

Национальный стандарт РФ ГОСТ Р 8.974-2019 "Государственная система обеспечения единства измерений. Газовый анализ. Пересчет данных состава газовых смесей" (утв. и введен в действие приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 30 октября 2019 г. N 1062-ст)

State system for ensuring the uniformity of measurements. Gas analysis. Conversion of gas mixture composition data

ОКС 17.020

Дата введения - 1 сентября 2020 г.
Введен впервые

Предисловие

1 Разработан Федеральным государственным унитарным предприятием "Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии им. Д.И. Менделеева" (ФГУП "ВНИИМ им. Д.И. Менделеева")

2 Внесен Техническим комитетом по стандартизации ТК 206 "Эталоны и поверочные схемы", подкомитетом ПК 206.5 "Эталоны и поверочные схемы в области измерения физико-химического состава и свойств веществ"

3 Утвержден и введен в действие Приказом Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии от 30 октября 2019 г. N 1062-ст

4 Введен впервые

1 Область применения

Настоящий стандарт распространяется на газовые смеси (далее - смеси) и устанавливает методику взаимного пересчета значений молярной доли, объемной доли, массовой доли и массовой концентрации компонентов.

2 Нормативные ссылки

В настоящем стандарте использована нормативная ссылка на следующий стандарт:

ГОСТ 34100.3/ISO/IEC Guide 98-3 Неопределенность измерения. Часть 3. Руководство по выражению неопределенности измерения

Примечание - При пользовании настоящим стандартом целесообразно проверить действие ссылочных стандартов в информационной системе общего пользования - на официальном сайте Федерального агентства по техническому регулированию и метрологии в сети Интернет или по ежегодному информационному указателю "Национальные стандарты", который опубликован по состоянию на 1 января текущего года, и по выпускам ежемесячного информационного указателя "Национальные стандарты" за текущий год. Если заменен ссылочный стандарт, на который дана недатированная ссылка, то рекомендуется использовать действующую версию этого стандарта с учетом всех внесенных в данную версию изменений. Если заменен ссылочный стандарт, на который дана датированная ссылка, то рекомендуется использовать версию этого стандарта с указанным выше годом утверждения (принятия). Если после утверждения настоящего стандарта в ссылочный стандарт, на который дана датированная ссылка, внесено изменение, затрагивающее положение, на которое дана ссылка, то это положение рекомендуется применять без учета данного изменения. Если ссылочный стандарт отменен без замены, то положение, в котором дана ссылка на него, рекомендуется применять в части, не затрагивающей эту ссылку.

3 Термины, определения и обозначения

3.1 В настоящем стандарте применены следующие термины с соответствующими определениями:

3.1.1 газовая смесь: Смесь чистых веществ, не вступающих друг с другом в химическую реакцию, находящаяся в газообразном состоянии.

3.1.2 компонент: Чистое вещество в составе смеси.

3.1.3 параметры состояния: Физические величины (давление и температура), характеризующие равновесное состояние газовой смеси.

3.1.4 молярная доля: Отношение количества вещества компонента к количеству вещества смеси.

3.1.5 объемная доля: Отношение объема компонента к объему многокомпонентной смеси.

Примечание - Значение объемной доли зависит от давления и температуры смеси.

3.1.6 массовая доля: Отношение массы компонента к массе смеси.

3.1.7 массовая концентрация: Отношение массы компонента к объему смеси.

Примечание - Значение массовой концентрации зависит от давления и температуры смеси.

3.1.8 коэффициент сжимаемости: Отношение объема произвольного количества компонента или смеси при определенных значениях давления и температуры к объему того же количества компонента или смеси при тех же самых значениях давления и температуры, вычисленному по уравнению закона идеального газа.

3.1.9 коэффициент смешения: Отношение объема произвольного количества смеси при определенных значениях давления и температуры к сумме объемов всех компонентов смеси до смешения при тех же самых значениях давления и температуры.

3.1.10 вириальные коэффициенты: Коэффициенты, полученные путем разложения в ряд коэффициента сжимаемости в виде степеней параметра состояния.

