



**Руководство пользователя: Расчёт №61
«Определение состава СУГ, расчёт плотности, давления и
октанового числа»**

**ООО «ХРОМОС Инжиниринг»
г. Дзержинск**

Редакция от 7 мая 2024 г.
Актуальная версия: 1.30
Internet: kb.has.ru

Содержание

1. Введение.....	3
2. Установка программы.....	4
3. Интерфейс программы.....	5
4. Порядок проведения измерений.....	7
5. Добавление данных.....	8
6. Вывод отчёта.....	9
7. Настройка программы.....	10
7.1. Управление компонентами.....	10
7.2. Настройка расчёта.....	11
8. Идентификация программы.....	13

1. Введение

Программа «Определение состава СУГ, расчёт плотности, давления и октанового числа» предназначена для анализа хроматограмм, полученных при помощи ПО «Хромос», на предмет определения состава сжиженных углеводородных газов (СУГ) и концентрации компонентов по ГОСТ Р 54484-2011, ГОСТ 33012-2014, ГОСТ 10679-76 или ГОСТ 10679-2019. На основе полученных концентраций и состава рассчитываются давление и плотность СУГ по ГОСТ 28656-2019, а также октановое число по ГОСТ EN 589-2014, ГОСТ Р 52087-2018 или ГОСТ 34858-2022.

Для начала работы необходимо ознакомиться с упомянутыми нормативными документами.

Данная программа работает как самостоятельное приложение. Для открытия хроматограмм требуется ПО «Хромос» (версия 2.x).

Установочный файл программы и сопутствующая документация доступны в сети Интернет по адресу: kb.has.ru/soft:dop_raschjot_61.

Предложения и пожелания по программе сообщайте на e-mail: soft@has.ru

2. Установка программы

2. Установка программы

Для установки программы «Определение состава СУГ, расчёт плотности, давления и октанового числа» рекомендуется 15 Мб свободного места на жёстком диске.

1. Запустите установочный файл.
2. Укажите путь установки программы и нажмите **Далее >** (Рис. 1).

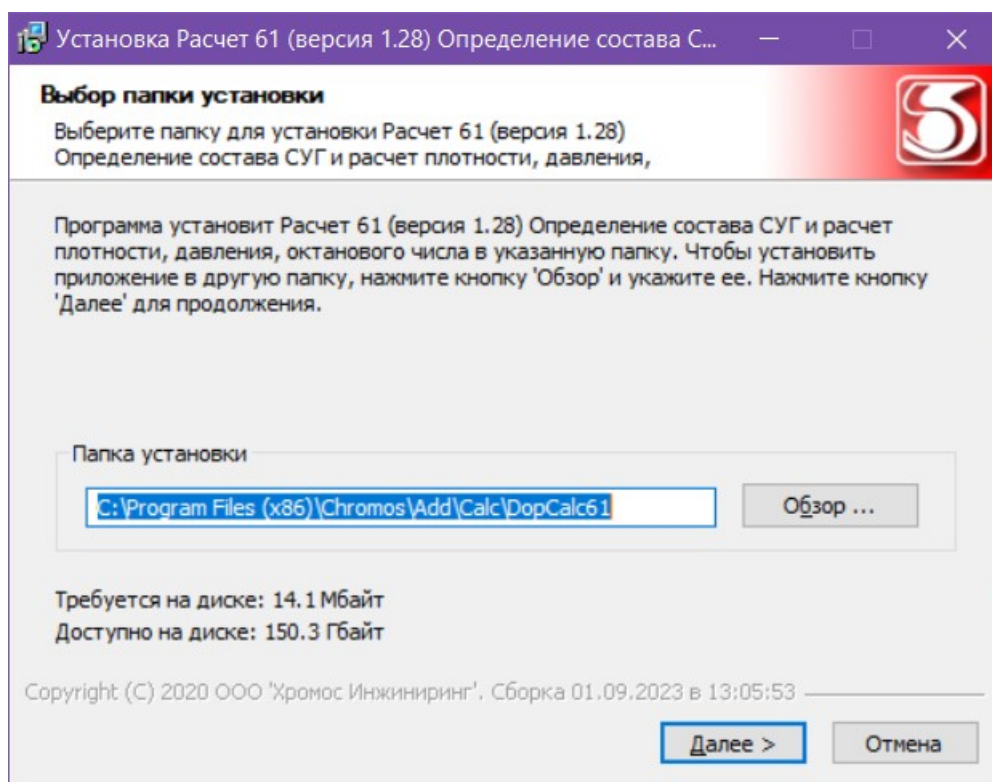


Рис. 1. Установка программы

3. Выберите папку для расположения ярлыка в меню **Пуск** или поставьте флажок **Не создавать ярлык**.
4. Нажмите **Установить**.
5. По завершении установки нажмите **Готово**.

