Техническое задание

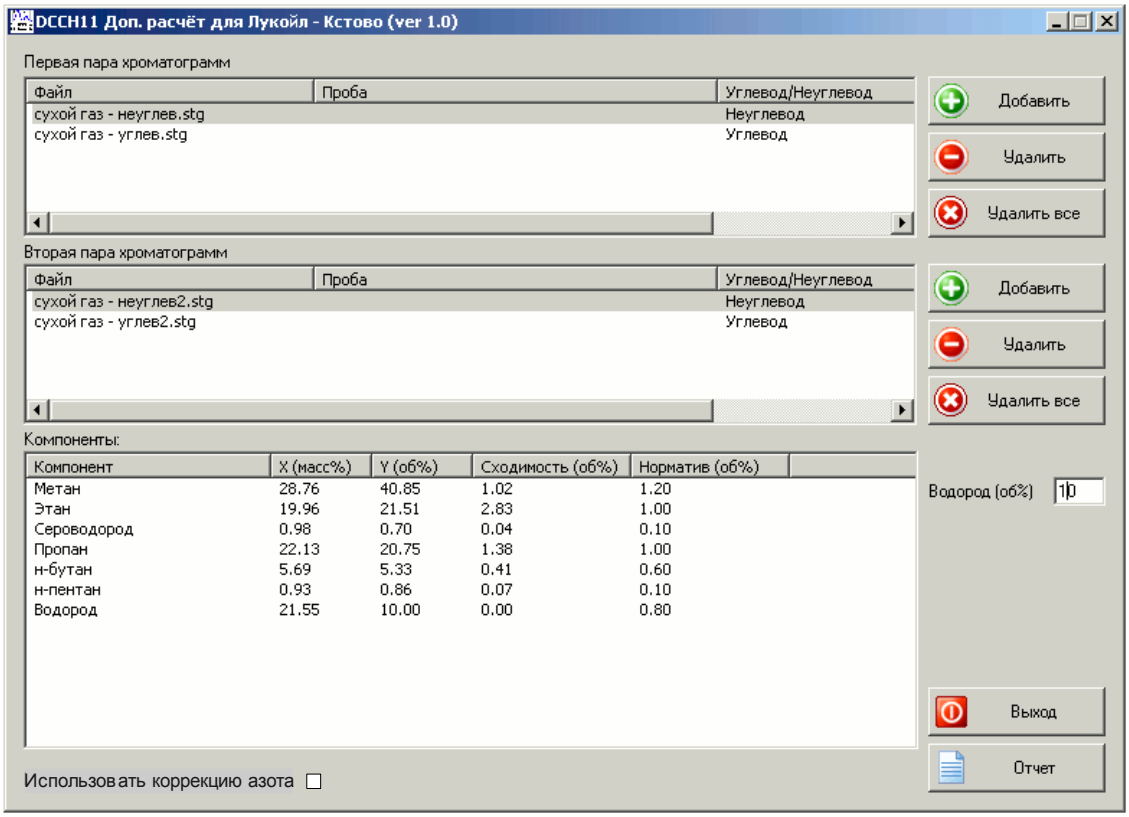
на дополнительный расчёт
Славнефть - Ярославль
(вариант 4)

Чего не будет в программе

В расчёте не будут рассматриваться компоненты, имена которых не попали в таблицу 1. Такие пики будут просто отброшены.

Интерфейс

Внешний вид расчёта должен быть таким:



В верхней части будет представлен список, в который можно будет добавлять как углеводородные, так и неуглеводородные хроматограммы (пару на каждый анализ).

Хроматограммы могут быть добавлены, если в них представлены либо только неуглеводородные компоненты, либо только углеводородные. Если же в хроматограмме встречаются и те и другие компоненты, то такая хроматограмма не может участвовать в расчёте, поскольку непонятно к какой части расчёта её отнести.

В хроматограммах обязательно должен присутствовать метан.

В каждый список может быть добавлена лишь одна неуглеводородная и одна углеводородная хроматограмма.

Вторая пара хроматограмм может отсутствовать.

Внизу отображаются компоненты и расчётные массовые концентрации совместно с точностью методики.

Справа есть поле для ввода концентрации водорода в объёмных процентах.

Совместная работа с программой Хромос

На программу Хромос возложены следующие обязанности:
- запись хроматограмм (пара на каждый анализ);
- автоматическая или ручная разметка полученных хроматограмм;
- идентификация веществ (присваивание имён пикам);

В хроматограммах, полученных с помощью программы Хромос необходимо лишь разметить пики и идентифицировать компоненты. Из этих хроматограмм берутся лишь имена компонентов и площади пиков.

Расчёт

Корректировка по метану

Из неуглеводородной и углеводородной хроматограмм берётся площадь метана, и вычисляется поправочный коэффициент:

$$A = \frac{S^0_{мет\ углев}}{S^0_{мет\ неугл}} \quad [1]$$

Затем все площади неуглеводородной хроматограммы умножаются на этот коэффициент.

$$S_{неуглев} = S^0_{неуглев} \cdot A \quad [2]$$

В дальнейшем расчёте у неуглеводородной части будут использоваться уже эти, скорректированные площади.

Коррекция концентрации азота исходя из концентрации кислорода

Коррекция азота исходя из концентрации кислорода будет производиться опционально, в зависимости от флажка на основном окне программы.

Если коррекции не предполагается, то все компоненты учитываются как есть, в том числе и кислород.

