

Berechnung von Realgasfaktoren und K-Zahlen mit der modifizierten SGERG-Gleichung SGERG-mod-H2

Technischer Bericht PK 1-5-3

Dr. Peter Schley, SmartSim GmbH

B.Sc. Tan-Trieu-Giang Nguyen, Ruhr-Universität Bochum

Prof. Dr. Roland Span, Ruhr-Universität Bochum

Dr. Andreas Hielscher, SmartSim GmbH

Gerhard Kleppek, GASCADE Gastransport GmbH

Dr. Jos van der Grinten, Physikalisch-Technische Bundesanstalt

Dr. Roland Schmidt, Physikalisch-Technische Bundesanstalt

Dr. Stefan M. Sarge, Physikalisch-Technische Bundesanstalt

Berechnung von Realgasfaktoren und K-Zahlen mit der modifizierten SGERG- Gleichung SGERG-mod-H2

**Bericht für die Redaktionsgruppe K-Zahl (G-AG-1-5-3-1) des
DVGW-Projektkreises Gasbeschaffenheit (PK 1-5-3)**

12. November 2021

(korrigiert am 19. Mai 2022)

Dr. Peter Schley, SmartSim GmbH

B.Sc. Tan-Trieu-Giang Nguyen, Ruhr-Universität Bochum

Prof. Dr. Roland Span, Ruhr-Universität Bochum

Dr. Andreas Hielscher, SmartSim GmbH

Gerhard Kleppek, GASCADE Gastransport GmbH

Dr. Jos van der Grinten, Physikalisch-Technische Bundesanstalt

Dr. Roland Schmidt, Physikalisch-Technische Bundesanstalt

Dr. Stefan M. Sarge, Physikalisch-Technische Bundesanstalt

Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

In dieser Arbeit wird die SGERG-88 Gleichung so modifiziert, dass eine Berechnung von Realgasfaktoren und Kompressibilitätszahlen von Erdgasen mit höheren Zumischungen von Wasserstoff möglich ist (Abschnitt 3.1). Dazu wird unter anderem die sogenannte „CO-Korrektur“ unterdrückt. Diese „modifizierte Version“ wird als SGERG-mod-H2 bezeichnet.

Die Zustandsgleichungen SGERG-88, SGERG-mod-H2, AGA8 und GERG-2008 werden in Kapitel 4 ausführlich mit experimentellen Realgasfaktoren von Gemischen mit Zumischungen von Wasserstoff verglichen. Außerdem erfolgt in Kapitel 5 ein Vergleich der verschiedenen Zustandsgleichungen für 5 verschiedene Erdgase mit Zumischungen von Wasserstoff von 0 bis 100 mol%.

Aus den Auswertungen lassen sich folgende Schlussfolgerungen ziehen:

Mit der SGERG-mod-H2 lassen sich Erdgasgemische mit Zumischungen von bis zu 100 mol% H₂ berechnen. Bis zu einem Druck von 50 bar betragen die Abweichungen zu den Messwerten sowie zur GERG-2008 Gleichung weniger als $\pm 0,1\%$. Für höhere Drücke bis 100 bar ist mit Abweichungen von bis zu $\pm 0,5\%$ zu rechnen. Auch wenn sich das Verfahren theoretisch bis 100 mol% Wasserstoff anwenden lässt, so kann es bei sehr hohen H₂-Konzentration bei bestimmten Kombinationen der Eingangsgrößen zu numerischen Problemen kommen. Aus diesem Grund wird empfohlen, den Anwendungsbereich im Teil 6 der G685 [1], auf 30 mol% Wasserstoff zu begrenzen.

Für die SGERG-88 Gleichung kann für H₂-Anteile ≤ 10 mol% und Drücken von bis zu 50 bar ebenfalls erwartet werden, dass eine Unsicherheit von 0,1% eingehalten werden kann.

Die AGA8 Gleichung und die GERG-2008 Gleichung stimmen für alle Datensätze im gesamten Druckbereich in der Regel besser als $\pm 0,1\%$ mit den gemessenen Werten überein. Es kann somit erwartet werden, dass diese Zustandsgleichungen für beliebige H₂-Anteile eingesetzt werden können, ohne dass die zugrunde gelegte Unsicherheit der Gleichungen von 0,1% hierdurch signifikant beeinflusst wird.

1	Inhalt	
2	Einleitung	1
3	Beschreibung der betrachteten Zustandsgleichungen	1
3.1	SGERG-88 und SGERG-mod-H2	2
3.2	AGA8.....	3
3.3	GERG-2008	3
4	Vergleich der Zustandsgleichungen mit Messwerten	4
4.1	Vergleich für Erdgase mit Zumischungen von Wasserstoff (hochgenaue Messwerte der Ruhr-Universität Bochum)	4
4.2	Vergleich für Erdgase mit Zumischungen von Wasserstoff (GERG-Datenbank TM7)	9
4.3	Vergleich für binäre Gemische Methan-Wasserstoff (GERG-Datenbank TM7).....	11
5	Vergleich der Zustandsgleichungen untereinander	13
	Symbolverzeichnis	18
	Literaturverzeichnis	19
	Anhang	21

2 Einleitung

Im DVGW laufen derzeit verschiedene Aktivitäten, um die Gasinfrastruktur und die Gasanwendungen auf höhere Wasserstoffanteile zu ertüchtigen. In diesem Zuge soll auch das technische Regelwerk des DVGWs im Hinblick auf mögliche Begrenzungen der H₂-Konzentration geprüft und ggf. angepasst werden. Dies betrifft u. a. auch das DVGW Arbeitsblatt G 685 [1], das im August 2020 überarbeitet wurde. Teil 6 der G 685 beschreibt die Bestimmung des Realgasfaktors und der Kompressibilitätszahl (K-Zahl), die für die Umwertung des gemessenen Volumens vom Betriebs- auf den Normzustand benötigt wird. Daher wurde vom DVGW Projektkreis PK 1-5-3 die „Redaktionsgruppe K-Zahl“ einberufen, um die Bestimmung der K-Zahl nach dem DVGW Arbeitsblatt G 685-6 im Hinblick auf die Berücksichtigung von Wasserstoff zu überarbeiten.

Vor diesem Hintergrund werden in der vorliegenden Arbeit die in dem o. g. Arbeitsblatt festgelegten Zustandsgleichungen SGERG-88 [2] und AGA8 [3] ausführlich auf die Eignung zur Beschreibung von wasserstoffhaltigen Gasgemischen untersucht. Die SGERG-88 Gleichung, bei der eine Limitierung in Bezug auf die H₂-Konzentration im Vorfeld bekannt war, wird hierbei so modifiziert, dass eine Berechnung von Gemischen mit Wasserstoffkonzentrationen von bis zu 100% möglich ist. Diese „modifizierte Version“ wird im Folgenden als SGERG-mod-H2 bezeichnet. Die Modifikationen werden in Abschnitt 3.1 erläutert.

Die Validierung der Zustandsgleichungen erfolgt anhand von experimentellen Literaturwerten. Zusätzlich wird für den Vergleich die GERG-2008 Gleichung [4] mit herangezogen. Die Untersuchung bezieht sich auf Wasserstoffanteile von 0 bis 100 mol%, wobei für H₂-Anteile > 30 mol% in der Literatur lediglich experimentelle Daten von binären CH₄/H₂-Gemischen verfügbar sind.

3 Beschreibung der betrachteten Zustandsgleichungen

In Deutschland werden heute im Wesentlichen zwei Zustandsgleichungen für die Volumenumwertung eingesetzt, deren Verwendung im DVGW-Arbeitsblatt G685-6 [1] beschrieben wird.

Die SGERG-88 Gleichung (s. Abschnitt 3.1), in die zur Charakterisierung der Gasbeschaffenheit die Gasbeschaffenheitswerte Brennwert, Dichte im Normzustand (kurz: Normdichte), CO₂-Anteil und H₂-Anteil eingehen, kommt vor allem in regionalen Verteilnetzen zum Einsatz, bei denen die Drücke meistens < 50 bar – in der Regel sogar < 25 bar betragen.

Die AGA8 Gleichung (s. Abschnitt 3.2) benötigt als Eingangsinformation zur Beschreibung der Gasbeschaffenheit eine vollständige Gasanalyse (z. B. 12 Komponenten). Da diese Information in den Verteilnetzen häufig nicht verfügbar ist, beschränkt sich der Einsatz der AGA8 Gleichung heute vorwiegend auf die Transportnetze.

Neben den zuvor genannten Gleichungen wird in diesem Kapitel noch die GERG-2008 Gleichung beschrieben, die ebenfalls eine vollständige Gasanalyse als Eingangsinformation erfordert. Die GERG-2008 Gleichung zeichnet sich durch einen sehr weiten Anwendungsbereich

bzgl. der verschiedenen Gasbestandteile aus und dient für die in den Kapiteln 4 und 5 dargestellten Vergleiche als zusätzliche Referenz.

3.1 SGERG-88 und SGERG-mod-H2

Die SGERG-88 Gleichung wurde von Jaeschke et al. [5] für die Berechnung von Realgasfaktoren und Kompressibilitätszahlen von Erdgasen entwickelt und ist 1997 als internationaler Standard ISO 12213-3 genormt worden [2]. In der ISO-Norm wird die Anwendung auf die Zusammensetzung von „Pipeline Quality Gas“ eingeschränkt, wobei für den H₂-Anteil eine Grenze von 10 mol% definiert wird. Außerdem wird die relative Dichte auf den Bereich $0,55 \leq d \leq 0,80$ eingeschränkt; dies entspricht einem Bereich von $0,711 \text{ kg/m}^3 \leq \rho_n \leq 1,034 \text{ kg/m}^3$ bezogen auf die Normdichte. Aus der unteren Grenze der relativen Dichte bzw. der Normdichte ergibt sich für manche Erdgase ein maximaler H₂-Anteil von ca. 5 mol%. Die in der ISO-Norm definierten Grenzen richten sich nach dem beim Transport von Erdgasen zu erwartendem Anwendungsbereich, wobei zum damaligen Zeitpunkt das Thema „Einspeisung von regenerativ erzeugtem Wasserstoff“ sicherlich nicht berücksichtigt wurde. Die Grenzen der ISO-Norm wurden in dem DVGW-Arbeitsblatt G685-5 [1] übernommen.

Darüber hinaus werden in Anhang B.5 der ISO 12213-3 durch die Gleichungen B.43 ($d > 0,55 + 0,97 \cdot x_{\text{CO}_2} - 0,45 \cdot x_{\text{H}_2}$) und B.46 ($d > 0,55 + 0,4 \cdot x_{\text{N}_2} + 0,97 \cdot x_{\text{CO}_2} - 0,45 \cdot x_{\text{H}_2}$) Konsistenzprüfungen beschrieben, die ebenfalls eine Begrenzung des maximalen H₂-Anteils zur Folge haben.

Eine weitere Beeinflussung der Berechnung in Abhängigkeit des Wasserstoffanteils stellt die sogenannte „Kohlenmonoxid-Korrektur“ (CO-Korrektur) dar. Hierbei wird unterstellt, dass bei Anwesenheit von Wasserstoff auch Kohlenmonoxid in einem festen Verhältnis von 0,0964 bezogen auf den Wasserstoffanteil in dem Gemisch vorliegt. Dies wird durch Gleichung B.2 ($x_{\text{CO}} = 0,0964 \cdot x_{\text{H}_2}$) in Anhang B des ISO Dokumentes ausgedrückt. Der CO-Anteil geht dann mit den entsprechenden Virialkoeffizienten von CO in die Berechnung ein. Der beschriebenen Korrektur liegt die Annahme zugrunde, dass der vorhandene Wasserstoff durch die Erzeugung von Kokereigas entsteht, wobei unterstellt wird, dass bei dem Entstehungsprozess eine Menge an Kohlenmonoxid in dem zuvor genannten Verhältnis anfällt. Bei der Einspeisung von reinem Wasserstoff, z. B. durch die Erzeugung mittels Elektrolyse, ist diese Korrektur natürlich nicht sinnvoll und lässt eine Verschlechterung der Berechnungsergebnisse erwarten. Die Einspeisung von Kokereigas in Gasnetze kommt heute praktisch nicht mehr vor, weshalb auf die CO-Korrektur verzichtet werden kann.

Um die Berechnung von Realgasfaktoren und K-Zahlen auf Basis der SGERG-Gleichung auch bei höheren H₂-Anteilen zu ermöglichen, wurde der bestehende Algorithmus im Rahmen dieser Arbeit so modifiziert, dass die zuvor beschriebenen Beschränkungen aufgehoben wurden. Demzufolge wurden die genannten Abfragen des Anwendungsbereichs, die Konsistenzprüfungen und die Kohlenmonoxid-Korrektur unterdrückt. Die Änderungen wurden in dem originären Fortran-Code durchgeführt, der in Anhang G der ISO 12213-3 veröffentlicht ist (s. Anlage E). Zur Ausführung der Berechnungen wird die Software GasCalc (www.GasCalc.de) verwendet. Die so modifizierte SGERG-Gleichung wird im Folgenden als **SGERG-mod-H2** bezeichnet.

3.2 AGA8

Die AGA8-DC92 Gleichung – im Folgenden vereinfacht als AGA8 Gleichung bezeichnet – wurde von Starling *et al.* ([6] [7]) für die Berechnung von Erdgas und erdgasähnlichen Gemischen in der Gasphase entwickelt und ist als ISO-Standard ISO 12213-2 [3] genormt. Neben der SGERG-88 Gleichung wurde diese Gleichung ebenfalls in das DVGW-Arbeitsblatt G685-6 [1] aufgenommen. Die AGA8 Gleichung [3] umfasst zur Charakterisierung der Gaszusammensetzung die 21 Erdgaskomponenten Methan, Stickstoff, Kohlenstoffdioxid, Ethan, Propan, *n*-Butan, Isobutan, *n*-Pentan, Isopentan, *n*-Hexan, *n*-Heptan, *n*-Oktan, *n*-Nonan, *n*-Dekan, Wasserstoff, Sauerstoff, Kohlenstoffmonoxid, Wasser, Schwefelwasserstoff, Helium und Argon. In der ISO-Norm wird analog wie im Falle der SGERG-88 der Wasserstoffanteil auf 10 mol% begrenzt; entsprechend der Spezifikation von „Pipeline Quality Gas“ (s. Abschnitt 3.1).

Für die Untersuchungen dieser Arbeit konnte die AGA8 Gleichung für H₂-Anteile im Bereich von 0-100% angewendet werden, indem die Abfrage des Anwendungsbereichs unterdrückt wurde. Die Berechnungen wurden mit der Software GasCalc (www.GasCalc.de) durchgeführt.

3.3 GERG-2008

Die GERG-2008 Gleichung wurde ursprünglich unter der Bezeichnung GERG2004 von Kunz *et al.* [8] im Jahr 2007 veröffentlicht. Die Zustandsgleichung wurde erweitert und 2012 als GERG-2008 von Kunz und Wagner [4] veröffentlicht. 2015 wurde die Gleichung als internationaler Standard ISO 20765 genormt [9].

Die GERG-2008 Gleichung [4] wurde basierend auf einer Datenbank mit mehr als 125.000 experimentellen Daten für verschiedene thermodynamische Eigenschaften in verschiedenen Zustandsbereichen entwickelt. Die experimentellen Daten umfassen Reinstoffe, Binärgemische sowie ein breites Spektrum an Mehrkomponentengemischen. Die Zustandsgleichung umfasst dieselben 21 Erdgaskomponenten wie die AGA8 Gleichung (s. Abschnitt 3.2). Die GERG-2008 Gleichung ist in einem großen Temperatur- und Druckbereich gültig und umfasst die Gas- und Flüssigphase, den überkritischen Bereich sowie Gas-Flüssig-Gleichgewichtszustände. Im Rahmen dieser Arbeit dient die GERG-2008 Gleichung vor allem als Referenz für die Vergleiche mit der SGERG-88, der SGERG-mod-H2 sowie der AGA8 Gleichung.

4 Vergleich der Zustandsgleichungen mit Messwerten

Die in Kapitel 3 beschriebenen Zustandsgleichungen werden im Folgenden anhand von experimentellen Daten in Bezug auf ihre Eignung zur Beschreibung von wasserstoffhaltigen Gemischen untersucht. Die Auswertung erfolgt anhand von Messdaten für Realgasfaktoren von Erdgasen mit Zumischungen von Wasserstoff und binären Methan-Wasserstoff Gemischen.

