



中华人民共和国国家标准

GB/T 17747.2—1999
eqv ISO 12213-2:1997

天然气压缩因子的计算 第2部分：用摩尔组成进行计算

Natural gas—Calculation of compression factor—
Part 2: Calculation using molar-composition analysis



1999-05-17 发布



C200006640

1999-12-01 实施

国家质量技术监督局 发布

中 华 人 民 共 和 国
国 家 标 准
天然气压缩因子的计算
第2部分：用摩尔组成进行计算
GB/T 17747.2—1999

*

中国标准出版社出版
北京复兴门外三里河北街16号
邮政编码：100045
电 话：68522112

无锡富瓷快速印务有限公司印刷
新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售
版权专有 不得翻印

*

开本 880×1230 1/16 印张 1½ 字数 37 千字
1999年8月第一版 1999年8月第一次印刷
印数 1—800

*

书号：155066·1-16008 定价 13.00 元

*

标 目 381—25

前 言

本标准等效采用 ISO 12213-2:1997《天然气压缩因子的计算 用摩尔组成进行计算》。本标准在技术内容上和编写格式与 ISO 12213-2:1997 完全一致。本标准取消了国际标准中的附录 F、附录 G。

本标准中高位发热量和相对密度采用的参比条件同我国石油气体所采用的标准参比条件有所差别,为方便使用,在 4.4.1 和 4.4.2 增加了注 2 和注 3。

《天然气压缩因子的计算》标准包括以下 3 个部分:第 1 部分《导论和指南》;第 2 部分《用摩尔组成进行计算》;第 3 部分《用物性值进行计算》。本标准是第 2 部分(GB/T 17747.2—1999):用摩尔组成进行计算。

本标准的附录 A、附录 B、附录 C、附录 D 是标准的附录。

本标准的附录 E 是提示的附录。

本标准由原中国石油天然气总公司提出。

本标准由石油工业天然气专业标准化技术委员会归口并负责解释。

本标准起草单位:中国石油天然气集团公司四川石油管理局天然气研究院。

本标准主要起草人:罗 勤、陈赓良、曾文平、许文晓、富朝英、陈荣松。

ISO 前言

ISO(国际标准化组织)是各国家标准化机构(ISO 成员)组成的世界性的联合会。制定国际标准的工作通常由 ISO 技术委员会完成。对技术委员会提出的项目感兴趣的每个成员都有权参加。与 ISO 保持联系的各政府或非政府的国际性组织也可以参加此项工作。所有电工技术方面的标准化工作,ISO 与 IEC(国际电工委员会)保持密切的合作。

由技术委员会通过的国际标准草案交各成员进行表决投票,要求至少有 75% 的成员同意,才能作为国际标准正式发布。

国际标准 ISO 12213-2 是由天然气技术委员会 ISO/TC 193 下的“天然气分析”分委员会制定的。

ISO 12213“天然气压缩因子的计算”标准包括以下 3 个部分:

- 第 1 部分:导论和指南;
- 第 2 部分:用摩尔组成进行计算;
- 第 3 部分:用物性值进行计算。

附录 A、附录 B、附录 C、附录 D 是标准的附录。附录 E、附录 F、附录 G 是提示的附录。

目 次

前言 I

ISO 前言 II

1 范围 1

2 引用标准 1

3 定义 1

4 计算方法 1

附录 A(标准的附录) 符号和单位 6

附录 B(标准的附录) AGA8-92DC 计算方法描述 7

附录 C(标准的附录) 计算示例 14

附录 D(标准的附录) 压力和温度的换算因子 15

附录 E(提示的附录) 更宽范围的应用效果 15



中华人民共和国国家标准

天然气压缩因子的计算

第2部分:用摩尔组成进行计算

GB/T 17747.2—1999
eqv ISO 12213-2:1997

Natural gas—Calculation of compression factor—
Part 2: Calculation using molar-composition analysis

1 范围

本标准规定了天然气、含人工掺合物的天然气和其他类似混合物仅以气体状态存在时的压缩因子计算方法。该计算方法是用已知的气体的详细的摩尔分数组成和相关压力、温度计算气体压缩因子。

该计算方法又称为AGA8-92DC计算方法,主要应用于在输气和配气正常进行的压力 p 和温度 T 范围内的管输气,计算不确定度约为 $\pm 0.1\%$ 。也可在更宽的压力和温度范围内,用于更宽组成范围的气体,但计算结果的不确定度会增加(见附录E)。

有关该计算方法应用范围和应用领域更详细的说明见GB/T 17747.1。

2 引用标准

下列标准所包含的条文,通过在本标准中引用而构成本标准的条文。本标准出版时,所示版本均为有效。所有标准都会被修订,使用本标准的各方应探讨使用下列标准最新版本的可能性。

GB/T 3102.3—1993 力学的量和单位

GB/T 3102.4—1993 热学的量和单位

GB/T 11062—1998 天然气发热量、密度、相对密度和沃泊指数的计算方法(neq ISO 6976:1995)

