XPOMOC

Руководство пользователя: Расчёт №117

«Методика №04-М-57-2024 Абсорбенты аминовые, содержащие диэтаноламин, метилдиэтаноламин, метилдиэтаноламин модифицированный специальный. Водные растворы метилдиэтаноламина, диэтаноламина, метилдиэтаноламина 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: <u>kb.has.ru</u>

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.х).

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

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.х Папку установки менять не рекомендуется.

🔂 Установка Хромос плагин "plug117" 1.0.0.0	—		\times
Выбор папки установки Выберите папку для установки Хромос плагин "plug117" 1.0.0.0.			1 2
Программа установит Хромос плагин "plug117" 1.0.0.0 в указаннук установить приложение в другую папку, нажмите кнопку "Обзор" Нажмите кнопку "Установить", чтобы установить программу.) папку. Ч	Нтобы те ее.	
Папка установки C:\Program Files (x86)\Chromos4\Plugins\plug117\	063	op	
Требуется на диске: 3.4 Мбайт Доступно на диске: 62.0 Гбайт Nullsoft Install System v3.10 Устан	овить	Отме	211

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

+	N₽	Имя файла		Смесь	Врем	я анализа	Проба		Тип расчёта	Метод
	1	3098 ПИД СТО Газпром 2	3.4-1157-2	018 1 - 04-м-57	15.1	1.24 15:11	(3) Р-4 Бутанди	ол; М	Градуировка	3098 ПИД СТО Газпро
	2	3098 ПИД СТО Газпром 2	3.4-1157-2	018 1-04-м-57	15.1	1.24 15:11	(3) Р-4 Бутанди	ол; М	Градуировка	3098 ПИД СТО Газпро
<u> </u>	3	3098 ПИД СТО Газпром 2	3.4-1157-2	018 1-04-м-57	15.1	1.24 15:11	(3) Р-4 Бутанди	ол; М	Градуировка	3098 ПИД СТО Газпро
	4	3098 ПИД СТО Газпром 2	3.4-1157-2	018 2 - 04-м-57	15.1	1.24 15:11	(3) Р-4 Бутанди	ол; М	Градуировка	3098 ПИД СТО Газпро
6	5	3098 ПИД СТО Газпром 2	3.4-1157-2	018 2 - 04-м-57	15.1	1.24 15:11	(3) Р-4 Бутанди	ол; М	Градуировка	3098 ПИД СТО Газпро
. 🥌 .	6	3098 ПИД СТО Газпром 2	3.4-1157-2	018 3-04-м-57	15.1	1.24 15:11	(3) Р-4 Бутанди	ол; М	Градуировка	3098 ПИД СТО Газпро
	7	3098 ПИД СТО Газпром 2	3.4-1157-2	018 3-04-м-57	15.1	1.24 15:11	(3) Р-4 Бутанди	ол; М	Градуировка	3098 ПИД СТО Газпро
	8	3098 ПИД СТО Газпром 2	3.4-1157-2	018 3-04-м-57	15.1	1.24 15:11	(3) Р-4 Бутанди	ол; М	Градуировка	3098 ПИД СТО Газпро
	-		2 4 1157 0	019 2 04 4 57	15.1	1.04.15.11	(3) P-4 Бутанли	ол: М	Градуировка	3098 EM/L CTO Esseno
	9	З098 ПИД СТО Газпром 2	5.4-1157-2	010 2-044-57	15,1	1,24 13:11	(o) i i by i drigge		традуировка	зозотид сто тазпро
Инф.	9 10 c xpo	3098 ПИД СТО Газпром 2 3098 ПИЛ СТО Газпром 2 М. Инф. о смеси Градуи	3.4-1157-2 3.4-1157-2 ровка Рас	018 2 - 04-м-57 018 3 - 04-м-57 счет Пределы повт. н	и воспр. Сист. (1.24 15:11 1.24 15:11 сообщения	(3) P-4 Бутаном	on: M	Лизпиз	3098 FMA CTO Fastpo
Инф. №	9 c xpo K	3098 ПИД СТОТ азпром 2 3098 ПИЛ СТО Газпром 2 М. Инф. о смеси Градуи омпонент	3.4-1157-2 3.4-1157-2 ровка Рас Канал	018 2 - 04-н-37 018 3 - 04-н-57 счет Пределы повт. и Площадь пика	и воспр. Сист. и Время выхода	1.24 15:11 1.24 15:11 сообщения а, мин Вы	(3) Р.4 Бутанди сота пика	Конце	традуйровка Анализ нтрация	3098 FIAD CTO Factor
Инф. №	9 c xpo K	3098 ПИД СТО Газпром 2 3098 ПИЛ СТО Газпром 2 М. Инф. о смеси Градуи омпонент	3.4-1157-2 3.4-1157-2 ровка Рас Канал	отя: 2-отн-37 отя: 3-о4-57 счет Пределы повт. и Площадь пика	15.1 15.1 воспр. Сист. (Время выхода	24 13-11 1 24 15-11 сообщения а, мин Вы	(3) В.4 Бутанли сота пика	Конце	традуировка Аналия нтрация	3008 FMA CTO Faanoo
Инф. №	c xpo	зова пид СТО Газпром 2 зова пид. СТО. Газпром 2 м. Инф. о счеси Градуи омпонент	3.4-1157-2 3.4-1157-2 ровка Рас Канал	отя 3-04ж-57 счет Пределы повт. к Площадь пика	и воспр. Сист. и Время выхода	сообщения а, мин Вы	(3) Р.4 Бутанди (3) Р.4 Бутанам	Конце	традупровка Аналия нтрация	3008 FMA CTO Faanno
№	9 c xpo K	зовя пид СТО Газпром 2 зовя ПИЛ. СТО. Газпром. 2 М. Инф. о снеси Градуи омпонент	3.4-1157-2 3.4.1157-2 ровка Рас Канал	оца. 2-очн-37 Оца 3-о4ж-57 счет Пределы повт. н Площадь пика	и воспр. Сист. и Время выхода	1.24 15:11 сообщения	(3) Р.4 Бутанди (3) Р.4 Бутанди	Конце	прадупровка Аналия нтрация	3008 DML CTO Faanno
 Инф. № 	9 c xpo Ka	зовя пид СТО Газпром 2 зовя пид СТО Газпром 2 м. Инф. о счеси Градуи омпонент	3.4-1157-2 3.4-1157-2 ровка Рас Канал	отя 3-04ж-57 счет Пределы повт. н Площадь пика	и воспр. Сист. (1.24 15:11 сообщения 3, мин Вы	(3) Р.4 Бутанди (3) Р.4 Бутанди	Конце	трация Аналия нтрация	3008 FMR CTO Faanno