Neben der SGERG-88 [2] und der SGERG-mod-H2 Gleichung (diese Arbeit) werden auch die die AGA8 Gleichung [3] sowie die GERG-2008 Gleichung [4] betrachtet. Für den Vergleich werden die relativen Abweichungen der Realgasfaktoren in Abhängigkeit vom Druck in Diagrammen dargestellt (s. **Abbildung 4-1**, **Abbildung 4-2**, **Abbildung 4-3**). Hierbei wird die GERG-2008 Gleichung als Referenz ausgewählt, wodurch sich die relativen Abweichungen wie folgt ergeben:

$$\delta Z_{\text{GERG-2008}} = 100 \cdot \frac{Z - Z_{\text{GERG-2008}}}{Z_{\text{GERG-2008}}} \quad (4-1)$$

Außerdem werden die maximalen Abweichungen der Zustandsgleichungen von den experimentellen Daten tabellarisch zusammengefasst (s. **Tabelle 4-2**, **Tabelle 4-4**, **Tabelle 4-6**). Hierbei wird die relative Abweichung von den Messwerten wie folgt bestimmt:

$$\delta Z_{\text{exp}} = \left| 100 \cdot \frac{Z - Z_{\text{exp}}}{Z_{\text{exp}}} \right| \quad (4-2)$$

Die maximalen Abweichungen werden in den Tabellen jeweils als Betrag für die Druckbereiche 0 bis 50 bar und 0 bis 100 bar angegeben. Der Druckbereich 0 bis 50 bar beinhaltet den Großteil der Zustandsmengenumwerter, in denen das SGERG-Verfahren üblicherweise angewendet wird.

Die im Folgenden dargestellten Abweichungen für den Realgasfaktor lassen sich in guter Näherung auf die K-Zahl (Z/Z_n) übertragen, da die Unsicherheit des Realgasfaktors im Normzustand Z_n vernachlässigt werden kann.

4.1 Vergleich für Erdgase mit Zumischungen von Wasserstoff (hochgenaue Messwerte der Ruhr-Universität Bochum)

Das von der Ruhr-Universität Bochum (RUB) entwickelte „2-Senkkörper Auftriebsverfahren“ (Gasdichtemessanlage) gilt mit einer Messunsicherheit von 0,02% als das genaueste Verfahren zur Bestimmung von Dichten und Realgasfaktoren von Gasgemischen.

Mit diesem Verfahren wurden in den letzten Jahren insgesamt 4 verschiedenen Erdgase mit Zumischungen von Wasserstoff vermessen. Eine Übersicht der untersuchten Gemische/Datensätze ist in **Tabelle 4-1** gegeben. Das Gemisch M1 mit einem H₂-Anteil von ≈ 8 mol% wurde 1993 im Auftrag der Ruhrgas AG vermessen [10] und ist ebenfalls in dem GERG-Monograph TM15 enthalten [8]. Die Gemische NG1, NG2 und NG3 mit H₂-Anteilen von ≈ 5 , 10 und 30 mol% wurden 2014 im Rahmen eines DVGW Forschungsprojektes [11] vermessen. Die

Ergebnisse wurden 2017 von Richter *et al.* [12] veröffentlicht. Die Analysen der untersuchten Gasgemische sind Anhang C zu entnehmen.

In der zuvor genannten Literaturstelle werden die gemessenen Dichten zusammen mit den entsprechenden Druck- und Temperaturwerten veröffentlicht. Zusätzlich wird zu jedem Gasgemisch die molare Masse angegeben, die sich für die jeweilige Messreihe durch Extrapolation der Dichten auf den Druck $p = 0$ bar ergibt. Hieraus lassen sich dann die entsprechenden Realgasfaktoren über die folgende Beziehung berechnen:

$$Z = \frac{p \cdot M}{\rho \cdot R \cdot T} \quad (4-3)$$

Der Vergleich der verschiedenen Zustandsgleichungen mit den experimentellen Daten ist in **Abbildung 4-1** bis **Abbildung 4-4** dargestellt. **Tabelle 4-2** enthält eine Übersicht der maximalen absoluten Abweichungen der Zustandsgleichungen von den Messwerten.

Die Ergebnisse zeigen sowohl für die GERG-2008 Gleichung als auch die AGA8 Gleichung im gesamten Druckbereich eine sehr gute Übereinstimmung für die 4 untersuchten Gemische. Es ergeben sich maximale Abweichungen für das Gemisch NG2 von 0,064% für die GERG-2008-Gleichung (bei 0°C und 60,3 bar) und 0,051% für die AGA8 Gleichung (bei 0°C und 80,4 bar). In allen anderen Fällen betragen die Abweichungen weniger als $\pm 0,05\%$.

Mit der SGERG-88 Gleichung lassen sich die Gemische M1, NG1 und NG2 berechnen, wobei bei Gemisch NG2 die Abfrage des Anwendungsbereichs ($x_{H_2} \leq 10$ mol%) unterdrückt werden musste. Das Gemisch NG3 lässt sich aufgrund der in Abschnitt 3.1 beschriebenen Konsistenzprüfung nicht berechnen. Für die SGERG-88 ergibt sich im Druckbereich von 0 bis 50 bar ebenfalls eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten. Die Abweichungen betragen in allen Fällen weniger als $\pm 0,1\%$; die maximale Abweichung von 0,099% ergibt sich für das Gemisch NG2 (bei 0°C und 40,2 bar). Für Drücke > 50 bar treten Abweichungen von bis zu $\pm 0,4\%$ auf. Die maximale Abweichung von 0,399% ergibt sich für das Gemisch NG2 (bei 0°C und 80,4 bar).

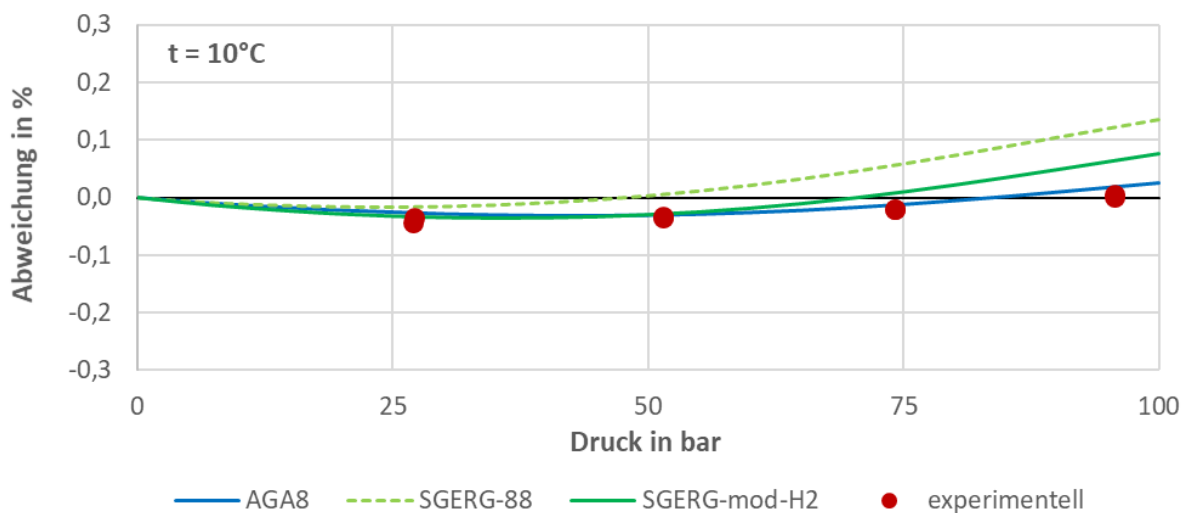
Mit der SGERG-mod-H2 lassen sich alle 4 Gemische problemlos berechnen. Im Druckbereich von 0 bis 50 bar ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messwerten. Die Abweichungen betragen in der Regel weniger als $\pm 0,05\%$, lediglich für das Gemisch NG1 und NG2 ergeben sich bei 0°C und ca. 40 bar maximale Abweichungen von 0,055% bzw. 0,054%. Es zeigt sich, dass die Unterdrückung der „CO-Korrektur“ (s. Abschnitt 3.1) im Vergleich zu der SGERG-88 Gleichung zu einer besseren Wiedergabe der experimentellen Werte führt. Für Drücke > 50 bar treten Abweichungen von bis zu ca. $\pm 0,3\%$ auf. Die maximale Abweichung von 0,306% ergibt sich für das Gemisch NG2 (bei 0°C und 80,4 bar). Für das Gemisch NG3 mit dem größten H_2 -Anteil von 30,47 mol% betragen die Abweichungen im gesamten Druckbereich dagegen weniger als $\pm 0,1\%$. Hierbei ist anzumerken, dass bei der SGERG-Gleichung für Drücke im Bereich von ≈ 80 -100 bar unabhängig von der Wasserstoffthematik mit erhöhten Unsicherheiten ($> 0,1\%$) zu rechnen ist.

Tabelle 4-1: Liste der für den Vergleich verwendeten Datensätze (Gasanalyse s. Anhang C).

Gemisch	Messverfahren	Datenpunkte	t °C	p bar	x_{H_2} mol%
M1	Gasdichtemessanlage	8	10	27 – 96	8,11
NG1	Gasdichtemessanlage	37	0, 10, 20	10 – 81	5,37
NG2	Gasdichtemessanlage	36	0, 10, 20	10 – 81	10,41
NG3	Gasdichtemessanlage	13	10	10 – 81	30,47

Tabelle 4-2: Übersicht der maximalen prozentualen Abweichungen (Betrag) der Zustandsgleichungen von den experimentellen Realgasfaktoren für die Datensätze M1, NG1, NG2 und NG3.

Gemisch	t °C	SGERG-88		SGERG-mod-H2		AGA8		GERG-2008	
		0-50 bar	0-100 bar	0-50 bar	0-100 bar	0-50 bar	0-100 bar	0-50 bar	0-100 bar
M1	10	0,026	0,120	0,008	0,063	0,015	0,016	0,042	0,042
	0	0,083	0,311	0,055	0,250	0,020	0,036	0,037	0,037
NG1	10	0,058	0,210	0,036	0,163	0,005	0,007	0,025	0,025
	20	0,052	0,183	0,033	0,145	0,007	0,010	0,017	0,017
NG2	0	0,099	0,399	0,054	0,306	0,017	0,051	0,038	0,064
	10	0,086	0,298	0,049	0,227	0,006	0,028	0,036	0,039
	20	0,074	0,249	0,043	0,190	0,013	0,013	0,020	0,020
NG3	10	Berechnung nicht mögl.		0,014	0,061	0,038	0,042	0,025	0,025

**Abbildung 4-1:** Vergleich gemessener und berechneter Realgasfaktoren (AGA8, SERG-88, SERG-mod-H2, GERG-2008) für das Gemisch **M1** ($x_{H_2} = 8,11$ mol%) bei 10°C . Dargestellt sind die relativen Abweichungen zur GERG-2008 Gleichung.

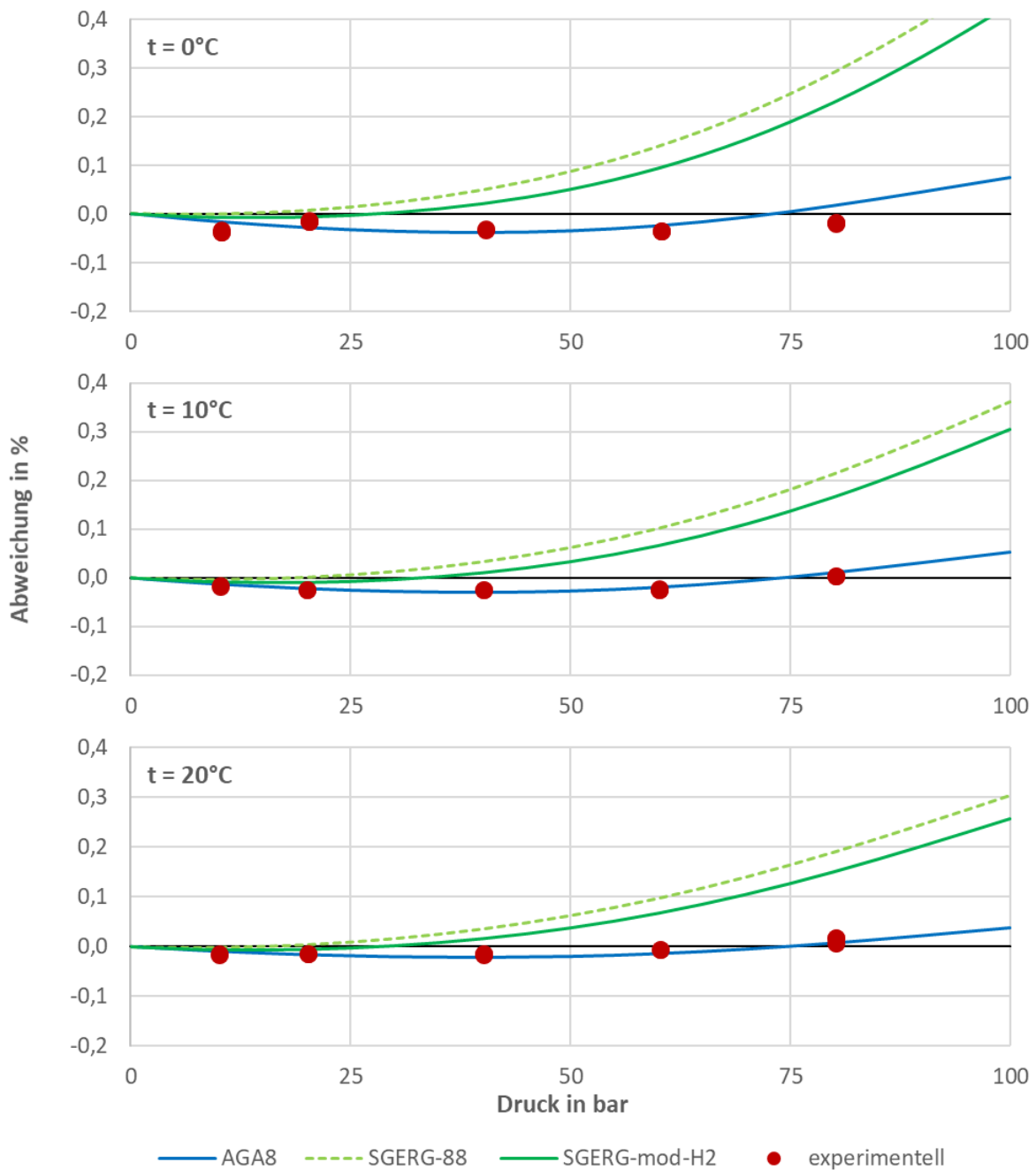


Abbildung 4-2: Vergleich gemessener und berechneter Realgasfaktoren (AGA8, SGERG-88, SGERG-mod-H2, GERG-2008) für das Gemisch **NG1** ($x_{H_2} = 5,32 \text{ mol\%}$) bei 0°C, 10°C und 20°C. Dargestellt sind die relativen Abweichungen zur GERG-2008 Gleichung.

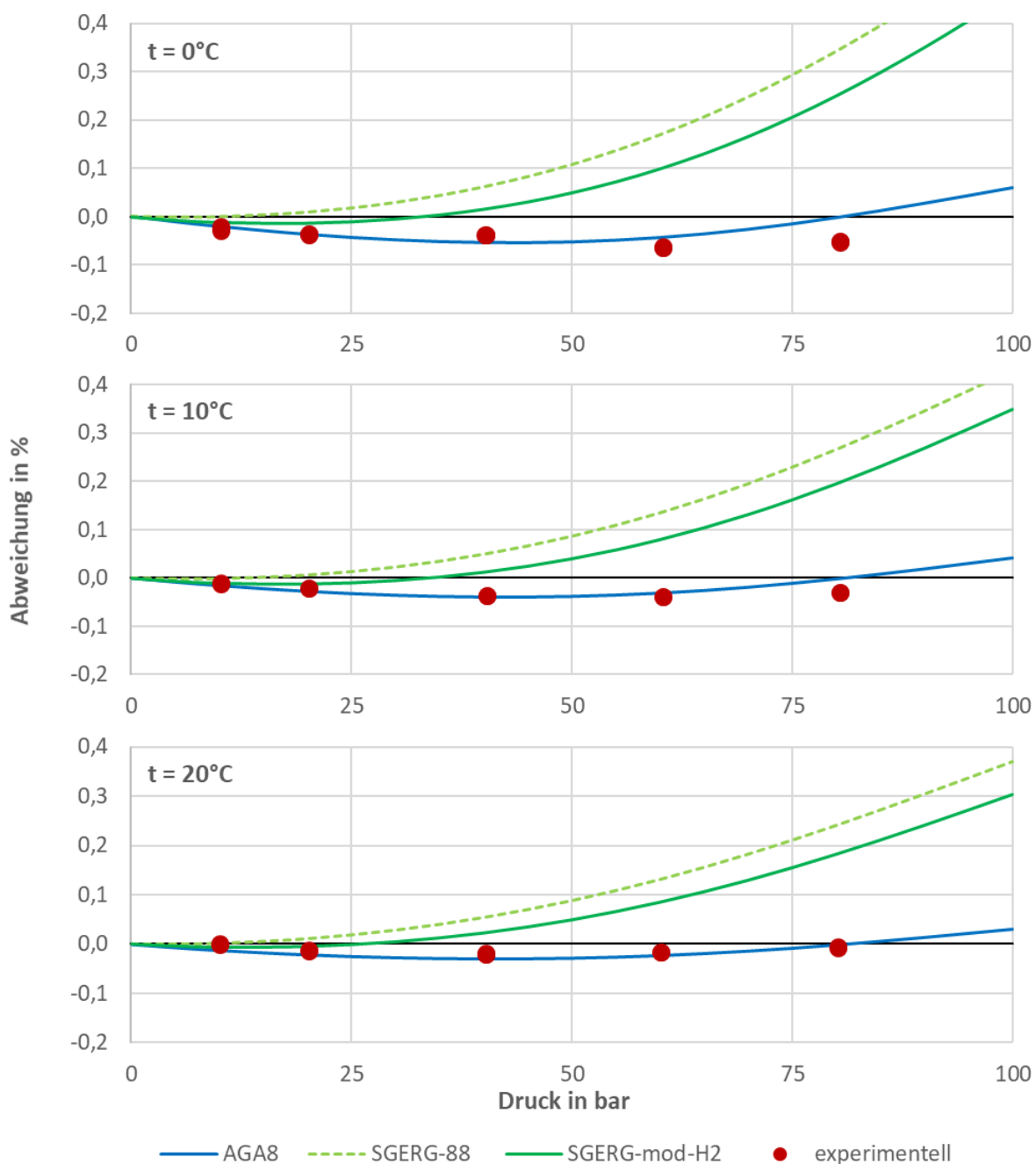


Abbildung 4-3: Vergleich gemessener und berechneter Realgasfaktoren (AGA8, SGERG-88, SGERG-mod-H2, GERG-2008) für das Gemisch **NG2** ($x_{H_2} = 10,41$ mol%) bei 0°C, 10°C und 20°C. Dargestellt sind die relativen Abweichungen zur GERG-2008 Gleichung.

