

Инструкция к расчету 73 (dcsh73 версия 1.9)

1. Введение

В данной инструкции описывается интерфейс программы «Доп. расчет 73» и описываются ключевые моменты использования данного ПО.

Программа предназначена для анализа хроматограмм полученных при помощи ПО Хромос. Анализ хроматограмм происходит по методике СТО Газпром 5.5 — 2007 (только метод Б).

Для начала работы необходимо ознакомиться с СТО Газпром 5.5 — 2007.

2. Установка программы

После запуска установочного файла достаточно следовать инструкциям мастера установки. Вид установочного окна приведен на рисунке 1. По окончании установки на рабочем столе появится ярлык программы: «Доп Расчет 73» .

В случае если операционная система Windows выводит предупреждение об опасности при запуске установочной программы, необходимо найти в окне предупреждения надпись «**подробнее**» и нажать на нее, после чего появится кнопка «**Выполнить в любом случае**». После нажатия на данную кнопку установка пойдет в штатном режиме.

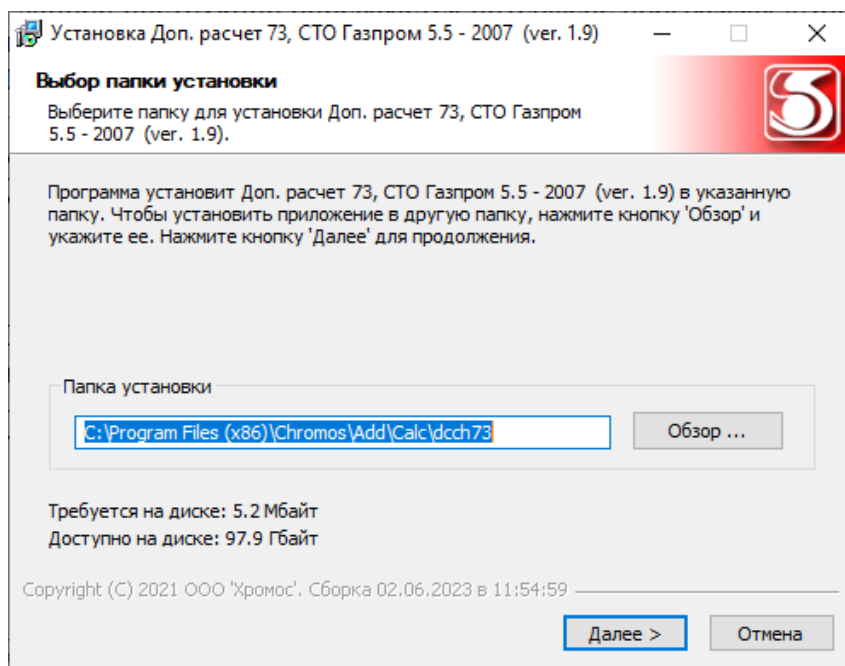


Рис 1. Окно установки программы

3. Внешний вид и элементы управления

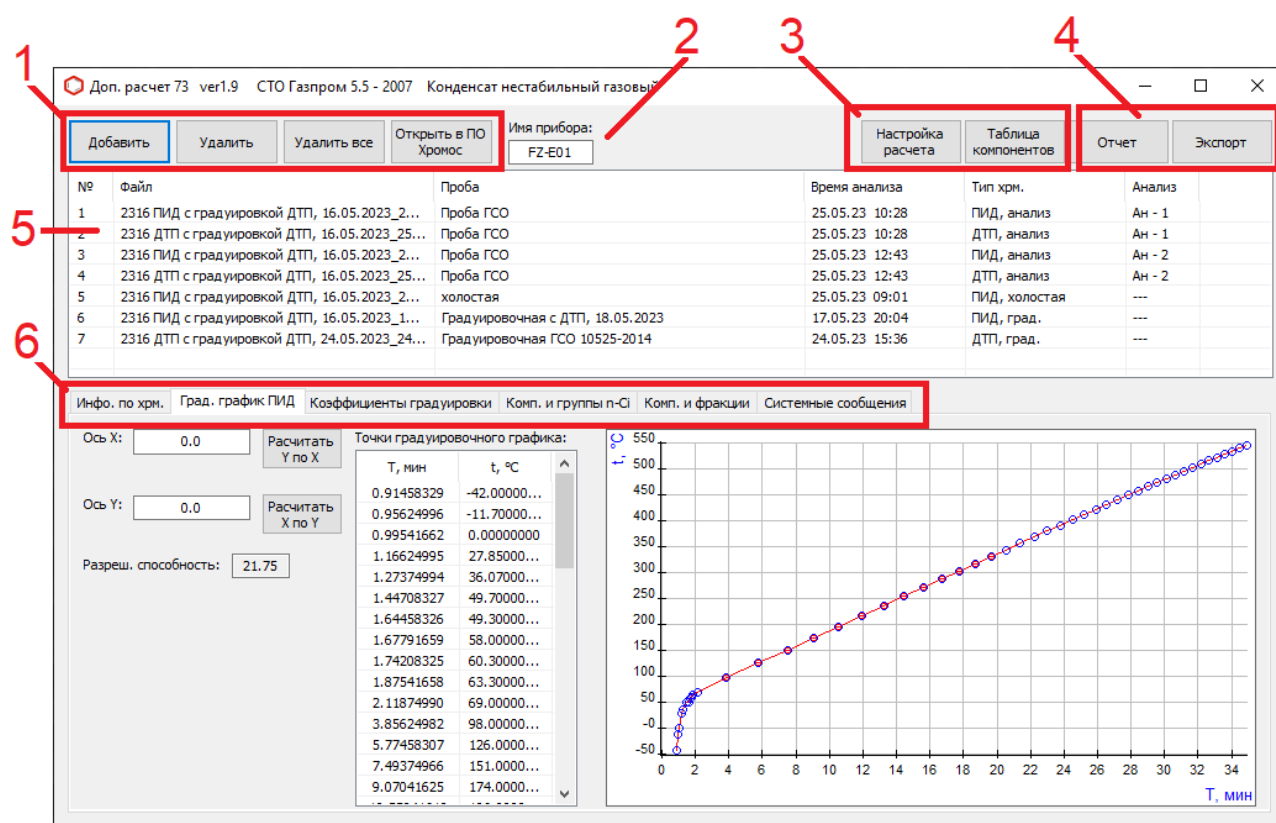


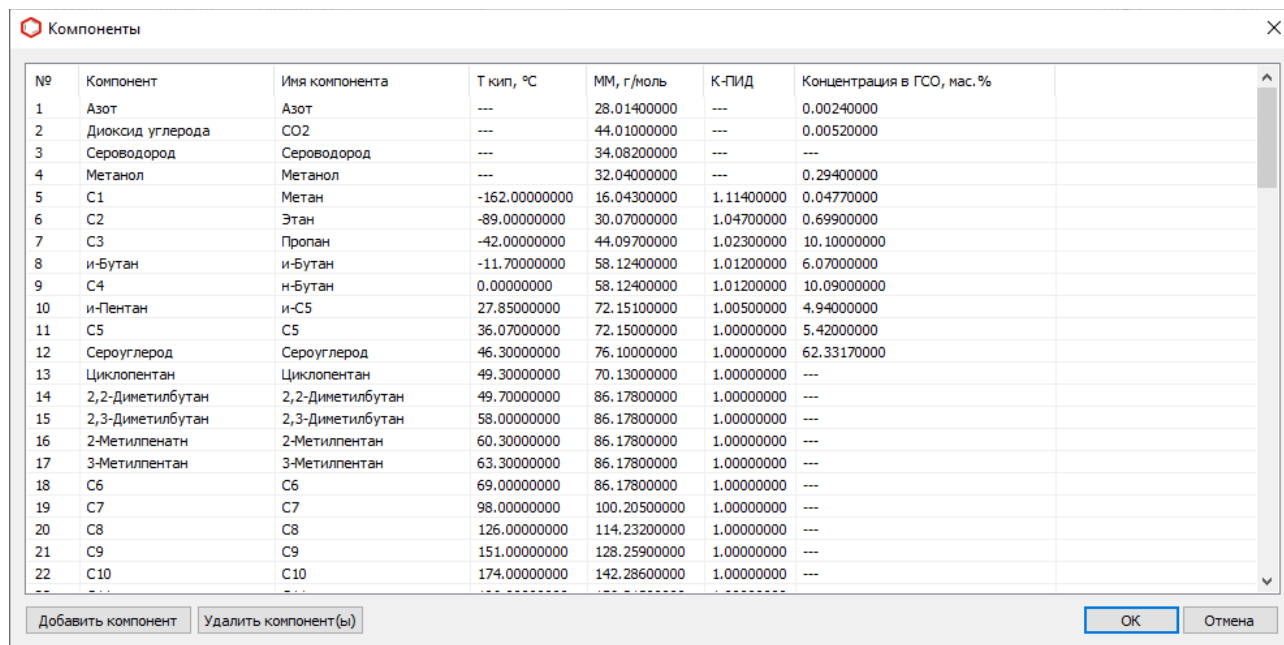
Рис 2. Внешний вид программы

На рисунке 2 изображен внешний вид основного окна программы.

