



Руководство пользователя: Расчёт №117

«Методика №04-М-57-2024 Абсорбенты аминовые, содержащие диэтаноламин, метилдиэтаноламин, метилдиэтаноламин модифицированный специальный. Водные растворы метилдиэтанолamina, диэтанолamina, метилдиэтанолamina модифицированного специального. Методика выполнения измерений массовой доли компонентов.»

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

Редакция от 13 февраля 2025 г.
Актуальная версия: 1.0.0.0
Сайт: kb.has.ru

Содержание

1. Содержание.....	2
2. Введение.....	3
3. Установка программы.....	4
4. Интерфейс программы.....	5
Компоненты.....	5
Инф. о смеси.....	6
Градуировка.....	6
Расчёт.....	7
Сообщения.....	8
Настройки.....	8
5. Порядок проведения измерений.....	9
6. Отчёт.....	9

Введение

Этот расчёт предназначен для количественного химического анализа компонентов в пробах аминовых абсорбентов и водных растворов, содержащих диэтаноламин, метилдиэтаноламин и его модифицированные формы. Анализ проводится хроматографическим методом с использованием градуировки для точного определения состава проб. Методика применяется в системах газоочистки и позволяет рассчитывать концентрации компонентов с высокой точностью.

Данная программа работает как расширение для ПО «Хромос» (версия 4.x).

Установочный файл программы и сопутствующая документация доступны в сети Интернет по адресу: https://kb.has.ru/soft:dop_raschjot_117.

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

Установка программы

Для установки программы «Методика №04-М-57-2024» рекомендуется 5 Мб свободного места на жёстком диске.

Программа устанавливается как расширение (плагин) для ПО Хромос 4.x. Папку установки менять не рекомендуется.

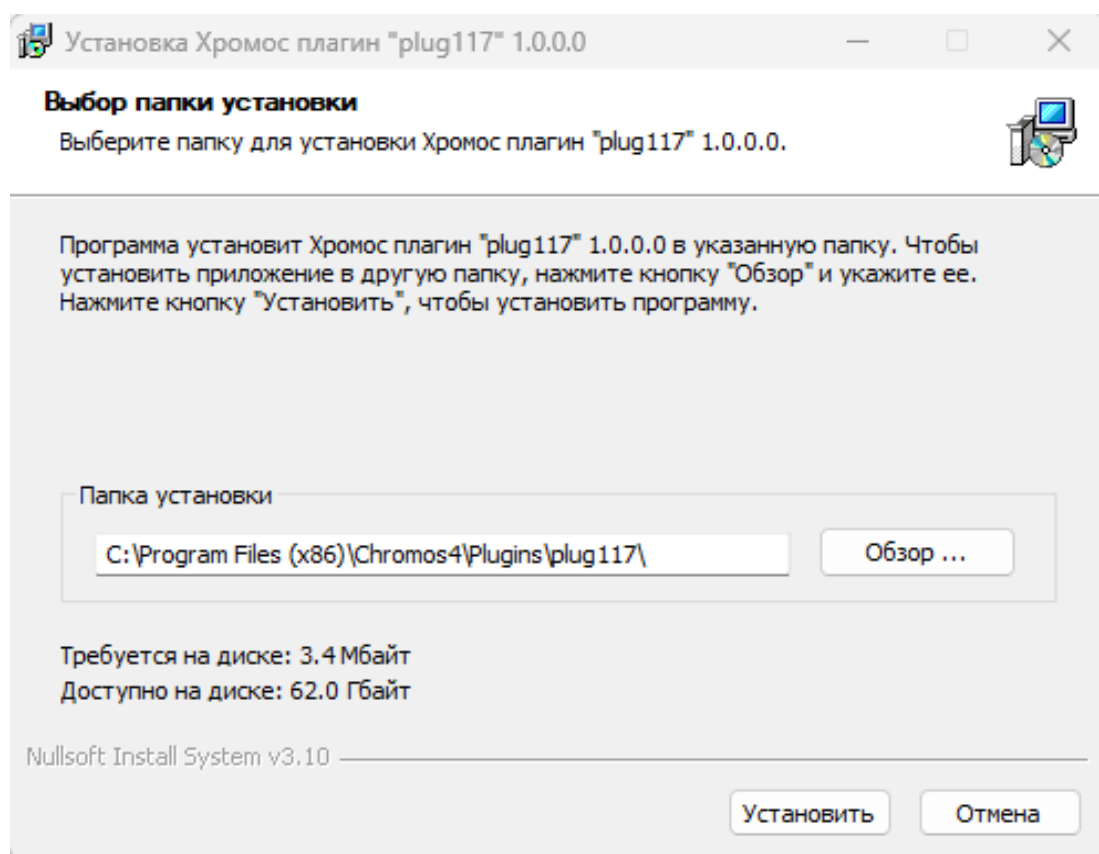


Рисунок 1: Установка программы

Интерфейс программы

Основное окно программы состоит из следующих элементов:

1. Элементы управления хроматограммами
2. Кнопка перерасчёта
3. Настройки программы
4. Кнопка создания отчёта
5. Список открытых хроматограмм
6. Набор вкладок и рабочие области расчёта