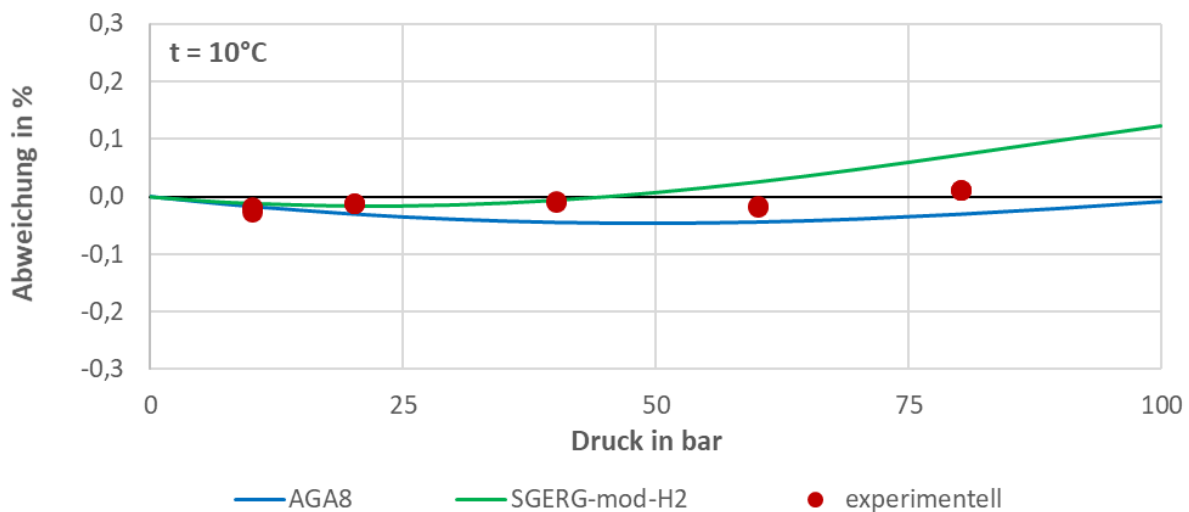


Abbildung 4-4: Vergleich gemessener und berechneter Realgasfaktoren (AGA8, SGERG-88, SGERG-mod-H2, GERG-2008) für das Gemisch **NG3** ($x_{\text{H}_2} = 30,47 \text{ mol\%}$) bei 10°C . Dargestellt sind die relativen Abweichungen zur GERG-2008 Gleichung.

4.2 Vergleich für Erdgase mit Zumischungen von Wasserstoff (GERG-Datenbank TM7)

Die GERG Datenbank TM7 (Jaeschke *et al.* [13], 1997) enthält insgesamt 36.239 experimentelle Realgasfaktoren von reinen Stoffen, binären Gemischen, Mehrkomponenten-Gemischen und Erdgasen. In diesem Abschnitt werden die Datensätze von Erdgasen mit Zumischungen von Wasserstoff ausgewertet. Eine Übersicht der betrachteten Datensätze ist in **Tabelle 4-3** dargestellt. Der maximale H_2 -Anteil beschränkt sich bei diesen Daten auf 9,49 mol%. Die Messungen wurden in den 80er und 90er Jahren von der damaligen Ruhrgas AG mit dem Burnett- sowie mit dem optischen Verfahren durchgeführt. Bei diesen beiden Verfahren wird die Messunsicherheit mit 0,1% angegeben, weshalb die im Folgenden dargestellten Ergebnisse nicht die gleiche Aussagekraft haben wie für die in Abschnitt 4.1 dargestellten Ergebnisse. Eine grafische Darstellung der relativen Abweichungen ist in Anhang A1 bis A8 enthalten.

Die Ergebnisse zeigen sowohl für die AGA8 Gleichung als auch für die GERG-2008 Gleichung eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messwerten, die in der Regel innerhalb von $\pm 0,1\%$ liegt. Lediglich in Einzelfällen werden Abweichungen $> 0,1\%$ beobachtet. Im Falle der AGA8 Gleichung werden maximale Abweichungen von 0,143% für das Gemisch N67 (bei 0°C und 91,6 bar) sowie 0,192% für das Gemisch N70 (bei 0°C und 91,6 bar) beobachtet. Für die GERG-2008 Gleichung beträgt die maximale Abweichung 0,143% – ebenfalls für das Gemisch N70 (bei 0°C und 91,6 bar). An dieser Stelle sei nochmal betont, dass diese Abweichungen sowohl durch die Unsicherheit der Zustandsgleichungen als auch durch die Unsicherheit der Messwerte zu begründen sind und nicht zwangsläufig auf den H_2 -Anteil zurückzuführen sind.

Für die SGERG-88 sowie die SGERG-mod-H2 ergibt sich ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messwerten. Die Abweichungen betragen über den gesamten Druckbereich in der Regel weniger als $\pm 0,1\%$. Lediglich in Einzelfällen werden Abweichungen $> 0,1\%$ beobachtet. Im Falle der SGERG-88 beträgt die maximale Abweichung 0,127% für das Gemisch N70. Im

Tabelle 4-3: Liste der für den Vergleich verwendeten Datensätze (Gasanalyse s. Anhang C)

Gemisch	Messverfahren	Datenpunkte	t °C	p bar	x _{H2} mol%
N67	Burnett	68	0 – 30	4 – 92	2,31
N68	Burnett	69	0 – 30	4 – 92	4,19
N69	Burnett	70	0 – 30	4 – 92	9,39
N70	Burnett	68	0 – 30	4 – 92	2,28
N71	Burnett	70	0 – 30	4 – 92	4,22
N72	Burnett	67	0 – 30	4 – 92	9,49
N73	Burnett	24	36,85	5 – 100	9,49
N74	Optik	100	-3,15 – 56,85	4 – 100	9,49

Tabelle 4-4: Übersicht der maximalen prozentualen Abweichungen der Zustandsgleichungen von den experimentellen Realgasfaktoren für die Datensätze N67 bis N74.

Gemisch	t °C	SGERG-88		SGERG-mod-H2		AGA8		GERG-2008	
		0-50 bar	0-100 bar	0-50 bar	0-100 bar	0-50 bar	0-100 bar	0-50 bar	0-100 bar
N67	0	0,032	0,074	0,015	0,039	0,030	0,143	0,071	0,097
	10	0,029	0,071	0,018	0,045	0,037	0,129	0,072	0,093
	20	0,038	0,086	0,027	0,065	0,042	0,111	0,071	0,090
	30	0,032	0,081	0,033	0,063	0,031	0,076	0,048	0,066
N68	0	0,016	0,047	0,016	0,016	0,017	0,059	0,051	0,063
	10	0,020	0,016	0,043	0,043	0,026	0,026	0,025	0,025
	20	0,015	0,018	0,023	0,023	0,014	0,014	0,028	0,028
	30	0,010	0,027	0,024	0,024	0,023	0,023	0,023	0,023
N69	0	0,024	0,063	0,056	0,135	0,049	0,049	0,014	0,032
	10	0,020	0,072	0,054	0,126	0,038	0,038	0,019	0,035
	20	0,030	0,069	0,059	0,113	0,047	0,047	0,015	0,043
	30	0,015	0,029	0,025	0,067	0,018	0,025	0,019	0,019
N70	0	0,064	0,127	0,046	0,093	0,061	0,192	0,102	0,143
	10	0,036	0,081	0,022	0,055	0,044	0,137	0,079	0,106
	20	0,041	0,099	0,029	0,078	0,044	0,122	0,073	0,099
	30	0,014	0,070	0,016	0,052	0,013	0,063	0,025	0,053
N71	0	0,013	0,022	0,021	0,043	0,017	0,026	0,049	0,049
	10	0,045	0,045	0,070	0,070	0,052	0,052	0,013	0,029
	20	0,018	0,018	0,031	0,039	0,020	0,024	0,035	0,035
	30	0,023	0,023	0,025	0,026	0,023	0,029	0,019	0,024
N72	0	0,014	0,039	0,051	0,111	0,042	0,042	0,020	0,020
	10	0,012	0,038	0,041	0,093	0,024	0,024	0,024	0,024
	20	0,042	0,046	0,071	0,084	0,059	0,059	0,026	0,045
	30	0,021	0,049	0,046	0,087	0,038	0,040	0,011	0,033
N73	36,85	0,009	0,014	0,017	0,046	0,008	0,008	0,018	0,019
N74	-3,15	0,039	0,058	0,011	0,054	0,011	0,101	0,059	0,075
	6,85	0,023	0,036	0,018	0,065	0,012	0,068	0,047	0,066
	16,85	0,004	0,034	0,033	0,080	0,019	0,019	0,016	0,020
	36,85	0,012	0,047	0,032	0,083	0,023	0,035	0,009	0,024
	56,85	0,010	0,043	0,036	0,082	0,004	0,006	0,020	0,020

Falle der SGERG-mod-H2 beträgt die maximale Abweichung 0,135 (bei 0°C und 91,6 bar) für das Gemisch N69 (bei 0°C und 92,3 bar). Im Druckbereich 0-50 bar betragen die Abweichungen in allen Fällen weniger als $\pm 0,1\%$ – in der Regel sogar weniger als $\pm 0,05\%$. Bei den Ergebnissen, die im Falle der SGERG-88 bzw. SGERG-mod-H2 teilweise sogar geringere Abweichungen aufweisen als für die AGA8- bzw. die GERG-2008 Gleichung ist anzumerken, dass die betrachteten Datensätze der GERG-Datenbank TM7 in die Entwicklung der SGERG-Gleichung mit eingeflossen sind.

4.3 Vergleich für binäre Gemische Methan-Wasserstoff (GERG-Datenbank TM7)

Da sich die in der Literatur vorhandenen Messdaten von Erdgasgemischen auf einen maximalen Wasserstoffanteil von 30% beschränken, werden im Folgenden zusätzlich binäre CH₄-H₂ Gemische betrachtet, da diese Datensätze H₂-Anteile von bis zu 75 mol% beinhalten. Dabei ist anzumerken, dass sich der Anwendungsbereich der SGERG-88 Gleichung auf natürliche Erdgase beschränkt.

Die Ergebnisse zeigen sowohl für die AGA8 Gleichung als auch für die GERG-2008 Gleichung eine sehr gute Übereinstimmung mit den Messwerten. Die Abweichungen betragen in allen Fällen weniger als $\pm 0,1\%$; in der Regel weniger als $\pm 0,05\%$. Damit wird belegt, dass sich mit diesen Zustandsgleichungen Gemische mit beliebigen H₂-Konzentrationen im Bereich von 0-100% berechnen lassen.

Für die SGERG-mod-H2 ergibt sich zumindest im Druckbereich bis 50 bar ebenfalls eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten. Hier beträgt die maximale Abweichung 0,139% für das Gemisch B6 (bei 1,85°C und 45 bar). Mit der SGERG-88 ist eine Berechnung dieser Gemische nicht möglich.

Tabelle 4-5: Liste der für den Vergleich verwendeten Datensätze – binäre Gemische Methan-Wasserstoff (der Stoffmengenanteil Methan ergibt sich zu $x_{\text{CH}_4} = 100 \text{ mol}\% - x_{\text{H}_2}$).

Gemisch	Messverfahren	Datenpunkte	t °C	p bar	x_{H_2} mol%
B1	Burnett	68	0 – 30	4 – 92	15,020
B2	Optik	69	0 – 30	4 – 92	15,020
B3	Optik	70	0 – 30	4 – 92	25,309
B4	Burnett	68	0 – 30	4 – 92	50,266
B5	Optik	70	0 – 30	4 – 92	50,266
B6	Burnett	67	0 – 30	4 – 92	74,940
B7	Optik	85	10 – 20	30 – 70	74,940

Tabelle 4-6: Übersicht der maximalen prozentualen Abweichungen der Zustandsgleichungen von den experimentellen Realgasfaktoren für die Datensätze B1 bis B7.

Gemisch	t °C	SGERG-88		SGERG-mod-H2		AGA8		GERG-2008	
		0-50 bar	0-100 bar	0-50 bar	0-100 bar	0-50 bar	0-100 bar	0-50 bar	0-100 bar
B1	0			0,032	0,202	0,022	0,054	0,018	0,018
	20	Berechnung nicht mögl.		0,029	0,159	0,014	0,022	0,011	0,022
	40			0,039	0,163	0,006	0,006	0,016	0,037
B2	0	Berechnung nicht mögl.		0,039	0,224	0,025	0,065	0,020	0,022
	40			0,058	0,183	0,013	0,019	0,007	0,019
B3	-3			0,039	0,154	0,053	0,104	0,048	0,062
	17	Berechnung nicht mögl.		0,043	0,143	0,035	0,068	0,027	0,027
	37			0,071	0,185	0,032	0,069	0,019	0,031
	57			0,060	0,171	0,015	0,023	0,017	0,017
B4	2			0,070	0,191	0,036	0,037	0,017	0,017
	37	Berechnung nicht mögl.		0,009	0,055	0,007	0,007	0,011	0,018
	47			0,016	0,017	0,007	0,007	0,016	0,020
	57			0,030	0,030	0,019	0,019	0,019	0,022
B5	-3			0,065	0,220	0,045	0,068	0,021	0,030
	17	Berechnung nicht mögl.		0,038	0,148	0,043	0,043	0,041	0,041
	37			0,012	0,057	0,016	0,023	0,010	0,010
	57			0,044	0,044	0,037	0,037	0,035	0,035
B6	2			0,131	0,311	0,012	0,015	0,032	0,038
	37	Berechnung nicht mögl.		0,047	0,240	0,010	0,029	0,013	0,013
	57			0,009	0,076	0,008	0,017	0,006	0,008
B7	-3			0,111	0,369	0,054	0,054	0,047	0,047
	17	Berechnung nicht mögl.		0,087	0,330	0,024	0,024	0,028	0,028
	37			0,044	0,203	0,015	0,027	0,016	0,016
	57			0,024	0,131	0,023	0,029	0,017	0,017

5 Vergleich der Zustandsgleichungen untereinander

In diesem Kapitel wird ein Vergleich der Zustandsgleichungen anhand von 5 verschiedenen Erdgasen durchgeführt, wobei der H₂-Anteil in den Analysen zwischen 0 und 100 mol% variiert wird. Bei den betrachteten Gasanalysen (s. Anhang D) handelt es sich um die gleichen Erdgase, die auch in Tabelle A.2 der G260 [14] angegeben sind. Die Berechnungen wurden bei $t = 10^{\circ}\text{C}$ für Drücke bis 100 bar durchgeführt.

Bei dem Vergleich der Zustandsgleichungen wird die GERG-2008 Gleichung als Referenz gewählt. **Abbildung 5-1** und **Abbildung 5-2** zeigen die relativen Abweichungen der AGA8 Gleichung von der GERG-2008 Gleichung. **Abbildung 5-3** und **Abbildung 5-4** zeigen die relativen Abweichungen der SGERG-88 bzw. der SGERG-mod-H2 von der GERG-2008 Gleichung.

Die Ergebnisse zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der AGA8 Gleichung und der GERG-2008 Gleichung. Die relativen Abweichungen betragen für alle H₂-Anteile im gesamten Druckbereich weniger als $\pm 0,1\%$.

Die SGERG-mod-H2 stimmt ebenfalls bis zu Drücken von 50 bar für alle H₂-Anteile innerhalb von $\pm 0,1\%$ mit der GERG-2008 Gleichung überein. Für Drücke > 50 bar treten Abweichungen von bis zu 0,44% auf (für Erdgas Nordsee-H mit 10 mol% H₂ bei 100 bar). Für die SGERG-88 betragen die Abweichungen bis 10 mol% H₂ in der Regel ebenfalls weniger als $\pm 0,1\%$. Lediglich für Erdgas Nordsee-H mit 10 mol% H₂ ergibt sich bei 50 bar eine Abweichung von 0,117%.

