



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

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

Редакция от 22 февраля 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

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).

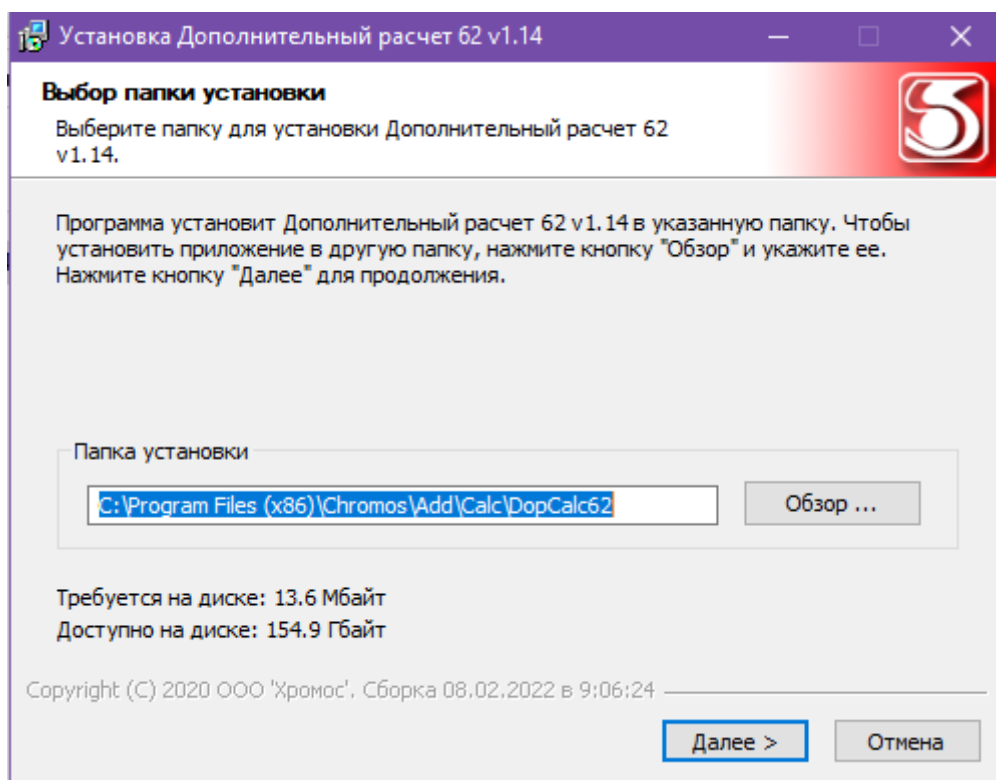


Рис. 1. Установка программы

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.

