie folgt zu berechnen:

$$G^o = \frac{M}{M_{\text{Luft}}} \quad (15)$$

Dabei ist

- G^o die relative Dichte des idealen Gases;
- M die molare Masse des Gemisches, berechnet nach Gleichung (7); und
- M_{Luft} die molare Masse trockener Luft mit Referenzzusammensetzung.

Die Zusammensetzung von Referenzluft ist in TR 29922 [1] erörtert, wobei der Wert für $M_{\text{Luft}} = (28,965\,46 \pm 0,000\,17) \text{ kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$ abgeleitet wird (siehe auch A.3).

10.2 Dichte des idealen Gases

Die Dichte eines idealen Gases ist von dessen Temperatur t und Druck p abhängig und wie folgt zu berechnen:

$$D^o(t_2, p_2) = M/V^o \quad (16)$$

Dabei ist

- $D^o(t_2, p_2)$ die massenbezogene Dichte des idealen Gases bei Referenzbedingungen der Volumensmessung
- M die molare Masse des Gemisches, berechnet nach Gleichung (7); und
- V^o das ideale molare Volumen des Gemisches, berechnet nach Gleichung (10).

10.3 Oberer Wobbeindex des idealen Gases

Der obere Wobbeindex des idealen Gases ist wie folgt zu berechnen:

$$W_G^o(t_1; t_2, p_2) = \frac{(Hv)_G^o(t_1; t_2, p_2)}{\sqrt{G^o}} \quad (17)$$

Dabei ist

- $W_G^o(t_1; t_2, p_2)$ der obere Wobbeindex des idealen Gases; und
- $(Hv)_G^o(t_1; t_2, p_2)$ nach 9.1 berechnet.

10.4 Unterer Wobbeindex des idealen Gases

Der untere Wobbeindex des idealen Gases ist wie folgt zu berechnen:

$$W_N^o(t_1; t_2, p_2) = \frac{(Hv)_N^o(t_1; t_2, p_2)}{\sqrt{G^o}} \quad (18)$$

Dabei ist

$W_N^o(t_1; t_2, p_2)$ der untere Wobbeindex des idealen Gases; und

$(Hv)_N^o(t_1; t_2, p_2)$ nach 9.2 berechnet.

10.5 Relative Dichte des realen Gases

Die relative Dichte des realen Gases bei den Referenzbedingungen für die Volumenmessung (t_2, p_2) ist wie folgt zu berechnen:

$$G(t_2, p_2) = \frac{G^o \cdot Z_{\text{Luft}}(t_2, p_2)}{Z(t_2, p_2)} \quad (19)$$

Dabei ist

$G(t_2, p_2)$ die relative Dichte des realen Gases;

$Z(t_2, p_2)$ der Realgasfaktor des Gases; und

$Z_{\text{Luft}}(t_2, p_2)$ der Realgasfaktor trockener Luft mit Referenzzusammensetzung.

Der Realgasfaktor $Z(t_2, p_2)$ ist nach Gleichung (3) zu berechnen unter Verwendung von Werten für den Summenfaktor $s_j(t_2, p_2)$, die für einzelne reine Stoffe in Abschnitt 12, Tabelle 2, angegeben sind. Der Realgasfaktor $Z_{\text{Luft}}(t_2, p_2)$ ist wie folgt zu berechnen:

$$Z_{\text{Luft}}(t_2, p_2) = 1 - \frac{p_2}{p_o} \cdot [1 - Z_{\text{Luft}}(t_2, p_o)] \quad (20)$$

Dabei ist $p_o = 101,325 \text{ kPa}$ (14,695 95 psi) und der Referenzdruck der Volumenmessung p_2 wird in denselben Einheiten angegeben;

und (siehe A.3)

$$Z_{\text{Luft}}(t_2 = 0 \text{ °C}, p_o) = 0,999\,419;$$

$$Z_{\text{Luft}}(t_2 = 15 \text{ °C}, p_o) = 0,999\,595;$$

$$Z_{\text{Luft}}(t_2 = 15,55 \text{ °C}, p_o) = 0,999\,601;$$

$$Z_{\text{Luft}}(t_2 = 20 \text{ °C}, p_o) = 0,999\,645.$$

Gleichung (20) gilt für den Bereich $90 < p_2/\text{kPa} < 110$ ($13,05 < p_2/\text{psi} < 15,95$).

10.6 Dichte des realen Gases

Die Dichte des realen Gases bei Referenzbedingungen der Volumenmessung ist wie folgt zu berechnen:

$$D(t_2, p_2) = \frac{D^o(t_2, p_2)}{Z(t_2, p_2)} \quad (21)$$

Dabei ist

$D(t_2, p_2)$ die Dichte des realen Gases.

10.7 Oberer Wobbeindex des realen Gases

Der obere Wobbeindex des realen Gases ist wie folgt zu berechnen:

$$W_G(t_1; t_2, p_2) = \frac{(Hv)_G(t_1; t_2, p_2)}{\sqrt{G(t_2, p_2)}} \quad (22)$$

Dabei ist

$W_G(t_1; t_2, p_2)$ der obere Wobbeindex des realen Gases; und

$(Hv)_G(t_1; t_2, p_2)$ nach 9.3 berechnet.

10.8 Unterer Wobbeindex des realen Gases

Der untere Wobbeindex des realen Gases ist wie folgt zu berechnen:

$$W_N(t_1; t_2, p_2) = \frac{(Hv)_N(t_1; t_2, p_2)}{\sqrt{G(t_2, p_2)}} \quad (23)$$

Dabei ist

$W_N(t_1; t_2, p_2)$ der untere Wobbeindex des realen Gases; und

$(Hv)_N(t_1; t_2, p_2)$ nach 9.4 berechnet.

ANMERKUNG Für die in diesem Abschnitt beschriebenen Berechnungen, insbesondere die Berechnungen der Dichte D , ist in Bezug auf die zu verwendenden Einheiten sorgfältig vorzugehen. Wenn R in Joule je Mol Kelvin, p in Kilopascal und M in Kilogramm je Kilomol ausgedrückt werden, ergibt sich der Wert für D automatisch in Kilogramm je Kubikmeter.

11 Unsicherheit der Berechnung

11.1 Grundsätze

Entsprechend den allgemeinen Grundsätzen der Metrologie, zusammengefasst im GUM [2], ist gewöhnlich jedes Berechnungsergebnis mit einem beigefügten Schätzwert der Unsicherheit anzugeben.