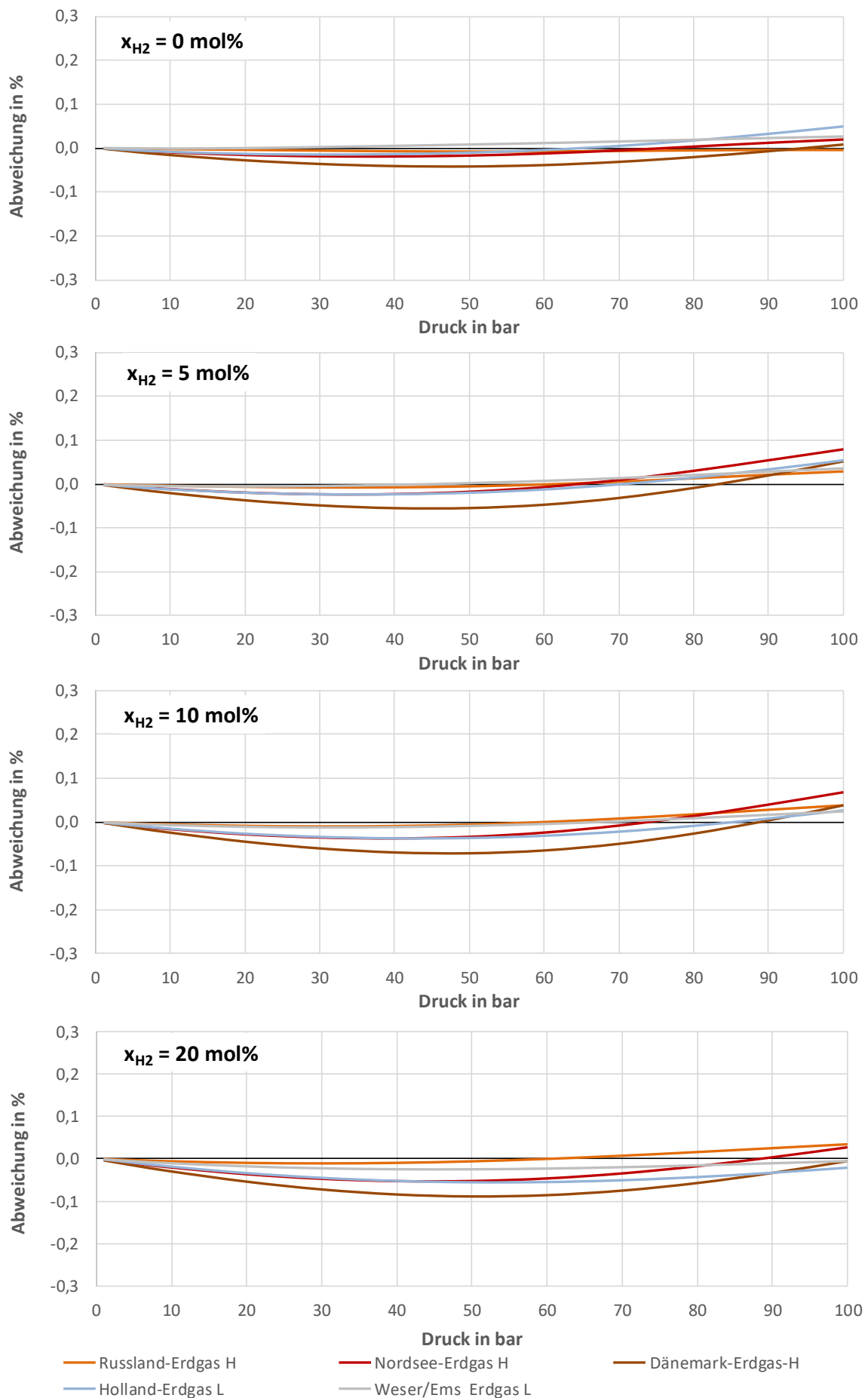


Abbildung 5-1: Relative Abweichungen der **AGA8 Gleichung** von der **GERG-2008 Gleichung** für verschiedene Erdgase ($t = 10^\circ\text{C}$, $x_{H_2} = 0\text{--}20\text{ mol\%}$).

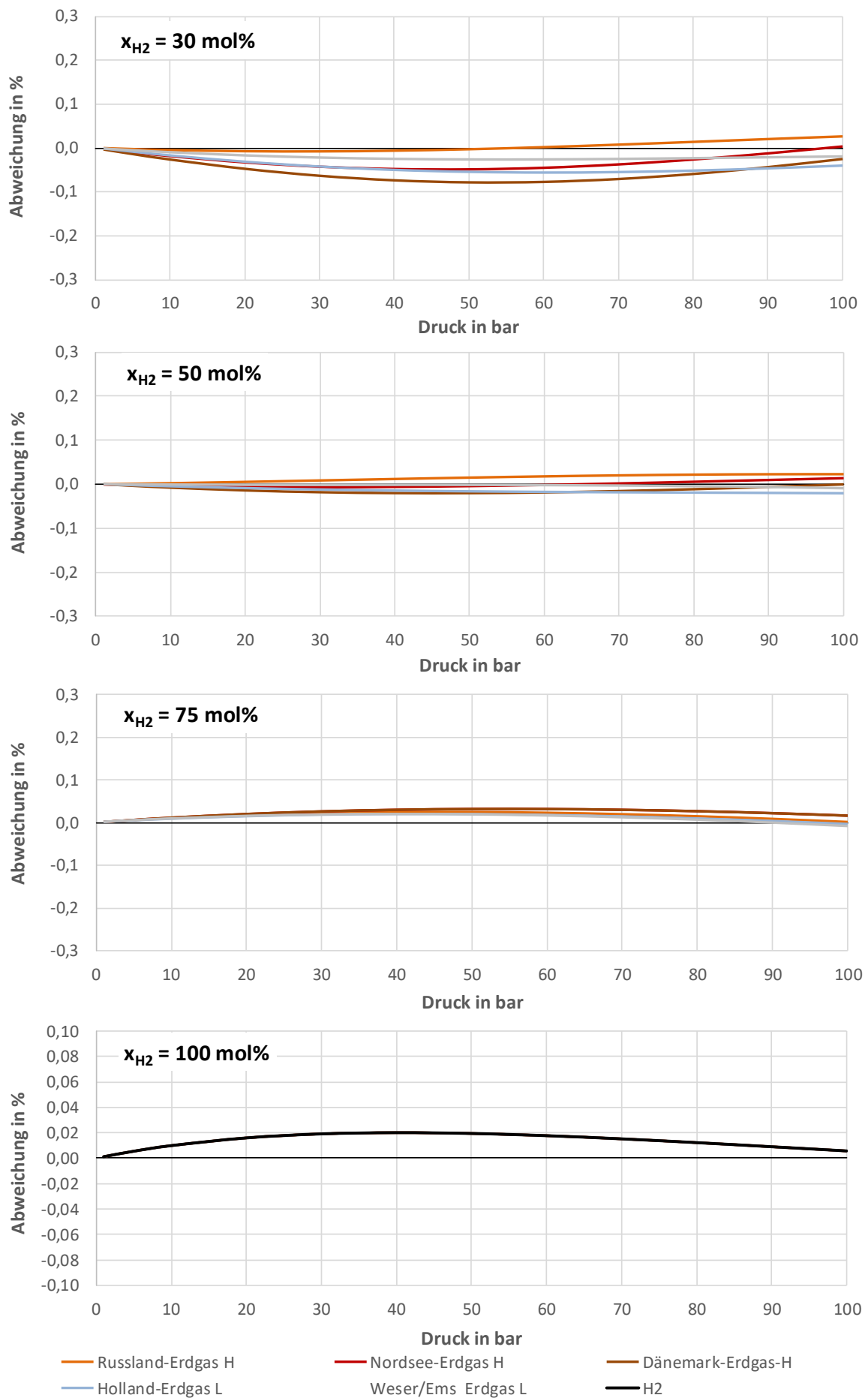


Abbildung 5-2: Relative Abweichungen der **AGA8 Gleichung** von der **GERG-2008 Gleichung** für verschiedene Erdgase ($t = 10^\circ\text{C}$, $x_{H_2} = 30\text{--}100 \text{ mol\%}$).

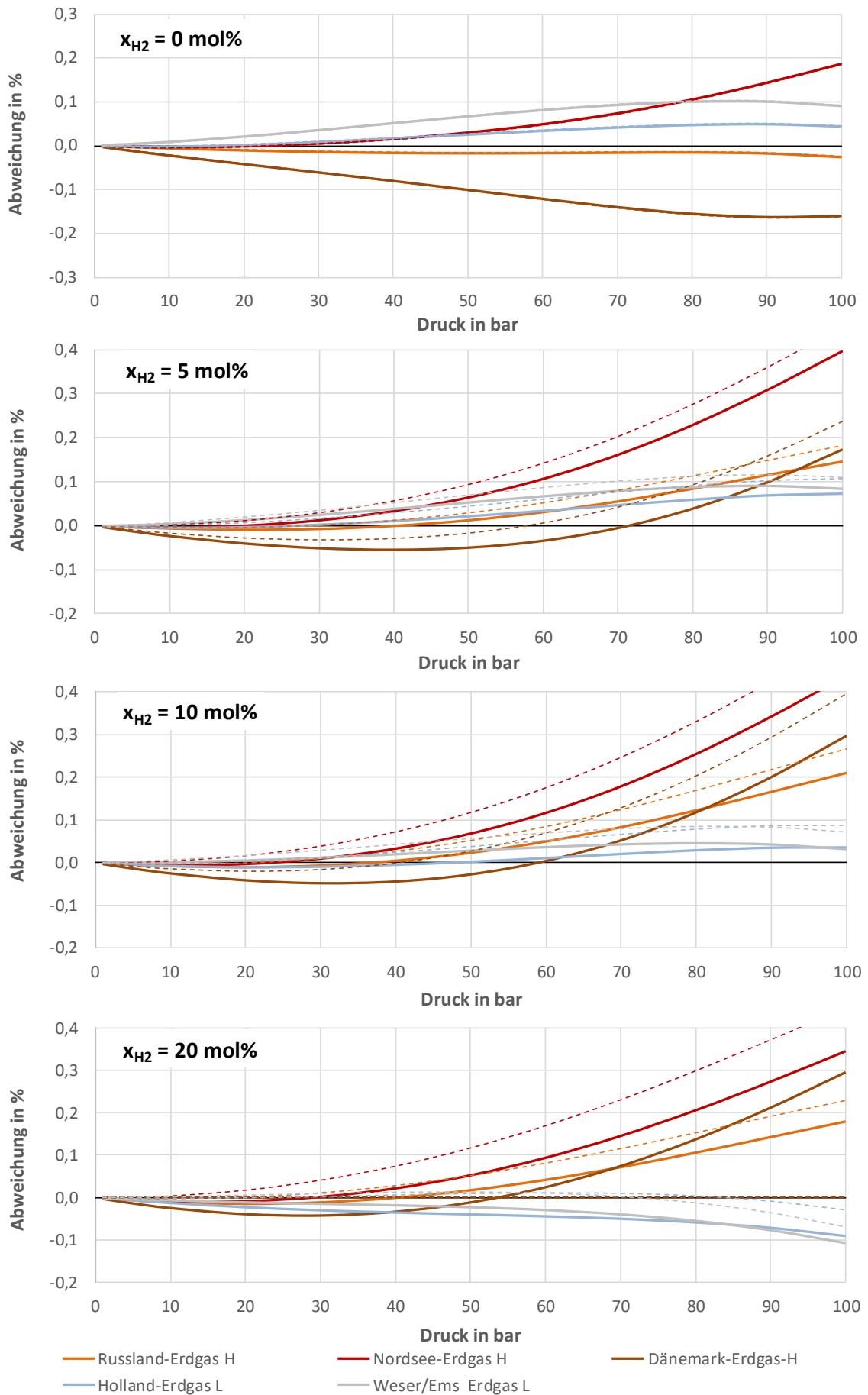


Abbildung 5-3: Relative Abweichungen der **SGERG-mod-H2 Gleichung** (—) sowie der **SGERG-88 Gleichung** (- - -) von der **GERG-2008 Gleichung** für verschiedene Erdgase ($t = 10^\circ\text{C}$, $x_{H_2} = 0\text{--}20 \text{ mol\%}$).

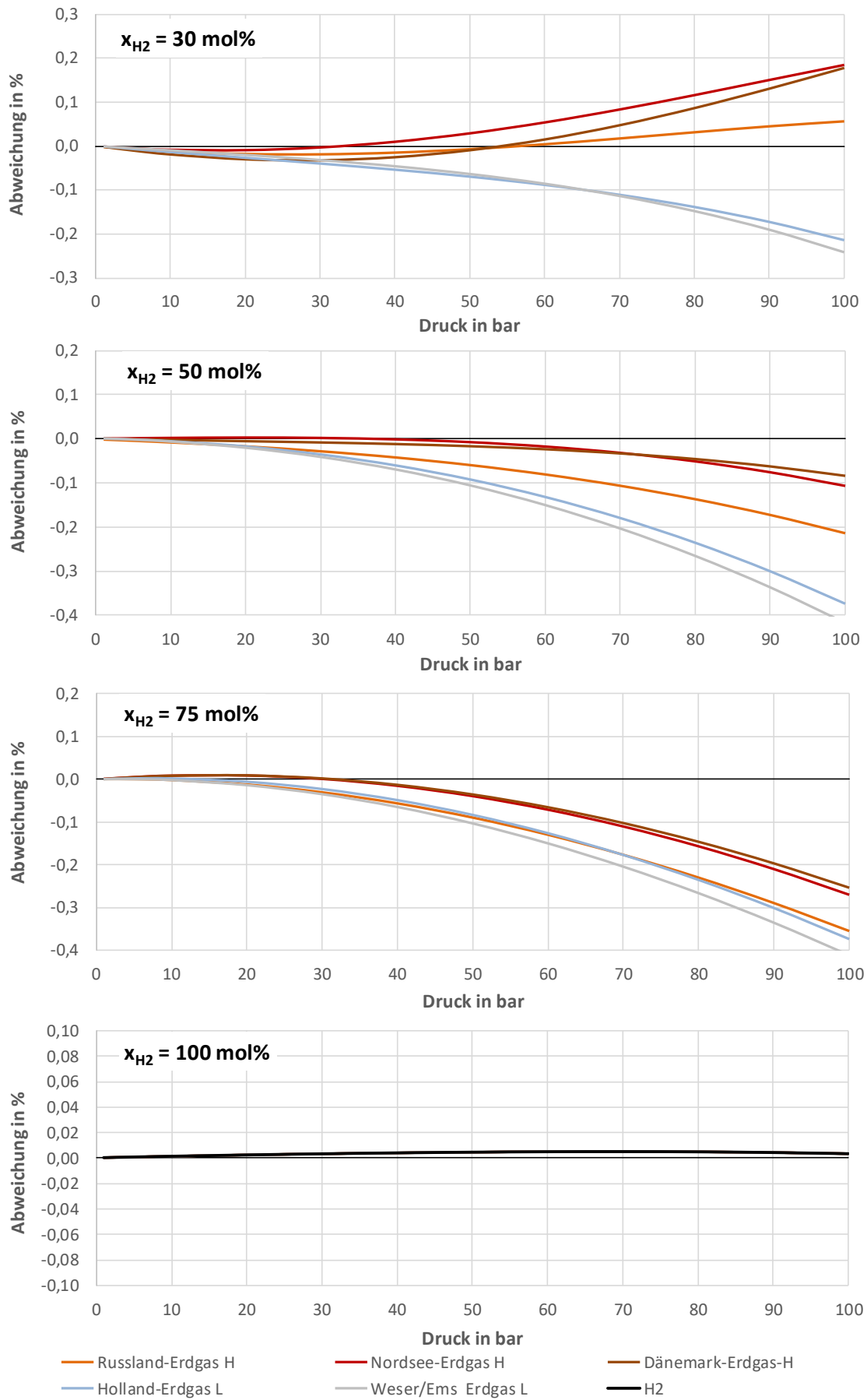


Abbildung 5-4: Relative Abweichungen der **SGERG-mod-H2** Gleichung von der **GERG-2008** Gleichung für verschiedene Erdgase und reinen Wasserstoff ($t = 10^\circ\text{C}$, $x_{H_2} = 30\text{--}100 \text{ mol\%}$).