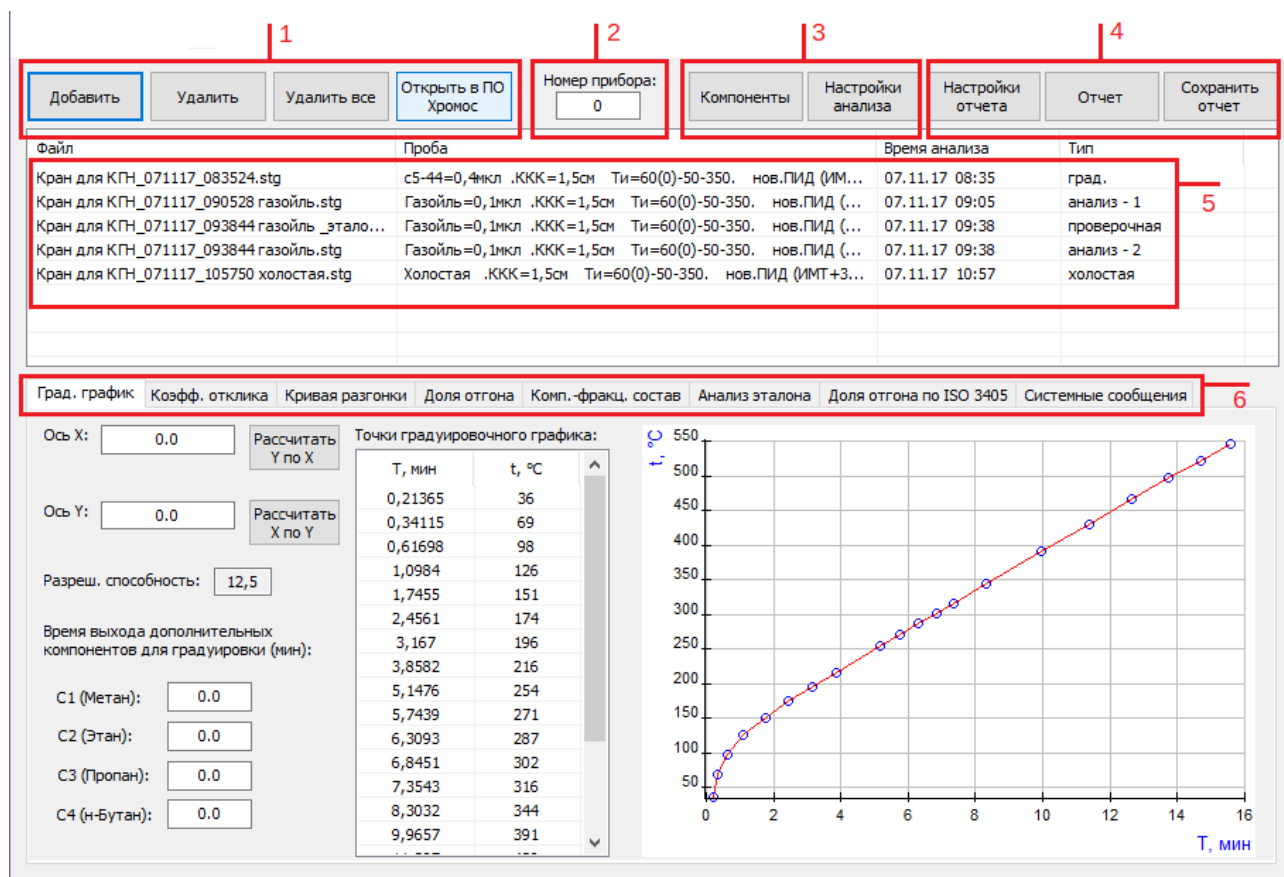


Рис. 2. Основное окно программы

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);
- *Коефф. отклика* — содержит результаты расчёта коэффициентов отклика (ASTM B2887-2013):
 - *N_г* — 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. А4)* — 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 потребоваться 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**.

