TCVN **TIÊU CHUẨN QUỐC GIA**

TCVN 12798:2019
ISO 6976:2016

Xuất bản lần 1

KHÍ THIÊN NHIÊN – PHƯƠNG PHÁP TÍNH NHIỆT TRỊ, KHỐI LƯỢNG RIÊNG, TỶ KHỐI VÀ CHỈ SỐ WOBBE TỪ THÀNH PHẦN

Natural gas – Calculation of calorific values, density, relative density and Wobbe indices from composition

HÀ NỘI – 2019

Lời nói đầu

TCVN 12798:2019 hoàn toàn tương đương với ISO 6976:2016.

TCVN 12798:2019 do Ban kỹ thuật tiêu chuẩn quốc gia TCVN/TC 193 *Sản phẩm khí* biên soạn, Tổng cục Tiêu chuẩn Đo lường Chất lượng đề nghị, Bộ Khoa học và Công nghệ công bố.

Lời giới thiệu

Trong giao nhận thương mại nội địa và quốc tế đối với khí thiên nhiên luôn luôn yêu cầu xác định chính xác cả khối lượng và chất lượng khí được mua bán. Tiêu chuẩn này quy định các phương pháp để tính các tính chất chính mô tả chất lượng khí, là nhiệt trị tổng và nhiệt trị thực, khối lượng riêng, tỷ khối, chỉ số Wobbe tổng và chỉ số Wobbe thực. Các phương pháp đưa ra giá trị trung bình tính toán các tính chất này và độ không đảm bảo đối với khí thiên nhiên, chất thay thế khí thiên nhiên hoặc nhiên liệu dạng khí dễ cháy tương tự có thành phần đã biết tại các điều kiện chuẩn sử dụng thông thường.

Thông thường, các giá trị của các đặc tính khác nhau tính được theo tiêu chuẩn này sẽ khác chỉ những lượng rất nhỏ với các giá trị tính được sử dụng phiên bản thứ hai của tiêu chuẩn này (1995). Trong tiêu chuẩn này, công nhận:

a) Chấp nhận các rà soát chi tiết trong tiêu chuẩn này không phải không có giá trị, vì phần mềm thiết bị cần nâng cấp;

b) Kết quả của các rà soát này, mức năng lượng được ghi lại và năng lượng được chi trả sẽ thay đổi chút ít;

c) Có thể xảy ra các tác động không mong muốn nếu những rà soát được thực hiện không thích hợp; ví dụ, nếu những rà soát được thực hiện tại các điểm vào trên hệ thống đường ống nhưng không thực hiện tại các điểm ra, khi đó sẽ dẫn đến sự không cân bằng về số liệu;

d) Cần tính đến các quy định hiện hành, thương mại, hợp đồng

Vì những lý do này và phụ thuộc vào ứng dụng của người sử dụng, việc đánh giá tác động có thể tiến hành thích hợp để xác định thời gian và quy trình thỏa thuận để thực hiện các điều khoản của tiêu chuẩn này.

Khí thiên nhiên – Phương pháp tính nhiệt trị, khối lượng riêng, tỷ khối và chỉ số Wobbe từ thành phần

Natural gas – Calculation of calorific values, density, relative density and Wobbe indices from composition

1 Phạm vi áp dụng

Tiêu chuẩn này quy định các phương pháp tính nhiệt trị tổng, nhiệt trị thực, khối lượng riêng, tỷ khối, chỉ số Wobbe tổng và chỉ số Wobbe thực của các khí thiên nhiên, chất thay thế khí thiên nhiên và các nhiên liệu khí dễ cháy khác, khi biết thành phần của khí tính theo mol. Các phương pháp được quy định cung cấp phương tiện tính các tính chất của hỗn hợp khí tại các điều kiện chuẩn đã sử dụng phổ biến.

Thống nhất sử dụng thành phần khí bằng đơn vị mol. Xác định thành phần khí này bằng phân tích sắc ký khí được hướng dẫn trong TCVN 12047-1 (ISO 6974-1) và TCVN 12047-2 (ISO 6974-2).

Các phương pháp tính toán đòi hỏi các giá trị đối với các tính chất vật lý khác nhau của các thành phần tinh khiết; các giá trị này, cùng với độ không đảm bảo, được cung cấp trong các bảng thành phần và nguồn của chúng được xác định.

Các phương pháp được đưa ra để tính độ không đảm bảo tiêu chuẩn của các tính chất.

Các phương pháp tính các giá trị của các tính chất theo mol, khối lượng hoặc theo thể tích có thể áp dụng đối với bất kỳ khí thiên nhiên, chất thay thế khí thiên nhiên hoặc nhiên liệu dễ cháy khác thường là khí, ngoại trừ đối với các tính chất tính theo thể tích phương pháp bị hạn chế đối với các hỗn hợp mà hệ số nén tại các điều kiện chuẩn lớn hơn 0,9.

Các phép tính ví dụ được nêu trong Phụ lục D đối với các phương pháp tính toán được khuyến nghị.

CHÚ THÍCH 1: Trong tiêu chuẩn này, các từ hạn định "cao cấp" ("superior"), "cao hơn" ("higher"), "phía trên" ("upper") và "tổng" ("total") là từ đồng nghĩa với "tổng" ("gross"); giống như vậy, "kém hơn" ("inferior") và "thấp hơn" ("lower") là đồng nghĩa với "thực" ("net"). Thuật ngữ "nhiệt trị"("heating value") là đồng nghĩa với "nhiệt lượng" ("calorific value"); "khối lượng riêng khối" ("mass density") và "khối lượng riêng" ("specific density") là đồng nghĩa với "khối lượng riêng" ("density"); "trọng lượng riêng" ("specific density") đồng nghĩa với "tỷ khối" ("relative density"); "trị số Wobbe" ("Wobbe number") đồng nghĩa với "chỉ số Wobbe" ("Wobbe index"); "hệ số khả năng nén" (compressbility factor") đồng nghĩa với "hệ số nén" ("compression factor"). Khối lượng phân tử định lượng không thứ nguyên về mặt số là bằng với khối lượng phân tử tính bằng $kg \cdot kmol^{-1}$.

CHÚ THÍCH 2: Không có các giới hạn rõ ràng về thành phần mà các phương pháp đã mô tả trong tài liệu này có thể áp dụng được. Tuy nhiên, hạn chế của các phép tính theo thể tích đối với các hỗn hợp có hệ số nén lớn hơn 0,9 tại các điều kiện chuẩn thiết lập các giới hạn tuyệt đối về thành phần.

CHÚ THÍCH 3: Vì phần mol của nước có mặt thông thường không có sẵn từ phép phân tích sắc ký đồ, thực tế người ta tính các tính chất lý học trên cơ sở khí khô và có xét đến các ảnh hưởng của hơi nước trong quy trình tách. Tuy nhiên, nếu phần mol của hơi nước được biết, khi đó các phép tính tính chất có thể được tiến hành hoàn toàn theo các quy trình được mô tả ở đây. Các ảnh hưởng của hơi nước lên nhiệt trị, ở đó nhiệt trị được đo trực tiếp hoặc được tính toán, được thảo luận trong ISO/TR 29922.

CHÚ THÍCH 4: Đối với các hydrocacbon no có số cacbon 7 hoặc cao hơn, đồng phân bất kỳ có mặt được bao gồm với đồng phân bình thường có số cacbon giống nhau.

CHÚ THÍCH 5: Nếu yêu cầu của người sử dụng bao gồm việc thay thế, ví dụ, nhóm C_{6+} hoặc C_{7+} của các cấu tử chưa được phân giải về mặt phân tích bởi các cấu tử-giả đơn lẻ, khi đó nhiệm vụ của người sử dụng là thiết lập thành phần phần mol, và do đó các tính chất, của cấu tử giả là phù hợp với mục đích trong ứng dụng cụ thể. Bất kỳ cái gì được gọi là "nước khán giả" và "hydro sulffua không dễ cháy" được xử lý như là các cấu tử giả bằng cách thiết lập entalpy thích hợp của các giá trị cháy về zero.

2 Tài liệu viện dẫn

Các tài liệu viện dẫn sau đây là cần thiết để áp dụng tiêu chuẩn này. Đối với các tài liệu viện dẫn ghi năm công bố thì áp dụng bản được nêu. Đối với các tài liệu viện dẫn không ghi năm công bố thì áp dụng bản mới nhất, bao gồm cả các sửa đổi, bổ sung (nếu có).

TCVN 12047-1 (ISO 6974-1) *Khí thiên nhiên – Xác định thành phần và độ không đảm bảo kèm theo bằng sắc ký khí – Phần 1: Hướng dẫn chung và phương pháp tính thành phần*

TCVN 12047-2 (ISO 6974-2) *Khí thiên nhiên – Xác định thành phần và độ không đảm bảo kèm theo bằng sắc ký khí – Phần 2: Phương pháp tính độ không đảm bảo*

ISO 14912:2003 *Gas analysis – Conversion of gas mixture composition data (Phân tích khí – Chuyển đổi dữ liệu thành phần hỗn hợp khí)*

3 Thuật ngữ và định nghĩa

Tiêu chuẩn này áp dụng các thuật ngữ và định nghĩa sau.

3.1

Nhiệt trị tổng (gross calorific value)

Lượng nhiệt được sinh ra từ việc đốt cháy hoàn toàn một lượng khí xác định trong oxy, tại áp suất, p_1, giữ nguyên không đổi, và tất cả các sản phẩm cháy được quy về cùng nhiệt độ

quy định, t_1, là sản phẩm của các chất phản ứng, tất cả các sản phẩm này ở trạng thái khí ngoại trừ nước, được ngưng tụ thành trạng thái lỏng tại t_1.

CHÚ THÍCH 1: Nếu lượng khí được quy định tính theo mol, nhiệt trị tổng được ký hiệu là $(Hc)_G(t_1, p_1)$; tính theo khối lượng, nhiệt trị tổng được ký hiệu là $(Hm)_G(t_1, p_1)$. Nếu lượng khí được quy định tính theo thể tích, nhiệt trị tổng được ký hiệu là $(Hv)_G(t_1, p_1; t_2, p_2)$, và t_2 và p_2 là các điều kiện chuẩn (đo) thể tích khí (xem Hình 1).

3.2

Nhiệt trị thực (net calorific value)

Lượng nhiệt được sinh ra từ việc đốt cháy toàn bộ lượng khí xác định trong oxy, tại áp suất, p_1, giữ nguyên không đổi, và tất cả các sản phẩm của quá trình đốt cháy được quy về về cùng nhiệt độ quy định, t_1, như sản phẩm của các chất phản ứng, tất cả các sản phẩm này đang ở trạng thái khí.

CHÚ THÍCH 1: Tính theo mol, khối lượng, thể tích, nhiệt trị thực được ký hiệu tương ứng là $(Hc)_N(t_1, p_1)$, $(Hm)_N(t_1, p_1)$ và $(Hv)_N(t_1, p_1; t_2, p_2)$.

3.3

Khối lượng riêng (density)

Khối lượng của mẫu khí chia cho thể tích của nó tại các điều kiện quy định về áp suất và nhiệt độ.

3.4

Tỷ khối (relative density)

Khối lượng riêng của khí chia cho khối lượng không khí khô có thành phần chuẩn tại các điều kiện quy định giống nhau về áp suất và nhiệt độ.

CHÚ THÍCH 1: Thuật ngữ tỷ khối lý tưởng áp dụng khi cả hai khí và không khí được xem như là khí tuân theo định luật khí lý tưởng (3.8). Thuật ngữ tỷ khối thực áp dụng khi cả hai khí và không khí được xem như là các chất lỏng thực (3.9). Đối với thành phần chuẩn cố định của không khí khô, xem ISO/TR 29922.

3.5

Chỉ số Wobbe tổng (gross Wobbe index)

Nhiệt trị tổng tính theo thể tích, tại các điều kiện chuẩn quy định, chia cho căn bậc hai của tỷ khối tại các điều kiện chuẩn đo quy định giống nhau.

CHÚ THÍCH 1: Trong sử dụng thông thường, và khi không có bất kỳ hạn định nào khác, thuật ngữ chỉ số Wobbe được xác định ở đây là chỉ số Wobbe tổng.

3.6

Chỉ số Wobbe thực (net Wobbe index)

Nhiệt trị thực tính theo thể tích, tại các điều kiện chuẩn quy định, chia cho căn bậc hai của tỷ khối tại các điều kiện chuẩn đo quy định giống nhau.

3.7

Entalpy chuyển hóa (enthalpy of transformation)

Lượng nhiệt giải phóng cùng với sự thay đổi điều kiện (sự chuyển hóa) của một chất hoặc hệ thống từ một điều kiện (ban đầu) đến điều kiện khác (cuối cùng).

CHÚ THÍCH 1: Sự giải phóng nhiệt dương được hiển thị bởi quy ước nhiệt động học là bằng con số entalpy âm tăng lên mà không kể dấu.

CHÚ THÍCH 2: Trong tiêu chuẩn này, những thông tin dưới đây có thể được xác định:

- **Entalpy của sự cháy**: điều kiện ban đầu là điều kiện của hỗn hợp tỷ lượng chưa cháy của các chất phản ứng và điều kiện cuối cùng là điều kiện của các sản phẩm cháy tại áp suất và nhiệt độ như nhau
- **Entalpy chuẩn của sự bay hơi**: điều kiện ban đầu là điều kiện của một chất ở trạng thái lỏng bão hòa và điều kiện cuối cùng là điều kiện của cùng chất ở trạng thái giả thuyết của khí lý tưởng tại cùng nhiệt độ;
- **Sự chênh lệch entalpy**: điều kiện ban đầu là điều kiện của khí hoặc hỗn hợp khí tại nhiệt độ T_1 và điều kiện cuối cùng là điều kiện của khí hoặc hỗn hợp khí đã nêu tại cùng áp suất nhưng tại nhiệt độ khác nhau T_2;
- **Sự hiệu chỉnh entalpy (entaly còn lại)**: điều kiện ban đầu là điều kiện của hỗn hợp khí và khí trong trạng thái giả thuyết của khí lý tưởng và điều kiện cuối cùng là điều kiện của khí và hỗn hợp khí đã nêu tại cùng áp suất và nhiệt độ trong trạng thái khí thực.

3.8

Khí lý tưởng (ideal gas)

Khí tuân theo định luật khí lý tưởng

CHÚ THÍCH 1: Định luật khí lý tưởng có thể được biểu thị là

$$p \cdot V^\circ = R \cdot T$$

trong đó

p là áp suất tuyệt đối;

T là nhiệt độ nhiệt động học;

V° là thể tích bị chiếm bởi một mol khí lý tưởng (thể tích mol lý tưởng);

R là hằng số khí tính bằng đơn vị sẵn có.

3.9

Khí thực (real gas)

Khí không có tính lý tưởng về thể tích

CHÚ THÍCH 1: Không có khí thực tuân theo định luật khí lý tưởng. Sự lệch khỏi tính lý tưởng thể tích có thể được viết theo phương trình trạng thái

$$p \cdot V = Z(p,T) \cdot R \cdot T$$

trong đó

V là thể tích bị chiếm bởi một mol khí thực (thể tích mol thực)

Z(p,T) là biến số, thường gần với một, và được biết như là hệ số nén (3.10)

3.10

Hệ số nén (compression factor)

Thể tích thực của lượng khí nhất định tại nhiệt độ và áp suất quy định chia cho thể tích của nó được tính từ định luật khí lý tưởng ở cùng các điều kiện.

3.11

Điều kiện cháy chuẩn (combustion reference conditions)

Nhiệt độ quy định, t_1, và áp suất, p_1, tại đó nhiên liệu được đốt cháy.

3.12

Điều kiện đo chuẩn (metering reference conditions)

Nhiệt độ quy định, t_2, áp suất, p_2, tại đó thể tích của nhiên liệu bị đốt cháy được xác định.

CHÚ THÍCH 1: Không có lý do *ưu tiên* đối với các điều kiện đo chuẩn giống như các điều kiện cháy chuẩn (xem Hình 1).

