Руководство пользователя: Расчёт №62 «Имитированная дистилляция нефти и нефтепродуктов»

ООО «ХРОМОС Инжиниринг»
г. Дзержинск

Редакция от 9 октября 2024 г.
Актуальная версия: 1.14
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. Работа с графиками....9
   6.1. Градуировочный график....9
   6.2. Кривая разгонки....10
7. Вывод отчёта....11
8. Настройка программы....12
   8.1. Управление компонентами....12
   8.2. Настройка анализа....13
   8.3. Настройка отчёта....14

1. Введение

Программа «Имитированная дистилляция нефти и нефтепродуктов» предназначена для анализа хроматограмм, полученных при помощи ПО «Хромос», на предмет определения фракционного состава методом газовой хроматографии согласно одному из следующих нормативных документов: ГОСТ Р 56720-2015, ГОСТ Р 54291-2010, ASTM D2887-2013, ГОСТ ISO 3924-2017, ASTM D7169 (с совмещением ASTM D7900-13). Определяется распределение компонентов по диапазону температур кипения.

Для начала работы необходимо ознакомиться с данными 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_62.

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

2. Установка программы

Для установки программы «Имитированная дистилляция нефти и нефтепродуктов» рекомендуется 15 Мб свободного места на жёстком диске.

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

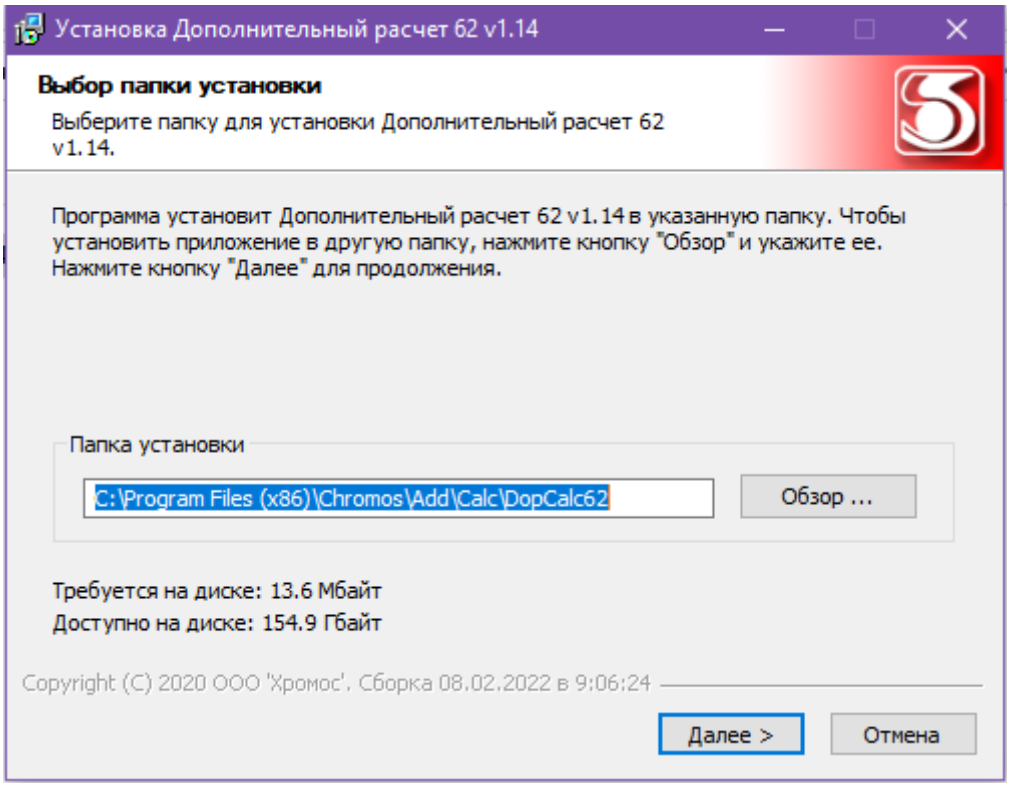


Рис. 1. Установка программы

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 открытых хроматограмм;
6. Набор вкладок и рабочие области расчёта.