Bekanntlich sind drei unterschiedliche Verfahren durchführbar zur Schätzung der Unsicherheiten von Eigenschaften, die unter Anwendung dieser Internationalen Norm berechnet werden können, und zwar:

- a) ein Verfahren unter Verwendung von Empfindlichkeitskoeffizienten, analytisch hergeleitet als partielle Ableitungen der betrachteten Größe in Zusammenhang mit jeder der Eingabegrößen;

- b) ein Verfahren, bei dem ebenfalls Empfindlichkeitskoeffizienten eingesetzt werden, die jedoch unter Verwendung von Finite-Differenzen-Verfahren abgeleitet werden;
- c) ein numerisches Verfahren auf der Grundlage von Monte-Carlo-Verfahren.

Die Verfahren b) und c) sind möglicherweise anwendbar und zulässig für die Verwendung mit dieser Norm, werden jedoch in diesem Abschnitt nicht weiter berücksichtigt. Im Allgemeinen ist jedes Verfahren zulässig, das den im GUM [2] festgelegten Grundsätzen entspricht, und einige der möglichen Optionen, einschließlich Verfahren b) and c), sind weiterführend in ISO/TR 29922 [1] beschrieben.

Verfahren a) bis c) sind dafür vorgesehen, einen für ein unabhängiges Einzelergebnis spezifischen Schätzwert der Unsicherheit zu liefern. Im GUM [2] wird jedoch anerkannt, dass es bei vielen Routinebestimmungen unpraktisch oder unangemessen sein kann, eine unabhängige Unsicherheit für jedes Ergebnis zu fordern. Ein gutes Beispiel im vorliegenden Kontext könnte die durchgehende Online-Gaschromatographie-Analyse sein.

Für derartige Fälle schlägt der GUM vor, dass ausreichende Angaben für einen in vernünftigem Maß allgemeinen Schätzwert häufig geschätzt oder aus maßgebenden Aufzeichnungen über Kalibrierung, Übereinstimmung, gesetzlich vorgeschriebene Prüfung und/oder Akkreditierung usw. gefolgert werden dürfen (hier als allgemeines Verfahren bezeichnet).

11.2 Gleichungen für das Analyseverfahren

Der Wert jeder physikalischen Eigenschaft Y darf als Funktion F der maßgebenden Eingabevariablen y_i und q_k wie folgt ausgedrückt werden:

$$Y = F(y_1, y_2, y_3, \dots, y_n, q_1, q_2, q_3, \dots, q_m) \quad (24)$$

Dabei ist

y_i die Größe einer Eingabevariablen mit einer zugehörigen Unsicherheit $u(y_i)$; und

q_k ein Eingabeparameter, der ohne Unsicherheit festgelegt ist (d. h. als genau angesehen wird).

Die Standardunsicherheit $u(Y)$ für Eigenschaft Y darf entsprechend dem allgemeinen, im GUM [2] festgelegten Ausdruck für korrelierte Eingabegrößen y_i, y_j wie folgt berechnet werden:

$$u^2(Y) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial Y}{\partial y_i} \right) \cdot u(y_i) \cdot r(y_i, y_j) \cdot u(y_j) \cdot \left(\frac{\partial Y}{\partial y_j} \right) \quad (25)$$

Dabei ist

$\left(\frac{\partial Y}{\partial y_i} \right)$ die partielle Ableitung (Empfindlichkeitskoeffizient) von Y bezogen auf y_i ; und

$r(y_i, y_j)$ der Korrelationskoeffizient zwischen y_i und y_j .

Anhang B enthält die Gleichungen für die Berechnung der Unsicherheit, die sich aus der Anwendung von Gleichung (25) auf jede der Eigenschaften ergeben, die Gegenstand dieser Internationalen Norm sind. Die erforderlichen Eingabegrößen sind die Zusammensetzung des Gemisches, die physikalischen Eigenschaften der reinen Komponente (oder des Gemisches), sämtlich mit ihren zugehörigen Unsicherheiten, sowie die jeweils zutreffenden Werte des Korrelationskoeffizienten.

11.3 Eingabewerte für das Analyseverfahren

11.3.1 Zusammensetzung und zugehörige Unsicherheiten

Für die Schätzung des Beitrags von Unsicherheiten in der Analyse der molaren Zusammensetzung zur Gesamtunsicherheit in der Berechnung der Eigenschaften sind gewöhnlich die folgenden Annahmen erforderlich:

- eine vollständige molare Zusammensetzung (wie in Abschnitt 1 dieser Internationalen Norm gefordert) ist verfügbar und der Wert des Stoffmengenanteils jeder Komponente ist mit der zugehörigen Unsicherheit angegeben; und
- Stoffmengenanteile der Komponente sind voneinander unabhängig, d. h. es bestehen keine Korrelationen zwischen den Stoffmengenanteilen der Komponenten.

Hinsichtlich der für die Gleichungen in Anhang B erforderlichen Korrelationskoeffizienten $r(x_i, x_j)$ bedeuten diese Anforderungen, dass die Matrix der Korrelationskoeffizienten eine Identitätsmatrix ist, d. h. alle diagonalen Elemente haben den Wert 1 und alle nichtdiagonalen Elemente haben den Wert 0.

ANMERKUNG 1 Aufgrund der üblichen Art der Bestimmung der Zusammensetzung eines Gemisches kann Annahme b) nicht als strikt gültig angesehen werden. Zwischen den Zusammensetzungen x_i, x_j besteht stets eine signifikante Korrelation, da die für die Bestimmung der Stoffmengenanteile aus den Rohdaten erforderliche Datenverarbeitung (Normalisierung) Korrelationen (zusätzlich zu jeglichen Korrelationen vor der Normalisierung) bewirkt. Folglich wird die Annahme, dass es sich bei $r(x_i, x_j)$ um Elemente einer Identitätsmatrix handelt, im Allgemeinen nicht standhalten. Allerdings wird bei einer typischen Erdgasanalyse (einschließlich Unsicherheiten) die unter der Annahme einer Identitätsmatrix bestimmte Unsicherheit jeder berechneten Eigenschaft als „sicher“ angesehen (d. h. dabei wird gewöhnlich die Unsicherheit jeder Eigenschaft zu hoch geschätzt, obwohl es dafür keine vollkommene Garantie gibt).