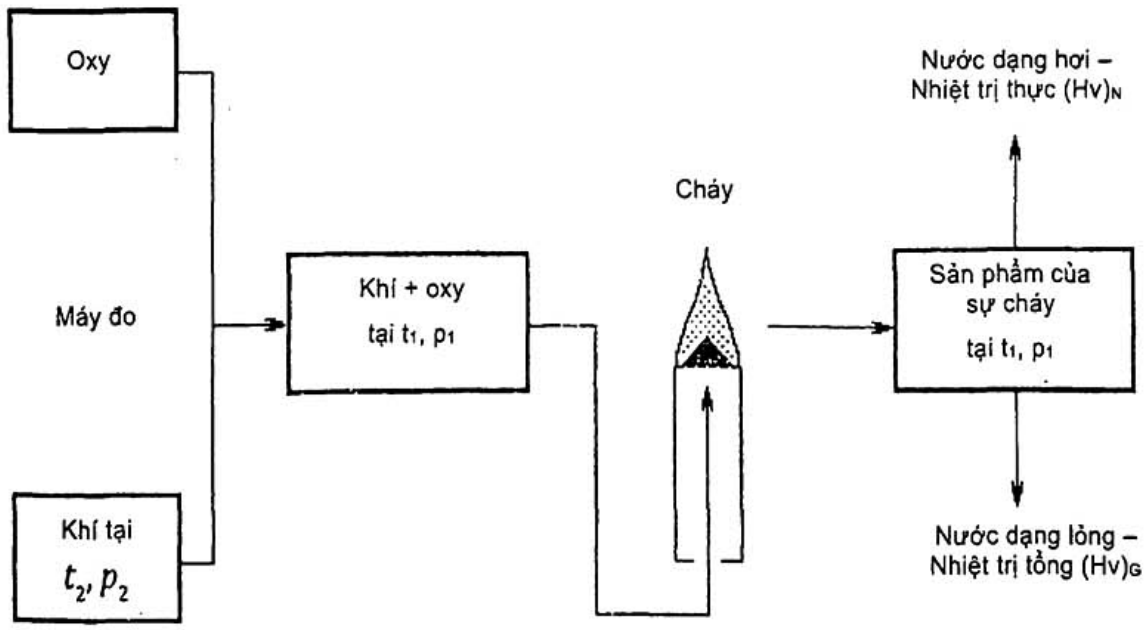
CHÚ THÍCH 2: Một dải các điều kiện chuẩn được sử dụng trên toàn thế giới.

CHÚ THÍCH 3: Toàn bộ tiêu chuẩn này, việc sử dụng 15,55 °C được dự kiến như là ghi nhanh đối với độ Celsius chính xác tương đương với 60 °F, nghĩa là $15^{5/9}$ hoặc 15,55 (số thập phân tuần hoàn) °C.

CHÚ THÍCH 4: Sự tương đương chính xác của 101,325 kPa với psi có thể được tính toán từ

$(101\ 325) \cdot (0{,}3048/12)^2 / (0{,}45359237) \cdot (9{,}80665) = 14{,}695949 \ldots$

Trong thực tế, giá trị này thông thường được làm tròn đến 14,696 psi và giá trị làm tròn bằng với 101,325 kPa.



$$\frac{\text{Nhiệt được giải phóng}}{\text{Thể tích khí đo được}} = \text{Nhiệt trị Hv}$$

Hình 1 – Nhiệt trị tính theo thể tích – Các điều kiện đo và cháy chuẩn

4 Ký hiệu và đơn vị

4.1 Đại lượng

Ký hiệu	Ý nghĩa	Đơn vị
A	Khối lượng nguyên tử	$kg.kmol^{-1}$
a	Chỉ số nguyên tử cacbon trong các loại phân tử tổng quát $C_aH_bN_cO_dS_e$	–
b	Chỉ số nguyên tử hydro trong các loại phân tử tổng quát $C_aH_bN_cO_dS_e$	–
c	Chỉ số nguyên tử nitơ trong các loại phân tử tổng quát $C_aH_bN_cO_dS_e$	–
D	Khối lượng riêng	–
d	Chỉ số nguyên tử oxy trong các loại phân tử tổng quát $C_aH_bN_cO_dS_e$	–

Ký hiệu	Ý nghĩa	Đơn vị
E	Chỉ số nguyên tử lưu huỳnh trong các loại phân tử tổng quát $C_aH_bN_cO_dS_e$	–
F	Hàm số tạo ra tính chất Y	–
G	Tỷ khối	–
Hc	Nhiệt trị tính theo mol	$kJ.mol^{-1}$
Hm	Nhiệt trị tính theo khối lượng	$MJ.kg^{-1}$
Hv	Nhiệt trị tính theo thể tích	$MJ.m^{-3}$
k	Hệ số bao phủ	–
L	Entalpy phân tử của sự hóa hơi của nước	$kJ.mol^{-1}$
M	Khối lượng phân tử	$kg.kmol^{-1}$
N	Số lượng các cấu tử trong hỗn hợp	–
n	Số lượng phép xác định trong bộ các giá trị	–
p	Áp suất (tuyệt đối)	kPa
q	Lượng đầu vào chính xác đối với phép tính của Y	(thay đổi)
R	Hằng số khí phân tử	$J.mol^{-1}.K^{-1}$
r	Hệ số tương quan	–
s	Hệ số tổng	–
T	Nhiệt độ nhiệt động học (tuyệt đối)	K
t	Nhiệt độ Celsius	°C
U(Y)	Độ không đảm bảo mở rộng của Y	(thay đổi)
u(Y)	Độ không đảm bảo tiêu chuẩn của Y	(thay đổi)
V	Thể tích phân tử	$m^3.mol^{-1}$
W	Chỉ số Wobbe	$MJ.m^{-3}$
x	Phần mol	–
Y	Tính chất lý học chung (chưa được quy định)	(thay đổi)
y	Lượng đầu vào không chính xác để tính Y	(thay đổi)
Z	Hệ số nén	–

4.2 Chỉ số dưới

Ký hiệu	Ý nghĩa
G	Tổng (nhiệt trị hoặc chỉ số Wobbe)
i	Bộ đếm hàng loạt Nhận dạng cấu tử
j	Bộ đếm hàng loạt Nhận dạng cấu tử
k	Bộ đếm hàng loạt
m	Bộ đếm hàng loạt
N	Thực (nhiệt trị và chỉ số Wobbe)
n	Bộ đếm hàng loạt
Air	Chỉ không khí
0	Giá trị (gốc) chuẩn (của áp suất)
1	Trạng thái cháy chuẩn
2	Trạng thái đo chuẩn

4.3 Chỉ số trên

Ký hiệu	Ý nghĩa
o	Đối với trạng thái khí lý tưởng

5 Nguyên tắc

Các phương pháp để tính các nhiệt trị (tổng và thực), khối lượng riêng, tỷ khối và các chỉ số Wobbe (tổng và thực) của khí thiên nhiên bất kỳ, chất thay thế khí thiên nhiên hoặc nhiên liệu dạng khí dễ cháy khác từ thành phần mol đã được xác định.

Đối với các giá trị nhiệt trị, những phương pháp này sử dụng công thức trong đó tất cả các loại phân tử riêng lẻ của hỗn hợp khí nhiệt trị tổng tính theo mol khí lý tưởng đã lập bảng được xác định phù hợp với phần mol của nó, sau đó tất cả các số hạng được cộng lại với nhau để nhận được trung bình phần mol của đại lượng này đối với hỗn hợp khí lý tưởng tính theo mol. Các công thức tiếp theo chuyển đổi đại lượng này thành nhiệt trị thực khí lý tưởng, và sau đó thành nhiệt trị tổng và nhiệt trị thực khí lý tưởng tính theo hoặc khối lượng hoặc thể tích.

Tương tự, đối với khối lượng riêng và tỷ khối, các phương pháp sử dụng các công thức trong đó, đối với tất cả các loại phân tử riêng lẻ của hỗn hợp khí, giá trị lập bảng của khối lượng phân tử

được xác định phù hợp với phần mol của nó, tất cả các số hạng được cộng lại với nhau để nhận được trung bình phần mol của đại lượng này. Các công thức đã cho chuyển đổi khối lượng phân tử trung bình phần mol này sang khối lượng riêng hoặc tỷ khối khí lý tưởng.

Các giá trị của khối lượng riêng và tỷ khối đối với khí thực khi đó nhận được do việc áp dụng hệ số hiệu chính thể tích (hệ số nén), dẫn đến cách tính toán các giá trị trên.

Đối với các nhiệt trị, sự chuyển đổi từ trạng thái khí lý tưởng sang trạng thái khí thực về nguyên tắc là không đơn giản. Việc áp dụng trước tiên nên được thực hiện hiệu chính entalpy nhỏ (entalpy còn lại) đối với nhiệt trị (tổng hoặc thực) của khí lý tưởng tính theo mol, do vậy thu được nhiệt trị của khí thực tính theo mol. Tuy nhiên đối với các mục đích của tiêu chuẩn này, sự hiệu chính entalpy được ước tính là quá nhỏ không đáng kể (xem ISO/TR 29922).

Hệ quả của việc bỏ qua sự hiệu chính entalpy, các nhiệt trị khí thực tính theo mol và khối lượng được thiết lập là bằng với các giá trị khí lý tưởng tương ứng. Tuy nhiên để nhận được các giá trị của các nhiệt trị khí thực (tổng và thực) tính theo thể tích từ các nhiệt trị khí lý tưởng tương ứng, thì áp dụng hệ số hiệu chính thể tích (hệ số nén) được đề cập ở trên.

Cuối cùng, các công thức đã cho để tính toán các chỉ số Wobbe, đối với hoặc khí lý tưởng hoặc khí thực, từ các tính chất khác được xem xét ở đây.

Đối với mỗi một tính chất trong số các tính chất khí thiên nhiên trong đó công thức được cung cấp như đã mô tả ở trên, các phương pháp được trình bày trong GUM[5] đã được áp dụng sao cho cung cấp thêm các công thức đủ đánh giá độ không đảm bảo kèm theo.

Để nhận được từng công thức độ không đảm bảo như vậy được trình bày một cách đầy đủ trong ISO/TR 29922. Về cơ bản, mỗi các kết quả từ phân tích các hệ số độ nhạy, bằng sự chênh lệch từng phần của các công thức tính chất hỗn hợp liên quan với một trong những các đại lượng đầu vào (đó là các tính chất lý học cấu tử tinh khiết và các phần mol cấu tử) với độ không đảm bảo có thể được kèm theo. Các dẫn xuất cũng tính đến các tương quan không thể tránh được giữa các phần mol cấu tử và những tương quan không thể tránh được tương tự giữa các khối lượng phân tử cấu tử (xem thêm Điều 11).

Đối với từng tính chất, biến số tổng (bình phương độ không đảm bảo) nhận được bằng các bổ sung sự phân bố độc lập với biến số từ từng nguồn không đảm bảo và kết quả độ không đảm bảo tổng thể được lấy là căn bậc hai của đại lượng này. Các công thức sử dụng được cho trong Phụ lục B.

Trong Điều 12, các giá trị để lập bảng được nêu đối với các tính chất lý học liên quan và các độ không đảm bảo kèm theo của chúng của các cấu tử tinh khiết của khí thiên nhiên đối với từng điều kiện trong các điều kiện chuẩn được sử dụng phổ biến. Dữ liệu bổ trợ, bao gồm các độ không đảm bảo, được nêu trong Phụ lục A. Ví dụ các phép tính được nêu trong Phụ lục D.

6 Tính chất của khí lý tưởng và khí thực

6.1 Entalpy của sự cháy

Hầu hết các đại lượng vật lý cơ sở được yêu cầu trong phép tính các nhiệt trị từ các nguyên tắc đầu tiên là các entalpy phân tử (chuẩn) khí lý tưởng của sự cháy (các nhiệt trị tính theo mol lý tưởng) đối với các khí cấu tử tinh khiết. Những đại lượng này là các hàm số phức của nhiệt độ; do vậy các giá trị được yêu cầu phụ thuộc và nhiệt độ cháy chuẩn, t_1. Đối với các lý do thực tiễn, không tính đến việc người sử dụng sẽ thực hiện các phép tính cho các giá trị thích hợp tại nhiệt độ cháy chuẩn bất kỳ. Các nhiệt độ diễn ra tại các bảng là các nhiệt độ t_1 = 25 °C, 20 °C, 15,55 °C (60 °F, xem 3.12, chú thích 3), 15 °C (59 °F) và 0 °C. Các giá trị được liệt kê trong Bảng 3 và được thảo luận trong ISO/TR 29922; điểm quan trọng là tất cả năm giá trị đối với bất kỳ chất nào đều phù hợp như nhau từ quan điểm nhiệt động học.

6.2 Phép tính hệ số nén

Đối với nhiệt trị tính theo thể tích, việc hiệu chỉnh khí thực được yêu cầu đánh giá nguồn gốc của khí thực từ tính lý tưởng thể tích. Sự hiệu chỉnh này là đáng kể và cũng được yêu cầu dùng trong phép tính khối lượng riêng, tỷ khối và chỉ số Wobbe. ISO/TR 29922 thảo luận nền tảng phương thức trong đó các sự hiệu chỉnh đối với tính không lý tưởng thể tích phải được áp dụng, các nguyên tắc liên quan và đánh giá sự đơn giản hóa được sử dụng để các phép tính có thể dễ sử dụng, như đã được chi tiết trong công thức (1) để được thực hiện

Sự hiệu chỉnh này đối với tính không lý tưởng thể tích được thực hiện thông qua việc sử dụng hệ số nén Z của hỗn hợp. Công thức được sử dụng đối với Z tại các điều kiện đo chuẩn, theo yêu cầu đối với các phép tính được mô tả trong Điều 9 và Điều 10, là (xem ISO/TR 29922)

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

Trong đó p_0 = 101,325 kPa (14,696 psi) và áp suất đo chuẩn p_2 được biểu thị bằng các đơn vị tương tự. Tổng được lấy trên tất cả các cấu tử N của hỗn hợp và công thức hợp lệ đối với dải $90 < p_2/\text{kPa} < 110$ ($13{,}05 < p_2/\text{psi} < 15{,}95$). Các giá trị của hệ số tổng là $s_j(t_2, p_0)$ được cho trong Bảng 2 tại bốn nhiệt độ đo chuẩn của tất cả các cấu tử của khí thiên nhiên và khí thiên nhiên thay thế được xem xét trong tiêu chuẩn này. Các nguồn gốc của các giá trị này được nêu trong ISO/TR 29922.

CHÚ THÍCH: Công thức (1) cũng có thể được sử dụng để tính các giá trị của hệ số nén của các cấu tử tinh khiết, nhưng điều này sẽ không cần thiết để cho kết quả chính xác nhất có thể. Đặc biệt, công thức sẽ không đưa ra các giá trị có thể chấp nhận đối với các hệ số nén của hydro, heli hoặc neon, chúng có $Z > 1$, hoặc đối với các cấu tử bất kỳ, như các hydrocacbon nặng hơn, không phải dạng khí tại các điều kiện đo chuẩn. Người sử dụng nên xem xét tính thích hợp cho mục đích tính toán bất kỳ trước khi việc sử dụng ngoài

nội dung tiêu chuẩn này. Các giá trị xác định của hệ số nén đối với một vài cấu tử tinh khiết, còn được gọi là các khí vĩnh cửu, được nêu trong ISO/TR 29922.

7 Cách tính nhiệt trị theo mol

7.1 Nhiệt trị tổng

Nhiệt trị tổng tính theo mol, tại nhiệt độ t_1, của hỗn hợp có thành phần đã biết phải được tính từ

$$(Hc)_G(t_1) = (Hc)^o_G(t_1) = \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot \left[(Hc)^o_G\right]_j(t_1) \quad (2)$$

Trong đó

$(Hc)^o_G(t_1)$ là nhiệt trị tổng khí lý tưởng tính theo mol của hỗn hợp;

$(Hc)_G(t_1)$ là nhiệt trị tổng khí thực tính theo mol của hỗn hợp;

$\left[(Hc)^o_G\right]_j(t_1)$ là nhiệt trị tổng lý tưởng của cấu tử *j*;

x_j là phần mol của cấu tử *j*.

CHÚ THÍCH 1: Các giá trị $\left[(Hc)^o_G\right]_j$ là độc lập của áp suất; kết quả là, áp suất cháy chuẩn, p_1, là không thích hợp và bị bỏ qua trong hệ thống thuật ngữ đã chấp nhận.

CHÚ THÍCH 2: Nhiệt trị khí lý tưởng tính theo mol của khí hoặc hỗn hợp khí được xác định trong tiêu chuẩn là đại lượng dương. Các giá trị cho trong Bảng 3 về mặt số là bằng với các entalpy phân tử tiêu chuẩn của sự cháy, tuy nhiên, theo quy ước chúng được biểu thị là các đại lượng âm (xem 3.7).

Các giá trị bằng số của $(Hc)^o_G(t_1)$ đối với t_1 = 25 °C được cho trong Bảng 3. Những giá trị này đối với $\left[(Hc)^o_G\right]_j(25)$ được lấy từ các nguồn thư viện gốc tại ISO/TR 29922. Các giá trị đối với $(Hc)^o_G(t_1)$ cho các nhiệt độ khác (t_1 = 20 °C, 15,55 °C, 15 °C và 0 °C) cũng được cho trong Bảng 3. Những giá trị này được dẫn xuất từ các giá trị 25 °C phù hợp với các phương pháp được nêu trong ISO/TR 29922.

7.2 Nhiệt trị thực

Nhiệt trị thực tính theo mol, tại nhiệt độ t_1, của hỗn hợp đã biết thành phần phải được tính từ

$$(Hc)_N(t_1) = (Hc)^o_N(t_1) = (Hc)^o_G(t_1) - \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot \frac{b_j}{2} \cdot L^o(t_1) \quad (3)$$

trong đó

$(Hc)^{o}_{N}(t_1)$ là nhiệt trị thực khí lý tưởng tính theo mol của hỗn hợp;

$(Hc)_{N}(t_1)$ là nhiệt trị thực khí thực tính theo mol của hỗn hợp;

$L^{o}(t_1)$ là entalpy tiêu chuẩn của sự bay hơi của nước tại t_1;

b_j là số lượng các nguyên tử hydro có trong từng phân tử của cấu tử j (chỉ số nguyên tử hydro).