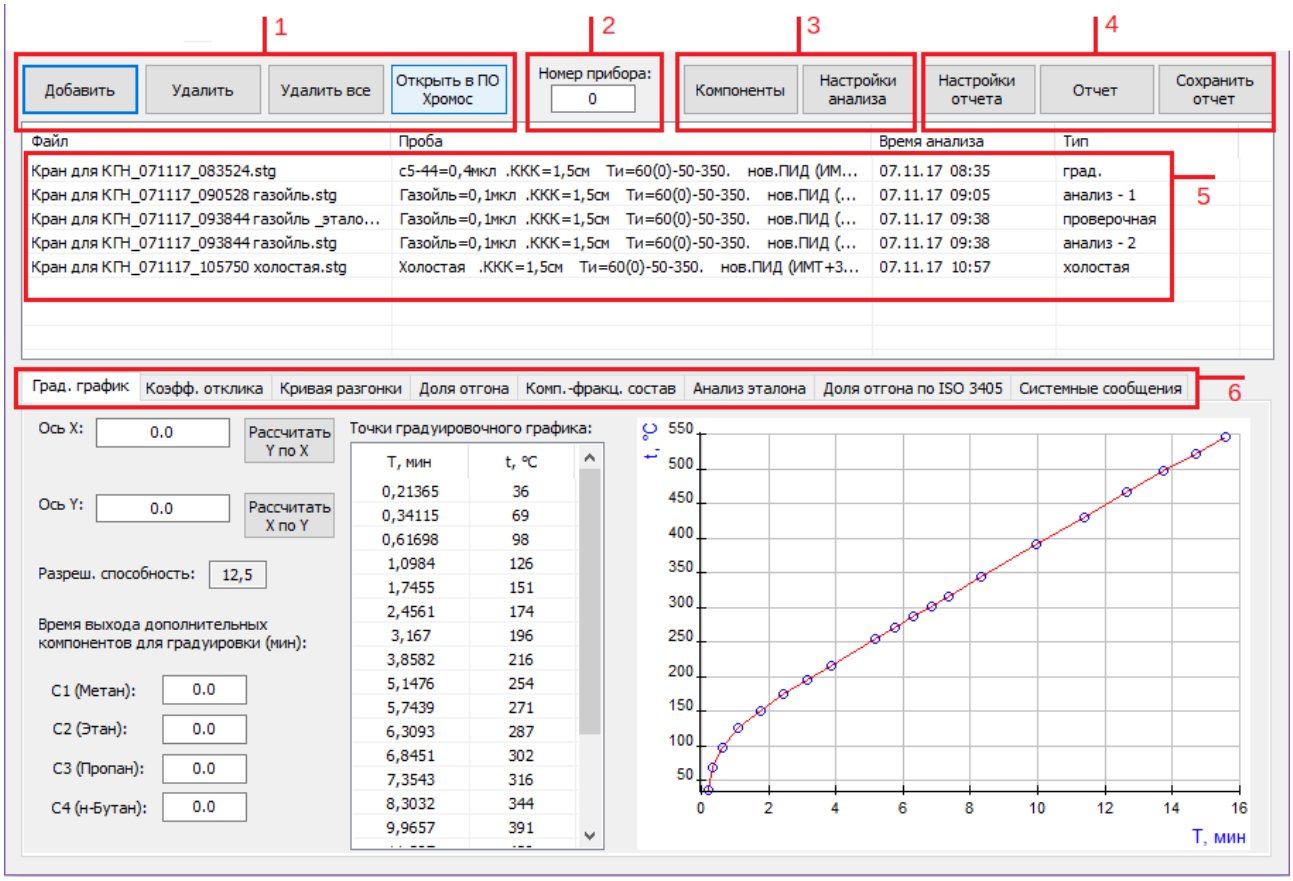


Рис. 2. Основное окно программы

Основное окно программы включает вкладки рабочих областей:

- *Град. график* — отображает информацию о градуировочном графике и дополнительные настройки градуировочного графика в виде полей ввода времён выхода компонентов (о работе с графиками см. 6.1);

- *Коэфф. отклика* — содержит результаты расчёта коэффициентов отклика (ASTM B2887-2013):
  - *№* — номер строки;
  - *Компонент* — имя компонента пробы;
  - *Площадь пика* — площадь пика;
  - *Масса в смеси, мг* — масса компонента в смеси (в мг);
  - *Отклик* — относительный коэффициент отклика;
  - *Соотв.* — соответствие нормативу;

3. Интерфейс программы

- *Кривая разгонки* — отображает график зависимости доли отгона от температуры кипения и группы настроек графиков соответствующих анализов (о работе с графиками см. 6.2);

