

Soprane I

Manuel d'utilisation



SRA INSTRUMENTS
210 rue des Sources
69280 Marcy l'Etoile
FRANCE

T : 04.78.44.29.47
F : 04.78.44.29.62
info@sra-instruments.com
www.sra-instruments.com

SA à Directoire et Conseil de
surveillance au capital de 150.000 €
RCS Lyon B 342 068 731
APE 4669B
SIRET: 342 068 731 00054
Code TVA FR 40342068731



Table des matières

1. INTRODUCTION	6
2. PREMIERS PAS, MENUS, LECTURE DU STATUT	6
2.1 Premiers pas avec Soprane	6
2.2 Les menus de Soprane	7
2.3 Les icônes de Soprane	8
2.4 Le module Traitement	9
2.5 Les menus du module Traitement	9
2.6 Les icônes du module Traitement	11
2.7 Le module Compare	11
2.8 Les menus du module Compare	12
2.9 Les icônes du module Compare	13
2.10 Lecture du statut	13
3. METHODES D'ANALYSE	15
3.1 Créer et modifier une méthode d'analyse	15
3.2 Envoyer une méthode à l'analyseur	17
3.3 Les conditions analytiques	17
3.4 Pilotage d'un MicroGC 490	19
3.5 Pilotage d'un MicroGC 3000	21
3.6 Pilotage d'un M200	23
3.7 Les 4 méthodes utiles	23
4. SEQUENCES D'ANALYSES	24
5. DEBUT ET ARRET DES ANALYSES	25
6. INTEGRATION	29
6.1 Méthodes d'intégration	29
6.2 Evénements d'intégration	29
6.3 Nature et valeurs des évènements d'intégration	30
6.4 Programmation des événements	32
6.5 Les outils graphiques du module traitement	33
6.5.1 Palette de contrôle	33
6.5.2 Menu "Chromatogramme"	34
6.5.3 L'outil zoom	36



6.5.4 Edition graphique des évènements d'intégration	36
6.5.5 Palette de ligne de base en manuel	37
7. IDENTIFICATION DES PICS	39
7.1 Table des composants	39
7.2 Regroupement de pics	40
7.3 Les colonnes de la table des composants	40
7.4 Affichage de la table des composants	43
7.5 L'option mathématique	45
7.6 Recaler les temps de rétention des pics	46
8. ETALONNAGE	46
8.1 Etalonnage manuel	46
8.2 Etalonnage par retraitement	47
8.3 Etalonnage automatique	48
8.4 Etalonnage par le menu Lancement	49
8.5 Niveaux d'étalonnage	49
9. IMPRESSION DES RESULTATS	50
9.1 Visualisation et impression des résultats	50
9.2 Création de rapports dans le module traitement	50
9.2.1 Configuration d'un rapport	50
a) L'entête du rapport	51
b) Les colonnes du rapport	52
c) Les représentations graphiques	53
9.2.2 Le rapport d'étalonnage	55
9.3 Affichage et impression de rapports depuis le module traitement	55
9.3.1 Les menus "Rapport/Rapport final" et "Rapport/Paramètres d'intégration"	55
9.3.2 Les menus "Imprimer" et "Configurer impression"	55
10. AFFICHAGES ET EXPORTATION DES RESULTATS	55
11. TRAITEMENT POST ANALYSE	61
11.1 Alarmes	61
11.2 Programme utilisateur	62
11.3 Archivage	63
12. TENDANCES ET SORTIES COURANT	64
12.1 Tendances	64
12.2 Sorties courant 4-20 mA	67



13. REGENERATION DES COLONNES	67
14. CALCULS SPECIFIQUES	72
14.1 Sélection des calculs	72
14.2 Calculs spécifiques pour l'analyse de gaz naturel	73
14.3 Calculs spécifiques pour les analyses de GPL	75
14.4 Calculs spécifiques pour la combustion	76
15. RETRAITEMENT DES ANALYSES	77
16. COMPARAISON DES ANALYSES	78
16.1 Module Compare	78
16.2 Les menus "Fichier / Nouveau" et "Fichier / Ouvrir"	78
16.3 Choix d'un chargement normal ou séquentiel	78
16.4 Edition des limites d'affichage des chromatogrammes	79
16.5 Représentations 2D, 3D et 3D opaque	80
16.6 Options d'affichage	82
16.7 Utilisation de la palette d'outils	82
16.8 L'impression	83
17. GESTION DES FICHIERS	83
18. CALCULS VIA EXCEL	85
19. MODBUS	90
19.1 Configuration hardware	90
19.2 Configuration du software	91
19.2.1 Variables système de l'analyseur	93
19.2.2 Variables système de l'analyse	96
19.2.3 Valeurs relatives aux constituants et aux calculs	96
19.2.4 Options	98
19.3 Mode visualisation	99
20. ANNEXE I : PARAMETRES ET ERREURS D'INTEGRATION	100
20.1 Commentaires à propos de l'intégration	100
20.2 La détection des pics	100
20.3 Intégration effectuée avec de mauvais paramètres	101
21. ANNEXE II : RECUPERATION DE METHODE ANALYSE ET TRAITEMENT A PARTIR D'UN CHROMATOGRAMME	105



22. ANNEXE III : CALCULS	107
22.1 Commentaires à propos des calculs	107
22.2 Valeurs initiales utilisées par Soprane	108
23. ANNEXE IV : TESTS MODBUS	109
23.1 Tests de communication	109
23.2 Tests de transmission des valeurs	110
24. ANNEXE V : COMMENTAIRES SUR LE COUPLAGE SOPRANE – MASS HUNTER	111
24.1 Couplage avec Mass Hunter	111
24.2 Installation des logiciels	111
24.3 Liaison avec Soprane	111
24.4 Utilisation avec Soprane	113
24.5 Utilisation avec Mass Hunter	115



1. Introduction

Nous supposons que SOPRANE a été correctement installé et paramétré.

Dans la majorité des cas, SOPRANE a été fourni installé. Dans ce cas, votre version de SOPRANE a été utilisée pour vérifier le fonctionnement de votre analyseur et vous disposez déjà, sur votre disque dur, de méthodes d'analyses, de résultats archivés et de séquences d'analyses.

Nous supposerons par la suite que SOPRANE a été simplement installé et paramétré, et qu'aucune analyse n'a été effectuée.

L'utilisation de SOPRANE nécessitera un certain nombre d'étapes :

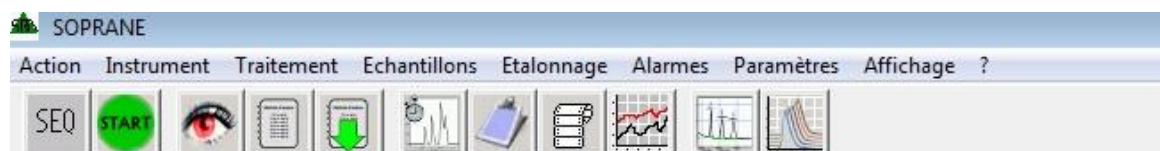
- D'abord, nous allons visualiser les différents menus et nous vérifierons la possibilité d'établir un dialogue avec l'analyseur,
 - Nous créerons une méthode d'analyse,
 - Nous créerons une séquence d'analyse,
 - Nous effectuerons des analyses,
 - A partir du chromatogramme d'une analyse, et directement, nous créerons une méthode d'intégration et une table d'identification des pics,
 - Nous verrons comment étalonner l'appareil,
 - Nous programmerons des calculs post-analytiques,
 - Nous archiverons les résultats,
 - Nous les imprimerons,
 - Nous les visualiserons graphiquement, en tendance,
 - Nous discuterons des possibilités d'affichage,
 - Nous programmerons des régénérations automatiques de colonnes.
-
- Enfin, nous nous intéresserons aux possibilités de retraitement des analyses et de comparaison de chromatogrammes.

2. Premiers pas, Menus, Lecture du Statut

2.1 Premiers pas avec Soprane

Pour fonctionner correctement, SOPRANE doit connaître la configuration de l'analyseur. Si cette configuration est inconnue lors du lancement de Soprane, un message le signale et le programme PGCSetup est automatiquement lancé pour lire la configuration de l'analyseur.

Lors du lancement (double clic sur l'icône ou menu Démarrer / Programmes / SRA Instruments / SOPRANE), le logiciel s'initialise et visualise la page principale de SOPRANE :



SOPRANE gère le fonctionnement global du système et fait appel à 2 modules externes. L'un de ces modules permet le traitement de l'intégration des pics (définitions des constituants, intégration et calculs), l'autre module permet de comparer des analyses et de suivre l'évolution des concentrations en fonction du temps.

Le chapitre suivant décrit les différents menus de Soprane et la fonction des icônes.

2.2 Les menus de Soprane

Il ne s'agit ici que d'une présentation des différents menus de Soprane ; tous les détails sont donnés plus loin dans ce manuel.

Notez que certains sous-menus mentionnés ci-dessous peuvent ne pas apparaître sur votre écran selon les options de base et celles sélectionnées lors de la configuration de Soprane sur votre ordinateur.

Le menu **Action** possède trois sous-menus :

- Lancement analyse. Ceci permet de démarrer une analyse ou une séquence d'analyses. Ce sous-menu devient alors Arrêt analyse et est utilisé pour arrêter une analyse.
- Impression. Ce menu permet une sortie imprimante.
- Quitter. Utilisé, tout comme la croix en haut à droite, pour quitter Soprane.

Le menu **Instrument** possède quatre sous-menus :

- Status. Utilisé pour visualiser le statut de l'analyseur.
- Edition de la méthode. Utilisé pour visualiser et modifier une méthode d'analyse.
- Envoyer une méthode. Utilisé pour envoyer les paramètres analytiques à l'analyseur.
- Couplage. Utilisé pour les couplages μ GC-MS afin de sélectionner le module couplé à la masse.

Le menu **Traitement** possède 4 sous-menus :

- Retraitement dernière analyse. Utilisé pour appeler le chromatogramme, la méthode d'analyse et les résultats de la dernière analyse.
- Traitement par lot. Utilisé pour appliquer le même traitement à plusieurs fichiers.
- Module Traitement. Utilisé pour charger le module de traitement et y accéder.
- Module Compare. Utilisé pour charger le module de comparaison et y accéder.

Le menu **Echantillons** possède un sous-menu :

- Table Séquence. Utilisé pour définir une séquence d'analyses (Ceci suppose que plusieurs flux ont été définis).

Le menu **Etalonnage** possède quatre sous-menus :

- Table séquence. Utilisé pour créer une séquence d'analyse.
- Paramètres. Utilisé pour modifier la temporisation entre deux séquences d'analyses.
- Etalonnage par retraitement. Utilisé pour étalonner la méthode une fois les analyses des étalons réalisées
- Affichage rapport étalonnage. Utilisé pour afficher le rapport.

Le menu **Alarmes** possède deux sous-menus :

- Acquiescement. Permet de supprimer les conséquences de la présence d'une alarme ou d'un défaut.
- Paramètres. Permet la configuration des alarmes seuil.



Le menu **Paramètres** possède quatre sous-menus :

- Affichage et impression. Utilisé pour sélectionner quelles variables seront visualisées et/ou imprimées à la fin d'une analyse.
- Tendances. Utilisé pour définir des tendances et qui possède lui-même deux sous-menus :
 - Propriétés. Utilisé pour définir les variables et les échelles des visualisations en tendance.
 - Effacer. Utilisé pour supprimer les archives des tendances.
- Régénération Col. (Configuré dans la Soprane Setup). Utilisé pour définir la régénération des colonnes.
- Configuration. Utilisé pour définir les actions à effectuer à partir des résultats d'une analyse. Le menu Configuration peut posséder 4 sous-menus.
 - Calculs. Utilisé pour sélectionner ou modifier les coefficients ou les calculs à effectuer à la fin d'une analyse, si l'option calcul est activée. Il possède lui-même six sous-menus :
 - Pic complémentaire. Utilisé pour afficher les paramètres pour le calcul d'un pic complémentaire.
 - Coefficients de calcul. Utilisé pour afficher la table des coefficients de calcul.
 - Sélection calculs 1. Utilisé pour afficher la fenêtre de gestion des calculs.
 - Sélection calculs 2. Utilisé pour afficher la fenêtre de gestion des calculs.
 - Sélection de la feuille de calcul. Utilisé pour paramétrer la feuille de calculs.
 - Sélection calculs spécifiques. Utilisé pour sélectionner un calcul spécifique
 - Fichiers résultats (.DIF). Utilisé pour sélectionner la façon d'archiver les résultats.
 - Programme Utilisateur. Utilisé pour définir un programme utilisateur.
 - Sortie 4-20 mA. Utilisé pour définir les variables et les échelles pour les sorties 4-20 mA.

Le menu **Affichage** possède onze sous-menus : (plus le nom des fenêtres visualisées)

- Chromatogramme. Utilisé pour sélectionner et afficher la fenêtre chromatogramme(s).
- Résultats. Utilisé pour sélectionner et afficher la fenêtre de résultats.
- Auxiliaires. Utilisé pour afficher la fenêtre qui permet de sélectionner une voie d'une vanne VICI, par exemple, ainsi que les différentes valeurs de capteurs qui aurait été configurées dans Soprane Setup (par exemple température et pression)
- Série d'analyses. Utilisé pour sélectionner et afficher la fenêtre de séquence d'analyses.
- Tendances. Utilisé pour sélectionner et afficher la fenêtre de tendance.
- Cascade.
- Horizontal.
- Personnalisé.
- Sauvegarde des positions des fenêtres. Utilisé pour mémoriser la position des fenêtres à l'écran.
- Barre outils. Utilisé pour visualiser ou non la barre d'outils.
- Barre état. Utilisé pour visualiser ou non la barre d'état.

2.3 Les icônes de Soprane

La barre d'outils de Soprane comprend onze icônes.



De gauche à droite, il s'agit de :

- Icône pour programmer une séquence d'analyses (Visualisée uniquement si l'appareil gère plusieurs flux).
- Icône pour démarrer et arrêter une analyse ou une séquence d'analyse.
- Icône pour visualiser le statut de l'analyseur.
- Icône pour créer et modifier des méthodes d'analyse.



- Icône pour envoyer les méthodes d'analyse vers l'analyseur.
- Icône pour visualiser le(s) chromatogramme(s).
- Icône pour visualiser la fenêtre des résultats.
- Icône pour visualiser la séquence d'analyses.
- Icône pour visualiser la fenêtre de tendance.
- Icône pour accéder au module de traitement.
- Icône pour accéder au module de comparaison.

2.4 Le module Traitement

Il est utilisé pour tout ce qui concerne le traitement ou le retraitement des pics et la calibration.

Lors du chargement, l'écran principal est visualisé :



2.5 Les menus du module Traitement

Le menu **Méthode** possède huit sous-menus :

- Créer une méthode. Utilisé pour créer une nouvelle méthode d'analyse.
- Ouvrir une méthode. Utilisé pour ouvrir une méthode d'analyse déjà définie.
- Enregistrer. Utilisé pour sauvegarder la méthode de la fenêtre active.
- Enregistrer sous. Utilisé pour sauvegarder sous un nouveau nom la méthode de la fenêtre active.
- Enregistrer tout. Utilisé pour sauvegarder toutes les méthodes.
- Enregistrer la méthode archivée sous. Utilisé pour sauvegarder une méthode archivée sous un nouveau nom.
- Fermer tous les documents. Utilisé pour fermer toutes les fenêtres et les fichiers associés.
- Quitter.

Le menu **Analyse** possède trois sous-menus :

- Charger analyse. Utilisé pour charger en mémoire un chromatogramme archivé.
- Information échantillon. Si un chromatogramme a été chargé en mémoire, utilisé pour accéder à la fenêtre des informations échantillon de cette analyse.
- Conditions opératoires de l'analyse. Si un chromatogramme a été chargé en mémoire, utilisé pour accéder à la fenêtre des paramètres analytiques de cette analyse.

Le menu **Intégration** possède 17 sous-menus :

- Intégrer. Utilisé pour ré-intégrer le(s) chromatogramme(s), refaire l'identification des pics et les calculs.
- Identifier pics. Utilisé pour refaire l'identification des pics.
- Mise à jour étalonnage. Utilisé pour étalonner l'appareil avec les résultats de l'analyse en cours.
- Options après intégration. Utilisé pour configurer le traitement lors de l'acquisition.
- Sensibilité optimale. Utilisé pour déterminer la valeur de seuil de pente (Slope sensitivity) à utiliser au temps zéro.
- Ligne de base en manuel. Utilisé pour basculer en mode positionnement manuel de ligne de base.
- Editer événements. Utilisé pour éditer les événements d'intégration.



- Modifier événements. Utilisé pour modifier les événements d'intégration.
- Table événements d'intégration. Utilisé pour construire une table des composants à partir de l'analyse en mémoire.
- Afficher l'entête table composant. Utilisé pour accéder à la configuration de l'entête de la table.
- Construire la table des composants. Utilisé pour créer une table des composants.
- Annuler Modif. Ligne de base. Utilisé pour supprimer les modifications manuelles de ligne de base.
- Palette de contrôle. Utilisé pour visualiser ou non la palette de contrôle.
- Palette ligne de base en manuel. Utilisé pour afficher ou non la palette de ligne de base manuelle.
- Palette des événements. Utilisé pour visualiser ou non la palette des événements d'intégration.
- Editeur d'unité de concentration. Utilisé pour définir ses propres unités.
- Mise à jour temps de rétention après intégration. Utilisé pour permettre aux temps de rétention de s'ajuster d'analyse en analyse.

Le menu **Chromatogramme** possède six sous-menus :

- Afficher le chromatogramme. Utilisé pour visualiser ou non la fenêtre des chromatogrammes.
- Configurer affichage chromatogramme. Utilisé pour visualiser les paramètres de la fenêtre des chromatogrammes.
- Limites affichage chromatogramme. Utilisé pour modifier les limites d'affichage des chromatogrammes.
- Zoom pleine échelle. Utilisé pour visualiser le chromatogramme en entier.
- Mode zoom. Utilisé pour autoriser le zoom dans une fenêtre.
- Tracé épais (fin). Utilisé pour dessiner les chromatogrammes avec un trait épais ou fin.

Le menu **Rapport** possède cinq sous-menus :

- Configuration du rapport. Utilisé pour sélectionner ce qui apparaît dans le rapport final.
- Personnaliser l'entête du rapport final. Utilisé pour personnaliser l'entête du rapport.
- Rapport final. Utilisé pour autoriser l'affichage de la fenêtre de rapport complet.
- Paramètres d'intégration. Utilisé pour autoriser l'affichage de la fenêtre des paramètres d'intégration.
- Table des composants. Utilisé pour autoriser l'affichage de la fenêtre de la table des constituants.

Le menu **Imprimer** possède deux sous-menus :

- Imprimer. Utilisé pour imprimer la fenêtre active.
- Configurer impression. Utilisé pour définir la configuration d'impression.

Le menu **Options** possède cinq sous-menus :

- Editer, qui possède lui-même 5 sous-menus :
 - Annuler.
 - Couper.
 - Copier.
 - Coller.
 - Remplacer.
- Police. Utilisé pour sélectionner une autre police d'écriture.
- Affichage, qui possède lui-même 4 sous-menus :
 - Barre d'outils. Utilisé pour afficher ou non la barre d'outils.
 - Barre d'état. Utilisé pour afficher ou non la barre de statut.
 - Position souris. Utilisé pour visualiser ou non la position de la souris.
 - Grille. Utilisé pour visualiser ou non la grille.
- Import/export (fichier de points). Utilisé pour importer ou exporter un fichier d'analyse, et qui possède lui-même 4 sous-menus :
 - Importer des analyses EZChrom.
 - Importer un fichier de points (ASCII).



- Exporter des fichiers d'analyse (ASCII).
- Exporter rapport ASCII.
- Afficher les options mathématiques. Utilisé pour soustraire une analyse ou lisser le signal.

2.6 Les icônes du module Traitement

13 icônes se trouvent dans la barre d'outils du module Traitement.



De gauche à droite, ce sont :

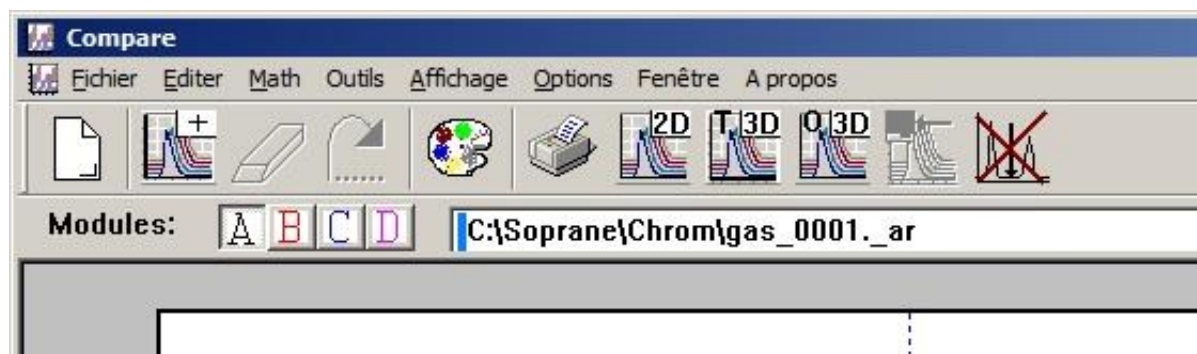
- Icône pour créer une nouvelle méthode.
- Icône pour ouvrir une méthode existante.
- Icône pour sauver les fichiers.
- Icône pour charger des résultats d'analyse.
- Icône pour imprimer la fenêtre.
- Icône pour intégrer le(s) chromatogramme(s).
- Icône pour visualiser le chromatogramme.
- Icône pour visualiser les paramètres analytiques utilisés.
- Icône pour accéder aux paramètres d'intégration.
- Icône pour accéder à la table des composants.
- Icône pour accéder aux résultats de l'étalonnage.
- Icône pour accéder à la table des résultats.
- Icône pour visualiser le rapport final.

Sous la barre d'outils, **Modules:** permet de sélectionner les différents modules dont on visualise l'analyse.

2.7 Le module Compare

Le module de comparaison est utilisé pour visualiser et comparer plusieurs chromatogrammes.

Lors du chargement, l'écran principal est visualisé :



2.8 Les menus du module Compare

Le menu **Fichier** possède 11 sous-menus :

- Nouveau. Utilisé pour ouvrir un document vide.
- Ouvrir. Utilisé pour ouvrir un document archivé.
- Fermer. Utilisé pour fermer la fenêtre active.
- Enregistrer. Utilisé pour archiver la fenêtre active.
- Enregistrer sous. Utilisé pour sauvegarder la fenêtre active sous un nouveau nom.
- Charger. Utilisé pour charger dans une fenêtre jusqu'à 64 analyses.
- Chargement séquentiel. Utilisé pour sélectionner jusqu'à 64 analyses et les afficher ensuite, une à la fois.
- Enregistrer analyse sous Utilisé pour sauvegarder les données.
- Configurer impression. Utilisé pour sélectionner les paramètres d'impression.
- Imprimer. Utilisé pour imprimer la fenêtre active.
- Quitter. Utilisé pour fermer le module compare.

Le menu **Editer** possède quatre sous-menus :

- Annuler. Utilisé pour supprimer la dernière action.
- Refaire. Utilisé pour refaire la dernière action.
- Copier.
- Limites d'affichage. Utilisé pour modifier les limites d'affichage.

Le menu **Math** possède six sous-menus :

- Différence. Utilisé pour visualiser la différence entre deux courbes.
- Somme. Utilisé pour visualiser la somme de deux courbes.
- Rapport. Utilisé pour visualiser le rapport de deux courbes.
- Dérivée. Utilisé pour visualiser la dérivée première d'une courbe.
- Lissage. Utilisé pour réduire le bruit d'une courbe.
- Etirer. Utilisé pour modifier l'échelle d'une courbe.

Le menu **Outils** possède 4 sous-menus :

- Zoom. Utilisé pour zoomer une courbe.
- Sélectionner. Utilisé pour sélectionner une courbe.
- Déplacer. Utilisé pour déplacer une courbe, avec 3 possibilités de mouvement : quelconque, horizontal ou vertical.
- Etirer. Utilisé pour étirer une courbe avec 3 possibilités d'étirement : quelconque, horizontal et vertical.

Le menu **Affichage** possède 7 sous-menus :

- Barre d'outil. Utilisé pour visualiser ou non la barre d'outils.
- Barre des voies. Utilisé pour visualiser ou non la barre des modules.
- Barre d'état. Utilisé pour visualiser ou non la barre de statut.
- Palette. Utilisé pour visualiser ou non la palette.
- Position souris. Utilisé pour visualiser ou non la position de la souris.
- Grille. Utilisé pour visualiser ou non la grille.
- Axes. Utilisé pour visualiser ou non les valeurs d'échelle sur les axes.

Le menu **Options** possède 6 sous-menus :

- 2D. Utilisé pour visualiser les courbes en mode 2D.
- 3D transparent. Utilisé pour visualiser les courbes en mode 3D transparent.
- 3D opaque. Utilisé pour visualiser les courbes en mode 3D opaque.