3.2 В настоящем стандарте использованы следующие обозначения:

P - давление, Па;

T - температура, К;

x_i - молярная доля i-го компонента;

v_i - объемная доля i-го компонента;

w_i - массовая доля i-го компонента;

ρ_i - массовая концентрация i-го компонента, кг/м³;

Z_i - коэффициент сжимаемости i-го компонента;

Z_S - коэффициент сжимаемости смеси;

R - универсальная газовая постоянная ($R = 8,3144598 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}$), $\text{Дж/(моль} \cdot \text{К)}$;

f_S - коэффициент смешения смеси;

M_i - молярная масса i-го компонента, кг/моль;

M_N - молярная масса газа-разбавителя, кг/моль;

M_S - молярная масса смеси, кг/моль;

ω - фактор ацентричности;

$V(T)$ - второй молярно-объемный коэффициент, м³/моль;

$T_{\text{крит}}$ - критическая температура, К;

T_r - приведенная температура, К;

$P_{\text{крит}}$ - критическое давление, Па.

4 Методы пересчета

4.1 Пересчет между значениями величин

Пересчет значения одной величины в значение другой величины осуществляется при определенных параметрах состояния рассматриваемой смеси.

При известном содержании только определяемого i-го компонента в смеси пересчет значений искомых величин осуществляют путем умножения значений исходных величин на коэффициенты пересчета, указанные в таблице 1.

Таблица 1 - Коэффициенты пересчета значений величин при известном содержании только определяемого компонента смеси

Значение исходной величины	Значение искомой величины			
	x_i	φ_i	w_i	p_i
x_i	1	$\frac{f_S \cdot Z_i}{Z_S}$	$\frac{M_i}{M_S}$	$\frac{\alpha \cdot M_i}{Z_S}$
φ_i	$\frac{Z_S}{f_S \cdot Z_i}$	1	$\frac{Z_S \cdot M_i}{f_S \cdot M_S \cdot Z_i}$	$\frac{\alpha \cdot M_i}{f_S \cdot Z_i}$
w_i	$\frac{M_S}{M_i}$	$\frac{f_S \cdot M_S \cdot Z_i}{Z_S \cdot M_i}$	1	$\frac{\alpha \cdot M_S}{Z_S}$
p_i	$\frac{Z_S}{\alpha \cdot M_i}$	$\frac{f_S \cdot Z_i}{\alpha \cdot M_i}$	$\frac{Z_S}{\alpha \cdot M_S}$	1
$\alpha = \frac{P}{R \cdot T}$				

Примечание -

При известном содержании всех компонентов рассматриваемой смеси (количество компонентов $k = 1, \dots, N$) коэффициенты пересчета значений величин из таблицы 1 преобразуются в коэффициенты пересчета, указанные в таблице 2.

Таблица 2 - Коэффициенты пересчета значений величин при известном содержании всех компонентов смеси

Значение исходной величины	Значение искомой величины			
	x_i	φ_i	w_i	p_i
x_i	1	$\frac{Z_i}{\sum_{k=1}^N x_k \cdot Z_k}$	$\frac{M_i}{\sum_{k=1}^N x_k \cdot M_k}$	$\frac{\alpha \cdot M_i}{f_S \cdot \sum_{k=1}^N x_k \cdot Z_k}$
φ_i	$\frac{1}{Z_i \cdot \sum_{k=1}^N \frac{\varphi_k}{Z_k}}$	1	$\frac{M_i}{Z_i \cdot \sum_{k=1}^N \frac{\varphi_k \cdot M_k}{Z_k}}$	$\frac{\alpha \cdot M_i}{f_S \cdot Z_i}$
w_i	$\frac{1}{M_i \cdot \sum_{k=1}^N \frac{w_k}{M_k}}$	$\frac{Z_i}{M_i \cdot \sum_{k=1}^N \frac{w_k \cdot Z_k}{M_k}}$	1	$\frac{\alpha}{f_S \cdot \sum_{k=1}^N \frac{w_k \cdot Z_k}{M_k}}$