- *Доля отгона* — содержит результаты расчёта доли отгона пробы:
  - *Доля, масс%* — массовая доля отгона;
  - *T1 (2,3), °C* — температура кипения анализа 1 (2,3);
  - $T_{ср}$*, °C* — усреднённая температура кипения;
  - *±Δ, °C* — границы абсолютной погрешности при P=0,95 (ГОСТ 56720-2015, Табл. 7);
  - *|T1-T2|, °C* — расхождение измеренных температур в пробах 1 и 2;
  - *Норматив, °C* — норматив;
  - *Соответствие* — соответствие нормативу;

- *Комп.-фракц. состав* — содержит информацию о компонентно-фракционном составе пробы:
  - *Фракция* — фракция по температуре кипения;
  - *Конц. 1 (2,3), % масс* — массовая концентрация 1 (2,3);
  - *Конц. ср, % масс* — усреднённая массовая концентрация;
  - *±δ, %* — границы относительной погрешности (ГОСТ 56720-2015, Табл. 8-9);
  - *Расхождение, %* — расхождение двух последовательных измерений;
  - *Норматив, %* — норматив на расхождение;
  - *Соотв.* — соответствие нормативу;

- *Анализ эталона* — содержит информацию о сравнении данных долей отгона типового эталонного образца партии №2 и проверочной пробы:
  - *Доля, % масс* — доля отгона;
  - *Образец, партия №2, °C* — температура кипения по образцу;
  - *Измерение, °C* — измеренная температура кипения;
  - *Расхождение, °C* — расхождение измерений;
  - *Норматив R, °C* — норматив;
  - *Соотв. R* — соответствие нормативу;

- *Доля отгона по ISO 3405* — содержит результаты расчёта доли отгона по стандарту ISO 3405:
  - *Доля, об%* — доля отгона;
  - *T (ISO 3405), °C* — температура кипения, эквивалентная температуре по ISO 3405 (ГОСТ 3924-2017, Форм. А1);
  - *R, °C (табл. A4)* — показатель воспроизводимости (ГОСТ 3924-2017, Табл. А4);

- *Системные сообщения* — выводит 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 расчёта в программу добавляются хроматограммы. В зависимости от метода, выбранного в настройках, и полученных результатов, для работы может требоваться разное количество хроматограмм. Информация о нехватке хроматограмм отображается во вкладке *Системные сообщения*.

Для правильного расчёта фракционного состава хроматограммы, в зависимости от их типа, должны содержать в паспорте следующие названия:

- #градуировочная – хроматограмма анализа калибровочной смеси углеводородов C5-C44;
- #холостая – хроматограмма, полученная без ввода пробы при тех же условиях, что и анализ;
- #эталон – хроматограмма анализа стандартного образца газойля, имеющего паспорт доли отгона;
- #анализ – хроматограмма анализа пробы без добавления внутреннего стандарта;
- #стандарт – хроматограмма анализа пробы с добавлением внутреннего стандарта;
- #проверочная – хроматограмма с известным содержанием углеводородов от C5 до C44.

Одновременно открыты могут быть:

- Градуировочная хроматограмма – 1 шт.;
- Холостая хроматограмма – 1 шт.;
- Хроматограмма эталонного образца – 1 шт.;
- Проверочная хроматограмма – 1 шт.;
- Хроматограмма анализа – 3 шт.;
- Хроматограмма анализа с внутренним стандартом – 3 шт.

Для минимального расчёта необходимо открыть градуировочную, холостую и хотя бы одну анализируемую хроматограмму.

Просмотреть открытые хроматограммы можно в ПО «Хромос», выбрав нужные хроматограммы в списке открытых файлов и нажать кнопку «Открыть в ПО Хромос» либо совершив двойной щелчок мышью по нужной хроматограмме.

Если в расчёте присутствует компонент с массовым коэффициентом чувствительности, отличным от 1, или если из расчёта необходимо исключить какой-либо пик, необходимо также добавить соответствующий компонент в таблицу компонентов и настроить его параметры.

Полученные в процессе расчёта данные отображаются во вкладках основного окна программы.

Результаты расчёта можно сохранить в файл отчёта в формате HTML.

5. Добавление данных

- Для проведения расчёта необходимо добавить хроматограммы. Для добавления хроматограмм и работы с ними используйте следующие действия:

1. Нажмите **Добавить**. Откроется окно *Открытие хроматограммы* (Рис. 3).
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 + ←↑↓→

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

> Пути к градуировочной, холостой и тестовой (т. е. стандартного образца) хроматограммам сохраняются в реестр, поэтому после закрытия и повторного открытия из списка будут исключены все хроматограммы, кроме перечисленных.