GB/T 17747.1—1999 天然气压缩因子的计算 第1部分:导论和指南(eqv ISO 12213-1:1997)

3 定义

关于本标准的所有定义见GB/T 17747.1。文中出现的符号所代表的含义及单位见附录A。

4 计算方法

4.1 原理

AGA8-92DC计算方法所使用的方程是基于这样的概念:管输天然气的容量性质可由组成来表征和计算。组成、压力和温度用作计算方法的输入数据。

该计算方法需要对气体进行详细的摩尔组成分析。分析包括摩尔分数超过0.000 05的所有组分。对典型的管输气,分析组分包括碳数最高到 C_7 或 C_8 的所有烃类,以及 N_2 、 CO_2 和He。对其他气体,分析需要考虑如 H_2O 蒸气、 H_2S 和 C_2H_4 等组分。对人造气体, H_2 和CO也可能是重要的分析组分。

4.2 AGA8-92DC方程

AGA8-92DC计算方法使用AGA8详细特征方程(下面表示为AGA8-92DC方程,见GB/T 17747.1);该方程是扩展的维利方程,可写作:

$$Z = 1 + B\rho_m - \rho_r \sum_{n=13}^{18} C_n^* + \sum_{n=13}^{58} C_n^* (b_n - c_n k_n \rho_r^{k_n}) \rho_r^{b_n} \exp(-c_n \rho_r^{k_n}) \dots\dots\dots (1)$$

式中：Z——压缩因子；
B——第二维利系数；
 ρ_m ——摩尔密度(单位体积的摩尔数)；
 ρ_r ——对比密度；
 $b_n、c_n、k_n$ ——常数,见表 B1；
 C_n^* ——温度和组成的函数的系数。

对比密度 ρ_r 同摩尔密度 ρ_m 相关,两者的关系由下式给出：

$$\rho_r = K^3 \rho_m \dots\dots\dots (2)$$

式中：K——混合物体积参数。

摩尔密度表示为：

$$\rho_m = p/(ZRT) \dots\dots\dots (3)$$

式中：p——绝对压力；
R——摩尔气体常数；
T——热力学温度。

压缩因子 Z 的计算方法如下:首先利用附录 B 给出的相关式计算出 B 和 C_n^* ($n=13\sim 58$)。然后通过适当的数值计算方法,求解联立方程(1)和(3)得到 ρ_m 和 Z。计算程序流程见图 B1。

4.3 输入变量

AGA8-92DC 计算方法要求输入的变量包括绝对压力、热力学温度和摩尔组成。

摩尔组成是以摩尔分数表示下列组分： $N_2、CO_2、Ar、CH_4、C_2H_6、C_3H_8、n-C_4H_{10}、i-C_4H_{10}、n-C_5H_{12}、i-C_5H_{12}、C_6H_{14}、C_7H_{16}、C_8H_{18}、C_9H_{20}、C_{10}H_{22}、H_2、CO、H_2S、He、O_2$ 和 H_2O 。

注 1：如果 $C_7H_{16}、C_8H_{18}、C_9H_{20}、C_{10}H_{22}$ 摩尔分数未知,允许用 C_6^+ 表示总的摩尔分数。应进行敏感度分析,以检验此近似法是否会计算结果变差。

摩尔分数大于 0.000 05 的所有组分都必须在计算中考虑。痕量组分(如 C_2H_4 等)应按表 1 中指定的赋值组分处理。所有组分的摩尔分数之和为 $1\pm 0.000 1$ 。

如果已知体积分数组成,则应将其换算成摩尔分数组成,具体换算方法见 GB/T 11062。

表 1 微量和痕量组分一览表

微量和痕量组分	指定赋值组分
O_2	O_2
Ar	Ar
H_2S	H_2S
$C_2H_4、C_2H_2$	CO_2
丙烯、丙二烯	C_3H_8
丁烯、丁二烯	$n-C_4H_{10}$
新戊烷、戊烯、苯、环戊烷	$n-C_5H_{12}$
C_6 同分异构体、环己烷、乙苯、二甲苯	$n-C_6H_{14}$
C_7 同分异构体、环庚烷、甲苯	$n-C_7H_{16}$
C_8 同分异构体	$n-C_8H_{18}$
C_9 同分异构体	$n-C_9H_{20}$
C_{10} 同分异构体和更高碳数烃类	$n-C_{10}H_{22}$

4.4 应用范围

4.4.1 管输气

AGA8-92DC 计算方法对管输气的应用范围如下：

绝对压力:	$0 \text{ MPa} < p \leq 12 \text{ MPa}$
热力学温度:	$263 \text{ K} \leq T \leq 338 \text{ K}$
高位发热量:	$30 \text{ MJ} \cdot \text{m}^{-3} \leq H_s \leq 45 \text{ MJ} \cdot \text{m}^{-3}$
相对密度:	$0.55 \leq d \leq 0.80$