Примечание - При выполнении расчетов используют формулы:

$$M_S = \sum_{k=1}^N x_k \cdot M_k$$

$$\frac{f_S}{Z_S} = \sum_{k=1}^N \frac{\varphi_k}{Z_k}$$

$$\frac{1}{M_S} = \sum_{k=1}^N \frac{w_k}{M_k}$$

$$\frac{f_S \cdot M_S}{Z_S} = \sum_{k=1}^N \frac{\varphi_k \cdot M_k}{Z_k}$$

$$\frac{Z_S}{f_S} = \sum_{k=1}^N x_k \cdot Z_k$$

$$\frac{Z_S}{f_S \cdot M_S} = \sum_{k=1}^N \frac{w_k \cdot Z_k}{M_k}$$

4.2 Пересчет значения величины при различных параметрах состояния

Пересчет значения объемной доли при исходных параметрах состояния (P, T) к значению объемной доли при заданных параметрах состояния (P_{зад}, T_{зад}) осуществляют по формуле

$$\varphi_i(P_{\text{зад}}, T_{\text{зад}}) = \frac{f_S(P_{\text{зад}}, T_{\text{зад}}) \cdot Z_S(P, T) \cdot Z_i(P_{\text{зад}}, T_{\text{зад}})}{f_S(P, T) \cdot Z_S(P_{\text{зад}}, T_{\text{зад}}) \cdot Z_i(P, T)} \cdot \varphi_i(P, T)$$

(1)

где $\varphi_i(P, T)$ - значение объемной доли при исходных значениях давления и температуры;

$\varphi_i(P_{\text{зад}}, T_{\text{зад}})$ - значение объемной доли при заданных значениях давления и температуры.

Пересчет значения массовой концентрации при исходных параметрах состояния (P, T) к значению массовой концентрации при заданных параметрах состояния (P_{зад}, T_{зад}) осуществляют по формуле

$$\rho_i(P_{\text{зад}}, T_{\text{зад}}) = \frac{P_{\text{зад}} \cdot T \cdot Z_S(P, T)}{P \cdot T_{\text{зад}} \cdot Z_S(P_{\text{зад}}, T_{\text{зад}})} \cdot \rho_i(P, T)$$

(2)

где $\rho_i(P, T)$ - значение массовой концентрации компонента при исходных значениях давления и температуры;

P_i ($P_{зад}$, $T_{зад}$) - значение массовой концентрации при заданных значениях давления и температуры.

5 Вычисление коэффициентов сжимаемости

5.1 Для вычисления коэффициента сжимаемости компонента используется усеченное вириальное уравнение

$$Z(P, T) = 1 + \frac{B(T) \cdot P}{R \cdot T}$$

(3)

где $Z(P, T)$ - коэффициент сжимаемости при давлении P и температуре T ;

$B(T)$ - второй молярно-объемный вириальный коэффициент при температуре T .

Второй молярно-объемный вириальный коэффициент вычисляют по уравнению Ветере

$$B(T) = \frac{\left(g^{(0)} + \omega \cdot g^{(1)} + \omega_p \cdot g^{(2)} \right) \cdot R \cdot T_{крит}}{P_{крит}}$$

(4)

где

$$g^{(0)} = 0,1445 - \frac{0,330}{T_r} - \frac{0,1385}{T_r^2} - \frac{0,0121}{T_r^3}$$

(5)

$$g^{(1)} = 0,073 + \frac{0,46}{T_r} - \frac{0,50}{T_r^2} - \frac{0,097}{T_r^3} - \frac{0,0073}{T_r^8}$$

(6)

$$g^{(2)} = 0,1042 - \frac{0,2717}{T_r} + \frac{0,2388}{T_r^2} - \frac{0,0716}{T_r^3} + \frac{1,502 \cdot 10^{-4}}{T_r^8}$$

(7)

$$T_r = \frac{T}{T_{крит}}$$

(8)

$$\omega_p = \frac{T_{кип}^{1,72}}{M_i} - 263$$

(9)

Примечание - Если значение коэффициента α_p получается отрицательным, его следует принимать равным нулю.

Коэффициенты сжимаемости ряда веществ, рассчитанные в соответствии с усеченным вириальным уравнением (3) при $P = 101325$ Па и $T = 293,15$ К, приведены в приложении А.