Các giá trị của $L^{o}(t_1)$ được cho trong Phụ lục A đối với 25 °C, 20 °C, 15,55 °C (60 °F), 15 °C và 0 °C. Các giá trị của b_j được cho trong Bảng 1.

8 Phép tính nhiệt trị theo khối lượng

8.1 Nhiệt trị tổng

Nhiệt trị tổng tính theo khối lượng, tại nhiệt độ t_1, của hỗn hợp có thành phần đã biết phải được tính từ

$$(Hm)_{G}(t_1) = (Hm)^{o}_{G}(t_1) = \frac{(Hc)^{o}_{G}(t_1)}{M} \quad (4)$$

trong đó

$(Hm)^{o}_{G}(t_1)$ là nhiệt trị tổng khí lý tưởng tính theo khối lượng của hỗn hợp;

$(Hm)_{G}(t_1)$ là nhiệt trị tổng khí thực tính theo khối lượng của hỗn hợp;

M là khối lượng phân tử của hỗn hợp, phải được tính từ

$$M = \sum_{j=1}^{N} x_j \cdot M_j \quad (5)$$

trong đó

M_j là khối lượng phân tử của cấu tử *j*.

Giá trị của khối lượng phân tử đối với từng cấu tử xem xét trong tiêu chuẩn này được nêu trong Bảng 1.

8.2 Nhiệt trị thực

Nhiệt trị thực tính theo khối lượng, tại nhiệt độ t_1, của hỗn hợp đã biết thành phần phải được tính từ

$$(Hm)_{N}(t_1) = (Hm)^{o}_{N}(t_1) = \frac{(Hc)^{o}_{N}(t_1)}{M} \quad (6)$$

trong đó

$(Hm)^{\circ}_{N}(t_1)$ là nhiệt trị thực khí lý tưởng tính theo khối lượng của hỗn hợp;

$(Hm)_{N}(t_1)$ là nhiệt trị thực khí thực tính theo khối lượng của hỗn hợp.

9 Phép tính nhiệt trị theo thể tích

9.1 Nhiệt trị tổng của khí lý tưởng

Nhiệt trị tổng tính theo thể tích khí lý tưởng, đối với nhiệt độ đốt cháy t_1, của hỗn hợp đã biết thành phần, được đo tại nhiệt độ t_2 và áp suất p_2 phải được tính từ

$$(Hv)^{\circ}_{G}(t_1;t_2,p_2)=\frac{(Hc)^{\circ}_{G}(t_1)}{V^{\circ}} \quad (7)$$

trong đó

$(Hv)^{\circ}_{G}(t_1;t_2,p_2)$ là nhiệt trị tổng của khí lý tưởng tính theo thể tích của hỗn hợp;

V° là thể tích phân tử lý tưởng của hỗn hợp, được tính từ

$$V^{\circ} = R \cdot T_2/p_2 \quad (8)$$

trong đó

R là hằng số khí (xem A.1);

T_2 là nhiệt độ tuyệt đối.

9.2 Nhiệt trị thực khí lý tưởng

Nhiệt trị thực tính theo thể tích khí lý tưởng, đối với nhiệt độ đốt cháy t_1, của hỗn hợp đã biết thành phần, được đo tại nhiệt độ t_2 và áp suất p_2, phải được tính từ

$$(Hv)^{\circ}_{N}(t_1;t_2,p_2)=\frac{(Hc)^{\circ}_{N}(t_1)}{V^{\circ}} \quad (9)$$

trong đó

$(Hv)^{\circ}_{G}(t_1;t_2,p_2)$ là nhiệt trị thực khí lý tưởng tính theo thể tích của hỗn hợp.

9.3 Nhiệt trị tổng khí thực

Nhiệt trị tổng tính theo thể tích khí thực, đối với nhiệt độ đốt cháy t_1, của hỗn hợp đã biết thành phần, được đo tại nhiệt độ t_2 và áp suất p_2, phải được tính từ

$$(Hv)_G(t_1;t_2,p_2)=\frac{(Hc)^o_G(t_1)}{V} \quad (10)$$

trong đó

$(Hv)_G(t_1;t_2,p_2)$ là nhiệt trị tổng khí thực tính theo thể tích;

V là thể tích phân tử khí thực của hỗn hợp, phải được tính từ

$$V = Z(t_2, p_2) \cdot R \cdot T_2/p_2 \quad (11)$$

trong đó

$Z(t_2, p_2)$ là hệ số nén tại các điều kiện đo chuẩn.

Hệ số nén $Z(t_2, p_2)$ phải được tính từ công thức (1) sử dụng các giá trị của $s_j(t_2,p_0)$ đã cho đối với các chất tinh khiết riêng lẻ trong Bảng 2. Trong tiêu chuẩn này, phép tính này chỉ hợp lệ đối với $Z > 0,9$.

9.4 Nhiệt trị thực khí thực

Nhiệt trị thực tính theo thể tích khí thực, đối với nhiệt độ đốt cháy t_1, của hỗn hợp đã biết thành phần, được đo tại nhiệt độ t_2 và áp suất p_2, phải được tính từ

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

trong đó

$(Hv)_N(t_1;t_2,p_2)$ là nhiệt trị thực khí thực tính theo thể tích.

10 Phép tính các tính chất liên quan

10.1 Tỷ khối khí lý tưởng

Tỷ khối của một khí lý tưởng không phụ thuộc vào trạng thái chuẩn bất kỳ và được tính từ

$$G^o=\frac{M}{M_{air}} \quad (13)$$

trong đó

G^o là tỷ khối của khí lý tưởng;

M là khối lượng phân tử của hỗn hợp được tính theo công thức (5);

M_{air} là khối lượng phân tử của không khí khô của thành phần chuẩn.

Thành phần của không khí chuẩn được nêu trong ISO/TR 29922, trong đó thu được giá trị đối với M_{air} = (28,96546 ± 0,00017) kg.kmol^{-1} (xem thêm A.3).

10.2 Khối lượng riêng khí lý tưởng

Khối lượng riêng của một khí lý tưởng phụ thuộc vào nhiệt độ t_1 và áp suất p và được tính từ

$$D^\circ(t_2, p_2) = M / V^\circ \quad (14)$$

trong đó

$D^\circ(t_2, p_2)$ là khối lượng riêng của khí lý tưởng tại các điều kiện đo chuẩn;

M là khối lượng phân tử của hỗn hợp được tính theo công thức (5);

V° là thể tích phân tử lý tưởng của hỗn hợp được tính theo công thức (8).

10.3 Chỉ số Wobbe tổng khí lý tưởng

Chỉ số Wobbe tổng của khí lý tưởng được tính từ

$$W_G^\circ(t_1; t_2, p_2) = \frac{(Hv)_G^\circ(t_1; t_2, p_2)}{\sqrt{G^\circ}} \quad (15)$$

trong đó

$W_G^\circ(t_1; t_2, p_2)$ là chỉ số Wobbe tổng của khí lý tưởng;

$(Hv)_G^\circ(t_1; t_2, p_2)$ được tính như đã nêu trong 9.1.

10.4 Chỉ số Wobbe thực khí lý tưởng

Chỉ số Wobbe thực của khí lý tưởng được tính từ

$$W_N^\circ(t_1; t_2, p_2) = \frac{(Hv)_N^\circ(t_1; t_2, p_2)}{\sqrt{G^\circ}} \quad (16)$$

trong đó

$W_N^\circ(t_1; t_2, p_2)$ là chỉ số Wobbe thực của khí lý tưởng;

$(Hv)_N^\circ(t_1; t_2, p_2)$ được tính như đã nêu trong 9.2.

10.5 Tỷ khối khí thực

Tỷ khối của khí thực tại các điều kiện đo chuẩn (t_2, p_2) được tính từ

$$G(t_2, p_2) = \frac{G^\circ \cdot Z_{air}(t_2, p_2)}{Z(t_2, p_2)} \quad (17)$$

trong đó

$G(t_2,p_2)$ là tỷ khối của khí thực;

$Z(t_2,p_2)$ là hệ số nén của khí;

$Z_{air}(t_2,p_2)$ là hệ số nén của không khí khô có thành phần chuẩn.

Hệ số nén $Z(t_2,p_2)$ được tính từ công thức (1), sử dụng các giá trị đối với hệ số tổng $s_j(t_2,p_0)$ đã cho đối với các chất tinh khiết riêng lẻ trong Bảng 2. Hệ số nén $Z_{air}(t_2,p_2)$ được tính từ

$$Z_{air}(t_2,p_2)=1-\frac{p_2}{p_0}\cdot\left[1-Z_{air}(t_2,p_0)\right] \quad (18)$$

trong đó p_0 = 101,325 kPa (14,696 psi), áp suất đo chuẩn p_2 được biểu thị với cùng các đơn vị, và (xem A.3)

$Z_{air}(t_2 = 0\,°C, p_0) = 0,999419;$

$Z_{air}(t_2 = 15\,°C, p_0) = 0,999595;$

$Z_{air}(t_2 = 15,55\,°C, p_0) = 0,999601;$

$Z_{air}(t_2 = 20\,°C, p_0) = 0,999645.$

Công thức (18) là hợp lệ đối với dải $90 < p_2/kPa < 110$ ($13,05 < p_2/psi < 15,95$).

10.6 Khối lượng riêng khí thực

Khối lượng riêng của khí thực tại các điều kiện đo chuẩn (t_2, p_2) được tính từ

$$D(t_2,p_2)=\frac{D^o(t_2,p_2)}{Z(t_2,p_2)} \quad (19)$$

trong đó

$D(t_2,p_2)$ là khối lượng riêng của khí thực.

10.7 Chỉ số Wobbe tổng khí thực

Chỉ số Wobbe tổng của khí thực được tính từ

$$W_G(t_1;t_2,p_2)=\frac{(Hv)_G(t_1;t_2,p_2)}{\sqrt{G(t_2,p_2)}} \quad (20)$$

trong đó

$W_G(t_1;t_2,p_2)$ là chỉ số Wobbe tổng của khí thực;

$(Hv)_G(t_1;t_2,p_2)$ được tính như đã nêu trong 9.3.

10.8 Chỉ số Wobbe thực khí thực

Chỉ số Wobbe thực của khí thực được tính từ

$$W_N(t_1;t_2,p_2)=\frac{(Hv)_N(t_1;t_2,p_2)}{\sqrt{G(t_2,p_2)}} \qquad (21)$$

trong đó

$W_N(t_1;t_2,p_2)$ là chỉ số Wobbe thực của khí thực;

$(Hv)_N(t_1;t_2,p_2)$ được tính như đã nêu trong 9.4.

CHÚ THÍCH: Một số lưu ý trong việc sử dụng các đơn vị được yêu cầu đối với các phép tính được đưa ra trong điều này, đặc biệt đối với các phép tính khối lượng riêng, D. Với R biểu thị bằng đơn vị jul trên mol kenvin, p tính bằng kilopascal và M tính bằng kilogam trên kilomol, giá trị của D tự động nhận được tính bằng kilogam trên mét khối.

11 Độ không đảm bảo của tính toán

11.1 Nguyên tắc

Theo các nguyên tắc chung của đo lường, như được tóm tắt trong GUM,[5] từng kết quả phép tính thông thường phải được báo cáo với sự đánh giá độ không đảm bảo kèm theo.

Ba kỹ thuật khác nhau được biết là có tính khả thi đối với sự đánh giá các độ không đảm bảo về các tính chất có thể được tính bằng việc sử dụng tài liệu này, đó là

a) Kỹ thuật sử dụng các hệ số độ nhạy thu được về mặt phân tích là các đạo hàm riêng của đại lượng đang xem xét liên quan đến từng đại lượng trong các đại lượng đầu vào (ở đây là phương pháp phân tích),

b) Kỹ thuật sử dụng các hệ số độ nhạy tương tự, nhưng những hệ số này nhận được bằng cách sử dụng các phương pháp hạn chế khác nhau, và

c) Kỹ thuật số dựa trên phương pháp Monte Carlo.

Các phương pháp b) và c) có thể áp dụng và chấp nhận đối với việc sử dụng tài liệu này nhưng không được xem xét thêm trong điều này. Nói chung, phương pháp bất kỳ phù hợp với các nguyên tắc được thiết lập trong GUM[5] là có thể chấp nhận, và một vài lựa chọn khả thi, bao gồm các kỹ thuật b) và c), được thông tin thêm trong ISO/TR 29922.

Các phương pháp a) đến c) dự định là phương pháp cung cấp một ước tính về độ không đảm bảo cụ thể đối với một kết quả độc lập đơn lẻ. Tuy nhiên, GUM[5] công nhận rằng trong nhiều vận hành thường lệ, nó có thể không thực tế hoặc không thích hợp để yêu cầu một độ không đảm bảo

độc lập đối với từng kết quả. Một ví dụ tốt trong nội dung hiện có có thể là phân tích sắc ký khí quy trình trực tuyến liên tục.

Trong các trường hợp như vậy, GUM đề nghị rằng thông tin đầy đủ về ước tính chung hợp lý của độ không đảm bảo có thể thường được ước tính hoặc được suy luận từ hiệu chuẩn, sự phù hợp, kiểm tra luật định liên quan và/hoặc bản ghi chép công nhận v.v... (ở đây là phương pháp phân tích).

11.2 Công thức đối với phương pháp phân tích

Giá trị của tính chất lý học bất kỳ, Y, có thể được biểu thị là một hàm số, F, với các biến số đầu vào liên quan y_i và q_k như sau

$$Y = F(y_1, y_2, y_3, \ldots y_n, q_1, q_2, q_3, \ldots q_m) \quad (22)$$

trong đó

y_i là đại lượng biến số đầu vào với một độ không đảm bảo kèm theo $u(y_i)$;

q_k là thông số đầu vào được quy định không có độ không đảm bảo (nghĩa là dường như là chính xác).

Độ không đảm bảo tiêu chuẩn kết hợp, $u(y_i)$, về tính chất, Y, có thể được tính theo cách biểu thị chung đã cho trong GUM[5] đối với các đại lượng đầu vào tương quan y_i và y_j như sau

$$u^2(Y) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial Y}{\partial y_i}\right) \cdot u(y_i) \cdot r(y_i, y_j) \cdot u(y_j) \cdot \left(\frac{\partial Y}{\partial y_i}\right) \quad (23)$$

trong đó

$\left(\frac{\partial Y}{\partial y_i}\right)$ là đạo hàm riêng (hệ số độ nhạy) của Y về y_i;

$r(y_i, y_j)$ là hệ số tương quan giữa y_i và y_j.

Phụ lục B đưa ra các công thức đối với phép tính độ không đảm bảo do việc áp dụng công thức (23) cho từng tính chất trong các tính chất là đối tượng của tài liệu này. Các đại lượng đầu vào được yêu cầu là các tính chất lý học của thành phần hỗn hợp và cấu tử tinh khiết (hoặc hỗn hợp), cùng với tất cả độ không đảm bảo kèm theo của chúng và các giá trị hệ số tương quan liên quan.

11.3 Đầu vào đối với phương pháp phân tích

11.3.1 Thành phần và độ không đảm bảo thành phần

Để xác định sự đóng góp từ các độ không đảm bảo trong phép phân tích thành phần phân tử đến độ không đảm bảo tổng thể trong phép tính tính chất, thông thường phải thực hiện những giả định sau đây.

a) Thành phần phân tử đầy đủ (như đã yêu cầu Điều 1) có sẵn, và đối với từng cấu tử giá trị phần mol liên quan với nó một đánh giá độ không đảm bảo, hoặc

b) Mô tả đầy đủ các tương quan giữa các phần mol đã biết có sẵn như một ma trận hiệp biến, nghĩa là như là ma trận hệ số tương quan phần mol (chuẩn hóa), hoặc

c) Không có những mối tương quan giữa các phần mol cấu tử, nghĩa là các phần mol cấu tử là độc lập lẫn nhau.

Sự đánh giá nghiêm ngặt và đầy đủ nhất của độ không đảm bảo do việc áp dụng các giả định a) và b) vào các công thức đã cho trong Phụ lục B nhưng, trong rất nhiều trường hợp, không có sẵn ma trận hệ số tương quan phần mol đầy đủ $r(x_i, x_j)$. Trong trường hợp này, nói chung có thể chấp nhận thay cho áp dụng các giả định a) và c), nhưng điều này không phải là không có hàm ý về các trạng thái của kết quả cuối cùng.

Nếu có sẵn đầy đủ các thông tin phân tích thô, khi đó ma trận hệ số tương quan phần mol đầy đủ $r(x_i, x_j)$ được tính bằng cách sử dụng ISO 14912:2013, 8.5.2.3, công thức (69), và việc sử dụng các giả định a) và b) để đánh giá độ không đảm bảo là tối ưu.

Tuy nhiên, khi không có thông tin đầy đủ để lấy đạo hàm của ma trận hệ số tương quan phần mol đầy đủ, khi đó việc sử dụng các giả định a) và c) để đánh giá độ không đảm bảo có thể chấp nhận để thay thế. Trong trường hợp này, các hệ số tương quan $r(x_i, x_j)$ phải được lấy là các thành phần của một ma trận đồng nhất, nghĩa là một ma trận trong đó tất cả các thành phần trên đường chéo có giá trị là số 1 và tất cả các thành phần ngoài đường chéo là 0.

