

Плагин 121. Газы нефтепереработки и газопереработки.
Определение компонентного состава методом газовой
хроматографии

Оглавление

Интерфейс программы.....	3
Требования расчета 121.....	4
Особенности градуировки.....	5
Особенности работы с таблицей компонентов.....	6
Работа с настройками.....	8

Интерфейс программы

Программа содержит стандартный интерфейс, используемый во всех похожих расчетах Хромос4 (рисунок 1).

Группа кнопок под номером 1 предоставляет управление файлами хроматограмм. Группа кнопок под номером 2 предоставляет задаваемые настройки приложения, таблицу компонентов расчета с характеристиками и функционал формирования отчета с последующим его выводом. Список файлов под номером 3, показывает текущие загруженные и обработанные файлы хроматограмм. Вкладки под номером 4 отображают результаты расчетов.

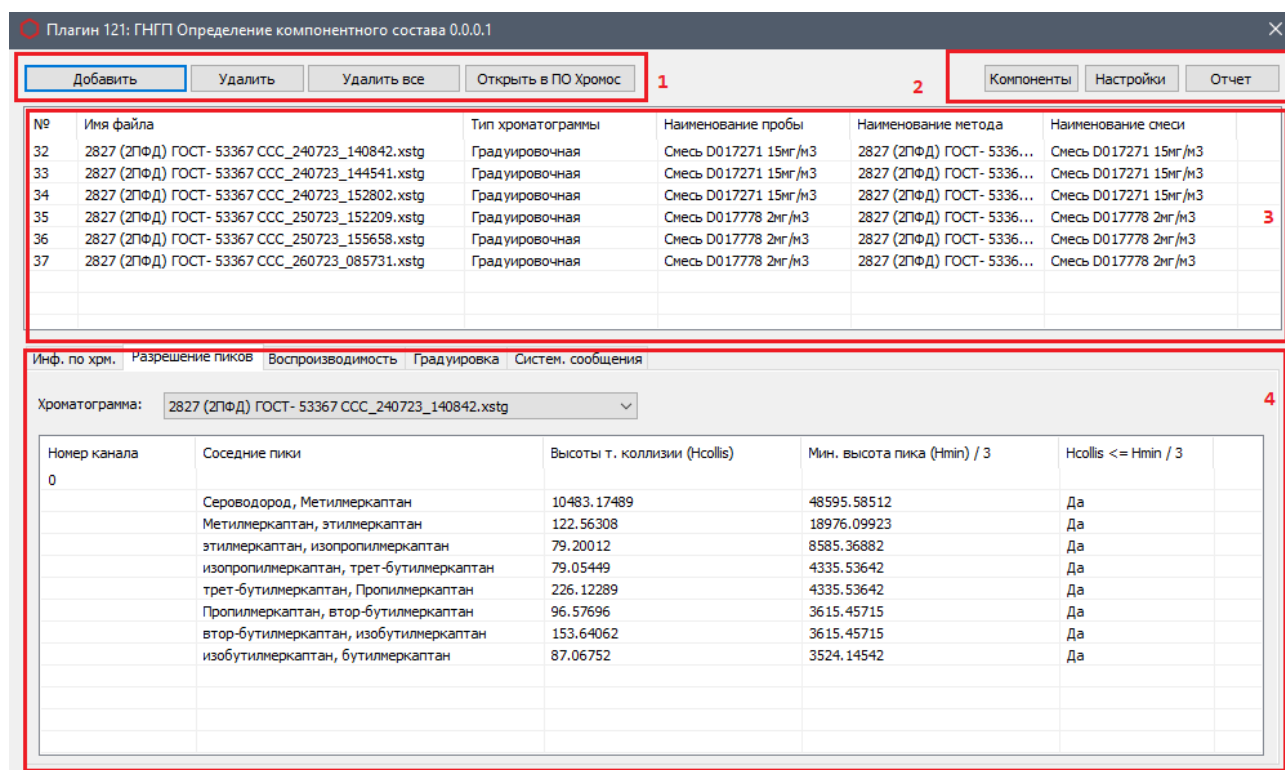


Рисунок 1

Требования расчета 121

Расчет производится согласно **ГОСТ 14920-2024**.