- Afficher la mire 3D. Utilisé pour afficher la fenêtre qui permet de positionner les chromatogrammes en 3D.
- Zoom aux mêmes coordonnées. Utilisé pour activer le zoom sur plusieurs fenêtres.
- Police. Utilisé pour sélectionner la fonte d'écriture.

Le menu **Fenêtre** possède 5 sous-menus : (plus le nom des fenêtres).

- Cascade.
- Arranger horizontal.
- Arranger vertical.
- Arrange les icônes.
- Actualiser.

2.9 Les icônes du module Compare

Onze icônes se trouvent dans la barre d'outils du module Compare.



De gauche à droite, ce sont :

- Icône pour ouvrir une nouvelle fenêtre.
- Icône pour ouvrir une fenêtre archivée.
- Icône pour supprimer la dernière action.
- Icône pour répéter la dernière action.
- Icône pour visualiser ou non la palette.
- Icône pour imprimer la fenêtre active.
- Icône pour afficher les courbes en mode 2D.
- Icône pour afficher les courbes en mode 3D transparent.
- Icône pour afficher les courbes en mode 3D opaque.
- Icône pour afficher la fenêtre qui permet de positionner les chromatogrammes en 3D
- Icône pour désactiver la superposition de chromatogrammes faite avec la combinaison de touches Maj+ Clic gauche.

2.10 Lecture du statut

Lorsque Soprane est lancé, lorsqu'une nouvelle méthode est envoyée à l'analyseur, avant un départ en analyse ou avant d'arrêter Soprane et l'analyseur, vous devez visualiser le statut de l'analyseur. Est-il "PRET" pour l'action souhaitée ?

De plus, la visualisation du statut est le meilleur moyen de s'assurer de la capacité de SOPRANE à dialoguer avec l'analyseur.

Nous avons déjà signalé que le menu "**Instrument / Status**", de même que l'icône représentant un œil, permet la lecture du statut.

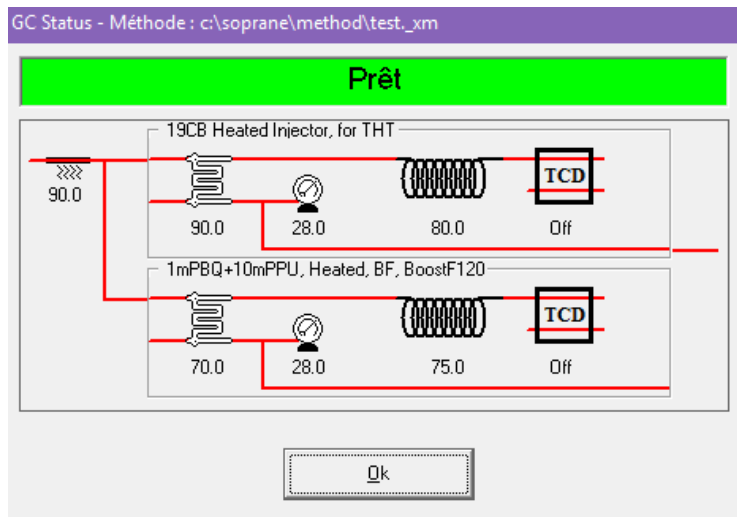
L'affichage indique tout ce qui concerne l'appareil : nombre de modules, températures, pression, état des détecteurs. La partie supérieure de la fenêtre permet de voir immédiatement si l'appareil est opérationnel (arrière-plan vert) ou non (arrière-plan rouge).



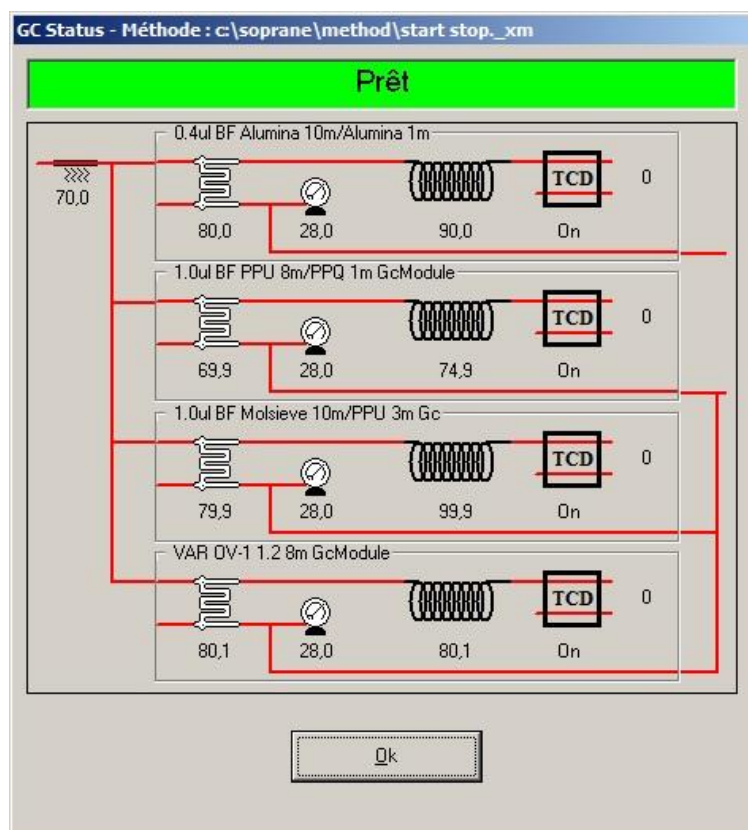
Les écrans correspondant au statut de différents types d'appareils sont présentés ci-dessous. Ils sont relativement similaires ; on note juste les différences suivantes :

- Les statuts des MicroGC 490 et MicroGC 3000 présentent plus d'informations concernant les colonnes que le statut du M200.
- Les statuts des MicroGC 3000 et M200 présentent une valeur à droite du TCD (détecteur) correspondant à son signal d'auto-zéro.

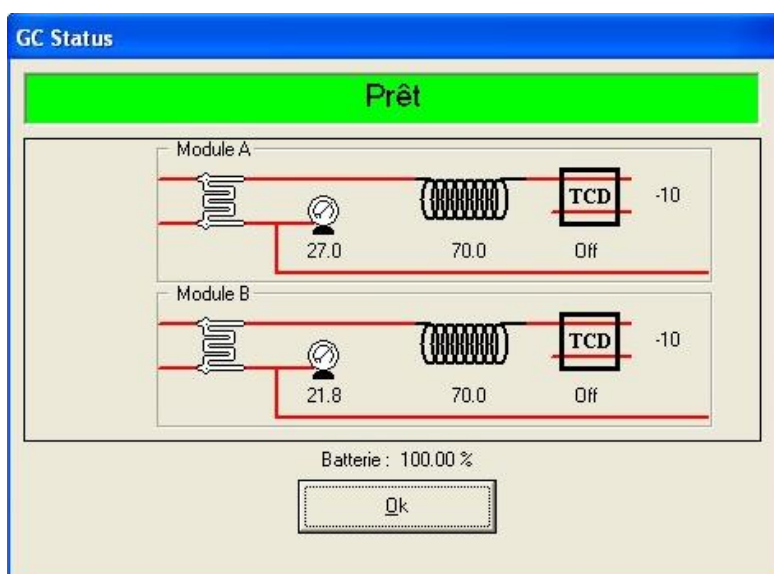
Statut d'un MicroGC 490 :



Statut d'un MicroGC 3000 :



Statut d'un M200 :



3. Méthodes d'analyse

Une méthode d'analyse regroupe aussi bien les conditions analytiques, gérées par SOPRANE, que les paramètres d'intégration et d'étalonnage qui seront configurés dans le module Traitement (voir chap. 6 à 8).

3.1 Créer et modifier une méthode d'analyse

Il existe plusieurs manières de créer une méthode d'analyse, selon que l'on part de nouveaux paramètres ou que l'on modifie une méthode d'analyse déjà existante.

1. Cliquez au niveau du menu sur "**Instrument / Editer la méthode**" ou sur l'icône correspondante.
2. Dans la fenêtre qui s'affiche, vous pouvez procéder de différentes manières :
 - Modifiez les différents paramètres analytiques affichés (exemple ci-dessous pour un MicroGC 3000) et cliquez sur "Enregistrer sous".



Rq : La définition de ces paramètres est présentée au § 3.4.

Ou

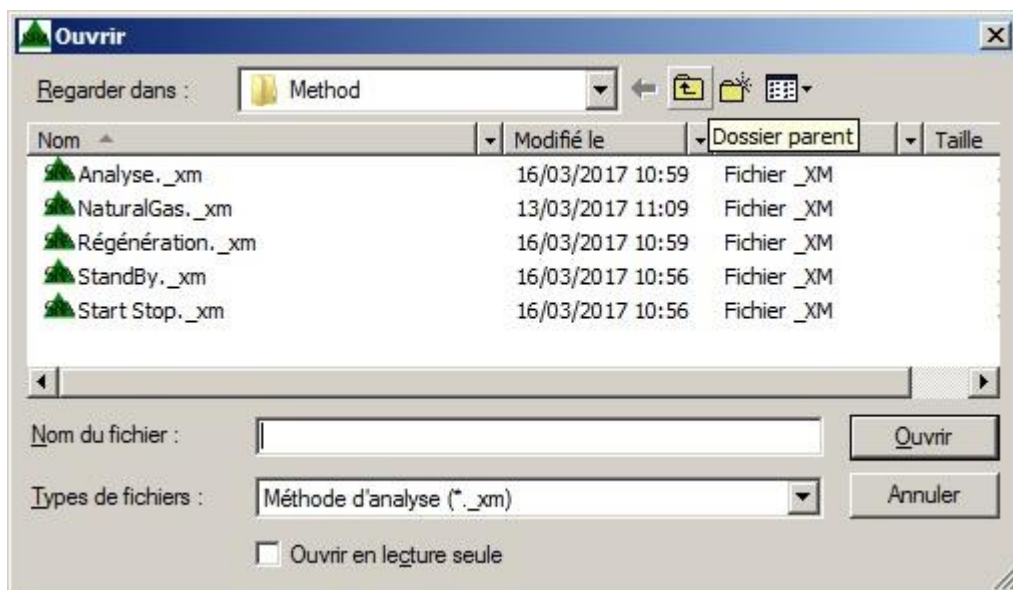
- Cliquez sur "**Nouveau**" ou "**Nouvelle méthode**" (selon le modèle d'appareil). Une fenêtre de dialogue permet d'indiquer le nom souhaité pour la nouvelle méthode. Aucune extension n'est nécessaire.

La fenêtre des conditions analytiques s'affiche, avec des valeurs par défaut. Fixez les conditions analytiques et cliquez sur Ok.

Ou

- Cliquez sur "**Ouvrir méthode**" ou sur le bouton "..." selon le modèle d'appareil.
- Sélectionnez la méthode puis cliquez sur Ouvrir.







- Modifiez les paramètres analytiques et cliquez sur Ok.

3.2 Envoyer une méthode à l'analyseur

Il existe plusieurs manières d'envoyer une méthode d'analyse à l'analyseur :

- Soit à partir de la fenêtre des conditions analytiques : 
 - Cliquez sur "**Envoyer meth. chromat**" (par ex. lorsque la méthode vient d'être créée).
 - Cliquez sur "Ouvrir méthode" ou sur le bouton "..." (selon l'appareil), sélectionnez la méthode puis cliquez sur "Envoyer meth. Chromato".
- Soit :
 - Cliquez sur "**Instrument / Envoyer la méthode**" ou sur l'icône correspondante 
 - Sélectionnez la méthode voulue et cliquez sur Ouvrir.

3.3 Les conditions analytiques

Le programme d'installation PGCSetup a permis de configurer SOPRANE selon le type d'analyseur que l'on utilise : un MicroGC 490 ou un MicroGC 3000 ou un chromatographe M200.

Les appareils étant différents, la visualisation des méthodes d'analyses sera, elle aussi, différente.

Voici les différents paramètres accessibles dans la méthode :

Pour chaque module analytique (nous nous limiterons ici au module A, sachant que les renseignements à fournir sont similaires pour les modules B, C et D), 2 types de données sont à fournir :

- Des cases à cocher. Elles correspondent à des états ON/OFF.
- Des valeurs numériques.



Entrée chauffée :

Il s'agit de la liaison entre l'arrivée échantillon et l'injecteur. Si cette entrée doit être chauffée, une température valide, exprimée en degré Celsius, doit être indiquée.

Chauffages injecteur et colonne :

Le fonctionnement est identique. Ces chauffages sont généralement nécessaires.

Durée balayage :

Avant injection de l'échantillon, il est nécessaire de faire circuler l'échantillon au niveau de la vanne d'injection. L'utilisateur indique ici une valeur en secondes durant laquelle la pompe sera activée pour aspirer l'échantillon et le faire circuler. La durée nécessaire pour le balayage dépend de la distance à parcourir par l'échantillon.

Durée injection :

Il s'agit de la durée exprimée en millisecondes pendant laquelle la vanne d'injection sera active. Une valeur trop faible ne permet pas une reproductibilité correcte ; on utilisera par défaut une valeur à 50 ms. Pour les μ GC 3000 et les M200 uniquement, cette durée peut être mise à zéro pour les injecteurs back-flush, afin d'obtenir une meilleure reproductibilité car l'injecteur ne dépend plus du temps. Pour des échantillons contenant des traces de composés, cette valeur peut être augmentée.

Temps du backflush :

Il s'agit du temps (référence zéro lors de l'injection), exprimé en secondes, auquel la circulation du gaz vecteur sera inversée dans la pré-colonne de manière à protéger l'ensemble analytique d'une éventuelle pollution par un produit lourd.

Pour le Micro GC 490, si on met cette valeur à zéro, le backflush ne s'active jamais, contrairement aux autres appareils où tous les composés sont backflushés si on met cette valeur à zéro.

Durée analyse :

Il s'agit de la durée d'une analyse, exprimée en secondes.

Pression colonne :

La case doit être cochée, ou une valeur doit être indiquée, pour que le gaz vecteur circule dans la colonne avec une pression en tête de colonne égale à la valeur indiquée et exprimée en PSI.

Détecteurs :

La case à cocher permet de mettre ou d'annuler le courant de pont du détecteur.

Sensibilité :

Différentes valeurs de gain d'ampli sont sélectionnables (voir paragraphes de pilotage de chaque appareil).

Le choix de sensibilité permet de définir la gestion de l'amplificateur de sensibilité, celle-ci pouvant aller de basse à haute.

NOTE IMPORTANTE :

Nous venons de préciser que le paramètre sensibilité pouvait prendre différentes valeurs et que ceci permettait de gérer le gain de l'amplificateur.

Le détecteur est très sensible, et permet de détecter aussi bien des ppm que 100% d'un constituant.



Supposons pour simplifier que l'on travaille en hauteur de pic, c'est-à-dire que l'on mesure la différence de signal entre le sommet du pic et la valeur de ligne de base (on supposera que la ligne de base est au même niveau avant et après le pic).

Supposons que le système donne une valeur de 2 volts pour un pic correspondant à 100% de produit. Pour une ppm, le signal sera donc de 2 μ V.

Lorsque l'on travaille en sensibilité "standard", le convertisseur analogique / digital délivre une valeur de 1 pour une variation de 5 nV en entrée. Nous aurons donc un signal de 400 points pour une variation de tension de 2 μ V.

Supposons maintenant que l'erreur du convertisseur pendant la conversion soit de 10 points. Nous pouvons faire une erreur de 10 points sur la lecture du sommet du pic, mais aussi sur la lecture de la ligne de base et il en résulte une erreur de mesure de 20 points pour un signal estimé à 400 points.

Si nous programmons une sensibilité "haute", le signal électrique est multiplié par un facteur 10 avant conversion et le nombre de points est divisé par 10 après conversion.

L'erreur de conversion reste égale à 20 points, mais se rapporte à un signal de 4000 points d'où une erreur relative imputable à la conversion analogique / digital 10 fois plus faible.

Bien évidemment, le signal maximal du détecteur pouvant être traité par le convertisseur n'est plus de l'ordre de 10 volts mais d'environ 1 volts (ce signal se retrouve multiplié par 10 avant conversion) et si l'on injecte 100 % d'un constituant avec la sensibilité "haute", le signal en entrée du convertisseur sera trop important et la sortie sera saturée.

CONCLUSION : si la concentration d'un constituant est de l'ordre de quelques pour cent ou plus, on utilisera une sensibilité "standard" et l'erreur de conversion sera négligeable.

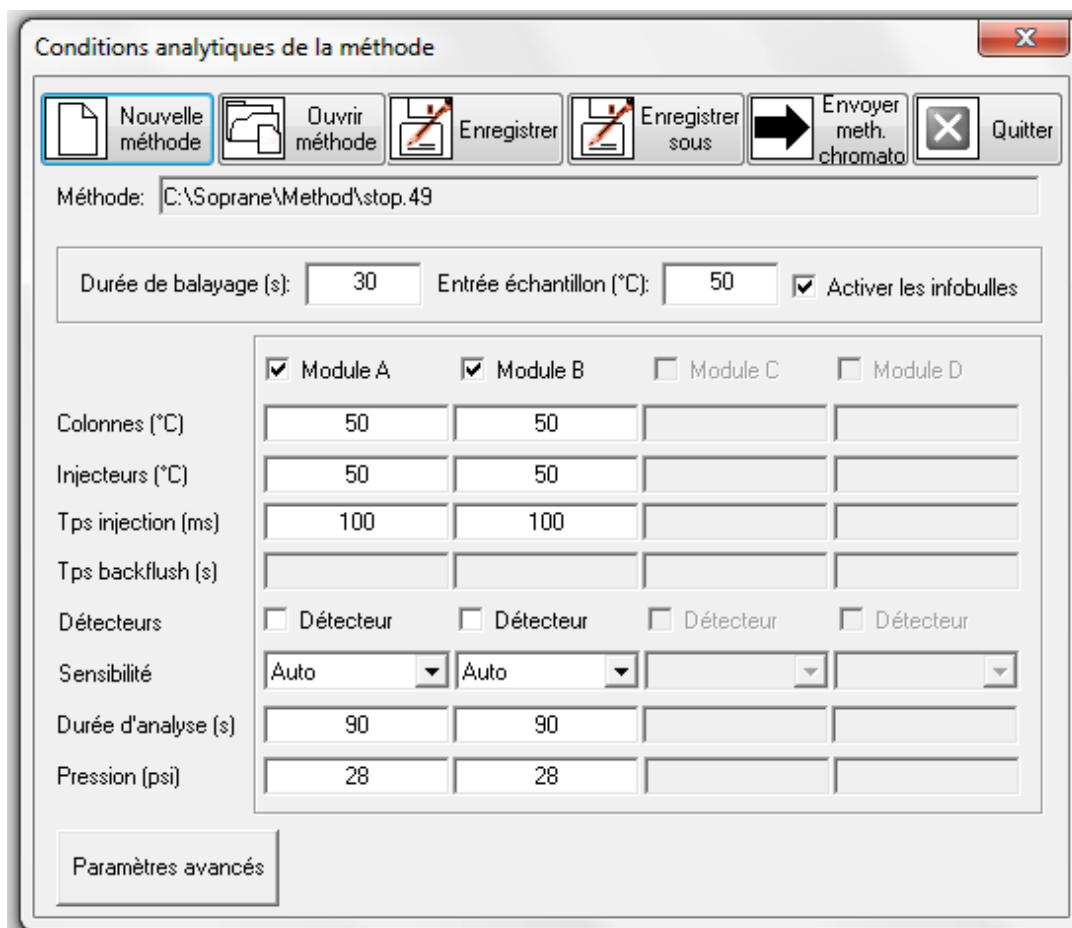
Si l'on analyse des produits présents à des concentrations de l'ordre de la ppm, l'erreur de conversion analogique / digital devient trop importante et il est préférable d'utiliser une sensibilité "haute".

Le bouton "Param." ou "Paramètres avancés" permet l'ouverture d'une deuxième feuille de paramètres ; ces derniers seront mentionnés dans les paragraphes suivants, car ils diffèrent selon l'analyseur.

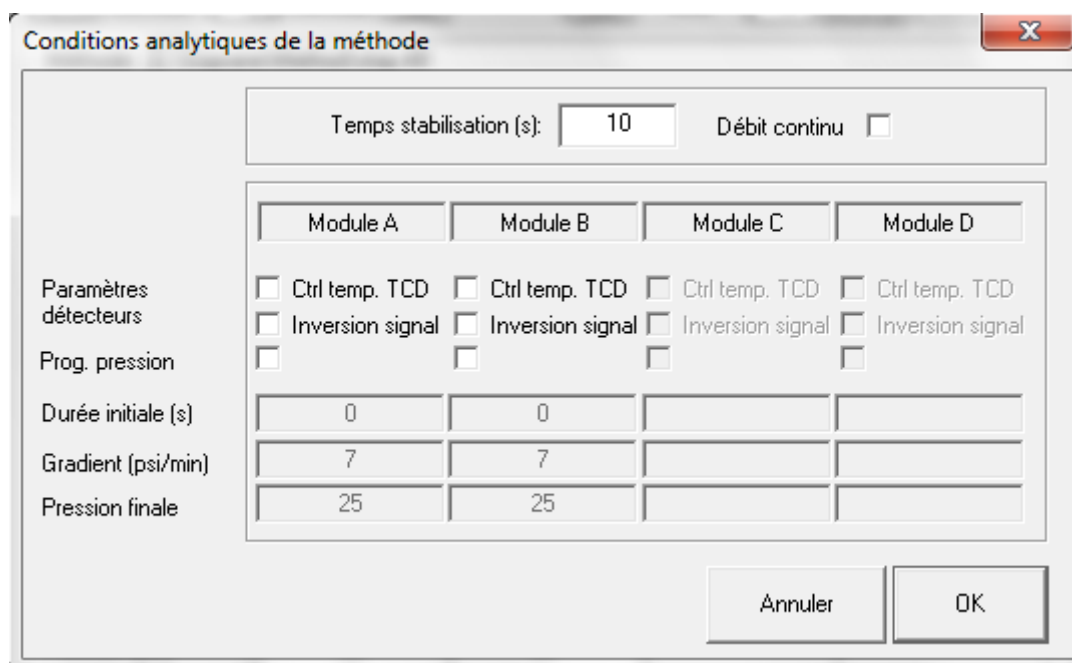
3.4 Pilotage d'un MicroGC 490

Voici la fenêtre permettant de fixer les conditions analytiques pour un MicroGC 490 :





Le bouton "Paramètres avancés" permet d'atteindre un deuxième écran :



- Le **temps de stabilisation** correspond à la durée de latence avant que le micro GC passe en « ready »
- **Débit continu** : Si cette case est cochée, la pompe est désactivée puisque l'échantillon circule "en continu" dans la boucle d'injection, on peut activer le débit continu uniquement dans Soprane Setup.
- **Ctrl temp. TCD** : contrôle de la température du TCD, si le TCD chauffe suite à une mauvaise configuration des gaz vecteurs, par exemple, une sécurité coupe le TCD.
- **Inversion signal** : permet d'inverser le signal lorsque l'on utilise le gaz vecteur Argon ou Azote
- **Prog. Pression** : permet de programmer la pression si besoin

3.5 Pilotage d'un MicroGC 3000

Voici la fenêtre permettant de fixer les conditions analytiques pour un Micro GC 3000 :

Module	Alumina	PPU	MS5A	OV1
Entrée chauffée (°C)	<input checked="" type="checkbox"/>	90.00		
Chauffage injecteur (°C)	<input checked="" type="checkbox"/> 90.00	<input checked="" type="checkbox"/> 90.00	<input checked="" type="checkbox"/> 90.00	<input checked="" type="checkbox"/> 90.00
Chauffage colonne (°C)	<input checked="" type="checkbox"/> 130.00	<input checked="" type="checkbox"/> 70.00	<input checked="" type="checkbox"/> 100.00	<input checked="" type="checkbox"/> 80.00
Pompe (temps balayage) (s)	Pompe 1: 20.00	Pompe 2: 20.00		
Durée balayage (s)	20.00	20.00	20.00	20.00
Durée injection (ms)	0.00	0.00	0.00	50.00
Temps backflush (s)	10.00	10.00	10.00	
Durée analyse (s)	180.00	180.00	180.00	180.00
Pression colonne (psi)	<input checked="" type="checkbox"/> 28.00	<input checked="" type="checkbox"/> 28.00	<input checked="" type="checkbox"/> 28.00	<input checked="" type="checkbox"/> 28.00
Détecteur	<input checked="" type="checkbox"/> ON	<input checked="" type="checkbox"/> ON	<input checked="" type="checkbox"/> ON	<input checked="" type="checkbox"/> ON
Sensibilité	Standard	Standard	Standard	Standard
Prog. Temp. / Pression	Prog A	Prog B	Prog C	Prog D

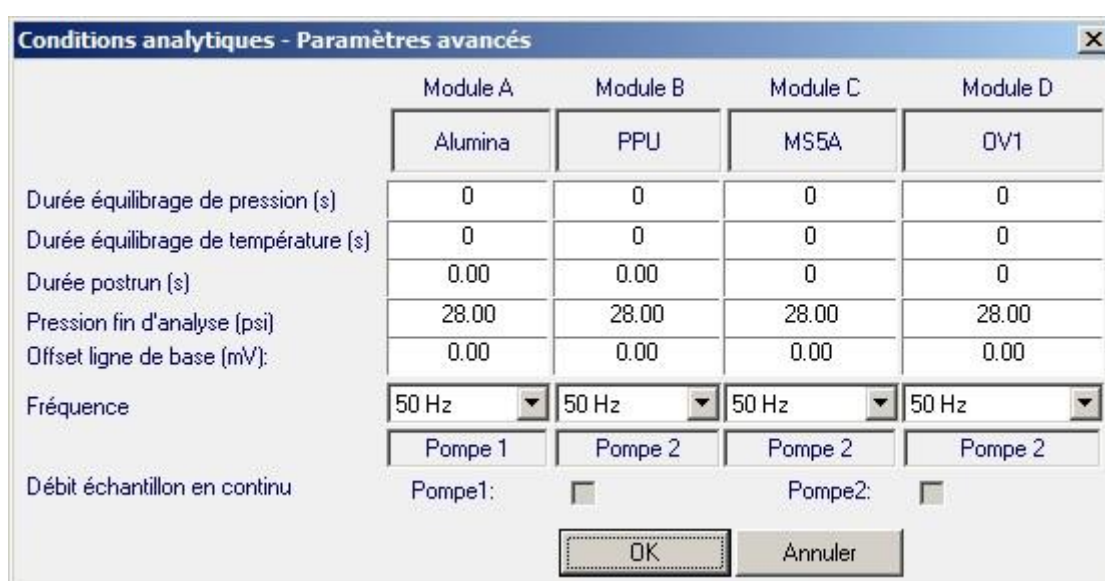
Sur ce premier écran des conditions analytiques, un ensemble de boutons, nommés Prog A à Prog D, permet l'écriture de pas de programmation de manière à modifier la température, la pression ou la sensibilité durant l'analyse.

