Руководство пользователя: Расчёт №74 «Определение серосодержащих соединений в нефтях»

ООО «ХРОМОС Инжиниринг»
г. Дзержинск

Редакция от 13 августа 2025 г.
Актуальная версия: 2.18.1
Internet: kb.has.ru

Содержание

1. Введение....3
2. Установка программы....4
3. Интерфейс программы....5
4. Порядок проведения измерений....7
5. Добавление данных....11
6. Вывод отчёта....12
7. Экспорт данных....13
8. Управление компонентами....14
9. Настройка программы....15
    9.1. Общие настройки расчёта....15
    9.2. Настройки хроматограмм....16
    9.3. Настройки баллонов....17
10. Идентификация программы....19

1. Введение

Программа «Определение серосодержащих соединений в нефтях» предназначена для анализа хроматограмм, полученных при помощи ПО «Хромос», на предмет определения сероводорода, метил- и этилмеркаптанов в нефтях согласно ГОСТ Р 50802-2021 и ГОСТ 32918-2014.

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_74.

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

2. Установка программы

Для установки программы «Определение серосодержащих соединений в нефтях» рекомендуется 6 Мб свободного места на жёстком диске.

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

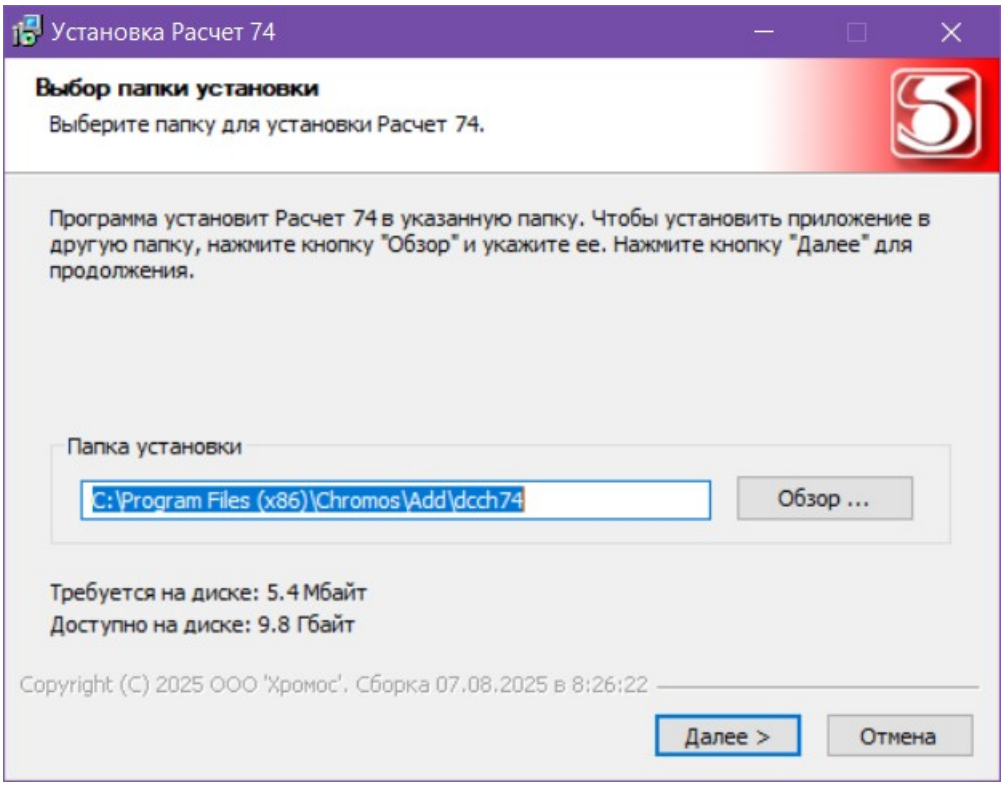

Рис. 1: Установка программы

3. Выберите папку для расположения ярлыка в меню *Пуск* или поставьте флажок *Не создавать ярлык.*
4. Нажмите **Установить**.
5. По завершении установки нажмите **Готово**.

3. Интерфейс программы

Основное окно программы (Рис. 2) состоит из следующих элементов:

1. Элементы управления хроматограммами;
2. Кнопка обновления результатов расчёта;
3. Кнопка вызова окна настроек;
4. Кнопка вызова таблицы компонентов;
5. Элементы управления отчётом;
6. Кнопка запуска экспорта данных;
7. Список анализируемых хроматограмм;
8. Набор вкладок и рабочие области расчёта.

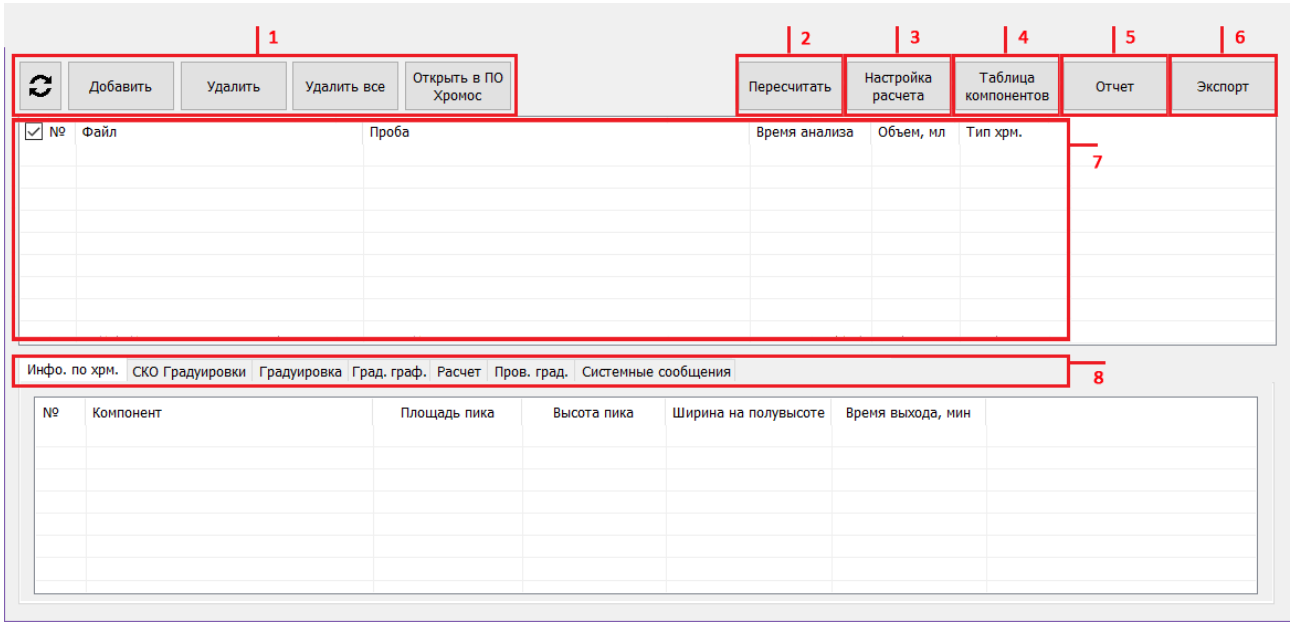

Рис. 2. Основное окно программы

Основное окно программы включает вкладки рабочих областей:

- *Инфо по хрм.* — информация по хроматограмме:
  - *№* — номер строки;
  - *Компонент* — имя компонента пробы;
  - *Площадь пика* — площадь пика;
  - *Высота пика* — высота пика;
  - *Ширина на полувысоте* — ширина пика на ½ его высоты;
  - *Время выхода, мин* — время выхода пика в минутах;

- *СКО градуировки* — среднее квадратичное отклонение градуировки (см. 9.1):
  - *Компонент* — поле выбора компонента;
  - *№* — номер строки;
  - *Точка градуировки* — точка градуировки;
  - *Кол-во пиков* — количество пиков;
  - *Ср. площадь* — усреднённая площадь пиков;
  - *СКО* — среднее квадратичное отклонение;
  - *СКО, %* — расхождение среднего квадратичного отклонения, %;

  - *Норматив, %* — допустимое расхождение среднего квадратичного отклонения, %;
  - *Соотв.* — соответствие нормативу;

- *Градуировка* — данные по градуировке:
  - *Компонент* — поле выбора компонента;
  - *№* — номер строки;
  - *Хроматограмма* — идентификатор хроматограммы;
  - *Объём, см^3* — объём градуировочной смеси (в см^3);
  - *Конц, мг/м^3* — массовая концентрация сернистого соединения в СО (мг/м^3), пересчитывается в мг/м^3 из единиц, выбранных в поле *Единицы измерения концентраций компонентов* в настройках программы;
  - *Площадь* — площадь пика серосодержащего соединения;
  - *Масса ССС, нг* — масса серосодержащего соединения (в нг);
  - *lg(m)* — lg массы серосодержащего соединения;
  - *lg(S)* — lg площади пика серосодержащего соединения;

- *Град. граф.* — градуировочный график:
  - *Компонент* — поле выбора компонента;
  - *№* — номер строки;
  - *Хроматограмма* — идентификатор хроматограммы;
  - *lg(m)* — lg массы серосодержащего соединения;
  - *lg(S)* — lg площади пика серосодержащего соединения;

- *Расчёт* — результаты расчёта:
  - *№* — номер строки;
  - *Компонент* — имя компонента;
  - *lg(m)* — lg массы серосодержащего соединения;
  - *lg(S)* — lg площади пика серосодержащего соединения;
  - *Конц. млн$^{-1}$* — концентрация компонента (в ppm, мкг/г);
  - *Ср. конц. млн$^{-1}$* — усреднённая концентрация компонента (в ppm, мкг/г);
  - *Расхожд, млн$^{-1}$* — расхождение (в ppm, мкг/г);
  - *Норматив, млн$^{-1}$* — норматив сходимости/воспроизводимости (в ppm, мкг/г);
  - *Соотв.* — соответствие нормативу;

- *Пров. град.* — проверка градуировки:
  - *№* — номер строки;
  - *Компонент* — имя компонента;
  - *lg(m)* — lg массы серосодержащего соединения;
  - *lg(S)* — lg площади пика серосодержащего соединения;
  - *Конц. млн$^{-1}$* — концентрация компонента (в ppm, мкг/г);
  - *Ср. конц. млн$^{-1}$* — усреднённая концентрация компонента (в ppm, мкг/г);
  - *Зад. конц. млн$^{-1}$* — заданная концентрация компонента (в ppm, мкг/г);
  - *Расхожд, млн$^{-1}$* — расхождение (в ppm, мкг/г);
  - *Норматив, млн$^{-1}$* — норматив сходимости/воспроизводимости (в ppm, мкг/г);
  - Соотв. — соответствие нормативу;

- *Системные сообщения* — 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 используются три типа хроматограмм: градуировочные, проверочные и анализируемые. Перед использованием хроматограммы в расчёте необходимо указать тип в паспорте хроматограммы.

Градуировочные хроматограммы используются для построения градуировочной зависимости. Согласно ГОСТ, требуется несколько хроматограмм данного типа. Для работы программы требуется минимум две хроматограммы.

В паспорте хроматограммы должны быть заполнены поля *Проба* и *Масса пробы*, а также установлен флаг *Градуировочная* (Рис. 3). Поле *Проба* должно содержать наименование ГСО (баллона), по которому получена данная хроматограмма. Наименование должно совпадать с идентификатором баллона из списка градуировочных баллонов (9.3). Поле *Масса пробы* должно содержать значение объёма введённой пробы в мл (см^3). Для идентификации типа хроматограммы должен быть установлен флаг *Градуировочная* или же в поле *Проба* должно быть написано «**град**».

Поле *Проба* всех хроматограмм может содержать любую информацию на усмотрение оператора и не ограничено ничем, кроме использования слов идентификации хроматограмм и баллонов («**град**» и «**пров**»).