ANMERKUNG 2 Die für die Normalisierung angewendeten Strategien unterscheiden sich möglicherweise signifikant voneinander. Anwender dieser Norm sollten beachten, dass unterschiedliche Vorgehensweisen zu unterschiedlichen Ungültigkeitsgraden der Annahme einer Identitätsmatrix für $r(x_i, x_j)$ führen können. Zu einer Erörterung von Normalisierungsverfahren siehe ISO 6974-1 und ISO 6974-2.

ANMERKUNG 3 Anhang D, Beispiel 3, enthält einen Leitfaden bezüglich der Unterschiede, die sich aus der Anwendung der vollständigen Kenntnis der Elemente $r(x_i, x_j)$ der vollständigen (Normalisierungs-)Matrix der Stoffmengenanteil-Korrelationskoeffizienten statt der Annahme einer Identitätsmatrix ergeben.

In Abwesenheit spezifischerer Angaben sind $r(x_i, x_j)$ als die Elemente einer Identitätsmatrix anzunehmen. Dennoch werden die besten Schätzwerte der Unsicherheit durch Anwendung der vollständigen (Normalisierungs-)Matrix der Stoffmengenanteil-Korrelationskoeffizienten erzielt. Sind ausreichende Rohdaten für die Analyse verfügbar, kann die Normalisierungsmatrix unter Verwendung der Gleichungen nach ISO 14912 (8.5.2.3) berechnet werden.

11.3.2 Nicht zusammensetzungsbezogene Eingabewerte

Schätzwerte der Standardunsicherheiten für die nicht auf die Zusammensetzung (Eigenschaften) bezogenen Eingabewerte (mit Ausnahme der molaren Masse) sind in den Tabellen der komponentenspezifischen Daten in Abschnitt 12 sowie der Hilfsdaten in Anhang A angegeben. In Abwesenheit spezifischerer Angaben sind alle diese Daten (wiederum mit Ausnahme der molaren Masse) als unkorreliert anzunehmen, d. h. die Korrelationskoeffizienten $r(y_i, y_j)$ sind als Elemente einer Identitätsmatrix anzunehmen. Die in Anhang B angegebenen Gleichungen wurden auf der Grundlage dieser Annahme hergeleitet.

Für die molaren Massen sind die aufgeführten Werte zwangsläufig hochgradig korreliert, da sie durch die Summierung gemeinsamer Werte der jeweiligen Atommassen beurteilt werden. Jedes Element $r(M_i, M_j)$ der Korrelationsmatrix wird angegeben durch:

$$r(M_i, M_j) = \frac{\{[a_i \cdot a_j \cdot u^2(A_C)] + [b_i \cdot b_j \cdot u^2(A_H)] + [c_i \cdot c_j \cdot u^2(A_N)] + [d_i \cdot d_j \cdot u^2(A_O)] + [e_i \cdot e_j \cdot u^2(A_S)]\}}{u(M_i) \cdot u(M_j)} \quad (26)$$

Dabei sind

a_j, b_j, c_j, d_j und e_j die Atomindizes von C, H, N, O und S in der j -ten Molekülart $C_aH_bN_cO_dS_e$, wofür Werte in Abschnitt 12, Tabelle 1, angegeben sind;

$u(A_C), u(A_H), u(A_N), u(A_O)$ und $u(A_S)$ die Standardunsicherheiten der Atommassen von C, H, N, O und S, wofür Werte in A.2 angegeben sind; und

$$u(M_j) = \sqrt{[a_j \cdot u(A_C)]^2 + [b_j \cdot u(A_H)]^2 + [c_j \cdot u(A_N)]^2 + [d_j \cdot u(A_O)]^2 + [e_j \cdot u(A_S)]^2} \quad (27)$$

11.4 Erweiterte Unsicherheit

Die erweiterte Unsicherheit $U(Y)$ der berechneten Eigenschaft Y ist zu berechnen, indem die Standardunsicherheit $u(Y)$ mit einem geeigneten Erweiterungsfaktor k (dessen Wert festzulegen ist) wie folgt multipliziert wird:

$$U(Y) = k \cdot u(Y) \quad (28)$$

ANMERKUNG Ein Erweiterungsfaktor von $k = 2$ ergibt im Allgemeinen ein Vertrauensniveau von etwa 95 %.

11.5 Angabe der Ergebnisse

11.5.1 Allgemeines

Die Ergebnisse sind entsprechend einem der folgenden Schemata anzugeben, die hier mit absteigender Präferenz aufgeführt sind. Sind ausreichend Daten verfügbar, wird dringend empfohlen, einen Schätzwert der Unsicherheit als grundlegenden Teil der vollständigen und ordnungsgemäßen Angabe eines Ergebnisses einzubeziehen.

11.5.2 Analyseverfahren

Für einen mit dem Analyseverfahren, d. h. unter Verwendung der in Anhang B angegebenen Gleichungen, ermittelten Schätzwert der Unsicherheit ist die erweiterte Unsicherheit unter Anwendung der üblichen Rundungsregeln auf zwei Stellen zu runden. Der Wert der berechneten Größe ist anzugeben in der Form $Y \pm U(Y)$ (einschließlich Einheiten).

Der numerische Wert von Y ist auf die niedrigstwertige Stelle im gerundeten Wert der erweiterten Unsicherheit $U(Y)$ zu runden.

Dieses Schema repräsentiert das ordnungsgemäße festgelegte Verfahren in vollständiger Übereinstimmung mit dem GUM.

ANMERKUNG Für die beste praktische Durchführung sollte die Angabe des Ergebnisses auch eine Aussage dazu enthalten, ob die bei der Schätzung der Unsicherheit verwendeten Elemente $r(x_i, x_j)$ der (Normalisierungs-)Matrix der Stoffmengenanteil-Korrelationskoeffizienten bekannt sind oder als Elemente einer Identitätsmatrix angenommen werden.

11.5.3 Allgemeines Verfahren

Wird ein Schätzwert der Unsicherheit mit dem allgemeinen Verfahren ermittelt, ist die erweiterte Unsicherheit unter Anwendung der üblichen Rundungsregeln auf zwei Stellen zu runden. Der numerische Wert von Y ist auf die niedrigstwertige Stelle im gerundeten Wert der gefolgerten erweiterten Unsicherheit $U(Y)$ zu runden.