Ces pas de programme doivent être écrits par temps croissants.





Le bouton "Param." permet d'atteindre un deuxième écran :



Durée d'équilibrage des températures ou des pressions :

Il s'agit de durées, exprimées en secondes, permettant de limiter la gestion de défauts. Si une consigne est programmée, la nouvelle valeur de température ou de pression ne peut pas être atteinte instantanément. La valeur programmée ici correspond à la durée pendant laquelle la différence normale entre valeur réelle et nouvelle consigne n'est pas gérée comme un défaut.

Durée postrun et pression de fin d'analyse :

Elles permettent, lorsque cela est nécessaire, d'éviter d'attendre trop longtemps la sortie d'un constituant lourd non analysé. A la fin de l'analyse, la pression en tête de colonne est imposée à la valeur programmée ici (normalement supérieure à la pression utilisée durant l'analyse) et cette valeur est maintenue durant le temps exprimé ici.

Offset ligne de base : La valeur, exprimée en millivolts, permet de déplacer le signal d'analyse dans un sens ou dans l'autre.



Débit continu :

Si cette case est cochée, la pompe est désactivée puisque l'échantillon circule "en continu" dans la boucle d'injection.

Fréquence :

Il s'agit de la fréquence d'échantillonnage du signal d'analyse, exprimée en Hz. Le choix est donné de mesurer le signal 20, 50 ou 100 fois par seconde.

3.6 Pilotage d'un M200

L'affichage permettant la visualisation, l'édition ou la modification de tous les paramètres de la méthode d'analyse est indiqué ci-après.

La gamme de sensibilité que l'utilisateur peut sélectionner est : Basse, Moyenne, Haute.

Les gaz vecteurs utilisables sont l'hydrogène, l'hélium, l'azote et l'argon.

L'utilisateur a simplement à renseigner les valeurs de temps et de température.

	Module A	Module B	Module C	Module D
Température colonne (°C)	40.00			
Durée d'injection (msec)	10.00			
Backflush (sec)				
Sensibilité	Basse			
Détecteur:	<input type="checkbox"/> OFF	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Autozéro:	<input type="checkbox"/> OFF	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Entrée chauffée:	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Temps balayage (sec)	A et B:	10.00	C et D:	
Durée d'analyse (sec):	120.00			
Caractéristiques du module				
Colonne:				
Gaz vecteur				
Pression GV				

3.7 Les 4 méthodes utiles

Quel que soit le type d'appareil que vous utilisez, il est nécessaire de créer les 4 méthodes suivantes :



- ✓ **Méthode Start/Stop** : seuls les gaz vecteurs circulent dans l'analyseur mais les colonnes ne sont pas chauffées, températures réglées en dessous de 50 °C. Cette méthode sera donc utilisée au démarrage et à l'arrêt de l'appareil.
- ✓ **Méthode Standby** : les gaz vecteurs circulent, les colonnes sont chauffées mais les détecteurs ne sont pas allumés. Cette méthode sera utilisée après la méthode Start/Stop et également lorsqu'on souhaite laisser l'appareil dans des conditions (Pression et température) stabilisées en attente d'une analyse.
- ✓ **Méthode Analyse** : les gaz vecteurs circulent, les colonnes sont chauffées et les détecteurs sont allumés.
- ✓ **Méthode Régénération** : il s'agit d'une méthode utilisée pour régénérer les colonnes (voir chap. 13). La température est plus haute, la pression un peu plus forte et les détecteurs sont éteints.

Avant d'éteindre le chromatographe, et dans un souci de sécurité pour les colonnes, il est préférable d'envoyer la méthode Start/Stop et attendre que la température des colonnes soit en-dessous de 50°C.

4. Séquences d'analyses

Nous venons de voir comment écrire (création ou modification) une méthode d'analyse et l'envoyer à l'analyseur.

La séquence d'analyses est utile lorsque plusieurs méthodes sont utilisées parce que soit on analyse plusieurs flux avec des compositions différentes, soit on ne travaille pas toujours dans les mêmes conditions analytiques par exemple.

Nous souhaitons réaliser des cycles d'analyses. Il va donc être nécessaire de préciser quel flux on souhaite analyser, quelle méthode d'analyse sera utilisée pour cela, combien de temps il faudra attendre avant les injections, ...

Supposons que le Micro GC soit couplé avec un sélecteur de voies (ou flux). Ces voies peuvent être sélectionnées par campagnes (on travaille toujours sur la même voie) ou séquentiellement, toutes les voies ayant la même fréquence d'analyse, ou certaines étant considérées comme plus importantes que d'autres.

Le menu "**Echantillons / Table séquence**" permet de préciser quelles voies constitueront la séquence d'analyse.



	Nom de l'analyse	Méthode	N° voie	Balayage (secs)
1		NaturalGas_xm	1	0

Dans cette table, il est possible de définir les analyses en leur donnant un nom, de sélectionner une méthode d'analyse (chaque case est une zone de liste visualisant toutes les méthodes), d'indiquer quelle voie est concernée (autre zone de liste) et de préciser la durée minimale d'échantillonnage avant l'injection.

La méthode d'analyse comprend déjà une durée de balayage de la boucle d'injection, qui correspond à la gestion de la pompe. En effet, avant d'injecter, il faut faire circuler l'échantillon dans la boucle d'échantillonnage, ce qui peut nécessiter une pompe pour aspirer l'échantillon.


La durée programmée ici se situe avant et ne concerne pas l'injection proprement dite mais la circulation de l'échantillon. Elle correspond à la sélection de l'échantillon.

Lorsque la vanne de sélection de voie est commutée, il est nécessaire de balayer les "résidus" du flux précédent de sorte que ce qui sera injecté sera représentatif de l'échantillon à analyser. Cela nécessite un temps plus ou moins long, fonction de l'échantillon, de ses caractéristiques, du débit et du volume séparant la vanne de sélection d'échantillon de la vanne d'injection.

La valeur ainsi programmée (valeur en secondes) permettra à SOPRANE d'anticiper l'analyse suivante et de sélectionner la voie suivante à temps pour que le balayage soit suffisant.

Si la durée de balayage est supérieure à la durée séparant la fin de l'injection de l'analyse en cours du début de l'analyse suivante, une temporisation est implicitement ajoutée par SOPRANE.

5. Début et arrêt des analyses

Le menu "**Action / Lancement analyse**" de SOPRANE, de même que l'icône START  permet le départ des analyses.

Il est alors possible de démarrer une ou plusieurs analyse(s), une séquence d'analyses ou la répétition de la même séquence d'analyses.



Lors d'une telle demande, SOPRANE émet la méthode d'analyse et l'analyse démarre dès que le chromatographe est stabilisé dans les conditions opératoires requises.

3 ou 4 modes de lancements sont accessibles :

- **Lancement en mode analyse :**

Dans cette fenêtre il est possible de sélectionner le nombre d'analyses que l'on souhaite lancer (jusqu'à 999), la méthode d'analyse, de donner un nom à la série d'analyses et d'indiquer un nom de répertoire (ce dernier sera créé automatiquement).

Vous pouvez également renseigner le nom de l'échantillon, celui de l'opérateur ainsi que l'intervalle entre chaque injection.

Cochez la case "Attente start externe" si votre Micro GC est couplé à un appareil d'analyse en amont dont la fin d'analyse déclenchera l'injection dans le Micro GC.

Lancement des analyses

Lancement d'analyses

En mode analyse Nombre d'analyses: 1

Une seule séquence

En mode automatique

Méthode : NaturalGas_xm

Nom de la série : ...

Répertoire : C:\Soprane\Chrom ...

Nom échantillon

Opérateur

Intervalle entre chaque injection en minutes : 0.00

Attente Start externe

Ok

Annuler

- **Lancement d'une seule séquence :**

Comme il s'agit de ne lancer qu'une seule séquence, par rapport au cas précédent, le nombre d'analyses, la méthode et l'intervalle entre la première injection de chaque séquence ne sont pas accessibles (grisés).



Lancement des analyses

Lancement d'analyses

En mode analyse
 Une seule séquence
 En mode automatique

Nombre d'analyses: 1

Ok

Annuler

Méthode : NaturalGas._xm

Séquence

Répertoire : C:\Soprane\Chrom

Nom échantillon

Opérateur

Intervalle entre la première injection de chaque séquence en minutes : 0.00

Attente Start externe

- Lancement en mode automatique :

Tant que SOPRANE sera maintenu en analyse, la même séquence sera indéfiniment répétée. Il peut être nécessaire de respecter un certain délai avant de répéter la séquence aussi vous pouvez spécifier l'intervalle de temps (exprimé en minutes) entre la première injection de chaque séquence.

Lancement des analyses

Lancement d'analyses

En mode analyse
 Une seule séquence
 En mode automatique

Nombre d'analyses: 1

Ok

Annuler

Méthode : NaturalGas._xm

Séquence

Répertoire : C:\Soprane\Chrom

Nom échantillon

Opérateur

Intervalle entre la première injection de chaque séquence en minutes : 0.00

Attente Start externe



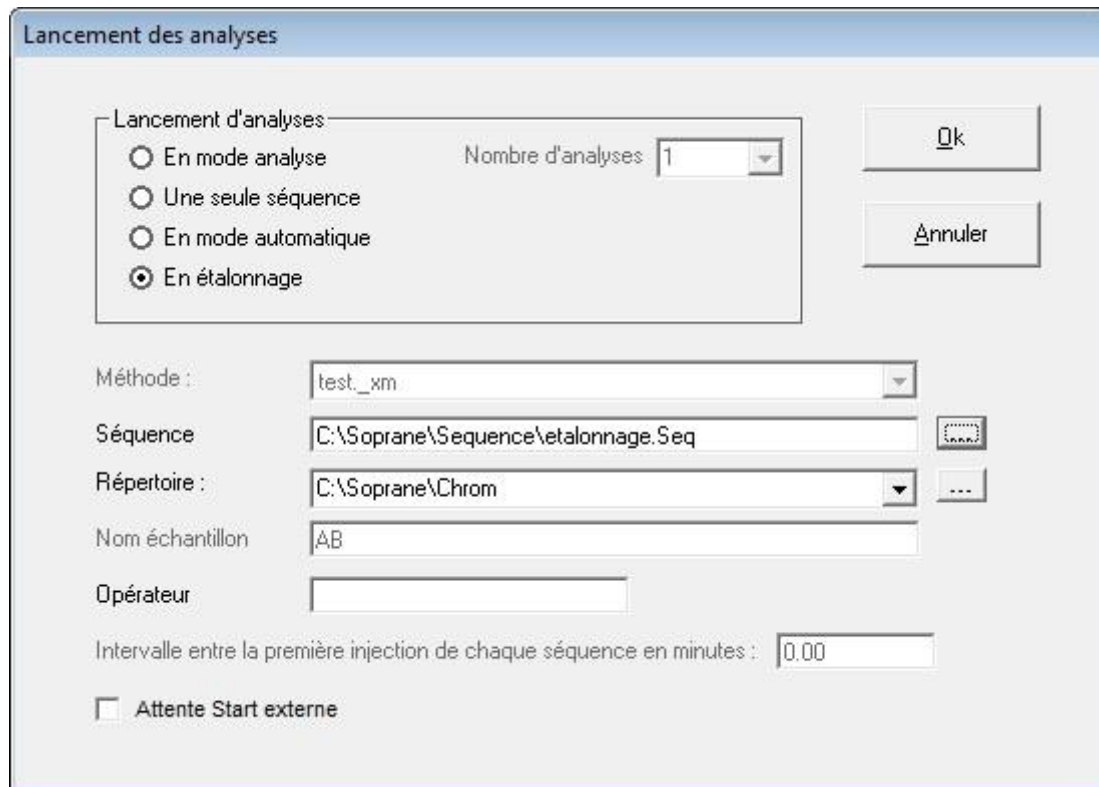
NOTE :

Une séquence d'analyse peut bien évidemment comprendre la référence d'un flux défini par ailleurs comme servant à la calibration. Il faut garder à l'esprit qu'il s'agit d'une séquence d'analyses, ce qui signifie que ces étalons seront alors analysés comme n'importe quel autre échantillon et donneront lieu au calcul de concentrations.

- **Lancement en étalonnage :**

Ce mode ne s'affiche à l'écran que si un étalon a été préalablement sélectionné lors de la configuration dans Soprane Setup.

Pour plus de détails, voir le chapitre 8 concernant l'étalonnage.



De la même façon, l'arrêt d'un cycle d'analyses peut être demandé par le menu **"Action / Stop"** ou par l'icône STOP.

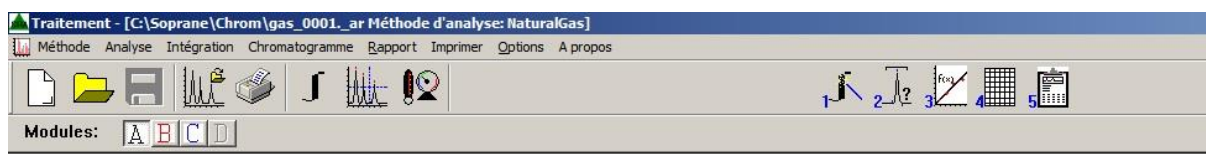


Par sécurité une fenêtre de dialogue permet de confirmer (ou non) la demande et précise que l'arrêt effectif surviendra à la fin de l'analyse en cours.



6. Intégration

L'intégration d'un chromatogramme se fait dans le module Traitement, accessible via :



6.1 Méthodes d'intégration

La méthode d'intégration constitue un sous-ensemble de la méthode d'analyse et est elle-même constituée de plusieurs parties :

- des données précisant le traitement à effectuer,
- des données concernant l'intégration proprement dite,
- des données sur l'échantillon,
- une table des composants,
- l'indication éventuelle d'un traitement mathématique à utiliser,
- la référence d'un éventuel programme utilisateur à lancer après l'analyse.

Lorsqu'on crée une méthode d'analyse dans Soprane, des valeurs d'intégration par défaut sont déjà associées à la méthode d'analyse.

Aussi en pratique, lorsqu'on ouvre le module Traitement pour faire l'intégration, l'analyse s'ouvre avec la méthode associée et c'est alors que l'on modifiera les valeurs d'intégration par défaut qui seront sauvegardées dans notre méthode d'analyse.

Cependant, il est tout de même possible de créer ou ouvrir une méthode d'intégration :

- Pour créer une nouvelle méthode d'intégration, allez dans "**Méthode / Créer une méthode**" ou cliquez sur l'icône "Nouveau".
- Pour ouvrir une méthode d'intégration existante, allez dans "**Méthode / Ouvrir une méthode**" ou cliquez sur l'icône "Ouvrir méthode".

6.2 Événements d'intégration

L'intégration d'un chromatogramme fait appel à deux processus distincts :

- d'abord il est nécessaire de détecter la présence de pics.
- dans un second temps il faut interpréter la forme de ces pics pour pouvoir appliquer différentes méthodes de correction de ligne de base.

Les événements d'intégration répondent à ces deux fonctions.

Deux paramètres sont importants pour détecter les pics et leur forme : la largeur de pic et la sensibilité.

Le signal d'analyse est scruté avec une fréquence de 20, 50 ou 100 Hz (comme cela a été défini dans la méthode d'analyse, pour les μGC 3000). Toutes les valeurs sont ensuite regroupées en tranches de manière à disposer d'un processus optimisé selon la taille du pic. Le regroupement s'opère en fonction de la valeur de largeur de pic programmée par l'utilisateur, ce qui autorise ensuite un suivi du signal en comparant la pente



à la valeur de seuil de sensibilité programmée par l'utilisateur. Ce processus permet une flexibilité assez importante. Multiplier ou diviser par 2 la largeur de pics n'entraîne généralement pas de modifications importantes. Il est toutefois préférable d'utiliser des valeurs en rapport avec la réalité.

La valeur par défaut de 0,5 secondes pour la largeur de pics permet l'intégration correcte de pics avec un faible temps de rétention.

La valeur par défaut de 5 $\mu\text{V/s}$ pour le seuil de sensibilité permet également la détection de pics "courants". Pour rendre l'intégration plus sensible, il est préférable de commencer par s'assurer que la largeur de pic est cohérente. La meilleure valeur est la largeur du pic estimée à mi-hauteur. Ensuite, il est possible d'ajuster le seuil de sensibilité.

6.3 Nature et valeurs des événements d'intégration

Le chromatogramme visualisé correspond exactement au signal utilisé pour faire l'intégration. Si le signal est géré avec une sensibilité haute (voir les paramètres analytiques au chapitre 3.3) et que la concentration des constituants analysés est trop élevée, le signal peut être tronqué. Dans un tel cas, la hauteur ou la surface du pic sera faussée.

Pour obtenir une bonne intégration, il est nécessaire de modifier les valeurs de largeur de pic et de seuil de sensibilité au cours de l'analyse. Cela est obtenu en programmant des événements.

Certains événements concernent la détection des pics, d'autres le mode de correction de ligne de base et les derniers servent à rejeter des pics.

Les événements d'intégrations sont décrits ci-après. Pour chaque événement, nous indiquons les valeurs et la représentation sur le chromatogramme.

Détection de pic : PD+, PD- (Peak detection)

Cet événement possède 2 états ON, symbolisé par PD+, et OFF, symbolisé par PD-.

Lorsque la détection de pic est ON, le système intègre le signal.

Par défaut, cet événement est ON. Il appartient à l'utilisateur d'interdire l'intégration là où il le souhaite (rejet de solvant, ...).

Détection de pic négatif : NPD+, NPD- (Negative peak detection)

Cet événement possède 2 états ON, symbolisé par NPD+, et OFF, symbolisé par NPD-.

L'événement est OFF par défaut. Lorsque la détection de pic négatif est ON, le système inverse sa logique de travail : une diminution de pente correspond à un début de pic tandis qu'un accroissement de la pente traduit la fin d'un pic et un retour à la ligne de base. La surface du pic est bien évidemment exprimée en valeur positive.

L'utilisation correcte de cet événement consiste d'abord à interdire la détection des pics par un événement PD OFF (voir au-dessus), ensuite à inverser la logique d'intégration (NPD ON pour intégrer des pics négatifs, NPD OFF pour revenir aux conditions normales), enfin à autoriser l'intégration avec un événement PD ON. Les deux premiers événements peuvent être programmés au même temps, mais le troisième événement doit se trouver plus tard.

Détection de ligne de base : BD (Baseline detection)

Cet événement possède 2 états ON et OFF.

L'utilisation de cet événement permet d'interdire la reconnaissance du retour à la ligne de base à la fin de l'intégration d'un pic. L'événement est ON par défaut, ce qui signifie que l'intégrateur recherche, et peut trouver, un retour à la ligne de base à la fin d'un pic ou d'un groupe de pics.

A compter du moment où on l'utilise (il devient alors OFF), et jusqu'à ce qu'on le ré-utilise (retour à ON), tous les pics sont considérés comme appartenant à un et un seul groupe de pics.



Le retour à la ligne de base ne peut donc survenir qu'après la deuxième utilisation du paramètre. Si la fin d'analyse survient avant un retour effectif à la ligne de base, éventuellement parce que l'évènement n'est utilisé qu'une seule fois, le dernier minima du chromatogramme est considéré comme étant la ligne de base.

Valeur absolue de seuil de sensibilité : SAS (Slope absolute sensitivity)

Cet évènement est la valeur limite exprimée en $\mu\text{V/s}$ de pente du signal utilisée pour détecter les pics ou les vallées entre les pics.

La valeur programmée prend effet immédiatement et jusqu'à ce qu'une autre valeur la remplace.

Valeur absolue de largeur de pic : SAP (Set absolute peakwidth)

Cet évènement est la valeur de largeur de pic exprimée en secondes utilisée pour détecter les pics.

La valeur programmée prend effet immédiatement et jusqu'à ce qu'une autre valeur la remplace.

Valeur relative de seuil de sensibilité : SRS (Set relative slope sensitivity)

Cet évènement possède 2 états Moitié et Double.

Cet évènement permet de multiplier ou diviser par 2 la valeur de seuil de sensibilité utilisée par le logiciel.

La nouvelle valeur reste active jusqu'à attribution d'une nouvelle valeur.

Valeur relative de largeur de pic : SRP (Peak relative width)

De la même manière, cet évènement permet de doubler ou diviser par 2 la valeur de largeur de pic utilisée par le logiciel. La nouvelle valeur reste active jusqu'à attribution d'une nouvelle valeur.

Forçage de ligne de base à la prochaine vallée : FBN (Force baseline at next valley)

Cet évènement à 2 états est OFF par défaut.

L'utilisation de cet évènement force le logiciel à considérer la première vallée suivante comme étant un retour à la ligne de base. Cette reconnaissance de ligne de base inhibe alors le processus sans qu'il ne soit nécessaire de programmer un état OFF pour l'évènement.

Forçage de ligne de base à toutes les vallées : FBA+, FBA- (Force baseline at all valleys)

Cet évènement à 2 états est OFF par défaut.

L'utilisation de cet évènement force le logiciel à traiter tous les points de vallée suivants comme étant des retours à la ligne de base. Cette reconnaissance de la ligne de base imposée à toutes les vallées se poursuit jusqu'à la fin de l'analyse ou la programmation d'un état OFF pour l'évènement.

Pénétration de ligne de base : BP (Baseline penetration)

Cet évènement à 2 états est OFF par défaut.

Il permet d'autoriser (ON) ou d'interdire (OFF) que la correction de ligne de base se fasse en coupant le chromatogramme.

Partage de ligne de base : BS (Baseline split)

Cet évènement à 2 états est OFF par défaut. Il permet de forcer le logiciel à tracer une ligne de base commune à tous les pics.

Regroupement de pics : PG (Peak group)

Par défaut cet évènement à 3 états (ON / ALL / OFF) a la valeur ALL.

Il permet d'activer un groupe, tous les groupes ou aucun groupe pour les pics. La ligne de base d'un groupe est dessinée en bleu.

Lorsqu'un groupe est commencé avec le paramètre PG ALL, les surfaces de tous les pics dont le temps de rétention est supérieur au temps de l'évènement PG ALL sont additionnées, jusqu'à ce que l'on trouve un



événement PG OFF ou la fin d'intégration (PD OFF) ou la fin de l'analyse. La surface ainsi obtenue est affectée au pic ayant la plus grande surface individuelle et le calcul de concentration se fait avec le coefficient de réponse affecté à ce pic.

Lorsqu'un groupe est commencé avec le paramètre PG ON, la fin du groupe peut aussi survenir si l'on retourne à la ligne de base, ce qui a pour effet de créer un nouveau groupe (puisque l'on est toujours en regroupement de pics), et ainsi de suite jusqu'à fin normale du regroupement telle que définie pour PG ALL.

Pics tangentiels : SKM (Skim peak detection)

Cet événement possède 3 états (Tangent / Exponential / Off). Il permet d'activer ou non l'intégration tangentielle.