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	Инф. с хром. Инф. о смеси		Расчет	Пределы повт. и воспр.	Сист. сообщения		
1 - 04-м-57		∨ Дат	а выпуска	: 30.01.2025	Действителен до : 30.01.2027		
№ Компонент			Концентр	рация, моль%	Неопределенность, %отн		
1	1 MMƏA				0,000		
2 MЭA			4,200		0,000		
3	МДЭА		81,323		0,000		
4	4 ДЭА				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:	кром. Инф. о смеси	Градуировка	Расчет Пределы по	вт. и воспр.	Сист. сообщения					
N₽	Компонент	К абс.	К абс. провер	Проверка	К отн.	R	ОСКО	Приемлимость	К отн. провер	Проверка
1	ДЭА	0,411	0,424	Да	20,342	-0,170	8,496	Нет	20,899	Дa
2	мдэа	0,020	0,020	Да	1,000	0,992	0,000	Да	1,000	Да
3	MƏA	0,203	0,208	Да	10,082	0,438	3,321	Нет	10,247	Да
4	MMƏA	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. со	Инф. с хром. Инф. о смеси Градуировка Расчет Пределы повт. и воспр. Сист. сообщения								
Метод:	Иетод: Абсолютная градуировка								
Nº	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)

• Внутрилаб. 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, %.

Настройки	×
Основной компонент для относительной градуировки :	мдэа 🗸
Массовая доля воды в абсорбенте, % :	0
	Применить Отмена

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 <u>настоятельно</u> рекомендуется использовать <u>сокращенные</u> 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.