5. Чтобы открыть хроматограмму в ПО «Хромос», дважды кликните по ней или выберите её и нажмите **Открыть в ПО Хромос**.

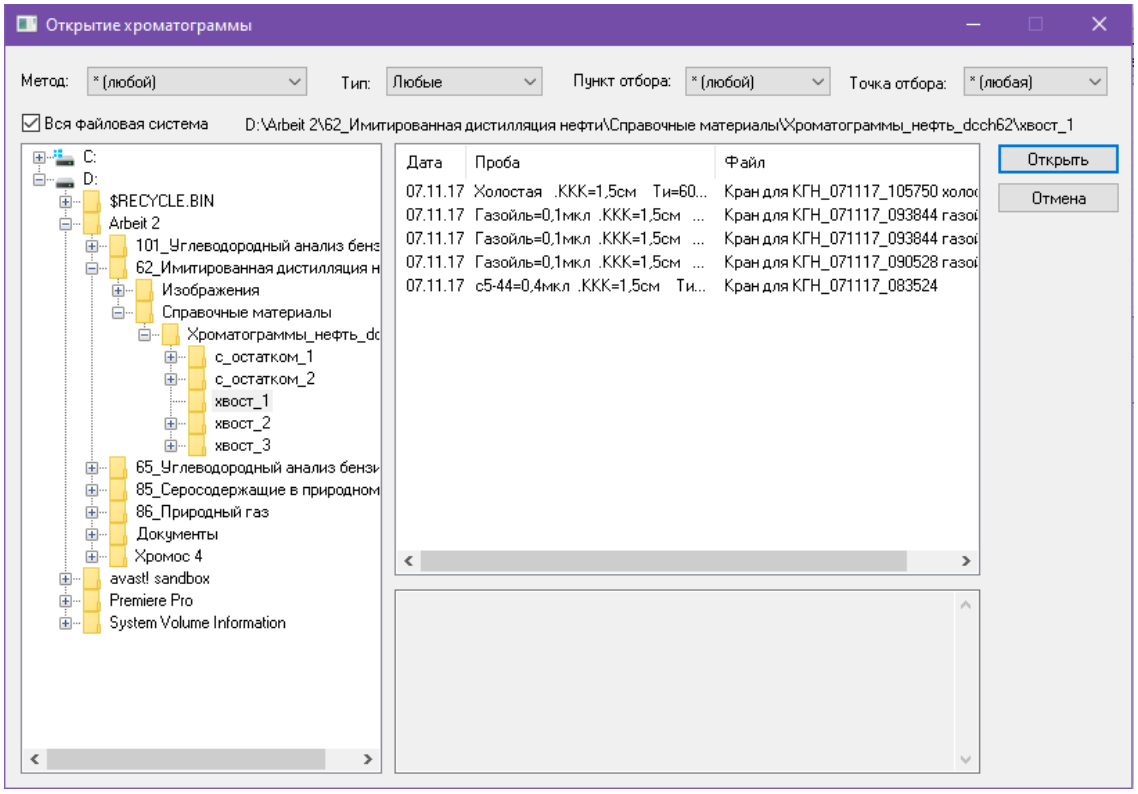


Рис. 3. Окно «Открытие хроматограммы»

- В основном окне программы в поле *Номер прибора* введите номер прибора.
- Настройте дополнительные компоненты (см. 8.1).

6. Работа с графиками

6.1. Градуировочный график

Информация о градуировочном графике представлена во вкладке *Град. график* (Рис. 4). Ниже приведено описание полей и действий по работе с графиком.