Symbolverzeichnis

ρ	<i>Dichte</i>
d	relative Dichte
k	Kompressibilitätszahl ($=Z/Z_n$)
M	Molare Masse
P	Druck
R	universelle Gaskonstante
T	Temperatur
Z	Realgasfaktor

Indizes

n	bezogen auf den Normzustand
---	-----------------------------

Literaturverzeichnis

- [1] DVGW G685, DVGW Arbeitsblatt G 685: Gasabrechnung (Teil 1-7). Technische Regel, Bonn: DVGW Deutscher Verein des Gas- und Wasserfaches e. V., 2020.
- [2] ISO 12213-3:2006-11, *Natural gas - Calculation of compression factor - Part 3: Calculation using physical properties*, International Standard Organization, 1997, second edition 2006-11-15.
- [3] ISO 12213-2:2006-11, *Natural gas - Calculation of compression factor - Part 2: Calculation using molar-composition analysis*, International Standard Organization, 1997, second edition 2006-11-15.
- [4] O. Kunz and W. Wagner, "The GERG-2008 Wide-Range Equation of State for Natural Gases and Other Mixtures: An Expansion of GERG-2004," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 57, pp. 3032-3091, 2012.
- [5] M. Jaeschke, S. Audibert, P. van Caneghem, A. Humphreys, R. Janssen-van Rosmalen, Q. Pellei, J. Schouten and J. Michels, "Simplified GERG Virial Equation for Field Use," *SPE Product Eng*, vol. 6, pp. 350-355, 1991.
- [6] AGA Transmission Measurement Committee, *Thermodynamic Properties of Natural Gas and Related Gases: DETAIL and GROSS Equations of State. AGA Report No. 8, Part I, 1st ed., Catalog No. XQ1704-1*, 1992.
- [7] AGA Transmission Measurement Committee, *Thermodynamic Properties of Natural Gas and Related Gases: DETAIL and GROSS Equations of State. AGA Report No. 8, Part I, 2nd ed., Catalog No. XQ1704-1*, 1994.
- [8] O. Kunz, R. Klimeck, W. Wagner and M. Jaeschke, *The GERG-2004 Wide-Range Equation of State for Natural Gases and Other Mixtures*, Düsseldorf, GERG Technical Monograph 15.
- [9] I. 20765-2:2015, *Natural gas — Calculation of thermodynamic properties — Part 2: Single-phase properties (gas, liquid, and dense fluid) for extended ranges of application*, International Standard Organization, 2015.
- [10] X. Y. Guo, R. Kleinrahm and W. Wagner, "Experimentelle Untersuchung der systematischen Meßfehler von Betriebsdichteaufnehmern für Erdgas-Meßstrecken. Teil 2: Meßergebnisse für Erdgase. Bericht für die Ruhrgas AG.," Lehrstuhl für Thermodynamik, Ruhr-Universität Bochum., 1993.
- [11] P. Schley, D. Wolf, M. Henel, C. Fiebig and R. Span, "Einfluss von Wasserstoff auf die Energiemessung und Abrechnung," DVGW-Forschungsprojekt G 3-02-12, Bonn, 2014.

-
- [12] M. Richter, M. Ben Souissi, R. Span and P. Schley, "Accurate (p, ρ, T, x) Measurements of Hydrogen-Enriched Natural-Gas Mixtures at $T = (273.15, 283.15, \text{ and } 293.15)$ K with Pressures up to 8 MPa," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 29, pp. 2021-2029, 2014.
- [13] M. Jaeschke, H.-M. Hinze and A. Humphreys, Supplement to the GERG Databank of High-Accuracy Compression Factor Measurements, Düsseldorf, GERG Technical Monograph TM7.
- [14] DVGW G260, DVGW Arbeitsblatt G 260: Gasbeschaffenheit. Technische Regel, Bonn: DVGW Deutscher Verein des Gas- und Wasserfaches e. V., 2020.
- [15] AGA Transmission Measurement Committee, *Thermodynamic Properties of Natural Gas and Related Gases: DETAIL and GROSS Equations of State. AGA Report No. 8, Part I, 3rd ed., Catalog No. XQ1704-1*, 2017.

Anhang

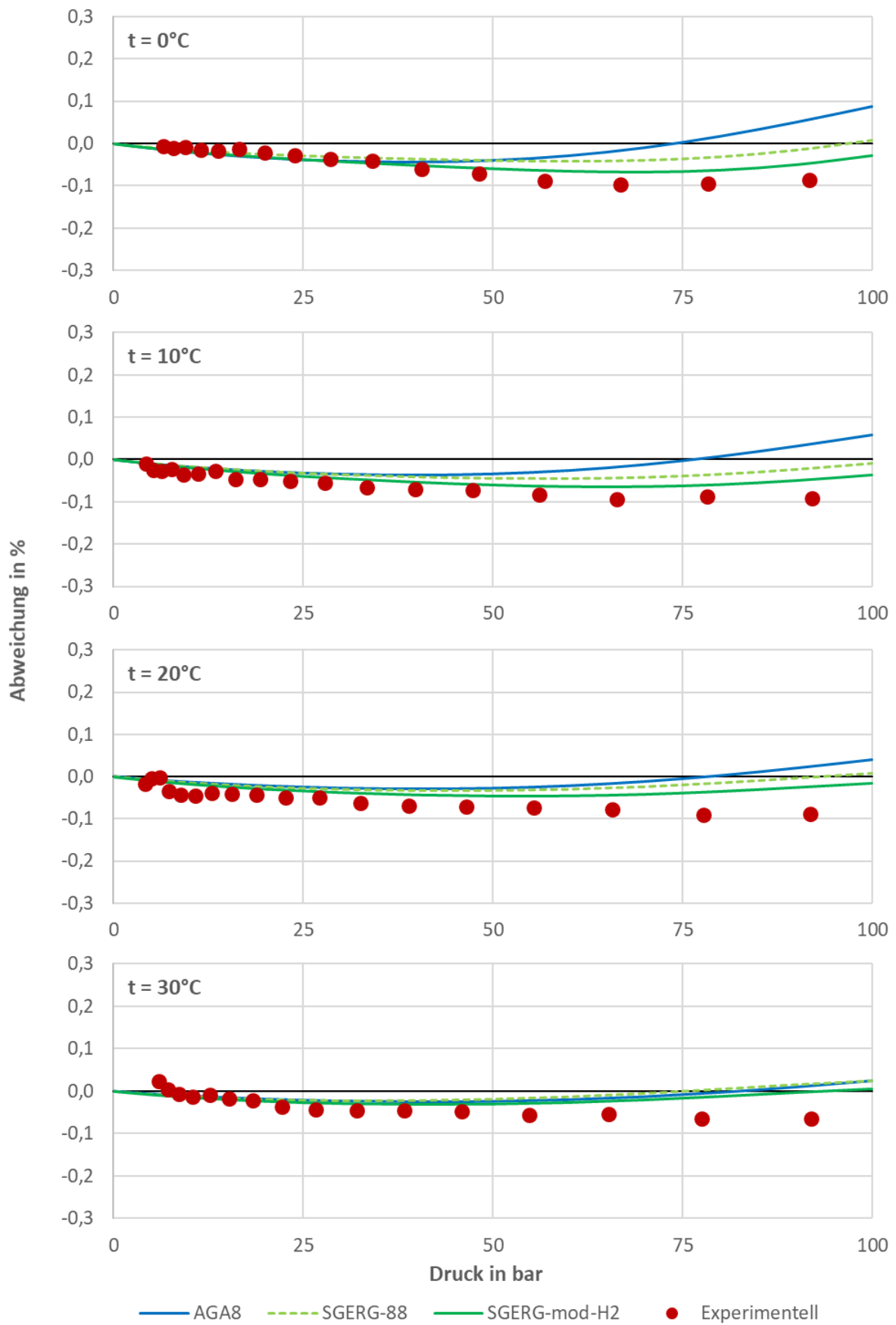
Anhang A: Vergleich für Erdgase (GERG Datenbank TM7)

Anhang B: Vergleich für binäre Gemische (GERG Datenbank TM7)

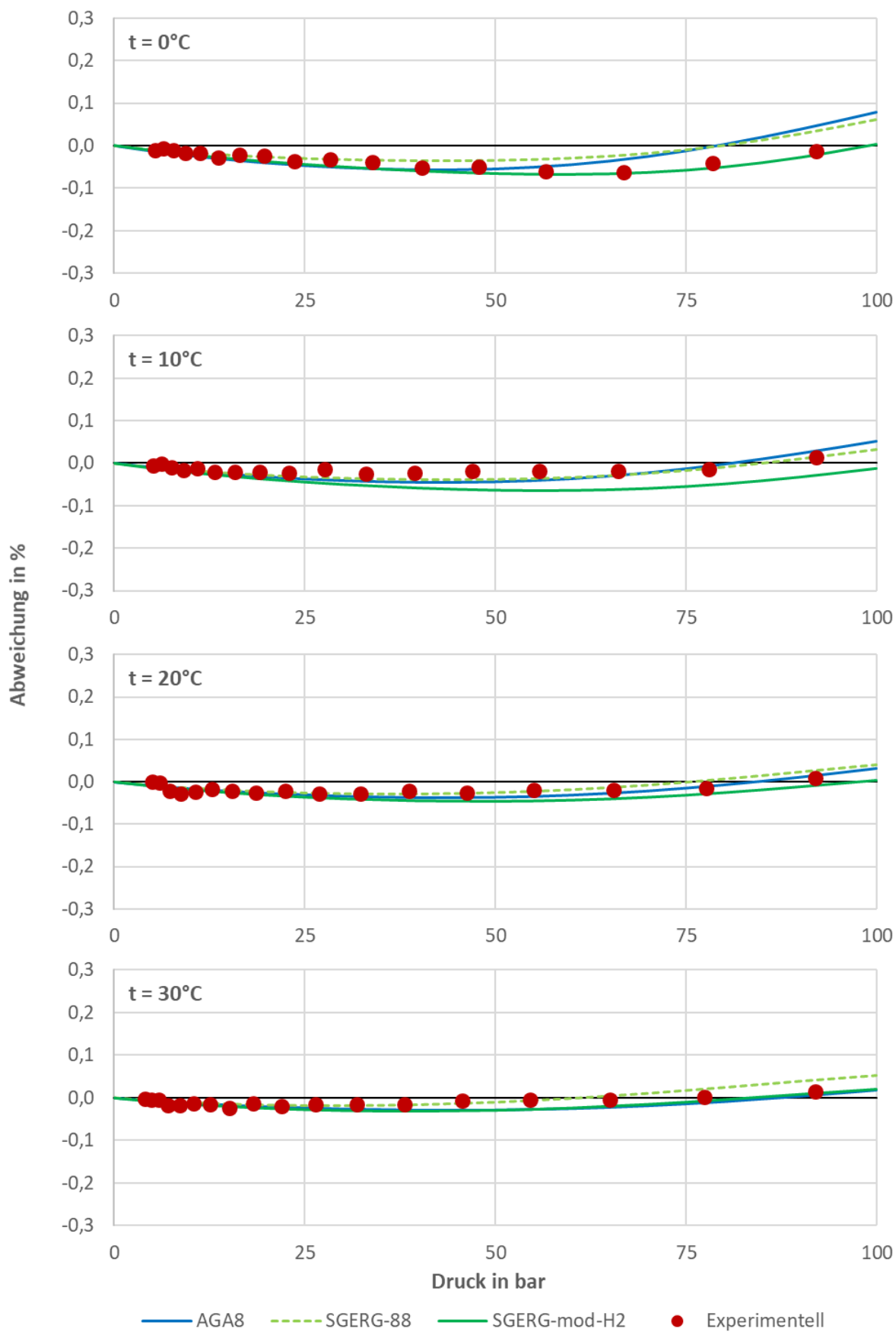
Anhang C: Gasanalysen zu den Erdgasen der experimentellen Datensätzen

Anhang D: Gasanalysen der G260 (Tabelle A.2) für den Vergleich der Zustandsgleichungen

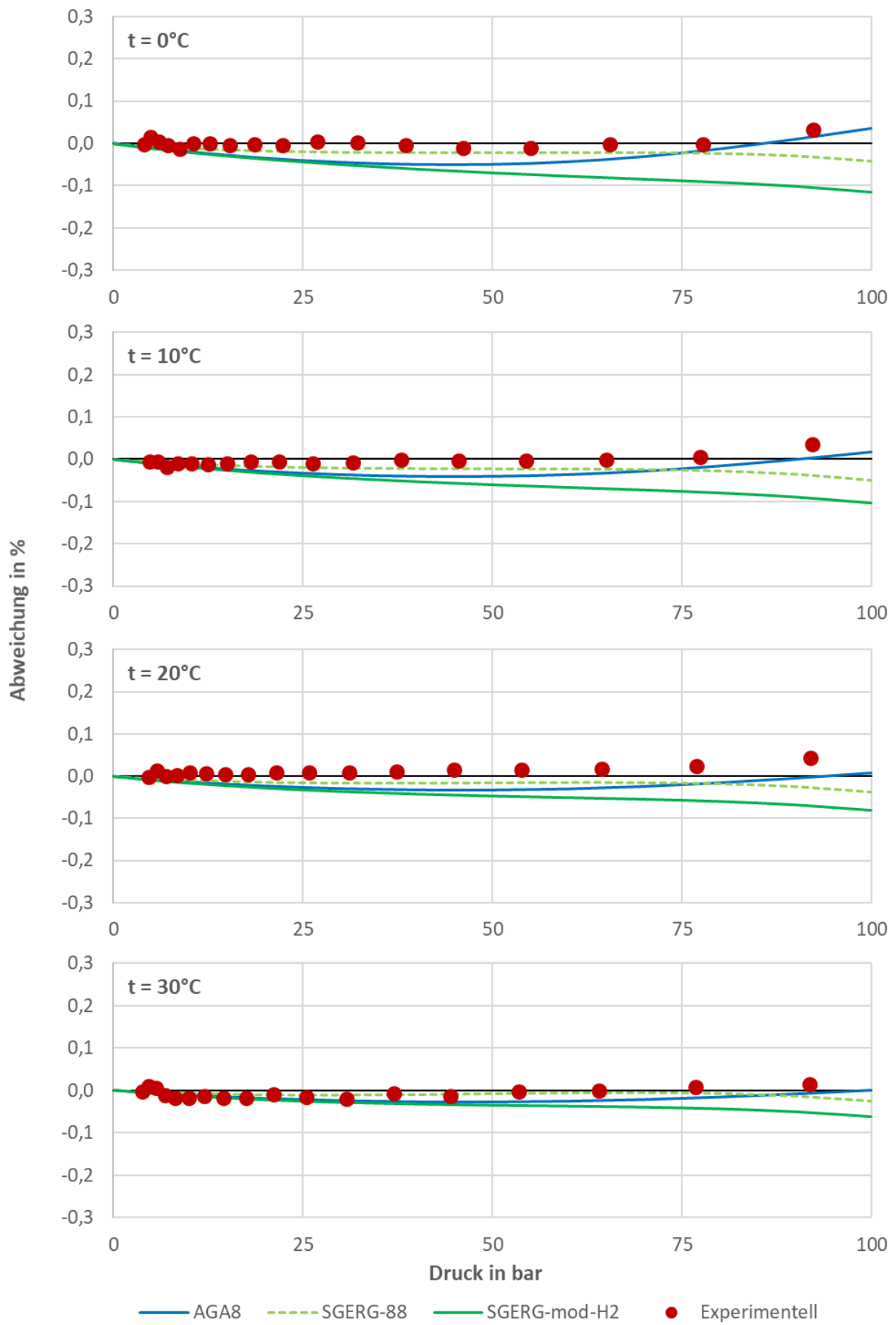
Anhang E: Modifikation der SGERG-mod-H2 (Fortran Source Code ISO12213-3)



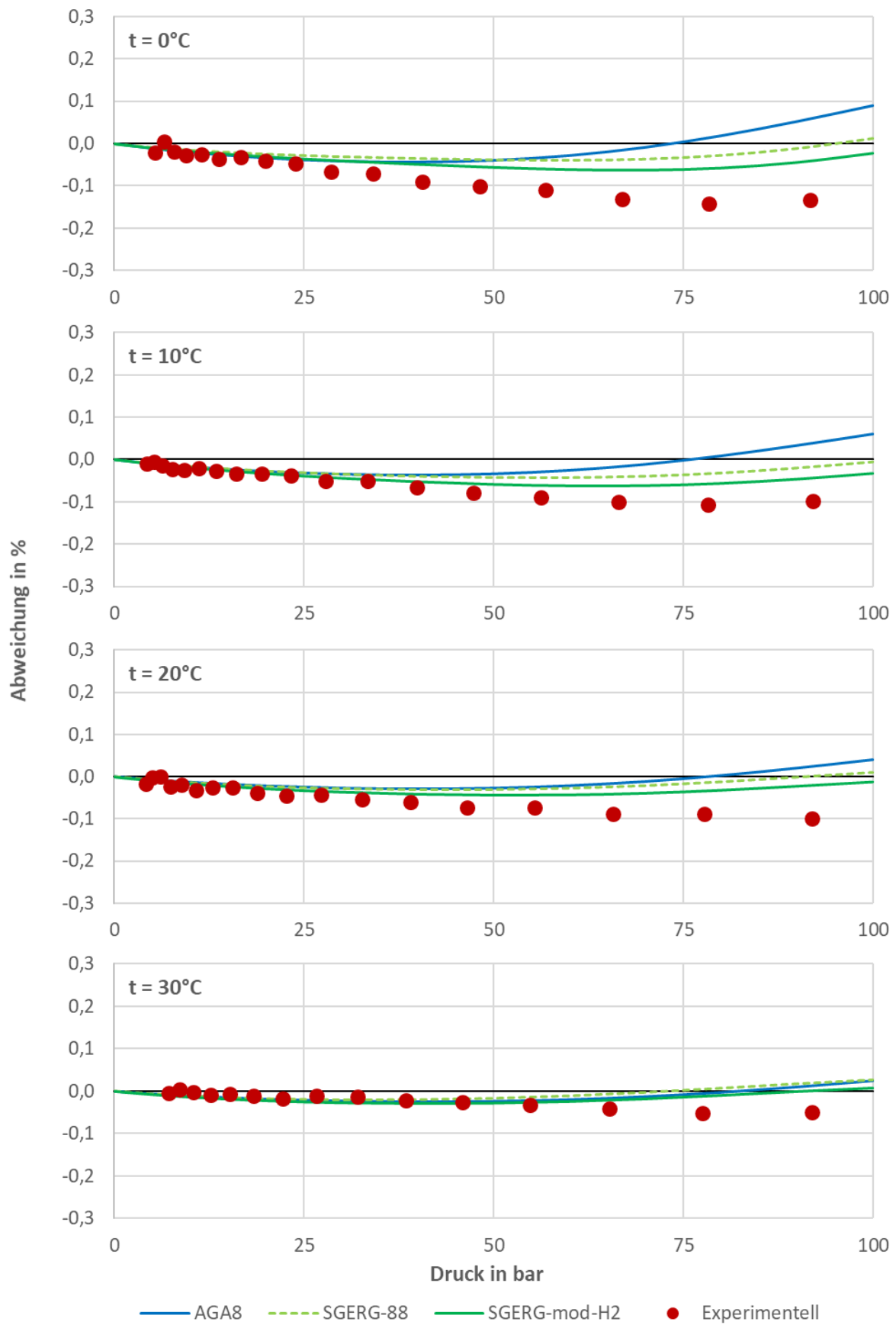
Anhang A1: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **N67** ($x_{\text{H}_2} = 2,3094 \text{ mol\%}$).



