

# Инструкция к расчету 108

## Введение

В данной инструкции описывается интерфейс программы «Доп. расчет 108» и описываются ключевые моменты использования данного ПО.

Программа предназначена для анализа хроматограмм полученных при помощи ПО Хромос. При анализе хроматограмм происходит вычисление теплоты сгорания, плотности, относительной плотности и числа Воббе на основе компонентного состава по ГОСТ 31369—2021.

Для начала работы необходимо ознакомиться со следующим документом:

- ГОСТ 31369—2021

## Установка

После запуска установочного файла достаточно следовать инструкциям мастера установки. Вид установочного окна приведен Рис. 1. По окончании установки на рабочем столе появится ярлык программы: «Доп Расчет108».

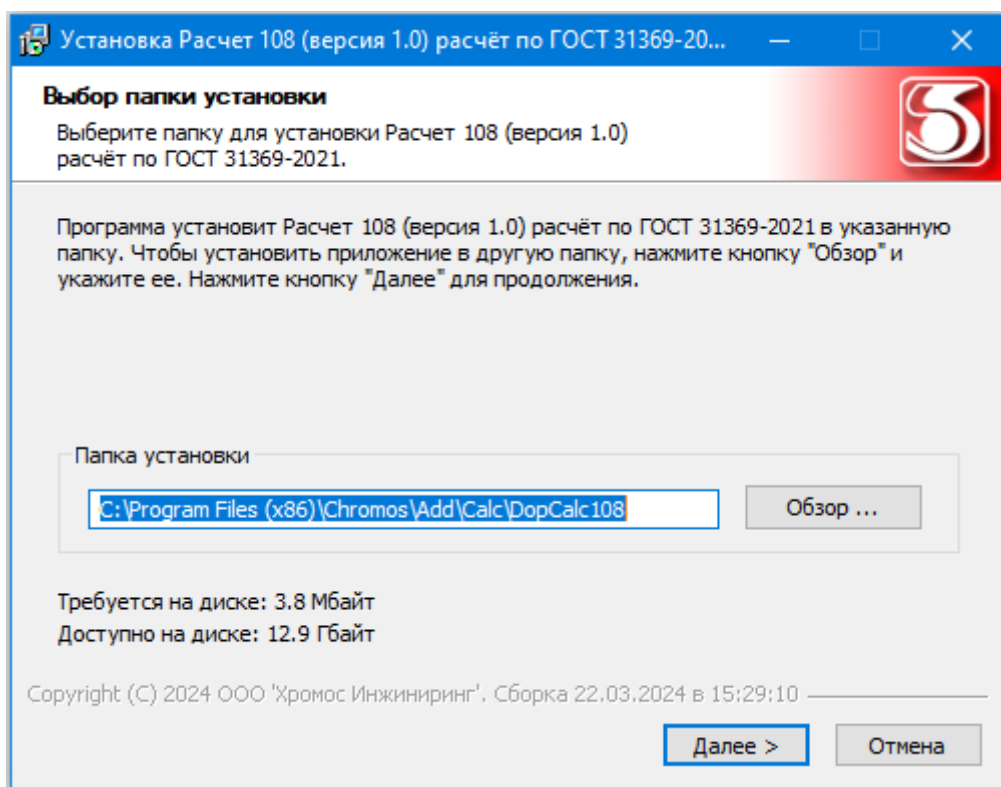


Рис. 1 Установка программы

# Интерфейс программы

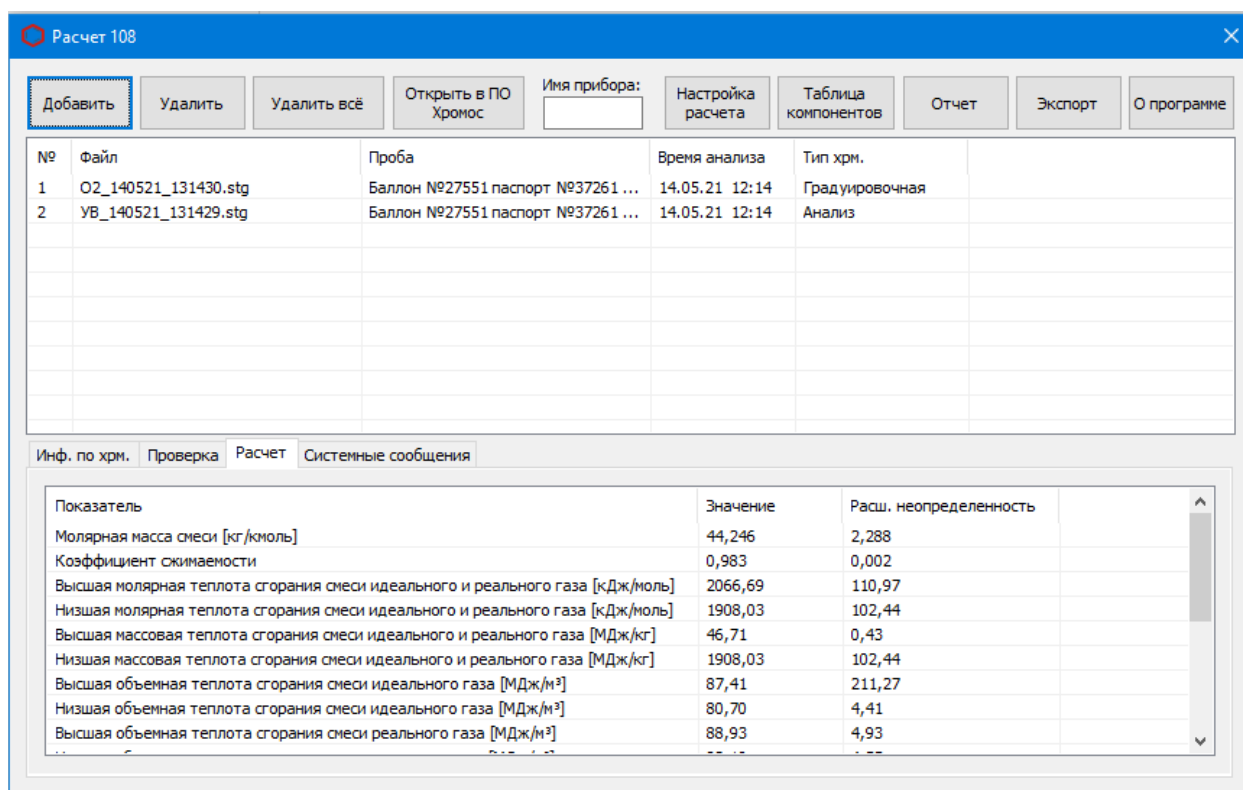


Рис. 2 Главное окно программы

## Открытие и удаление хроматограмм

Для добавления файлов хроматограмм используются кнопка Рис. 2 «Добавить». При нажатии этой кнопки вызывается окно открытия хроматограмм Рис. 3. Используя кнопку клавиатуры «ctrl» или «shift» можно выбрать несколько файлов одновременно, после выбора нужных хроматограмм следует нажать кнопку «Открыть».