CHÚ THÍCH: Bởi vì phương pháp trong đó thành phần của hỗn hợp được xác định một cách thông thường, giả định c) không thể hợp lệ hoàn toàn. Các thành phần x_i, y_i luôn luôn liên quan đến nhau vì (thêm vào các tương quan chuẩn hóa sơ bộ bất kỳ) quá trình xử lý dữ liệu (chuẩn hóa) được yêu cầu để xác định các phần mol từ dữ liệu thô sẽ mở đầu sự tương quan. Kết quả là, giả định rằng $r(x_i, x_j)$ là các thành phần của một ma trận đồng nhất nói chung sẽ không giữ được. Tuy nhiên, đối với phép phân tích khí thiên nhiên điển hình (bao gồm độ không đảm bảo), độ không đảm bảo trong từng tính chất đã tính nhận được bằng cách sử dụng giả định một ma trận đồng nhất được coi là "an toàn" (có nghĩa là sẽ luôn luôn đánh giá độ không đảm bảo trong từng tính chất, mặc dù điều này không bảo đảm hoàn toàn).

Nếu biết thành phần của khí bởi các phần thể tích, trước tiên những phần này được chuyển đổi thành những phần mol theo ISO 14912:2013, 5.1.2. Tuy nhiên, ghi nhớ rằng những phần dẫn xuất từ những phần mol sẽ có các độ không đảm bảo lớn hơn những phần của phần thể tích gốc.

Các chiến lược được sử dụng để chuẩn hóa có thể thay đổi đáng kể, Những người sử dụng tiêu chuẩn này nên được cảnh báo rằng các sự tiếp cận khác nhau có thể dẫn đến các mức độ khác nhau với giả định của ma trận đồng nhất đối với $r(x_i, x_j)$ là không hợp lệ. Đối với thảo luận các quy trình chuẩn hóa, xem TCVN 12047-1 (ISO 6974-1) và TCVN 12047-2 (ISO 6974-2).

Xem Phụ lục D, ví dụ 3 về hướng dẫn sự chênh lệch có thể do việc sử dụng hiểu biết đầy đủ về các thành phần $r(x_i, x_j)$ của ma trận (chuẩn hóa) hệ số tương quan phần mol thay cho giả định một ma trận đồng nhất.

11.3.2 Đầu vào không-thành phần

Sự đánh giá các độ không đảm bảo tiêu chuẩn đối với đầu vào (tính chất) không-thành phần (ngoại trừ đối với các khối lượng phân tử) được cung cấp trong các bảng về dữ liệu cấu tử cụ thể được nêu trong Điều 12 và đối với các dữ liệu bổ trợ trong Phụ lục A. Trong trường hợp không có thông tin cụ thể, tất cả các dữ liệu này (lại ngoại trừ đối với các khối lượng phân tử) phải được lấy như chưa có tương quan với nhau, nghĩa là các hệ số tương quan $r(x_i, x_j)$ phải được lấy là các thành phần của một ma trận đồng nhất. Các công thức đã cho trong Phụ lục B được dẫn xuất trên cơ sở giả định này.

Đối với các khối lượng phân tử, các giá trị được liệt kê có tương quan cao chắc chắn vì chúng được đánh giá bởi phép cộng của các giá trị chung của các khối lượng nguyên tử liên quan. Từng thành phần $r(M_i, M_j)$ của ma trận tương quan được cho bởi

$$r(M_i,M_j) = \frac{\left\{\left[a_i \cdot a_j \cdot u^2(A_C)\right] + \left[b_i \cdot b_j \cdot u^2(A_H)\right] + \left[c_i \cdot c_j \cdot u^2(A_N)\right] + \left[d_i \cdot d_j \cdot u^2(A_O)\right] + \left[e_i \cdot e_j \cdot u^2(A_S)\right]\right\}}{u(M_i) \cdot u(M_j)} \quad (24)$$

trong đó

a_i, b_j, c_j, d_j và e_j là các chỉ số nguyên tử của C, H, N, O và S trong các loại phân tử thứ j, các giá trị này được cho trong Bảng 1;

$u(A_C)$, $u(A_H)$, $u(A_N)$, $u(A_O)$ và $u(A_S)$ là các độ không đảm bảo tiêu chuẩn của khối lượng nguyên tử của C, H, O, N và S, các giá trị này được cho trong A.2;

$$u(M_j) = \sqrt{\left[a_j \cdot u(A_C)\right]^2 + \left[b_j \cdot u(A_H)\right]^2 + \left[c_j \cdot u(A_N)\right]^2 + \left[d_j \cdot u(A_O)\right]^2 + \left[e_j \cdot u(A_S)\right]^2} \quad (25)$$

11.4 Độ không đảm bảo mở rộng

Độ không đảm bảo mở rộng, U(Y), của tính chất được tính, Y, phải được tính bằng cách nhân độ không đảm bảo tiêu chuẩn kết hợp, u(Y), với hệ số bao phủ thích hợp, k, (giá trị của nó phải được công bố), như sau:

$$U(Y) = k \cdot u(Y) \quad (26)$$

CHÚ THÍCH: Hệ số bao phủ k = 2 nói chung cung cấp độ tin cậy khoảng 95 %.

11.5 Biểu thị kết quả

11.5.1 Yêu cầu chung

Khi dữ liệu đầy đủ có sẵn, kết luận về đánh giá độ không đảm bảo được khẳng định là một phần cơ sở của biểu thị kết quả đầy đủ và thích hợp. Các kết quả phải được biểu thị phù hợp với một trong những quy trình sau đây, theo trật tự ưu tiên.

11.5.2 Phương pháp phân tích

Để đánh giá độ không đảm bảo cần sử dụng phương pháp phân tích, nghĩa là sử dụng các công thức đã cho Phụ lục B, độ không đảm bảo mở rộng phải được làm tròn đến hai con số có nghĩa, sử dụng các quy luật chuẩn về làm tròn [nghĩa là làm tròn một nửa trên, xem TCVN 7870-1:2010 (ISO 80000-1:2009), Phụ lục B]. Giá trị bằng số của Y phải được làm tròn đến hai con số nhỏ nhất (thứ hai) trong giá trị được làm tròn của độ không đảm bảo mở rộng, U(Y).

Báo cáo giá trị của đại lượng đã tính ở dạng Y ± U(Y) (bao gồm các đơn vị).

Quy trình này đại diện cho quy trình phù hợ GUM đầy đủ xác định thích hợp.

Để thực hành tốt nhất, báo cáo kết quả cũng nên bao gồm lời công bố về các thành phần $r(x_i, x_j)$ của ma trận (chuẩn hóa) hệ số tương quan phần mol được sử dụng trong đánh giá độ không đảm bảo đã được biết hoặc thay thế cho được giả định là độ không đảm bảo của một ma trận đồng nhất.

11.5.3 Phương pháp chung

Khi một phép đánh giá độ không đảm bảo được thực hiện bằng phương pháp chung, độ không đảm bảo mở rộng phải được làm tròn đến hai con số có nghĩa, sử dụng các quy luật chuẩn về làm tròn. Giá trị bằng số của Y phải được làm tròn và báo cáo (bao gồm các đơn vị) đến con số có nghĩa nhỏ nhất trong giá trị được làm tròn của độ không đảm bảo mở rộng đã suy luận, U(Y).

Trách nhiệm của người sử dụng phải quyết định liệu việc áp dụng yêu cầu giá trị U(Y) được báo cáo rõ ràng với từng kết quả không. Trong nhiều ứng dụng, công bố chung bao gồm nhiều kết quả giống nhau có thể đáp ứng.

11.5.4 Phương pháp ngẫu nhiên

Có các tình huống duy trì ở đây, ví dụ, vì dữ liệu độ không đảm bảo phân tích không đầy đủ hoặc việc sắp xếp máy tính không thích hợp, thì không thể thực hiện đánh giá độ không đảm bảo tính chất phù hợp GUM bất kỳ.

Trong các trường hợp như vậy, và không có chứng cứ bất kỳ để đề nghị dữ liệu đầu vào phân tích là có độ chính xác không đủ đối với mục đích này, người sử dụng tiêu chuẩn này phải báo cáo các kết quả đối với từng tính chất đã tính được làm tròn như sau.

Nhiệt trị - tính theo mol	đến 0,01 $kJ \cdot mol^{-1}$
Nhiệt trị - tính theo khối lượng	đến 0,01 $MJ \cdot kg^{-1}$
Nhiệt trị - tính theo thể tích	đến 0,01 $MJ \cdot mol^{-3}$
Tỷ khối	đến 0,0001
Khối lượng riêng	đến 0,0001 $kg \cdot m^3$
Chỉ số Wobbe	đến 0,01 $MJ \cdot m^{-3}$

Đối với từng tính chất, đây là trách nhiệm của người sử dụng phải đánh giá việc dẫn ra số lượng con số sau chấm thập phân là đúng và nếu không số các con số được báo cáo phải được giảm phù hợp. Số lượng các con số được báo cáo phải không được tăng.

11.6 Áp dụng độ không đảm bảo

Điều 11.5 cung cấp phương pháp tính giá trị đối với độ không đảm bảo mở rộng được kèm theo với giá trị đã tính tương ứng của một tính chất lý học. Kết quả phương pháp phân tích "đứng-một mình" như vậy có thể đáp ứng đầy đủ yêu cầu của người sử dụng.

Tuy nhiên, sự hữu ích và tính ứng dụng của đánh giá độ không đảm bảo có thể thường phụ thuộc vào tình huống trong đó phép tính được thực hiện. Về mặt này, có thể xác định số lượng của các trường hợp khác nhau, Điều này bao gồm (nhưng không giới hạn) như sau:

a) Tính phù hợp với mục đích: nếu yêu cầu là để chứng minh rằng loại thiết bị phân tích thực hiện trong phạm vi quy định kỹ thuật của nó của độ không đảm bảo (tính chất) đối với các loại khí thử nghiệm có độ không đảm bảo (tính chất) đã biết, khi đó đại lượng liên quan để thử nghiệm đó là độ không đảm bảo đầy đủ như được tính theo điều này, nghĩa là bao gồm cả các cấu tử kết hợp và không-kết hợp của độ không đảm bảo.

b) Tính tương thích phân tích: nếu yêu cầu là để chứng minh tính phù hợp (trong phạm vi độ không đảm bảo) giữa các kết quả từ hai (hoặc nhiều hơn) bộ thiết bị phân tích giống hệt nhau (hay tương tự) trên cùng các mẫu thử nghiệm, khi đó trước tiên cần loại trừ các cấu tử có độ không đảm bảo là chung đối với từng bộ thiết bị, nghĩa là các độ không đảm bảo (tính chất cấu tử) không-kết hợp. Điều này có thể đạt được bằng cách thiết lập từng độ không đảm bảo không-kết hợp đến zero trong các công thức độ không đảm bảo liên quan, như vậy chỉ độ chênh lệch giữa các kết quả tăng lên từ các số hạng kết hợp.

c) Tính tương thích bên ngoài: nếu yêu cầu là thử nghiệm tính phù hợp giữa các kết quả đạt được bởi bộ thiết bị phân tích và các kết quả đạt được bằng đo trực tiếp tính chất trên cùng các khí thử nghiệm, khi đó phép đo thích hợp độ không đảm bảo đối với thiết bị phân tích là độ không đảm bảo đầy đủ, nghĩa là lại bao gồm cả các cấu tử kết hợp và không-kết hợp của độ không đảm bảo.

d) Độ lặp lại: nếu yêu cầu là để thử nghiệm hiệu quả của một phần thiết bị phân tích trong các điều kiện lặp lại như được xác định trong GUM[5] khi đó độ lặp lại của kết quả (tính chất) bất kỳ có thể được đánh giá trực tiếp từ bộ các giá trị tính chất đã tính. Cách khác, cũng có thể xác định độ không đảm bảo (tính chất) bằng cách xác định độ lặp lại của từng thành phần và sau đó sử dụng các giá trị này là đầu vào công thức độ không đảm bảo liên quan. Điều này là cần thiết để thiết lập các số hạng độ không đảm bảo không-kết hợp đến zero.

12 Các bảng số liệu

Bảng 1 – Khối lượng phân tử và chỉ số nguyên tử đối với các cấu tử của khí thiên nhiên

			Chỉ số nguyên tử				
j	Cấu tử	Khối lượng phân tử, M_j $kg \cdot kmol^{-1}$	a_j	b_j	c_j	d_j	e_j
1	Metan	16,04246	1	4	0	0	0
2	Etan	30,06904	2	6	0	0	0
3	Propan	44,09562	3	8	0	0	0
4	n-butan	58,12220	4	10	0	0	0
5	2-metylpropan	58,12220	4	10	0	0	0
6	n-pentan	72,14878	5	12	0	0	0
7	2-metylbutan	72,14878	5	12	0	0	0
8	2,2-dimetylpropan	72,14878	5	12	0	0	0
9	n-hexan	86,17536	6	14	0	0	0
10	2-metylpentan	86,17536	6	14	0	0	0
11	3-metylpentan	86,17536	6	14	0	0	0
12	2,2-dimetylbutan	86,17536	6	14	0	0	0
13	2,3-dimetylbutan	86,17536	6	14	0	0	0
14	n-heptan	100,20194	7	16	0	0	0
15	n-octan	114,22852	8	18	0	0	0
16	n-nonan	128,25510	9	20	0	0	0
17	n-decan	142,28168	10	22	0	0	0
56	n-undecan	156,30826	11	24	0	0	0
57	n-dodecan	170,33484	12	26	0	0	0
58	n-tridecan	184,36142	13	28	0	0	0
59	n-tetradecan	198,38800	14	30	0	0	0
60	n-pentadecan	212,41458	15	32	0	0	0
18	eten	28,05316	2	4	0	0	0
19	propen	42,07974	3	6	0	0	0
20	1-buten	56,10632	4	8	0	0	0

Bảng 1 (tiếp theo)

j	Cấu tử	Khối lượng phân tử, M_j kg·kmol^{-1}	Chỉ số nguyên tử				
			a_j	b_j	c_j	d_j	e_j
21	Cis-2-buten	56,10632	4	8	0	0	0
22	Trans-2-buten	56,10632	4	8	0	0	0
23	2-metylpropen	56,10632	4	8	0	0	0
24	1-penten	70,13290	5	10	0	0	0
25	Propadien	40,06386	3	4	0	0	0
26	1,2-butadien	54,09044	4	6	0	0	0
27	1,3-butadien	54,09044	4	6	0	0	0
28	Etyl	26,03728	2	2	0	0	0
29	Cyclopentan	70,13290	5	10	0	0	0
30	Metylcyclopentan	84,15948	6	12	0	0	0
31	Etylcyclopentan	98,18606	7	14	0	0	0
32	Cyclohexan	84,15948	6	12	0	0	0
33	Metylcyclohexan	98,18606	7	14	0	0	0
34	Etylcyclohexan	112,21264	8	16	0	0	0
35	Benzen	78,11184	6	6	0	0	0
36	Toluen	91,13842	7	8	0	0	0
37	Etylbenzen	106,16500	8	10	0	0	0
38	o-xylen	106,46500	8	10	0	0	0
39	metanol	32,04186	1	4	0	1	0
40	metanthiol	48,10746	1	4	0	0	1
41	hydro	2,01588	0	2	0	0	0
42	nước	18,01528	0	2	0	1	0
43	hydro sulfua	34,08088	0	2	0	0	1
44	amoniac	17,03052	0	3	1	0	0
45	hydro cyanua	27,02534	1	1	1	0	0
46	cacbon monoxit	28,0101	1	0	0	1	0
47	cacbonyl sulfua	60,0751	1	0	0	0	1
48	cacbon disulfua	76,1407	1	0	0	0	2
49	heli	4,002602	0	0	0	0	0
50	neon	20,1797	0	0	0	0	0
51	argon	39,948	0	0	0	0	0
52	nitơ	28,0134	0	0	2	0	2
53	oxy	31,9988	0	0	0	2	0

Bảng 1 (kết thúc)

j	Cấu tử	Khối lượng phân tử, M_j kg·kmol^{-1}	Chỉ số nguyên tử				
			a_j	b_j	c_j	d_j	e_j
54	cacbon dioxit	44,0095	1	0	0	2	0
55	lưu huỳnh dioxit	64,0638	0	0	0	2	1
	không khí	28,96546					

CHÚ THÍCH: Các giá trị của khối lượng phân tử đã cho ở trên nhận được bằng cách cộng khối lượng của các khối lượng nguyên tử (khối lượng nguyên tử) của các nguyên tố liên quan, như được liệt kê trong Bảng A.1 và trong ISO/TR 29922. Tất cả các số thập phân được giữ lại trong bảng này, nghĩa là không làm tròn đến một số cố định của các vị trí thập phân đã được áp dụng (ngoại trừ không khí). Các giá trị của độ không đảm bảo tiêu chuẩn đối với khối lượng phân tử không bao gồm trong bảng này. Khi được yêu cầu, chúng được tính toán sử dụng công thức (25).