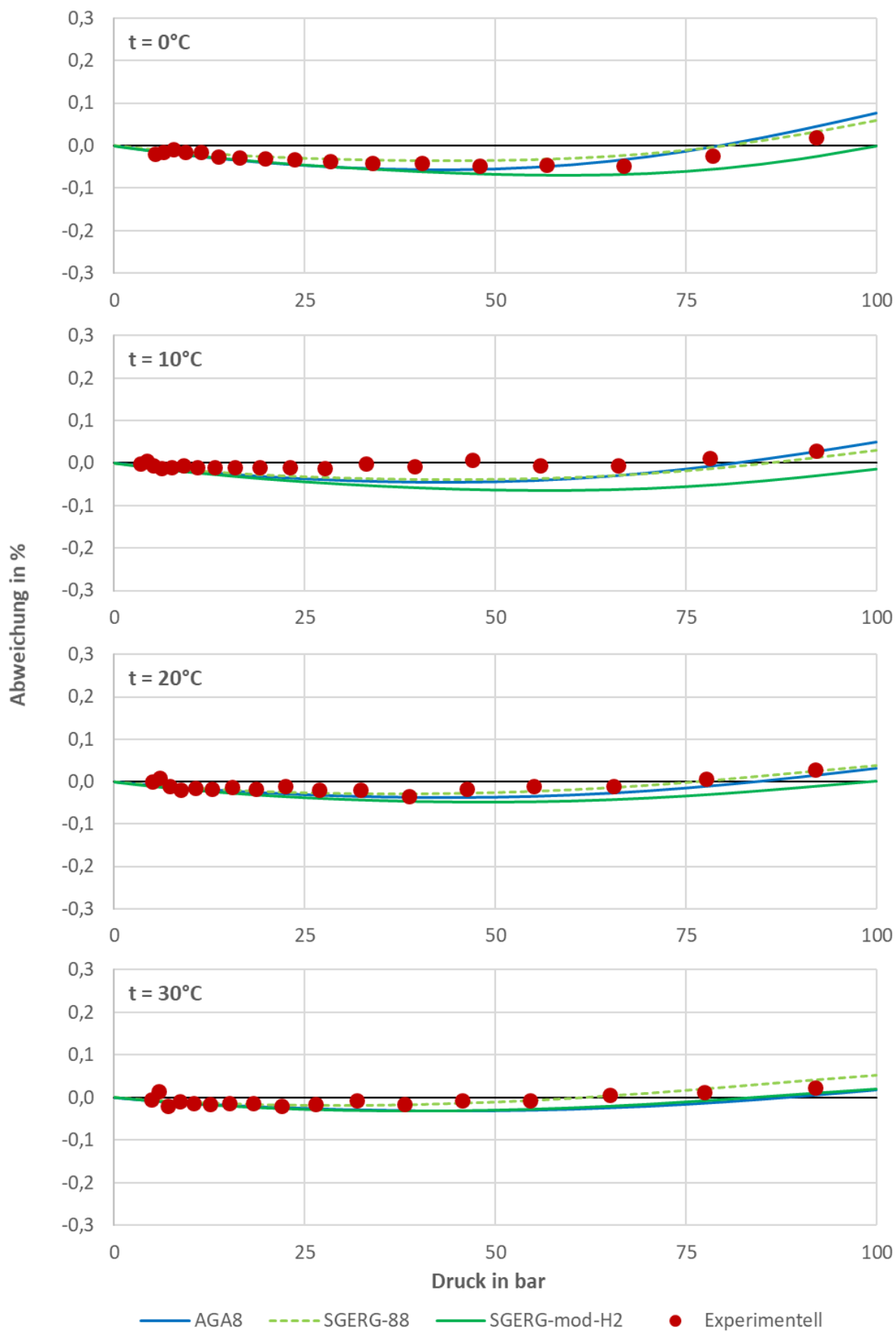
Anhang A2: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **N68** ($x_{\text{H}_2} = 4,1947 \text{ mol\%}$).



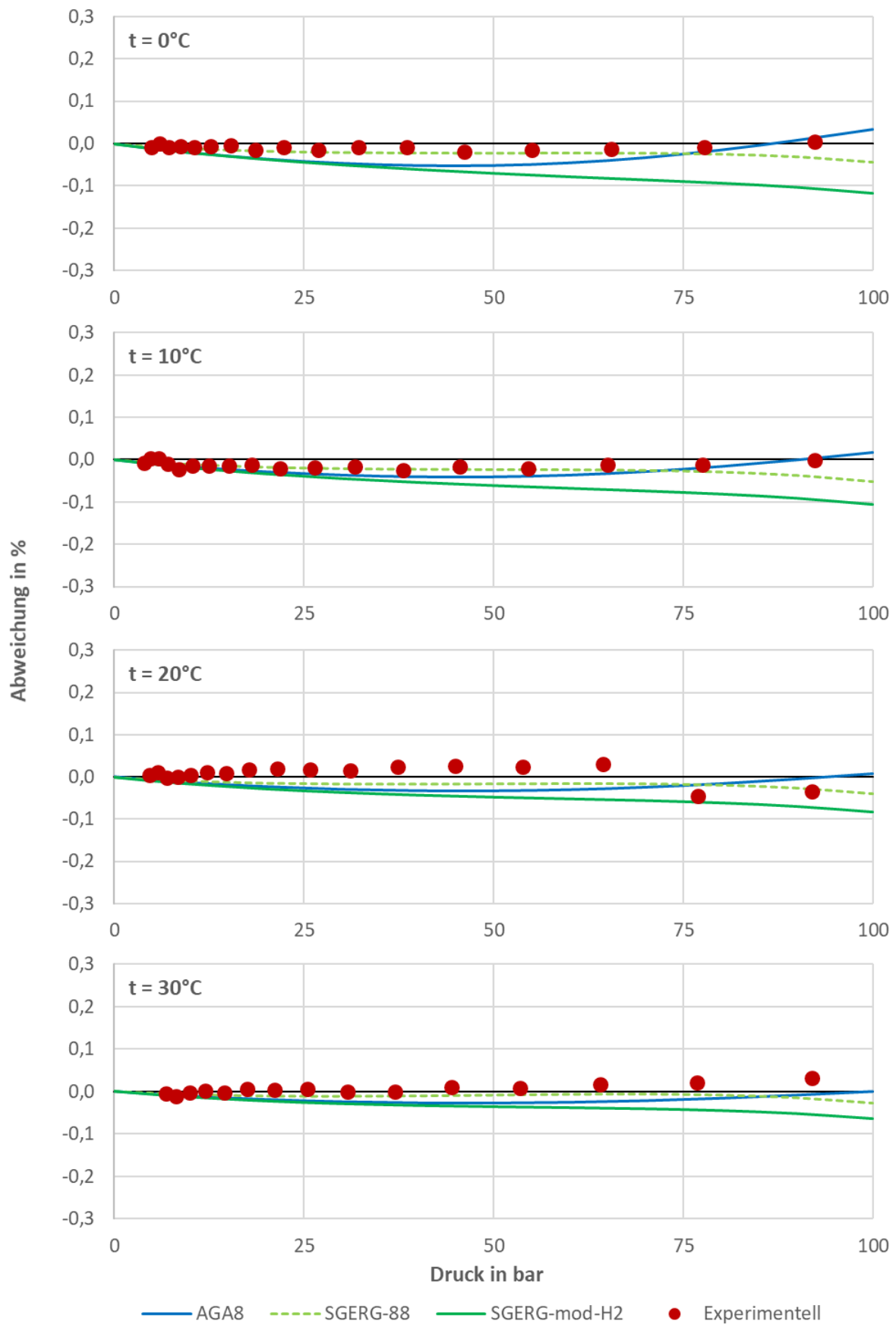
Anhang A3: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **N69** ($x_{\text{H}_2} = 9,3919 \text{ mol\%}$).



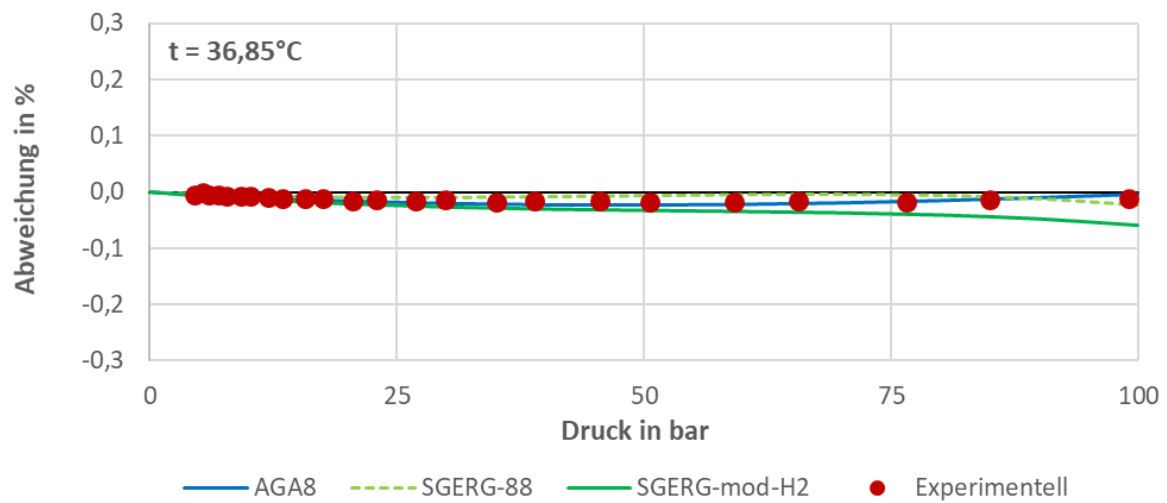
Anhang A4: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **N70** ($x_{\text{H}_2} = 2,2770 \text{ mol\%}$).



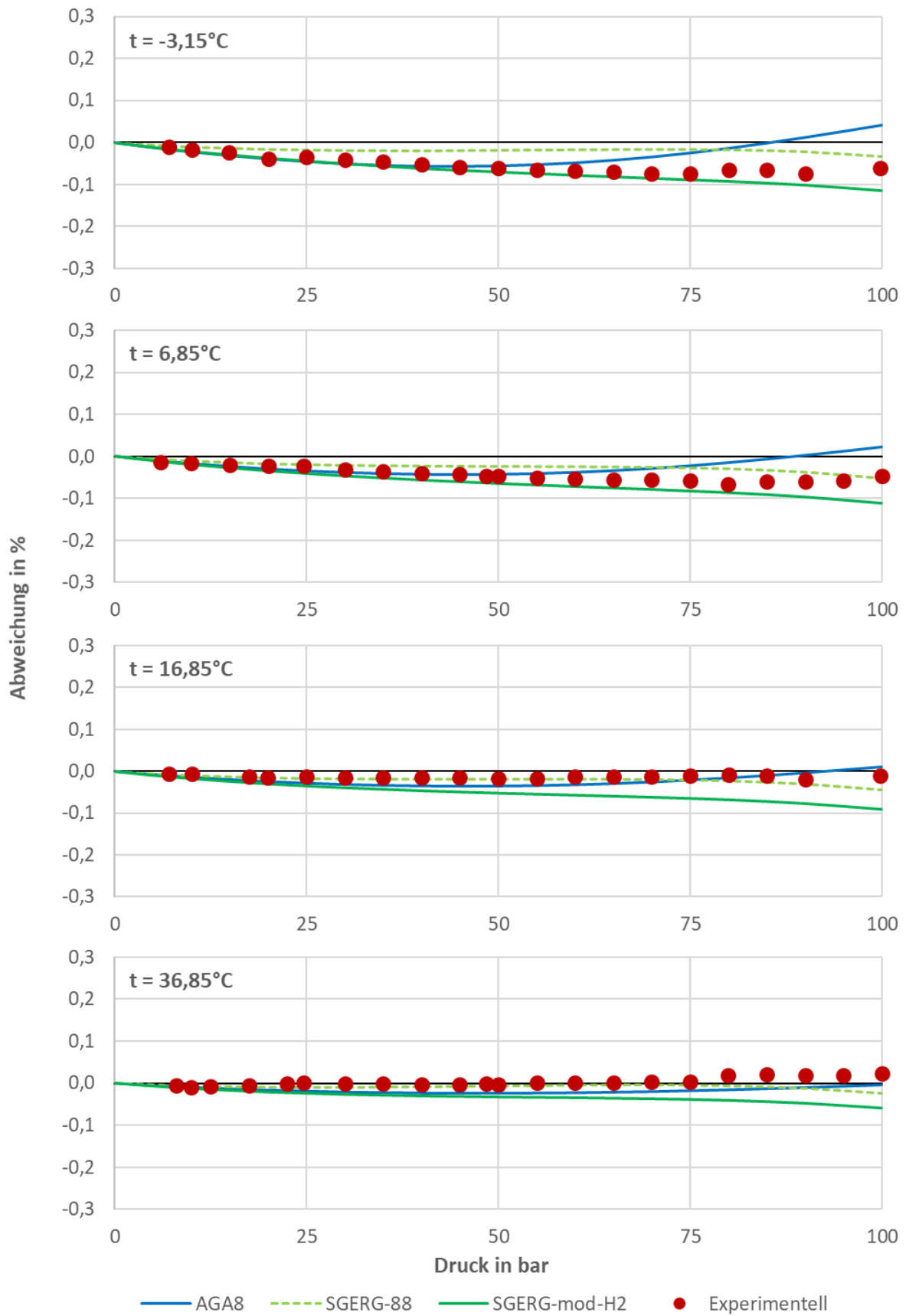
Anhang A5: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **N71** ($x_{\text{H}_2} = 4,2203 \text{ mol\%}$).



Anhang A6: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **N72** ($x_{\text{H}_2} = 9,4918 \text{ mol}\%$).

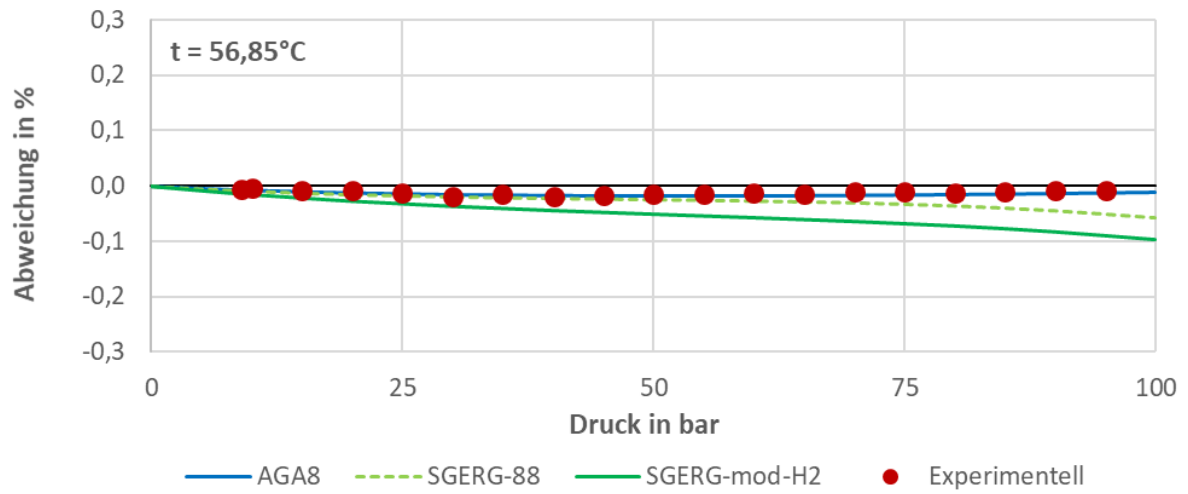


Anhang A7: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **N73** ($x_{H_2} = 9,4918$ mol%).