Программа устанавливается как самостоятельное приложение.

3. Интерфейс программы

Основное окно программы (Рис. 2) состоит из следующих элементов:

1. Элементы управления хроматограммами;
2. Поле ввода номера прибора;
3. Элементы настройки программы;
4. Элементы управления отчётом;
5. Список хроматограмм;
6. Набор вкладок и рабочие области расчёта.

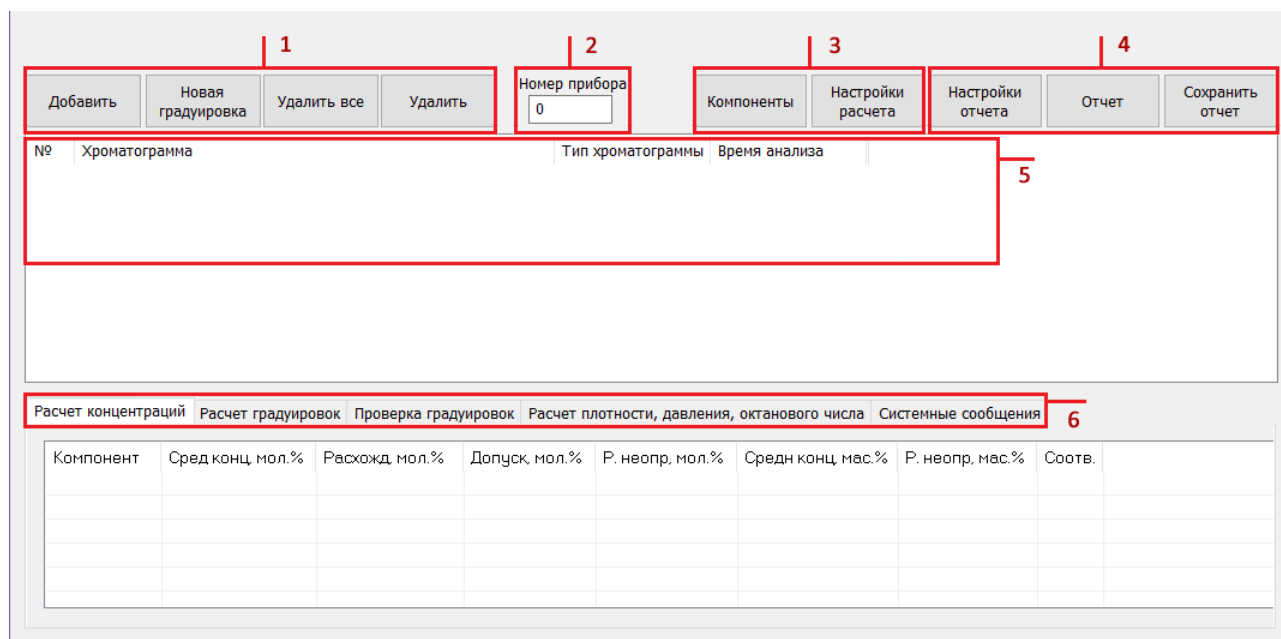


Рис. 2. Основное окно программы

Основное окно программы включает вкладки рабочих областей:

- *Расчёт концентраций* — рассчитанные параметры концентраций (зависят от выбранного метода расчёта):
 - *Компонент* — имя компонента;
 - *Ср./Средн конц, масс.%* — усреднённая массовая доля компонента;
 - *Ср./Сред конц, мол.%* — усреднённая молярная доля компонента;
 - *Расхожд, мол.%* — расхождение последовательных измерений;
 - *Допуск, мол.%* — допустимое отклонение значения молярной доли;
 - *P. неопр. мол.%* — расширенная неопределённость значения молярной доли;
 - *P. неопр. мас.%* — расширенная неопределённость значения массовой доли;
 - *Факт. повтор, %* — показатель повторяемости;
 - *Предел повтор, %* — предел повторяемости (сходимости);
 - *Отн. погрешность, масс.%* — относительная погрешность;
 - *Конц, масс.(мол., об.)%* — массовая (молярная, объёмная) доля компонента;
 - *Абс. расш. неопр, масс.%* — абсолютная расширенная неопределённость результата измерений массовой доли углеводородного компонента в СУГ;
 - *Соотв.* — соответствие нормативу;

3. Интерфейс программы

- *Расчёт градуировок:*
 - *Компонент* — имя компонента;
 - *Град конц-ия, мол.%* — градуировочная концентрация (в молярной доле);
 - *К сред.* — усреднённый градуировочный коэффициент;
 - *Отн. размах (R нов)* — относительный размах;
 - *Допуск (R* нов)* — допустимое отклонение относительного размаха;
 - *Соотв.* — соответствие нормативу;
- *Проверка градуировок:*
 - *Компонент* — имя компонента;
 - *К стар.* — исходный градуировочный коэффициент;
 - *К нов.* — нормированный градуировочный коэффициент;
 - *Отн. размах (R нов)* — относительный размах;
 - *Допуск (R* нов)* — допустимое отклонение относительного размаха;
 - *Соотв.* — соответствие нормативу;
- *Расчёт плотности, давления, октанового числа* — консоль расчёта плотности и давления насыщенных паров в зависимости от температуры, а также результаты расчёта концентраций:
 - *№* — номер строки;
 - *Компонент* — имя компонента;
 - *Кон-ция, мол%* — молярная доля компонента;
 - *Кон-ция, масс%* — массовая доля компонента;
- *Системные сообщения* — сведения об ошибках, сообщения с предупреждениями о каком-либо несоответствии или невозможности выполнения расчётов в связи с отсутствием данных.

4. Порядок проведения измерений

Для проведения измерений используются хроматограммы двух типов: градуировочные и расчётные (анализ). В зависимости от метода, для расчёта необходимо добавить одну градуировочную хроматограмму и одну расчётную. Для соответствия ГОСТ Р 54484-2011 п.9.5.3 следует добавить не менее трёх градуировочных хроматограмм.

При помощи кнопки *Новая градуировка* можно добавить хроматограммы для проверки градуировок (см. ГОСТ Р 54484-2011).

На вкладке *Расчёт плотности, давления, октанового числа* в консоли можно задать температуры для расчёта плотности, а также нормального и избыточного давления насыщенных паров. Чтобы задать температуры, нажмите **Задание температур**, введите значения температур во всплывающем окне и нажмите **ОК**.

Также на вкладке *Расчёт плотности, давления, октанового числа* выводится октановое число, рассчитанное моторным методом (MON), и молекулярная масса.

Выбор методов расчёта доступен в настройках программы (7.2). При изменении параметров расчёта следует обновить результаты, в основном окне программы нажав **Рассчитать**.

Настроить имена компонентов и коэффициенты чувствительности можно в управлении компонентами (7.1). Если в поле коэффициента чувствительности компонента стоит прочерк, значит, в выбранном ГОСТ значение не было указан. Такие компоненты будут пропущены при расчётах. Если компонент необходимо учесть, следует указать его коэффициент чувствительности.

Примечание: В программе осуществляется перевод массовых долей в мольные и в объёмные согласно следующим формулам (Рис. 3):