注 2: 将本条中的高位发热量和相对密度换算为我国石油气体标准参比条件下的高位发热量和相对密度,则高位发热量范围为 $27.95 \sim 41.93 \text{ MJ} \cdot \text{m}^{-3}$,相对密度范围为 $0.550 \sim 0.800$ 。

天然气中各组分的摩尔分数应在以下范围以内:

CH_4 :	$0.7 \leq x_{\text{CH}_4} \leq 1.00$
N_2 :	$0 \leq x_{\text{N}_2} \leq 0.20$
CO_2 :	$0 \leq x_{\text{CO}_2} \leq 0.20$
C_2H_6 :	$0 \leq x_{\text{C}_2\text{H}_6} \leq 0.10$
C_3H_8 :	$0 \leq x_{\text{C}_3\text{H}_8} \leq 0.035$
C_4H_{10} :	$0 \leq x_{\text{C}_4\text{H}_{10}} \leq 0.015$
C_5H_{12} :	$0 \leq x_{\text{C}_5\text{H}_{12}} \leq 0.005$
C_6H_{14} :	$0 \leq x_{\text{C}_6\text{H}_{14}} \leq 0.001$
C_7H_{16} :	$0 \leq x_{\text{C}_7\text{H}_{16}} \leq 0.0005$
C_8H_{18} 和更高碳数烃类:	$0 \leq x_{\text{C}_8^+} \leq 0.0005$
H_2 :	$0 \leq x_{\text{H}_2} \leq 0.10$
CO :	$0 \leq x_{\text{CO}} \leq 0.03$
He :	$0 \leq x_{\text{He}} \leq 0.005$
H_2O :	$0 \leq x_{\text{H}_2\text{O}} \leq 0.00015$

所有摩尔分数大于 0.00005 的组分都不可忽略。微量和痕量组分见表 1,并按指定的赋值组分处理。

AGA8-92DC 计算方法仅适用于单相气态(高于露点)混合物在操作压力和操作温度下压缩因子计算。

4.4.2 更宽的应用范围

超出 4.4.1 所给出范围的应用范围如下:

绝对压力:	$0 \text{ MPa} < p \leq 65 \text{ MPa}$
热力学温度:	$225 \text{ K} \leq T \leq 350 \text{ K}$
高位发热量:	$20 \text{ MJ} \cdot \text{m}^{-3} \leq H_s \leq 48 \text{ MJ} \cdot \text{m}^{-3}$
相对密度:	$0.55 \leq d \leq 0.90$

注 3: 将本条中的高位发热量和相对密度换算为我国石油气体标准参比条件下的高位发热量和相对密度,则更宽的高位发热量范围为 $18.64 \sim 44.73 \text{ MJ} \cdot \text{m}^{-3}$,相对密度范围为 $0.550 \sim 0.900$ 。

天然气中主要组分摩尔分数允许范围如下:

CH_4 :	$0.50 \leq x_{\text{CH}_4} \leq 1.00$
N_2 :	$0 \leq x_{\text{N}_2} \leq 0.50$
CO_2 :	$0 \leq x_{\text{CO}_2} \leq 0.30$
C_2H_6 :	$0 \leq x_{\text{C}_2\text{H}_6} \leq 0.20$
C_3H_8 :	$0 \leq x_{\text{C}_3\text{H}_8} \leq 0.05$
H_2 :	$0 \leq x_{\text{H}_2} \leq 0.10$

管输气中微量和痕量组分含量范围见 4.4.1。在超出以上范围应用时,AGA8-92DC 方法的计算性能见附录 E。

4.5 不确定度

4.5.1 管输气压缩因子计算的不确定度

AGA8-92DC 计算方法在 4.4.1 给出的管输气应用范围(温度为 263~350 K,压力最大为 12 MPa)内,计算结果的不确定度为 $\pm 0.1\%$ (见图 1)。当温度高于 290 K,压力在最大为 30 MPa 的范围内时,计算结果的不确定度也为 $\pm 0.1\%$ 。