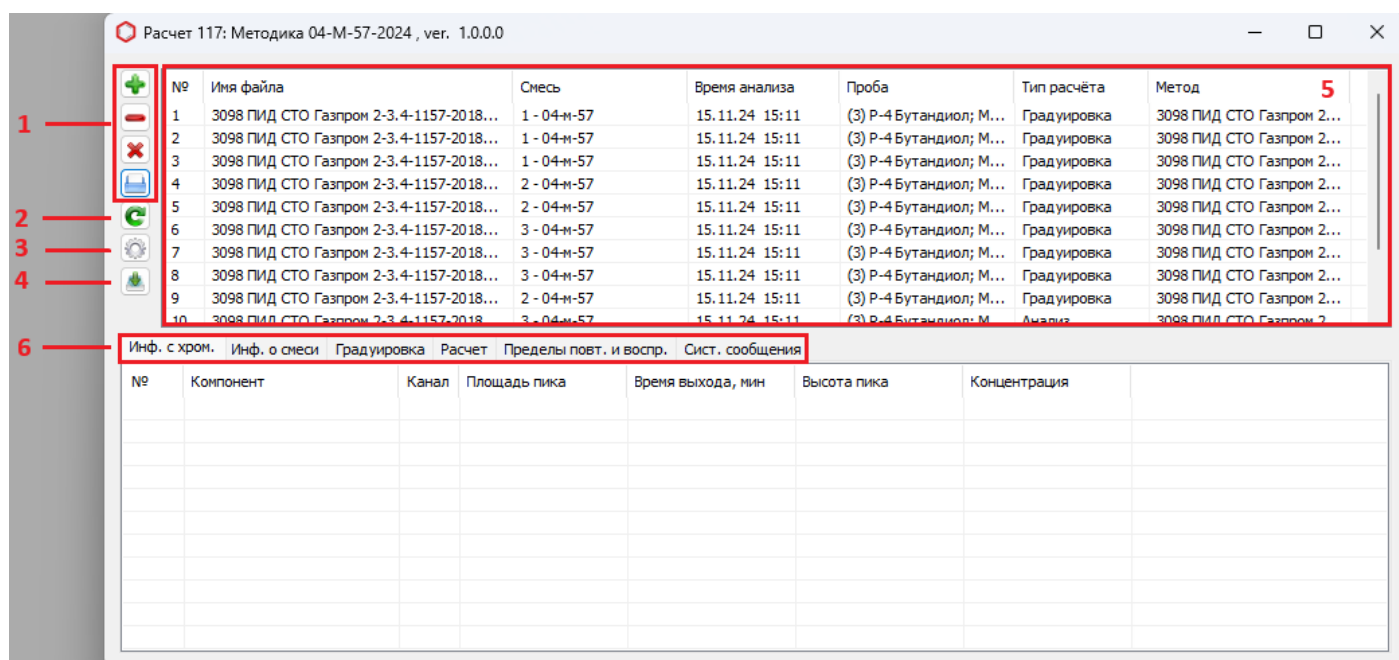


Рисунок 2: Основное окно программы

Компоненты

Отображает информацию о компонентах выбранной хроматограммы.

- № — порядковый номер
- Компонент — имя компонента
- Канал — канал, с которого отображаются данные
- Площадь пика — площадь пика компонента
- Время выхода, мин — время выхода компонента
- Высота пика — высота пика компонента
- Концентрация — концентрация компонента

Инф. о смеси

Вкладка информации о смеси содержит данные о градуировочных смесях всех загруженных хроматограмм.

Инф. с хром.	Инф. о смеси	Градуировка	Расчет	Пределы повт. и воспр.	Сист. сообщения
1 - 04-м-57				Дата выпуска : 30.01.2025	Действителен до : 30.01.2027
№	Компонент	Концентрация, моль %	Неопределенность, %отн		
1	ММЭА	0,900	0,000		
2	МЭА	4,200	0,000		
3	МДЭА	81,323	0,000		
4	ДЭА	8,247	0,000		

Рисунок 3: Вкладка с информацией о смеси

Таблица содержит следующие столбцы:

- № — порядковый номер
- Компонент — имя компонента в град. смеси
- Концентрация, моль % — массовая доля компонента в градуировочной смеси
- Неопределенность — неопределенность компонента в градуировочной смеси.

Также в левом верхнем углу вкладки расположен выпадающий список с именами смеси. В этом списке можно выбрать смеси, информацию о которой вы хотите посмотреть. Справа от этого списка информация о дате выпуска и сроке годности смеси.

Градуировка

Вкладка градуировки содержит информацию об абсолютной и относительной градуировке, а также результаты приемлемости (Получается из проверки результата коэффициента корреляции и ОСКО) и проверки (используя проверочную хроматограмму).