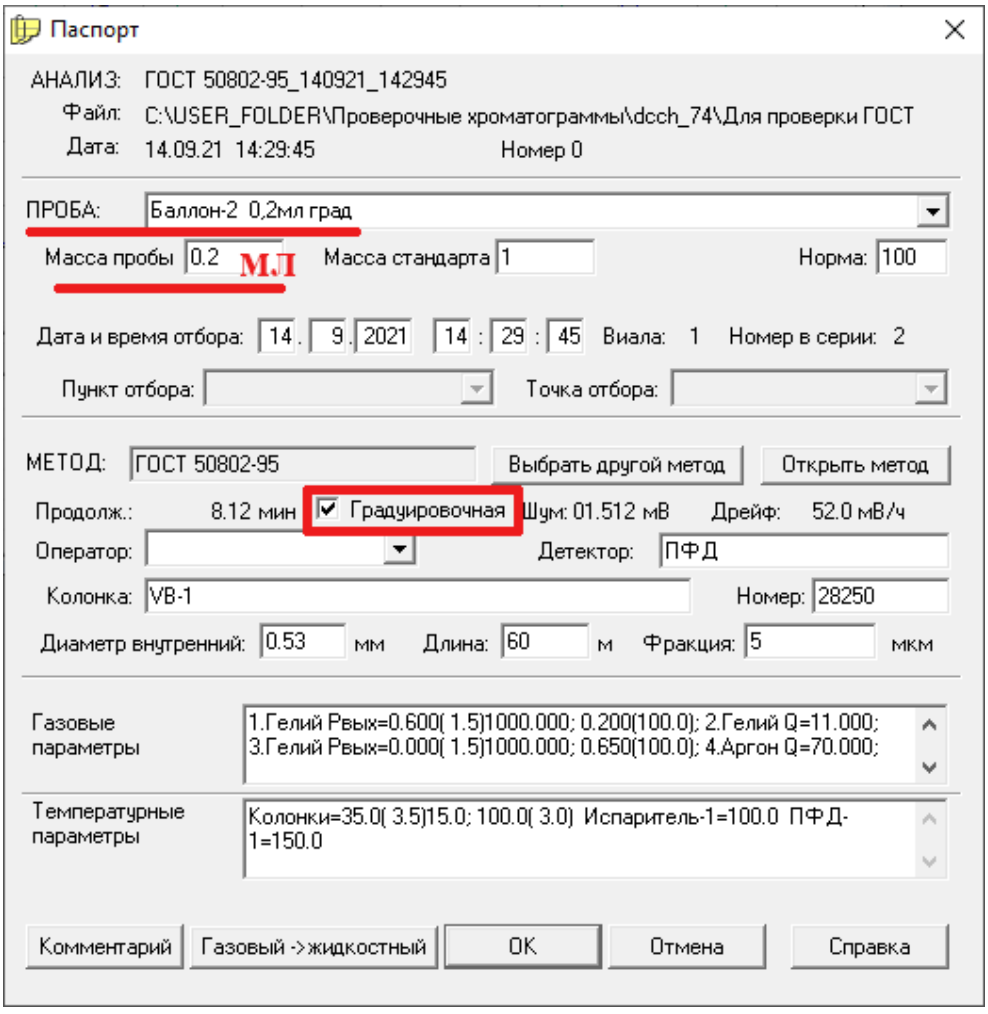

Рис. 3: Паспорт градуировочной хроматограммы

4. Порядок проведения измерений

Проверочные хроматограммы используются для проверки полученной градуировочной зависимости. В ГОСТ количество хроматограмм данного типа не регламентировано, для работы программы требуется минимум одна хроматограмма.

В паспорте хроматограммы должны быть заполнены поля *Проба* и *Масса пробы* (Рис. 4). Поле *Масса пробы* должно содержать значение объёма введённой пробы в мл (см³). Для идентификации типа хроматограммы в поле *Проба* должно быть написано «**пров**».

Концентрации компонентов указываются вручную в соответствующих полях хроматограммы (Рис. 5) или в настройках баллонов (9.3).

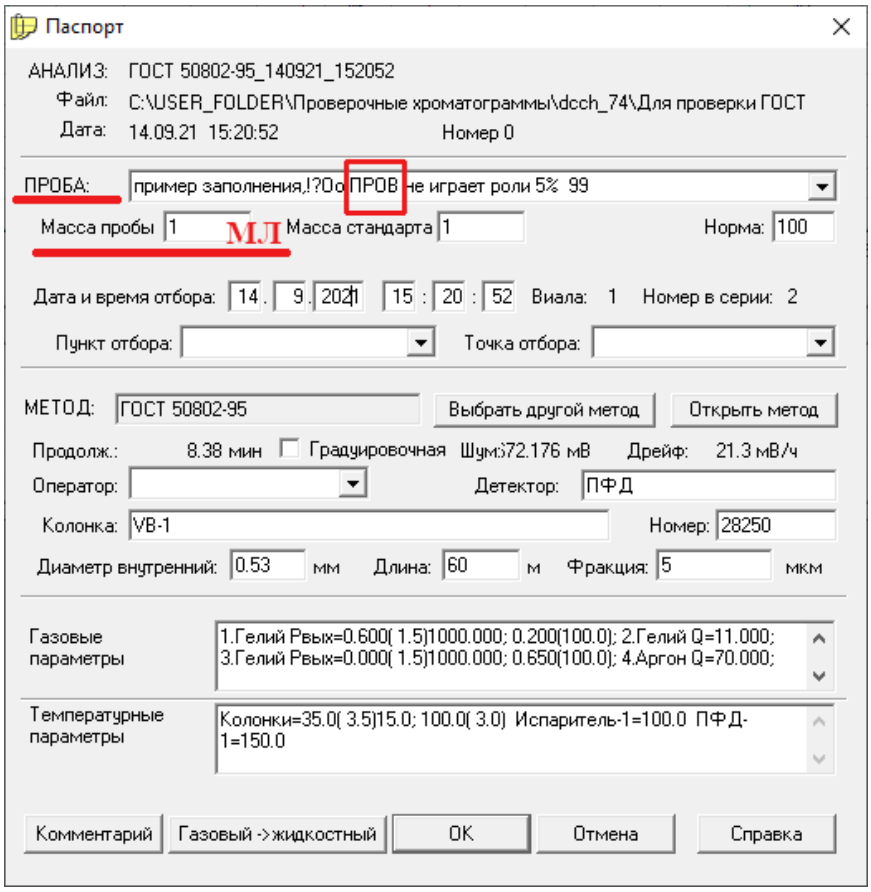

Рис. 4: Паспорт проверочной хроматограммы

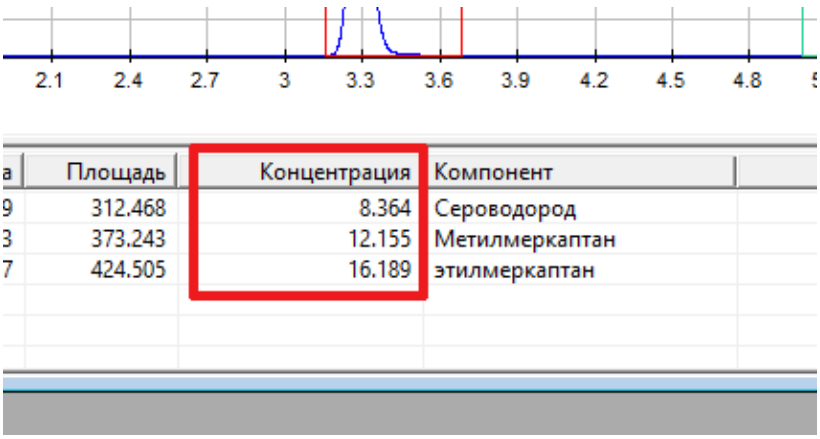

Рис. 5: Указание концентраций компонентов для проверки

4. Порядок проведения измерений

Анализируемые хроматограммы используются для расчёта концентраций серосодержащих компонентов в пробе. Согласно ГОСТ, требуется две хроматограммы данного типа. Для работы программы требуется минимум одна хроматограмма.