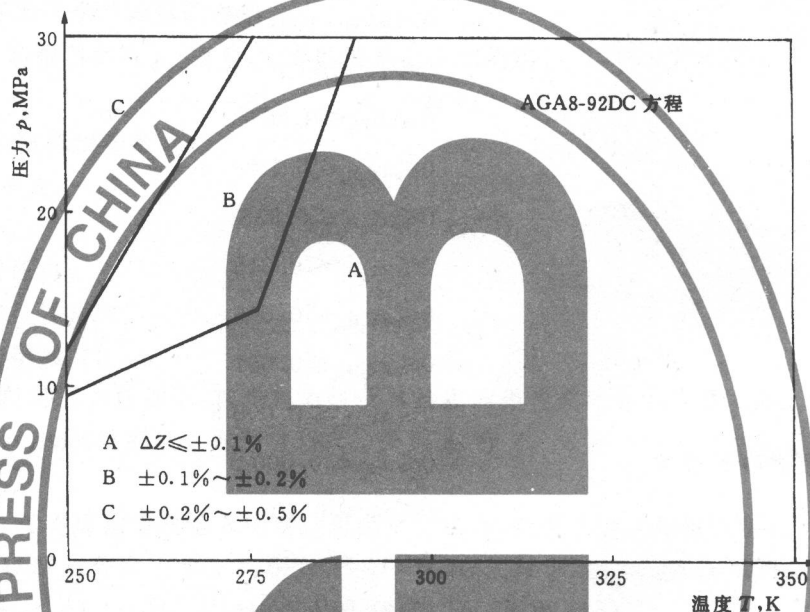


图 1 压缩因子计算的不确定度范围(给出的不确定度范围仅适合于满足下面条件的天然气和类似气体: $x_{N_2} \leq 0.20$ 、 $x_{CO_2} \leq 0.20$ 、 $x_{C_2H_6} \leq 0.10$ 、 $x_{H_2} \leq 0.10$ 、 $30 \text{ MJ} \cdot \text{m}^{-3} \leq H_s \leq 45 \text{ MJ} \cdot \text{m}^{-3}$ 、 $0.55 \leq d \leq 0.80$)

温度低于 263 K 时,仅当压力在最高至 10 MPa 的范围内,计算结果的不确定度才能保持在 $\pm 0.1\%$ 内。

不确定度水平是通过将天然气压缩因子计算值与实验值数据库相比较而得到的。另外还同由称量法配制的模拟天然气混合物的压缩因子实验数据作了详细比较。用于试验本计算方法的两个数据库中实验测定值的不确定度在 $\pm 0.1\%$ 以内。

4.5.2 更宽的应用范围压缩因子计算的不确定度

超出 4.4.1 给出气质范围的气体压缩因子计算的预期不确定度见附录 E。

4.5.3 输入变量不确定度的影响

表 2 列出的是相关输入变量的典型不确定度值,这些值可在最优操作条件下获得。

根据误差传播分析,输入变量的不确定度会对压力为 6 MPa,温度在 263~338 K 范围内的压缩因子计算结果产生约 $\pm 0.1\%$ 的附加不确定度。当压力大于 6 MPa 时,附加不确定度会更大,且大致与压力成正比例增加。

表 2 相关输入变量的典型不确定度值

输 入 变 量	绝 对 不 确 定 度
绝对压力	$\pm 0.02 \text{ MPa}$
热力学温度	$\pm 0.15 \text{ K}$
惰性组分的摩尔分数	± 0.001
x_{N_2}	± 0.001
x_{CO_2}	± 0.001
x_{CH_4}	± 0.001
$x_{\text{C}_2\text{H}_6}$	± 0.001
$x_{\text{C}_3\text{H}_8}$	± 0.0005
$x_{\text{C}_4\text{H}_{10}}$	± 0.0003
$x_{\text{C}_5^+}$	± 0.0001
x_{H_2} 和 x_{CO}	± 0.001

4.5.4 结果的表述

压缩因子和摩尔密度计算结果应保留至小数点后四位或五位,同时给出压力和温度以及所使用的计算方法(GB/T 17747.2 AGA8-92DC 计算方法)。验证计算机程序时,压缩因子计算结果应给出更多的位数。



附 录 A
(标准的附录)
符号和单位

符号	含义	单位
a_n	常数(表 B1)	—
B	第二维利系数	$\text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1}$
B_{nij}^*	混合物交互作用系数[方程(B1)和方程(B2)]	—
b_n	常数(表 B1)	—
c_n	常数(表 B1)	—
C_n^*	与温度和组成相关的系数	—
E_i	组分 i 的特征能量参数(表 B2)	K
E_j	组分 j 的特征能量参数(表 B2)	K
E_{ij}	第二维利系数的二元能量参数	K
E_{ij}^*	第二维利系数的二元能量交互作用参数(表 B3)	—
F	混合物高温参数	—
F_i	组分 i 的高温参数(表 B2)	—
F_j	组分 j 的高温参数(表 B2)	—
f_n	常数(表 B1)	—
G	混合物定位参数	—
G_i	组分 i 的定位参数(表 B2)	—
G_j	组分 j 的定位参数(表 B2)	—
G_{ij}	二元定位参数	—
G_{ij}^*	二元定位交互作用参数(表 B2)	—
g_n	常数(表 B1)	—
H_s	高位发热量	$\text{MJ} \cdot \text{m}^{-3}$
K	体积参数	$(\text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1})^{1/3}$
K_i	组分 i 的体积参数(表 B2)	$(\text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1})^{1/3}$
K_j	组分 j 的体积参数(表 B2)	$(\text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1})^{1/3}$
K_{ij}	二元体积交互作用参数(表 B3)	—
k_n	常数(表 B1)	—
M	摩尔质量	$\text{kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$