Так как в методике анализируются вещества разных типов, которые обнаруживаются на разных типах детекторов, необходимо настроить метод анализа таким образом, чтобы он имел **многоканальную конфигурацию**. Расчетная программа считывает и обрабатывает компоненты с нескольких каналов.

Поддерживаются хроматограммы следующих видов: **градуировочная, анализируемая**.

Для каждой из градуировочных хроматограмм в паспорте должна быть указана смесь и объем вводимой пробы, объем указывается в см³.

Для каждой из анализируемых хроматограмм в паспорте должен быть указан объем вводимой пробы, объем указывается в см³.

Текущая реализация расчета работает **только с молярными долями**.

Особенности градуировки

Метод измерений описывает различные способы градуировки. На текущий момент, расчет поддерживает **метод абсолютной градуировки**. Рассмотрим его более подробно.

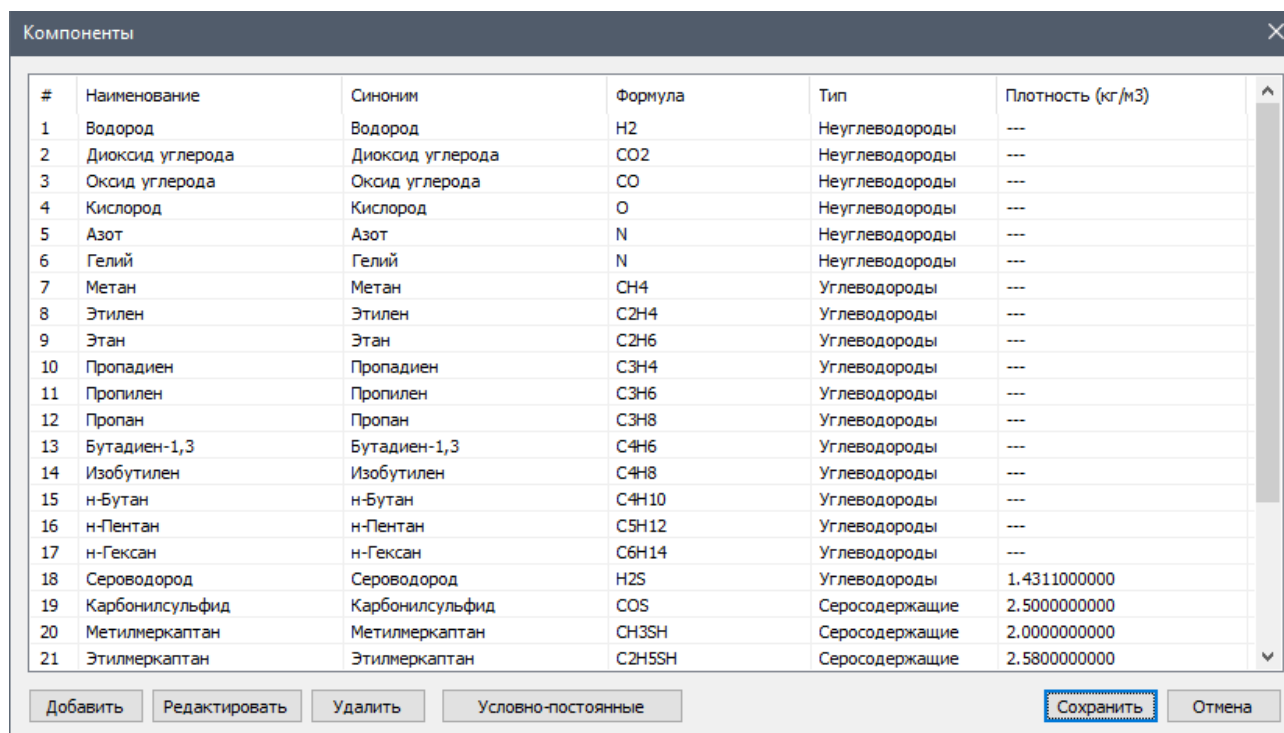
Метод абсолютной градуировки распространяется на два вида компонентов: **определение градуировочных характеристик при измерении углеводов и неуглеводородов и градуировка хроматографа с ПФД при измерении серосодержащих**. Требования ко второму виду градуировки более жесткие, в частности, требуется не менее 4-х экспериментально полученных точек (п. 11.4.4), в то время как для первого вида, имеется возможность использовать всего два градуировочных уровня, или же выполнить градуировку всего по одной точке (п. 11.4.2). В настройках программы для **первого** вида компонентов предоставлена возможность градуироваться по одной точке. В этом случае, в качестве градуировочной хроматограммы будет выбрана самая ранняя по дате проведения анализа, указанной в паспорте.