В паспорте хроматограммы должно быть заполнено поле *Масса пробы*, где указывается значение объёма введённой пробы в мкл (мм³). Поле *Проба* может быть заполнено произвольно и не требует особых пометок.

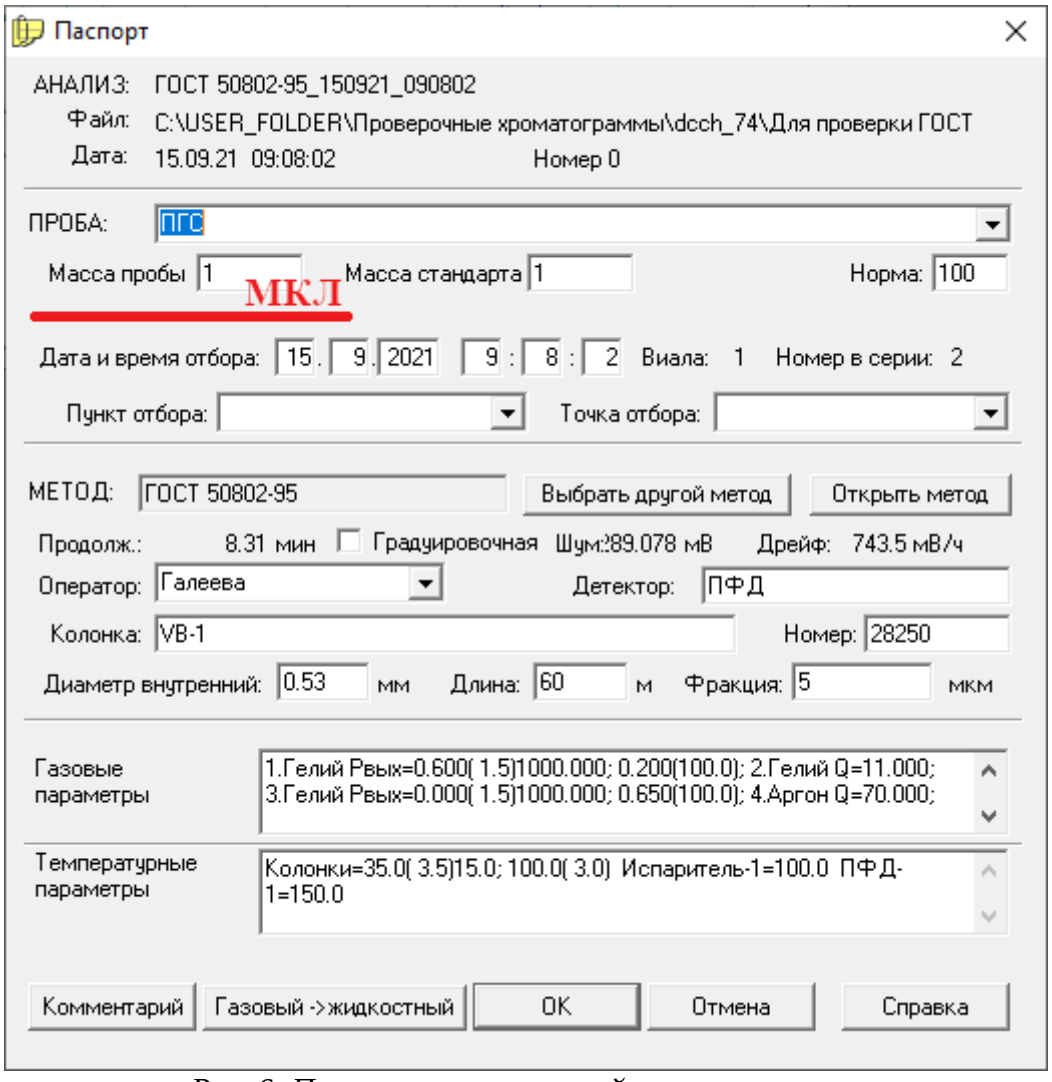

Рис. 6: Паспорт анализируемой хроматограммы

После подготовки хроматограммы добавляются в расчёт. Для обновления списка хроматограмм используется кнопка **Обновить**, для перерасчёта имеющихся хроматограмм (например, при изменении хроматограммы в ПО «Хромос») используется кнопка **Пересчитать**. Градуировочные хроматограммы, оставшиеся в программе по окончании работы, открываются в следующие сеансы; при необходимости их можно исключить из списка, нажав **Удалить**.

Каталог хроматограмм для автоматического открытия и данные градуировочных баллонов задаются в настройках расчёта (9.3).

Единицы измерения градуировочных смесей выбираются в настройках расчёта (9.1). Для проверочных смесей используются только единицы измерения в млн$^{-1}$ (ppm, мкг/г).

4. Порядок проведения измерений

Пересчёт единиц измерения при помощи усреднённой плотности смеси производится по следующей формуле:

$$C = \omega * \rho ,$$

где C — концентрация компонента (мг/м^3), ω — концентрация компонента (млн$^{-1}$, ppm массовые), ρ — усреднённая плотность смеси (кг/м^3).

Пересчёт единиц измерения при помощи усреднённой молярной массы (ГОСТ Р 50802-2021, ф. 2) производится по следующей формуле:

$$C = \omega * M_{газ} / V ,$$

где C — концентрация компонента (в мг/м^3), ω — концентрация компонента (млн$^{-1}$, ppm массовые), $M_{газ}$ — усреднённая молярная масса смеси (г/моль), V — молярный объём газовой смеси при температуре 20°С и давлении 101325 Па [принимают равным 24 дм^3/моль] (дм^3/моль).