> *Будем считать, что отношение площадей пиков азота и кислорода пропорционально отношению поправочных коэффициентов. В этом случае мы как бы переведём площадь пика кислорода с помощью поправочного коэффициента кислорода в концентрацию, умножим эту концентрацию на 3.0, а затем уже с помощью поправочного коэффициента для азота переведём эту поправку к концентрации азота на площадь азота. Обнулим площадь кислорода. Последней операцией будет нормализация, где азот будет участвовать уже в виде скорректированной площади.*

При коррекции азота площадь азота и кислорода представлены уже в виде скорректированных площадей согласно формуле [2].

$$S'_{N2} = S_{N2} - 3.0 \cdot S_{O2} \cdot \frac{k_{O2}}{k_{N2}} \quad [3]$$

где коэффициенты k_{O2} и k_{N2} — относительные объёмные коэффициенты чувствительности из таблицы 1 для азота и кислорода

Обнуление кислорода: $S'_{O2} = 0$ [4]

Для остальных компонентов площади не корректируем $S'_{остальные} = S_{остальные}$ [5]

Вычисление объёмной доли компонентов

Объёмные Yi концентрации компонентов (исключая водород) вычисляются следующим образом.

$$Y_i = \frac{S'_i \cdot k_i}{\sum S'_i \cdot k_i} \cdot (100 - Y_{водород})$$

Si – площади компонентов

k_i- объёмные коэффициенты чувствительности из таблицы 1

$Y_{водород}$ - объёмная концентрация водорода в объёмных процентах

Если объёмная концентрация водорода имеет значение 0 (ноль), будем считать, что значение объёмной концентрации будет браться из хроматограммы. В этом случае объёмные Yi концентрации компонентов вычисляются следующим образом.

$$Y_i = \frac{S'_i \cdot k_i}{\sum S'_i \cdot k_i} \cdot 100$$

Si – площади компонентов, включая площадь водорода

k_i- объёмные коэффициенты чувствительности из таблицы 1

Необходимо помнить, что площади у неуглеводородной части берутся уже скорректированные, а метан берётся только из углеводородной хроматограммы.

Метан из неуглеводородной части просто отбрасывается, он нужен лишь для вычисления поправочного коэффициента А.

Вычисление массовой доли компонентов

Массовые Xi концентрации компонент вычисляются следующим образом.

$$X_i = \frac{Y_i \cdot \rho_i}{\sum Y_i \cdot \rho_i} \cdot 100$$

Yi – объёмные концентрации компонентов

ρ_i- плотность из таблицы 1

Усреднение результатов

Данный расчёт производится как для первой пары хроматограмм, так и для второй пары независимо.

Затем результаты вычисленных концентраций Xi и Yi усредняются:

$$\bar{X}_i = \frac{(X_i^1 + X_i^2)}{2} \qquad \bar{Y}_i = \frac{(Y_i^1 + Y_i^2)}{2}$$

Если второй пары хроматограмм не загружено, усреднения не происходит, и результаты выдаются как есть для первой пары хроматограмм (углеводородной и неуглеводородной).

Если какой либо компонент представлен лишь в одной из хроматограмм, то усреднение результатов по этому компоненту тоже вестись не будет. Его концентрации (массовая и объёмная) будет взята как есть из одной хроматограммы.

Норматив сходимости

Цифры по нормативу сходимости взяты из ГОСТ 14920-79

Объёмная доля компонента (об %)	Норматив сходимости (об %)
до 0.5	0,05
от 0.5 включительно до 1.0	0,10
от 1.0 включительно до 5.0	0,30
от 5.0 включительно до 10	0,60
от 10 включительно до 20	0,80
от 20 включительно до 30	1,00
от 30 включительно до 60	1,20
от 60 включительно до 85	0,70
от 85 включительно до 95	0,40
от 95 включительно и выше	0,30

Приложение

Таблица 1

	Компонент	плотность ρ_i	объёмный коэффициент чувствительности k_i	Часть
1	Метан	0,717	2,39	обе
2	Двуокись углерода	1,977	1,77	Углеводородная
3	Этин	1,537	2,07	Углеводородная
4	Этен	1,260	1,78	Углеводородная
5	Этан	1,356	1,68	Углеводородная
6	Сероводород	1,5361	2,23	Углеводородная
7	Пропен	1,915	1,32	Углеводородная
8	Пропан	2,0037	1,32	Углеводородная
9	Изобутан	2,69	1,04	Углеводородная
10	Бутен-1	2,550	1,06	Углеводородная
11	Изобутен	2,550	1,06	Углеводородная
12	Бутадиен-1,3	2,550	1,06	Углеводородная
13	н-Бутан	2,723	1	Углеводородная
14	Бутен-2-транс	2,550	1	Углеводородная
15	Бутен-2-цис	2,550	0,98	Углеводородная
16	3-метилбутен-1	2,550	0,86	Углеводородная
17	Изопентан	3,457	0,84	Углеводородная
18	н-Пентан	3,457	0,81	Углеводородная
19	Пентен-1	3,457	0,86	Углеводородная
20	2-метилбутен-1	3,457	0,86	Углеводородная
21	Пентен-2-транс	3,457	0,82	Углеводородная
22	Пентен-2-цис	3,457	0,86	Углеводородная
23	2-метилбутен-2	3,457	0,86	Углеводородная
24	Водород	0,0899	58,58	Неуглеводородная
25	Кислород	1,429	2,14	Неуглеводородная
26	Азот	1,251	2,03	Неуглеводородная
27	Окись углерода	1,250	2,03	Неуглеводородная

Исполнитель: Федоренко Сергей Павлович, ЗАО "Химаналитсервис", Дзержинск, 09.02.2009