Основное окно программы имеет следующие элементы управления:

- Над кнопкой «Добавить» в заголовке окна программы отображен значок программы — который является кнопкой и вызывает меню с дополнительными функциями, из него можно открыть окно информации «О программе»;
- 1 - Блок кнопок для управления списком хроматограмм (Добавление, Удаление, открытие в ПО Хромос);
- 2 - Поле ввода «Имя прибора» - данные из этого поля будут отображаться в отчете формируемом программой;
- 3 - Блок кнопок для управления параметрами программы;
- 4 - Блок кнопок для получения результирующих данных анализа в виде файлов;
- 5 - Список хроматограмм используемых для расчетов.
- 6 - Набор вкладок предоставляющих пользователю возможность получить не только результирующую информацию расчета, но и увидеть исходные данные, часть промежуточных расчетов или иную дополнительную информацию.

4. Таблица компонентов



№	Компонент	Имя компонента	T кип, °C	ММ, г/моль	К-ПВД	Концентрация в ГСО, мас. %
1	Азот	Азот	---	28.01400000	---	0.00240000
2	Диоксид углерода	СО2	---	44.01000000	---	0.00520000
3	Сероводород	Сероводород	---	34.08200000	---	---
4	Метанол	Метанол	---	32.04000000	---	0.29400000
5	С1	Метан	-162.00000000	16.04300000	1.11400000	0.04770000
6	С2	Этан	-89.00000000	30.07000000	1.04700000	0.69900000
7	С3	Пропан	-42.00000000	44.09700000	1.02300000	10.10000000
8	и-Бутан	и-Бутан	-11.70000000	58.12400000	1.01200000	6.07000000
9	С4	н-Бутан	0.00000000	58.12400000	1.01200000	10.09000000
10	и-Пентан	и-С5	27.85000000	72.15100000	1.00500000	4.94000000
11	С5	С5	36.07000000	72.15000000	1.00000000	5.42000000
12	Сероуглерод	Сероуглерод	46.30000000	76.10000000	1.00000000	62.33170000
13	Циклопентан	Циклопентан	49.30000000	70.13000000	1.00000000	---
14	2,2-Диметилбутан	2,2-Диметилбутан	49.70000000	86.17800000	1.00000000	---
15	2,3-Диметилбутан	2,3-Диметилбутан	58.00000000	86.17800000	1.00000000	---
16	2-Метилпентан	2-Метилпентан	60.30000000	86.17800000	1.00000000	---
17	3-Метилпентан	3-Метилпентан	63.30000000	86.17800000	1.00000000	---
18	С6	С6	69.00000000	86.17800000	1.00000000	---
19	С7	С7	98.00000000	100.20500000	1.00000000	---
20	С8	С8	126.00000000	114.23200000	1.00000000	---
21	С9	С9	151.00000000	128.25900000	1.00000000	---
22	С10	С10	174.00000000	142.28600000	1.00000000	---

Рис. 3 Таблица компонентов

Для редактирования параметра компонентов, а так же для задания необходимых имен компонентов необходимо вызвать окно «**Компоненты**» нажав кнопку «**Таблица компонентов**» в главном окне программы (рис 2).

Таблица компонентов включает в себя справочные данные о компонентах, которые предположительно могут содержаться в пробах анализируемых по СТО Газпром 5.5 — 2007.

Данные в таблице могут быть отредактированы пользователем при необходимости. Для начала редактирования достаточно 2 раза кликнуть левой кнопкой мышки по выбранной ячейке и ввести требуемое значение. Поле редактирования нажатие кнопки «**ОК**» сохранит внесенные изменения, нажатие же кнопки «**Отмена**» или закрытие окна отменит внесенные изменения.

Таблица содержит 2 поля для имени компонента — это требуется для сопоставления имен из хроматограммы с именами компонентов используемых внутри программы. Потому если в хроматограмме имена компонентов отличаются от имен в таблице программы, то достаточно изменить имя в поле «**Имя компонента**».