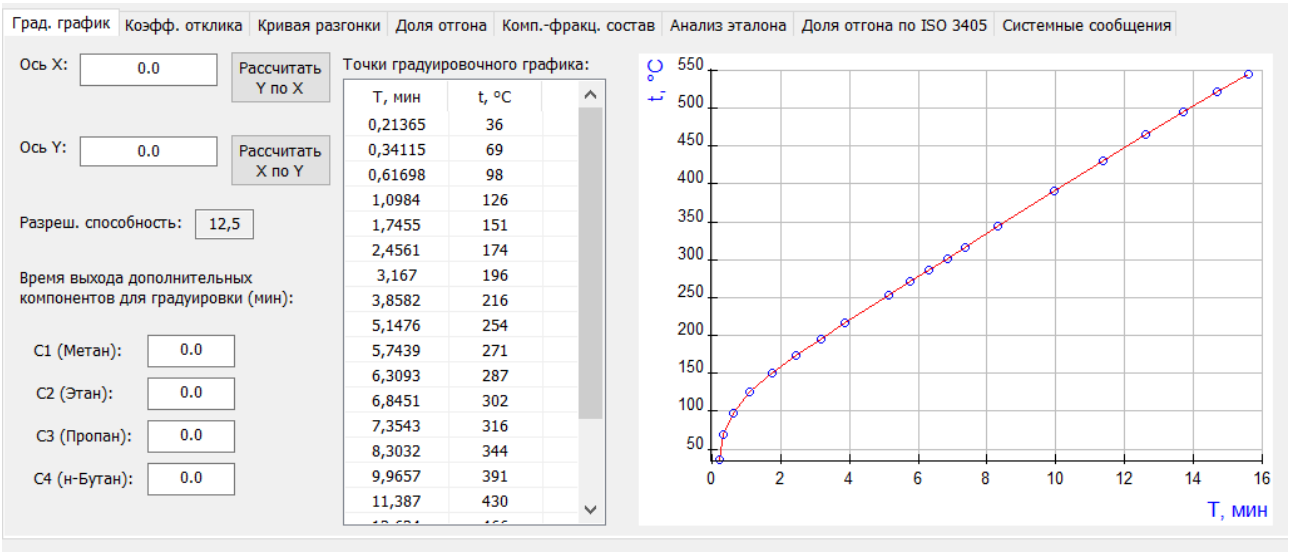


Рис. 4. Вкладка «Град. график»

Поля ввода *Ось X* и *Ось Y* предназначены для ручного расчёта значений по градуировочному графику.

- Чтобы получить данные по одной из осей, в поле *Ось X* или *Ось Y* введите значение и нажмите соответственно **Рассчитать Y по X** или **Рассчитать X по Y.**

Поле *Разреш. способность* отображает значение разрешающей способности капиллярной колонки по ГОСТ Р 56720-2015 п. 8.3. При несоответствии данного значения ГОСТ во вкладке *Системные сообщения* появляется сообщение об ошибке.

Поля ввода *Время выхода дополнительных компонентов для градуировки (мин)* служат для расширения диапазона градуировочного графика. Согласно ГОСТ Р 56720-2015 п. 9.3, для градуировочного графика используется смесь компонентов с С5 по С44, а анализируемые хроматограммы часто содержат компоненты с температурой кипения ниже, чем у С5. Это не позволяет провести часть расчётов, поэтому в программе добавлена возможность вручную ввести времена выхода дополнительных компонентов. Времена выхода соответствующих компонентов можно взять из анализируемой хроматограммы, предварительно обработанной в ПО «Хромос».

- Чтобы расширить диапазон градуировочного графика, в поля дополнительных компонентов введите значения их времён выхода.

Таблица *Точки градуировочного графика* отображает координаты точек, по которым построен график. На графике точки таблицы показаны в виде пустых синих кругов.

В отдельном окне можно открыть интерактивный график (Рис. 5). При клике в точку графика выводятся координаты этой точки. Окно графика можно развернуть на весь экран.

6.1. Градуировочный график

- Чтобы открыть интерактивный график, во вкладке *Град. график* дважды кликните по графику.

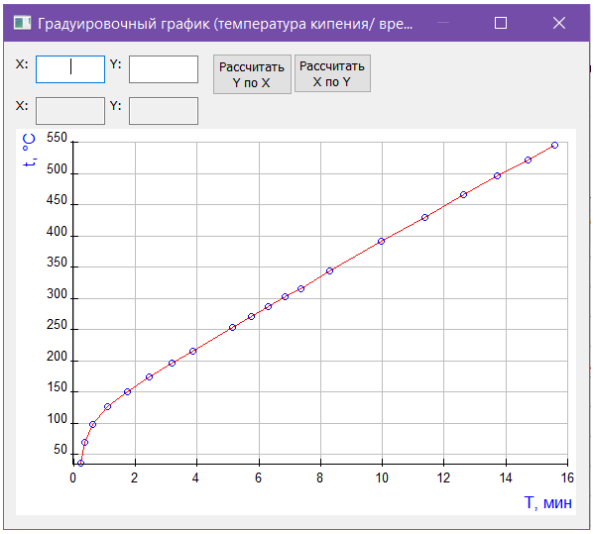


Рис. 5. Окно интерактивного графика

6.2. Кривая разгонки

Информация о графике кривой разгонки представлена во вкладке *Кривая разгонки*.