M_i	组分 i 的摩尔质量	$\text{kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$
N	气体混合物的组分数	—
n	整数(1~58)	—
p	绝对压力	MPa
Q	四极参数	—
Q_i	组分 i 的四极参数	—
Q_j	组分 j 的四极参数	—
q_n	常数(表 B1)	—
R	气体常数(=0.008 314 510)	$\text{MJ} \cdot \text{kmol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$
S_i	组分 i 的偶极参数(表 B2)	—
S_j	组分 j 的偶极参数(表 B2)	—
S_n	常数(表 B1)	—
T	热力学温度	K
U	混合物能量参数	K
U_{ij}	混合物二元能量交互作用参数(表 B3)	—
u_n	常数(表 B1)	—
W_i	组分 i 的组合参数(表 B2)	—
W_j	组分 j 的组合参数(表 B2)	—
W_n	常数(表 B1)	—
x_i	组分 i 在气体混合物中的摩尔分数	—
x_j	组分 j 在气体混合物中的摩尔分数	—
Z	压缩因子	—
ρ	质量密度	$\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$
ρ_t	气体的对比密度	—
ρ_m	摩尔密度	$\text{kmol} \cdot \text{m}^{-3}$

附 录 B

(标准的附录)

AGA8-92DC 计算方法描述

B1 概述

计算气体混合物压缩因子 Z 使用 4.2 给出的 AGA8-92DC 方程。本附录将详细描述用 AGA8-92DC 方程进行压缩因子计算的有关方法和计算机执行程序,并给出必要的常数值。验证计算机程序用

的压缩因子数据见附录 C。如果计算机程序能够得到与附录 C 中数据相等的计算结果,则可使用。

B2 AGA8-92DC 计算方法的计算机执行程序

B2.1 计算概述

B2.1.1 输入热力学温度 T , 绝对压力 p 和混合物中各组分的摩尔分数 x_i ;

注 B1: 当压力和温度用非 MPa 和 K 的其他单位表示时, 必须分别换算成以 MPa 和 K 表示的值; 有关换算因子见 GB/T 3102.3—1993 和 GB/T 3102.4—1993 以及附录 D。

B2.1.2 计算状态方程系数 B 和 C_n^* ($n=13\sim58$), 两者均取决于 T 和 x_i ;

B2.1.3 利用改写的状态方程, 迭代求解摩尔密度 ρ_m , 以得到压力 p ;

B2.1.4 当由 B2.1.3 计算出的压力与 B2.1.1 的输入压力, 在规定的收敛范围内 (如 1×10^{-6}) 相一致时, 即得到压缩因子计算值。

计算程序流程见图 B1。

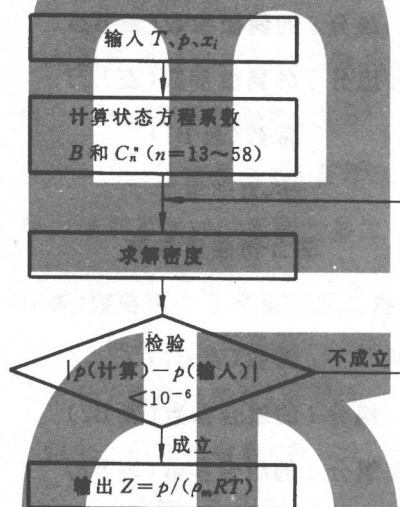


图 B1 AGA8-92DC 计算方法的程序流程图

B2.2 计算步骤

B2.2.1 输入绝对压力 p , 热力学温度 T 和天然气混合物中各组分的摩尔分数 x_i ;

B2.2.2 根据 B2.2.1 中输入的热力学温度 T 和天然气组分摩尔分数 x_i , 计算与组成和温度有关的状态方程系数 B 和 C_n^* ($n=13\sim58$);

第二维利系数 B 按方程(B1)计算:

$$B = \sum_{n=1}^{18} a_n T^{-u_n} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j B_{mij}^* E_{ij}^u (K_i K_j)^{3/2} \quad \dots\dots\dots (B1)$$

$$B_{mij}^* = (G_{ij} + 1 - g_n)^{g_n} (Q_i Q_j + 1 - q_n)^{q_n} (F_i^{1/2} F_j^{1/2} + 1 - f_n)^{f_n} (S_i S_j + 1 - s_n)^{s_n} (W_i W_j + 1 - w_n)^{w_n} \quad \dots\dots\dots (B2)$$

二元参数 E_{ij} 和 G_{ij} 由方程(B3)和(B4)计算:

$$E_{ij} = E_{ij}^* (E_i E_j)^{1/2} \quad \dots\dots\dots (B3)$$

$$G_{ij} = G_{ij}^* (G_i + G_j) / 2 \quad \dots\dots\dots (B4)$$

注 B2: 除了表 B3 中给出的 E_{ij}^* 和 G_{ij}^* 外, 所有其他二元交互作用参数 E_{ij}^* 和 G_{ij}^* 的值都是 1.0。