В таблице есть ячейки с прочерками из-за то го что не для всех компонентов даны справочные значения в используемых нормативных документах и соответственно в них нет нужды. Но эти данные можно вписать при необходимости.

Сброс параметров компонентов можно осуществить путем переустановки программы.

5. Настройка расчета

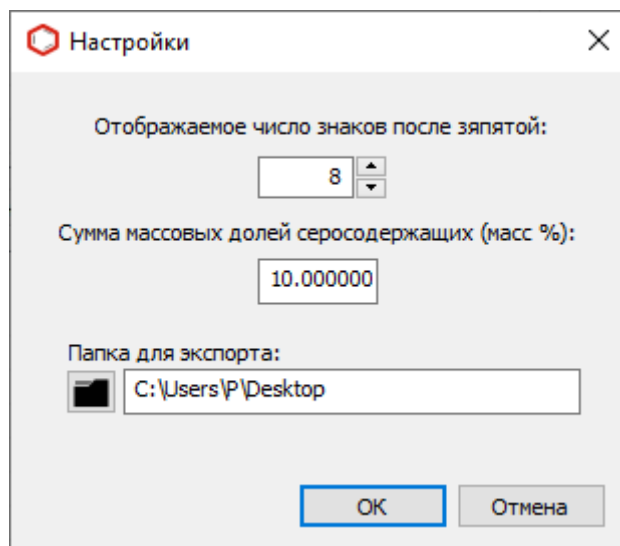


Рис. 4 Окно «Настройки»

Для настройки расчета необходимо вызвать окно настроек (рис 4) нажав кнопку «**Настройка расчета**» в главном окне программы (рис 2). В данном окне можно задать некоторые параметры программы:

- Поле «**Отображаемое число знаков после запятой**» - задает формат отображаемых чисел в программе и отчете, точнее число знаков после запятой.
- Поле «**Сумма массовых долей серосодержащих**» - задает массовую долю серосодержащих для учета их при расчете компонентов. Подробнее в разделе 8 данной инструкции.
- Поле «**Папка для экспорта**» - отображает путь к папке в которой будут сохраняться файлы электронных таблиц используемые для экспорта результатов расчета. Подробнее раздел 6 данной инструкции.

6. Формирование файлов с результатами расчета

Данная программа может результирующие данные предоставить в трех разных форматах файлов:

- Отчет в формате **OpenDocument**. Это файл с расширением «**.odt**» и представляет собой обычный текстовый формат. Подходит для печати на принтере.
- Файл экспорта с расширением «**.xml**». Файл подходящий для чтения другими программами.
- Файл электронных таблиц с расширением «**.XLSX**». Имеет самый широкий набор данных что бы можно было провести «ручную» проверку полученных результатов. Так же подходит для обработки сторонними программами.

Для формирования файлов формата «**.odt**» и «**.xml**» необходимо вызвать

окно «**Отчет**», нажав одноименную кнопку в главном окне (рис 2). Внешний вид окна представлен на рисунке 5. В окне формирования отчета можно настроить содержимое отчета и задать путь сохранения файла экспорта формата «.xml».

Отчет формируется кнопками «**Просмотр**» и «**Сохранить**». Создание файла экспорта происходит при нажатии кнопки «**Экспорт**», при нажатии данной кнопки будет сформирован файл экспорта по указанному пути.

Нажатие кнопки «**Просмотр**» откроет сформированный документ, но НЕ сохранит его на диске. Для его сохранения необходимо воспользоваться возможностями программы в которой был открыт документ, либо нажать кнопку «**Сохранить**». Нажатие кнопки сохранения запустит окно выбора места сохранения и в выбранном месте сформирует новый отчет.

Для формирования файла с электронными таблицами сначала необходимо задать папку для сохранения файлов электронных таблиц. Папка задается в настройках программы (рис 4). Если папка уже задана, то достаточно нажать кнопку «**Экспорт**» в главном окне программы (рис 2), после успешно сохранения файла программа покажет окно с сообщением об окончании экспорта.