Вместо усреднённой плотности (усреднённой молярной массы) смеси можно использовать усреднённую плотность (усреднённую молярную массу) газа-разбавителя, так как газовые смеси состоят приблизительно на 99% из газа-разбавителя.

Примечание: Для сброса всех настроек программы необходимо запустить деинсталлятор из программной папки. При переустановке программы настройки и данные, введённые пользователем, не сбрасываются.

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. 7).
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 + ←↑↓→
> **Примечание:** Чтобы выбрать все хроматограммы одного анализа, поставьте флажок **Совместный выбор**.

3. Чтобы удалить хроматограмму, кликните по ней и нажмите **Удалить**.
4. Чтобы очистить список добавленных хроматограмм, нажмите **Удалить все**.
5. Чтобы открыть хроматограмму в ПО «Хромос», дважды кликните по ней или выберите её и нажмите **Открыть в ПО Хромос**.

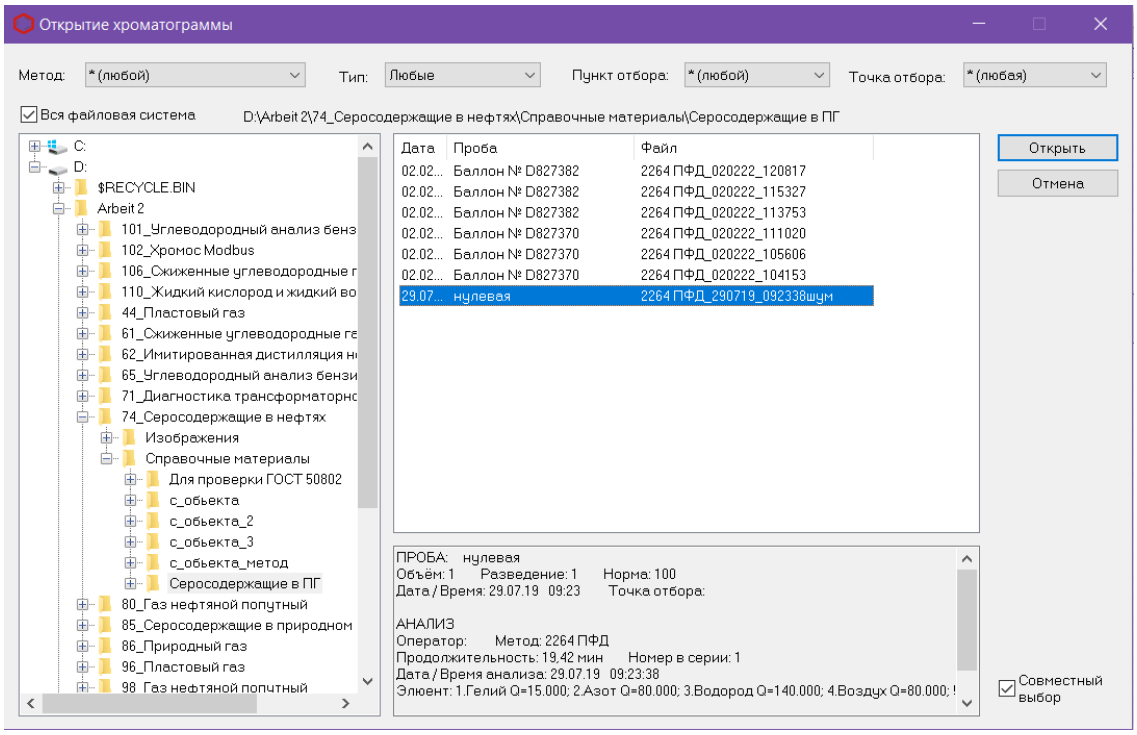

Рис. 7. Окно «Открытие хроматограммы»

- Хроматограммы автоматически подгружаются из указанных в настройках каталогов (9.2). Чтобы обновить список хроматограмм, нажмите **Обновить**.
- Чтобы обновить результаты при изменении хроматограмм, нажмите **Пересчитать**.
- Чтобы настроить имена компонентов, нажмите **Таблица компонентов** (см. 8).

6. Вывод отчёта

Полученные данные расчёта можно сформировать в отчёт. Чтобы сформировать отчёт, выполните следующие действия:

1. В основном окне программы нажмите **Отчёт**. Откроется окно *Отчёт* (Рис. 8).

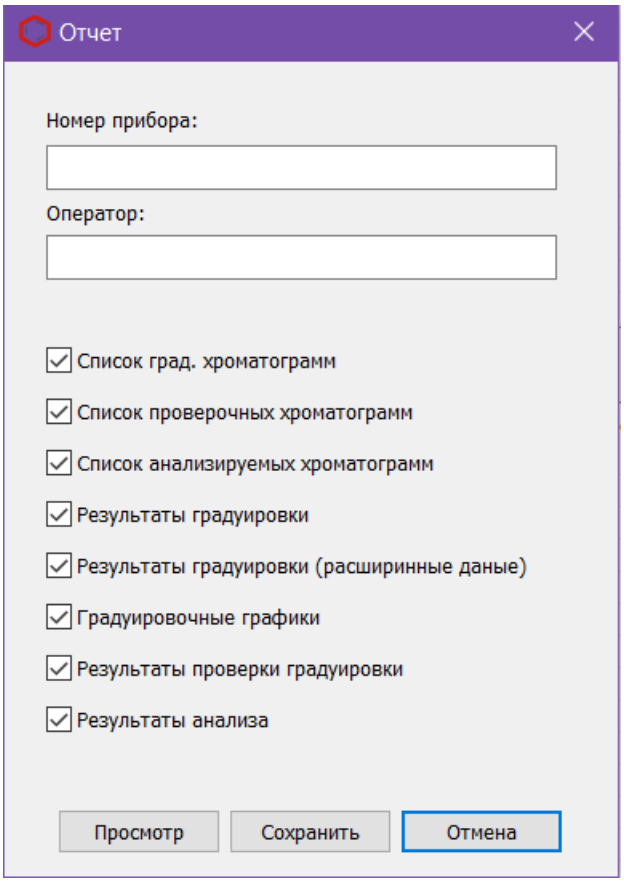

Рис. 8: Окно «Отчёт»

2. В поле *Номер прибора* введите номер прибора.
3. В поле *Оператор* введите ФИО оператора.
4. Установите флаг напротив данных, которые необходимо добавить в отчёт.
5. Чтобы просмотреть отчёт, нажмите **Просмотр**.
6. Чтобы сохранить отчёт в html, нажмите **Сохранить**.