Die Entscheidung darüber, ob für die Anwendung die explizite Angabe des Wertes von $U(Y)$ mit jedem Ergebnis erforderlich ist, obliegt dem Anwender. In vielen Anwendungen reicht möglicherweise eine allgemeine Aussage, die viele ähnliche Ergebnisse einschließt, aus.

11.5.4 Kontingenzverfahren

Es verbleiben Situationen, in denen beispielsweise aufgrund unzureichender Unsicherheitsdaten für die Analyse oder ungeeigneter Datenverarbeitungsbedingungen eine ordnungsgemäße Schätzung der Unsicherheiten von Eigenschaften in Übereinstimmung mit dem GUM nicht möglich ist.

In derartigen Fällen und in Abwesenheit eines Beweises für die unzureichende Genauigkeit der Eingabedaten für den Analysezweck muss der Anwender dieser Norm Ergebnisse für jede berechnete Eigenschaft angeben, die wie folgt gerundet sind:

Molarer Brennwert	– auf 0,01 kJ·mol ⁻¹
Massenbezogener Brennwert	– auf 0,01 MJ·kg ⁻¹
Volumenbezogener Brennwert	– auf 0,01 MJ·m ⁻³
Relative Dichte	– auf 0,000 1
Dichte	– auf 0,000 1 kg·m ⁻³
Wobbeindex	– auf 0,01 MJ·m ⁻³

Es liegt in der Verantwortung des Anwenders, für jede Eigenschaft zu bewerten, ob die Angabe dieser Anzahl von Dezimalstellen gerechtfertigt ist; sofern dies nicht der Fall ist, muss die Anzahl der angegebenen Stellen entsprechend verringert werden. Die Anzahl der angegebenen Stellen darf nicht erhöht werden.

11.6 Anwendung der Unsicherheit

Vorstehend in diesem Abschnitt sind die Mittel zur Berechnung eines Wertes der erweiterten Unsicherheit beschrieben, der dem entsprechenden berechneten Wert der physikalischen Eigenschaft zuzuordnen ist. Ein derartiges „alleinstehendes“ Ergebnis eines Analyseverfahrens kann möglicherweise die Anforderung eines Anwenders vollständig erfüllen.

Allerdings können Nützlichkeit und Anwendbarkeit eines Schätzwertes der Unsicherheit häufig vom Kontext abhängig sein, in dem die Berechnungen durchzuführen sind. In diesem Zusammenhang ist die Identifizierung einer Anzahl unterschiedlicher Fälle möglich. Diese schließen u. a. Folgendes ein:

- Gebrauchstauglichkeit:** Besteht die Anforderung in dem Nachweis der Funktionsfähigkeit eines Teils der Analyseausrüstung innerhalb der jeweiligen Spezifikation der Unsicherheit (einer Eigenschaft) bei einer Anzahl verschiedener Prüfgase mit bekannter Unsicherheit (einer Eigenschaft), dann ist die jeweils zu prüfende Größe die nach diesem Abschnitt berechnete vollständige Unsicherheit, d. h. einschließlich sowohl der zusammensetzungsbezogenen als auch der nicht zusammensetzungsbezogenen Komponenten der Unsicherheit.
- Analyseverträglichkeit:** Besteht die Anforderung in dem Nachweis der Übereinstimmung (mit der Unsicherheit) zwischen den Ergebnissen von zwei (oder mehr) identischen (oder ähnlichen) Analyseausrüstungen bei denselben Prüfgasen, dann müssen zuerst jene Komponenten der Unsicherheit ausgeschlossen werden, die alle Analyseausrüstungen gemeinsam haben, d. h. die nicht zusammensetzungsbezogenen Unsicherheiten (der Komponenteneigenschaften). Dies kann erreicht werden, indem jede der nicht zusammensetzungsbezogenen Unsicherheiten in den jeweils zutreffenden Unsicherheitsgleichungen gleich 0 gesetzt wird, so dass sich die einzige Differenz zwischen den Ergebnissen aus den zusammensetzungsbezogenen Termen ergibt.
- Äußere Verträglichkeit:** Besteht die Anforderung in der Prüfung der Übereinstimmung zwischen den mit einer Analyseausrüstung erzielten Ergebnissen und den durch direkte Messung einer Eigenschaft an denselben Prüfgasen erzielten Ergebnissen, dann ist das zutreffende Maß der Unsicherheit für die Analyseausrüstung die vollständige Unsicherheit, d. h. wiederum einschließlich sowohl der zusammensetzungsbezogenen als auch der nicht zusammensetzungsbezogenen Komponenten der Unsicherheit.

- d) Wiederholpräzision: Besteht die Anforderung in der Prüfung der Leistung eines einzelnen Teils der Analyseausrüstung unter Bedingungen der Wiederholpräzision entsprechend den Festlegungen im GUM [2], dann darf die Wiederholpräzision jedes Ergebnisses (einer Eigenschaft) direkt anhand des Satzes der berechneten Eigenschaftswerte beurteilt werden. Alternativ ist es auch möglich, die Unsicherheit (einer Eigenschaft) durch Bestimmung der Wiederholpräzision jeder Zusammensetzung und anschließende Verwendung dieser Werte als Eingabewerte für die jeweilige Unsicherheitsgleichung zu ermitteln. In diesem Fall ist es wiederum erforderlich, die Terme der nicht zusammensetzungsbezogenen Unsicherheiten, da sie durchgängig gleich sind, gleich 0 zu setzen.