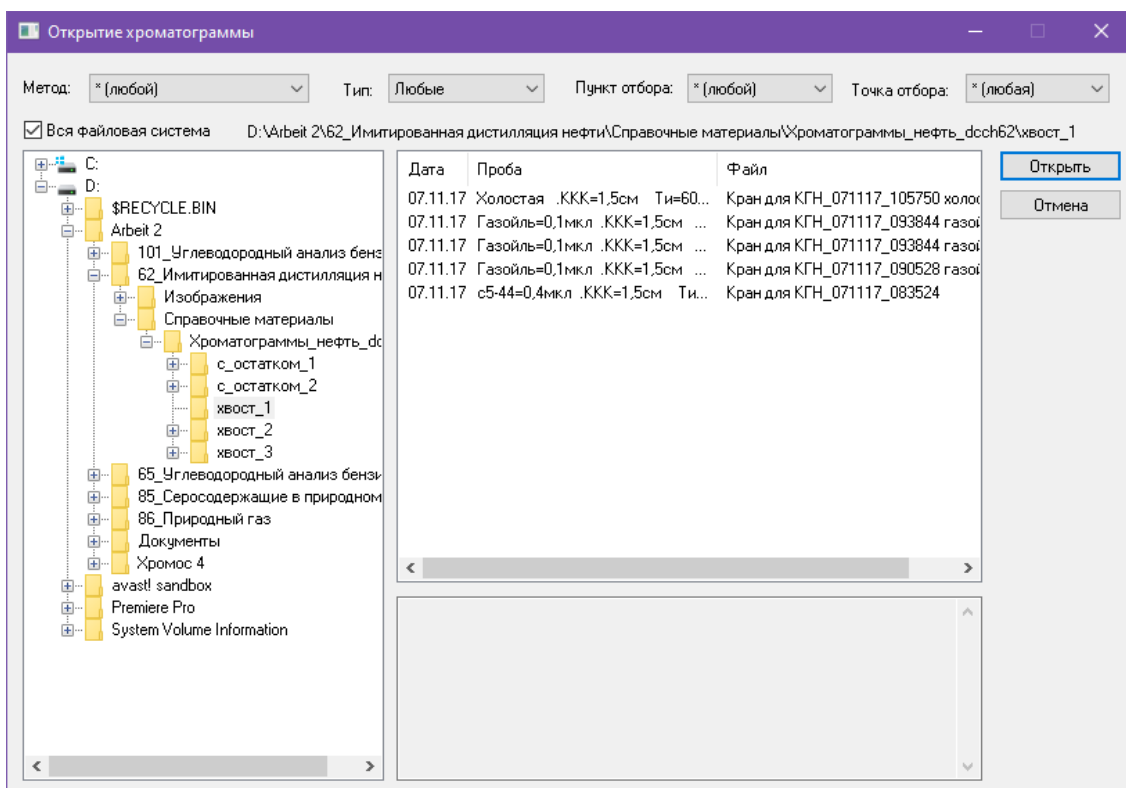


Рис. 3. Окно «Открытие хроматограммы»

- 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.

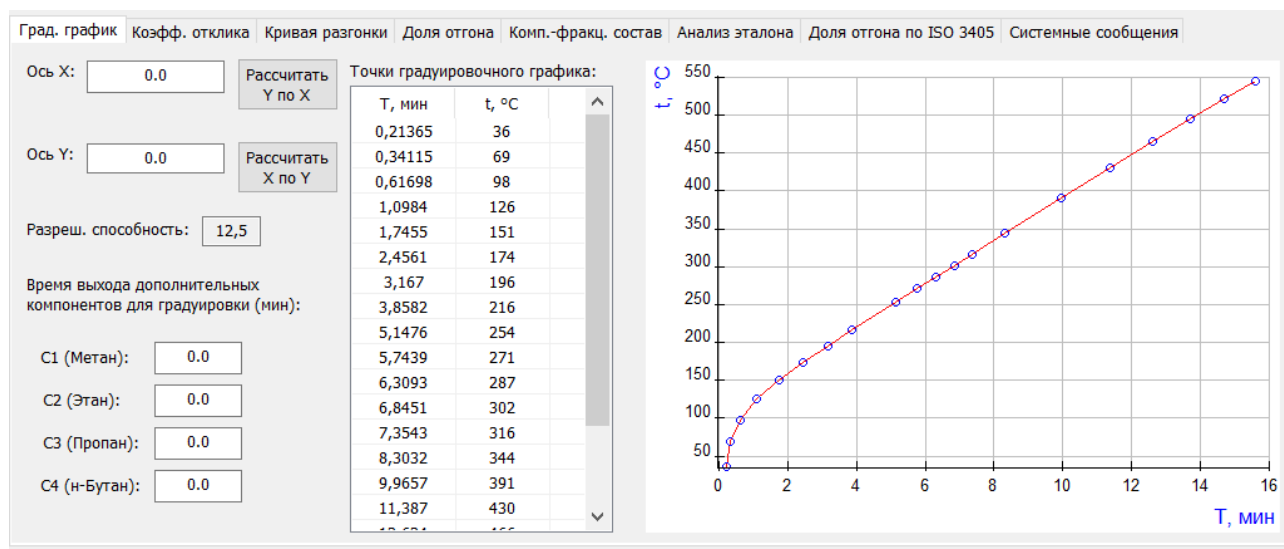


Рис. 4. Вкладка «Град. график»

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 C5 по C44, а анализируемые хроматограммы часто содержат компоненты с температурой кипения ниже, чем у C5. 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.

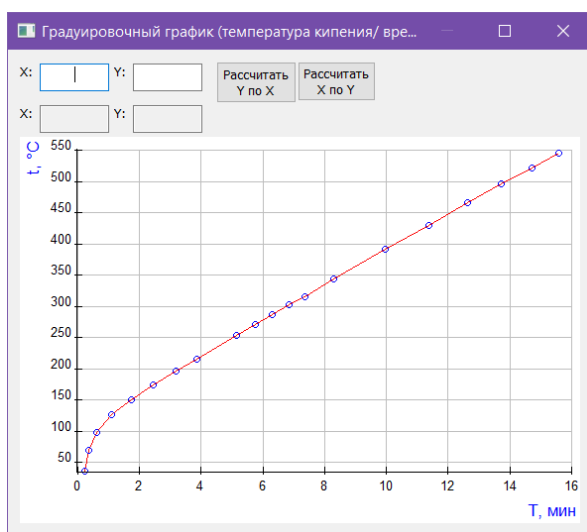


Рис. 5. Окно интерактивного графика

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.