По умолчанию имя файла отчёта имеет вид **Report74_17102023_114811.html**, где:
- *Report74* — имя программы;
- *17102023* — дата в формате ДДММГГГГ;
- *114811* — время в формате ЧЧММСС;
- *html* — формат файла.

7. Экспорт данных

Результаты расчёта можно экспортировать в файл таблицы *.xlsx. Чтобы экспортировать данные, выполните следующие действия:

1. Откройте настройки расчёта и в поле *Папка для экспорта* укажите папку сохранения экспортируемого файла.
2. В основном окне программы нажмите **Экспорт**.

Имя экспортируемой таблицы имеет вид **dcch74_export_17102023_114811.xlsx**, где:

- *dcch74* — имя программы;
- *17102023* — дата в формате ДДММГГГГ;
- *114811* — время в формате ЧЧММСС;
- *xlsx* — формат файла.

8. Управление компонентами

Чтобы задать компонентам условные наименования, выполните следующие действия:

1. В основном окне нажмите **Таблица компонентов**. Откроется окно *Компоненты* (Рис. 9).
2. Для изменения наименования дважды кликните по ячейке столбца *Имя компонента* и введите условное наименование.
3. Сохраните изменения, нажав **ОК**.

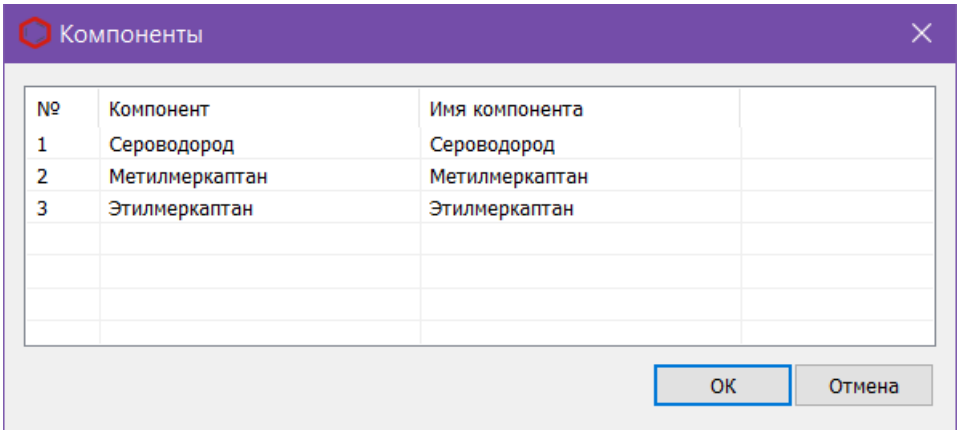

Рис. 9: Окно «Компоненты»

9. Настройка программы

Настройка программы включает общие настройки расчёта, настройки каталогов хроматограмм и настройки градуировочных баллонов.

9.1. Общие настройки расчёта

В данном разделе указывается способ расчёта, параметры округления значений, единицы измерения градуировочных и проверочных смесей, а также папка для экспорта.

1. В основном окне программы нажмите **Настройки расчёта**. Откроется окно *Настройки*, вкладка *Общие настройки* (Рис. 10).
2. В сегменте *Способ расчёта* выберите нормативный документ, согласно которому будет производиться расчёт:

   - ГОСТ 32918-2014;
   - ГОСТ Р 50802-2021.

3. В сегменте *Округление значений* введите количество знаков после запятой, до которого следует округлять значения в программе и в отчёте. Чтобы округлять значения по ГОСТ, установите флаг **Округлять по ГОСТ**.
4. В поле *Плотность нефти* введите плотность нефти (в г/см^3).
5. Чтобы сортировать открытые хроматограммы только по дате, установите флаг **Использовать простую сортировку (по дате, без учёта отметки) для списка открытых хроматограмм**.
6. Чтобы не выводить среднее квадратичное отклонение (СКО) в отчёте и на вкладке *СКО Градуировки*, установите флаг **Отключить вывод СКО в вкладке «СКО Градуировки» и в отчёте**.
7. В поле *Единицы измерения концентраций компонентов* выберите единицы измерения:

   - мг/м^3;
   - ppm (объёмные);
   - ppm (массовые).

   Примечание: Выбранные единицы измерения будут пересчитаны в мг/м^3 для концентрации, отображаемой на вкладке *Градуировка*, а также отображаются в концентрациях компонентов градуировочных баллонов.

8. В полях *Молярная масса газа-разбавителя* введите молярную массу газа-разбавителя смеси (в г/моль).
9. В поле *Папка для экспорта* укажите каталог сохранения экспортируемой таблицы данных (см. 7).
10. Сохраните изменения, нажав **ОК**.