Коэффициент сжимаемости смеси вычисляют из молярных долей компонентов и коэффициентов сжимаемости компонентов в соответствии с уравнением

$$Z_S = f_S \cdot \sum_{i=1}^N x_i \cdot Z_i$$

(10)

где коэффициент смешения смеси f_S принимается равным единице, следовательно, уравнение (10) сокращается до эквивалента закона Амагата

$$Z_S = \sum_{i=1}^N x_i \cdot Z_i$$

(11)

6 Оценка неопределенности пересчета значений величин

В случае выполнения пересчета между значениями величин согласно 4.1 в бюджете неопределенности по ГОСТ 34100.3 следует учитывать следующие составляющие, связанные с выполнением данного пересчета:

$u(M_S)$ - стандартная неопределенность молярной массы смеси;

$u(Z_i)$ - стандартная неопределенность коэффициента сжимаемости компонента;

$u(Z_S)$ - стандартная неопределенность коэффициента сжимаемости смеси;

$u(f_S)$ - стандартная неопределенность аппроксимации единицей коэффициента смешения;

$u(M_i)$ - стандартная неопределенность молярных масс компонентов;

$u(R)$ - стандартная неопределенность универсальной газовой постоянной.

Для приближенной оценки данных составляющих руководствуются следующими формулами:

$$u(M_S) = \sqrt{\sum_{i=1}^{N-1} (M_i - M_N)^2 \cdot u^2(x_i)}$$

(12)

$$u(Z_i) = \frac{|1 - Z_i|}{\sqrt{3}}$$

(13)

$$u(Z_S) = \frac{|1 - Z_S|}{\sqrt{3}}$$

(14)

где $u(x_i)$ - стандартная неопределенность молярной доли компонента.

В приближенной оценке не учитывают, считая незначимыми, неопределенности $u(f_g)$, $u(M_i)$ и $u(R)$.

Приложение А
(справочное)