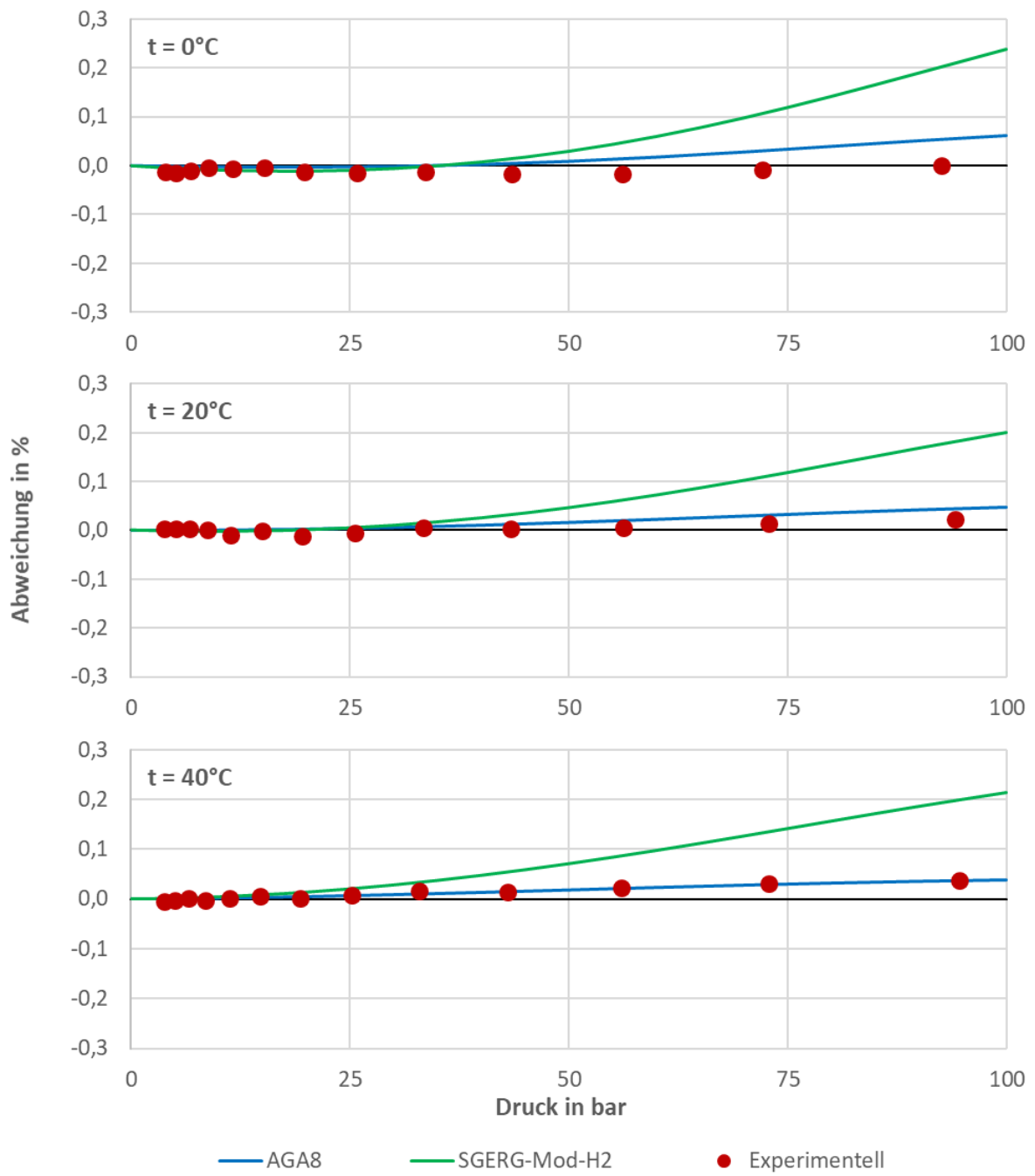


Anhang A8: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **N74** ($x_{H_2} = 9,4918 \text{ mol\%}$).

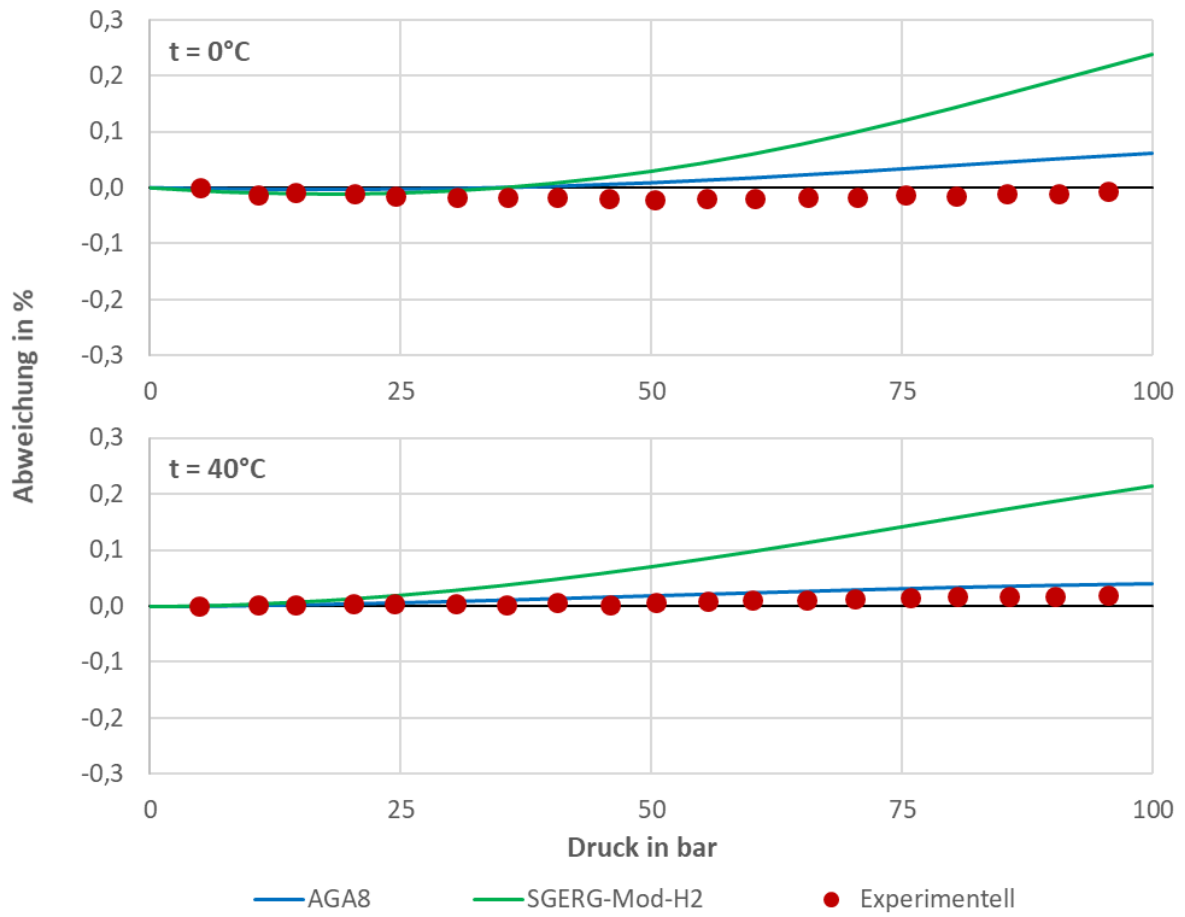
Fortsetzung Anhang A8



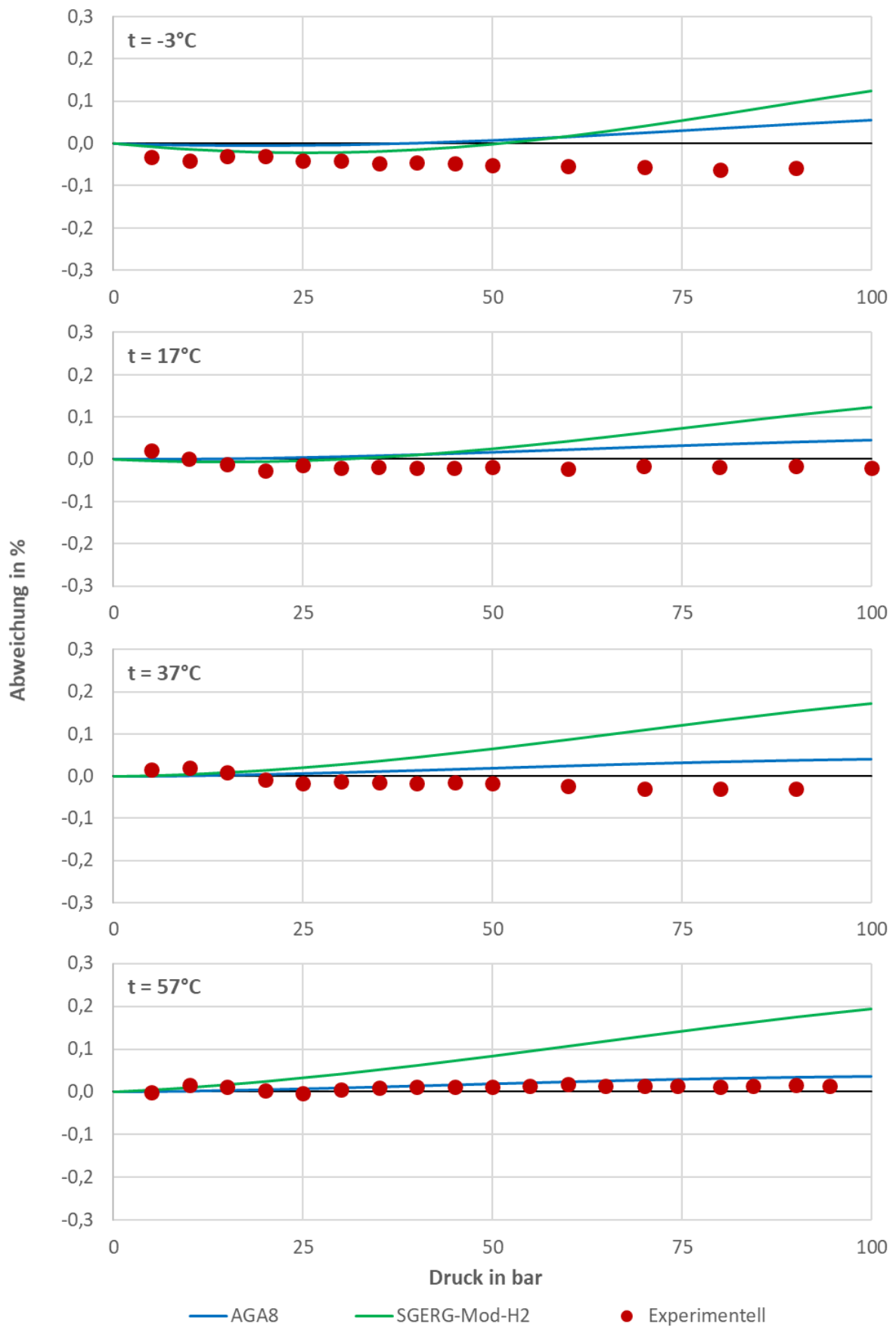
Anhang A8: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **N74** ($x_{H_2} = 9,4918$ mol%).



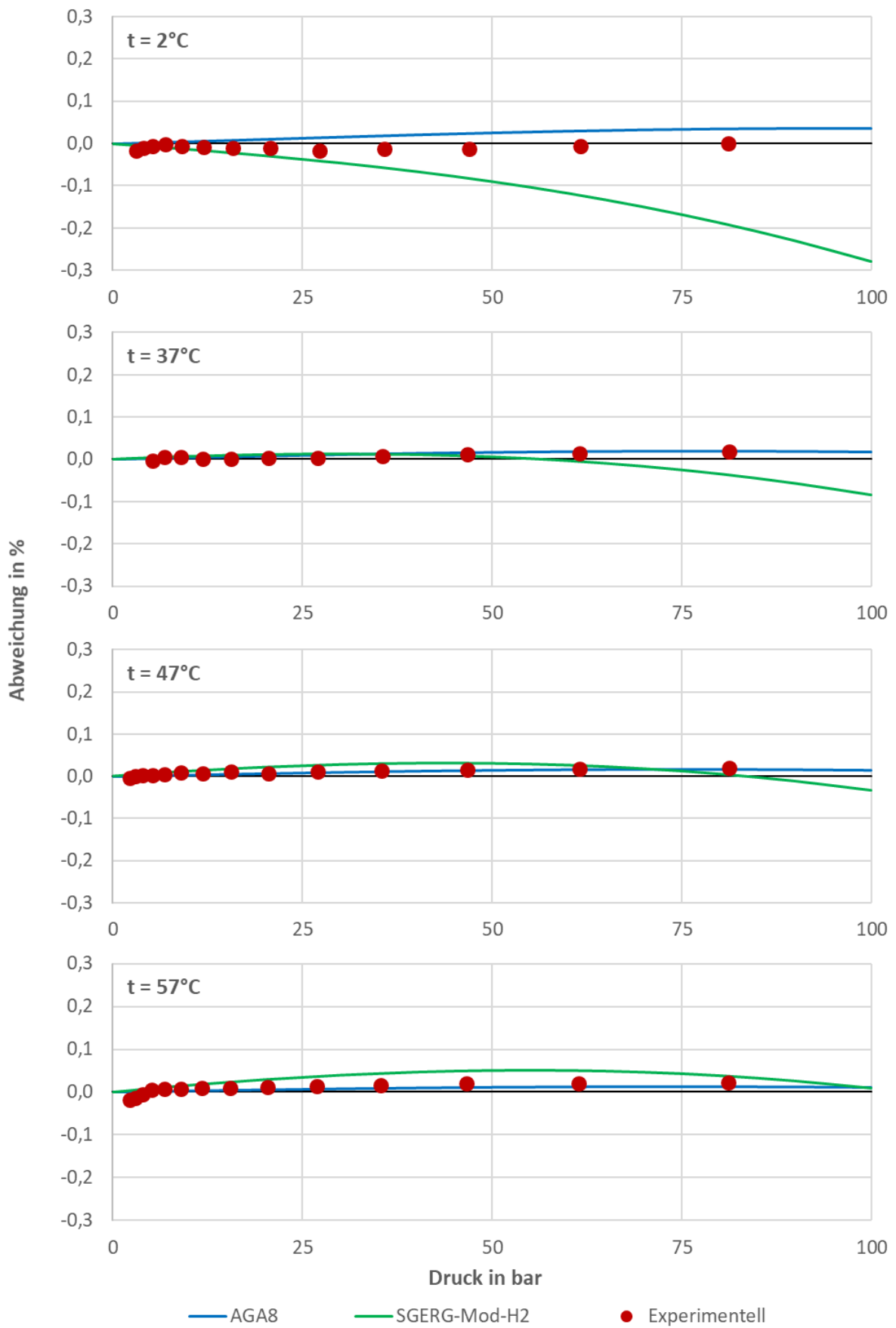
Anhang B1: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **B1** ($x_{\text{H}_2} = 15,020 \text{ mol\%}$).