На кривой разгонки могут одновременно отображаться до трёх анализов. Графики соответствующих анализов изображены кривыми красного, синего и зелёного цветов.

- Чтобы отобразить график анализа, в сегменте соответствующего анализа поставьте флажок **Отобразить**.

Поля ввода *X* и *Y* предназначены для ручного расчёта значений по графику.

- Чтобы получить данные по одной из осей, в поле *X* или *Y* введите значение и нажмите соответственно **Рассчитать Y** или **Рассчитать X.**

В отдельном окне можно открыть интерактивный график (Рис. 6). При клике в точку графика выводятся координаты этой точки. Окно графика можно развернуть на весь экран.

- Чтобы открыть интерактивный график, во вкладке *Кривая разгонки* дважды кликните по графику.

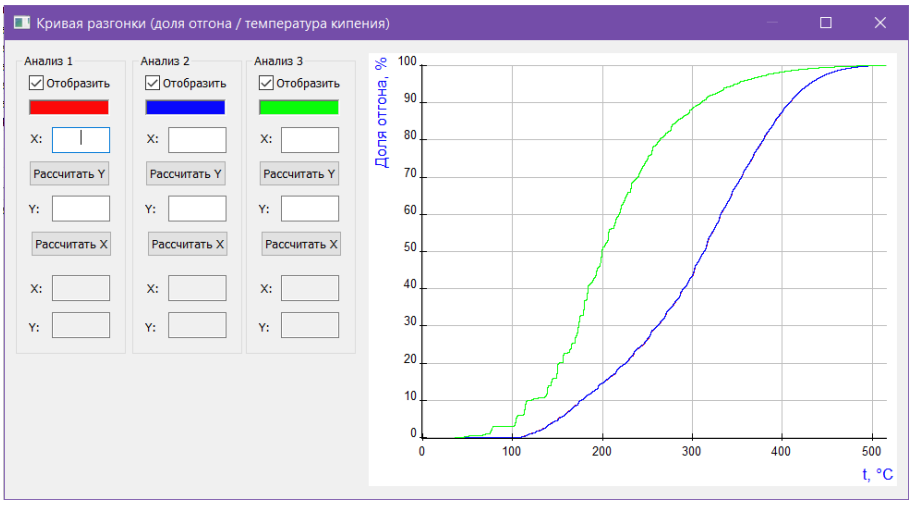
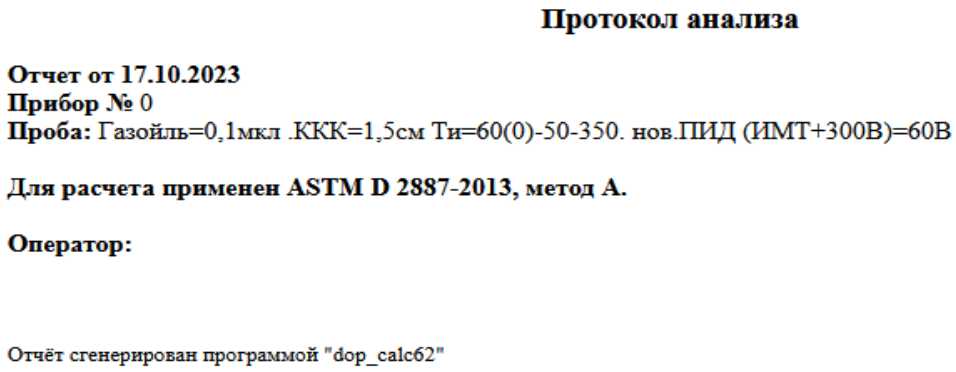


Рис. 6. Кривая разгонки

7. Вывод отчёта

Полученные данные расчёта можно сформировать в отчёт. В настройках отчёта (8.3) выбираются данные, которые будут добавлены в отчёт (Рис. 7).

- Чтобы сформировать отчёт, нажмите **Отчёт**. Он формируется в формате html и автоматически открывается браузером.



Протокол анализа

Отчет от 17.10.2023
Прибор № 0
Проба: Газойль=0,1мкл .ККК=1,5см Ти=60(0)-50-350. нов.ПИД (ИМТ+300В)=60В

Для расчета применен ASTM D 2887-2013, метод А.