Détection de pics sur épaulement : SPD (Shoulder peak detection)

Cet événement à 2 états (ON / OFF) permet ou interdit la reconnaissance d'un pic sur épaulement comme étant un pic séparé ou non. L'épaulement peut se situer indifféremment sur la pente croissante ou décroissante du pic.

Par défaut l'évènement est dans l'état OFF et les 2 pics seront traités comme un seul pic.

Forçage de pics : SP (Set Peak)

Cet événement à 2 états (ON / OFF) permet d'imposer la détection de pics là où les autres paramètres s'avèrent insuffisants, à cause de l'asymétrie des pics, d'une trop grande disparité de la forme du pic selon les rapports de concentration, ...

Lorsque le paramètre SP est actif (SP ON), l'éventuelle intégration d'un pic est immédiatement arrêtée avec ce qui est considéré comme un retour à la ligne de base, même si ce n'est pas le cas. Un nouveau pic est immédiatement débuté, en considérant partir de la ligne de base, même si ce n'est pas le cas.

Lorsque le paramètre SP est désactivé, le pic est arrêté et l'intégration considère que l'on est revenu à la ligne de base.

La correction de ligne de base sur un pic intégré en mode SP se fait en mode tangentiel. Si des points de vallée sont détectés, il s'agit non pas d'un pic mais d'un massif et les pics sont séparés par des verticales (pas d'intégration sur traînée pour un massif intégré en mode SP), la correction de ligne de base étant la tangente au massif, éventuellement plusieurs tangentes si un point de vallée se trouve à un niveau inférieur à la tangente au massif.

Remarque : L'utilisation du paramètre SP a été conçue pour résoudre des cas difficiles. Si on utilise ce paramètre pour un pic ne posant pas de problème la sensibilité sera très certainement à diminuer (principalement par augmentation de la valeur du paramètre SAP, ou du paramètre SAS) pour éviter de réagir à la moindre variation du signal.

Aire minimale pour rejet : <AR (Minimum area reject)


Aire maximale pour rejet : >AR (Maximum area reject)

Hauteur minimale pour rejet : <HR (Minimum height reject)

Hauteur maximale pour rejet : >HR (Maximum height reject)

Ces 4 événements reçoivent directement leur valeur numérique.

6.4 Programmation des événements

Lors de l'édition de la partie intégration d'une méthode d'analyse, le bouton  "paramètres d'intégration" permet d'accéder à la table des événements d'intégration.



Temps	Type	Valeur
0.0	Sensibilité de pente ($\mu V/s$)	5.000000
0.0	Largeur de pic absolue (s)	0.500000
0.00	Détection pic	Off
40.00	Détection pic	On


On se déplace dans cette table avec les flèches du pavé numérique ou avec la souris. Les lignes de la table sont automatiquement triées par temps croissants durant l'édition.

Il n'existe pas de priorité entre 2 événements envisagés au même temps : SOPRANE les gère simultanément. L'ajout d'une ligne se fait par un clic droit dans la colonne « Temps » et clic sur « Ajouter une ligne ».

La suppression d'une ligne de la table des événements est obtenue en sélectionnant la ligne (clic droit de la souris dans la colonne « Temps ») et en la supprimant par la touche DELETE ou en cliquant sur « Supprimer cette ligne ».

Ainsi que nous le verrons ultérieurement dans ce chapitre, une autre méthode beaucoup plus précise consiste à utiliser un chromatogramme et à positionner graphiquement les événements sur ce chromatogramme.

Si l'on modifie les paramètres d'intégration, ou les événements d'intégration, ou encore si l'on change manuellement la ligne de base, il est nécessaire de refaire l'intégration.

Le menu "**Intégration / Intégrer**", de même que l'icône d'intégration  de la palette de contrôle ou de la barre d'outils ou de la palette de ligne de base manuelle permet de refaire l'intégration avec le nouveau jeu de paramètres. Les anciennes valeurs seront perdues.

6.5 Les outils graphiques du module traitement

De manière à simplifier le travail, le module de traitement fait un large usage des outils graphiques.

Lorsque l'on travaille avec le module de traitement, le chromatogramme est représenté avec en abscisse le temps exprimé en secondes et en ordonnée la valeur du signal exprimée en microvolts.

Si plusieurs modules (A, B, C et D) équipent l'analyseur, l'indication de leur existence est rappelée dans la barre de modules de la fenêtre visualisée (bas de page) et l'on peut sélectionner chacun de ces modules par les lettres A, B, C ou D non grisées se trouvant sous la barre d'outils.

La position de la souris (valeur X en secondes, valeur Y en microvolts) est indiquée dans la barre de statut en bas à gauche. Un point du chromatogramme peut donc être localisé avec une extrême précision.

Dans cette même barre, si un pic est intégré et que l'on place le curseur de la souris sur ce pic, l'aire de ce pic y est indiquée.

6.5.1 Palette de contrôle

Une palette d'outils, définie comme "palette de contrôle" est visualisée. Le menu "**intégration / palette de contrôle**" permet de l'afficher ou de la cacher.

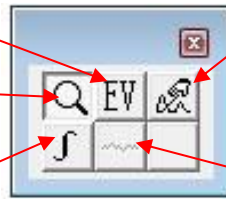
Les commandes accessibles par la palette de contrôle sont également accessibles par le menu intégration.



Palette d'évènements

Palette de ligne de base manuelle

Zoom



Détermination du seuil de pente
[non accessible]

Intégration

NB : Certaines fonctionnalités, notamment la ligne de base manuelle, sont accessibles uniquement si l'option est configurée dans Soprane Setup.

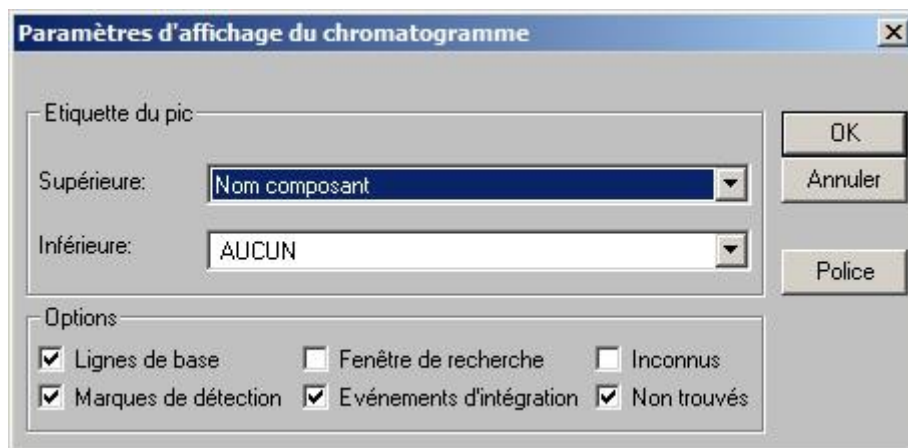
6.5.2 Menu "Chromatogramme"

Le menu "**Chromatogramme / Afficher le chromatogramme**" permet la visualisation d'un chromatogramme chargé en mémoire mais non visualisé.

Le menu "**Chromatogramme / Configurer affichage chromatogramme**" autorise la sélection de ce qui intéresse un utilisateur.

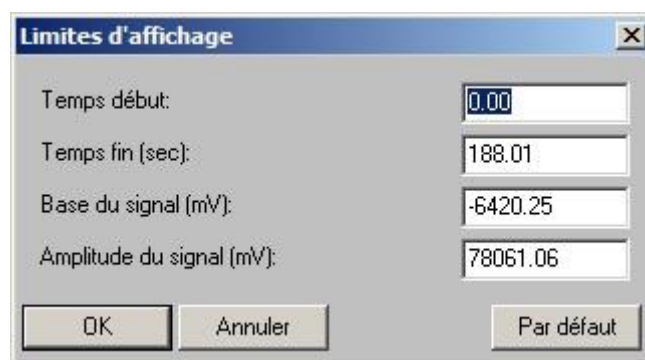
Normalement chaque pic est représenté par son nom indiqué au sommet. Il est possible d'afficher d'autres valeurs au sommet ou à la base des pics.

Il est possible de faire figurer la ligne de base, les marques de début et fin de pic, la taille de la fenêtre de recherche du pic, les évènements d'intégration, d'indiquer les pics vus mais inconnus et enfin les pics connus mais non trouvés.



Le menu "**Chromatogramme / Limites affichage chromatogramme**" est utilisé pour modifier les limites (temps, offset et amplitude du signal) de la représentation du chromatogramme :





Quand le chromatogramme est dans la fenêtre active (menu "Affichage" ou menu "Chromatogramme / Afficher chromatogramme") le clavier et la souris permettent différentes actions pour déplacer ou modifier la dimension des chromatogrammes visualisés, ou pour modifier leur facteur de zoom.

Le zoom (palette de contrôle ou icône de la barre d'outils) peut être utilisé plusieurs fois consécutives pour grossir un détail.

Actions se rapportant à la vue visualisée :

Les actions définies ci-après sont cumulatives, le résultat restant mémorisé comme facteur d'échelle et facteur d'affichage de la vue en cours.

La flèche vers le haut permet de déplacer le chromatogramme vers le haut de l'écran.

La flèche vers le bas permet de déplacer le chromatogramme vers le bas de l'écran.

La flèche vers la gauche permet de déplacer le chromatogramme vers la gauche de l'écran.

La flèche vers la droite permet de déplacer le chromatogramme vers la droite de l'écran.

Page précédente décale le chromatogramme d'une valeur correspondant à un écran vers le bas de l'écran. Cette action est ignorée tant que le chromatogramme occupe intégralement l'écran puisque le déplacement reviendrait à visualiser un écran vide.

Page suivante décale le chromatogramme d'une valeur correspondant à un écran vers le haut de l'écran. Cette action est ignorée tant que le chromatogramme occupe intégralement l'écran puisque le déplacement reviendrait à visualiser un écran vide.

Contrôle et page précédente décale le chromatogramme d'une valeur correspondant à un écran vers la gauche de l'écran. Cette action est ignorée tant que le chromatogramme occupe intégralement l'écran puisque le déplacement reviendrait à visualiser un écran vide.

Contrôle et page suivante décale le chromatogramme d'une valeur correspondant à un écran vers la droite de l'écran. Cette action est ignorée tant que le chromatogramme occupe intégralement l'écran puisque le déplacement reviendrait à visualiser un écran vide.

Contrôle et la flèche vers le haut dilate la courbe selon l'axe du signal, la valeur zéro du signal (valeur théorique de la ligne de base en l'absence de pic et de dérive) restant positionnée au même endroit.



Contrôle et la flèche vers le bas comprime la courbe selon l'axe du signal, la valeur zéro du signal (valeur théorique de la ligne de base en l'absence de pic et de dérive) restant positionnée au même endroit.

Contrôle et la flèche vers la gauche comprime la courbe selon l'axe du temps, le temps zéro restant positionné au même endroit.

Contrôle et la flèche vers la droite dilate la courbe selon l'axe du temps, le temps zéro restant positionné au même endroit.

Actions permettant le changement de vue :

Les actions définies ci-après permettent de créer des vues, de supprimer toutes les vues ou de se déplacer de vue en vue parmi l'ensemble des vues mémorisées. Chacune de ces vues peut être modifiée comme indiqué précédemment.

La sélection d'un rectangle avec la souris (bouton gauche) permet la création d'une nouvelle vue dont le contenu représentera la partie de la courbe sélectionnée à la souris.

Contrôle et Origine (Home), de même que Shift et Origine, crée une nouvelle vue équivalente à la vue de départ. L'affichage y est optimisé de manière à ce que le chromatogramme occupe tout l'écran.

Origine (Home) annule toutes les vues sauf la première. Les modifications éventuellement apportées à la première vue sont conservées et visualisées.

Fin (End) permet de se positionner sur la dernière vue mémorisée.

Majuscule (Shift) et page précédente, de même qu'un double clic droit à la souris, permet de visualiser la vue précédente si elle existe.

Majuscule (Shift) et page suivante permet de se positionner sur la vue suivante si elle existe.

Le menu "**Chromatogramme / Tracé épais**" (ou "**Tracé fin**") permet de modifier l'épaisseur du trait utilisé pour dessiner le chromatogramme.

6.5.3 L'outil zoom

L'outil zoom (une loupe) de la palette de contrôle, de même que l'icône équivalente de la barre d'outils, permet de modifier l'échelle de représentation du chromatogramme. Il suffit pour cela de sélectionner un rectangle avec la souris (bouton gauche appuyé) et de relâcher le bouton pour modifier la courbe. Ceci peut être répété plusieurs fois consécutives. Un double clic droit permet l'opération inverse en remontant à chaque fois d'un niveau de zoom.

On peut également utiliser les flèches du pavé numérique pour modifier la position du chromatogramme à l'écran, et/ou les mêmes flèches avec la touche CTRL appuyée pour étirer le chromatogramme. (Les actions possibles sont définies au paragraphe 15.3).

6.5.4 Edition graphique des évènements d'intégration

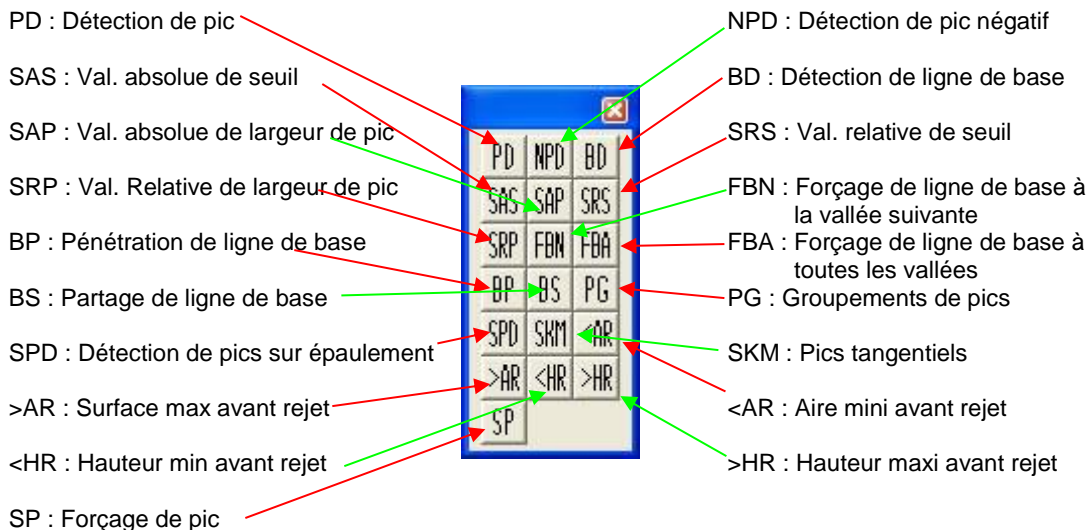
Nous avons vu comment écrire directement les évènements d'intégration dans la table. Il peut être plus rapide de les placer directement sur le chromatogramme. L'examen de divers chromatogrammes permet de définir les zones où les pics sont attendus. Le zoom permet alors un positionnement précis de chaque évènement.



Le menu "**Intégration / palette des évènements**", de même que l'icône "EV" de la palette de contrôle, permet l'affichage de la palette d'évènements.

Lorsqu'elle est visualisée, la palette des évènements peut être fermée par un clic de souris sur la croix en haut à droite de la palette. Le curseur symbolisant une main notée EV montre que l'outil évènement reste actif. Un clic de souris sur l'outil zoom désactive l'outil évènements.

La fermeture de la palette ne supprime pas l'outil évènement (le curseur symbolise toujours une main). L'outil évènements est désactivé lorsque l'on en sélectionne un autre, normalement l'outil zoom.



Pour positionner un évènement, il suffit de zoomer le chromatogramme jusqu'à obtention d'une visualisation correcte de l'emplacement où l'on souhaite insérer l'évènement, de sélectionner l'outil évènement (clic sur l'icône correspondante), de saisir l'évènement qui nous intéresse (bouton gauche de la souris appuyé sur l'icône de l'évènement), de le faire glisser au temps souhaité (bouton gauche maintenu appuyé) et de le déposer (bouton gauche relâché).

Une fenêtre permet de visualiser et, en cas d'erreur, de modifier la nature de l'évènement, le temps et la valeur ou l'état de l'évènement.

Pour supprimer un évènement, la façon la plus simple est de le supprimer de la table des évènements (voir paragraphe précédent). Parfois, il est simplement nécessaire de modifier le temps auquel un évènement est programmé. Dans ce cas, il suffit d'amener le curseur sur l'évènement et de le saisir avec le bouton gauche de la souris. Une barre verticale apparaît dès que la souris est déplacée. L'évènement peut alors être déposé là où on le souhaite. Un changement de valeur peut aussi être écrit directement dans la table des évènements.

6.5.5 Palette de ligne de base en manuel

La palette des évènements modifie la table des évènements et donc la méthode utilisée. Ces modifications peuvent être utilisables ultérieurement lors des analyses.

Quelquefois il est souhaitable d'aller plus loin sur un chromatogramme particulier et d'imposer une correction de ligne de base qu'il est normalement impossible d'atteindre par le biais des évènements d'intégration.

Ces modifications sont alors spécifiques de ce chromatogramme et n'ont pas à être écrites dans la méthode d'analyse.

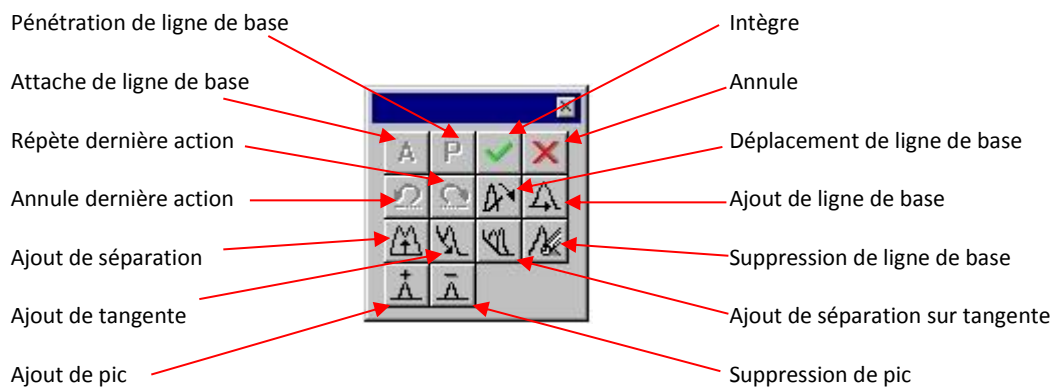


Le menu "**Intégration / Palette Ligne de base en manuel**", de même que l'outil de la palette de contrôle ou de la barre d'outils symbolisé par une souris, permet l'affichage de la palette de ligne de base manuelle. Ces options ne sont disponibles que si l'option « intégration manuelle » est activée dans Soprane Setup.

La palette se ferme par la croix située dans son coin supérieur droit. La fermeture de la palette retire également l'outil. Lorsque l'outil est actif, le curseur est symbolisé par une flèche.

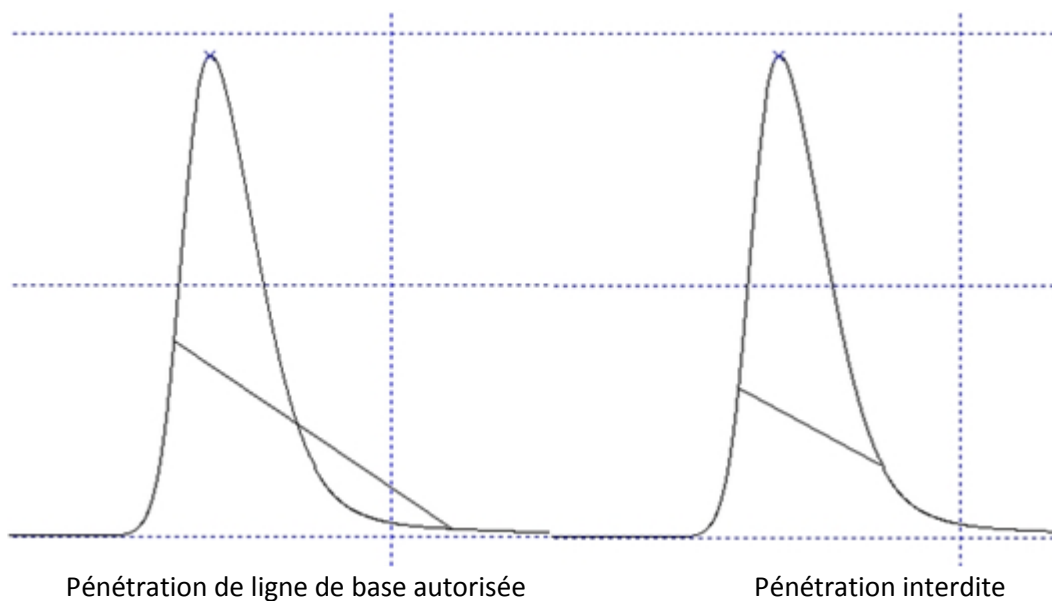
Cet outil permet de tracer, ajouter ou déplacer les lignes de base comme on le souhaite et de modifier la manière dont les pics sont intégrés.

Pour l'utiliser, il suffit de cliquer sur l'outil, d'amener la souris au point de départ (début du pic par exemple si l'on ajoute une ligne de base), d'appuyer sur le bouton gauche de la souris, de déplacer la souris sur le point d'arrivée (fin du pic dans le cas précédent) puis de relâcher le bouton gauche de la souris.



L'outil de pénétration de ligne de base, symbolisé par un "P", autorise ou interdit que la ligne de base coupe le chromatogramme, évitant ainsi d'ajouter une valeur négative au pic (si le chromatogramme se trouve des 2 côtés de la ligne de base, la surface limitée par le signal et se trouvant sous la ligne de base est comptée négativement lors de la correction de ligne de base).

Le défaut est volontairement exagéré pour montrer le rôle de cet outil




Le menu "**Intégration / Annuler Modif. Ligne de base**" permet le retrait de toutes les modifications effectuées. Ce menu est inactif en l'absence de modification.

7. Identification des pics

L'intégration des pics étant faite, il va maintenant falloir associer chaque pic à un composant élué. L'identification des pics se fait dans le module traitement.

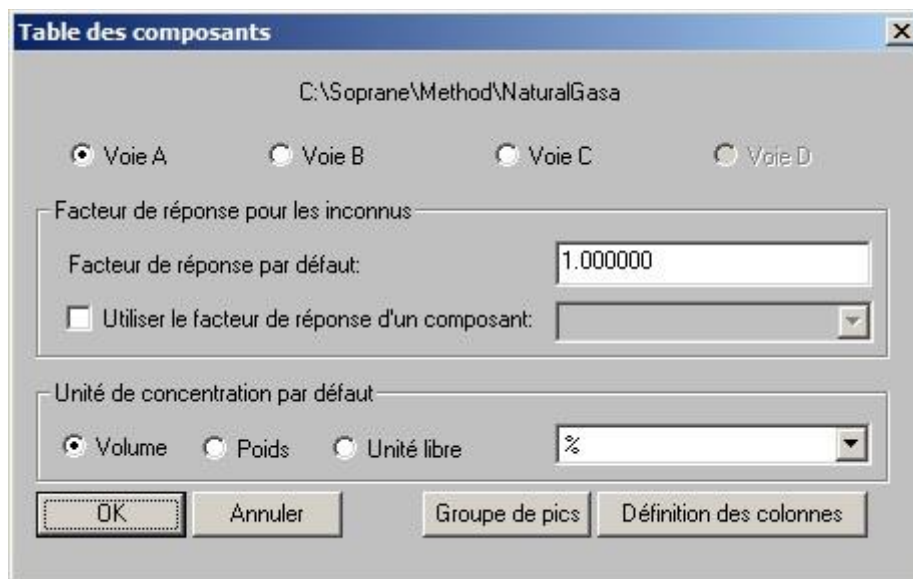
7.1 Table des composants

Pour accéder à la table des composants, cliquer sur l'icône correspondante 

Par défaut, on a une table des composants avec des colonnes et unités prédéfinies, mais on peut la modifier. Pour cela allez dans "**Intégration / afficher l'en-tête table composant**".

Note : Si aucune analyse n'a été réalisée avec la méthode que l'on édite, la table des composants est inaccessible.

La fenêtre qui s'affiche permet la programmation d'informations générales.



Pour chaque module analytique il est ainsi possible d'indiquer :

- Un facteur de réponse par défaut.
- Un type d'unité (volume, poids, libre) et une unité (% volume ou poids, %, ml/m³ ou mg/kg, ppm) par défaut.

Cet affichage montre l'unité de concentration par défaut. L'utilisateur a bien évidemment la possibilité de définir ses propres unités. Ceci est obtenu par le menu "Intégration / Editeur d'unité de concentration" du module de traitement.