Bảng 2 – Phép tổng các hệ số đối với các cấu tử của khí thiên nhiên tại các nhiệt độ đo chuẩn khác nhau

		Hệ số tổng s_j tại các nhiệt độ đo chuẩn khác nhau				$u(s_j)$
j	Cấu tử	0°C	15 °C	15,55 °C	20 °C	
1	metan	0,048 86	0,044 52	0,044 37	0,043 17	0,000 5
2	Etan	0,099 7	0,091 9	0,091 6	0,089 5	0,0011
3	Propan	0,146 5	0,1344	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-metylpropan	0,188 5	0,172 2	0,171 7	0,167 3	0,003 1
6	n-pentan	0,258 6	0,2361	0,235 4	0,229 5	0,010 7
7	2-metylbutan	0,245 8	0,225 1	0,224 4	0,218 9	0,008 8
8	2,2-dimetylpropan	0,224 5	0,204 0	0,203 3	0,197 9	0,006 0
9	n-hexan	0,3319	0,300 1	0,299 0	0,290 7	0,027 1
10	2-metylpentan	0,311 4	0,282 6	0,281 6	0,274 0	0,022 1
11	3-metylpentan	0,299 7	0,276 2	0,275 4	0,269 0	0,023 4
12	2,2-dimetylbutan	0,253 0	0,235 0	0,234 4	0,229 5	0,017 3
13	2,3-dimetylbutan	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	0,6713	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

Bảng 2 (tiếp theo)

		Hệ số tổng s_j tại các nhiệt độ đo chuẩn khác nhau				$u(s_j)$
j	Cấu tử	0°C	15 °C	15,55 °C	20 °C	
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	eten	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-metylpropen	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	etyn	0,093 6	0,083 6	0,083 3	0,080 8	0,002 4
29	cyclo pentan	0,240 9	0,222 1	0,221 5	0,216 4	0,013 7
30	metylcyclopentan	0,281 7	0,261 2	0,260 5	0,254 8	0,026 2
31	etylcyclopentan	0,422 7	0,368 4	0,366 6	0,353 1	0,100 6
32	cyclohexan	0,293 9	0,268 6	0,267 7	0,261 0	0,032 5
33	metylcyclohexan	0,366 7	0,331 7	0,330 5	0,321 3	0,066 8
34	etylcyclohexan	0,527 5	0,454 7	0,452 4	0,434 5	0,100 6
35	benzene	0,275 2	0,252 7	0,252 0	0,246 0	0,027 4
36	toluen	0,372 6	0,335 9	0,334 7	0,325 1	0,100 2
37	ethylbenzen	0,412 9	0,379 7	0,378 5	0,369 4	0,100 2
38	o-xylen	0,485 2	0,4411	0,439 6	0,427 7	0,100 4
39	metanol	0,580 6	0,446 4	0,442 3	0,4117	0,023 3
40	metanethiol	0,190 9	0,170 0	0,169 3	0,164 0	0,011 7
41	hydro	-0,01	-0,01	-0,01	-0,01	0,025 0
42	nước	0,309 3	0,256 2	0,254 6	0,241 9	0,015 0
43	hydro sulfua	0,100 6	0,092 3	0,092 0	0,089 8	0,002 3
44	amoniac	0,123 0	0,110 0	0,109 6	0,106 2	0,002 1
45	hydro cyanua	0,317 5	0,276 5	0,275 1	0,264 4	0,007 6
46	cacbon monoxit	0,025 8	0,021 7	0,021 5	0,020 3	0,001 0
47	cacbonyl sulfua	0,121 1	0,111 4	0,111 0	0,108 4	0,005 4
48	cacbon disulfua	0,218 2	0,195 8	0,195 1	0,189 4	0,009 8

Bảng 2 (kết thúc)

		Hệ số tổng s_j tại các nhiệt độ đo chuẩn khác nhau				$u(s_j)$
j	**Cấu tử**	0°C	15 °C	15,55 °C	20 °C	
49	heli	-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	nitơ	0,021 4	0,017 0	0,016 9	0,015 6	0,001 0
53	oxy	0,0311	0,027 6	0,027 5	0,026 5	0,0010
54	cacbon dioxit	0,082 1	0,075 2	0,074 9	0,073 0	0,002 0
55	lưu huỳnh dioxit	0,157 9	0,140 6	0,140 0	0,135 6	0,003 5
CHÚ THÍCH: Các giá trị s_j và $u(s_j)$ đã cho ở trên được dẫn xuất bởi các phương pháp nêu trong ISO/TR 29922. Tất cả các giá trị liên quan đến áp suất p_0 là 101,325 kPa (14,696 psi).						

Bảng 3 – Nhiệt trị tổng tính theo mol đối với các cấu tử của khí thiên nhiên trong trạng thái khí lý tưởng tại các nhiệt độ cháy chuẩn khác nhau

		Nhiệt trị tổng $\left[(H_c)^\circ_G\right]_j(t_1)$ kJ·mol^{-1} của khí lý tưởng tại các nhiệt độ chuẩn khác nhau					*u(Hc)*
j	Cấu tử	0°C	15 °C	15,55 °C	20 °C	25 °C	
1	metan	892,92	891,51	891,46	891,05	890,58	0,19
2	etan	1564,35	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-metylpropan	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-metylbutan	3 536,01	3 531,68	3 531,52	3 530,25	3 528,83	0,23
8	2,2-dimetylpropan	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	4198,06	4 196,60	4 194,95	0,32
10	2-metylpentan	4195,64	4 190,62	4 190,44	4 188,97	4187,32	0,53
11	3-metylpentan	4198,27	4193,22	4 193,04	4191,56	4189,90	0,53
12	2,2-dimetylbutan	4 185,86	4180,83	4 180,65	4 179,17	4 177,52	0,48
13	2,3-dimetylbutan	4193,68	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	6182,92	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

Bảng 3 (tiếp theo)

		Nhiệt trị tổng $\left[(H_C)^o_G\right]_j(t_1)$ kJ·mol^{-1} của khí lý tưởng tại các nhiệt độ chuẩn khác nhau					*u[Hc)*
j	Cấu tử	0°C	15 °C	15,55 °C	20 °C	25 °C	
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	eten	1413,55	1412,12	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-metylpropen	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	etyn	1 301,86	1 301,37	1301,35	1 301,21	1 301,05	0,32
29	cyclo pentan	3 326,14	3 322,19	3 322,05	3 320,89	3 319,59	0,36
30	metylcyclopentan	3 977,05	3 972,46	3 972,29	3 970,95	3 969,44	0,56
31	etylcyclopentan	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	metylcyclohexan	4 609,33	4 604,08	4 603,89	4 602,36	4 600,64	0,71
34	etylcyclohexan	5 272,76	5 266,90	5 266,69	5 264,97	5 263,05	0,95
35	benzene	3 305,12	3 302,90	3 302,81	3 302,16	3 301,43	0,27
36	toluen	3 952,77	3 949,83	3 949,72	3 948,86	3 947,89	0,51
37	etylbenzen	4 613,16	4 609,54	4 609,40	4 608,34	4 607,15	0,66
38	o-xylen	4 602,18	4 598,64	4 598,52	4 597,48	4 596,31	0,76
39	metanol	766,60	765,09	765,03	764,59	764,09	0,13
40	metanthiol	1 241,64	1 240,28	1 240,23	1 239,84	1 239,39	0,32
41	hydro	286,64	286,15	286,13	285,99	285,83	0,02
42	nước	45,064	44,431	44,408	44,222	44,013	0,004
43	hydro sulfua	562,93	562,38	562,36	562,19	562,01	0,23
44	amoniac	384,57	383,51	383,47	383,16	382,81	0,18
45	hydro cyanua	671,92	671,67	671,66	671,58	671,50	1,26

Bảng 3 (kết thúc)

		Nhiệt trị tổng $\left[(H_c)^\circ_G\right]_j(t_1)$ kJ·mol^{-1} của khí lý tưởng tại các nhiệt độ chuẩn khác nhau					u(Hc)
j	Cấu tử	0°C	15 °C	15,55 °C	20 °C	25 °C	
46	cacbon monoxit	282,80	282,91	282,91	282,95	282,98	0,06
47	cacbonyl sulfua	548,01	548,14	548,15	548,19	. 548,23	0,24
48	cacbon disulfua	1104,05	1 104,32	1 104,33	1104,40	1104,49	0,43

CHÚ THÍCH 1: Tất cả các giá trị của $\left[(H_c)^\circ_G\right]_j(t_1)$ đối với t_1 = 25 °C được lấy từ tài liệu tham khảo [6] ngoại trừ metan (j = 1), được nêu chi tiết là trường hợp cụ thể trong ISO/TR 29922, nước (xem chú thích 3) và các n-alkan C11 đến C15 (xem ISO/TR 29922). Các giá trị của $\left[(H_c)^\circ_G\right]_j(t_1)$ đối với t_1 = 20 °C, 15,55 °C, 15 °C và 0 °C nhận được từ các giá trị tương ứng tại 25 °C bằng các phép tính đã nêu trước của loại được nêu trong ISO/TR 29922.

CHÚ THÍCH 2: Giá trị của u(Hc) đối với metan được lấy từ ISO/TR 29922:–, 8.1.5. Đối với từng cấu tử khác, giá trị của u(Hc) được ước tính theo các phương pháp nêu trong ISO/TR 29922.

CHÚ THÍCH 3: Nhiệt trị không-zero của hơi nước (j = 42) bắt nguồn chính thức từ định nghĩa nhiệt trị tổng, yêu cầu sự ngưng tụ thành trạng thái lỏng của tất cả hơi nước trong sản phẩm cháy. Do vậy, hơi nước bất kỳ có trong khí góp phần nhiệt hóa hơi tiềm tàng của nó vào nhiệt trị tổng của hỗn hợp. Các giá trị đã cho được lấy từ A.4. Xem ISO/TR 29922 cho giải thích đầy đủ hơn.

Phụ lục A

(quy định)

Các giá trị của hằng số bổ trợ

A.1 Hằng số khí

Giá trị của hằng số phân tử khí R (bao gồm độ không đảm bảo tiêu chuẩn) phải được lấy từ khuyến nghị CODATA[7] hiện hành như nêu trong Bảng A.1.

Bảng A.1 – Hằng số khí phân tử

Hằng số khí phân tử $R/J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$	Độ không đảm bảo $u(R/)/J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$
8,3144621	0,0000075

A.2 Khối lượng nguyên tử của các nguyên tố

Khối lượng nguyên tử tính bằng $kg \cdot kmol^{-1}$ của từng nguyên tố cacbon, hydro, nitơ, oxy và lưu huỳnh, được yêu cầu đối với phép xác định của công thức (25). Các giá trị phải được lấy từ khuyến nghị IUPAC 2007[8] như được nêu trong Bảng A.2. Thông tin chi tiết hơn về các khối lượng nguyên tử xem trong ISO/TR 29922.

Bảng A.2 – Khối lượng nguyên tử của các nguyên tố

Nguyên tố		Khối lượng nguyên tử $A/kg \cdot kmol^{-1}$	Độ không đảm bảo tiêu chuẩn $u(A)/kg \cdot mol^{-1}$
Cacbon	C	12,0107	0,0004
Hydro	H	1,00794	0,000035
Nitơ	N	14,0067	0,0001
Oxy	O	15,9994	0,00015
Lưu huỳnh	S	32,065	0,0025
Heli	He	4,002602	0,000001
Neon	Ne	20,1797	0,0003
Argon	Ar	39,948	0,0005

A.3 Các tính chất của không khí khô

Giá trị đối với khối lượng phân tử của không khí khô của thành phần chuẩn cố định được làm tròn đến số thập phân thứ năm phải được lấy như đã cho trong Bảng A.3[3][9].

Bảng A.3 – Khối lượng phân tử của không khí khô

Khối lượng phân tử M_{air}/kg·kmol^{-1}	Độ không đảm bảo tiêu chuẩn $u(M_{air})$/kg·mol^{-1}
28,96546	0,00017

Độ không đảm bảo được trích dẫn là trích nguồn duy nhất từ các độ không đảm bảo đã biết trong các khối lượng phân tử của các thành phần. Không được phép thực hiện đối với độ không đảm bảo của thành phần, nghĩa là thành phần của không khí được lấy, đối với mục đích hiện có, là chính xác.

Giá trị của hệ số nén của không khí khô của thành phần chuẩn tại từng điều kiện trong bốn điều kiện đo chuẩn được sử dụng phổ biến phải được lấy như đã cho trong Bảng A.4.

Bảng A.4 – Hệ số nén của không khí khô tại các điều kiện chuẩn khác nhau

Điều kiện chuẩn	Hệ số nén, Z_{air}	Độ không đảm bảo tiêu chuẩn $u(Z_{air})$
0 °C, 101,325 kPa	0,999419	0,000015
15 °C, 101,325 kPa	0,999595	0,000015
15,55 °C, 101,325 kPa	0,999601	0,000015
20 °C, 101,325 kPa	0,999645	0,000015

Từng giá trị trong các giá trị này được tính toán phù hợp với công thức GERG-2004 như được trình bày trong tài liệu tham khảo [1] và [10]. Đối với ba nhiệt độ cao nhất, các giá trị phù hợp các các giá trị đã cho bởi công thức CIPM-2007[9] mới nhất trong phạm vi 2 đến 3 phần trên triệu, nhưng công thức đó không hợp lệ tại 0 °C. Các giá trị độ không đảm bảo tiêu chuẩn được lấy trực tiếp từ tài liệu tham khảo [9].

A.4 Entalpy tiêu chuẩn của quá trình bay hơi nước

Entalpy phân tử tiêu chuẩn của quá trình bay hơi nước được yêu cầu tại từng điều kiện trong năm điều kiện cháy chuẩn được sử dụng phổ biến để tạo điều kiện thuận lợi các phép tính về độ chênh lệch giữa nhiệt trị tổng khí lý tưởng và nhiệt trị thực khí lý tưởng (tính theo mol) đối với từng cấu tử. Phải sử dụng các giá trị đã nêu trong Bảng A.5, được tính từ công thức IAPWS-1992 đã cho trong tài liệu tham khảo [11] và [12].

Bảng A.5 – Entalpy tiêu chuẩn của quá trình bay hơi nước

Nhiệt độ/ °C	Entalpy của sự bay hơi L°/ kJ·mol^{-1}	Độ không đảm bảo tiêu chuẩn u(L°)/ 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

Phụ lục B

(quy định)

Các công thức để tính độ không đảm bảo

B.1 Yêu cầu chung

Các công thức nêu trong phụ lục này phải được sử dụng trong các phép tính độ không đảm bảo đối với các tính chất của chúng mà có thể được tính bằng việc sử dụng tiêu chuẩn này. Vì các tính chất của khí lý tưởng là không chắc chắn được yêu cầu như là kết quả cuối cùng, với độ không đảm bảo kèm theo, các công thức đã cho áp dụng một cách cụ thể với khí thực.

Trong trường hợp độ không đảm bảo liên quan đến tính chất của khí lý tưởng được yêu cầu, điều này có thể nhận được bằng việc thiết lập s = 0 và u(s) = 0 trong công thức thích hợp.