Оператор:

Отчёт сгенерирован программой "dop_calc62"

Рис. 7. Отчёт

- Чтобы сохранить отчёт, нажмите **Сохранить отчёт**. В диалоговом окне укажите папку сохранения и нажмите **Сохранить**.

По умолчанию имя файла отчёта имеет вид **Report62_17102023_114811.html**, где:
- *Report62* – имя программы;
- *17102023* — дата в формате ДДММГГГГ;
- *114811* — время в формате ЧЧММСС;
- *html* – формат файла.

8. Настройка программы

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

8.1. Управление компонентами

В списке компонентов предустановлены записи о компонентах с C1 по C44, которые защищены от изменения и удаления. Добавленные в процессе работы компоненты можно редактировать и удалять. Для управления компонентами выполните следующие действия:

1. В основном окне нажмите **Компоненты**. Откроется окно *Компоненты* (Рис. 8).
2. Чтобы добавить компонент, нажмите **Добавить компонент**. В списке компонентов отобразится новая запись.
3. Для изменения данных дважды кликните по нужному полю. При редактировании новые компоненты подсвечены жёлтым, существовавшие — зелёным.

   - В поле *Имя* введите имя компонента.

   > Имена компонентов не должны повторяться.

   - В поле *Масс. коэфф. чувств.* введите значение массового коэффициента чувствительности.

   > Для исключения какого-либо пика из расчёта добавьте соответствующий компонент и задайте нулевое значение коэффициента чувствительности.

   - (Опционально) В поле *Доп. имя* введите дополнительное имя компонента.
   - В поле *Т кипения, °C* введите значение температуры кипения (в °C).
   - В поле *Масса комп. в смеси* введите значение массы компонента в смеси.

4. Чтобы удалить компонент, выделите его и нажмите **Удалить компонент(ы)**. Новые компоненты (жёлтые) будут удалены сразу, ранее существовавшие — помечены красным цветом.
5. Сохраните изменения, нажав **OK**. Цветовые маркировки записей исчезнут.

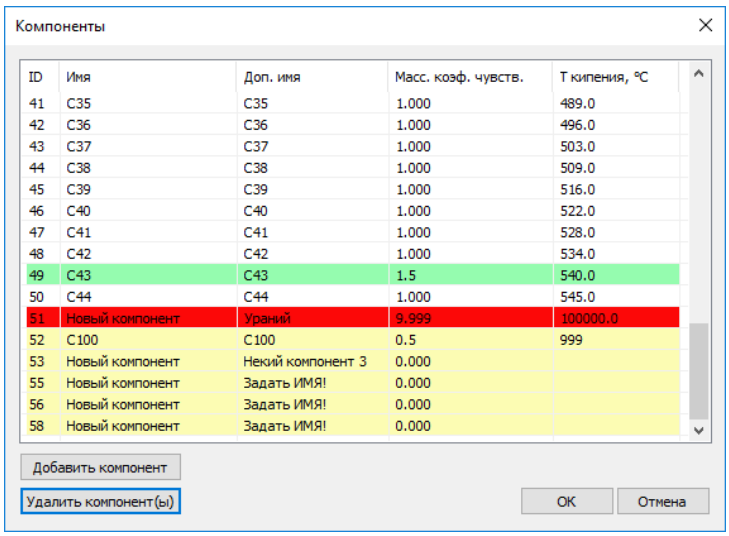


Рис. 8. Окно «Компоненты»

8.2. Настройка анализа

Чтобы задать параметры анализа, выполните следующие действия:

1. В основном окне нажмите **Настройки анализа**. Откроется окно *Настройка анализа* (Рис. 9).
2. В окне *Настройка анализа* выберите метод расчёта. В зависимости от выбранного метода будут доступны некоторые поля параметров.
3. В поле *Начало выхода пробы, мин* введите время начала выхода пробы (в мин.).
4. В поле *Шаг отгона пробы, %* введите значение шага отгона пробы (в %).
5. (Опционально) Чтобы очистить поле *Шаг отгона пробы, %*, нажмите **Сбросить шаг отгона**.
6. В поле *Масса внутр. стандарта, г* введите массу внутреннего стандарта (в граммах).
7. В поле *Масса пробы, г* введите массу пробы (в граммах).
8. В поле *Начало разметки фракций, °C* введите начальную температуру разметки фракций (в °C).
9. В поле *Шаг разметки фракций, °C* введите температурное значение шага разметки фракций (в °C).
10. В поле *Массовая доля сероводорода, %* введите массовую долю водорода (в %).
11. В поле *Массовая доля меркаптановой серы, %* введите массовую долю меркаптановой серы (в %).
12. В поле *Массовая доля воды, %* введите массовую долю воды (в %).
13. Сохраните изменения, нажав **OK**.