12 Datentabellen

Tabelle 1 — Molare Masse und Atomindizes für Erdgaskomponenten

<i>j</i>	Komponente	Molare Masse M_j kg·kmol ⁻¹	Atomindex				
			a_j	b_j	c_j	d_j	e_j
1	Methan	16,042 46	1	4	0	0	0
2	Ethan	30,069 04	2	6	0	0	0
3	Propan	44,095 62	3	8	0	0	0
4	n-Butan	58,122 20	4	10	0	0	0
5	2-Methylpropan	58,122 20	4	10	0	0	0
6	n-Pentan	72,148 78	5	12	0	0	0
7	2-Methylbutan	72,148 78	5	12	0	0	0
8	2,2-Dimethylpropan	72,148 78	5	12	0	0	0
9	n-Hexan	86,175 36	6	14	0	0	0
10	2-Methylpentan	86,175 36	6	14	0	0	0
11	3-Methylpentan	86,175 36	6	14	0	0	0
12	2,2-Dimethylbutan	86,175 36	6	14	0	0	0
13	2,3-Dimethylbutan	86,175 36	6	14	0	0	0
14	n-Heptan	100,201 94	7	16	0	0	0
15	n-Octan	114,228 52	8	18	0	0	0
16	n-Nonan	128,255 10	9	20	0	0	0
17	n-Decan	142,281 68	10	22	0	0	0
56	n-Undecan	156,308 26	11	24	0	0	0
57	n-Dodecan	170,334 84	12	26	0	0	0
58	n-Tridecan	184,361 42	13	28	0	0	0
59	n-Tetradecan	198,388 00	14	30	0	0	0
60	n-Pentadecan	212,414 58	15	32	0	0	0
18	Ethen	28,053 16	2	4	0	0	0
19	Propen	42,079 74	3	6	0	0	0
20	1-Buten	56,106 32	4	8	0	0	0
21	cis-2-Buten	56,106 32	4	8	0	0	0
22	trans-2-Buten	56,106 32	4	8	0	0	0
23	2-Methylpropen	56,106 32	4	8	0	0	0
24	1-Penten	70,132 90	5	10	0	0	0
25	Propadien	40,063 86	3	4	0	0	0
26	1,2-Butadien	54,090 44	4	6	0	0	0
27	1,3-Butadien	54,090 44	4	6	0	0	0
28	Ethyn	26,037 28	2	2	0	0	0
29	Cyclopentan	70,132 90	5	10	0	0	0
30	Methylcyclopentan	84,159 48	6	12	0	0	0

<i>j</i>	Komponente	Molare Masse M_j kg·kmol ⁻¹	Atomindex				
			a_j	b_j	c_j	d_j	e_j
31	Ethylcyclopentan	98,186 06	7	14	0	0	0
32	Cyclohexan	84,159 48	6	12	0	0	0
33	Methylcyclohexan	98,186 06	7	14	0	0	0
34	Ethylcyclohexan	112,212 64	8	16	0	0	0
35	Benzol	78,111 84	6	6	0	0	0
36	Toluol	92,138 42	7	8	0	0	0
37	Ethylbenzol	106,165 00	8	10	0	0	0
38	o-Xylol	106,165 00	8	10	0	0	0
39	Methanol	32,041 86	1	4	0	1	0
40	Methanthiol	48,107 46	1	4	0	0	1
41	Wasserstoff	2,015 88	0	2	0	0	0
42	Wasser	18,015 28	0	2	0	1	0
43	Wasserstoffsulfid	34,080 88	0	2	0	0	1
44	Ammoniak	17,030 52	0	3	1	0	0
45	Wasserstoffcyanid	27,025 34	1	1	1	0	0
46	Kohlenstoffmonoxid	28,010 1	1	0	0	1	0
47	Carbonylsulfid	60,075 1	1	0	0	1	1
48	Kohlenstoffdisulfid	76,140 7	1	0	0	0	2
49	Helium	4,002 602	0	0	0	0	0
50	Neon	20,179 7	0	0	0	0	0
51	Argon	39,948	0	0	0	0	0
52	Stickstoff	28,013 4	0	0	2	0	0
53	Sauerstoff	31,998 8	0	0	0	2	0
54	Kohlenstoffdioxid	44,009 5	1	0	0	2	0
55	Schwefeldioxid	64,063 8	0	0	0	2	1
	Luft	28,965 46					

ANMERKUNG Die vorstehend angegebenen Werte der molaren Masse wurden durch gewichtete Summierung der Atommassen (Atomgewichte) der betroffenen Elemente erzielt, wie in Tabelle A.1 und in ISO/TR 29922 [1] aufgeführt. Alle Dezimalstellen wurden in dieser Tabelle beibehalten, d. h. ein Runden auf eine festgelegte Anzahl von Dezimalstellen ist (ausgenommen für Luft) nicht erfolgt. Werte der Standardunsicherheit für molare Massen sind in dieser Tabelle nicht aufgeführt. Bei Bedarf sind sie unter Verwendung von Gleichung (27) zu berechnen.

Tabelle 2 — Summenfaktoren für Erdgaskomponenten bei verschiedenen Referenzbedingungen für die Volumenmessung

<i>j</i>	Komponente	Summenfaktor s_j bei verschiedenen Referenztemperaturen für die Volumenmessung				$u(s_j)$
		0 °C	15 °C	15,55 °C	20 °C	
1	Methan	0,048 86	0,044 52	0,044 37	0,043 17	0,000 5
2	Ethan	0,099 7	0,091 9	0,091 6	0,089 5	0,001 1
3	Propan	0,146 5	0,134 4	0,134 0	0,130 8	0,001 6
4	n-Butan	0,202 2	0,184 0	0,183 4	0,178 5	0,003 9
5	2-Methylpropan	0,188 5	0,172 2	0,171 7	0,167 3	0,003 1
6	n-Pentan	0,258 6	0,236 1	0,235 4	0,229 5	0,010 7
7	2-Methylbutan	0,245 8	0,225 1	0,224 4	0,218 9	0,008 8
8	2,2-Dimethylpropan	0,224 5	0,204 0	0,203 3	0,197 9	0,006 0
9	n-Hexan	0,331 9	0,300 1	0,299 0	0,290 7	0,027 1
10	2-Methylpentan	0,311 4	0,282 6	0,281 6	0,274 0	0,022 1
11	3-Methylpentan	0,299 7	0,276 2	0,275 4	0,269 0	0,023 4
12	2,2-Dimethylbutan	0,253 0	0,235 0	0,234 4	0,229 5	0,017 3
13	2,3-Dimethylbutan	0,283 6	0,263 2	0,262 5	0,256 9	0,020 7
14	n-Heptan	0,407 6	0,366 8	0,365 4	0,354 7	0,100 1
15	n-Octan	0,484 5	0,434 6	0,432 9	0,419 8	0,100 2
16	n-Nonan	0,561 7	0,503 0	0,501 0	0,485 6	0,100 6
17	n-Decan	0,671 3	0,599 1	0,596 7	0,577 8	0,100 6
56	n-Undecan	0,722 8	0,640 2	0,637 4	0,615 9	0,100 6
57	n-Dodecan	0,856 7	0,761 5	0,758 3	0,733 5	0,100 6
58	n-Tridecan	0,912 9	0,806 1	0,802 6	0,774 8	0,100 6
59	n-Tetradecan	1,013 5	0,894 0	0,890 0	0,858 9	0,100 6
60	n-Pentadecan	1,117 6	0,984 9	0,980 4	0,945 9	0,100 6
18	Ethen	0,086 8	0,079 9	0,079 7	0,077 8	0,001 0
19	Propen	0,138 1	0,126 7	0,126 3	0,123 2	0,001 6
20	1-Buten	0,196 4	0,177 6	0,177 0	0,172 1	0,004 1
21	cis-2-Buten	0,207 5	0,187 0	0,186 3	0,181 0	0,004 5
22	trans-2-Buten	0,207 2	0,186 8	0,186 2	0,180 9	0,004 3
23	2-Methylpropen	0,196 6	0,177 7	0,177 0	0,172 1	0,003 7
24	1-Penten	0,262 2	0,229 7	0,228 7	0,220 8	0,010 2
25	Propadien	0,141 7	0,131 3	0,131 0	0,128 2	0,002 5
26	1,2-Butadien	0,206 3	0,186 2	0,185 5	0,180 3	0,011 0
27	1,3-Butadien	0,199 3	0,173 9	0,173 1	0,167 3	0,003 8
28	Ethyn	0,093 6	0,083 6	0,083 3	0,080 8	0,002 4
29	Cyclopentan	0,240 9	0,222 1	0,221 5	0,216 4	0,013 7
30	Methylcyclopentan	0,281 7	0,261 2	0,260 5	0,254 8	0,026 2
31	Ethylcyclopentan	0,422 7	0,368 4	0,366 6	0,353 1	0,100 6