Выражение состава	Мольные доли x , $\frac{\text{кг - моль}}{\text{кг - моль смеси}}$	Массовые доли ω , $\frac{\text{кг}}{\text{кг смеси}}$	Объёмные доли φ , $\frac{\text{м}^3}{\text{м}^3 \text{ смеси}}$
Мольные доли x , $\frac{\text{кг - моль}}{\text{кг - моль смеси}}$	—	$\frac{\omega_i}{M_i}$ $\sum_{i=1}^{i=k} \frac{\omega_i}{M_i}$	$\frac{\varphi_i \rho_i}{M_i}$ $\sum_{i=1}^{i=k} \frac{\varphi_i \rho_i}{M_i}$
Массовые доли ω , $\frac{\text{кг}}{\text{кг смеси}}$	$\frac{x_i M_i}{\sum_{i=1}^{i=k} x_i M_i}$	—	$\frac{\varphi_i \rho_i}{\sum_{i=1}^{i=k} \varphi_i \rho_i}$
Объёмные доли φ , $\frac{\text{м}^3}{\text{м}^3 \text{ смеси}}$	$\frac{x_i M_i}{\rho_i}$ $\sum_{i=1}^{i=k} \frac{x_i M_i}{\rho_i}$	$\frac{\omega_i}{\rho_i}$ $\sum_{i=1}^{i=k} \frac{\omega_i}{\rho_i}$	—

Рис. 3: Формулы пересчёта долей

5. Добавление данных

- Для добавления хроматограмм и работы с ними используйте следующие действия:
 1. Нажмите **Добавить**. Откроется окно *Открытие хроматограммы* (Рис. 4).
 2. В окне *Открытие хроматограммы* выберите хроматограммы и нажмите **Открыть**. Хроматограммы отобразятся в списке в основном окне программы.

Для удобства выбора хроматограмм можно использовать фильтры по методу, типу, пункту и точке отбора, а также выбрать сразу несколько файлов, используя комбинации **Ctrl + Мышь** и **Shift + ←↑↓→**

Примечание: Чтобы выбрать все хроматограммы одного анализа, поставьте флажок **Совместный выбор**.

3. Чтобы удалить хроматограмму, кликните по ней и нажмите **Удалить**.
4. Чтобы очистить список добавленных хроматограмм, нажмите **Удалить все**.

Примечание: Нажатие кнопок удаление не удаляет хроматограммы с диска, а только исключает из расчёта.

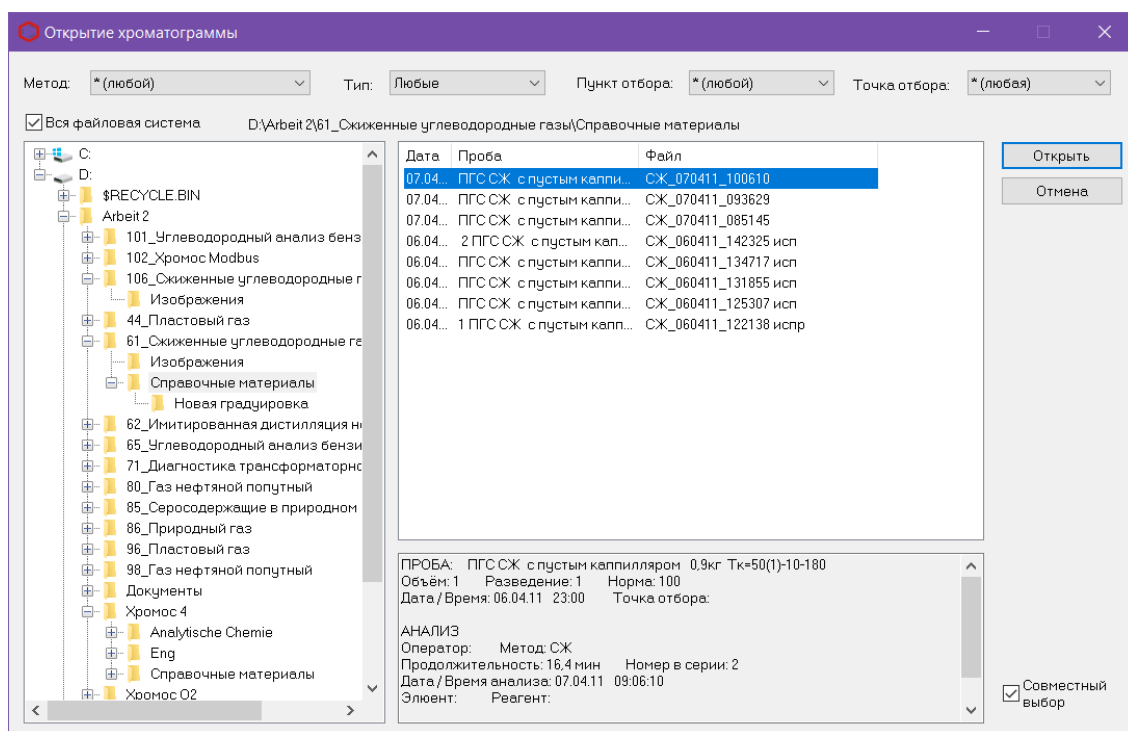


Рис. 4. Окно «Открытие хроматограммы»

- В основном окне программы в поле *Номер прибора* введите номер прибора.
- Настройте дополнительные компоненты (см. 7.1).