Если какие-либо компоненты хроматограммы отсутствуют в градуировочной смеси, расчет их не учитывает.

Наименования компонентов градуировочных смесей должны строго соответствовать наименованиям компонентов градуировочных хроматограмм.

Особенности работы с таблицей компонентов

Таблица компонентов программы представлена на рисунке 2.



#	Наименование	Синоним	Формула	Тип	Плотность (кг/м3)
1	Водород	Водород	H2	Неуглеводороды	---
2	Диоксид углерода	Диоксид углерода	CO2	Неуглеводороды	---
3	Оксид углерода	Оксид углерода	CO	Неуглеводороды	---
4	Кислород	Кислород	O	Неуглеводороды	---
5	Азот	Азот	N	Неуглеводороды	---
6	Гелий	Гелий	N	Неуглеводороды	---
7	Метан	Метан	CH4	Углеводороды	---
8	Этилен	Этилен	C2H4	Углеводороды	---
9	Этан	Этан	C2H6	Углеводороды	---
10	Пропadiен	Пропadiен	C3H4	Углеводороды	---
11	Пропилен	Пропилен	C3H6	Углеводороды	---
12	Пропан	Пропан	C3H8	Углеводороды	---
13	Бутадиен-1,3	Бутадиен-1,3	C4H6	Углеводороды	---
14	Изобутилен	Изобутилен	C4H8	Углеводороды	---
15	н-Бутан	н-Бутан	C4H10	Углеводороды	---
16	н-Пентан	н-Пентан	C5H12	Углеводороды	---
17	н-Гексан	н-Гексан	C6H14	Углеводороды	---
18	Серoводород	Серoводород	H2S	Углеводороды	1.4311000000
19	Карбонилсульфид	Карбонилсульфид	COS	Серосодержащие	2.5000000000
20	Метилмеркаптан	Метилмеркаптан	CH3SH	Серосодержащие	2.0000000000
21	Этилмеркаптан	Этилмеркаптан	C2H5SH	Серосодержащие	2.5800000000

Добавить Редактировать Удалить Условно-постоянные Сохранить Отмена

Рисунок 2

В программе уже присутствует некоторое количество первичных компонентов, их удаление запрещено, однако имеется возможность редактировать некоторые характеристики. В частности, имеется возможность изменить синоним, формулу, тип компонента и его значение плотности. Разберем представленные характеристики компонентов.

Формула компонента не влияет на логику расчета и служит для улучшения визуального восприятия.

Тип компонента. В соответствии с ГОСТом, программа работает с компонентами трех видов: **углеводороды**, **неуглеводороды** и **серосодержащие**. Соотнесение компонента к тому или иному виду, напрямую влияет на то, как компонент будет обрабатываться в ходе выполнения расчета. Отметим, например, что абсолютная градуировка для серосодержащих отличается от абсолютной градуировки остальных двух типов компонентов. Выделим среди компонентов **Серoводород**. Данный компонент может быть обработан двумя способами: как серосодержащие (детектор ПФД), так и на детекторе (ДТП).

Чтобы отнести **Сероводород** к группе серосодержащих, необходимо указать **тип** Серосодержащие, чтобы отнести его ко второй группе, необходимо указать любой оставшийся из двух типов компонентов.

Плотность компонента. Так как текущая версия расчета работает только с **молярными** долями, значение плотности компонента используется только при обработки серосодержащих, для компонентов остальных типов можно указать значение -1.

Синоним. В ходе загрузки хроматограмм, при наличии соответствующих стандартных образцов, может сложиться такая ситуация, что в смеси и в хроматограмме компонент называется одним способом, а в программной таблице другим способом. Чтобы не исправлять наименование компонента в каждой из смесей и в каждой из хроматограмм, имеется вместо этого возможность указать синоним. После записи верного синонима, программа сможет найти и обработать соответствующий компонент хроматограммы.