B.2 Khối lượng phân tử

$$u^2(M) = \left(\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} M_i \cdot M_j \cdot u(x_i) \cdot u(x_j) \cdot r(x_i, x_j)\right) + \left(\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} x_i \cdot x_j \cdot u(M_i) \cdot u(M_j) \cdot r(M_i, M_j)\right) \quad \text{(B.1)}$$

B.3 Hệ số phép cộng

$$u^2(s) = \left(\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} s_i \cdot u(x_i) \cdot r(x_i, x_j) \cdot s_j \cdot u(x_j)\right) + \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \cdot u^2(s_i) \quad \text{(B.2)}$$

B.4 Hệ số nén

$$u^2(Z) = 4 \cdot s^2 \times \left(\left(\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} s_i \cdot u(x_i) \cdot r(x_i, x_j) \cdot s_j \cdot u(x_j)\right) + \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \cdot u^2(s_i)\right) \quad \text{(B.3)}$$

B.5 Nhiệt trị tổng tính theo mol

$$u^2\left(\left(Hc\right)_G\right) = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i \cdot u\left(x_i\right)\cdot r\left(x_i,x_j\right)\cdot\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_j \cdot u\left(x_j\right) + \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \cdot u^2\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i\right) \tag{B.4}$$

B.6 Nhiệt trị tổng tính theo khối lượng

$$\left(\frac{u\left(\left(Hm\right)_G\right)}{\left(Hm\right)_G}\right)^2 = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i}{\left(Hc\right)_G} - \frac{M_i}{M}\right)\cdot u\left(x_i\right)\cdot r\left(x_i,x_j\right)\cdot\left(\frac{\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_j}{\left(Hc\right)_G} - \frac{M_j}{M}\right)\cdot u\left(x_j\right) + \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \cdot u^2\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i\right)}{\left(Hc\right)_G^2} + \frac{\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} x_i \cdot u\left(M_i\right)\cdot r\left(M_i,M_j\right)\cdot x_j \cdot u\left(M_j\right)}{M^2} \tag{B.5}$$

B.7 Nhiệt trị tổng tính theo thể tích

$$\left(\frac{u\left(\left(Hv\right)_G\right)}{\left(Hv\right)_G}\right)^2 = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i}{\left(Hc\right)_G} + \frac{2\cdot s_i \cdot s}{Z}\right)\cdot u\left(x_i\right)\cdot r\left(x_i,x_j\right)\cdot\left(\frac{\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_j}{\left(Hc\right)_G} + \frac{2\cdot s_j \cdot s}{Z}\right)\cdot u\left(x_j\right) + \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \cdot u^2\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i\right)}{\left(Hc\right)_G^2} + \frac{4\cdot s^2 \cdot \sum_{i=1}^{N} x_i^2 \cdot u^2\left(s_i\right)}{Z^2} + \left(\frac{u\left(R\right)}{R}\right)^2 \tag{B.6}$$

trong đó

$$s = \left(\left(1-Z\right)\times\frac{p_2}{p_0}\right)^{1/2} \tag{B.7}$$

B.8 Nhiệt trị thực tính theo mol

$$u^2\left(\left(Hc\right)_N\right)=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i-\frac{L^o}{2}\cdot b_i\right)\cdot u\left(x_i\right)\cdot r\left(x_i,x_j\right)\cdot\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_j-\frac{L^o}{2}\cdot b_j\right)\cdot u\left(x_j\right)+$$

$$\sum_{i=1}^{N}x_i^2\cdot u^2\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i\right)+\left(\frac{\sum_{i=1}^{N}x_i\cdot b_i}{2}\right)^2\cdot u^2\left(L^o\right) \qquad \text{(B.8)}$$

B.9 Nhiệt trị thực tính theo khối lượng

$$\left(\frac{u\left(\left(Hm\right)_N\right)}{\left(Hm\right)_N}\right)^2=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i-\frac{L^o}{2}\cdot b_i\right)}{\left(Hc\right)_N}-\frac{M_i}{M}\right)\cdot u\left(x_i\right)\cdot r\left(x_i,x_j\right)\cdot$$

$$\left(\frac{\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_j-\frac{L^o}{2}\cdot b_j\right)}{\left(Hc\right)_N}-\frac{M_j}{M}\right)\cdot u\left(x_j\right)+\frac{\sum_{i=1}^{N}x_i^2\cdot u^2\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i\right)}{\left(Hc\right)_N^2}+$$

$$\frac{\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}x_i\cdot u\left(M_i\right)\cdot r\left(M_i,M_j\right)\cdot x_j\cdot u\left(M_j\right)}{M^2}+\left(\frac{\sum_{i=1}^{N}x_i\cdot b_i}{2\cdot\left(Hc\right)_N}\right)^2\cdot u^2\left(L^o\right) \qquad \text{(B.9)}$$

B.10 Nhiệt trị thực tính theo thể tích

$$\left(\frac{u\left(\left(Hv\right)_N\right)}{\left(Hv\right)_N}\right)^2 = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i - \frac{L^o}{2}b_i\right)}{\left(Hc\right)_N} + \frac{2\cdot s_i\cdot s}{Z}\right)\cdot u\left(x_i\right)\cdot r\left(x_i,x_j\right)\cdot$$
$$\left(\frac{\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_j - \frac{L^o}{2}\cdot b_j\right)}{\left(Hc\right)_N} + \frac{2\cdot s_i\cdot s}{Z}\right)\cdot u\left(x_j\right) + \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2\cdot u^2\left(\left[\left(Hc\right)_G^o\right]_i\right)}{\left(Hc\right)_N^2} +$$
$$\frac{4\cdot s^2\cdot\sum_{i=1}^{N} x_i^2\cdot u^2\left(s_i\right)}{Z^2} + \left(\frac{u\left(R\right)}{R}\right)^2 + \left(\frac{\sum_{i=1}^{N} x_i\cdot b_i}{2\cdot\left(Hc\right)_N}\right)^2\cdot u^2\left(L^o\right) \quad \text{(B.10)}$$

B.11 Nhiệt trị thực tính theo khối lượng riêng

$$\left(\frac{u\left(D\right)}{D}\right)^2 = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{M_i}{M} + \frac{2\cdot s_i\cdot s}{Z}\right)\cdot u\left(x_i\right)\cdot r\left(x_i,x_j\right)\cdot u\left(x_j\right)\cdot\left(\frac{M_j}{M} + \frac{2\cdot s_j\cdot s}{Z}\right) +$$
$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{x_i\cdot u\left(M_i\right)\cdot r\left(M_i,M_j\right)\cdot u\left(M_j\right)\cdot x_j}{M^2} +$$
$$\frac{4\cdot s^2\cdot\sum_{i=1}^{N} x_i^2\cdot u^2\left(s_i\right)}{Z^2} + \left(\frac{u\left(R\right)}{R}\right)^2 \quad \text{(B.11)}$$

B.12 Tỷ khối

$$\left(\frac{u(G)}{G}\right)^2 = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{M_i}{M}+\frac{2\cdot s_i\cdot s}{Z}\right)\cdot u(x_i)\cdot r(x_i,x_j)\cdot\left(\frac{M_j}{M}+\frac{2\cdot s_j\cdot s}{Z}\right)\cdot u(x_j)+$$
$$\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{x_i\cdot u(M_i)\cdot r(M_i,M_j)\cdot u(M_j)\cdot x_j}{M^2}+$$
$$\frac{4\cdot s^2\cdot\sum_{i=1}^{N}x_i^2\cdot u^2(s_i)}{Z^2}+$$
$$\left(\frac{u(M_{air})}{M_{air}}\right)^2+\left(\frac{u(Z_{air})}{Z_{air}}\right)^2 \qquad (B.12)$$

B.13 Chỉ số Wobbe tổng

$$\left(\frac{u(W_G)}{W_G}\right)^2 = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\left[(Hc)_G^o\right]_i}{(Hc)_G}+\frac{s_i\cdot s}{Z}-\frac{M_i}{2\cdot M}\right)\cdot u(x_i)\cdot$$
$$r(x_i,x_j)\cdot u(x_j)\cdot\left(\frac{\left[(Hc)_G^o\right]_j}{(Hc)_G}+\frac{s_j\cdot s}{Z}-\frac{M_j}{2\cdot M}\right)+$$
$$\frac{\sum_{i=1}^{N}x_i^2\cdot u^2[(Hc)_G^o]_i}{(Hc)_G^2}+\frac{s^2\cdot\sum_{i=1}^{N}x_i^2\cdot u^2(s_i)}{Z^2}+$$
$$\frac{\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}x_i\cdot u(M_i)\cdot r(M_i,M_j)\cdot u(M_j)\cdot x_j}{4\cdot M^2}+$$
$$\left(\frac{u(R)}{R}\right)^2+\left(\frac{u(M_{air})}{2\cdot M_{air}}\right)^2+\left(\frac{u(Z_{air})}{2\cdot Z_{air}}\right)^2 \qquad (B.13)$$

B.14 Chỉ số Wobbe thực

$$\left(\frac{u(W_N)}{W_N}\right)^2 = \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\left(\left[(Hc)_G^o\right]_i - \frac{L^o}{2}\cdot b_i\right)}{(Hc)_N} + \frac{s_i\cdot s}{Z} - \frac{M_i}{2\cdot M}\right)\cdot u(x_i)\cdot r(x_i,x_j)\cdot u(x_j)\cdot$$

$$\left(\frac{\left(\left[(Hc)_G^o\right]_j - \frac{L^o}{2}\cdot b_j\right)}{(Hc)_N} + \frac{s_j\cdot s}{Z} - \frac{M_j}{2\cdot M}\right) + \frac{\sum_{i=1}^{N} x_i^2\cdot u^2\left[(Hc)_G^o\right]_i}{(Hc)_N^2} +$$

$$\frac{s^2\cdot\sum_{i=1}^{N} x_i^2\cdot u^2(s_i)}{Z^2} + \frac{\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} x_i\cdot u(M_i)\cdot r(M_i,M_j)\cdot u(M_j)\cdot x_j}{4\cdot M^2} +$$

$$\left(\frac{u(R)}{R}\right)^2 + \left(\frac{u(M_{air})}{2\cdot M_{air}}\right)^2 + \left(\frac{u(Z_{air})}{2\cdot Z_{air}}\right)^2 + \left(\frac{\sum_{i=1}^{N} x_i\cdot b_i}{2\cdot(Hc)_N}\right)^2\cdot u^2(L^o) \qquad \text{(B.14)}$$

Phụ lục C
(Tham khảo)

Các hệ số chuyển đổi

C.1 Yêu cầu chung

Trong một số ứng dụng đã biết, giá trị của các đại lượng bao trùm bởi tiêu chuẩn này được yêu cầu tính bằng các đơn vị khác ngoài đơn vị SI được sử dụng trong nội dung chính. Trong các trường hợp như vậy, các hệ số bằng số sau đây phải được sử dụng để chuyển đổi các đại lượng từ đơn vị SI đã cho trong nội dung chính sang các đại lượng tương tự trong các đơn vị không phải SI đã yêu cầu.

Trong các bảng sau đây, để nhận được giá trị của một đại lượng trong hệ đơn vị không phải SI từ giá trị của đại lượng trong đơn vị SI, chia hệ số chuyển đổi đã cho và sử dụng các quy tắc chuẩn về làm tròn, biểu thị kết quả đến độ chính xác làm tròn được chỉ ra.

Các hệ số chuyển đổi đã cho trong phông chữ thông thường là xấp xỉ nhưng độ chính xác đủ đối với các mục đích của tiêu chuẩn này khi các giá trị tính theo đơn vị SI, nhận được bằng cách sử dụng phương pháp ngẫu nhiên (11.5.4), là để chuyển đổi sang đơn vị không phải SI và được trích dẫn đến độ chính xác làm tròn đã chỉ ra. Các hệ số chuyển đổi đã cho in nghiêng là chính xác.

Các hệ số chuyển đổi đối với các tính chất theo thể tích áp dụng chỉ khi tính chất được tính theo đơn vị SI và đơn vị không phải SI liên quan đến cùng áp suất và nhiệt độ.

C.2 Nhiệt trị tính theo phân tử

Bảng C.1

Đơn vị SI	Đơn vị không-SI	Hệ số chuyển đổi	Độ chính xác làm tròn
$kJ \cdot mol^{-1}$	$Btu_{IT} \cdot lb \cdot mol^{-1}$	*0,002 326*	1

C.3 Nhiệt trị tính theo khối lượng

Bảng C.2

Đơn vị SI	Đơn vị không-SI	Hệ số chuyển đổi	Độ chính xác làm tròn
$MJ \cdot mol^{-1}$	$Btu_{IT} \cdot lb \cdot mol^{-1}$	*0,002 326*	1

C.4 Nhiệt trị tính theo thể tích và các chỉ số Wobbe

Bảng C.3

Đơn vị SI	Đơn vị không-SI	Hệ số chuyển đổi	Độ chính xác làm tròn
$MJ \cdot m^{-3}$	$kWh \cdot m^{-3}$	*3,6*	0,001
	$Btu_{IT} \cdot ft^{-3}$	*0,037 258 9*	0,1

C.5 Khối lượng riêng

Bảng C.4

Đơn vị SI	Đơn vị không-SI	Hệ số chuyển đổi	Độ chính xác làm tròn
$kg \cdot m^{-3}$	$lb \cdot ft^{-3}$	*16,018 46*	0,000 01

Phụ lục D

(Tham khảo)

Các phép tính ví dụ

D.1 Yêu cầu chung

Phụ lục này đưa ra các phép tính ví dụ đối với các tính chất bao gồm trong tiêu chuẩn này. Những ví dụ này cho các kết quả hợp lệ có thể sử dụng được để chứng nhận sự thực hiện của các phương pháp. Để hỗ trợ trong việc kiểm tra xác nhận của phép thực hiện bất kỳ và để đảm bảo rằng không có sai số làm tròn thỏa thuận các kết quả cuối cùng, các vị trí thập phân được giữ lại tại từng bước trung gian có thể nghiêm ngặt hơn là cần thiết.

D.2 Ví dụ 1: Một hỗn hợp đơn giản có năm cấu tử

D.2.1 Tổng quan

Trong phép tính ví dụ này, các kết quả của các bước trung gian trong phép tính lựa chọn có giới hạn của các tính chất được cung cấp cho hỗn hợp đơn giản năm cấu tử. Hỗn hợp được đơn giản hóa một cách cần thiết là để hạn chế cỡ các ma trận có chứa các giá trị $r(x_i, x_j)$ và $r(M_i, M_j)$. Các tính chất được tính đối với các điều kiện cháy chuẩn là 15 °C và 101,325 kPa và các điều kiện đo chuẩn là 15 °C và 101,325 kPa (Các điều kiện quy chiếu tiêu chuẩn ISO).

D.2.2 Phân tích thành phần

Báo cáo phân tích phần mol của mẫu khí thiên nhiên được cung cấp các thông tin sau đây đối với thành phần đã chuẩn hóa (được làm tròn đến sáu vị trí thập phân) và các độ không đảm bảo kèm theo:

Cấu tử	x_i	$u(x_i)$
Metan	0,933 212	0,000 346
Etan	0,025 656	0,000 243
Propan	0,015 368	0,000 148
Nitơ	0,010 350	0,000 195
Cacbon dioxit	0,015 414	0,000 111
Tổng	1,000 000	

D.2.3 Tính khối lượng phân tử

Cấu tử	x_i	M_i	$x_i \cdot M_i$
Metan	0,933 212	16,042 46	14,971 016 2
Etan	0,025 656	30,069 04	0,771 451 3
Propan	0,015 368	44,095 62	0,677 661 5
Nitơ	0,010 350	28,013 40	0,289 938 7
Cacbon dioxit	0,015 414	44,009 50	0,678 362 4
Tổng	1,000 000		17,388 430 1

Từ công thức (5) – khối lượng phân tử = 17,388 430 kg·kmol^{-1}

D.2.4 Tính thể tích phân tử khí thực

Cấu tử	x_i	s_i	$x_i \cdot s_i$
Metan	0,933 212	0,044 52	0,041 546 6
Etan	0,025 656	0,091 90	0,002 357 8
Propan	0,015 368	0,134 40	0,002 065 5
Nitơ	0,010 350	0,017 00	0,000 176 0
Cacbon dioxit	0,015 414	0,075 20	0,001 159 1
Tổng	1,000 000		0,047 305 0

p_2 = 101,325 kPa

p_0 = 101,325 kPa

từ công thức (1) – hệ số nén Z = 0,997 762 24

từ công thức (B.7) – hệ số tổng s = 0,047 305

T_2 = 288,15 K

Từ A.1 – hằng số khí R = 8,314 462 1 J·mol^{-1}·K^{-1}

Từ công thức (11) – thể tích phân tử V = 0,023 591 917 m^3·mol^{-1}

D.2.5 Tính nhiệt trị tổng theo mol

Cấu tử	x_i	$\left((H_c)^\circ_G\right)_i$	$x_i \cdot \left((H_c)^\circ_G\right)_i$
Metan	0,933 212	891,51	831,967 830 1
Etan	0,025 656	1562,14	40,078 263 8
Propan	0,015 368	2221,10	34,133 864 8
Nitơ	0,010 350	0,00	0,000
Cacbon dioxit	0,015 414	0,00	0,000
Tổng	1,000 000		906,179 958 8

Từ công thức (2) – nhiệt trị tổng tính theo mol $(H_C)_G$ = 906,179 959 kJ·mol^{-1}

D.2.6 Tính độ không đảm bảo về nhiệt trị tổng theo mol

Cấu tử	$\left((H_C)^\circ_G\right)_i$	u(xi)	$\left((H_C)^\circ_G\right)_{i}\cdot u(x_i)$	$\left[\left((H_C)^\circ_G\right)_i \cdot u(x_i)\right]^2$
Metan	891,51	0,000 346	0,308 462 46	0,095 149 089
Etan	1562,14	0,000 243	0,379 600 02	0,144 096 175
Propan	2221,10	0,000 148	0,328 722 80	0,108 058 679
Nitơ	0,00	0,000 195	0,000 000 00	0,000 000 000
Cacbon dioxit	0,00	0,000 111	0,000 000 00	0,000 000 000
Tổng				0,347 303 943

Cấu tử	xi	x_i^2	$u\left((H_C)^\circ_G\right)_i$	$u^2\left((H_C)^\circ_G\right)_i$	$x_i^2 \cdot u^2\left((H_C)^\circ_G\right.$
Metan	0,933 212	0,870 884 637	0,19	0,036 1	0,031 438 93
Etan	0,025 656	0,000 658 230	0,51	0,260 1	0,000 171 20
Propan	0,015 368	0,000 236 175	0,51	0,260 1	0,000 061 42
Nitơ	0,010 350	0,000 107 123	0,00	0,000 0	0,000 000 00
Cacbon dioxit	0,015 414	0,000 237 591	0,00	0,000 0	0,000 000 00
Tổng	1,000 000				0,031 671 57

Từ công thức (B.4) – $u^2\left((H_C)_G\right)$ = 0,347 303 943 + 0,031 671 570
= 0,378 975 513

$u\left((H_C)_G\right)$ = 0,615 609 872 kJ·mol^{-1}

$U\left((H_C)_G\right)$ = 1,2 kJ·mol^{-1} (sử dụng hệ số bao trùm k = 2 và biểu thị kế