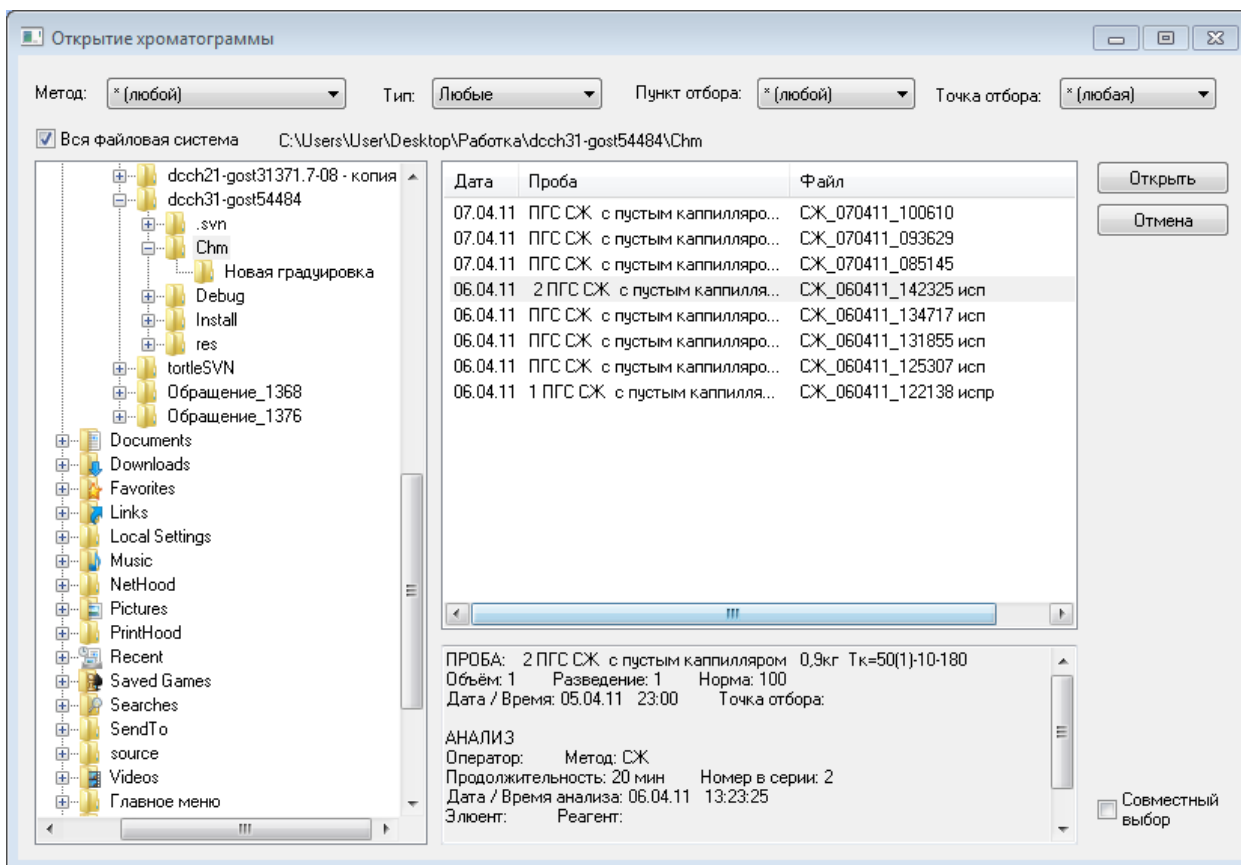


Рис. 3 Окно открытия хроматограмм

Выбранные хроматограммы отобразятся в основном окне Рис. 2. Если выбраны подходящие хроматограммы, то сразу будет проведен полный расчет. Для расчета достаточно добавить 2 хроматограммы.

Для удаления хроматограмм из списка открытых файлов есть 2 кнопки «Удалить все» и «Удалить» Рис. 2. При нажатии кнопки «Удалить все» будет полностью очищен список файлов и очистятся все результаты расчетов. При нажатии кнопки «Удалить» будут удалены выбранные хроматограммы и произойдет пересчет всех результатов.

**Кнопки удаления НЕ удаляют файлы с диска, происходит только их исключение из анализа (из программы)!!!**

## Изменение данных

Если в хроматограмме названия компонентов отличаются от данных в таблицах ГОСТов, то во вкладке Данные Рис. 4 их можно отредактировать. Так же обязательно нужно отредактировать столбец «Молярная доля, пасп.» и при желании «Коэфф. сжимаемости» для корректного проведения расчета.

№	Компонент	Имя в хроматограмме	Объемная доля, паспорта	Кэфф. сжимаемости
1	Метан	Метан	0,000	0,998
2	Этан	Этан	0,000	0,992
3	Пропан	Пропан	15,006	0,983
4	и-бутан	и-бутан	12,900	0,971
5	н-Бутан	н-Бутан	2,222	0,968
6	и-пентан	и-пентан	22,002	0,953
7	н-Пентан	н-Пентан	0,000	0,945
8	Неопентан	Неопентан	33,933	0,959
9	н-Гексан	н-Гексан	0,000	0,919
10	н-Гептан	н-Гептан	0,000	0,876
11	н-Октан	н-Октан	0,000	0,817
12	Бензол	Бензол	0,000	0,936
13	Толуол	Толуол	0,000	0,892
14	Диоксид углерода	Диоксид углерода	0,000	0,995
15	Гелий	Гелий	0,000	1,001
16	Водород	Водород	0,000	1,001
17	Кислород	Кислород	1,002	0,999

Рис. 4 Окно данных

## Результаты расчетов

Все результаты расчетов находятся на главном окне Рис. 2. Каждый результат в своей вкладке.