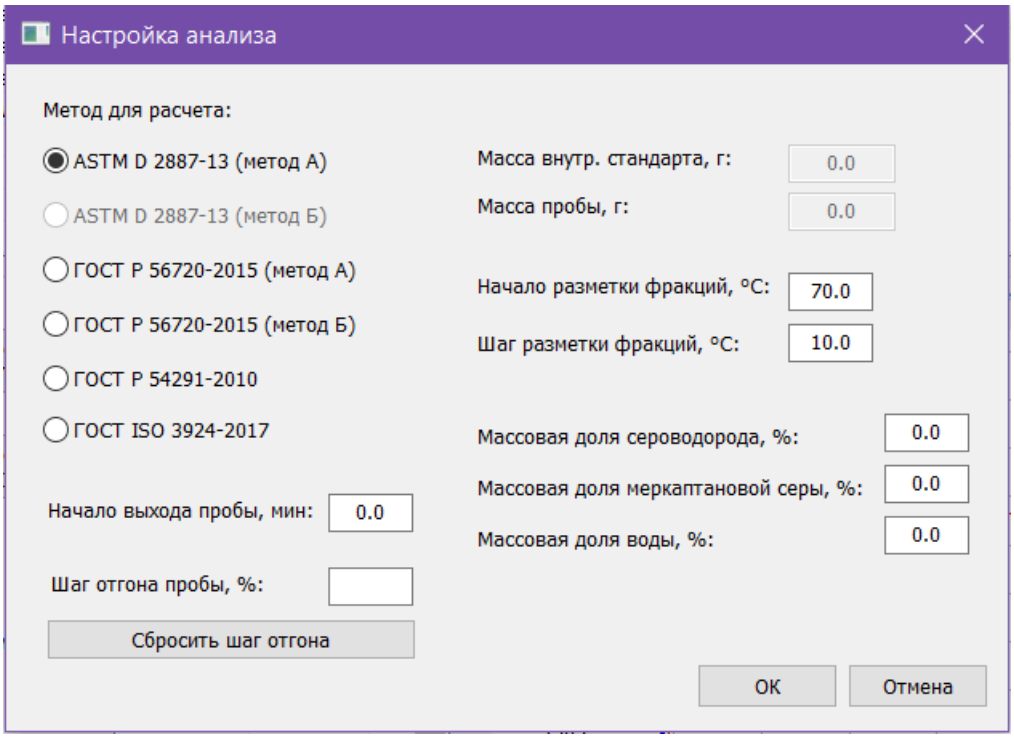


Рис. 9. Окно «Настройка анализа»

8.3. Настройка отчёта

Чтобы настроить содержание отчёта:

1. В основном окне нажмите **Настройки отчёта**. Откроется окно *Настройки отчёта* (Рис. 10).
2. В окне *Настройки отчёта* поставьте флажки напротив элементов, которые необходимо включить в отчёт.
3. Нажмите **OK**.

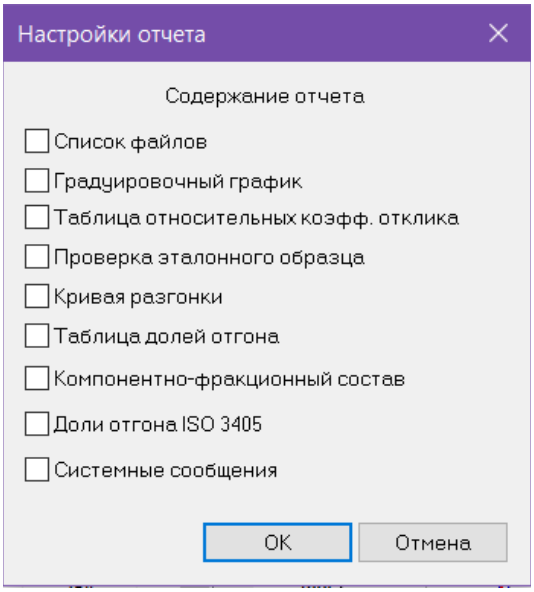


Рис. 10. Окно «Настройки отчёта»