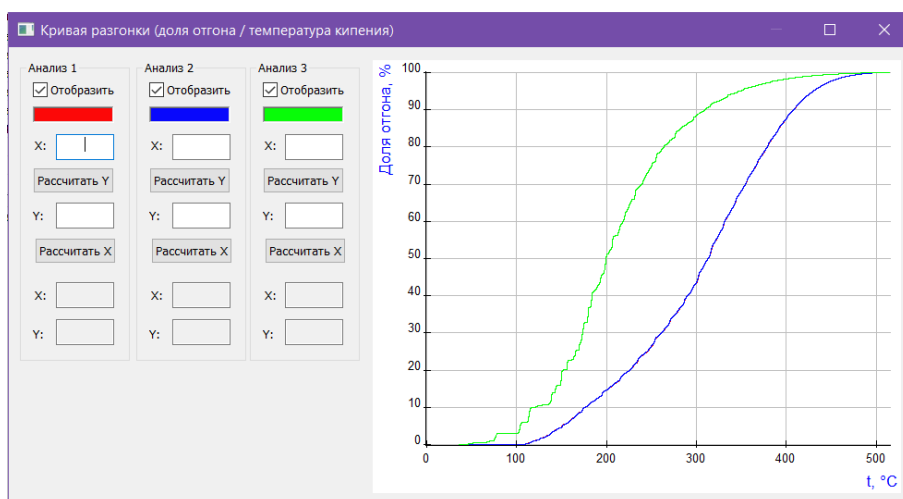


Рис. 6. Кривая разгонки

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 Тн=60(0)-50-350. нов.ПВД (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 С1 по С44, 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 **ОК**. Цветовые маркировки записей исчезнут.

ID	Имя	Доп. имя	Масс. коэф. чувств.	Т кипения, °C
41	С35	С35	1.000	489.0
42	С36	С36	1.000	496.0
43	С37	С37	1.000	503.0
44	С38	С38	1.000	509.0
45	С39	С39	1.000	516.0
46	С40	С40	1.000	522.0
47	С41	С41	1.000	528.0
48	С42	С42	1.000	534.0
49	С43	С43	1.5	540.0
50	С44	С44	1.000	545.0
51	Новый компонент	Ураний	9.999	100000.0
52	С100	С100	0.5	999
53	Новый компонент	Некий компонент 3	0.000	
55	Новый компонент	Задать ИМЯ!	0.000	
56	Новый компонент	Задать ИМЯ!	0.000	
58	Новый компонент	Задать ИМЯ!	0.000	

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 **ОК**.

Настройка анализа

Метод для расчета:

ASTM D 2887-13 (метод А) Масса внутр. стандарта, г: 0.0

ASTM D 2887-13 (метод Б) Масса пробы, г: 0.0

ГОСТ Р 56720-2015 (метод А) Начало разметки фракций, °C: 70.0

ГОСТ Р 56720-2015 (метод Б) Шаг разметки фракций, °C: 10.0

ГОСТ Р 54291-2010

ГОСТ ISO 3924-2017

Начало выхода пробы, мин: 0.0

Шаг отгона пробы, %:

Сбросить шаг отгона

Массовая доля сероводорода, %: 0.0

Массовая доля меркаптановой серы, %: 0.0

Массовая доля воды, %: 0.0

ОК Отмена

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 **ОК**.

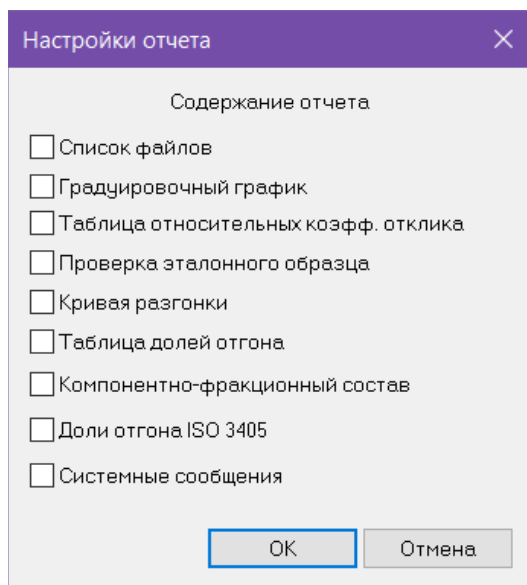


Рис. 10. Окно «Настройки отчёта»