- Вкладка «Инф. по хрм.» - содержит информацию по компонентам в открытых файлах. В случае, если компонент в хроматограмме неизвестен в расчете, он помечается красным крестом, в остальных случаях зеленой галкой.
- Вкладка «Проверка» - содержит проверку согласно требованиям ФР 1.13.2013.14306. В случае несоответствия строка помечается красным оттенком.
- Вкладка «Расчет» - содержит результаты всех вычислений по ГОСТ 31369-2021.

## Настройка программы

Если в хроматограммах концентрации указаны в молярных долях в настройках следует выбрать опцию «Молярная доля», если в объемных долях, то «Объемная доля» Рис. 5.

Для расчета по ГОСТ 31369-2021 нужно указать температуру измерений (0, 15, 15.55, 20) и температуру сгорания (0, 15, 15.55, 20, 25).

В программе можно указать до какого знака округлять результаты. Разные варианты округления показаны в окне настроек, так же есть возможность округления по ГОСТ 31369-2021.

Путь к программе передачи данных и дополнительные параметры экспорта.

Настройки

Величина доли измерения компонентов

Молярная доля

Объемная доля

Температура измерений [°C] 20

Температура сгорания [°C] 25

Округление

	ГОСТ	
Молярная теплота сгорания [кДж/моль]	<input checked="" type="checkbox"/>	3
Массовая теплота сгорания [МДж/кг]	<input checked="" type="checkbox"/>	3
Объемная теплота сгорания [МДж/м³]	<input checked="" type="checkbox"/>	3
Плотность [кг/м³]	<input checked="" type="checkbox"/>	3
Число Воббе [МДж/м³]	<input checked="" type="checkbox"/>	3
Остальные		3

Путь к программе для передачи данных:

CMD

Дополнительные параметры:

/C move /Y %F D:\export.csv

OK Отмена

Рис. 5 Окно настроек расчета

## Формирование отчета

При нажатии по кнопке «Отчет» на главном окне появится окно отчета Рис. 6. На окне отчета можно выбрать входящие параметры в отчет.

Получить результаты расчетов можно путем формирования отчета, для это есть 2 кнопки: «Просмотр» и «Сохранить». При нажатии кнопки «Просмотр» формируется отчет и открывается. При нажатии кнопки «Сохранить» формируется отчет и открывается окно для сохранения файла.

Файл сохраняется в формате **odt** и может быть открыт любым офисным пакетом.

По умолчанию имя файла имеет вид: Report108 28112023\_133649.odt

Где

**Report108** - отчет 108(имя программы);

**28112023** – 28.11.2023г(дата);

133649 – 13:36:49(часы, минуты, секунды);  
.odt - формат файла.

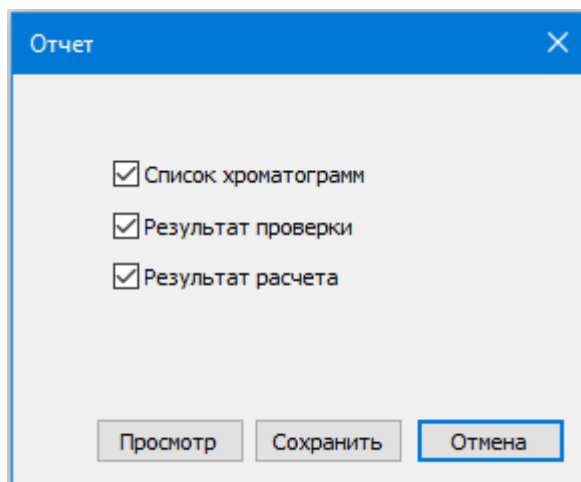


Рис. 6 Окно отчета

## Экспорт

Чтобы экспортировать данные о проведенном расчете сначала зайдите в настройки и настройте экспорт Рис. 5:

- В поле Путь к программе для передачи данных введите путь к приложению из системы LIMS, которое загружает информацию в систему.
- В поле Дополнительные параметры введите параметры для программы передачи данных.
  - **Примечание:** Вместо имени файла экспорта необходимо указать %F. См. также примеры ниже.

Пример 1.

- «Путь к программе для передачи данных» – **CMD**
- «Дополнительные параметры» – **/C move /Y %F C:\out\data.csv**

Пример 2.

- «Путь к программе для передачи данных» – **notepad.exe**
- «Дополнительные параметры» – **нет**

Пример 3 (для вызова системного диалога сохранения файла).

- «Путь к программе для передачи данных» – **SaveAs**
- «Дополнительные параметры» – **нет**