系数 C_n^* ($n=13\sim58$) 由方程(B5)计算:

$$C_n^* = a_n (G + 1 - g_n)^{g_n} (Q^2 + 1 - q_n)^{q_n} (F + 1 - f_n)^{f_n} U^n T^{-u_n} \quad \dots\dots\dots (B5)$$

用以下共形求解混合方程计算混合物参数 U , G 和 Q ; 二重加和时, i 从 $1\sim N-1$, 变化, 而相对每一个 i 值, j 从 $i+1\sim N$ 变化。

$$U^5 = \left[\sum_{i=1}^N x_i E_i^{5/2} \right]^2 + 2 \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N x_i x_j (U_{ij}^5 - 1) (E_i E_j)^{5/2} \dots\dots\dots (B6)$$

$$G = \sum_{i=1}^N x_i G_i + 2 \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N x_i x_j (G_{ij}^* - 1) (G_i + G_j) \dots\dots\dots (B7)$$

$$Q = \sum_{i=1}^N x_i Q_i \dots\dots\dots (B8)$$

$$F = \sum_{i=1}^N x_i^2 F_i \dots\dots\dots (B9)$$

注 B3: 除了表 B3 给出的 K_{ij} , E_{ij}^* , G_{ij}^* 和 U_{ij} 外, 所有其他的二元交互作用参数 K_{ij} , E_{ij}^* , G_{ij}^* 和 U_{ij} 的值都为 1.0。表 B2 中 H_2 的 $F(H_2)=1.0$, 而其他组分的 F_i 值都为 0; 水的 $W(H_2O)=1.0$, 而其他组分的 W_i 值都为 0。

B2.2.3 在压缩因子 Z 的计算中, 气体的组成 x_i 、热力学温度 T 和绝对压力 p 都是已知的, 问题在于要用表示压力 p 的状态方程来计算摩尔密度 ρ_m 。将定义压缩因子 Z 的方程(1)代入方程(3)(见 4.2), 获得压力的状态方程(B10):

$$p = \rho_m RT \left[1 + B \rho_m - \rho_m \sum_{n=13}^{18} C_n^* + \sum_{n=13}^{58} C_n^* (b_n - c_n k_n \rho_m^{k_n}) \rho_m^m \exp(-c_n \rho_m^{k_n}) \right] \dots\dots\dots (B10)$$

方程(B10)用标准状态方程密度检索法求解。由于已获得压力 p 的表达式[方程(B10)], 则求解摩尔密度 ρ_m 使计算出的压力与输入的压力两者的差值在预先设定的范围(如 1×10^{-6})以内。

对比密度 ρ_r 通过混合物体积参数 K 与摩尔密度 ρ_m 相关联[见 4.2 中方程(2)]。

混合物体积参数 K 由方程(B11)计算:

$$K^5 = \left[\sum_{i=1}^N x_i K_i^{5/2} \right]^2 + 2 \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N x_i x_j (K_{ij}^5 - 1) (K_i K_j)^{5/2} \dots\dots\dots (B11)$$

注 B4: 求和时, 下标 i 指的是气体混合物中第 i 个组分; 下标 j 指的是气体混合物中第 j 个组分; N 指的是混合物中的组分数。单重求和中, i 是 $1 \sim N$ 间的整数值。例如, 对含 12 个组分的混合物, $N=12$, 单重求和中将有 12 项; 二重求和中 i 从 $1 \sim N-1$ 变化, 而相对每一个 i 值, j 从 $i+1 \sim N$ 变化。例如, 对含 12 个组分的混合物, 如果 K_{ij} 的值都不为 1.0, 则二重求和将有 66 项。由于许多 K_{ij} 的值都为 1.0, 因此对许多天然气混合物, 二重求和中非零项的数目很少。除了表 B3 给出的 K_{ij} 外, 所有其他的 K_{ij} 的值都为 1.0。

B2.2.4 求出摩尔密度 ρ_m 后, 利用压力、温度、摩尔密度和摩尔气体常数计算压缩因子。

$$Z = p / (\rho_m RT) \dots\dots\dots (B12)$$

密度 ρ 可由方程(B13)计算:

$$\rho = M \rho_m \dots\dots\dots (B13)$$

式中, M 根据方程(B14)计算:

$$M = \sum_{i=1}^N x_i M_i \dots\dots\dots (B14)$$

密度值应保留至小数点后第三位。

表 B1 状态方程参数

n	a_n	b_n	c_n	k_n	u_n	g_n	q_n	f_n	s_n	w_n
1	0.153 832 600	1	0	0	0.0	0	0	0	0	0
2	1.341 953 000	1	0	0	0.5	0	0	0	0	0
3	-2.998 583 000	1	0	0	1.0	0	0	0	0	0
4	-0.048 312 280	1	0	0	3.5	0	0	0	0	0
5	0.375 796 500	1	0	0	-0.5	1	0	0	0	0
6	-1.589 575 000	1	0	0	4.5	1	0	0	0	0
7	-0.053 588 470	1	0	0	0.5	0	1	0	0	0