Ce menu permet d'accéder à un écran permettant l'édition d'unités sous la forme :



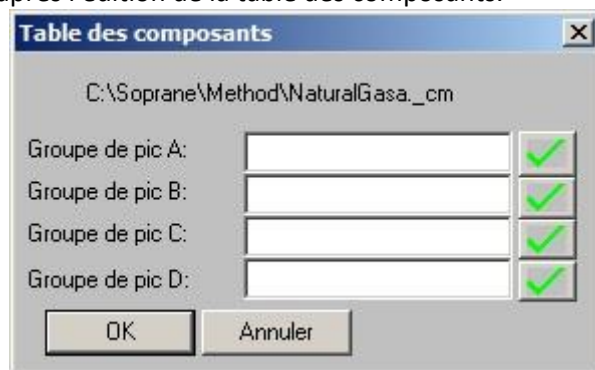
7.2 Regroupement de pics

SOPRANE offre la possibilité de regrouper des pics intégrés séparément de manière à pouvoir les traiter ultérieurement comme un seul et même pic.

Lorsque nous éditerons la table des composants, nous verrons qu'il est possible de définir 4 groupes de pics identifiés par les lettres A à D.

Le bouton "Groupe de pics" permet de donner un nom à chacun de ces 4 groupes de pics.

Ceci peut être fait avant ou après l'édition de la table des composants.



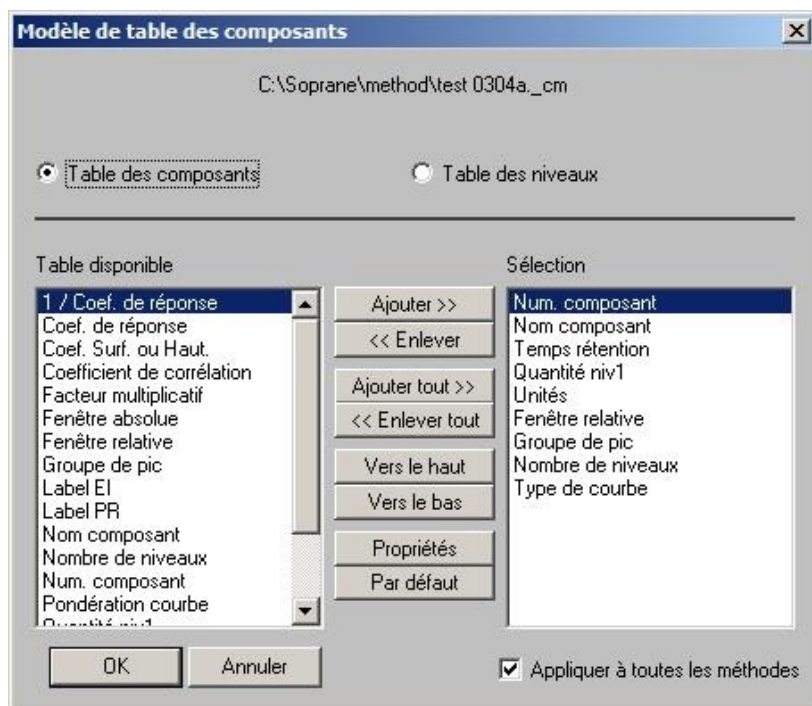
Ces groupes de pics ne seront accessibles que dans le rapport du module Traitement.

7.3 Les colonnes de la table des composants

La table des composants peut contenir une grande diversité de données. Certaines seront utiles à un utilisateur, d'autres non.

Le bouton "Définition des colonnes" permet d'atteindre un écran de sélection des colonnes qui seront affichées ultérieurement.





A la table des composants est associée une table des niveaux de présentation similaire. La partie "composants" concerne l'identification des pics, la partie "niveaux" se rapporte aux paramètres d'étalonnage.

Chacune des colonnes peut être ajoutée, supprimée ou déplacée dans un sens ou dans l'autre.

Un bouton "Propriétés" permet également de modifier le nom de la colonne, la largeur de la colonne et quelques autres paramètres similaires.

Pour la table des constituants, la nature des colonnes visualisables est :

1/ Coef de réponse : Si la courbe de réponse n'est pas une ligne passant par l'origine, l'équation de la courbe, avec ses divers constituants, sera visualisée ici.

Coef de réponse : C'est le coefficient de réponse "traditionnel", c'est-à-dire correspondant à une droite passant par l'origine.

Coefficient Surf ou Haut : Le logiciel permet de travailler indifféremment en surface ou en hauteur de pics.

Coefficient de corrélation : La courbe de réponse est extrapolée à partir de plusieurs points. Ce coefficient permet d'apprécier la qualité de l'étalonnage. Plus ce coefficient se rapproche de 1 et plus la courbe d'étalonnage est proche des points utilisés pour la définir.

Facteur multiplicatif : Ce coefficient intervient comme un facteur multiplicatif de la concentration.

Fenêtre absolue : Il s'agit d'une durée précédant et suivant le temps de rétention attendu et pendant laquelle on cherchera à identifier le pic. Cette valeur de fenêtre est exprimée sous la forme d'une valeur absolue.

Fenêtre relative : Il s'agit d'une durée précédant et suivant le temps de rétention attendu et pendant laquelle on cherchera à identifier le pic. Cette valeur de fenêtre est exprimée sous la forme d'un pourcentage du temps de rétention attendu.



Groupe de pics : Il s'agit d'un repère (A, B, C ou D) indiquant quels pics, parce qu'ils ont le même repère, seront regroupés lors des calculs. 4 groupes de pics peuvent ainsi être définis. (Attention : il ne s'agit pas de pics intégrés ensemble, avec une ligne de base commune ; ces pics sont intégrés séparément ou non puis regroupés uniquement au moment des calculs).

Le label EI : Cette colonne permet la définition d'un étalon interne (lettre "I" suivie d'un caractère alphabétique référence) ou d'associer un étalon interne à un pic (uniquement le caractère alphabétique).

Le label RP : Ce paramètre permet de définir un pic référence facilitant l'identification d'un constituant. Pour définir le pic référence, on tapera la lettre "R" et un autre caractère alphabétique. Pour assigner un pic référence à un constituant, on ne tapera que le caractère alphabétique.

Ce processus facilite l'identification du pic : son temps de rétention attendu sera corrigé en lui appliquant une variation relative identique à celle observée sur le pic référence facile, par sa taille, à identifier.

Nom du composant : Il s'agit du nom du constituant. Le nom programmé ici sert de référence pour identifier le pic dans les autres modules de SOPRANE. C'est sous ce nom que le constituant sera identifié lors des calculs post-analytiques ou pour les sorties tendances par exemple.

Nombre de niveaux : Il s'agit du nombre de valeurs de concentration successives qui seront utilisées lors de l'étalonnage pour déterminer la courbe de réponse d'un constituant déterminé.

Num. composant : Il s'agit d'un numéro d'identification interne à usage de SOPRANE.

Pondération courbe : C'est le moyen de pondérer les résultats d'une mesure d'étalonnage. Le logiciel offre 9 possibilités basées sur la quantité : égal à la quantité, proportionnel à la quantité, à l'inverse de la quantité, au carré de la quantité, à l'inverse du carré de la quantité, au logarithme de la quantité, à l'inverse du logarithme de la quantité, au carré du logarithme de la quantité, à l'inverse du carré du logarithme de la quantité.

Quantité niv 1 : C'est la concentration du constituant.

Temps de rétention : C'est le temps de rétention attendu exprimé en secondes. Cette valeur sert de référence pour l'identification des constituants.

Type de courbe : Selon le nombre de points utilisés pour définir la courbe, il est possible de définir plusieurs types de courbes. Un point permet de définir une droite passant par l'origine. Deux points définissent une droite ne passant pas par l'origine. De la même manière, on peut définir une courbe du second, troisième ou quatrième degré, une courbe exponentielle ou logarithmique.

Unités : C'est l'unité dans laquelle la concentration sera exprimée.

REMARQUE IMPORTANTE :

Les 2 valeurs de fenêtre absolue et relative s'additionnent. La fenêtre utilisée pour la recherche et l'identification des pics est la somme des deux valeurs programmées.

Soit un pic dont le temps de rétention supposé est de 2 minutes (soit 120 secondes), avec une fenêtre relative de 10 % (soit 12 secondes) et une fenêtre absolue de 0,1 minute, soit 6 secondes. Le pic sera identifié s'il lors d'une analyse son temps de rétention se trouve entre 1 mn 42 secondes et 2 mn 18 secondes.

Pour la table des niveaux, les colonnes visualisables sont :



Déviati on standard : C'est la variation observée pour ce niveau.

Niveau : Si la calibration est effectuée avec plusieurs flux étalon, le niveau indique quels points correspondent au flux.

Quantité : C'est la quantité de constituant étalon pour le niveau considéré. Il est possible de visualiser les valeurs obtenues pour chacune des mesures d'étalonnage en effectuant un double clic sur cette valeur.

Surface : Il s'agit de la valeur de surface ou hauteur de pic relative à ce niveau de calibration.

Surface / Quantité : C'est le rapport correspondant au facteur de réponse dans le cas d'une droite passant par l'origine.

Tolérance relative : C'est la valeur maximale de variation acceptée avant rejet d'une valeur d'étalonnage.

Utilisé : Il s'agit d'un indicateur permettant de savoir que ce niveau est utilisé pour ce constituant. Un simple clic dans cette zone permet d'indiquer que ce niveau est (X) ou n'est pas () utilisé pour ce pic.

7.4 Affichage de la table des composants



Le bouton "Table des composants" permet l'affichage et l'édition des valeurs nécessaires à l'identification et au calcul des courbes de réponse ou des concentrations de chacun des constituants à analyser.

Deux tables sont visualisées.

The screenshot shows a software window titled 'Table des composants - C:\Soprane1\Method\TESTa - Pic 1*'. It contains two tables and a graph.

Numéro Composant	Nom composant	Temps rétention (Sec)	Quantité niv1	Unités du rapport	Fenêtre relative (0 à durée d'analyse (secondes))	Groupe de pic	Niveaux	Type de courbe
1	Pic 1	62.87	1.000	%	5.00		2	Ligne droite passant par zéro
2	Pic 2	129.78	1.000	%	5.00		1	Ligne droite passant par zéro

Niveau Pic 1	Quantité	Tolérance relative (0 à durée d'analyse (secondes))	Surface	Surface / Quantité	Utilisé
1	1.0000	0.00	1.00	1.00	<input type="checkbox"/>
2	101.0000	0.00	1.00	0.01	<input type="checkbox"/>

The graph shows a linear calibration curve with the equation $Y = 0.009998x$. The x-axis is labeled 'Quantité' (0.00 to 100.00) and the y-axis is labeled 'Surface' (0.0000 to 1.0000).

On peut se déplacer dans ces deux tables par les flèches du pavé numérique ou à la souris.

Le passage à la case suivante alors que le curseur se trouve sur la dernière case de la dernière ligne, de même que le passage à la ligne suivante lorsque l'on est dans la dernière ligne permet l'ajout d'une nouvelle ligne.



Une ou plusieurs lignes peuvent être sélectionnées, tout comme dans un traitement de texte classique, en positionnant la souris devant chaque ligne. Une action sur la touche DELETE entraîne alors la suppression des lignes sélectionnées.

La table du haut est relative aux pics et à leur identification. L'insertion d'une ligne n'a pas été envisagée : on peut ajouter une ligne et SOPRANE trie les lignes selon le temps de rétention.

Il est possible de tester la validité d'une ligne complète en effectuant un double clic dans sa marge gauche. Les données du constituant sont vérifiées et une fenêtre avertit que tout est correct, ou qu'il manque des informations ou encore que l'une des informations est erronée.

Si la courbe de réponse n'est pas une droite passant par l'origine, plusieurs coefficients seront nécessaires pour la définir. La colonne "type de courbe" permet de définir l'équation générale de la courbe visualisée dans la colonne "1/ Coef de réponse". Lorsque l'on clique dans cette dernière colonne sur la case intersection avec la ligne sur laquelle on souhaite intervenir, la case devient grisée et sélectionnée. Un clic sur le titre de la colonne ("1/ Coef de réponse") permet alors l'ouverture d'une fenêtre d'édition des coefficients. Les coefficients A, B, C, D et éventuellement E sont indiqués, sachant que A représente le coefficient de plus bas exposant, B, le suivant, ... et E le coefficient de plus haut exposant.

Une équation du second degré est donc définie par : $Cx^2 + Bx + A$

Dans la première table, l'utilisateur indique le temps de rétention de chaque constituant, ainsi que deux fenêtres de temps, l'une relative, l'autre absolue, utilisées pour identifier le pic. La fenêtre d'identification du pic est la somme des 2 valeurs programmées.

Si l'utilisateur l'a sélectionné par le menu "Intégration / Mise à jour temps de rétention après intégration" le temps de rétention attendu sera corrigé à la fin de chaque analyse.

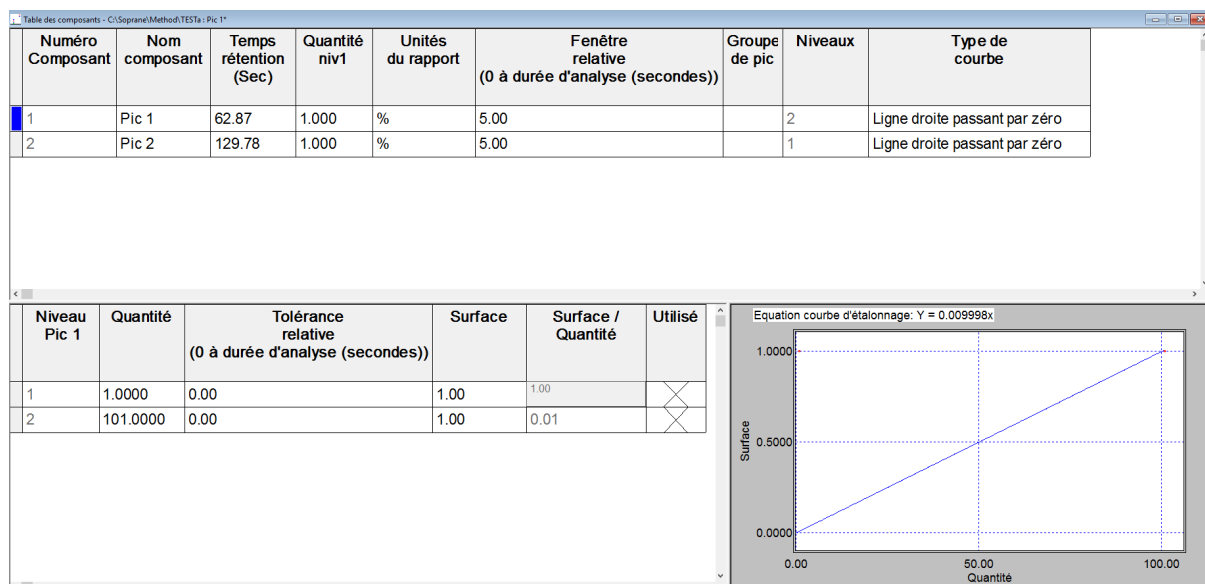
La seconde table est relative à l'étalonnage :

Pour chaque pic sélectionné dans la table du haut, une table de niveaux est à définir pour préciser les conditions d'un étalonnage.

Les paramètres à renseigner sont le niveau, la quantité, la "tolérance relative" et le repère "utilisé".

Sur la table du bas (la table des niveaux) le bord droit est plus épais : lorsque la souris passe au-dessus du bord, le curseur est modifié et permet de tirer une fenêtre comportant la visualisation de la courbe de réponse.





SOPRANE évite à l'utilisateur une programmation fastidieuse et lui permet de gagner du temps en limitant les risques d'erreurs. La première fois que l'on veut éditer la table des composants, SOPRANE a déjà en mémoire un chromatogramme et des pics intégrés.

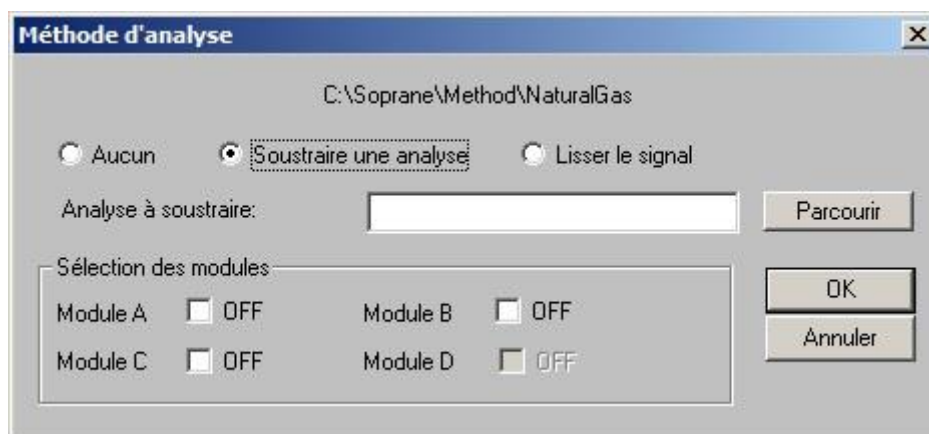
Plutôt que de partir de zéro pour éditer la table des composants, il est possible de demander à SOPRANE de créer une table avec les paramètres en sa possession. Ensuite, nous n'aurons plus qu'à éditer la table ligne après ligne pour corriger certaines valeurs ou retirer des lignes. Dans le module de traitement, la création d'une telle table est obtenue par le menu "**Intégration / Construire la table des composants**".

Similairement, si l'on modifie les événements d'intégration et qu'un nouveau pic se trouve intégré, SOPRANE peut l'ajouter à la table des composants. Il suffit de se positionner sur le pic et de faire un clic droit de la souris avec la touche CTRL appuyée.

7.5 L'option mathématique

Le menu "**Options / Afficher les options mathématiques**" permet d'atteindre un écran de définition des traitements mathématiques à effectuer en fin d'analyse.

Les possibilités consistent en la soustraction ou la réduction du bruit de fond sur un module.



Deux options sont proposées.



La première option permet de soustraire un chromatogramme référence de l'analyse. Les calculs portent sur la différence entre les deux courbes.

Dans ce cas, l'utilisateur sélectionne le ou les canaux sur lesquels cette soustraction doit être effectuée et des calculs sont effectués sur la différence entre les 2 courbes.

Ce traitement est intéressant par exemple lors de l'analyse de ppm d'un composant seul dans un solvant et situé sur le pic trainant. La soustraction d'une analyse du solvant pur donne un pic plus précis, plus facile à intégrer.

La deuxième option consiste en un lissage du chromatogramme avant traitement. Là aussi, l'utilisateur sélectionne le ou les canaux sur lesquels cette action doit être effectuée.

Le lissage n'est pas nécessaire pour une meilleure intégration. Dans la plupart des cas, l'utilisation de valeurs correctes pour les paramètres d'intégration permet une bonne intégration d'un chromatogramme ayant un bruit de fond.

Les calculs sont effectués sur le chromatogramme lissé ou sur le chromatogramme différence, le chromatogramme origine étant sauvegardé sous un autre nom dans le même répertoire.

7.6 Recaler les temps de rétention des pics

Le fait de ne pas trouver un pic peut ne pas être dû à un défaut d'intégration des pics mais à un défaut d'identification des pics (temps de rétention attendu non conforme, fenêtre de recherche trop étroite, ...).

L'identification des pics est effectuée à partir du temps de rétention programmé dans la table des composants et des valeurs de fenêtre de recherche absolue et relative. Si l'on corrige une telle erreur, il n'est pas nécessaire de refaire une calibration : la surface ou la hauteur des pics n'a pas varié.

Le menu "**Intégration / Identifier pics**" permet de refaire l'identification des pics du chromatogramme.

8. Etalonnage

Soprane offre plusieurs possibilités d'étalonnage :


- Etalonnage manuel
- Etalonnage par retraitement
- Etalonnage automatique
- Etalonnage par le menu Lancement


Le menu Etalonnage n'est présent que si un ou des flux d'étalonnage a ou ont été défini(s).

Le programme Soprane Setup permet de définir le nombre total de flux ainsi que le nombre de flux d'étalonnage. Si aucun flux étalon n'a été précisé, le menu n'existe pas.

8.1 Etalonnage manuel

L'étalonnage manuel consiste à modifier directement les coefficients de réponse de la méthode par le module de traitement. Il suffit donc de lancer l'interface de traitement, de charger une analyse réalisée sur le gaz étalon et de charger la méthode associée à cette analyse, de sélectionner le module analytique, de

sélectionner l'affichage dans le mode Calibration , de sélectionner le composant et de renseigner directement la valeur de la surface. Vous pouvez récupérer la valeur de cette surface dans l'affichage Table

résultats .

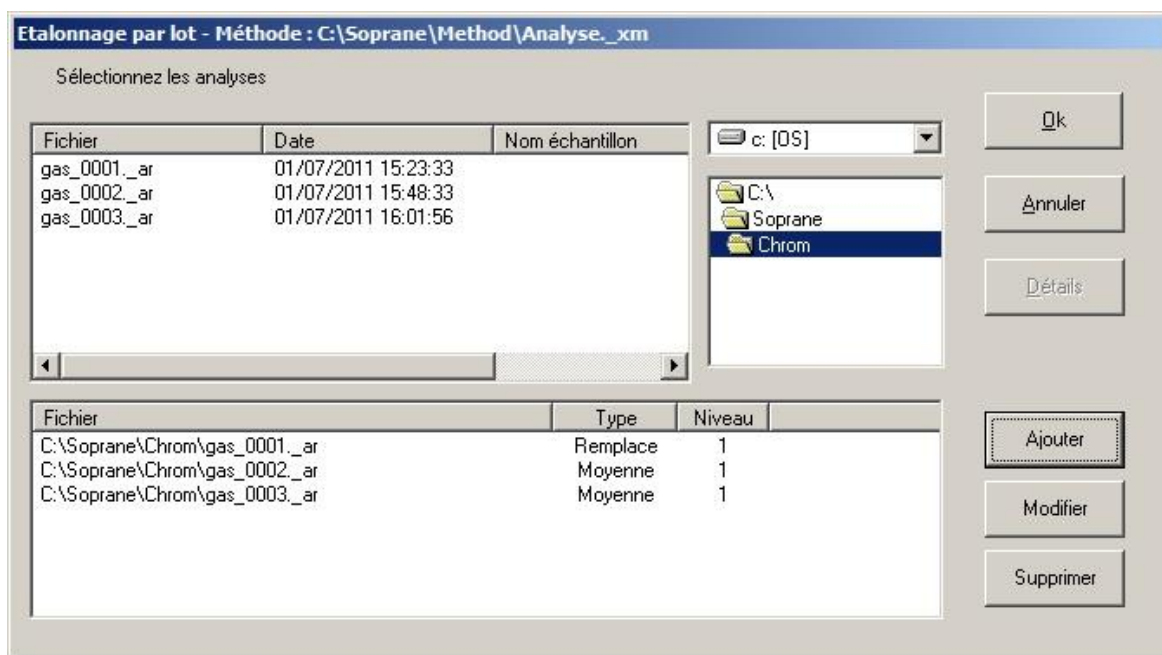


8.2 Etalonnage par retraitement

Vous pouvez réaliser un étalonnage par retraitement lorsqu'après avoir effectué toute une série d'analyses, vous avez vérifié qu'elles ont été correctement intégrées et identifiées (exemple : analyses effectuées dans le cas d'une vérification).

L'étalonnage par retraitement est accessible dans Soprane par le menu "**Etalonnage / Etalonnage par retraitement**".

Dans un premier temps, vous devez sélectionner la méthode à étalonner et ensuite sélectionner les fichiers des analyses qui serviront pour ce retraitement. Le bouton "Détails" vous permet de visualiser le nom de l'échantillon, le type d'analyse et le niveau étalonné dans le cas d'un étalonnage.



Lorsque ces fichiers sont sélectionnés, cliquez sur le bouton Ajouter.

Pour chaque analyse, le logiciel vous demande quel type d'action vous voulez réaliser et sur quel niveau.

Il existe 4 types d'actions pour l'étalonnage :

- **Remplace** : Les coefficients de réponse stockés dans la méthode sont remplacés par les coefficients calculés au cours de cette analyse.
- **Moyenne** : Le logiciel effectue une moyenne entre les coefficients de réponse stockés dans la méthode et ceux obtenus au cours de cette analyse. Le résultat de cette moyenne est ensuite stocké dans la méthode. (Moyenne arithmétique).
- **Pondérer** : Le logiciel effectue une moyenne entre les coefficients de réponse stockés dans la méthode et ceux obtenus au cours de cette analyse en pondérant moins lourdement les anciens coefficients. Le résultat de cette moyenne est ensuite stocké dans la méthode. (Moyenne géométrique).
- **Blanc** : Aucune modification des coefficients de réponse n'est effectuée. Ce type d'analyse est utilisé pour purger les lignes ou pour effectuer des vérifications d'étalonnage sans modifier la méthode.

Pour lancer l'étalonnage par retraitement, il vous suffit alors de cliquer sur le bouton Ok.



Vous pouvez ensuite visualiser le rapport d'étalonnage par le menu "**Etalonnage / Affichage rapport étalonnage**".

La méthode est sauvegardée automatiquement.