<i>j</i>	Komponente	Summenfaktor s_j bei verschiedenen Referenztemperaturen für die Volumenmessung				$u(s_j)$
		0 °C	15 °C	15,55 °C	20 °C	
32	Cyclohexan	0,293 9	0,268 6	0,267 7	0,261 0	0,032 5
33	Methylcyclohexan	0,366 7	0,331 7	0,330 5	0,321 3	0,066 8
34	Ethylcyclohexan	0,527 5	0,454 7	0,452 4	0,434 5	0,100 6
35	Benzol	0,275 2	0,252 7	0,252 0	0,246 0	0,027 4
36	Toluol	0,372 6	0,335 9	0,334 7	0,325 1	0,100 2
37	Ethylbenzol	0,412 9	0,379 7	0,378 5	0,369 4	0,100 2
38	o-Xylol	0,485 2	0,441 1	0,439 6	0,427 7	0,100 4
39	Methanol	0,580 6	0,446 4	0,442 3	0,411 7	0,023 3
40	Methanthiol	0,190 9	0,170 0	0,169 3	0,164 0	0,011 7
41	Wasserstoff	−0,01	−0,01	−0,01	−0,01	0,025 0
42	Wasser	0,309 3	0,256 2	0,254 6	0,241 9	0,015 0
43	Wasserstoffsulfid	0,100 6	0,092 3	0,092 0	0,089 8	0,002 3
44	Ammoniak	0,123 0	0,110 0	0,109 6	0,106 2	0,002 1
45	Wasserstoffcyanid	0,317 5	0,276 5	0,275 1	0,264 4	0,007 6
46	Kohlenstoffmonoxid	0,025 8	0,021 7	0,021 5	0,020 3	0,001 0
47	Carbonylsulfid	0,121 1	0,111 4	0,111 0	0,108 4	0,005 4
48	Kohlenstoffdisulfid	0,218 2	0,195 8	0,195 1	0,189 4	0,009 8
49	Helium	−0,01	−0,01	−0,01	−0,01	0,025 0
50	Neon	−0,01	−0,01	−0,01	−0,01	0,025 0
51	Argon	0,030 7	0,027 3	0,027 2	0,026 2	0,001 0
52	Stickstoff	0,021 4	0,017 0	0,016 9	0,015 6	0,001 0
53	Sauerstoff	0,031 1	0,027 6	0,027 5	0,026 5	0,001 0
54	Kohlenstoffdioxid	0,082 1	0,075 2	0,074 9	0,073 0	0,002 0
55	Schwefeldioxid	0,157 9	0,140 6	0,140 0	0,135 6	0,003 5
ANMERKUNG Sämtliche vorstehend angegebenen Werte für s_j und $u(s_j)$ wurden mit den in ISO/TR 29922 [1] beschriebenen Verfahren hergeleitet. Alle Werte beziehen sich auf einen Druck von 101,325 kPa (1 Normalatmosphäre = 14,695 95 psi).						

Tabelle 3 — Molare Brennwerte für Erdgaskomponenten im Idealgaszustand bei verschiedenen Referenztemperaturen für die Verbrennung