Коэффициенты сжимаемости веществ

Таблица А.1 - Коэффициенты сжимаемости веществ

Вещество	Формула	M_i , г/моль	$T_{кип}$, К	$T_{крит}$, К	$P_{крит}$, Па	ω	Z_i
Аргон	Ar	39,9481	87,28	150,86	48,98 · 10 ⁵	0	0,9993
Арсин	AsH ₃	77,9455	210,67	373	65,5 · 10 ⁵	0,0105	0,9896
Трихлорид бора	BCl ₃	117,1680	285,65	451,95	38,71 · 10 ⁵	0,1505	0,9642
Тетрафторэтилен	C ₂ F ₄	100,0148	197,51	306,45	39,44 · 10 ⁵	0,227	0,9895
Гексафторэтан	C ₂ F ₆	138,0116	194,95	292,8	29,8 · 10 ⁵	0,249	0,9880
Ацетилен	C ₂ H ₂	26,0372	189,35	308,3	61,38 · 10 ⁵	0,191	0,9927
1,1-Дифторэтилен	C ₂ H ₂ F ₂	64,0340	187,5	302,8	44,6 · 10 ⁵	0,136	0,9913
Винилхлорид	C ₂ H ₃ Cl	62,4966	259,25	432	56,7 · 10 ⁵	0,1	0,9799
1-Хлор-1,1-Дифторэтан	C ₂ H ₃ ClF ₂	100,4934	263,95	410,29	40,41 · 10 ⁵	0,231	0,9730
Винилфторид	C ₂ H ₃ F	46,0435	200,95	327,8	52,4 · 10 ⁵	0,143	0,9904
1,1,1-Трифторэтан	C ₂ H ₃ F ₃	84,0403	225,81	345,88	37,64 · 10 ⁵	0,261	0,9833
Этилен	C ₂ H ₄	28,0531	169,47	282,34	50,41 · 10 ⁵	0,086	0,9939
1,1-Дифторэтан	C ₂ H ₄ F ₂	66,0499	249,13	386,44	45,2 · 10 ⁵	0,275	0,9796
Оксид этилена	C ₂ H ₄ O	44,0525	283,6	469,15	71,9 · 10 ⁵	0,197	0,9617
Хлорэтан	C ₂ H ₅ Cl	64,5126	285,42	460,35	52,7 · 10 ⁵	0,19	0,9708
Фторэтан	C ₂ H ₅ F	48,0595	235,45	375,31	50,28 · 10 ⁵	0,22	0,9840
Этан	C ₂ H ₆	30,0691	184,55	305,32	48,72 · 10 ⁵	0,1	0,9919
Диметиловый эфир	C ₂ H ₆ O	46,0685	248,31	400,1	53,7 · 10 ⁵	0,2	0,9806
Диметиламин	C ₂ H ₇ N	45,0839	280,03	437,2	53,4 · 10 ⁵	0,3	0,9630
1-Хлор-1,1,2,2-Тetraфторэтан	C ₂ HClF ₄	136,4743	261,41	400	37,6 · 10 ⁵	0,274	0,9725
Гексафторпропилен	C ₃ F ₆	150,0222	243,55	368	29 · 10 ⁵	0,205	0,9742
Октафторпропан	C ₃ F ₈	188,0190	236,4	345,05	26,8 · 10 ⁵	0,327	0,9759
ПропADIен	C ₃ H ₄	40,0637	238,65	394	52,5 · 10 ⁵	0,104	0,9815
Метилацетилен	C ₃ H ₄	40,0637	249,94	402,4	56,3 · 10 ⁵	0,212	0,9785
Циклопропан	C ₃ H ₆	42,0797	240,37	397,91	54,95 · 10 ⁵	0,127	0,9819
Пропилен	C ₃ H ₆	42,0797	225,46	364,9	46 · 10 ⁵	0,141	0,9847
Пропан	C ₃ H ₈	44,0956	231,11	369,83	42,48 · 10 ⁵	0,152	0,9827
Триметиламин	C ₃ H ₉ N	59,1104	276,02	433,25	40,73 · 10 ⁵	0,209	0,9680
Гептафторпропан	C ₃ HF ₇	170,0286	256,79	374,83	29,12 · 10 ⁵	0,355	0,9700
Октафтор-2-бутен	C ₄ F ₈	200,0296	270,36	392	23,3 · 10 ⁵	0,292	0,9580
Октафторциклобутан	C ₄ F ₈	200,0296	267,17	388,37	27,78 · 10 ⁵	0,356	0,9643
н-Бутан	C ₄ H ₁₀	58,1222	272,65	425,12	37,96 · 10 ⁵	0,2	0,9682
2-метилпропан	C ₄ H ₁₀	58,1222	261,43	407,8	36,4 · 10 ⁵	0,184	0,9718
1,2-Бутадиен	C ₄ H ₆	54,0903	284	452	43,6 · 10 ⁵	0,166	0,9603
1,3-Бутадиен	C ₄ H ₆	54,0903	268,74	425,37	43,3 · 10 ⁵	0,193	0,9709
Этилацетилен	C ₄ H ₆	54,0903	281,22	443,2	49,5 · 10 ⁵	0,247	0,9661
1-Бутен	C ₄ H ₈	56,1062	266,9	419,59	40,2 · 10 ⁵	0,187	0,9716
Цис-2-бутен	C ₄ H ₈	56,1062	276,87	435,58	42,06 · 10 ⁵	0,203	0,9666
Транс-2-бутен	C ₄ H ₈	56,1062	274,03	428,63	41,02 · 10 ⁵	0,218	0,9679