表 B1 (续)

n	a_n	b_n	c_n	k_n	u_n	g_n	q_n	f_n	s_n	w_n
8	0.886 594 630	1	0	0	7.5	0	0	0	1	0
9	-0.710 237 040	1	0	0	9.5	0	0	0	1	0
10	-1.471 722 000	1	0	0	6.0	0	0	0	0	1
11	1.321 850 350	1	0	0	12.0	0	0	0	0	1
12	-0.786 659 250	1	0	0	12.5	0	0	0	0	1
13	$2.291\ 290 \times 10^{-9}$	1	1	3	-6.0	0	0	1	0	0
14	0.157 672 400	1	1	2	2.0	0	0	0	0	0
15	-0.436 386 400	1	1	2	3.0	0	0	0	0	0
16	-0.044 081 590	1	1	2	2.0	0	1	0	0	0
17	-0.003 433 888	1	1	4	2.0	0	0	0	0	0
18	0.032 059 050	1	1	4	11.0	0	0	0	0	0
19	0.024 873 550	2	0	0	-0.5	0	0	0	0	0
20	0.073 322 790	2	0	0	0.5	0	0	0	0	0
21	-0.001 600 573	2	1	2	0.0	0	0	0	0	0
22	0.642 470 600	2	1	2	4.0	0	0	0	0	0
23	-0.416 260 100	2	1	2	6.0	0	0	0	0	0
24	-0.066 899 570	2	1	4	21.0	0	0	0	0	0
25	0.279 179 500	2	1	4	23.0	1	0	0	0	0
26	-0.696 605 100	2	1	4	22.0	0	1	0	0	0
27	-0.002 860 589	2	1	4	-1.0	0	0	1	0	0
28	-0.008 098 836	3	0	0	-0.5	0	1	0	0	0
29	3.150 547 000	3	1	1	7.0	1	0	0	0	0
30	0.007 224 479	3	1	1	-1.0	0	0	1	0	0
31	-0.705 752 900	3	1	2	6.0	0	0	0	0	0
32	0.534 979 200	3	1	2	4.0	1	0	0	0	0
33	-0.079 314 910	3	1	3	1.0	1	0	0	0	0
34	-1.418 465 000	3	1	3	9.0	1	0	0	0	0
35	$-5.999\ 05 \times 10^{-17}$	3	1	4	-13.0	0	0	1	0	0
36	0.105 840 200	3	1	4	21.0	0	0	0	0	0
37	0.034 317 290	3	1	4	8.0	0	1	0	0	0
38	-0.007 022 847	4	0	0	-0.5	0	0	0	0	0
39	0.024 955 870	4	0	0	0.0	0	0	0	0	0
40	0.042 968 180	4	1	2	2.0	0	0	0	0	0
41	0.746 545 300	4	1	2	7.0	0	0	0	0	0
42	-0.291 961 300	4	1	2	9.0	0	1	0	0	0

表 B1 (完)

n	a_n	b_n	c_n	k_n	u_n	g_n	q_n	f_n	s_n	w_n
43	7.294 616 000	4	1	4	22.0	0	0	0	0	0
44	-9.936 757 000	4	1	4	23.0	0	0	0	0	0
45	-0.005 399 808	5	0	0	1.0	0	0	0	0	0
46	-0.243 256 700	5	1	2	9.0	0	0	0	0	0
47	0.049 870 160	5	1	2	3.0	0	1	0	0	0
48	0.003 733 797	5	1	4	8.0	0	0	0	0	0
49	1.874 951 000	5	1	4	23.0	0	1	0	0	0
50	0.002 168 144	6	0	0	1.5	0	0	0	0	0
51	-0.658 716 400	6	1	2	5.0	1	0	0	0	0
52	0.000 205 518	7	0	0	-0.5	0	1	0	0	0
53	0.009 776 195	7	1	2	4.0	0	0	0	0	0
54	-0.020 487 080	8	1	1	7.0	1	0	0	0	0
55	0.015 573 220	8	1	2	3.0	0	0	0	0	0
56	0.006 862 415	8	1	2	0.0	1	0	0	0	0
57	-0.001 226 752	9	1	2	1.0	0	0	0	0	0
58	0.002 850 908	9	1	2	0.0	0	1	0	0	0