<i>j</i>	Komponente	Brennwert des idealen Gases bei verschiedenen Referenztemperaturen $\left((H_c)_G^0(t_1) \right)_j \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$					<i>u(Hc)</i>
		0 °C	15 °C	15,55 °C	20 °C	25 °C	
1	Methan	892,92	891,51	891,46	891,05	890,58	0,19
2	Ethan	1 564,35	1 562,14	1 562,06	1 561,42	1 560,69	0,51
3	Propan	2 224,03	2 221,10	2 220,99	2 220,13	2 219,17	0,51
4	n-Butan	2 883,35	2 879,76	2 879,63	2 878,58	2 877,40	0,72
5	2-Methylpropan	2 874,21	2 870,58	2 870,45	2 869,39	2 868,20	0,72
6	n-Pentan	3 542,91	3 538,60	3 538,45	3 537,19	3 535,77	0,23
7	2-Methylbutan	3 536,01	3 531,68	3 531,52	3 530,25	3 528,83	0,23
8	2,2-Dimethylpropan	3 521,75	3 517,44	3 517,28	3 516,02	3 514,61	0,25
9	n-Hexan	4 203,24	4 198,24	4 198,06	4 196,60	4 194,95	0,32
10	2-Methylpentan	4 195,64	4 190,62	4 190,44	4 188,97	4 187,32	0,53
11	3-Methylpentan	4 198,27	4 193,22	4 193,04	4 191,56	4 189,90	0,53
12	2,2-Dimethylbutan	4 185,86	4 180,83	4 180,65	4 179,17	4 177,52	0,48
13	2,3-Dimethylbutan	4 193,68	4 188,61	4 188,43	4 186,94	4 185,28	0,46
14	n-Heptan	4 862,88	4 857,18	4 856,98	4 855,31	4 853,43	0,67
15	n-Octan	5 522,41	5 516,01	5 515,78	5 513,90	5 511,80	0,76
16	n-Nonan	6 182,92	6 175,82	6 175,56	6 173,48	6 171,15	0,81
17	n-Decan	6 842,69	6 834,90	6 834,62	6 832,33	6 829,77	0,87
56	n-Undecan	7 502,22	7 493,73	7 493,42	7 490,93	7 488,14	1,54
57	n-Dodecan	8 162,43	8 153,24	8 152,91	8 150,21	8 147,19	1,13
58	n-Tridecan	8 821,88	8 811,99	8 811,63	8 808,73	8 805,48	1,21
59	n-Tetradecan	9 481,71	9 471,12	9 470,73	9 467,63	9 464,15	1,32
60	n-Pentadecan	10 141,65	10 130,23	10 129,82	10 126,52	10 122,82	1,44
18	Ethen	1 413,55	1 412,12	1 412,07	1 411,65	1 411,18	0,21
19	Propen	2 061,57	2 059,43	2 059,35	2 058,73	2 058,02	0,34
20	1-Buten	2 721,57	2 718,71	2 718,60	2 717,76	2 716,82	0,39
21	cis-2-Buten	2 714,88	2 711,94	2 711,83	2 710,97	2 710,00	0,50
22	trans-2-Buten	2 711,09	2 708,26	2 708,16	2 707,33	2 706,40	0,47
23	2-Methylpropen	2 704,88	2 702,06	2 701,96	2 701,13	2 700,20	0,42
24	1-Penten	3 381,32	3 377,76	3 377,63	3 376,59	3 375,42	0,73
25	Propadien	1 945,26	1 943,97	1 943,92	1 943,54	1 943,11	0,60
26	1,2-Butadien	2 597,15	2 595,12	2 595,05	2 594,46	2 593,79	0,40
27	1,3-Butadien	2 544,14	2 542,11	2 542,03	2 541,44	2 540,77	0,41
28	Ethyn	1 301,86	1 301,37	1 301,35	1 301,21	1 301,05	0,32
29	Cyclopentan	3 326,14	3 322,19	3 322,05	3 320,89	3 319,59	0,36
30	Methylcyclopentan	3 977,05	3 972,46	3 972,29	3 970,95	3 969,44	0,56

		Brennwert des idealen Gases bei verschiedenen Referenztemperaturen $\left((Hc)_G^0\right)_j(t_1)$ kJ·mol ⁻¹					$u(Hc)$
j	Komponente	0 °C	15 °C	15,55 °C	20 °C	25 °C	
31	Ethylcyclopentan	4 637,20	4 631,93	4 631,74	4 630,20	4 628,47	0,71
32	Cyclohexan	3 960,68	3 956,02	3 955,85	3 954,49	3 952,96	0,32
33	Methylcyclohexan	4 609,33	4 604,08	4 603,89	4 602,36	4 600,64	0,71
34	Ethylcyclohexan	5 272,76	5 266,90	5 266,69	5 264,97	5 263,05	0,95
35	Benzol	3 305,12	3 302,90	3 302,81	3 302,16	3 301,43	0,27
36	Toluol	3 952,77	3 949,83	3 949,72	3 948,86	3 947,89	0,51
37	Ethylbenzol	4 613,16	4 609,54	4 609,40	4 608,34	4 607,15	0,66
38	o-Xylol	4 602,18	4 598,64	4 598,52	4 597,48	4 596,31	0,76
39	Methanol	766,60	765,09	765,03	764,59	764,09	0,13
40	Methanthiol	1 241,64	1 240,28	1 240,23	1 239,84	1 239,39	0,32
41	Wasserstoff	286,64	286,15	286,13	285,99	285,83	0,02
42	Wasser (siehe Anmerkung 3)	45,064	44,431	44,408	44,222	44,013	0,004
43	Wasserstoffsulfid	562,93	562,38	562,36	562,19	562,01	0,23
44	Ammoniak	384,57	383,51	383,47	383,16	382,81	0,18
45	Wasserstoffcyanid	671,92	671,67	671,66	671,58	671,50	1,26
46	Kohlenstoffmonoxid	282,80	282,91	282,91	282,95	282,98	0,06
47	Carbonylsulfid	548,01	548,14	548,15	548,19	548,23	0,24
48	Kohlenstoffdisulfid	1 104,05	1 104,32	1 104,33	1 104,40	1 104,49	0,43

ANMERKUNG 1 Alle Werte für $\left((Hc)_G^0\right)_j(t_1)$ bei $t_1 = 25$ °C wurden aus [3] entnommen, mit Ausnahme von Methan ($j = 1$), das detailliert als Sonderfall ISO/TR 29922 [1] erörtert wird, Wasser (siehe Anmerkung 3) sowie der C₁₁- bis C₁₅-n-Alkane (siehe [1]). Werte für $\left((Hc)_G^0\right)_j(t_1)$ bei $t_1 = 20$ °C, 15,55 °C, 15 °C und 0 °C wurden anhand der entsprechenden Werte bei 25 °C mittels der in [1] festgelegten Berechnung ermittelt.

ANMERKUNG 2 Der Wert für $u(Hc)$ für Methan wurde ISO/TR 29922 [1] entnommen. Für alle anderen Komponenten wurde der Wert für $u(Hc)$ entsprechend den an anderer Stelle in ISO/TR 29922 beschriebenen Verfahren geschätzt.

ANMERKUNG 3 Der von Null verschiedene Brennwert/Heizwert von Wasserdampf ($j = 42$) ergibt sich formal aus der Definition des Brennwertes, die die Kondensation des gesamten Wasserdampfes in den Verbrennungsprodukten in den flüssigen Aggregatzustand verlangt. Somit trägt jeder Wasserdampf in einem ansonsten trockenen Gas mit seiner latenten Verdampfungswärme zum Brennwert des Gemisches bei. Die angegebenen Werte wurden A.4 entnommen. Zu näherer Erläuterung siehe ISO/TR 29922 [1].

