

Ивановой Марине Владимировне

тел: (4942) 55-74-92
факс: (4942) 45-11-23

Техническое задание (вариант4)

на дополнительный расчёт

Количественный химический анализ атмосферного воздуха и выбросов в атмосферу по ПНД Ф 13.1:2:3.25-99

Чего не будет в программе

Программа дополнительного расчёта не будет рассчитывать концентрации предельных углеводородов по отдельности, а также непредельных углеводородов по отдельности, только суммой.

Данный расчёт не производит оценку сходимости результатов.

В данном расчёте не будут учитываться пики, названия которых отсутствует в таблице 1.

Дополнительный расчёт не будет отображать значения калибровочного коэффициента у метана.

Интерфейс

Внешний вид расчёта должен быть таким:

Расчётные значения	
предельные углеводороды	0.12±0.024 мг/м3
непредельные углеводороды	1.89±0.387 мг/м3
Бензол	6.12±1.224 мг/м3
Толуол	0.74±0.148 мг/м3
Стирол	5.43±1.086 мг/м3

В верхней части будут представлены списки, в которые можно будет добавлять калибровочные хроматограммы, хроматограммы, полученные без патрона и с патроном.

Добавление градуировочных хроматограмм в верхний список возможно, если в этих хроматограммах есть вещество "метан", его концентрация не нулевая.

Для приведения к нормальным условиям следует предусмотреть выпадающий список.

Выводить анализ сходимости калибровки в виде текста "Сходимость калибровки есть" либо "НЕТ сходимости калибровки"

Расчётные значения концентраций записываются как концентрация±0.23*концентрация

Совместная работа с программой Хромос

На программу Хромос возложены следующие обязанности:

- запись хроматограмм;
- автоматическая разметка полученных хроматограмм;
- идентификация веществ (присваивание имён пикам);
- учёт поправки по атмосферному давлению (ввод давления в паспорт);

Дополнительный расчёт будет рассчитывать всё остальное:

- расчёт градуировочных коэффициентов для каждой калибровочной хроматограммы
- вычисление средневзвешенного градуировочного коэффициента;
- учёт поправки по давлению;
- расчёт концентраций с учётом коэффициента относительной чувствительности.

Хроматограммы с одним метаном и размеченными другими искомыми веществами поступают в дополнительный расчёт, где рассчитывается суммарные массовые концентрации предельных и суммарные массовые концентрации непредельных углеводородов, а также отдельные компоненты вроде толуола, бензола и других.

Подготовка метода

В методе метод расчёта можно установить любой, поскольку весь расчёт будет выполняться в программе дополнительного расчёта.

После получения хроматограммы необходимо дать названия всем компонентам, а затем выбрать меню "Метод"-"+компоненты" для запоминания в методе времён выхода компонентов из этой хроматограммы.

Поправка на давление

После получения хроматограммы или во время её записи необходимо заполнить в паспорте поле "Объём" значением атмосферного давления во время анализа.

Это значение будет учтено в дополнительном расчёте для поправки на атмосферное давление.

Приведение к нормальным условиям

Для приведения к нормальным условиям используется коэффициент f , равный 1 или 1.07. В выпадающем списке (см. рисунок 1) можно будет выбрать то, или иное значение.

Воздух рабочей зоны	Всё рассчитывается как есть
Атмосферный воздух	Все концентрации увеличиваются в 1.07 раз

Замечания

Расчёт будет некорректен при использовании хроматограмм, полученных при разном атмосферном давлении, поскольку в ПНД Ф (раздел 7.8) никак не описан этот случай.

В список градуировочных хроматограмм можно будет добавлять хроматограммы лишь с одинаковым значением атмосферного давления.

Для того, чтобы добавить хроматограмму в список с патроном или без патрона она должна иметь одинаковое давление в паспорте, как и у остальных хроматограмм в этих двух списках.

Приложение (Таблица 1)