9.1. Общие настройки расчёта

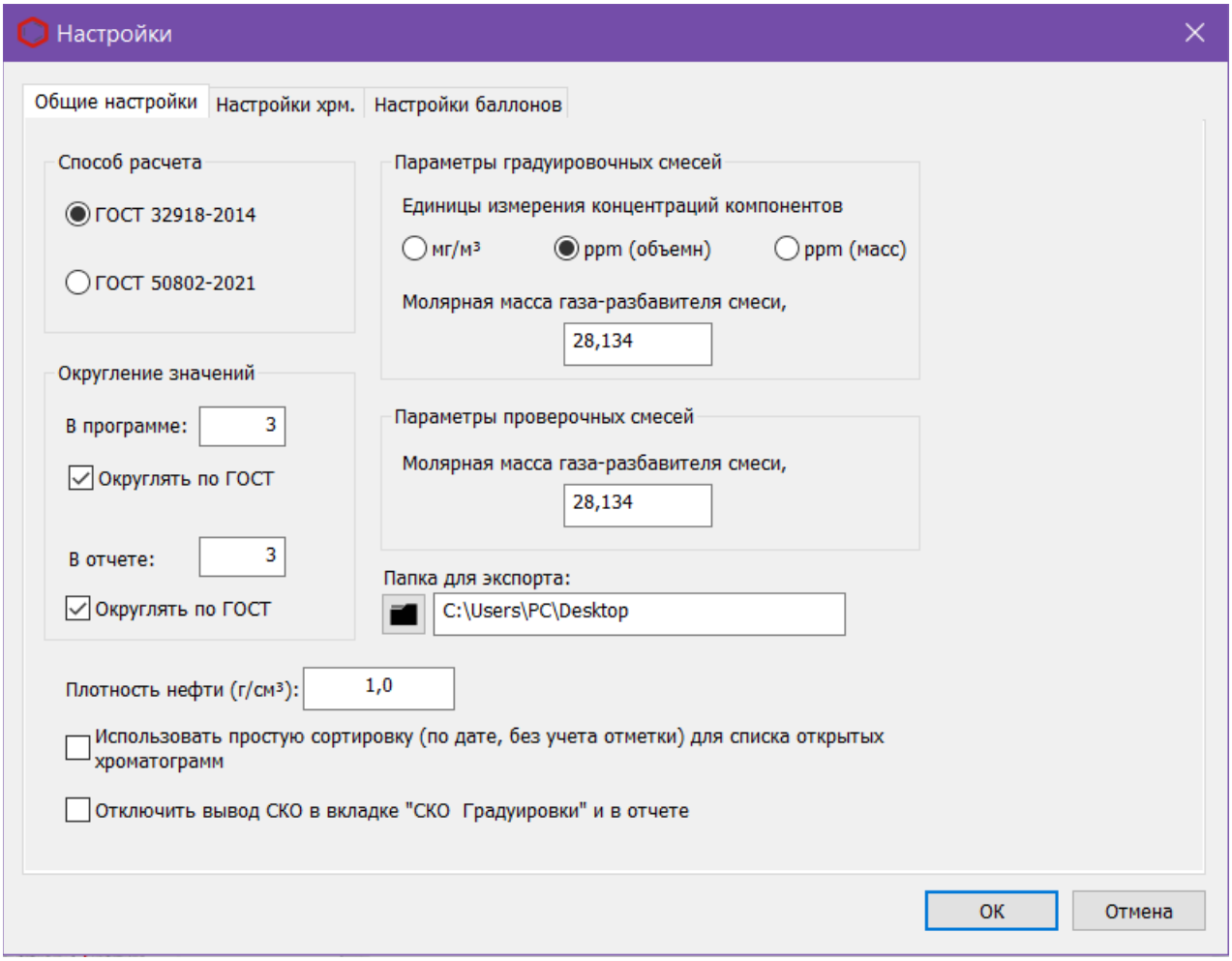

Рис. 10: Настройки: Общие настройки

9.2. Настройки хроматограмм

В данном разделе указываются каталоги поиска хроматограмм, откуда они могут подгружаться автоматически. Чтобы указать каталоги, выполните следующие действия:

1. В основном окне нажмите **Настройки расчёта**. Откроется окно *Настройки*.
2. В окне *Настройки* выберите вкладку *Настройки хрм.* Список каталогов отображается в таблице (Рис. 11).
3. Чтобы добавить каталог, нажмите **Добавить** и выберите расположение на компьютере.
4. Чтобы удалить каталог, выберите его и нажмите **Удалить**.
5. Чтобы очистить список каталогов, нажмите **Удалить все**.
6. Чтобы автоматически подгружать хроматограммы из указанных каталогов, установите флаг **Открывать хроматограммы автоматически**.
7. Сохраните изменения, нажав **ОК**.

9.2. Настройки хроматограмм

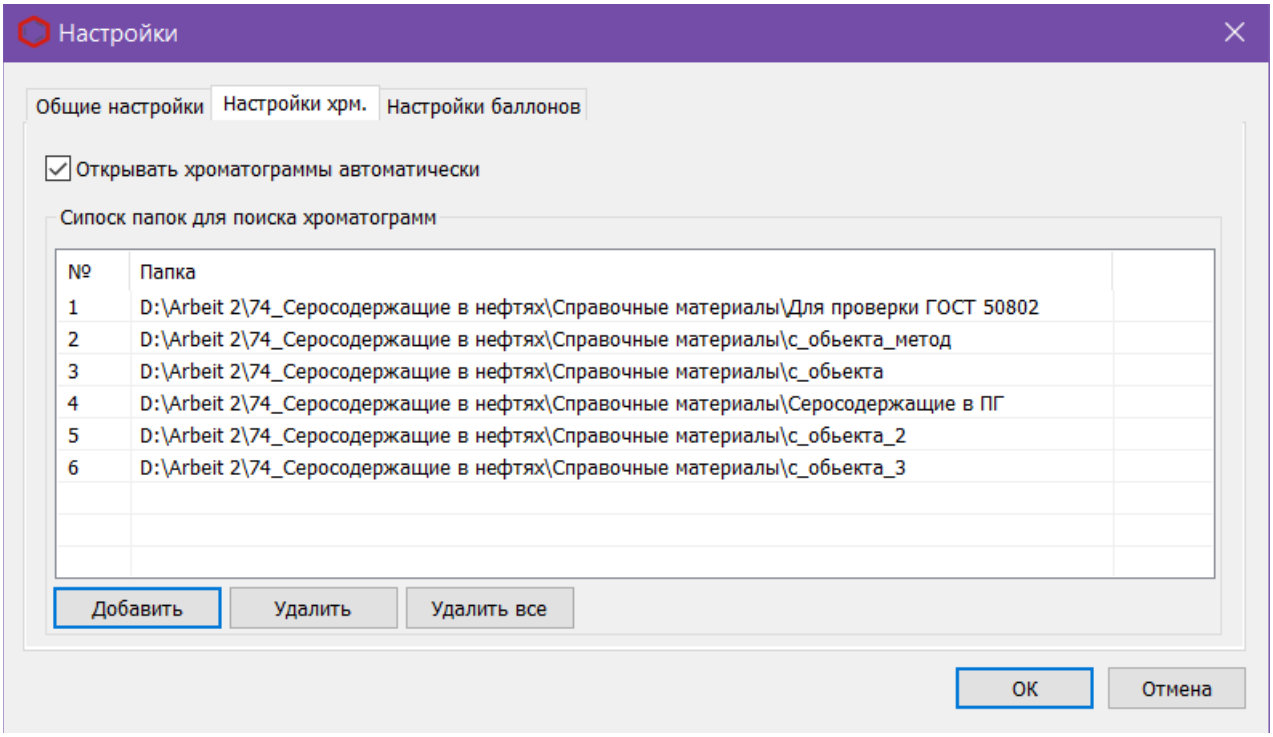

Рис. 11: Настройки: Настройки хроматограмм

9.3. Настройки баллонов

В данном разделе указываются градуировочные баллоны, задаются компоненты и их концентрации.