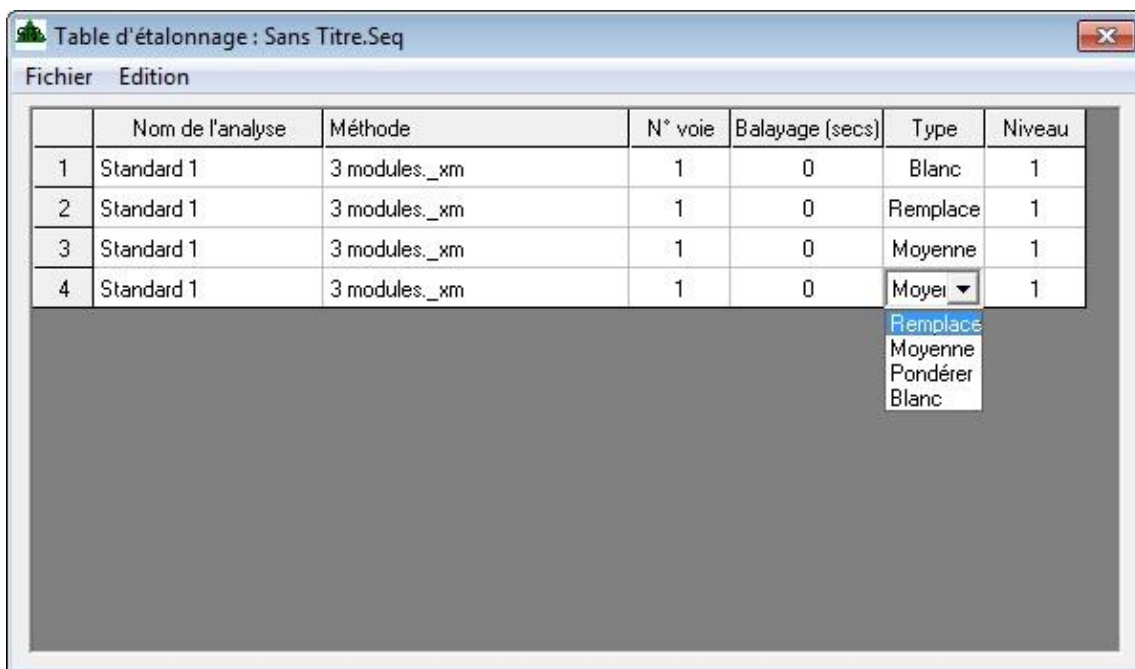
Dans la mesure du possible et afin de vérifier les résultats avant de modifier la méthode, nous recommandons cette méthode.

8.3 Etalonnage automatique

Nous avons indiqué chapitre 4 comment définir une séquence d'analyses. De la même façon nous pouvons définir une séquence d'étalonnage. Cette option est disponible uniquement si une voie étalon est définie dans Soprane Setup, ce type d'étalonnage est utilisé principalement lorsque l'appareil est doté d'un sélecteur de voies.

L'étalonnage peut être déclenché automatiquement et sa programmation prend la priorité sur le déroulement de la séquence d'analyses.

Un premier sous menu "**Etalonnage / Table séquence**" sert à définir la séquence de calibration de la même manière que nous avons défini une séquence d'analyses.



	Nom de l'analyse	Méthode	N° voie	Balayage (secs)	Type	Niveau
1	Standard 1	3 modules._xm	1	0	Blanc	1
2	Standard 1	3 modules._xm	1	0	Remplace	1
3	Standard 1	3 modules._xm	1	0	Moyenne	1
4	Standard 1	3 modules._xm	1	0	Moyen	1

Par rapport à la table de séquence d'analyses, deux colonnes sont ajoutées. La première, type, est utilisée pour définir quel type d'action sera utilisée pour le nouvel étalonnage. La seconde est le niveau d'étalonnage, nécessaire lorsque plusieurs points servent à définir une courbe de réponse.

Les types d'action sur l'étalonnage ont été définis dans le paragraphe précédent.

Le sous-menu "**Etalonnage / Paramètres**" permet de définir une demande de calibration automatique et, dans ce cas, la fréquence des étalonnages.



Si l'on choisit un étalonnage automatique, il est nécessaire de définir la date et l'heure du premier étalonnage, puis le nombre de jours (0-999) avant un nouvel étalonnage automatique. La valeur 0 jour entre 2 étalonnages permet de n'imposer qu'un seul étalonnage automatique.

ATTENTION : L'étalonnage n'est lancé que lorsque l'analyseur est en service, en mode automatique.

8.4 Etalonnage par le menu Lancement

Lorsque vous avez défini une séquence d'étalonnage, vous pouvez lancer cette séquence directement à partir du menu "**Action / Lancement analyse**". Cette solution est intéressante surtout si la sélection de l'étalon n'est pas automatique et donc manuelle.

8.5 Niveaux d'étalonnage

Il arrive fréquemment que les bouteilles étalons utilisées ne contiennent pas l'ensemble de composants et, dans ce cas, il est nécessaire d'utiliser plusieurs bouteilles pour étalonner l'ensemble des composés de la méthode.

Si toutes les concentrations étalons de ces différentes bouteilles sont renseignées au niveau 1, il y a de fortes probabilités que vous rencontriez des problèmes d'étalonnage car, si dans une bouteille un des composés n'est pas présent et que pour une raison quelconque, il a un artéfact ou une dérive de ligne de base ce qui entraîne une détection de pic au temps attendu de ce composé, la surface de ce pic remplacera la surface étalon de ce composé ce qui va fausser son étalonnage. Pour pallier à ce problème, le logiciel offre la possibilité d'utiliser plusieurs niveaux d'étalonnage. Ainsi, pour une bouteille, il faudra utiliser un niveau d'étalonnage et pour une autre bouteille, il faudra utiliser un deuxième niveau. La sélection du niveau s'effectuera par l'option "utilisé" qu'il faudra cocher en fonction du niveau renseigné.

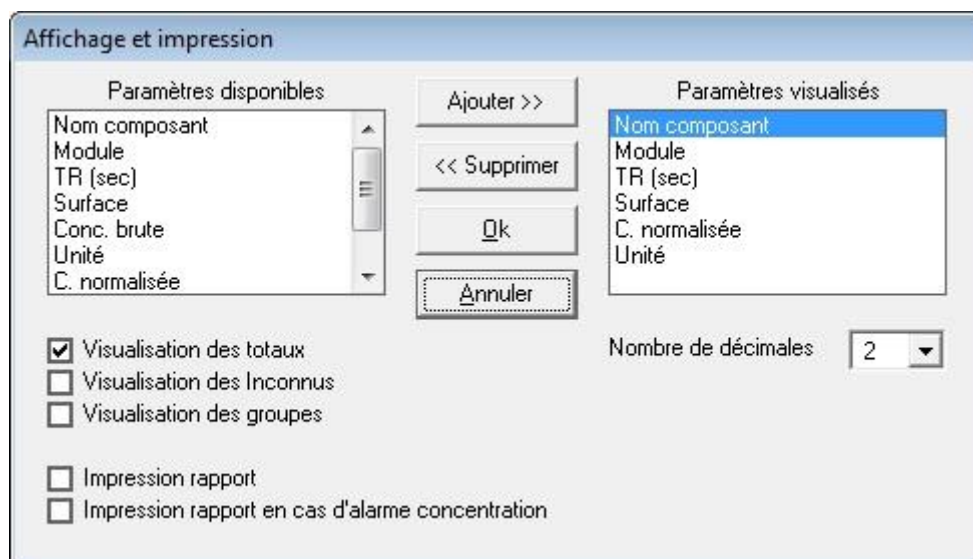
En règle générale : 1 Niveau = 1 bouteille



9. Impression des résultats

9.1 Visualisation et impression des résultats

Les résultats de l'analyse peuvent être affichés et imprimés selon plusieurs formats accessibles par le menu "Paramètres / Affichage et impression".



9.2 Création de rapports dans le module traitement

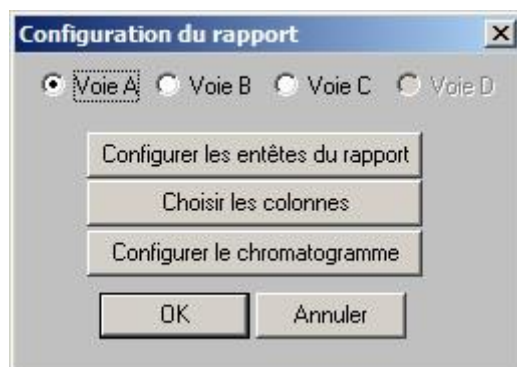
Le module de traitement permet de définir tous les rapports dont on peut avoir le besoin à la fin d'une analyse. Ces rapports peuvent être affichés ou imprimés.

De la même manière, toute fenêtre active peut être imprimée.

9.2.1 Configuration d'un rapport

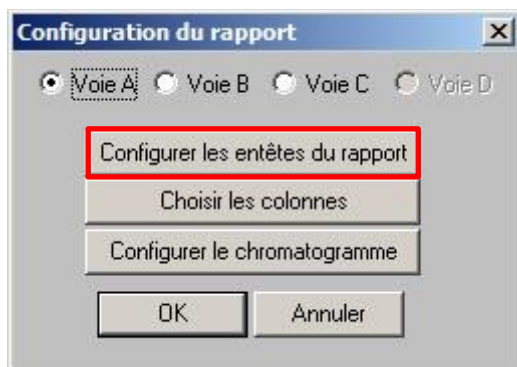
Le menu "Rapport / Configuration du rapport" du module de traitement permet de modifier la présentation des rapports.

L'écran offre la possibilité de modifier l'entête, les colonnes ou les graphiques du rapport échantillon, du rapport étalon ou du rapport à exporter, pour chacun des modules A à D.



a) L'entête du rapport

Le bouton "Configurer les entêtes du rapport" permet l'accès à un autre écran servant à préciser ce qui doit figurer dans le rapport.

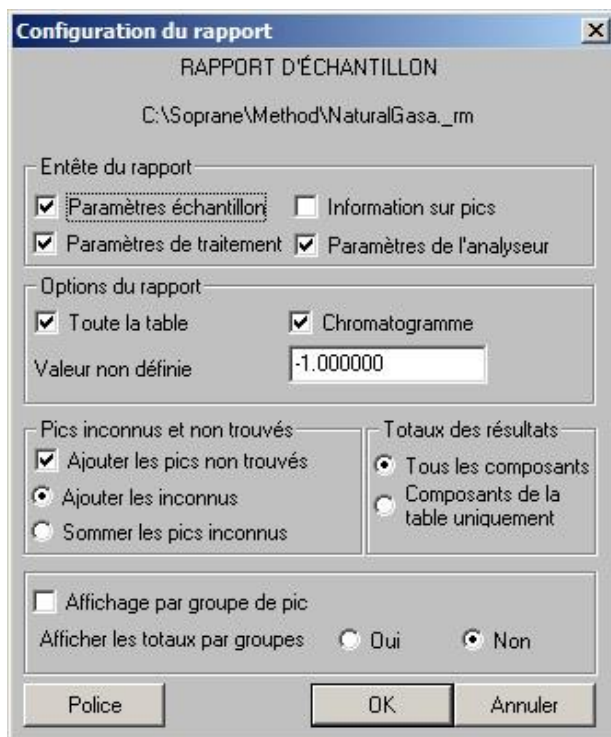


L'utilisateur peut choisir d'afficher (d'imprimer) n'importe quelle information spécifique relative aux pics, à l'échantillon ou à l'analyseur, ou encore n'importe quel commentaire.

Le rapport peut ou non contenir la représentation graphique du chromatogramme.

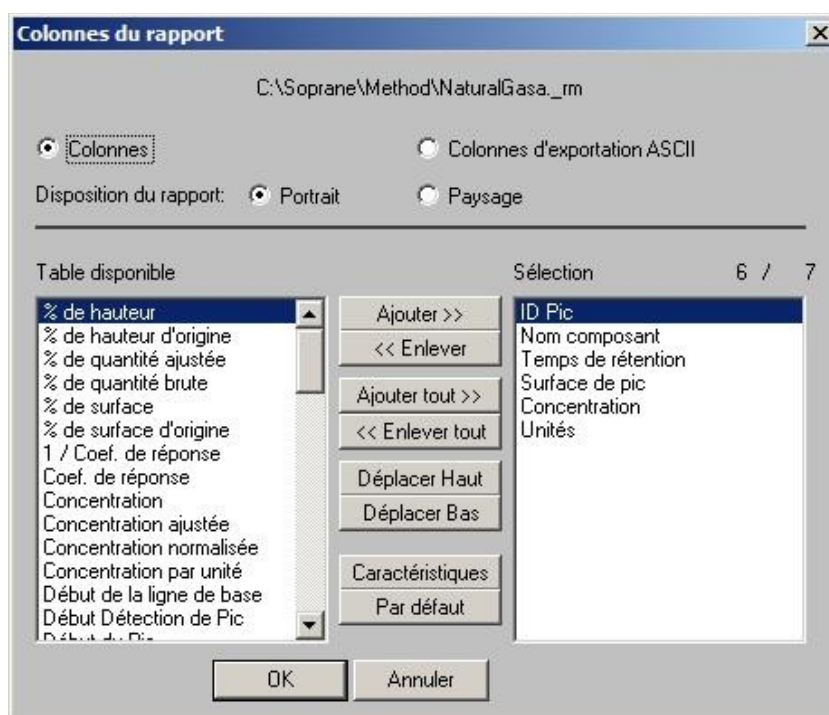
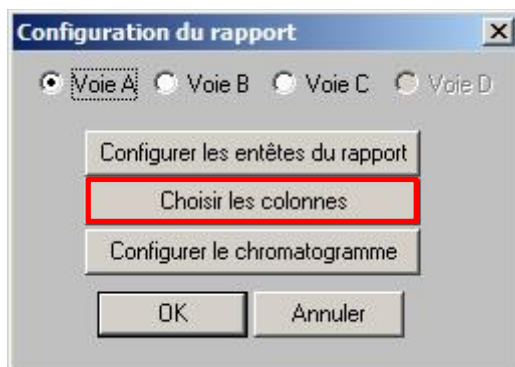
Plusieurs possibilités sont utilisables pour gérer les pics inconnus ou connus mais non trouvés, pour le total des pics ou pour les groupes de pics.

L'écran qui autorise ces définitions est visualisé ci-après.



b) Les colonnes du rapport

Le bouton "Choisir les colonnes" autorise l'accès à un autre écran permettant la définition de ce qui est attendu dans la table du rapport.



Sur cet écran, on choisit la référence des colonnes dont on demandera l'impression selon une représentation portrait ou paysage.

Si dans la majorité des cas on se satisfait des colonnes ID Pic, nom du constituant, temps de rétention, surface du pic, hauteur du pic, quantité ajustée et concentration, toutes les variables, et leur colonne correspondante, dont un utilisateur aurait besoin peuvent être sélectionnées.

Cet écran permet la sélection de ce qui est intéressant pour l'utilisateur.

Deux étiquettes peuvent être associées à chaque pic, l'une au sommet du pic, l'autre à sa base. Généralement, on visualise le nom du constituant au sommet et rien à la base.



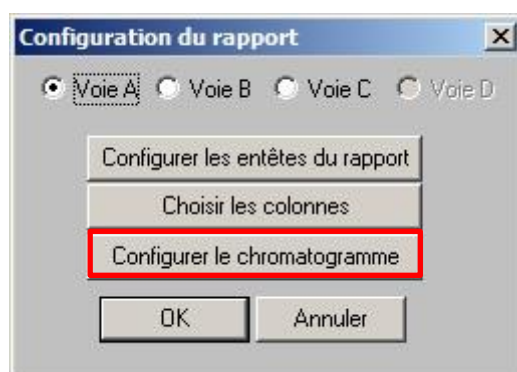
Ces deux étiquettes peuvent être :

% de hauteur,
% de hauteur d'origine,
% de quantité ajustée,
1 / Coef de réponse,
Coef de réponse,
Concentration,
Concentration ajustée,
Concentration normalisée,
Concentration par unité,
Début de la ligne de base,
Début Détection de pic,
Début du pic,
Début valeur ligne de base,
Fin Détection de pic,
Fin de la ligne de base,
Fin du pic,
Fin valeur ligne de base,
Hauteur / Largeur,
Hauteur de pic,
Hauteur de pic d'origine,
Hauteur d'origine normalisée,
Hauteur normalisée,
ID Pic,
Intégré manuellement,
Largeur de pic,
Nom composant,
Nom groupe de pic,
Peak tailing factor,
Plateaux 5% largeur de pic,
Plateaux demi-largeur,
Quantité / Surface,

% de quantité brute,
% de surface,
% de surface d'origine,
Quantité ajustée,
Quantité ajustée normalisée,
Quantité brute,
Quantité brute normalisée,
Résolution FP,
Résolution USP,
Saturé,
SH plateaux,
Surface de pic,
Surface de pic d'origine,
Surface d'origine normalisée,
Surface normalisée,
Surface ou Hauteur,
Surface / Hauteur,
Symétrie du pic,
Temps de rétention,
Temps de rétention attendu,
Temps de rétention modifié,
Temps de rétention relatif,
Type de début de pic,
Type de fin de pic,
Type de ligne de base,
Type de pic,
Type EI,
Type PR,
Unités,
Variation du temps de rétention.

c) Les représentations graphiques

Le bouton "Configurer le chromatogramme" permet l'accès à un autre écran utilisé pour définir ce qui est souhaité sur les graphiques figurant dans les rapports.



Six options peuvent être sélectionnées :

Lignes de base : permet ou non la représentation de la ligne de base.

Marques de détection : permet ou non la représentation des tops d'intégration.

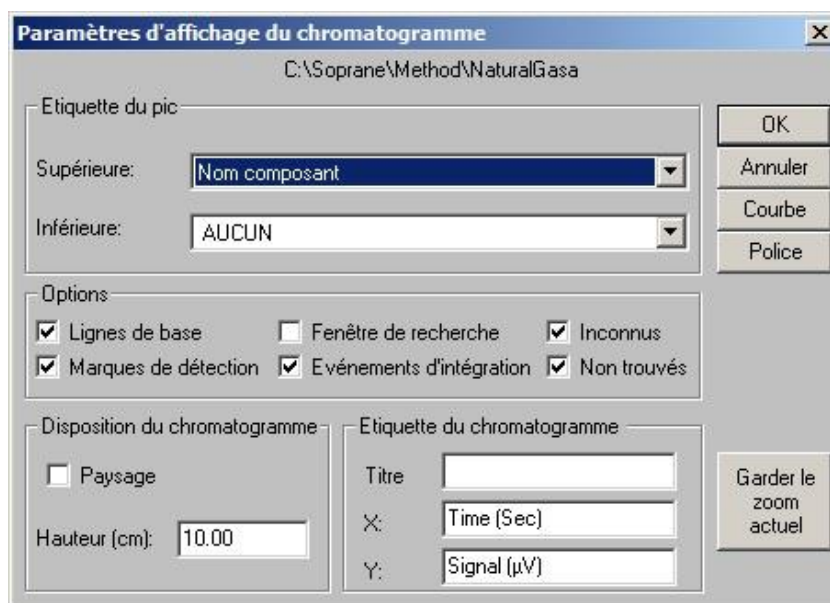
Fenêtre de recherche : permet ou non la représentation des fenêtres de recherche des pics.

Evènements d'intégration : permet ou non la représentation des évènements d'intégration.

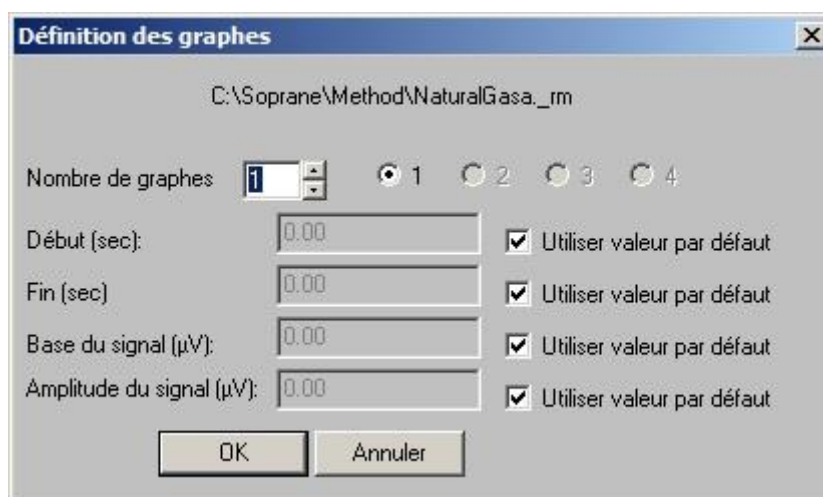
Inconnus : permet ou non l'affichage de l'indication "inconnu" pour un pic intégré mais non identifié.

Non trouvés : permet ou non l'affichage de l'indication "non trouvé" pour un pic attendu mais non identifié.

Ces écrans permettent également l'ajout de texte sur les deux axes du chromatogramme.



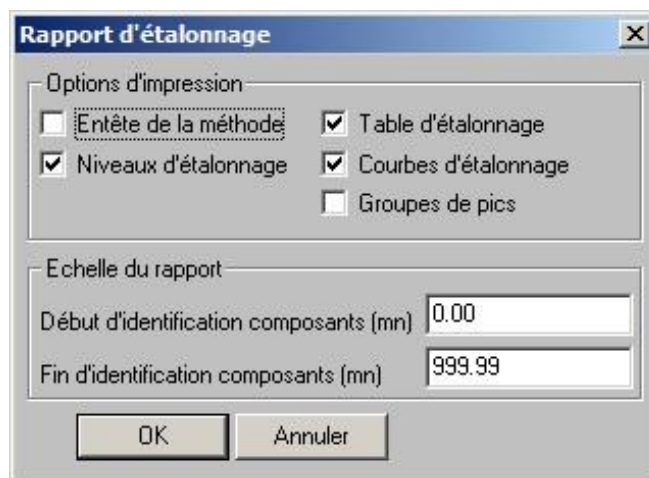
Sur l'écran décrit précédemment relatif aux représentations graphiques du rapport, un bouton "Courbe" peut être utilisé pour modifier la vue correspondant à chaque chromatogramme.



9.2.2 Le rapport d'étalonnage

Le menu "**Rapport / Table des composants**" permet de définir les informations souhaitées à la fin d'un étalonnage.

L'écran utilisé pour modifier ce rapport d'étalonnage est :



9.3 Affichage et impression de rapports depuis le module traitement

9.3.1 Les menus "Rapport/Rapport final" et "Rapport/Paramètres d'intégration"

Ces menus permettent respectivement l'affichage de la fenêtre avec le rapport complet et l'affichage de la fenêtre avec le rapport relatif aux paramètres d'intégration, ces rapports étant définis tels que décrit précédemment.

Comme toute fenêtre, ces rapports peuvent être imprimés lorsqu'ils sont affichés.

9.3.2 Les menus "Imprimer" et "Configurer impression"

Ces menus sont utilisés pour l'impression de la fenêtre active.

10. Affichages et exportation des résultats

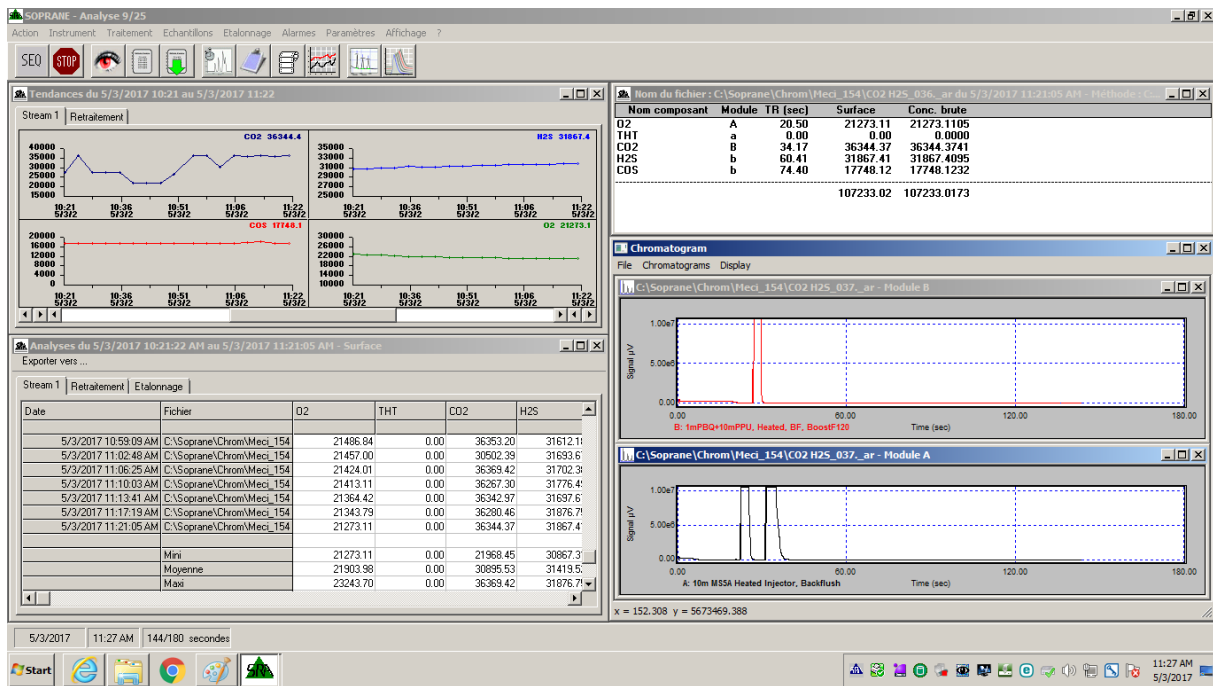
En fonctionnement normal, SOPRANE permet la visualisation simultanée de 3 fenêtres relatives aux analyses. Ces 3 fenêtres permettent la visualisation des résultats, de la séquence d'analyse en cours et des tendances. Ces fenêtres peuvent être redimensionnées, réduites ou restaurées.