D.2.7 Tính nhiệt trị tổng theo khối lượng

Từ D.2.5 – $(H_C)_G$ = 906,179 959 kJ·mol^{-1}

Từ D.2.3 – M = 17,388 430 kg·kmol^{-1}

Từ công thức (4) – nhiệt trị tổng tính theo khối lượng $(Hm)_G$ = 52,113 961 MJ·kg^{-1}

D.2.8 Tính độ không đảm bảo trong nhiệt trị tổng theo khối lượng

Cấu tử	$\left((H_C)^{o}_{G}\right)_t$ /$(Hc)_G$	M_i/M	$\left[\left((Hc)^{o}_{G}\right)_t / (Hc)_G\right] - [M_1 / M]$	$u(x_i)$	
Metan	0,983 811 2	0,922 593 9	0,061 217 3	0,000 346	
Etan	1,723 873 9	1,729 255 6	–0,005 381 7	0,000 243	
Propan	2,451 058 4	2,535 917 3	–0,084 858 9	0,000 148	
Nitơ	0,000 000 0	1,611 036 8	–1,611 036 8	0,000 195	
Cacbon dioxit	0,000 000 0	2,530 964 6	–2,530 964 6	0,000 111	
Tổng					

CHÚ THÍCH: Ma trận tương quan giả định $r(x_i,x_j)$ là

Cấu tử	x_i	x_i^2	$u\left((H_C)^{o}_{G}\right)_t$	$u^2\left((H_C)^{o}_{G}\right)_t$	$x_i^2 \cdot u^2\left($(
Metan	0,933 212	0,870 884 637	0,19	0,036 1	0,031 43
Etan	0,025 656	0,000 658 230	0,51	0,260 1	0,000 17
Propan	0,015 368	0,000 236 175	0,51	0,260 1	0,000 06
Nitơ	0,010 350	0,000 107 123	0,00	0,000 0	0,000 00
Cacbon dioxit	0,015 414	0,000 237 591	0,00	0,000 0	0,000 00
Tổng	1,000 000				0,031 67

	$r(M_i,M_j)$			
	Metan	Etan	Propan	
Metan	1,000 000 000 000 0	0,996 804 383 768 0	0,994 233 563 614 8	0,000 0
Etan	0,996 804 383 768 0	1,000 000 000 000 0	0 999 622 547 547 1	0,000 0
Propan	0,994 233 563 614 8	0,999 622 547 547 1	1,000 000 000 000 0	0,000 0
Nitơ	0,000 000 000 000 0	0,000 000 000 000 0	0,000 000 000 000 0	1,000 0
Cacbon dioxit	0,755 086 685 092 8	0,773 784 772 303 5	0,779 072 967 793 4	0,000 0

Cấu tử	x_i	$u(M_j)$	$x_i \cdot u(M_i)$	$\left[x_i \cdot u(M_i) \cdot r(M_i,$
Metan	0,933 212	0,000 423 79	0,000 395 5	
Etan	0,025 656	0,000 827 10	0,000 021 2	
Propan	0,015 368	0,001 232 23	0,000 018 9	
Nitơ	0,010 350	0,000 200 00	0,000 002 1	
Cacbon dioxit	0,015 414	0,000 500 00	0,000 007 7	
Tổng	1,000 000			0,064 4

Từ công thức (B.5) – $[u((Hm)_G / (Hm)_G]^2 = [17,822\,531 + 3,856\,921 + 0,064\,425] \times 10^{-8}$

$= 21,743\,877 \times 10^{-8}$

$u\left((Hm)_G\right) = [21,743\,877 \times 10^{-8} \times (52,113\,961)^2]^{1/2}$

$= 0,024\,301\ MJ \cdot kg^{-1}$

$U\left((Hm)_G\right) = 0,049\ MJ \cdot kg^{-1}$ (sử dụng hệ số bao trùm k = 2 và b

D.2.9 Tính nhiệt trị tổng theo thể tích khí thực

Từ D.2.5 – $(H_C)_G$ = 906,179 959 kJ·mol^{-1}

Từ D.2.4 – V = 0,023 591 917 m^3·mol^{-1}

Từ công thức (10) – $(H_V)_G$ = 38,410 611 MJ·m^{-3}

D.2.10 Tính độ không đảm bảo trong nhiệt trị tổng theo thể tích

Cấu tử	$\left((H_C)^\circ_G\right)_t/(H_C)_G$	$2 \cdot s_I \cdot s / Z$	$\left[\left((H_C)^\circ_G\right)_t / (H_C)_G\right] + [2 \cdot s_i \cdot s / z]$	$u(x_I)$	[((H
Metan	0,983 811 2	0,004 221 5	0,988 032 7	0,000 346	
Etan	1,723 873 9	0,008 714 2	1,732 588 1	0,000 243	
Propan	2,451 058 4	0,012 744 1	2,463 802 5	0,000 148	
Nitơ	0,000 000 0	0,001 612 0	0,001 612 0	0,000 195	
Cacbon dioxit	0,000 000 0	0,007 130 6	0,007 130 6	0,000 111	
Tổng					

CHÚ THÍCH: Ma trận tương quan giả định $r(x_I, x_J)$ là

Cấu tử	x_I	x_i^2	$u\left((H_C)^\circ_G\right)_t$	$u^2\left((H_C)^\circ_G\right)_t$	$x_i^2 \cdot u^2\left((H$
Metan	0,933 212	0,870 884 637	0,19	0,036 1	0,031 43
Etan	0,025 656	0,000 658 230	0,51	0,260 1	0,000 17
Propan	0,015 368	0,000 236 175	0,51	0,260 1	0,000 06
Nitơ	0,010 350	0,000 107 123	0,00	0,000 0	0,000 00
Cacbon dioxit	0,015 414	0,000 237 591	0,00	0,000 0	0,000 00
Tổng	1,000 000				0,031 67

Cấu tử	x_i	u(s_i)	$x_i^2 \cdot u^2(s_i) \times 10^8$	$4 \cdot s^2 \cdot x_i^2 \cdot u^2$ (
Metan	0,933 212	0,000 5	21,772 212	0,195
Etan	0,025 656	0,001 1	0,079 646	0,000
Propan	0,015 368	0,001 6	0,060 461	0,000
Nitơ	0,010 350	0,001 0	0,010 712	0,000
Cacbon dioxit	0,015 414	0,002 0	0,095 037	0,000
Tổng	1,000 000			0,197

Từ A.1 – $[u(R) / R]^2$ = 0,000 081 4 × 10^{-8}

Từ công thức (B.6) – $[u((Hv)_G / (Hv)_G]^2$ = [42,709 979 + 3,856 921 + 0,197 968 + 0,000 08

= 46,763 949 × 10^{-8}

$u((Hv)_G)$ = [46,763 949 × 10^{-8} × $(38,410\ 611)^2]^{1/2}$

= 0,026 264 MJ·m^{-3}

$U((Hv)_G)$ = 0,053 MJ·m^{-3} (sử dụng hệ số bao trùm k = 2 và b

D.3 Ví dụ 2: Hỗn hợp đơn giản có chứa hơi nước

D.3.1 Tổng quan

Ví dụ này tuân thủ các quy trình giống nhau và ở trong cách trình bày giống như đối với ví dụ 1, nhưng khác nhau là hỗn hợp đơn giản năm cấu tử giờ đây loại trừ propan và, ở vị trí của nó, có chứa hơi nước tại phần mol đã biết. Ngoài ra, cả hai điều kiện cháy chuẩn và các điều kiện đo chuẩn đều thay đổi là 15,55 °C (60 °F) và 101,325 kPa (14,696 psi).

D.3.2 Phân tích thành phần

Báo cáo phân tích phần mol của mẫu khí thiên nhiên được cung cấp các thông tin sau đây đối với thành phần đã chuẩn hóa (được làm tròn đến sáu vị trí thập phân) và các độ không đảm bảo kèm theo:

Cấu tử	x_i	$u(x_i)$
Metan	0,931 819	0,000 350
Etan	0,025 618	0,000 243
Nitơ	0,010 335	0,000 195
Cacbon dioxit	0,015 391	0,000 111
Nước	0,016 837	0,000 162
Tổng	1,000 000	

D.3.3 Tính khối lượng phân tử

Cấu tử	x_i	M_i	$x_i \cdot M_i$
Metan	0,931 819	16,042 46	14,948 669 0
Etan	0,025 618	30,069 04	0,770 308 7
Nitơ	0,010 335	28,013 40	0,289 518 5
Cacbon dioxit	0,015 391	44,009 50	0,677 350 2
Nước	0,016 837	18,015 28	0,303 323 3
Tổng	1,000 000		16,989 169 7

Từ công thức (7) – khối lượng phân tử = 16,989 170 $kg \cdot kmol^{-1}$

D.3.4 Tính thể tích phân tử khí thực

Cấu tử	x_i	s_i	$x_i \cdot s_i$
Metan	0,931 819	0,044 37	0,041 344 8
Etan	0,025 618	0,091 60	0,002 346 6
Nitơ	0,010 335	0,116 90	0,000 174 7
Cacbon dioxit	0,015 391	0,074 90	0,001 152 8
Nước	0,016 837	0,254 60	0,004 286 7
Tổng	1,000 000		0,049 305 6

p_2 = 101,325 kPa

p_0 = 101,325 kPa

từ công thức (1) – hệ số nén Z = 0,997 569 0

từ công thức (B.7) – hệ số tổng s = 0,049 306

T_2 = 288,15 K

Từ A.1 – hằng số khí R = 8,314 462 1 $J \cdot mol^{-1} \cdot K^{-1}$

Từ công thức (11) – thể tích phân tử V = 0,023 632 824 $m^3 \cdot mol^{-1}$

D.3.5 Tính nhiệt trị tổng theo mol

Cấu tử	x_i	$\left((H_C)^\circ_G\right)_i$	$x_i \cdot \left((H_C)^\circ_G\right)_i$
Metan	0,931 819	891,460	830,679 365 7
Etan	0,025 618	1562,060	40,016 853 1
Nitơ	0,010 335	0,000	0,000
Cacbon dioxit	0,015 391	0,000	0,000
Nước	0,016 837	44,408	0,747 697 5
Tổng	1,000 000		871,443 916 3

Từ công thức (2) – nhiệt trị tổng tính theo mol $(Hc)^0_G$ = 871,443 916 $kJ \cdot mol^{-1}$

D.3.6 Tính độ không đảm bảo về nhiệt trị tổng theo mol

Cấu tử	$\left((H_C)^\circ_G\right)_i$	u(xi)	$\left((H_C)^\circ_G\right)_{i\cdot u(x_I)}$	$\left[\left((H_C)^\circ_G\right)_I \cdot u(x_I)\right]^2$
Metan	891,460	0,000 350	0,312 011 00	0,097 350 864
Etan	1 562,060	0,000 243	0,379 580 58	0,144 081 417
Nitơ	0,000	0,000 195	0,000 000 00	0,000 000 000
Cacbon dioxit	0,000	0,000 111	0,000 000 00	0,000 000 000
Nước	44,405	0,000 162	0,007 194 10	0,000 051 755
Tổng				0,241 484 036

Cấu tử	xi	x_i^2	$u\left((H_C)^\circ_G\right)_i$	$u^2\left((H_C)^\circ_G\right)_I$	$x_i^2 \cdot u^2\left((H_C)^\circ_G\right)$
Metan	0,931 819	0,868 286 649	0,190	0,036 10	0,031 345 148
Etan	0,025 618	0,000 656 282	0,510	0,260 10	0,000 170 699
Nitơ	0,010 335	0,000 106 812	0,000	0,000 0	0,000 000 000
Cacbon dioxit	0,015 391	0,000 236 883	0,000	0,000 0	0,000 000 000
Nước	0,016 837	0,000 283 485	0,004	0,000 02	0,000 000 005
Tổng	1,000 000				0,031 515 852

Từ công thức (B.4) – $u^2\left((H_C)_G\right)$ = 0,241 484 036 + 0,031 515 852
= 0,272 999 888

$u\left((H_C)_G\right)$ = 0,522 493 911 kJ·mol^{-1}

$U\left((H_C)_G\right)$ = 1,0 kJ·mol^{-1} (sử dụng hệ số bao trùm k = 2 và biểu thị kế

D.3.7 Tính nhiệt trị tổng theo khối lượng

Từ D.3.5 – $(H_C)_G$ = 871,443 916 kJ·mol^{-1}

Từ D.3.3 – M = 16,989 170 kg·kmol^{-1}

Từ công thức (4) – nhiệt trị tổng tính theo khối lượng $(Hm)_G$ = 51,294 085 MJ·kg^{-1}

D.3.8 Tính độ không đảm bảo trong nhiệt trị tổng theo khối lượng

Cấu tử	$\left((H_C)^o_G\right)_t$ /$(Hc)_G$	M_i/M	$\left[\left((Hc)^o_G\right)_t / (Hc)_G\right] - [M_1 / M]$	$u(x_i)$	
Metan	1,022 968 9	0,944 275 7	0,078 693 2	0,000 350	
Etan	1,792 496 3	1,769 894 6	0,022 601 7	0,000 243	
Nitơ	0,000 000 0	1,648 897 5	–1,648 897 5	0,000 195	
Cacbon dioxit	0,000 000 0	2,590 444 4	–2,590 444 4	0,000 111	
Nước	0,050 959 1	1,060 397 9	–1,009 438 8	0,000 162	
Tổng					

CHÚ THÍCH: Ma trận tương quan giả định $r(x_i,x_j)$ là giốn

Cấu tử	x_i	x_i^2	$u\left((H_C)^o_G\right)_t$	$u^2\left((H_C)^o_G\right)_t$	$x_i^2 \cdot u^2($
Metan	0,931 819	0,868 286 649	0,190	0,036 10	0,031 3
Etan	0,025 618	0,000 656 282	0,510	0,260 10	0,000 1
Nitơ	0,010 335	0,000 106 812	0,000	0,000 00	0,000 0
Cacbon dioxit	0,015 391	0,000 236 883	0,000	0,000 00	0,000 0
Nước	0,016 837	0,000 283 485	0,004	0,000 02	0,000 0
Tổng	1,000 000				0,031 5

	r(Mi,Mj)			
	Metan	Etan	Nitơ	Cac
Metan	1,000 000 000 000 0	0,996 804 383 768 0	0,000 000 000 000 0	0,755 0
Etan	0,996 804 383 768 0	1,000 000 000 000 0	0,000 000 000 000 0	0,773 7
Nitơ	0,000 000 000 000 0	0,000 000 000 000 0	0,000 000 000 000 0	0,000 0
Cacbon dioxit	0,755 086 685 092 8	0,773 784 772 303 5	1,000 000 000 000 0	1,000 0
Nước	0,139 700 393 083 5	0,107 369 828 180 3	0,000 000 000 000 0	0,543 7

Cấu tử	x_i	$u(M_i)$	$x_i \cdot u(M_i)$	$\left[x_i \cdot u(M_i) \cdot r(M_i,M$
Metan	0,931 819	0,000 423 79	0,000 394 9	
Etan	0,025 618	0,000 827 10	0,000 021 2	
Nitơ	0,010 335	0,000 200 00	0,000 002 1	
Cacbon dioxit	0,015 391	0,000 500 00	0,000 007 7	
Nước	0,016 837	0,000 166 00	0,000 002 8	
Tổng	1,000 000			0,061 7

Từ công thức (B.5) – $u[(Hm)_G / (Hm)_G]^2$ = [21,359 415 + 4,150 020 + 0,061 785] × 10^{-8}

= 25,571 220 × 10^{-8}

$u\left((Hm)_G\right)$ = [25,571 220 × 10^{-8} × (51,294 085)^2]$^{1/2}$

= 0,025 938 MJ·kg^{-1}

$U\left((Hm)_G\right)$ = 0,052 MJ·kg^{-1} (sử dụng hệ số bao trùm k = 2 và b

D.3.9 Tính nhiệt trị tổng theo thể tích khí thực

Từ D.3.5 – $(H_C)_G$ = 871,443 916 kJ·mol^{-1}

Từ D.3.4 – V = 0,023 632 824 m^3·mol^{-1}

Từ công thức (10) – $(H_V)_G$ = 36,874 304 MJ·m^{-3}

D.3.10 Tính độ không đảm bảo trong nhiệt trị tổng theo thể tích

Cấu tử	$\left((H_C)^{\circ}_G\right)_{t/(Hc)_G}$	$2 \cdot s_I \cdot s / Z$	$\left[\left((Hc)^{\circ}_G\right)_t / (Hc)_G\right] + \left[2 \cdot s_i \cdot s / z\right]$	$u(x_I)$	$\left[\left((H\right.\right.$
Metan	1,022 968 9	0,004 386 0	1,027 354 9	0,000 350	
Etan	1,792 496 3	0,009 054 8	1,801 551 1	0,000 243	
Nitơ	0,000 000 0	0,001 670 6	0,001 670 6	0,000 195	
Cacbon dioxit	0,000 000 0	0,007 404 0	0,007 404 0	0,000 111	
Nước	0,050 9591	0,025 167 6	0,076 126 7	0,000 162	
Tổng					