Компонент	Коэффициент чувствительности	Примечание
метан	1	предельные
этан	0.75	предельные
пропан	0.75	предельные
н-Бутан	0.75	предельные
2-метилпропан	0.75	предельные
н-пентан	0.75	предельные
2-метилбутан	0.75	предельные
2,2-диметилпропан	0.75	предельные
н-гексан	0.75	предельные
2-метилпентан	0.75	предельные
3-метилпентан	0.75	предельные
2,2-диметилбутан	0.75	предельные
2,3-диметилбутан	0.75	предельные
н-гептан	0.75	предельные
н-октан	0.75	предельные
н-нонан	0.75	предельные
н-декан	0.75	предельные
циклопентан	0.75	предельные
метилциклопентан	0.75	предельные
этилциклопентан	0.75	предельные
циклогексан	0.75	предельные
метилциклогексан	0.75	предельные
углеводороды	0.75	предельные
этилен	0.88	непредельные
пропилен	0.88	непредельные
1-бутен	0.88	непредельные
цис-2-бутен	0.88	непредельные
транс-2-бутен	0.88	непредельные
2-метилпропен	0.88	непредельные
1-пентен	0.88	непредельные
амилен	0.88	отдельный
дивинил	0.85	отдельный
изопрен	0.85	отдельный
бензол	0.81	отдельный
толуол	0.83	отдельный
этилбензол	0.83	отдельный
о-ксилол	0.83	отдельный
м-ксилол	0.83	отдельный
п-ксилол	0.83	отдельный
стирол	0.81	отдельный



Если нужных вам компонентов здесь нет, то расчёт будет неверен.

Расчёт

В списке градуировочных (верхний список)

Для каждой хроматограммы из списка **градуировочных** хроматограмм вычисляем градуировочный коэффициент

$$K_i = \frac{C_{метан}}{S_{метан}}$$

Вычисляем средневзвешенный коэффициент **K**

$$K = \frac{1}{\sum \frac{1}{K_i}}$$

У градуировочных хроматограмм берём значение из паспорта "Объём". Оно должно быть одно и тоже у всех хроматограмм.

Это будет значение атмосферного давления при градуировке **P_{гр}**

В итоге получаем средневзвешенный коэффициент **K** и давление при градуировке **P_{гр}**

В списке "С патроном" (третий список)

Проходя по всем предельным веществам таблицы 1 и по всем хроматограммам из третьего списка вычисляем среднюю площадь для каждого вещества.

$$\bar{S}_i = \frac{\bar{S}_i \cdot N_i + S_{ik}}{N_i + 1}$$

$$N_i = N_i + 1$$

где *i* – индекс вещества; *k* – индекс хроматограммы

N_i – количество предыдущих усреднений у данного вещества (количество ненулевых значений площади у данного вещества в предыдущих хроматограммах);

\bar{S}_i – искомое значение средней площади текущего (*i*-го) вещества;

В итоге получаем для каждого вещества из таблицы 1 усреднённую площадь.

Суммируем площади только предельных, получая суммарную площадь предельных

$$S_{пред} = \sum \bar{S}_i$$

В списке "БЕЗ патрона" (второй список)

Производятся все те же действия как и со списком "С патроном", но расчёт может вестись лишь по "непредельным" и "предельным" веществам (другими словами НЕ по "отдельным" веществам).

В итоге получаем сумму предельных и непредельных углеводов:

$$S_{пред+непр}$$

Запоминаем средние площади для веществ, не относящихся ни к предельным, ни к непредельным. Они (эти площади \bar{S}_i) нам потребуются далее.

Поправка на давление

У хроматограмм второго и третьего списка берём значение из паспорта "Объём". Оно должно быть одно и тоже у всех хроматограмм и у второго и у третьего списка.

Будем считать это значение давлением при анализе P_a

Поправка на давление z вычисляется так:

$$z = \frac{P_{ep}}{P_a}$$

Приведение к нормальным условиям

Коэффициент f равен 1 или 1.07 в зависимости от выбора в выпадающем списке. (см. раздел "Приведение к нормальным условиям" выше)

Искомые концентрации

Расчётные концентрации выводятся в самый нижний список в виде концентрация $\pm 0.2 \cdot \text{концентрация}$ (см. Интерфейс).

Суммарная концентрация предельных углеводородов выводится отдельной строчкой, и рассчитывается следующим образом:

$$C_{пред} = S_{пред} \cdot 0.75 \cdot K \cdot z \cdot f$$

Суммарная концентрация непредельных углеводородов выводится отдельной строчкой, и рассчитывается следующим образом:

$$C_{непред} = (S_{пред+непред} - S_{пред}) \cdot 0.88 \cdot K \cdot z \cdot f$$

Остальные вещества (которые не попали в раздел предельных или непредельных) выводятся каждый на своей строчке, и считаются по формуле:

$$C_i = (\bar{S}_i) \cdot A_i \cdot K \cdot z \cdot f$$

где A_i – коэффициент чувствительности из таблицы 1

Проверка сходимости калибровки

Для проверки сходимости вычисляется размах градуировочных коэффициентов. Если он меньше или равен 15, то такая калибровка будет считаться сходимой.

$$R = 100 \cdot \frac{(K_{max} - K_{min})}{K}$$

Исполнитель: Федоренко Сергей Павлович, ЗАО "Химаналитсервис", Дзержинск, 09.01.2008