L'affichage d'une 4^e fenêtre reste évidemment possible si l'utilisateur souhaite visualiser le chromatogramme.

Il est également possible d'accéder au module de traitement ou au module de comparaison sans gêner le déroulement de la séquence.

Le menu "**Affichage**" permet la sélection de chacune des fenêtres dont on souhaite l'affichage. Il est aussi possible d'afficher une fenêtre auxiliaire permettant de visualiser les entrées analogiques et la voie d'analyse sélectionnée.





Les 3 fenêtres peuvent être visualisées en mode cascade (chaque fenêtre est légèrement décalée par rapport à la précédente), horizontal (les fenêtres occupent la largeur de l'écran et se recouvrent dans le sens de la hauteur) ou personnalisé (l'utilisateur place la fenêtre comme il l'entend).

Toujours par le biais du menu "Affichage", la nature et la position des fenêtres peuvent être mémorisées de telle sorte que SOPRANE puisse restaurer l'affichage à chaque lancement du programme.

NOTE :

L'option "Sauvegarde des positions des fenêtres" du menu ne signifie pas que SOPRANE mémorisera l'état dans lequel on quittera le programme. Ce qui est sauvegardé est la nature et la position des fenêtres au moment où l'on en fait la demande. Lorsque SOPRANE sera de nouveau lancé les fenêtres seront automatiquement ré ouvertes et repositionnées à leur emplacement.



La fenêtre "Série d'analyses" offre la possibilité de voir les résultats flux par flux sous forme de tableau, ou le résultat d'un retraitement.

Date	Fichier	O2	N2	CH4	CO2	C2	C3-c	iC4-c	nC4-c	C3-d
		%	%	%	%	%	%	%	%	%
31/01/2017 14:21:31	C:\Soprane\Ch	0.00	636.11	117131.80	7537.92	66250.38	3954.87	1177.86	682.69	629
31/01/2017 14:24:55	C:\Soprane\Ch	0.00	639.53	116812.09	7534.13	66541.79	4014.43	1141.92	669.02	629
31/01/2017 14:28:18	C:\Soprane\Ch	0.00	635.43	116880.39	7532.13	66475.00	3977.93	1163.12	687.18	629
31/01/2017 14:31:42	C:\Soprane\Ch	0.00	647.28	117151.07	7541.50	66349.89	4005.85	1167.05	678.44	628
31/01/2017 14:35:05	C:\Soprane\Ch	0.00	623.06	117161.48	7529.99	66287.29	3989.31	1163.53	682.61	629
31/01/2017 14:38:30	C:\Soprane\Ch	0.00	643.15	117131.60	7523.55	66194.07	3982.06	1170.76	684.43	628
31/01/2017 14:42:28	C:\Soprane\Ch	0.00	633.33	117170.96	7559.35	66309.49	3990.33	1158.44	680.54	615
31/01/2017 14:45:52	C:\Soprane\Ch	0.00	639.25	117071.51	7554.71	66118.61	4007.10	1171.55	684.11	629
31/01/2017 14:49:16	C:\Soprane\Ch	0.00	647.97	117090.49	7557.86	66586.62	4008.46	1159.31	687.19	628
31/01/2017 14:52:40	C:\Soprane\Ch	0.00	646.92	117274.65	7534.21	66149.47	3991.24	1162.10	686.21	629
31/01/2017 14:56:04	C:\Soprane\Ch	0.00	628.05	117242.17	7528.73	66358.66	4001.63	1161.54	674.41	628
31/01/2017 14:59:28	C:\Soprane\Ch	0.00	641.68	117175.07	7532.60	66361.45	3998.90	1153.25	681.85	629
31/01/2017 15:02:53	C:\Soprane\Ch	0.00	635.91	117306.52	7549.02	66460.26	4005.50	1184.37	675.11	629
31/01/2017 15:06:17	C:\Soprane\Ch	0.00	648.66	117371.26	7540.52	66355.21	4004.55	1166.76	666.74	629
31/01/2017 15:09:40	C:\Soprane\Ch	0.00	634.30	117262.54	7672.82	66407.45	3987.80	1168.31	675.56	628
31/01/2017 15:13:05	C:\Soprane\Ch	0.00	634.57	117175.23	7549.45	66471.20	3953.34	1172.95	681.62	629
Mini		0.00	623.06	116812.09	7521.40	66118.61	3953.34	1141.92	666.74	615
Moyenne		0.00	638.31	117151.70	7546.45	66343.39	3990.78	1165.38	679.72	628
Maxi		0.00	648.66	117371.26	7672.82	66586.62	4014.43	1184.37	687.19	630
Rsd		0.00	1.05	0.11	0.43	0.19	0.42	0.78	0.85	

Dans cette fenêtre "Analyses", il est possible d'effectuer différentes opérations :

- En positionnant la souris sur une ligne et en effectuant un clic droit, il est possible de :
 - changer le type de résultat
 - afficher les statistiques (RSD)
 - accéder au module traitement

Date	Fichier	N2	CH4	CO2	C2H6	C3H8	iC4	nC4	iC5	nC5	C6	TBM
		%	%	%	%	%	ppmVol	%	%	%	ppbVol	mg/m3
24/11/2011 06:05:03	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0001_ar	0.83	96.74	0.17	1.40	0.43	671.69	0.00	0.01	0.01	8.05	0.00
24/11/2011 06:13:59	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0002_ar	0.89	96.86	0.17	1.40	0.43	672.82	0.00	0.01	0.01	8.04	0.13
24/11/2011 06:22:54	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0003_ar	0.84	96.77	0.17	1.40	0.44	679.21	0.00	0.01	0.01	8.12	0.00
24/11/2011 06:31:50	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0004_ar	0.84	96.76	0.17	1.40	0.44	683.23	0.00	0.01	0.01	8.20	0.00
24/11/2011 06:40:49	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0005_ar	0.84	96.78	0.17	1.40	0.43	678.72	0.00	0.01	0.01	8.81	0.00
24/11/2011 06:49:47	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0006_ar	0.84	96.71	0.17	1.40	0.43	677.79	0.00	0.01	0.01	7.46	0.00
24/11/2011 06:58:41	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0007_ar	0.84	96.67	0.17	1.40	0.43	676.75	0.00	0.01	0.01	8.52	0.00
24/11/2011 07:07:37	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0008_ar	0.84	96.65	0.17	1.39	0.43	674.18	0.00	0.01	0.01	8.35	0.00
24/11/2011 07:16:35	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0009_ar	0.84	96.56	0.17	1.39	0.43	675.11	0.00	0.01	0.01	8.32	0.00
24/11/2011 07:25:32	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0010_ar	0.84	96.63	0.17	1.40	0.43	675.78	0.00	0.01	0.01	8.18	0.33
24/11/2011 07:34:29	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0011_ar	0.84	96.69	0.17	1.40	0.43	670.21	0.00	0.01	0.01	7.98	0.00
24/11/2011 07:43:26	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0012_ar	0.84	96.65	0.17	1.40	0.43	668.63	0.00	0.01	0.01	7.51	1.59
24/11/2011 07:52:24	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0013_ar	0.84	96.73	0.17	1.38	0.43	671.23	0.00	0.01	0.01	8.30	0.00
24/11/2011 08:01:21	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0014_ar	0.84	96.72	0.17	1.40	0.43	671.09	0.00	0.01	0.01	8.02	0.00
24/11/2011 08:10:18	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0015_ar	0.85	96.81	0.17	1.39	0.43	671.28	0.00	0.01	0.01	8.08	0.00
24/11/2011 08:19:16	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0016_ar	0.85	96.89	0.17	1.40	0.43	672.00	0.00	0.01	0.01	8.14	0.00
24/11/2011 08:28:13	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0017_ar	0.84	96.78	0.17	1.39	0.43	670.35	0.00	0.01	0.01	8.35	0.00
24/11/2011 08:37:09	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0018_ar	0.89	96.72	0.18	1.40	0.43	667.28	0.00	0.01	0.01	7.87	0.00
24/11/2011 08:46:06	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0019_ar	0.84	96.61	0.17	2.18	0.43	669.34	0.00	0.01	0.01	7.35	0.06
24/11/2011 08:54:59	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0020_ar	0.88	96.69	0.17	1.39	0.43	668.23	0.00	0.01	0.01	7.98	0.84
24/11/2011 09:03:55	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0021_ar	0.84	96.83	0.17	1.39	0.43	670.70	0.00	0.01	0.01	8.04	0.22
24/11/2011 09:12:52	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0022_ar	0.85	96.86	0.17	1.39	0.43	667.71	0.00	0.01	0.01	7.99	0.00
24/11/2011 09:21:52	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0023_ar	0.85	96.93	0.17	1.38	0.43	666.96	0.00	0.01	0.01	7.98	1.50



- Double-cliquer sur une ligne permet d'afficher les informations concernant l'analyse sélectionnée dans la fenêtre "Nom du fichier".

The screenshot shows the SOPRANE software interface. The main window displays a table with the following columns: Nom composant, Module, TR (sec), Surface, and Conc. brute. The data is as follows:

Nom composant	Module	TR (sec)	Surface	Conc. brute
N2	a	20.92	7599.12	0.89
CH4	a	21.94	639628.01	96.76
CO2	a	34.80	1755.19	0.17
C2H6	a	43.97	15124.66	1.40
C3H8	b	23.51	12917.96	0.44
iC4	b	27.21	2323.32	683.23
nC4	b	0.00	0.00	0.00
iC5	b	39.53	545.22	0.01
nC5	b	43.98	409.58	0.01
C6	b	114.05	365.38	8.20
TBM	c	0.00	0.00	0.00

Below this table, a window titled "Analyses du 24/11/2011 06:05:03 au 24/11/2011 09:48:46 - Conc. brute" is open, showing a detailed table of analysis results with columns for Date, Fichier, N2, CH4, CO2, C2H6, C3H8, iC4, nC4, iC5, and nC5.

- Sélectionner plusieurs lignes d'analyses puis faire un clic droit permet de :
 - faire un traitement des analyses sélectionnées en cliquant sur Traitement par lot
 - utiliser les analyses sélectionnées pour faire un étalonnage en cliquant sur Etalonnage par retraitement

The screenshot shows the same "Analyses du 24/11/2011 06:05:03 au 24/11/2011 09:48:46 - Conc. brute" window. A context menu is open over the table, showing options: Copier, TR (sec), Surface, Conc. brute (checked), Affichage des statistiques (checked), Traitement par lot, and Etalonnage par retraitement.



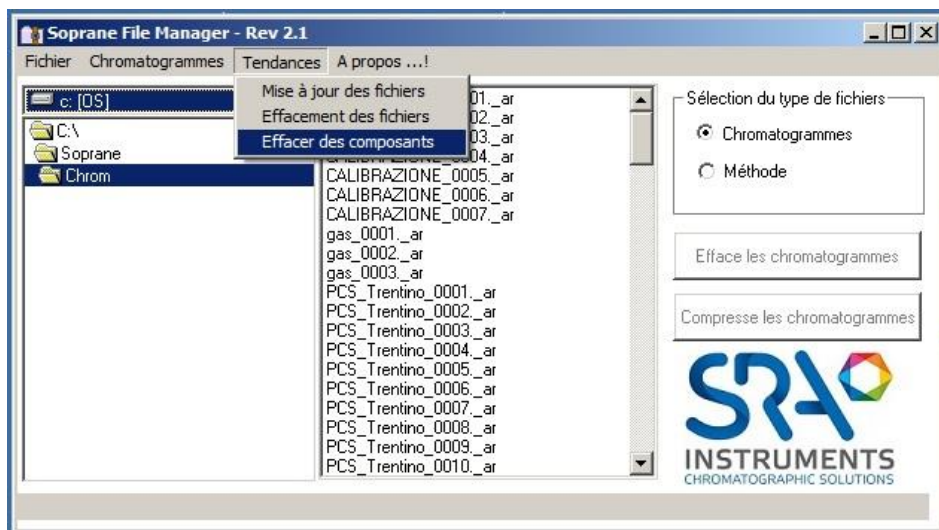
- Il est possible d'effacer des composants de la fenêtre "Nom du fichier" en allant dans Soprane File Manager.

Dans l'exemple qui suit, on va enlever les colonnes nC4 et nC5 des fenêtres ci-dessous :

Nom composant	Module	TR (sec)	Surface	Conc. brute
N2	a	20.94	7589.78	0.89
CH4	a	21.96	639333.99	96.72
CO2	a	34.81	1818.17	0.18
C2H6	a	43.99	15121.39	1.40
C3H8	b	23.53	12701.49	0.43
iC4	b	27.24	2269.07	667.28
nC4	b	0.00	0.00	0.00
iC5	b	39.56	526.76	0.01
nC5	b	44.02	396.64	0.01
C6	b	114.05	350.42	7.87
TBM	c	0.00	0.00	0.00

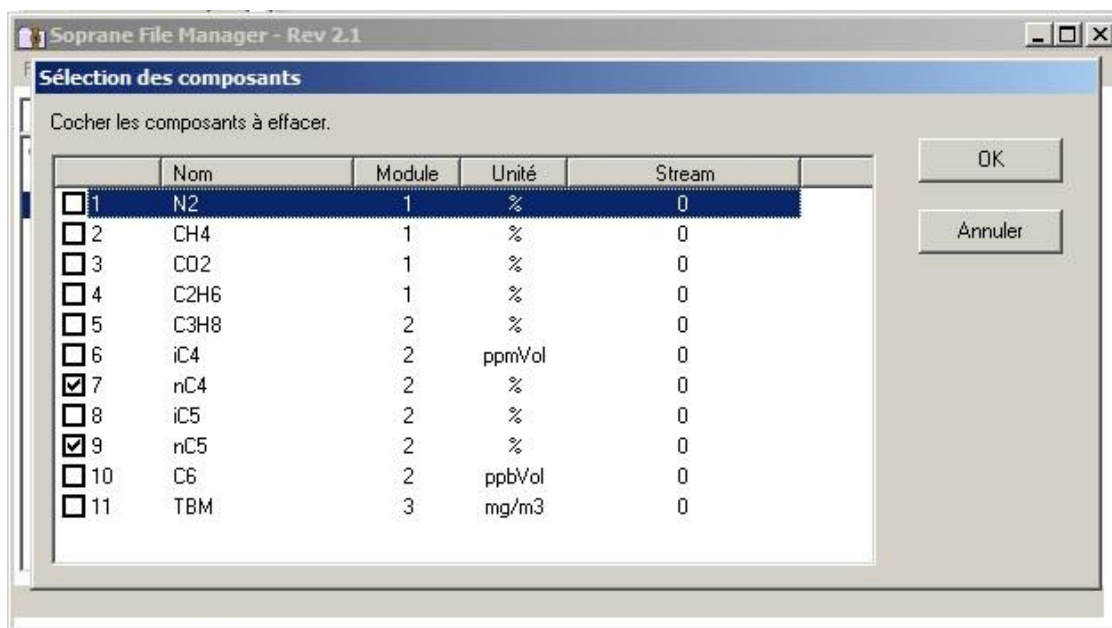
Date	Fichier	N2	CH4	CO2	C2H6	C3H8	iC4	nC4	iC5	nC5	C6	TBM
		%	%	%	%	%	ppmVol	%	%	%	ppbVol	mg/m3
24/11/2011 08:37:09	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0018_ar	0.89	96.72	0.18	1.40	0.43	667.28	0.00	0.01	0.01	7.87	0.00
24/11/2011 08:46:06	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0019_ar	0.84	96.61	0.17	2.18	0.43	669.34	0.00	0.01	0.01	7.35	0.06
24/11/2011 08:54:59	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0020_ar	0.88	96.69	0.17	1.39	0.43	668.23	0.00	0.01	0.01	7.98	0.84
24/11/2011 09:03:59	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0021_ar	0.84	96.83	0.17	1.39	0.43	670.70	0.00	0.01	0.01	8.04	0.22
24/11/2011 09:12:52	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0022_ar	0.85	96.86	0.17	1.39	0.43	667.71	0.00	0.01	0.01	7.99	0.00
24/11/2011 09:21:52	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0023_ar	0.85	96.93	0.17	1.38	0.43	666.96	0.00	0.01	0.01	7.98	1.50
24/11/2011 09:30:50	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0024_ar	0.90	96.98	0.17	1.38	0.43	667.38	0.00	0.01	0.01	7.98	0.00
24/11/2011 09:39:50	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0025_ar	0.90	96.98	0.17	1.37	0.43	666.56	0.00	0.01	0.01	7.38	0.00
24/11/2011 09:48:46	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0026_ar	0.85	97.07	0.17	1.51	0.43	668.98	0.00	0.01	0.01	7.93	0.00
24/11/2011 07:34:29	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0011_ar	0.88	96.69	0.17	1.40	0.43	670.21	0.00	0.01	0.01	7.98	0.00
24/11/2011 06:05:03	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0001_ar	1.87	92.76	0.54	3.39	0.85	1383.06	0.00	0.05	0.05	91.06	0.00
24/11/2011 06:13:59	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0002_ar	2.00	92.88	0.55	3.40	0.85	1385.37	0.00	0.05	0.05	90.92	0.13

Pour cela, on va dans Soprane File Manager et on sélectionne **Tendances/Effacer des composants**.



En cliquant sur Effacer des composants, une fenêtre s'affiche, dans laquelle on peut cocher les composants que l'on souhaite effacer :





Après avoir validé en cliquant sur Ok, on ferme File Manager puis on retourne dans Soprane.

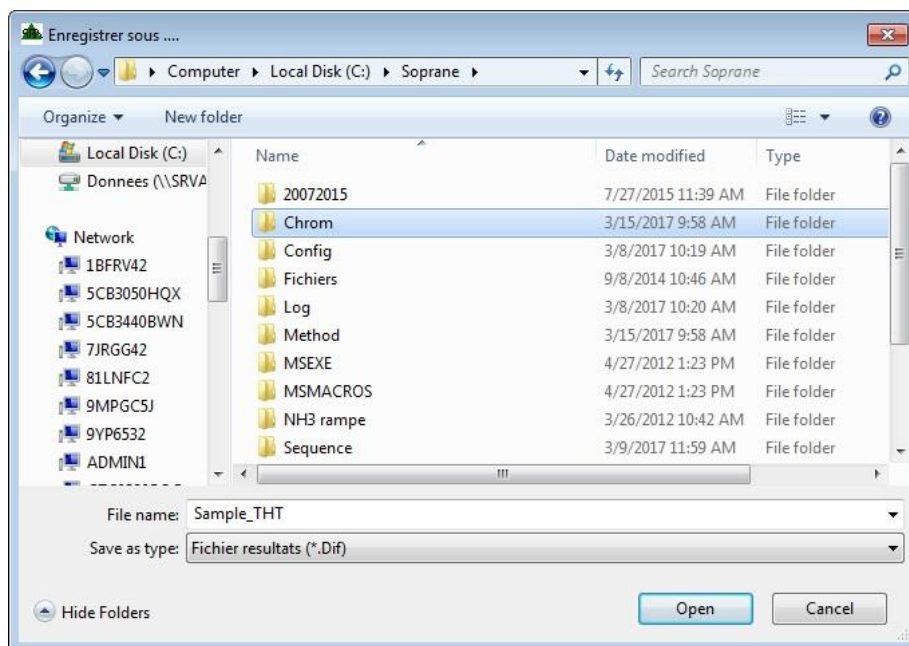
Dans Soprane, cliquer sur la fenêtre "Analyses" permet de l'actualiser puis il suffit de cliquer sur la ligne d'analyse qui nous intéresse pour l'afficher dans la fenêtre "Nom du fichier".

Nom composant	Module	TR (sec)	Surface	Conc. brute
N2	a	20.94	7589.78	0.89
CH4	a	21.96	639333.99	96.72
CO2	a	34.81	1818.17	0.18
C2H6	a	43.99	15121.39	1.40
C3H8	b	23.53	12701.49	0.43
iC4	b	27.24	2269.07	667.28
iC5	b	39.56	526.76	0.01
C6	b	114.05	350.42	7.87
TBM	c	0.00	0.00	0.00

Date	Fichier	N2	CH4	CO2	C2H6	C3H8	iC4	iC5	C6	TBM
		%	%	%	%	%	ppmVol	%	ppbVol	mg/m3
24/11/2011 08:37:09	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0018_ar	0.89	96.72	0.18	1.40	0.43	667.28	0.01	7.87	0.00
24/11/2011 08:46:06	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0019_ar	0.84	96.61	0.17	2.18	0.43	669.34	0.01	7.35	0.06
24/11/2011 08:54:59	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0020_ar	0.88	96.69	0.17	1.39	0.43	668.23	0.01	7.98	0.84
24/11/2011 09:03:55	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0021_ar	0.84	96.83	0.17	1.39	0.43	670.70	0.01	8.04	0.22
24/11/2011 09:12:52	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0022_ar	0.85	96.86	0.17	1.39	0.43	667.71	0.01	7.99	0.00
24/11/2011 09:21:52	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0023_ar	0.85	96.93	0.17	1.38	0.43	666.96	0.01	7.98	1.50
24/11/2011 09:30:50	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0024_ar	0.90	96.98	0.17	1.38	0.43	667.38	0.01	7.98	0.00
24/11/2011 09:39:50	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0025_ar	0.90	96.98	0.17	1.37	0.43	666.56	0.01	7.38	0.00
24/11/2011 09:48:46	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0026_ar	0.85	97.07	0.17	1.51	0.43	668.98	0.01	7.93	0.00
24/11/2011 07:34:29	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0011_ar	0.88	96.69	0.17	1.40	0.43	670.21	0.01	7.98	0.00
24/11/2011 06:05:03	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0001_ar	1.87	92.76	0.54	3.39	0.85	1383.06	0.05	91.06	0.00
24/11/2011 06:13:59	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0002_ar	2.00	92.88	0.55	3.40	0.85	1385.37	0.05	90.92	0.13
24/11/2011 06:22:54	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0003_ar	1.89	92.79	0.54	3.39	0.85	1398.54	0.05	91.79	0.00
24/11/2011 06:31:50	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0004_ar	2.00	92.78	0.55	3.39	0.85	1406.81	0.05	92.77	0.00
24/11/2011 06:40:49	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0005_ar	1.89	92.80	0.55	3.38	0.85	1397.52	0.05	99.67	0.00
24/11/2011 06:49:47	C:\Soprane\Chrom\PCS_Trentino_0006_ar	1.89	92.73	0.55	3.38	0.85	1395.61	0.05	84.35	0.00

En haut de la fenêtre "Analyses" il y a un bouton permettant d'exporter les résultats au format .DIF. Une action sur ce bouton permet l'ouverture d'une nouvelle fenêtre où l'on sélectionne le répertoire et le nom sous lequel les valeurs seront écrites.





11. Traitement post analyse

11.1 Alarmes

SOPRANE offre la possibilité de gérer des alarmes seuils liées à la concentration des constituants. Si des relais ont été définis (Voir Guide de configuration Soprane I – chap. 2.3), 16 alarmes sont ainsi disponibles.