表 B2 特征参数

识别号	化合物	摩尔质量 M_i $\text{kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$	能量参数 E_i K	体积参数 K_i $(\text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1})^{1/3}$	定位参数 G_i	四极参数 Q_i	高温参数 F_i	偶极参数 S_i	组合参数 W_i
1	CH ₄	16.043 0	151.318 300	0.461 925 5	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
2	N ₂	28.013 5	99.737 780	0.447 915 3	0.027 815	0.0	0.0	0.0	0.0
3	CO ₂	44.010 0	241.960 600	0.455 748 9	0.189 065	0.690 000	0.0	0.0	0.0
4	C ₂ H ₆	30.070 0	244.166 700	0.527 920 9	0.079 300	0.0	0.0	0.0	0.0
5	C ₃ H ₈	44.097 0	298.118 300	0.583 749 0	0.141 239	0.0	0.0	0.0	0.0
6	H ₂ O	18.015 3	514.015 600	0.382 586 8	0.332 500	1.067 750	0.0	1.582 200	1.0
7	H ₂ S	34.082 0	296.355 000	0.461 826 3	0.088 500	0.633 276	0.0	0.390 000	0.0
8	H ₂	2.015 9	26.957 940	0.351 491 6	0.034 369	0.0	1.0	0.0	0.0
9	CO	28.010 0	105.534 800	0.453 389 4	0.038 953	0.0	0.0	0.0	0.0
10	O ₂	31.998 8	122.766 700	0.418 695 4	0.021 000	0.0	0.0	0.0	0.0
11	<i>i</i> -C ₄ H ₁₀	58.123 0	324.068 900	0.640 693 7	0.256 692	0.0	0.0	0.0	0.0
12	<i>n</i> -C ₄ H ₁₀	58.123 0	337.638 900	0.634 142 3	0.281 835	0.0	0.0	0.0	0.0
13	<i>i</i> -C ₅ H ₁₂	72.150 0	365.599 900	0.673 857 7	0.332 267	0.0	0.0	0.0	0.0
14	<i>n</i> -C ₅ H ₁₂	72.150 0	370.682 300	0.679 830 7	0.366 911	0.0	0.0	0.0	0.0
15	<i>n</i> -C ₆ H ₁₄	86.177 0	402.636 293	0.717 511 8	0.289 731	0.0	0.0	0.0	0.0

表 B2 (完)

识别号	化合物	摩尔质量 M_i $\text{kg} \cdot \text{kmol}^{-1}$	能量参数 E_i K	体积参数 K_i $(\text{m}^3 \cdot \text{kmol}^{-1})^{1/3}$	定位参数 G_i	四极参数 Q_i	高温参数 F_i	偶极参数 S_i	组合参数 W_i
16	$n\text{-C}_7\text{H}_{16}$	100.204 0	427.722 630	0.752 518 9	0.337 542	0.0	0.0	0.0	0.0
17	$n\text{-C}_8\text{H}_{18}$	114.231 0	450.325 022	0.784 955 0	0.383 381	0.0	0.0	0.0	0.0
18	$n\text{-C}_9\text{H}_{20}$	128.258 0	470.840 891	0.815 273 1	0.427 354	0.0	0.0	0.0	0.0
19	$n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$	142.285 0	489.558 373	0.843 782 6	0.469 659	0.0	0.0	0.0	0.0
20	He	4.002 6	2.610 111	0.358 988 8	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
21	Ar	39.948 0	119.629 900	0.421 655 1	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

表 B3 二元交互作用参数值

识别号		化合物对		E_{ij}^*	U_{ij}	K_{ij}	G_{ij}^*
i	j						
1	2	CH ₄ +	N ₂	0.971 640	0.886 106	1.003 630	
	3		CO ₂	0.960 644	0.963 827	0.995 933	0.807 653
	4		C ₂ H ₆				
	5		C ₃ H ₈	0.994 635	0.990 877	1.007 619	
	6		H ₂ O	0.708 218			
	7		H ₂ S	0.931 484	0.736 833	1.000 080	
	8		H ₂	1.170 520	1.156 390	1.023 260	1.957 310
	9		CO	0.990 126			
	10		O ₂				
	11		$i\text{-C}_4\text{H}_{10}$	1.019 530			
	12		$n\text{-C}_4\text{H}_{10}$	0.989 844	0.992 291	0.997 596	
	13		$i\text{-C}_5\text{H}_{12}$	1.002 350			
	14		$n\text{-C}_5\text{H}_{12}$	0.999 268	1.003 670	1.002 529	
	15		$n\text{-C}_6\text{H}_{14}$	1.107 274	1.302 576	0.982 962	
	16		$n\text{-C}_7\text{H}_{16}$	0.880 880	1.191 904	0.983 565	
	17		$n\text{-C}_8\text{H}_{18}$	0.880 973	1.205 769	0.982 707	
	18		$n\text{-C}_9\text{H}_{20}$	0.881 067	1.219 634	0.981 849	
	19		$n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$	0.881 161	1.233 498	0.980 991	
2	3	N ₂ +	CO ₂	1.022 740	0.835 058	0.982 361	0.982 746
	4		C ₂ H ₆	0.970 120	0.816 431	1.007 960	
	5		C ₃ H ₈	0.945 939	0.915 502		
	6		H ₂ O	0.746 954			
	7		H ₂ S	0.902 271	0.993 476	0.942 596	
	8		H ₂	1.086 320	0.408 838	1.032 270	