

Техническое задание

на разработку расчёта по ГОСТ 31369-2021

для ПО Хромос 2.24.x

Основные положения:

Необходимо разработать расчёт в виде самостоятельного приложения для версии Хромос 2.24.x по ГОСТ 31369-2021, с учётом требований ФР 1.13.2013.14306 в части содержания объёмной (молярной) доли азота, кислорода, углеводородов С₁-С_{6+в}, сероводорода и диоксид углерода в диапазоне от 0,01 % до 70,00 %.

Приложение должно выполнять проверку на соответствие объёмных (молярных) долей компонентов по ФР 1.13.2013.14306 и вычислять основные показатели отвечающие за качество природного газа, а именно высшую и низшую теплоты сгорания, плотность, относительную плотность и числа Воббе (высшее и низшее).

Требования к программе:

- Интерфейс программы

Макет главного окна:

Доп. расчёт 102 ver. 1.0.0 Природный газ по ГОСТ 31369-2021					-	□	X										
Добавить		Удалить		Удалить всё		Открыть в ПО Хромос		Имя прибора: ГХ-1000		Настройка расчёта		Таблица компонентов		Отчёт		Экспорт	
№	Файл				Проба				Время анализа				Тип хрм.				
1	Природный газ 13654				стандартная				20.12.2024 15:22				град.				
Инф. по хрм.		Проверка		Расчёт		Системные сообщения											
№	Компонент										Площадь пика		Время выхода				
1	✓ Метан										1.13		0.82				
2	✗ Этан										5.67		3.74				
miro																	

Кнопки «Добавить», «Удалить», «Удалить всё», «Открыть в ПО Хромос» отвечают за работу с хроматограммами.

Макет вкладки «Проверка»:

Проверка						
№	Компонент	Молярная доля, пасп.	Молярная доля, норм.	Расхождение	Норматив	Соответствие
1	Метан	0,933212	0,863212	0,07	0,16	Да
2	Этан	0,077607	0,118787	0,04118	0,03	Нет
						miro

Проверка должна происходить согласно требованиям ФР 1.13.2013.14306. В случае не соответствия строка помечается красным оттенком.

Макет вкладки «Расчёт»:

Расчёт		
Показатель	Значение	Расширенная неопределённость
Молярная масса [кг/моль]	17,3884	---
Молярный объём реального газа [м ³ /моль]	0,02359	---
Высшая молярная теплота сгорания [кДж/моль]	906,1612	1,2
Высшая массовая теплота сгорания, [МДж/кг]	52,1139	0,049
Высшая объёмная теплота сгорания [МДж/м ³]	38,4106	0,053
Низшая объёмная теплота сгорания [МДж/м ³]	35,868	0,050
Плотность [кг/м ³]	0,7646	0,0012
Относительная плотность	0,6239	0,00096
Число Воббе (высшее) [МДж/м ³]	50,303	0,043
Число Воббе (низшее) [МДж/м ³]	45,410	0,040
		miro

Все степени должны быть в верхнем индекс (-3), в соответствии с ГОСТ.

Макет вкладки «Системные сообщения»:

Системные сообщения
<input checked="checked" type="checkbox"/> Ошибки <input type="checkbox"/> Предупреждения <input type="checkbox"/> Информация
Ошибки! 1. Недостаточно хроматограмм для расчёта. 2. Этан не найден в таблице компонентов.
miro

Системные сообщения должны содержать все ошибки, предупреждения и доп. информацию связанные с входными данными или расчётом.

Макет окна настроек:

Настройки - □ X

Величина измерения доли компонентов

Молярная доля

Объёмная доля


Температура измерений 15 °C ▾

Температура сгорания 15 °C ▾

Округление

	ГОСТ	Точность
Молярная теплота сгорания [кДж/моль]	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="text" value="3"/>
Массовая теплота сгорания [МДж/кг]	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="text" value="3"/>
Объёмная теплота сгорания [МДж/м ³]	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="text" value="3"/>
Плотность [кг/м ³]	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="text" value="3"/>
Число Воббе[МДж/м ³]	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="text" value="3"/>
Остальные		<input type="text" value="3"/>

Путь для экспорта:



OK Отмена

В случае если в хроматограмме указаны объёмные доли вместо молярных и в настройках выбрана соответствующая опция, то значения объёмных долей будут преобразованы в молярные доли в соответствии с ГОСТом **Р 8.974-2019** (табл. 1, 2).

Программа предоставляет выбор стандартных температур измерения (0, 15, 15.55, 20) и сгорания (0, 15, 15.55, 20, 25) для расчёта, определённых в таблицах 2 и 3 (стр. 16) в ГОСТ **31369-2021**.

Округление показательных значений можно установить по ГОСТу нажав на соответствующий чек-бокс, либо вручную указав точность. Это применяется для всех данных в таблице и в отчёте.

По нажатии кнопки «Папки» можно задать полный путь для экспорта отчёта.

Макет окна таблицы компонентов:

Компоненты					-	□	X
№	Компонент	Имя в хрм.	Молярная масса, кг/моль	Молярная доля, пасп.			
1	Метан	метан	16,04	0,933212			
2	Этан	этанн	30,06	0,077607			
...							
...							
...							
...							
58							

Окно должно содержать все компоненты из таблиц в ГОСТ 31369-2021, пункт 12 (стр. 15). При добавлении хроматограмм, компоненты хрм. сопоставляются именам компонентов из таблицы во второй колонке. Сопоставление регистро-независимое. В случае не нахождения элемента, в главном окне компонент помечится красным крестом, в случае нахождения - зелёной галкой.