6. Вывод отчёта

Полученные данные расчёта можно сформировать в отчёт.

1. Чтобы сформировать отчёт, нажмите **Настройки отчёта**. Откроется окно *Настройки отчёта* (Рис. 5).

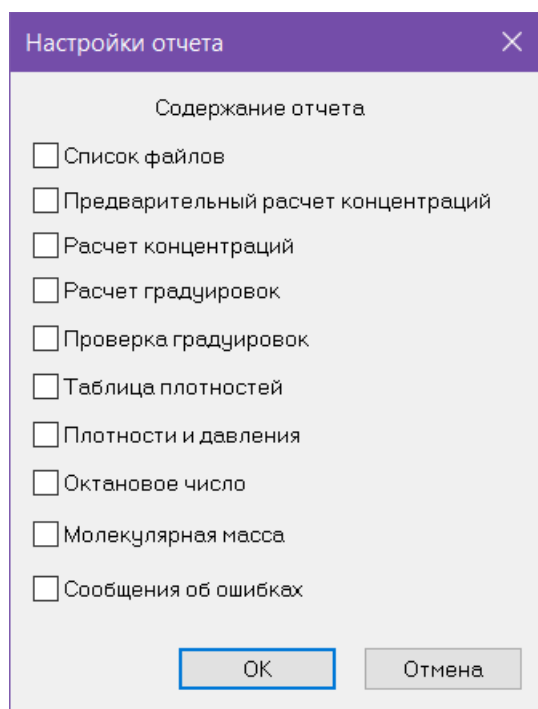


Рис. 5: Окно «Настройки отчёта»

2. В окне *Настройки отчёта* выберите данные, которые необходимо добавить в отчёт.
3. Нажмите **ОК**.
4. Выберите действие, которое необходимо выполнить:
 - Чтобы открыть отчёт в браузере, в основном окне программы нажмите **Отчёт**.
 - Чтобы сохранить отчёт, в основном окне программы нажмите **Сохранить отчёт**, укажите папку сохранения и нажмите **Сохранить**.

По умолчанию имя файла отчёта имеет вид **Report61_17102023_114811.html**, где:

- *Report61* – имя программы;
- *17102023* — дата в формате ДДММГГГГ;
- *114811* — время в формате ЧЧММСС;
- *html* – формат файла.

7. Настройка программы

Настройка программы включает управление компонентами, настройку параметров анализа и настройку параметров отчёта.

7.1. Управление компонентами

Список компонентов содержит предустановленные записи о компонентах. Для управления компонентами выполните следующие действия:

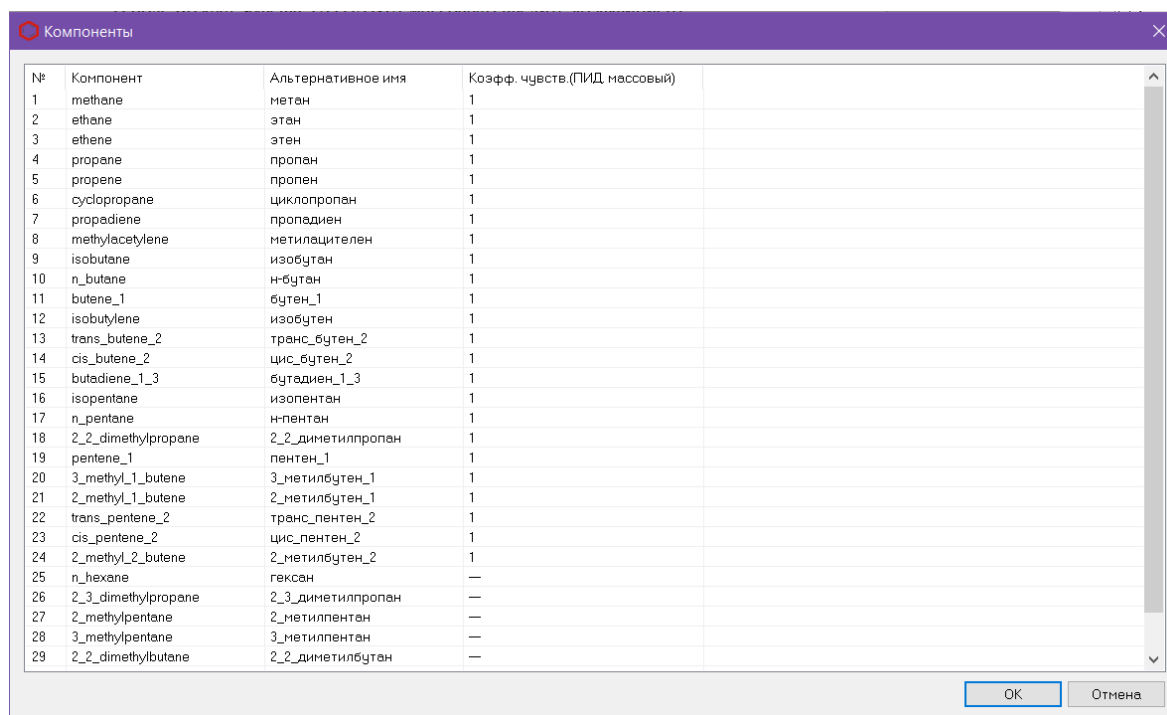
1. В основном окне нажмите **Компоненты**. Откроется окно *Компоненты* (Рис. 6).
2. Для изменения данных дважды кликните по нужному полю.
 - В поле *Альтернативное имя* введите имя компонента.

Имена компонентов не должны повторяться.

- В поле *Кэфф. чувств. (ДТП/ПИД массовый)* введите коэффициент чувствительности детектора.

Данный параметр доступен при выборе метода расчёта по ГОСТ 10679-76 или ГОСТ 10679-2019 (относительная град.)

3. Сохраните изменения, нажав **ОК**.



№	Компонент	Альтернативное имя	Кэфф. чувств. (ПИД массовый)
1	methane	метан	1
2	ethane	этан	1
3	ethene	этен	1
4	propane	пропан	1
5	propene	пропен	1
6	cyclopropane	циклопропан	1
7	propadiene	пропадиен	1
8	methylacetylene	метилацетилен	1
9	isobutane	изобутан	1
10	n_butane	н-бутан	1
11	butene_1	бутен_1	1
12	isobutylene	изобутен	1
13	trans_butene_2	транс_бутен_2	1
14	cis_butene_2	цис_бутен_2	1
15	butadiene_1_3	бутадиен_1_3	1
16	isopentane	изопентан	1
17	n_pentane	н-пентан	1
18	2_2_dimethylpropane	2_2_диметилпропан	1
19	pentene_1	пентен_1	1
20	3_methyl_1_butene	3_метилбутен_1	1
21	2_methyl_1_butene	2_метилбутен_1	1
22	trans_pentene_2	транс_пентен_2	1
23	cis_pentene_2	цис_пентен_2	1
24	2_methyl_2_butene	2_метилбутен_2	1
25	n_hexane	гексан	—
26	2_3_dimethylpropane	2_3_диметилпропан	—
27	2_methylpentane	2_метилпентан	—
28	3_methylpentane	3_метилпентан	—
29	2_2_dimethylbutane	2_2_диметилбутан	—

Рис. 6. Окно «Компоненты»

7.2. Настройка расчёта

Выбор метода расчёта осуществляется в настройках расчёта:

1. В основном окне программы нажмите **Настройки расчёта**. Откроется окно *Настройка расчёта* (Рис. 7).
2. В окне *Настройка расчёта* в сегменте *Метод расчёта* выберите метода расчёта:
 - ГОСТ Р 54484-2011 Относительные коэффициенты;
 - ГОСТ Р 54484-2011 Градуировочные коэффициенты;
 - ГОСТ 33012-2014 Метод А (насадочная колонка);
 - ГОСТ 33012-2014 Метод В (капиллярная колонка);
 - ГОСТ 10679-76;
 - ГОСТ 10679-2019 (относительная градуировка);
 - ГОСТ 10679-2019 (абсолютная градуировка).
3. Для метода *ГОСТ Р 54484-2011 Относительные коэффициенты* выберите из списка вещество-стандарт.
4. Для методов *ГОСТ 10679-76* и *ГОСТ 10679-2019 (относительная градуировка)* выберите тип детектора:
 - Детектор по теплопроводности (ДТП);
 - Пламенно-ионизационный детектор (ПИД).
5. Для метода *ГОСТ 10679-2019 (относительная градуировка)* выберите размерность градуировочных концентраций:
 - Масс %;
 - Моль %.
6. В сегменте *Метод расчёта октанового числа* выберите стандарт расчёта октанового числа:
 - ГОСТ EN 589 -2014;
 - ГОСТ Р 52087-2018;
 - ГОСТ 34858-2022.
7. В сегменте *Округление значений* задайте настройки округления значений:
 - В поле *Округлить до знака* введите количество знаков после запятой;
 - Чтобы округлять значения по ГОСТ 10679-2019, поставьте флажок **Округлять по ГОСТ 10679-2019**;
 - Чтобы округлять физико-химические параметры по ГОСТ 10679-2019, поставьте флажок **Округлять физ-хим параметры по ГОСТ 10679-2019**.
8. Сохраните изменения, нажав **ОК**.

7.2. Настройка расчёта

Настройка расчёта

Метод расчёта:

ГОСТ Р 54484-2011 Относительные коэфф.
Вещество стандарт:
[Dropdown menu]

ГОСТ Р 54484-2011 Градуировочные коэфф.
 ГОСТ 33012-2014 Метод А (насадочная колонка)
 ГОСТ 33012-2014 Метод В (капиллярная колонка)
 ГОСТ 10679-76
 ГОСТ 10679-2019 (относительная град.)
 ГОСТ 10679-2019 (абсолютная град.)

Метод расчёта октанового числа:

ГОСТ EN 589-2014
 ГОСТ Р 52087-2018

Округление значений:

Округлить до знака: [0]

Округлять по ГОСТ 10679-2019
 Округлять физ-хим параметры по ГОСТ 10679-2019

Тип детектора:

ДТП
 ПИД

Размерность град. конц:

масс %
 моль %

OK Отмена

Рис. 7: Окно «Настройка расчёта»

8. Идентификация программы

Чтобы посмотреть данные о программе, в левом верхнем углу окна кликните на иконку и в контекстном меню выберите **Сведения о DorCalc61**. Откроется окно *О плагине* (Рис. 8).

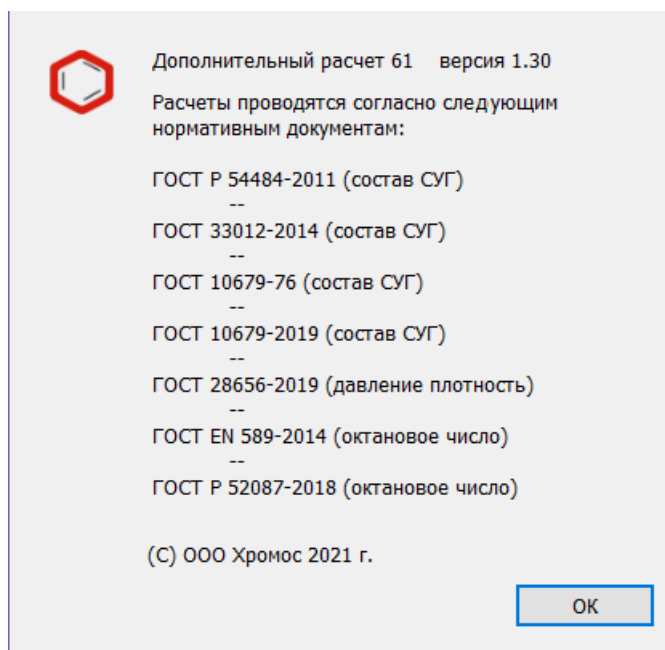


Рис. 8: О плагине