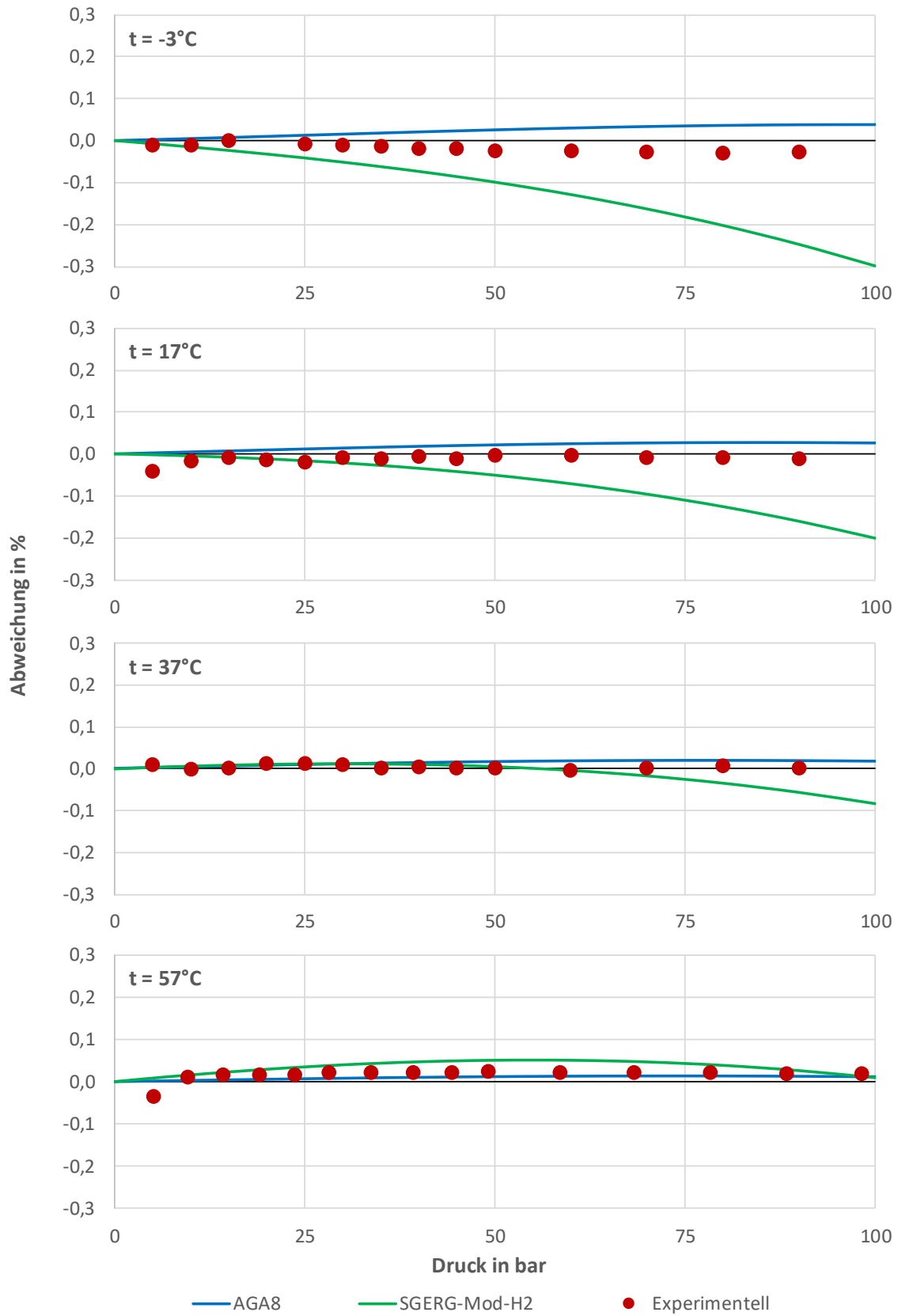
Anhang B2: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **B2** ($x_{H_2} = 15,020$ mol%).



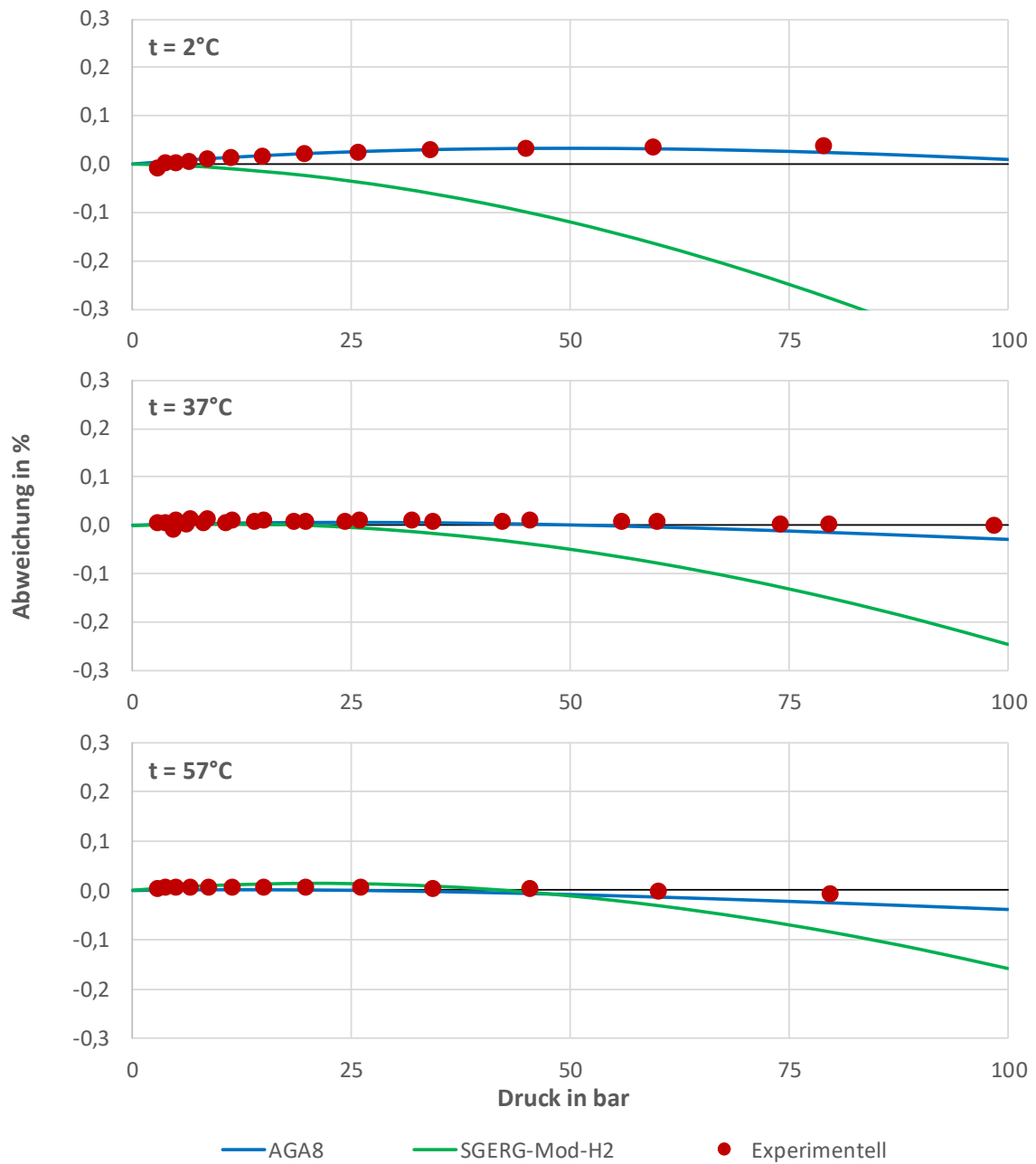
Anhang B3: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **B3** ($x_{\text{H}_2} = 25,309$ mol%).



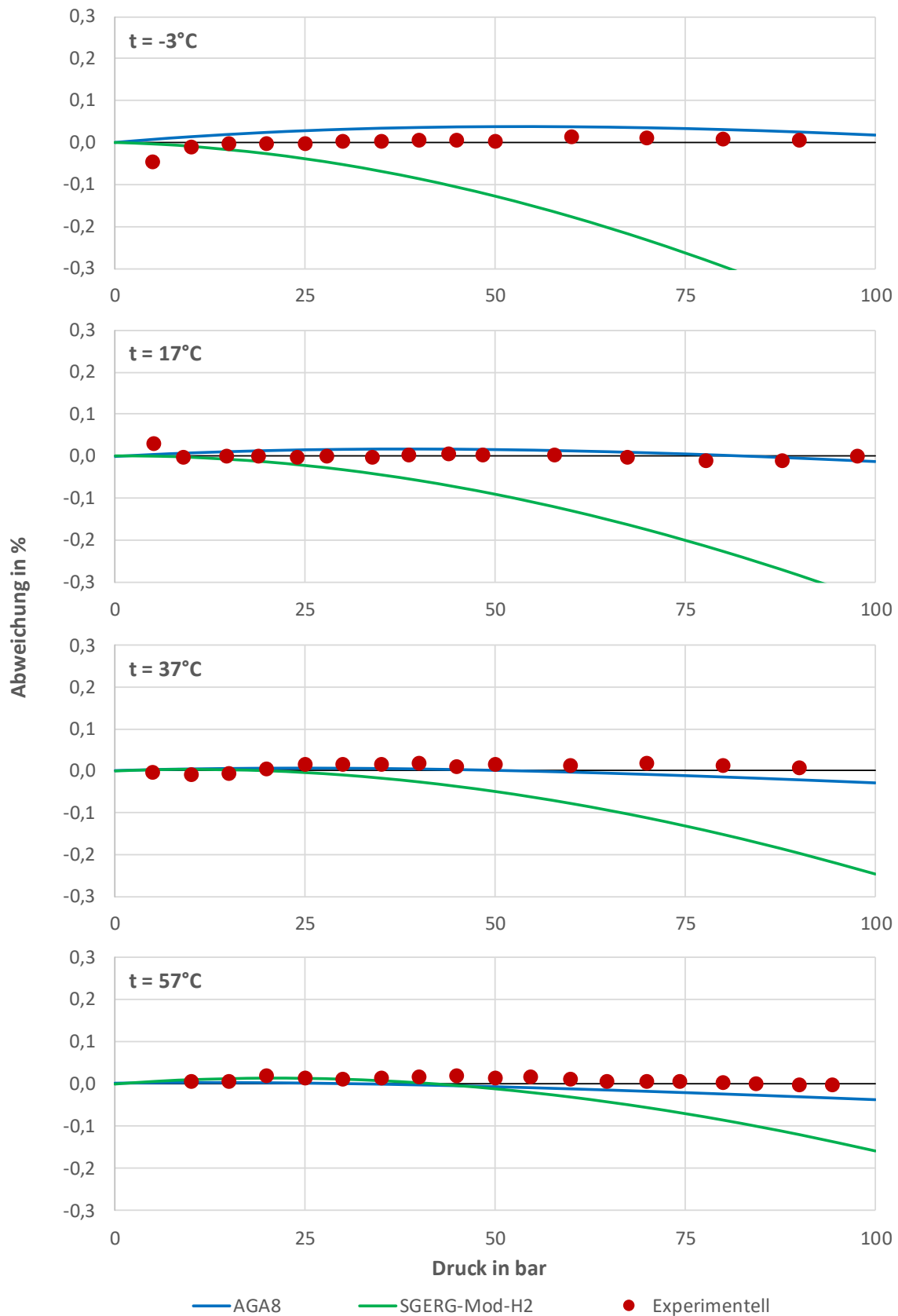
Anhang B4: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **B4** ($x_{\text{H}_2} = 50,266 \text{ mol\%}$).



Anhang B5: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **B5** ($x_{\text{H}_2} = 50,266 \text{ mol\%}$).



Anhang B6: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **B6** ($x_{\text{H}_2} = 74,940 \text{ mol\%}$).



Anhang B7: Abweichungen experimenteller und berechneter Realgasfaktoren von der GERG-2008 Gleichung für den Datensatz **B7** ($x_{\text{H}_2} = 74,940 \text{ mol\%}$).

Anhang D: Gasanalysen der G260 (Tabelle A.2) für den Vergleich der Zustandsgleichungen.

Komponente	Formelzeichen	Russland- Erdgas H	Nordsee- Erdgas H	Dänemark- Erdgas-H	Holland- Erdgas L	Weser/Ems Erdgas L
Methan	$x_i(\text{CH}_4)$	96,96	88,71	90,07	83,64	86,46
Stickstoff	$x_i(\text{N}_2)$	0,86	0,82	0,28	10,21	10,24
Kohlenstoffdioxid	$x_i(\text{CO}_2)$	0,18	1,94	0,60	1,68	2,08
Ethan	$x_i(\text{C}_2\text{H}_6)$	1,37	6,93	5,68	3,56	1,06
Propan	$x_i(\text{C}_3\text{H}_8)$	0,45	1,25	2,19	0,61	0,11
n-Butan	$x_i(\text{n-C}_4\text{H}_{10})$	0,15	0,28	0,90	0,19	0,03
2-Methylpropan	$x_i(\text{i-C}_4\text{H}_{10})$					
n-Pentan	$x_i(\text{n-C}_5\text{H}_{12})$	0,02	0,05	0,22	0,04	0,01
2-Methylbutan	$x_i(\text{i-C}_5\text{H}_{12})$					
n-Hexan	$x_i(\text{n-C}_6\text{H}_{14})$	0,01	0,02	0,06	0,07	0,01
n-Heptan	$x_i(\text{n-C}_7\text{H}_{16})$					
n-Oktan	$x_i(\text{n-C}_8\text{H}_{18})$					
n-Nonan	$x_i(\text{n-C}_9\text{H}_{20})$					
n-Dekan	$x_i(\text{n-C}_{10}\text{H}_{22})$					
Helium	$x_i(\text{He})$					
Argon	$x_i(\text{Ar})$					
Wasserstoff	$x_i(\text{H}_2)$					
Sauerstoff	$x_i(\text{O}_2)$					
Kohlenstoffmonoxid	$x_i(\text{CO})$					
Wasser	$x_i(\text{H}_2\text{O})$					
Schwefelwasserstoff	$x_i(\text{H}_2\text{S})$					
Summe		100,00	100,00	100,00	100,00	100,00

Anhang E: Modifikation der SGERG-mod-H2 (Fortran Source Code ISO12213-3)

```

C   SYNTAX :   CALL SGERG (X2,X3,HS,RM,X5,P,TC,Z,D)
C
C           The coefficients used in this program are conform with the
C           values of subroutine GAS682, from July 20,1988, appended to
C           report 8807, Van der Waals Laboratory, Amsterdam.
C
C           J.P.J. Michels   &   J.A. Schouten
C                   August 16, 1991
C
C           Values for the gas constant, molar masses, calorific values
C           and the density of air are conform with ISO/DIS 6976 (1991).
C
CCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCCC
C
SUBROUTINE SGERG (X2,X3,HS,RM,X5,P,TC,Z,D)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
IF( P.LT. 0.0 .OR. P .GT.120.0) STOP ' PRESSURE OUT OF RANGE '
IF(TC.LT.-10.0 .OR. TC.GT .65.0) STOP ' TEMPERATURE OUT OF RANGE '
CALL SGERG1 (P,TC,X2,X3,X5,HS,RM,Z,D)
RETURN
END
C
*****
SUBROUTINE SGERG1 (P,TC,Q2,Q3,Q5,QM,RM,Z,D)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
COMMON /RBLOK/ AMOL,HS
COMMON /XBLOK/ X1,X2,X3,X11,X12,X13,X22,X23,X33
>      ,X5,X7,X15,X17,X25,X55,X77
COMMON /MBLOK/ GM1R0,GM1R1,GM2,GM3,GM5,GM7,FA,FB,RL,T0,H5,H7,R
HS = QM
X3 = Q3
X5 = Q5
IF(RM.LT. 0.55.OR. RM.GT. 0.90) STOP 'REL. MASS OUT OF RANGE'
IF(RM.LT. 0.06.OR. RM.GT. 0.90) STOP 'REL. MASS OUT OF RANGE'
IF(X3.LT. 0.0 .OR. X3.GT. 0.30) STOP 'CO2 OUT OF RANGE'
IF(HS.LT.20.0 .OR. HS.GT.48.0 ) STOP 'CALOR. VALUE OUT OF RANGE'
IF(HS.LT.6.0.0 .OR. HS.GT.48.0 ) STOP 'CALOR. VALUE OUT OF RANGE'
IF((0.55+0.97*X3-0.45*X5).GT.RM)STOP 'CONFLICTING INPUT'
SM = RM*RL
X7 = X5*0.0964D0
X7 = 0D0

```

untere Grenze der rel.
Dichte auf „0.06“ setzen

Untere Grenze des Brenn-
wertes auf „6 MJ/m³“ setzen

Konsistenzprüfung Norm-
dichte unterdrücken

CO-Korrektur
unterdrücken

```

X33 = X3*X3
X55 = X5*X5
X77 = X7*X7
BEFF= 0.065D0
BEFF= 0D0
H = 1000.0D0
AMOL= 1.0D0 / (FA+BEFF)
K = 0
KK = 0
1 CALL SMBER(H,SMT1)
  IF (ABS(SM-SMT1) .GT. 1.D-6) THEN
    CALL SMBER(H+1.0D0,SMT2)
    DH= (SM-SMT1) / (SMT2-SMT1)
    H = H+DH
    KK = KK+1
    IF (KK.GT.20) STOP ' NO CONVERGENCY #1'
    GO TO 1
  END IF
X11 = X1*X1
X12 = X1*X2
X13 = X1*X3
X22 = X2*X2
X23 = X2*X3
X25 = X2*X5
X15 = X1*X5
X17 = X1*X7
CALL B11BER(T0,H,B11)
CALL BBER(T0,B11,BEFF)
AMOL= 1.0D0 / (FA+BEFF)
HSBER = X1*H*AMOL+(X5*H5+X7*H7)*AMOL
IF (ABS(HS-HSBER) .GT.1.0D-4) THEN
  K = K+1
  IF (K.GT.20) STOP 'NO CONVERGENCY #2'
  GO TO 1
END IF
IF (X2.GT.0.5) STOP 'CALC. N2 OUT OF RANGE'
IF (X2+X3.GT.0.5) STOP 'N2 + CO2 OUT OF RANGE'
IF (X2.LT.-0.01 .OR. (0.55+.4*X2+0.97*X3-0.45*X5) .GT.PM)
STOP 'CONFLICTING RESULT FOR N2'
+ IF (X2.LT.-0.01)
+ STOP 'CONFLICTING RESULT FOR N2'
```

Startwert für den 2. Virialkoeffizient auf „0“ setzen

Konzistenzprüfung Normdichte unterdrücken