Циклобутан	C ₄ H ₈	56,1062	285,66	459,93	49,8 · 10 ⁵	0,185	0,9634
2-метилпропен	C ₄ H ₈	56,1062	266,25	417,9	39,99 · 10 ⁵	0,189	0,9719
2,2-диметилпропан	C ₅ H ₁₂	72,1487	282,65	433,8	31,96 · 10 ⁵	0,196	0,9602
Бромхлордифторметан	CBRCIF ₂	165,3629	269,14	426,15	42,54 · 10 ⁵	0,187	0,9721
Бромтрифторметан	CBrF ₃	148,9098	215,26	340,15	39,7 · 10 ⁵	0,17	0,9856
Дихлордифторметан	CCl ₂ F ₂	120,9104	243,36	384,95	41,25 · 10 ⁵	0,18	0,9794
Хлортрифторметан	CClF ₃	104,4573	296,97	471,2	44,08 · 10 ⁵	0,189	0,9622
Тетрафторметан	CF ₄	88,0042	145,09	227,5	37,4 · 10 ⁵	0,179	0,9961
Хлорметан	CH ₃ Cl	50,4860	248,93	416,25	66,8 · 10 ⁵	0,153	0,9840
Фторметан	CH ₃ F	34,0329	194,82	317,42	58,75 · 10 ⁵	0,198	0,9921
Метан	CH ₄	16,0425	111,66	190,56	45,99 · 10 ⁵	0,012	0,9981
Метилмеркаптан	CH ₄ S	48,1100	279,11	469,95	72,3 · 10 ⁵	0,158	0,9682
Метиламин	CH ₅ N	31,0573	266,82	430,05	74,6 · 10 ⁵	0,281	0,9679
Дихлорфторметан	CHCl ₂ F	102,9200	282,05	451,58	51,84 · 10 ⁵	0,205	0,9717
Хлордифторметан	CHClF ₂	86,4669	232,32	369,3	49,71 · 10 ⁵	0,219	0,9846
Трифторметан	CHF ₃	70,0138	191,09	299,01	48,16 · 10 ⁵	0,264	0,9920
Хлор	Cl ₂	70,9030	239,12	417,15	77,11 · 10 ⁵	0,069	0,9871
Оксид углерода	CO	28,0100	81,7	132,92	34,99 · 10 ⁵	0,0663	0,9997
Диоксид углерода	CO ₂	44,0094	194,7	304,19	73,82 · 10 ⁵	0,2276	0,9945
Карбонилсульфид	COS	60,0775	223	378,8	63,49 · 10 ⁵	0,097	0,9880
Дейтерий	D ₂	2,0141	23,65	38,35	16,64 · 10 ⁵	-0,1449	1,0006
Фтор	F ₂	37,9968	84,95	144,12	51,72 · 10 ⁵	0,053	0,9996
Водород	H ₂	2,0160	20,39	33,18	13,13 · 10 ⁵	-0,215	1,0007
Сероводород	H ₂ S	34,0835	212,8	373,53	89,63 · 10 ⁵	0,0942	0,9912
Хлористый водород	HCl	36,4595	188,15	324,65	83,1 · 10 ⁵	0,1315	0,9942
Гелий	He	4,0026	4,22	5,2	2,28 · 10 ⁵	-0,39	1,0008
Криптон	Kr	83,7982	119,8	209,35	55,02 · 10 ⁵	0	0,9978
Азот	N ₂	28,0137	77,34	126,2	34,6 · 10 ⁵	0,0377	0,9998
Оксид диазота	N ₂ O	44,0131	184,67	309,57	72,45 · 10 ⁵	0,1408	0,9942
Неон	Ne	20,1798	27,09	44,4	26,53 · 10 ⁵	-0,0395	1,0005
Трифторид азота	NF ₃	71,0021	144,09	234	44,61 · 10 ⁵	0,12	0,9963
Аммиак	NH ₃	17,0308	239,72	405,65	112,8 · 10 ⁵	0,2526	0,9778
Оксид азота	NO	30,0063	121,38	180,15	64,8 · 10 ⁵	0,5829	0,9997
Кислород	O ₂	31,9988	90,19	154,58	50,43 · 10 ⁵	0,0222	0,9993
Фосфин	PH ₃	33,9977	185,41	324,75	65,4 · 10 ⁵	0,0452	0,9929
Гексафторид серы	SF ₆	146,0579	209,25	318,69	37,6 · 10 ⁵	0,2151	0,9875
Тетрафторид кремния	SiF ₄	104,0786	187,15	259	37,2 · 10 ⁵	0,3858	0,9938
Силан	SiH ₄	32,1169	161	269,7	48,4 · 10 ⁵	0,0938	0,9945
Диоксид серы	SO ₂	64,0663	263,13	430,75	78,84 · 10 ⁵	0,2453	0,9835
Ксенон	Xe	131,2936	165,03	289,74	58,4 · 10 ⁵	0	0,9944