CHÚ THÍCH: Ma trận tương quan giả định $r(x_I, x_J)$ là

Cấu tử	x_I	x_i^2	$u\left((H_C)^{\circ}_G\right)_t$	$u^2\left((H_C)^{\circ}_G\right)_t$	$x_i^2 \cdot u^2\left($
Metan	0,931 819	0,870 884 637	0,190	0,036 10	0,031 3
Etan	0,025 618	0,000 658 230	0,510	0,260 10	0,000 1
Nitơ	0,010 335	0,000 236 175	0,000	0,000 00	0,000 0
Cacbon dioxit	0,015 391	0,000 107 123	0,000	0,000 00	0,000 0
Nước	0,016 837	0,000 237 591	0,004	0,000 02	0,000 0
Tổng	1,000 000				0,031 5

Cấu tử	x_i	$u(s_i)$	$x_i^2 \cdot u^2(s_i) \times 10^8$	$4 \cdot s^2 \cdot x_i^2 \cdot u^2$ (
Metan	0,931 819	0,000 5	21,707 166	0,212
Etan	0,025 618	0,001 1	0,079 410	0,000
Nitơ	0,010 335	0,001 0	0,010 681	0,000
Cacbon dioxit	0,015 391	0,001 0	0,094 753	0,000
Nước	0,016 837	0,015 0	6,378 403	0,062
Tổng	1,000 000			0,276

Từ A.1 – $[u(R) / R]^2$ = 0,000 081 4 × 10^{-8}

Từ công thức (B.6) – $[u((Hv)_G / (Hv)_G]^2$ = [32,109 513 + 4,150 020 + 0,276 247 + 0,000 081

= 36,535 861 × 10^{-8}

$u((Hv)_G)$ = [36,535 861 × 10^{-8} × (36,874 304)^2]$^{1/2}$

= 0,022 289 MJ·m^{-3}

$U((Hv)_G)$ = 0,045 MJ·m^{-3} (sử dụng hệ số bao trùm k = 2 và bi

D.3.11 Chuyển đổi sang đơn vị không-SI

Các kết quả nhận được trong D.3.5 đến D.3.10 đối với các nhiệt trị tổng tính theo mol, khối lượng và thể tích tương ứng là $(Hc)_G$, $(Hm)_G$ và $(Hv)_G$, có thể được tóm tắt và báo cáo thích hợp là

$(Hc)_G = (871,4 \pm 1,0)\ kJ \cdot mol^{-1}$

$(Hm)_G = (51,294 \pm 0,052)\ MJ \cdot kg^{-1}$

$(Hv)_G = (36,874 \pm 0,045)\ MJ \cdot m^{-3}$

Việc chuyển đổi các đơn vị này sang các đơn vị không-SI đạt được bởi sử dụng Phụ lục C như sau:

- Sử dụng Bảng C.1:

  $(Hc)_G = (871,4 \pm 1,0)\ kJ \cdot mol^{-1} = [(871,4 \pm 1,0) / 0,002\ 326]\ Btu_{IT} \cdot lb \cdot mol^{-1}$

  $= (374\ 635 \pm 430)\ Btu_{IT} \cdot lb \cdot mol^{-1}$

- Sử dụng Bảng C.2:

  $(Hm)_G = (51,294 \pm 0,052)\ MJ \cdot kg^{-1} = [(51,294 \pm 0,052) / 0,002\ 326]\ Btu_{IT} \cdot lb^{-1}$

  $= (22\ 052 \pm 22)\ Btu_{IT} \cdot lb^{-1}$

- Sử dụng Bảng C.3:

  $(Hv)_G = (36,874 \pm 0,045)\ MJ \cdot m^{-3} = [(36,874 \pm 0,045) / 0,037\ 258\ 9]\ Btu_{IT} \cdot ft^{-3}$

  $= (987,9 \pm 1,2)\ Btu_{IT} \cdot ft^{-3}$

D.4 Ví dụ 3: Hỗn hợp phức tạp hơn có 11 cấu tử

D.4.1 Tổng quan

Trong ví dụ này, các kết quả tính toán của các bước trung gian không được báo cáo, nhưng thay cho các kết quả cuối cùng của phép tính có dải các tính chất rộng hơn được cung cấp đối với hỗn hợp đầy đủ hơn có 11 cấu tử. Các tính chất được tính trong D.4.3, đối với các điều kiện cháy chuẩn là 15 °C và 101,325 kPa và các điều kiện đo chuẩn là 15 °C và 101,325 kPa (Các điều kiện quy chiếu tiêu chuẩn ISO), và trong D.4.4 đối với các điều kiện cháy chuẩn là 25 °C và 101,325 kPa và các điều kiện đo chuẩn là 0 °C và 101,325 kPa. Đối với cả hai bộ các điều kiện chuẩn, các phép tính được thực hiện trước tiên bằng cách sử dụng giả định về một ma trận đồng nhất đối với các tương quan phần mol, và sau đó bằng cách sử dụng ma trận chuẩn hóa nghiêm ngặt hơn.

D.4.2 Phân tích thành phần

Báo cáo phân tích phần mol của mẫu khí thiên nhiên được cung cấp các thông tin sau đây đối với thành phần đã chuẩn hóa (được làm tròn đến sáu vị trí thập phân) và các độ không đảm bảo kèm theo:

Cấu tử	x_i	$u(x_i)$
Metan	0,922 393	0,000 348
Etan	0,025 358	0,000 247
Propan	0,015 190	0,000 149
n-butan	0,000 523	0,000 018
2-metylpropan	0,001 512	0,000 027
n-pentan	0,002 846	0,000 007
2-metylbutan	0,002 832	0,000 009
2,2-dimetylpropan	0,001 015	0,000 004
n-hexan	0,002 865	0,000 008
Nitơ	0,010 230	0,000 195
Cacbon dioxit	0,015 236	0,000 112
Tổng	1,000 000	

D.4.3 Các tính chất và độ không đảm bảo đối với các điều kiện quy chiếu tiêu chuẩn ISO

D.4.3.1 Các kết quả từ việc sử dụng một ma trận đồng nhất đối với các tương quan phần mol

Tính chất	Đơn vị	Y	u(Y)	U(Y)
Nhiệt trị tổng tính theo thể tích	$MJ \cdot m^{-3}$	39,733 51	0,026 917	0,053 833
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		39,734		0,054
Nhiệt trị thực tính theo thể tích	$MJ \cdot m^{-3}$	35,868 11	0,024 757	0,049 515
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		35,868		0,050
Khối lượng riêng	$kg \cdot m^{-3}$	0,764 62	0,000 586	0,001 172
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		0,764 6		0,001 2
Tỷ khối		0,623 91	0,000 478	0,000956
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		0,623 91		0,000 96
Chỉ số Wobbe tổng	$MJ \cdot m^{-3}$	50,303 18	0,021 588	0,043 177
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		50,303		0,043
Chỉ số Wobbe thực	$MJ \cdot m^{-3}$	45,409 54	0,020 151	0,040 302
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		45,410		0,040

D.4.3.2 Các kết quả từ việc sử dụng ma trận chuẩn hóa đối với các tương quan phần mol

Các giá trị đối với các thành phần $r(x_i,x_j)$ của ma trận (chuẩn hóa) hệ số tương quan phần mol, được tính theo ISO 14912:2003, 8.5.2.3, công thức (69) và được làm tròn đến vị trí thập phân số 6, được cho trong bảng sau đây. Các ước tính được rà soát đối với các độ không đảm bảo giá trị tính chất khác nhau nhận được bằng việc sử dụng ma trận hệ số tương quan đầy đủ này thay cho ma trận đồng nhất được trình bày trong bảng tiếp theo. Điều đó rõ ràng, đối với ví dụ điển hình này, nói chung các kết quả này nhỏ hơn đáng kể so với các kết quả đã nêu trong D.4.3.1.

$r(x_i,x_j)$	CH_4	C_2H_6	C_3H_8	nC_4	iC_4	nC_5	iC_5	ne
CH_4	1,000 000	–0,657 246	–0,377 458	–0,041 205	–0,056 924	0,099 228	0,061 961	0,06
C_2H_6	–0,657 246	1,000 000	–0,35 617	–0,007 450	–0,013 720	–0,085 690	–0,063 295	–0,0
C_3H_8	–0,377 458	–0,035 617	1,000 000	–0,004 442	–0,007 810	–0,039 877	–0,029 677	–0,0
nC_4	–0,041 205	–0,007 450	–0,004 442	1,000 000	–0,000 824	–0,000 592	–0,000 551	–0,0
iC_4	–0,056 924	–0,013 720	–0,007 810	–0,000 824	1,000 000	0,002 803	0,001 827	0,00
nC_5	0,099 228	–0,085 295	–0,039 877	–0,000 592	0,002 803	1,000 000	0,079 557	0,07
iC_5	0,061 961	–0,063 295	–0,029 677	–0,000 551	0,001 827	0,079 557	1,000 000	0,05
$neoC_5$	0,064 295	–0,054 908	–0,025 538	–0,000 372	0,001 811	0,071 180	0,051 085	1,00
nC_6	0,080 202	–0,074 061	–0,034 574	–0,000 567	0,002 303	0,094 670	0,067 927	0,06
N_2	–0,512 347	–0,030 668	–0,024 994	–0,005 703	–0,010 740	–0,072 794	–0,053 627	–0,0
CO_2	–0,265 664	–0,038 371	–0,023 925	–0,003 373	–0,005 392	–0,014 019	–0,010 845	–0,0

Tính chất	Đơn vị	Y	u(Y)	U(Y)
Nhiệt trị tổng tính theo thể tích	$MJ \cdot m^{-3}$	39,733 51	0,016 316	0,032 631
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		39,734		0,033
Nhiệt trị thực tính theo thể tích	$MJ \cdot m^{-3}$	35,868 11	0,015 305	0,030 609
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		35,868		0,031
Khối lượng riêng	$kg \cdot m^{-3}$	0,764 62	0,000 277	0,000 554
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		0,764 6		0,000 55
Tỷ khối		0,623 91	0,000 226	0,000 453
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		0,623 91		0,000 45
Chỉ số Wobbe tổng	$MJ \cdot m^{-3}$	50,303 18	0,019 823	0,039 646
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		50,303		0,040
Chỉ số Wobbe thực	$MJ \cdot m^{-3}$	45,409 54	0,018 498	0,036 996
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		45,410		0,037

D.4.4 Các tính chất và độ không đảm bảo đối với các điều kiện chuẩn 25 °C/0 °C

D.4.4.1 Các kết quả từ việc sử dụng một ma trận đồng nhất đối với các tương quan phần mol

Tính chất	Đơn vị	Y	u(Y)	U(Y)
Nhiệt trị tổng tính theo thể tích	$MJ \cdot m^{-3}$	41,893 60	0,028 425	0,056 850
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		41,894		0,057
Nhiệt trị thực tính theo thể tích	$MJ \cdot m^{-3}$	37,852 28	0,026 164	0,052 327
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		37,852		0,052
Khối lượng riêng	$kg \cdot m^{-3}$	0,807 01	0,000 619	0,001 238
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		0,807 0		0,001 2
Tỷ khối		0,624 11	0,000 479	0,000 958
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		0,624 11		0,000 96
Chỉ số Wobbe tổng	$MJ \cdot m^{-3}$	53,029 30	0,022 783	0,045 566
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		53,029		0,046
Chỉ số Wobbe thực	$MJ \cdot m^{-3}$	47,913 76	0,021 278	0,042 557
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		47,914		0,043

D.4.4.2 Các kết quả từ việc sử dụng ma trận chuẩn hóa đối với các tương quan phần mol

Sự thay đổi về các điều kiện chuẩn không ảnh hưởng đến ma trận (chuẩn hóa) hệ số tương quan phần mol, giữ không bị thay đổi từ kết quả được trình bày trong D.4.3.2. Cũng như các kết quả trình bày, kết luận rằng việc sử dụng ma trận đồng nhất thay cho các kết quả ma trận chuẩn hóa trong ước tính "an toàn" của độ không đảm bảo đối với tất cả các tính chất.

Tính chất	Đơn vị	Y	u(Y)	U(Y)
Nhiệt trị tổng tính theo thể tích	$MJ \cdot m^{-3}$	41,893 60	0,017 241	0,034 483
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		41,894		0,034
Nhiệt trị thực tính theo thể tích	$MJ \cdot m^{-3}$	37,852 28	0,016 181	0,052 361
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		37,852		0,032
Khối lượng riêng	$kg \cdot m^{-3}$	0,807 01	0,000 293	0,000 586
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		0,807 0		0,000 59
Tỷ khối		0,624 11	0,000 227	0,000 454
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		0,624 11		0,000 45
Chỉ số Wobbe tổng	$MJ \cdot m^{-3}$	53,029 30	0,020 914	0,041 828
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		53,029		0,042
Chỉ số Wobbe thực	$MJ \cdot m^{-3}$	47,913 76	0,019 528	0,039 057
(sau khi làm tròn theo 11.5.2)		47,914		0,039

Thư mục tài liệu tham khảo

[1] ISO 20765-2, *Natural gas – Calculation of thermodynamic properties – Part 2: Single-phase properties (gas, liquid, and dense fluid) for extended ranges of application [Khí thiên nhiên – Tính toán các tính chất nhiệt động học – Phần 2: Các tính chất đơn pha (khí, lỏng và lưu chất đậm đặc) đối với các dải ứng dụng mở rộng]*

[2] ISO 80000-1:2009, *Quantities and units – Part 1: General (Đại lượng và đơn vị - Phần 1: Tổng quan)*

[3] ISO/TR 29922, *Natural gas – Supporting information on the calculation of physical properties according to ISO 6976 (Khí thiên nhiên – Thông tin hỗ trợ về cách tính toán các tính chất lý học phù hợp với ISO 6976)*

[4] ISO/IEC *Guide 99, International vocabulary of metrology – Basic and general concepts and associated terms (VIM) [Hướng dẫn 99, Từ vựng quốc tế về đo lường – Khái niệm cơ bản và khái niệm chung và các thuật ngữ kèm theo (VIM)]*

[5] *Evaluaton of measurements data – Guide to the expression of uncertainty inmeasurement (GUM 1995 with minor corrections), Joint committee for guides in metrology, JCGM 100:2008 (BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP, OIML), 120+viii p [Đánh giá các số liệu phép đo – Hướng dẫn biểu thị độ không đảm bảo trong phép đo (GUM 1995 với các hiệu chỉnh phụ) , Ủy ban liên kết về hướng dẫn đo lường, JCGM 100:2008 (BIPM, IEC, IFCC, ISO, IUPAC, IUPAP, OIML.) 120+viii p]*

[6] HUMPHREYS A.E. *Some thermophysical properties of components of natural gas and cognate fluids. Groupe Europeen de Recjercjes Gazieres, GERG technical monograph TPC/1. 1986, 43 p (Một số tính chất nhiệt vật lý của các cấu tử của khí thiên nhiên và các chất lỏng cùng nguồn gốc).*

[7] MOHR P.J., TAYLOR B.N NEWELL D.B. CODATA *recommended values of the fundamental physical constants: 2010. Rev. Mod. Phys. 2010, 84 (4) pp. 1527-1605 (Các giá trị khuyến nghị về hằng số vật lý cơ bản: 2010. Rev. Mod. Phys. 2012, 84 (4) pp. 1527 – 1605.)*

[8] WIESER, M.E., & BERGLUND M. *Atomic weights of the elemnts 2007. Pure appl. Chem. 2009, 81 (11) pp. 2131-2156 (Khối lượng nguyên tử của các nguyên tố 2007. Hóa chất ứng dụng tinh khiết 2009 81 (11) pp. 2131-2156)*

[9] PICARD A., DAVIS R.S., GLASER M., FUJII K. *Revised formula for the density of moist air (CIPM-2007). Metrologia. 2008, 45 pp. 149-155 (Công thức đã rà soát đối với khối lượng riêng của không khí ẩm (CIPM-2017). Đo lường. 2008, 45 pp. 149-155)*

[10] KUNZ O., KLIMECK R., WAGNER W., JAESCHIKE M. GERG-2004 *Wide range equatation of state for natural gases and other mixtures, GERG Technical monograph TM-15. 2007,*

535 p (Phương trình trạng thái dải rộng đối với các khí thiên nhiên và các hỗn hợp khác, Biểu đồ kỹ thuật GERG TM-15. 2007, 535 p)

[11] WAGNER W., & PRUSS A. *The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use. J. Phys. Chem. Ref. data. 2002, 31 pp. 387-535 (Công thức IAPWS 1995 về các tính chất nhiệt động học của nước thông thường để sử dụng chung và sử dụng trong khoa học. J. Phys. Chem. Ref. Dữ liệu 2002, 31 pp 387-535)*

[12] *IAPWS (International association for the properties of water and steam) Advisory note No. 1 (2003), uncertainties in enthalpy for the IAPWS formulation 1995 for the properties of ordinary wtaer substance for general and scientific use (IAPWS-95) and the IAPWS industrial formulation 1997 for the thermodynamic properties of water and steam (IAPWS-IF97) [IAPWS (Hiệp hội quốc tế về các tính chất của nước và hơi) Ghi chú tư vấn số 1 (2003), các độ không đảm bảo trong entalpy đối với công thức IAPWS 1995 đối với các tính chất của nước thông thường để sử dụng chung và sử dụng trong khoa hoc (IAPWS-95) và Công thức công nghiệp IAPWS 1997 về các tính chất nhiệt động học của nước và hơi (IAPWS-IF97)]*