1. В основном окне нажмите **Настройки расчёта**. Откроется окно *Настройки*.
2. В окне *Настройки* выберите вкладку *Настройки баллонов*. Список имеющихся баллонов и данные по компонентам отображаются в таблицах *Список имеющихся баллонов* и *Компонентный состав баллона* (Рис. 12).
3. Чтобы добавить баллон, нажмите **Добавить баллон**. Новый баллон отобразится в таблице *Список имеющихся баллонов*.
4. Введите имя баллона и идентификатор, дважды кликнув по соответствующим ячейкам в таблице *Список имеющихся баллонов*.
   Обратите внимание: для корректного соотнесения хроматограммы с баллоном необходимо указать имя баллона в поле *Проба* в паспорте хроматограммы.
5. Чтобы добавить компонент, нажмите **Добавить компонент**. Новый компонент отобразится в таблице *Компонентный состав баллона*.
6. Введите имя компонента, концентрацию (согласно полю *Единицы измерения концентраций компонентов* на вкладке *Общие настройки*) и погрешность, дважды кликнув по соответствующим ячейкам в таблице *Компонентный состав баллона*.
7. Чтобы отметить баллон как градуировочный, выберите его и нажмите **Отметить для градуировки**. Выбранный баллон подсвечивается жёлто-зелёным цветом.
8. Чтобы снять отметку о градуировке, выберите баллон и нажмите **Снять отметку**.
9. Сохраните изменения, нажав **OK**.

9.3. Настройки баллонов

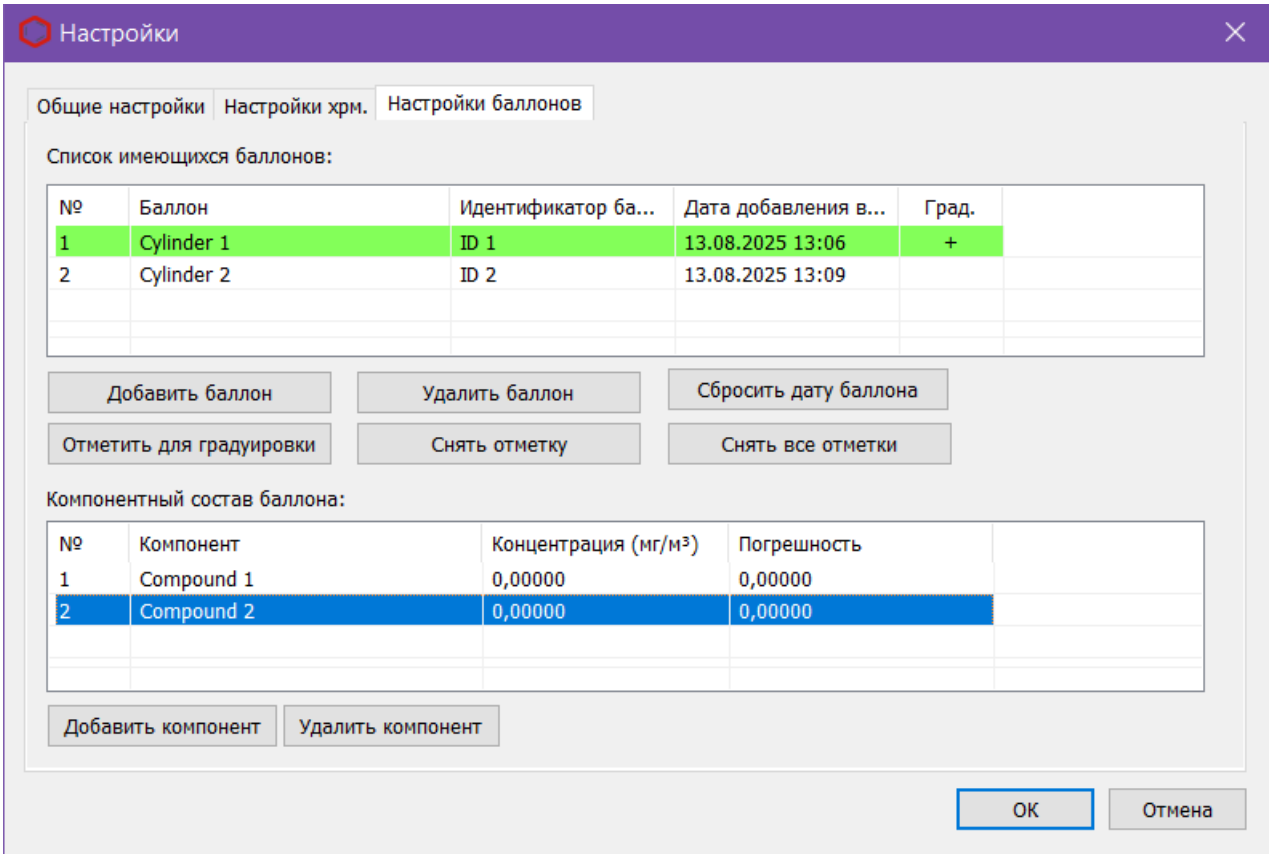

Рис. 12: Настройки: Настройки баллонов

10. Идентификация программы

Чтобы посмотреть данные о программе, в левом верхнем углу окна кликните на иконку и в контекстном меню выберите **Сведения о dcch74…** Откроется окно *О программе* (Рис. 13).

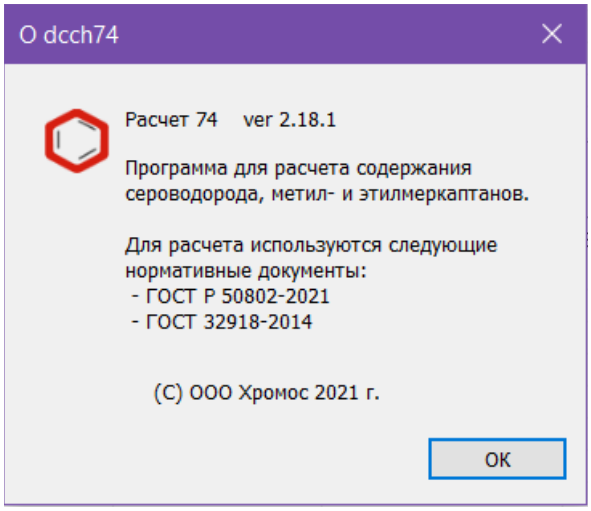

Рис. 13: О программе