Anhang A (normativ)

Werte für Hilfskonstanten

A.1 Gaskonstante

Der Wert für die molare Gaskonstante R (einschließlich Standardunsicherheit) ist der derzeitigen CODATA-Empfehlung [4] zu entnehmen, wie in Tabelle A.1 angegeben.

Tabelle A.1 — Die molare Gaskonstante

Molare Gaskonstante R $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	Standardunsicherheit $u(R)$ $\text{J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$
8,314 462 1	0,000 007 5

A.2 Atomgewichte der Elemente

Die Atommassen, in $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$ jedes der Elemente Kohlenstoff, Wasserstoff, Stickstoff, Sauerstoff und Schwefel ist für die Beurteilung von Gleichung (27) erforderlich. Die Werte sind den IUPAC-Empfehlungen (2007) [5] von zu entnehmen, wie in Tabelle A.2 angegeben. TR 29922 enthält eine umfassendere Erörterung zu Atommassen.

Tabelle A.2 — Atomgewichte der Elemente

Element		Atomgewicht A $\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$	Standardunsicherheit $u(A)/\text{kg}\cdot\text{kmol}^{-1}$
Kohlenstoff	C	12,010 7	0,000 4
Wasserstoff	H	1,007 94	0,000 035
Stickstoff	N	14,006 7	0,000 1
Sauerstoff	O	15,999 4	0,000 15
Schwefel	S	32,065	0,002 5
Helium	He	4,002 602	0,000 001
Neon	Ne	20,179 7	0,000 3
Argon	Ar	39,948	0,000 5

A.3 Eigenschaften trockener Luft

Der Wert für die molare Masse trockener Luft mit festgelegter Referenzzusammensetzung, gerundet auf fünf Dezimalstellen, ist den Angaben in Tabelle A.3 [1,6] zu entnehmen.

Tabelle A.3 — Molare Masse trockener Luft

Molare Masse M_{Luft} kg·kmol ⁻¹	Standardunsicherheit $u(M_{\text{Luft}})$ kg·kmol ⁻¹
28,965 46	0,000 17

Die angegebene Standardunsicherheit ergibt sich ausschließlich aus den bekannten Unsicherheiten der molaren Massen der Bestandteile. Die Unsicherheit der Zusammensetzung wurde nicht berücksichtigt, d. h. die Zusammensetzung von Luft wird für diese Zwecke als genau angenommen.

Der Wert für den Realgasfaktor trockener Luft mit Referenzzusammensetzung ist bei jeder der vier allgemein üblichen Referenzbedingungen für die Volumenmessung den Angaben in Tabelle A.4 zu entnehmen.

Tabelle A.4 — Realgasfaktor trockener Luft bei verschiedenen Referenzbedingungen

Referenzbedingung	Realgasfaktor Z_{Luft}	Standardunsicherheit $u(Z_{\text{Luft}})$
0 °C, 101,325 kPa	0,999 419	0,000 015
15 °C, 101,325 kPa	0,999 595	0,000 015
15,55 °C, 101,325 kPa	0,999 601	0,000 015
20 °C, 101,325 kPa	0,999 645	0,000 015

Jeder dieser Werte wurde entsprechend der Gleichung nach GERG-2004 [7,8] berechnet. Für die drei höchsten Temperaturen entsprechen diese Werte den jüngeren Angaben der Zusammensetzung nach CIPM-2007 [6] bis innerhalb 2 bis 3 Teile je Million, diese Zusammensetzung gilt jedoch nicht bei 0 °C. Die Werte der Standardunsicherheit wurden direkt aus [6] entnommen.

A.4 Standard-Verdampfungsenthalpie von Wasser

Die molare Standard-Verdampfungsenthalpie von Wasser ist für jede der fünf allgemein üblichen Referenzbedingungen für die Verbrennung erforderlich, um die Berechnungen der Differenz zwischen dem molaren Idealgas-Brennwert und dem molaren Idealgas-Heizwert für jede Komponente zu ermöglichen. Zu verwenden sind die in Tabelle A.5 angegebenen Werte, die nach IAPWS-1995 [9,10] berechnet wurden.

Tabelle A.5 — Standard-Verdampfungsenthalpie von Wasser

Temperatur	Verdampfungsenthalpie	Standardunsicherheit
°C	L^0 kJ·mol ⁻¹	$u(L^0)$ kJ·mol ⁻¹
0	45,064	0,004
15	44,431	0,004
15,55 (60 °F)	44,408	0,004
20	44,222	0,004
25	44,013	0,004

Anhang B (normativ)

Gleichungen für Berechnungen der Unsicherheit

B.1 Allgemeines

Die in diesem Anhang angegebenen Gleichungen sind für Berechnungen der Unsicherheit für die unter Anwendung dieser Internationalen Norm berechenbaren Eigenschaften zu verwenden. Da die Eigenschaften des idealen Gases wahrscheinlich nicht als Endergebnis erforderlich sind, gelten die angegebenen Gleichungen mit einer zugehörigen Unsicherheit speziell für das reale Gas.

ANMERKUNG Ist eine zugehörige Unsicherheit für eine Eigenschaft des idealen Gases erforderlich, kann diese durch Einsetzen von $s = 0$ und $u(s) = 0$ in der jeweiligen Gleichung ermittelt werden.

B.2 Molarer Brennwert

$$u^2((Hc)_G) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N [(Hc)_G^0]_i \cdot u(x_i) \cdot r(x_i, x_j) \cdot [(Hc)_G^0]_j \cdot u(x_j) + \sum_{i=1}^N x_i^2 \cdot u^2([(Hc)_G^0]_i) \quad (B.1)$$

B.3 Massenbezogener Brennwert

$$\begin{aligned} \left(\frac{u((Hm)_G)}{(Hm)_G} \right)^2 &= \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(\frac{[(Hc)_G^0]_i}{(Hc)_G} - \frac{M_i}{M} \right) \cdot u(x_i) \cdot r(x_i, x_j) \cdot \left(\frac{[(Hc)_G^0]_j}{(Hc)_G} - \frac{M_j}{M} \right) \cdot u(x_j) \\ &\quad + \frac{\sum_{i=1}^N x_i^2 \cdot u^2([(Hc)_G^0]_i)}{(Hc)_G^2} \\ &\quad + \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i \cdot u(M_i) \cdot r(M_i, M_j) \cdot x_j \cdot u(M_j)}{M^2} \end{aligned} \quad (B.2)$$