Инф. с хром.	Инф. о смеси	Градуировка	Расчет	Пределы повт. и воспр.	Сист. сообщения					
№	Компонент	К абс.	К абс. провер...	Проверка	К отн.	R	ОСКО	Приемливость	К отн. провер...	Проверка
1	ДЭА	0,411	0,424	Да	20,342	-0,170	8,496	Нет	20,899	Да
2	МДЭА	0,020	0,020	Да	1,000	0,992	0,000	Да	1,000	Да
3	МЭА	0,203	0,208	Да	10,082	0,438	3,321	Нет	10,247	Да
4	ММЭА	0,254	0,250	Да	12,834	-0,035	13,864	Нет	12,304	Да
5	1.3 Бутандиол	0,108	0,107	Да	5,353	-0,004	2,497	Нет	5,261	Да

Рисунок 4: Градуировка

- № — порядковый номер
- Компонент — имя компонента
- К абс. — градуировочный коэффициент по методу абсолютной градуировки
 - К абс. Проверочное — градуировочный коэффициент по методу абсолютной градуировки, рассчитанный по проверочной хроматограмме
- Проверка — результат проверки как расхождение град. коэф.
- К отн. — градуировочный коэффициент по методу относительной градуировки.
 - R — коэффициент корреляции
 - ОСКО — относительное среднеквадратичное отклонение
 - Приемлемость — соответствие коэф. корреляции и ОСКО ожидаемому результату
 - К отн. проверочное — градуировочный коэффициент по методу относительной градуировки, рассчитанный по проверочной хроматограмме
- Проверка — результат проверки как расхождение град. коэф.

Расчёт

Вкладка расчета содержит данные о результатах расчета, а также проверок.

Инф. с хром.	Инф. о смеси	Градуировка	Расчет	Пределы повт. и воспр.	Сист. сообщения		
Метод : Абсолютная градуировка							
№	Компонент	Массовая доля	Вхождение в диапазон	Расх. результатов	Повторяемость	Воспроизводимость	Внутрилаб. прециз...
1	ММЭА	0,9 ± 0,3	Да	7,7	Да	Да	Да
2	МЭА	3,8 ± 1,5	Да	0,4	Да	Да	Да
3	МДЭА	79,7 ± 31,9	Нет	0,0	Да	Да	Да
4	ДЭА	9,3 ± 3,4	Да	0,6	Да	Да	Да
5	1.3 Бутандиол	5,3 ± 0,0	Нет	0,2	Нет	Нет	Нет

Рисунок 5: Вкладка с информацией о результатах расчета

- № — порядковый номер
- Компонент — имя компонента
- Массовая доля — массовая доля компонента, рассчитанная по выбранному в выпадающем списке методом (левый верхний угол)
- Вхождение в диапазон — проверка полученной массовой доли на вхождение в диапазон значений (сверяется с таблицей 4 методики)
 - Расх. Результатов — расхождение двух параллельных результатов анализа, %
 - Повторяемость — соответствие пределу повторяемости
 - Воспроизводимость — соответствие пределу воспроизводимости (таблица 4)
 - Внутривлаб. прецизионность — результат проверки внутри лабораторной прецизионности

Сообщения

Сообщения — выводит сведения об ошибках, сообщения с предупреждениями о каком-либо несоответствии или невозможности выполнения расчётов в связи с отсутствием данных или некорректностью вводимых данных.

Настройки

В окне настроек можно выбрать основной компонент для относительной градуировки и указать массовую долю воды в абсорбенте, %.

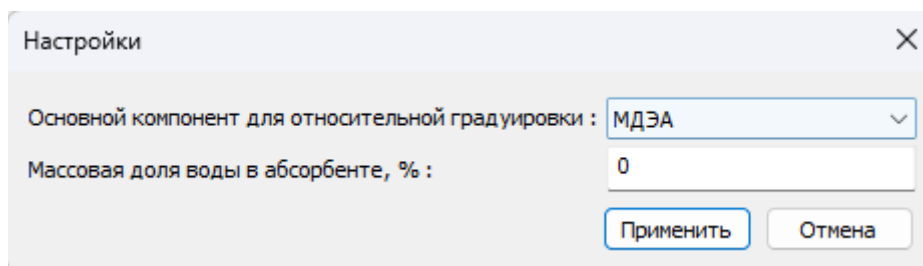


Рисунок 6: Окно настроек

Порядок проведения измерений

Для проведения расчёта в программу добавляются хроматограммы.

Для расчёта необходимо добавить **9 градуировочных хроматограмм, 2 анализируемых и 1 проверочную**. Градуировочные хроматограммы должны быть добавлены по 3 уникальным смесям, на каждую градуировочную смесь по 3 градуировочных хроматограммы.

При разметке пиков в хроматограммах настоятельно рекомендуется использовать сокращенные имена компонентов, указанные в тексте методики.

В градуировочной смеси должны быть те же компоненты что и в хроматограмме, а также компонентный состав градуировочных смесей не должен отличаться.

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.

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

В случае отсутствия необходимых хрм., данных или несоответствия приемлемости данных или результатов, для информативности во вкладке сообщения выводятся соответствующие сообщения.

Отчёт

Полученные данные расчёта можно сформировать в отчёт. Для этого необходимо нажать соответствующую кнопку в главном окне программы. Отчёт результатов расчёта формируется в формате html и автоматически открывается браузером.