Добавление компонента. Если возникла необходимость в добавлении иного компонента, программа предоставляет такую возможность. Однако, строго не рекомендуется добавлять компонент, на который не распространяется действие ГОСТа, это приведет к тому, что программа не сможет корректно обработать данный компонент и выведет по нему неверные характеристики. Если же возникла необходимость добавить компонент, который присутствует в ГОСТе, но не занесен в таблицу компонентов, нужно поступить следующим образом. ГОСТ упоминает некоторые группы компонентов, как например **Пентаны**. Чтобы правильно добавить нужный компонент из группы пентаны, необходимо, при его добавлении, в качестве первичного **наименования** указать наименование группы, то есть Пентаны. В качестве синонима можно указать уже конкретное наименование компонента, то, которое используется в стандартом образце и в хроматограммах.

Отметим, что наименование и синоним не чувствительны к регистру.

Условно-постоянные. Программа позволяет при необходимости задавать условно-постоянные. Их присутствие с их концентрациями будут учитываться на этапе нормализации.

Работа с настройками

Настройки представлены на рисунке 3.

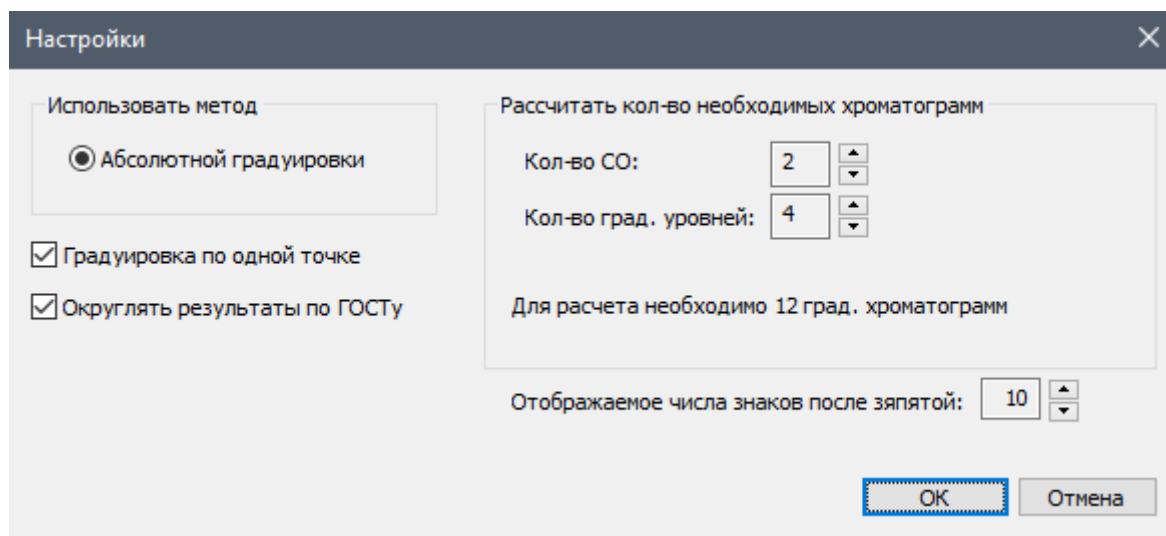


Рисунок 3

В настройках имеется возможность рассчитать количество необходимых хроматограмм для градуировки. Количество рассчитывается в соответствии с требованиями ГОСТа. Если количество загруженных градуировочных хроматограмм будет отличаться от количества требуемых, программа не начнет расчет.

Для компонентов, детектируемых на детекторах ПИД и ДТП (углеводороды и неуглеводороды, а также сероводород, при условии детектирования на ДТП) имеется возможность градуировки по одной точке. В этом случае, в качестве градуировочной хроматограммы будет выбрана самая ранняя по дате проведения анализа, указанной в паспорте. Однако, для выполнения градуировки серосодержащих, по-прежнему требуется градуировка по нескольким точкам (не менее 4-х в соответствии с ГОСТом).