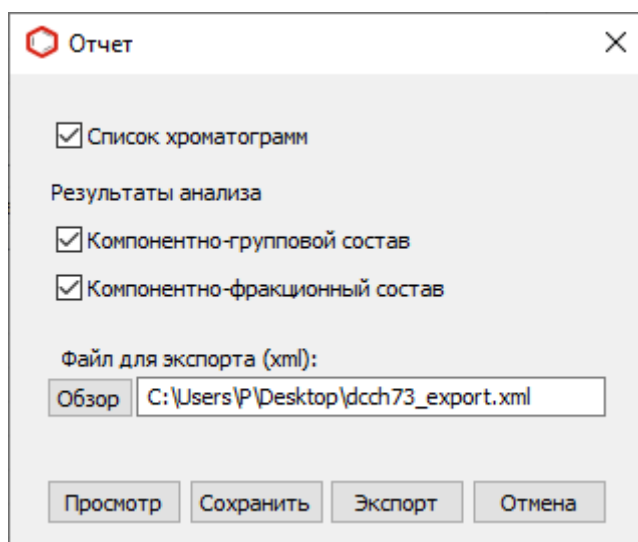


Рис. 5 Окно «Отчет»

7. Подготовка хроматограмм

Для работы с дополнительным расчетом 73, хроматограммы должны быть снабжены «маркерами» (помечены в соответствии с типом хроматограммы). Маркерами являются ключевые слова вписываемые в поля ввода паспорта хроматограммы или метода. Эти «маркеры» можно посмотреть/отредактировать в ПО Хромос; необходимые данные содержатся в паспорте хроматограммы.

Поле «**Метод**» должно содержать тип детектора. Детекторы могут быть следующие:

- **ПВД**
- **ДТП**

Поле «**Метод**» заполняется автоматически при анализе в зависимости от выбранного метода, потому название метода должно включать в себя выше перечисленные ключевые слова.

Поле «**Проба**» должно содержать тип хроматограммы. Ключевые слова типов хроматограмм:

- **холостая**
- **градуировочная**
- **проба (или анализ)**

8. Обработка данных и методика расчета

Для корректной работы требуются следующие хроматограммы:

- 1 хроматограмма холостого анализа полученная на ПВД детекторе;
- 1 градуировочная хроматограмма полученная на ДТП детекторе;
- 1 градуировочная хроматограмма полученная на ПВД детекторе;
- 2 хроматограммы анализируемой пробы с ДТП детектора;
- 2 хроматограммы анализируемой пробы с ПВД детектора;

Это минимальный набор хроматограмм соответствующий условиям СТО Газпром 5.5-2007. **НО!** В программе добавлена возможность вести расчет только по хроматограммам с ПВД детектора — что не соответствует выше указанному нормативному документу и результаты расчета могут использоваться исключительно в ознакомительных целях.

Хроматограммы которые не соответствуют требованиям из раздела 7 данной инструкции не будут добавлены в список программы при попытке их открыть.

Обработка данных начинается сразу же после открытия необходимого числа хроматограмм.

Для расчета из хроматограмм берутся следующие данные:

- Массив «точек» (значения сигнала детектора во времени)
- Имена компонентов
- Площади

- Времена выхода

Остальные значения в программе являются результатом обработки перечисленных данных.

Основная методика и последовательность расчета полностью взяты из СТО Газпром 5.5 - 2007 (метод Б), потому ниже будут описаны только основные моменты и уточнения!

1. Площади и времена выхода углеводородных компонентов, для углеводородов от C1 до C3 и для метанола берутся из хроматограмм с детектора ДТП. Данные для углеводородов начиная с C4 и выше берутся из хроматограмм с детектора ПИД.
2. Формула 8.1 и 8.2 применяется к углеводородам, углеводородам с C1 до C4 и к метанолу. Формула 8.3 применяется к C4, C5, к температурным фракциям, а так же к углеводородным группам от C6 и выше.
3. Обработка анализируемых хроматограмм полученных на детекторе ПИД выполняется по ASTM D 2887-2013.
4. При обработке хроматограмм по ASTM D 2887-2013, выполняется вычитание хроматограммы холостого анализа из хроматограмм анализируемой пробы полученных на детекторе ПИД, что оказывает влияние на площади углеводородов, размечаемых фракций и углеводородных групп! Это стоит учитывать при ручной проверки результирующих данных.
В экспортируемом файле электронных таблиц приведенные площади уже являются результатом этого вычитания потому могут напрямую применяться для проверки результатов расчета.
5. Формула 8.3 из СТО Газпром 5.5-2007 немного изменяется в случаи задания массовой доли серосодержащих в настройках программы! Это необходимо для учета серосодержащих компонентов в пробе. Она будет иметь следующий вид:

$$X_i^Y = \frac{S_i \cdot K_i \cdot (100 - C_s - \sum X_i)}{\sum S_i \cdot K_i}$$

где C_s – массовая доля серосодержащих.