Макет окна отчёта:

Отчёт				-	□	X
<input checked="" type="checkbox"/>	Список хроматограмм					
<input checked="" type="checkbox"/>	Результаты проверки					
<input checked="" type="checkbox"/>	Результаты расчёта					
<input type="button" value="Просмотр"/>		<input type="button" value="Сохранить"/>		<input type="button" value="Отмена"/>		

- Отчёт должен быть выполнен в формате odt.

Образец отчёта:

Отчет по ГОСТ 31369-2021 от 20.02.2024, 10:59					
Прибор: GX-1000					
Список хроматограмм:					
Имя пробы				Дата и время анализа	
стандартная				20.12.2024 15:22	
проба 2				20.12.2024 15:35	
Результат проверки:					
Компонент	Молярная доля паясп.	Молярная доля расч.	Расхождение	Норматив	Соответствие
Этан	0,933212	0,863212	0,07	0,16	Да
Метан	0,077607	0,118787	0,04118	0,03	Нет
Результаты расчёта					
Показатель	Значение		Расширенная неопределённость		
Молярная масса [кг/моль]	17,3884		--		
Молярный объём реального газа [м ³ /моль]	0,02359		--		
Высшая молярная теплота сгорания [кДж/моль]	906,1612		1,2		
Высшая массовая теплота сгорания [МДж/кг]	52,1139		0,049		
Высшая объёмная теплота сгорания [МДж/м ³]	38,4106		0,053		
Низшая объёмная теплота сгорания [МДж/м ³]	35,868		0,050		
Плотность [кг/м ³]	0,7646		0,0012		
Относительная плотность	0,6239		0,00096		
Число Воббе (высшее) [МДж/м ³]	50,303		0,043		
Число Воббе (низшее) [МДж/м ³]	45,410		0,040		
Отчёт сгенерирован программой "dch102 ver. 1.0.0.0"					
XPOMOC					

- Сделать экспорт отчёта в формат систем LIMS.

Этот формат представляет из себя текстовый файл формата csv в кодировке UTF-8. Каждая строка файла — это одна строка таблицы. Разделителем между колонками является символ точки запятой «;». Так же перед началом логического блока данных должен быть задан заголовок вида: [Имя заголовка].

Образец экспортируемого файла NaturalGas.csv:

[Отчёт по ГОСТ 31369-2021 от 20.02.2024 10:59]

Прибор: ГХ-1000

[Список хроматограмм]

Имя пробы; Дата и время анализа

стандартная; 20.12.2024 15:22

проба 2; 20.12.2024 15:35

[Результат проверки]

Компонент; Молярная доля пасп.; Молярная доля расч.; Расхождение; Норматив; Соответствие

Этан; 0,933212; 0,863212; 0,07; 0,16; Да

Метан; 0,077607; 0,118787; 0,04118; 0,03; Нет

[Результат расчёта]

Показатель; Значение; Расширенная неопределённость

Молярная масса [кг/моль]; 17,3884; --

Молярный объём реального газа [м³/моль]; 0,02359; --

Высшая молярная теплота сгорания [кДж/моль]; 906,1612; 1,2

Высшая массовая теплота сгорания [МДж/кг]; 52,1139; 0,049

Высшая объёмная теплота сгорания [МДж/м³]; 38,4106; 0,053

Низшая объёмная теплота сгорания [МДж/м³]; 35,868; 0,050

Плотность [кг/м³]; 0,7646; 0,0012

Относительная плотность; 0,6239; 0,00096

Число Воббе (высшее) [МДж/м³]; 50,303; 0,043

Число Воббе (низшее) [МДж/м³]; 45,410; 0,040

Требования к функциональным характеристикам:

- При вычислении значений физических показателей будут учтены все компоненты, молярная доля которых не менее 0,00005 (0,005 % молярной доли).

- Вычисление молярных, массовых и объёмных значений ФХП, распространяющиеся на любой природный газ, заменитель природного газа или другое газообразное топливо, за исключением объёмных характеристик газовых смесей, для которых коэффициент сжимаемости в стандартных условиях менее 0,9.

- Неопределённость компонентов следует считать по следующей формула взятым из ГОСТ 31371.7-2020 Таблица 1 метод А:

Определяемый компонент	U(x), %
Метан	$-0,0023 * x + 0,29$
Этан	$0,04 * x + 0,00026$
Пропан	$0,06 * x + 0,00024$
Изобутан	$0,06 * x + 0,00024$

н-Бутан	$0,06 * x + 0,00024$
Изопентан	$0,06 * x + 0,00024$
н-Пентан	$0,06 * x + 0,00024$
Неопентан	$0,06 * x + 0,00024$
Гексаны	$0,06 * x + 0,00024$
Гептаны	$0,06 * x + 0,00024$
Октаны	$0,08 * x + 0,00022$
Бензол	$0,08 * x + 0,00022$
Толуол	$0,08 * x + 0,00022$
Диоксид углерода	$0,06 * x + 0,0012$
Гелий	$0,06 * x + 0,00024$
Водород	$0,06 * x + 0,00024$
Кислород	$0,06 * x + 0,0012$
Азот	$0,04 * x + 0,0013$
Метанол	$0,08 * x + 0,00022$

В случае если неопределённость для компонента неопределена или равна нулю, вычислить расширенную неопределённость для значений физико-химических показателей не является возможным.

Нормативные документы:

- ГОСТ 31369-2021
- ФР 1.13.2013.14306
- ГОСТ 31371.7-2020
- ГОСТ Р 8.974-2019