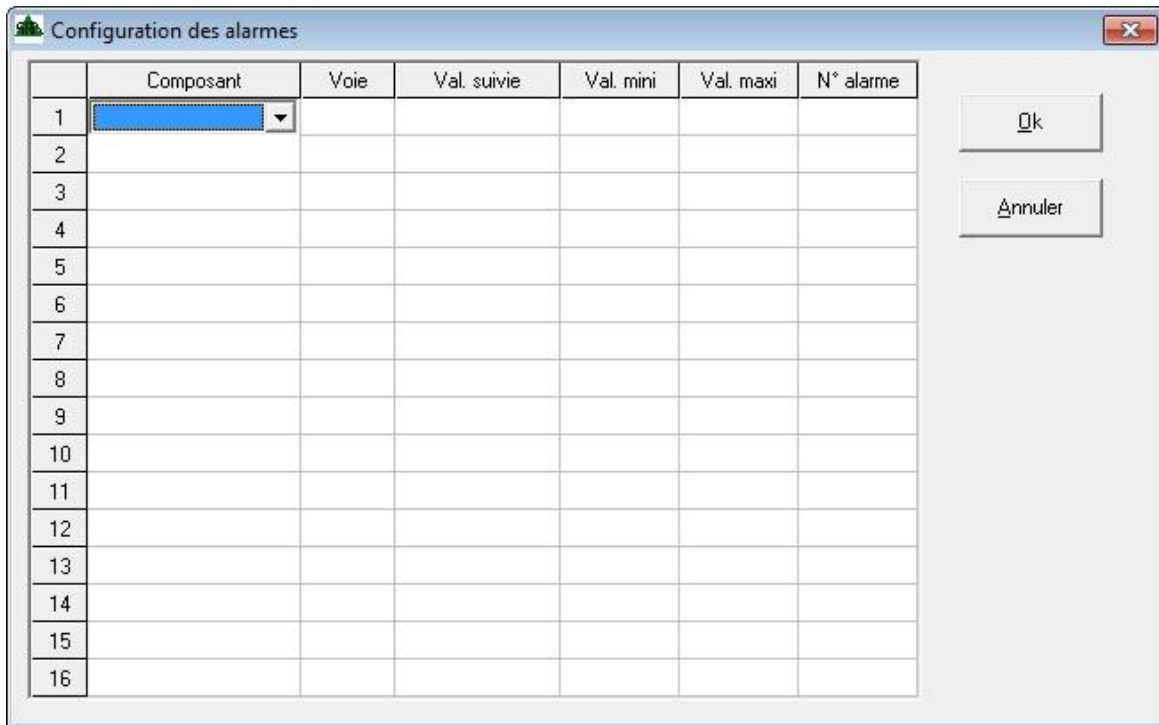
Une sortie relais est généralement utilisée pour signaler un défaut analyseur.

Les autres relais peuvent être utilisés pour ces alarmes seuil.

Allez dans "**Alarmes / Paramètres**". Pour chacune des alarmes, vous devez indiquer :

- La référence du constituant surveillé (une zone de liste permet d'éviter tout risque d'erreur).
- Le flux sur lequel ce constituant est surveillé.
- La variable utilisée pour ce défaut, avec 3 possibilités : la concentration brute, la concentration normalisée ou la concentration masse.
- La valeur de seuil bas.
- La valeur de seuil haut.
- Le numéro du relais associé à cette alarme.





11.2 Programme utilisateur

SOPRANE offre la possibilité de lancer un programme avant ou après l'analyse par le menu "**Paramètres / Configuration / Programme utilisateur**".

Il est possible de lancer un programme avant l'injection et d'attendre ou non la fin d'exécution de ce programme. Dans le cas où cette option est décochée, le cycle d'injection continue et le programme pré-run peut générer un Start du MicroGC. Dans le cas où cette option est cochée, le cycle d'injection est interrompu pendant toute la durée du programme pré-run (ex : pompe externe).

Nous avons précisé (voir § 6.1) qu'il était possible d'accéder à un programme utilisateur après l'analyse (post-programme).

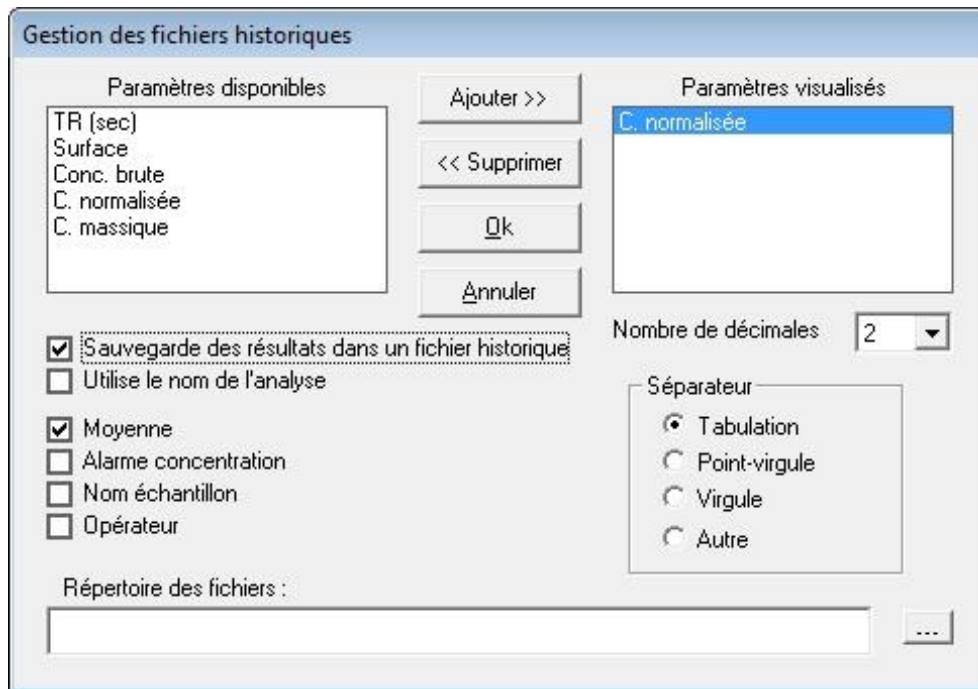


Si nécessaire, un bouton situé à gauche de la zone d'édition est utilisé pour afficher les répertoires et les fichiers et pour sélectionner directement le programme utilisateur.

11.3 Archivage

SOPRANE permet de mémoriser le résultat des analyses dans des fichiers directement exploitables dans des tableurs (extension DIF). Ces fichiers sont également visualisables dans un éditeur de textes. Les champs, dont la valeur est en ASCII, sont séparés par une tabulation et les analyses par un retour à la ligne.

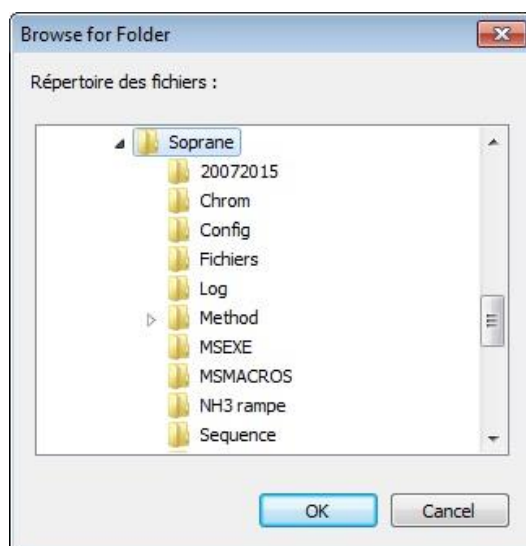
Le menu "**Paramètres / Configuration / Fichiers résultats**" permet l'affichage du formulaire où est mentionné le nom du répertoire sous lequel les résultats seront stockés (Cliquez sur "..." en bas à droite).



Il faut cocher « Sauvegarde des résultats dans un fichier historique ».

Après avoir cliqué sur "...", la fenêtre ci-dessous s'affiche. Vous pouvez sélectionner le fichier.





Les données stockées dans ces fichiers sont :

- La date et l'heure de l'analyse.
- Le nom du fichier.
- La surface et la concentration du pic (normalisée ou pas selon ce qui a été programmé).
- La somme des concentrations (si cette option a été demandée).
- Les résultats des calculs post-analytiques éventuellement demandés.

Un nouveau fichier est automatiquement généré chaque jour, et ce pour chaque flux. Un tel fichier porte le nom aammjjVx.DIF ou aammjjEx.DIF. "aammjj" correspond à la date (année, mois, jour), Vx ou Ex représente le flux X de l'analyse X ou de l'étalon X.

NOTE :

1. La création d'un nouveau fichier est faite lors du stockage tandis que la date et l'heure indiquées dans le fichier sont celles du moment de l'injection. Une analyse commencée un jour peut donc être stockée dans le fichier daté du lendemain.

2. Si l'utilisateur demande l'affichage, éventuellement l'impression, des composants inconnus (Paramètres / Affichage et impression), ces composants inconnus n'en seront pas moins ignorés lors du stockage dans le fichier DIF.

12. Tendances et sorties courant

12.1 Tendances

SOPRANE permet de visualiser l'évolution des concentrations ou des valeurs calculées sur un laps de temps.

Le menu "**Paramètres / Tendances / Propriétés**" permet l'accès à une feuille de propriétés utilisée pour la programmation des tendances.

La première feuille permet de choisir le nom des tendances à visualiser.



Paramétrage des tendances

Nom des tendances	Echelles des tendances	Options
Tendance n°1 :	COS	A
Tendance n°2 :	CO2	B
Tendance n°3 :	None	
Tendance n°4 :	Acetone	
Tendance n°5 :	None	
Tendance n°6 :	None	
Tendance n°7 :	None	
Tendance n°8 :	None	

Ok

Annuler

Huit variables peuvent être visualisées indépendamment les unes des autres (par exemple, il n'est pas nécessaire d'utiliser la tendance 4 pour pouvoir utiliser la tendance 5). Pour chaque tendance, une zone de liste permet la sélection de la variable qui sera visualisée.

La référence d'une variable dont on souhaite la représentation doit évidemment être connue du système au moment où l'on en demande la représentation. Ceci explique pourquoi l'accès aux feuilles de tendances est interdit tant que l'utilisateur n'a pas programmé un minimum de données concernant les pics identifiés dans l'analyse et les calculs post-analytiques.

NOTE :

L'identification d'un pic se fait par son nom. Si le nom d'un pic est modifié, il ne sera plus reconnu sur les feuilles de tendance.

Ainsi, par exemple, vous intégrez un pic d'azote dont le nom est N2 et vous faites la visualisation en tendance de sa valeur de concentration. Ensuite vous changez le nom de ce pic de N2 en AZOTE dans la table des constituants. Vous devez alors nécessairement réécrire la demande de visualisation en tendance sous ce nouveau nom.

La deuxième feuille concerne les échelles de sortie. Pour chacune des 8 tendances, il est possible d'indiquer une valeur minimale et une valeur maximale à prendre en compte lors de la représentation graphique. Par défaut, ces valeurs sont respectivement 0 et 100.



Paramétrage des tendances

Nom des tendances	Echelles des tendances		Options
	Echelle mini	Echelle maxi	
CO2 ppmVol	0	5	<input type="button" value="Ok"/> <input type="button" value="Annuler"/>
CO2 ppmVol	0	30000	
None	0	100	
Acetone	0	100	
None	0	100	
None	0	100	
None	0	100	
None	0	100	

Les valeurs utilisables peuvent être dans la gamme suggérée par SOPRANE, ce qui permet une grande flexibilité sans risque d'erreur, ou peuvent être écrites directement.

La seule contrainte est que l'on ne peut programmer que des entiers positifs (ni point, ni virgule). La valeur du minimum est inévitablement plus faible que celle du maximum (le minimum est forcé à 0 si l'on essaye de transgresser cette règle).

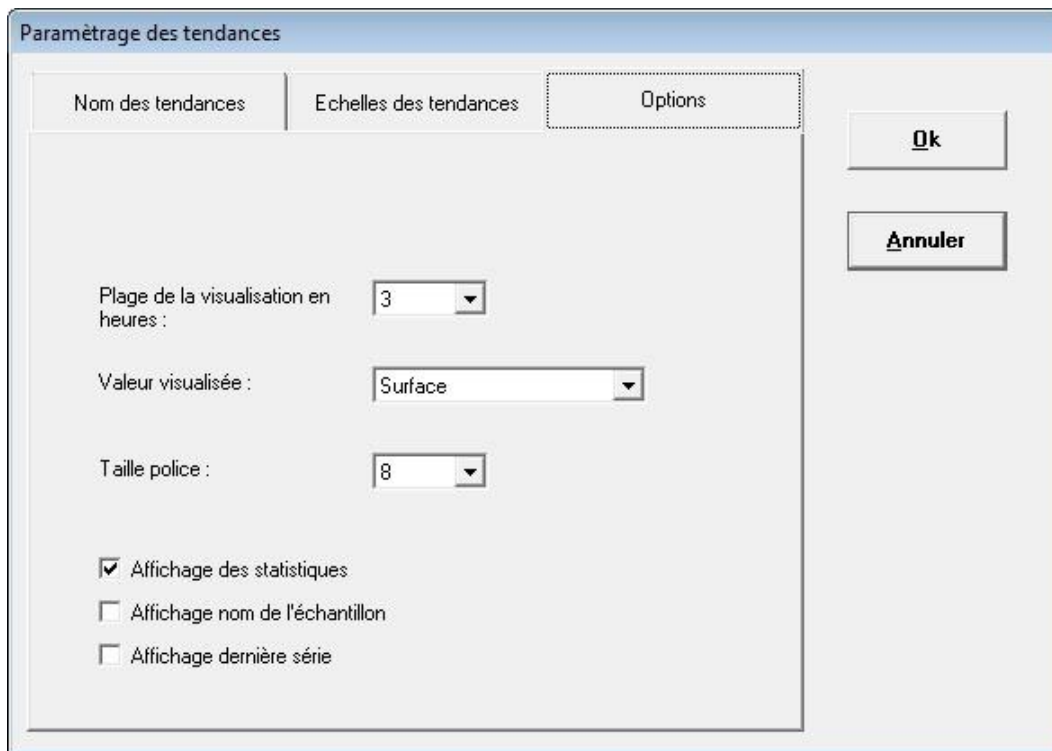
La dernière page « Options » permet de définir l'échelle de temps que l'on veut visualiser.

Par défaut, SOPRANE a sélectionné des tendances glissantes avec visualisation de la dernière heure. Il est possible de conserver ce mode et de visualiser jusqu'à 120 heures (5 jours) d'analyses ou toutes les analyses.

NOTE :

Les données visualisées sont celles des analyses des "X" dernières heures et non celles des "X" dernières heures d'analyse. Si l'on n'effectue pas d'analyse, aucun résultat ne sera visualisé.





12.2 Sorties courant 4-20 mA

Pour chaque groupe de sorties courant, l'utilisateur doit indiquer quelle variable (nom et flux) est émise et quelle est l'échelle de sortie (minimum et maximum).

L'affichage utilisé pour cette programmation est obtenu par le menu "**Paramètres / Configuration / Sorties 4-20 mA**", uniquement disponible si l'option est débloquée dans la clé de protection de Soprane.

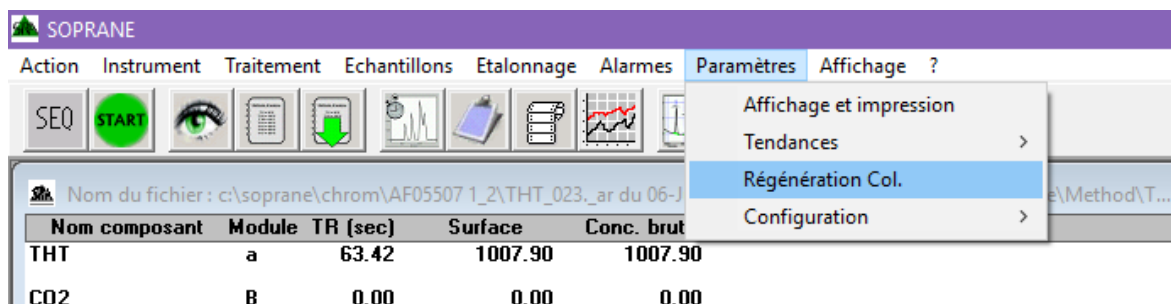


13. Régénération des colonnes

Lors de la configuration de SOPRANE (voir Guide de configuration Soprane I – Chap. 2.3) nous avons pu demander la gestion de la régénération des colonnes.

Si une telle requête a été faite, le menu "**Paramètres**" de SOPRANE proposera l'option "**Régénération Col.**".





Cette option fonctionne de la même manière que l'étalonnage automatique, ce qui signifie qu'elle a priorité sur le déroulement d'une séquence d'analyses.

La régénération nécessite des paramètres différents de ceux utilisés pour faire les analyses (température de colonne plus élevée, détecteur OFF), c'est pourquoi on indiquera une durée de régénération et le nom d'une méthode à utiliser pour réaliser les régénérations.

Une telle régénération peut être effectuée pendant la nuit ou le week-end et à la fin vous avez un appareil prêt à l'utilisation.

La post-régénération permet de redescendre en température après la régénération. La méthode de post-régénération peut être alors utilisée comme une méthode de fin de séquence car elle permet de charger une méthode sans faire d'analyses.

Si la durée de régénération est mise à zéro, la méthode de régénération n'est pas chargée et seule la méthode de post régénération est chargée.

Si vous ne souhaitez pas qu'une régénération soit lancée, cochez la case "Aucune".



Programmation de la régénération de colonne

Lancement régénération

Aucune

Maintenant

En fin de séquence

Programmée

Ok

Annuler

Date prochaine régéné. (JJ/MM/AA) : 05 / 07 / 2017

Heure prochaine régéné. (HH:MM:SS) : 11 : 23

Nombre de jours entre chaque régé. : 0

Méthode de la régénération : rege test_xm

Durée de la régénération (mn) : 2

Méthode post-régénération : test_xm

Durée de la stabilisation (mn) : 3

Si vous souhaitez qu'une régénération soit lancée, il y a 3 façons de procéder :

- Il est possible d'arrêter les analyses et de demander une **régénération immédiate**, en cochant "**Maintenant**" dans l'écran ci-dessous.

Vous pouvez choisir la méthode de régénération et sa durée (en min). Si la durée est nulle la méthode n'est pas chargée.

Vous pouvez aussi choisir une méthode de post-régénération et la durée de stabilisation (en min). Dans ce cas, lorsque la régénération sera terminée, la méthode de post régénération sera envoyée à l'analyseur même si la durée est nulle.



Programmation de la régénération de colonne

Lancement régénération

Aucune

Maintenant

En fin de séquence

Programmée

Ok

Annuler

Date prochaine régéné. (JJ/MM/AA) : 05 / 07 / 2017

Heure prochaine régéné. (HH:MM:SS) : 11 : 23

Nombre de jours entre chaque régé. : 0

Méthode de la régénération : rege test_xm

Durée de la régénération (mn) : 2

Méthode post-régénération : test_xm

Durée de la stabilisation (mn) : 3

- Il est possible, en cochant "**En fin de séquence**", d'avoir une régénération qui sera lancée à la fin de chaque séquence, que les analyses soient lancées en mode séquence ou automatique.

Vous pouvez choisir la méthode de régénération, sa durée (en min) ainsi qu'une méthode de post-régénération et sa durée.

Si la durée de régénération est mise à zéro, la méthode de régénération n'est pas chargée et seule la méthode de post régénération est chargée.

Si la durée de stabilisation est mise à zéro, la méthode post régénération est chargée. Si vous êtes en mode automatique les analyses de la séquence suivante vont redémarrer tout de suite.



Programmation de la régénération de colonne

Lancement régénération

Aucune

Maintenant

En fin de séquence

Programmée

Ok

Annuler

Date prochaine régéné. (JJ/MM/AA) : 05 / 07 / 2017

Heure prochaine régéné. (HH:MM:SS) : 11 : 23

Nombre de jours entre chaque régé. : 0

Méthode de la régénération : rege test_xm

Durée de la régénération (mn) : 2

Méthode post-régénération : test_xm

Durée de la stabilisation (mn) : 3

- La 3^e manière consiste à **programmer** la régénération à intervalles réguliers. Il suffit d'indiquer la date et l'heure de la prochaine régénération ainsi que le nombre de jours devant séparer deux régénérations successives (0 si une seule régénération doit être effectuée). Les méthodes et durées fonctionnent de la même manière que pour les cas précédents.

La régénération programmée ne fonctionne que si les analyses sont lancées en mode automatique.

Lorsqu'une régénération doit être effectuée, la séquence automatique est momentanément interrompue et la régénération est réalisée. Dans ce cas, à la fin de la régénération, la méthode de post régénération est ignorée et la méthode correspondant à l'analyse suivante est envoyée à l'analyseur. Soprane attend alors le temps nécessaire pour disposer d'un statut PRET de l'analyseur, puis la séquence automatique reprend son cours normal.



Programmation de la régénération de colonne

Lancement régénération

Aucune

Maintenant

En fin de séquence

Programmée

Ok

Annuler

Date prochaine régéné. (JJ/MM/AA) : 05 / 07 / 2017

Heure prochaine régéné. (HH:MM:SS) : 11 : 23

Nombre de jours entre chaque régé. : 0

Méthode de la régénération : rege test_xm

Durée de la régénération (mn) : 2

Méthode post-régénération : test_xm

Durée de la stabilisation (mn) : 3

14. Calculs spécifiques

Ces calculs spécifiques ne sont disponibles si la clé contient l'option calculs spécifiques.

14.1 Sélection des calculs

Selon les options, SOPRANE permet différents calculs.

Ces options permettent :

- Des calculs d'Analyse de Gaz Naturel,
- Des calculs personnalisés (15 calculs),
- Des calculs GPL,
- Des calculs de combustion,

Deux groupes de calculs peuvent être utilisés. Il est ainsi possible de calculer et gérer simultanément les mêmes paramètres dans des conditions de température différentes.

Le menu "**Paramètres / Configuration / Calculs / Sélection calculs 1**" ou "**Paramètres / Configuration / Calculs / Sélection calculs 2**" permet cette programmation.

Tout le monde n'est pas concerné par ce type de calculs et les possibilités ainsi offertes ne répondent qu'à un besoin standard.

L'appel d'un programme utilisateur autorise la définition d'autres possibilités de calculs.



NOTE :

Il est normalement nécessaire que les concentrations soient normalisées à 100% pour une exécution correcte des calculs.

L'utilisateur peut sélectionner l'unité dans laquelle le résultat sera exprimé (lorsqu'une unité est justifiée).

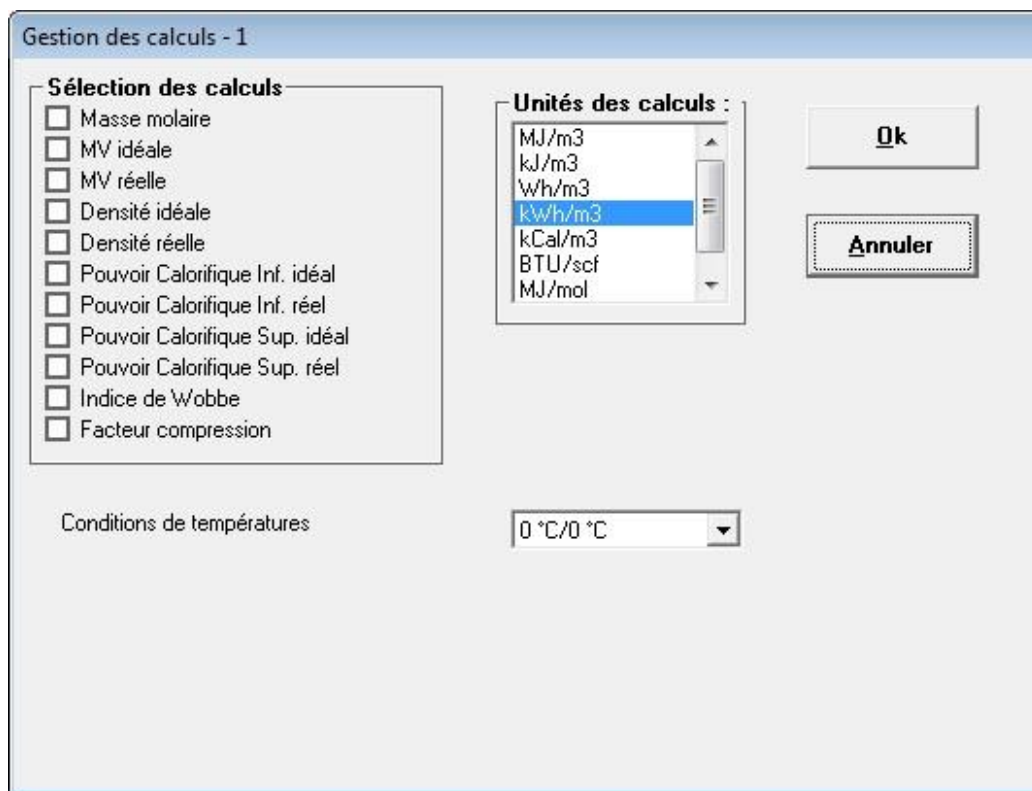
14.2 Calculs spécifiques pour l'analyse de gaz naturel

Le menu "Paramètres / Configuration / Calculs / Sélection calculs 1" ou "Paramètres / Configuration / Calculs / Sélection calculs 2" permet cette programmation.

Un jeu de calculs spécifiques est accessible dans le cas d'un analyseur de gaz naturel.

Les calculs possibles sont :

- La masse molaire.
- La masse volumique idéale.
- La masse volumique réelle.
- La densité idéale.
- La densité réelle.
- Le pouvoir calorifique inférieur idéal.
- Le pouvoir calorifique inférieur réel.
- Le pouvoir calorifique supérieur idéal.
- Le pouvoir calorifique supérieur réel.
- L'indice de Wobbe.
- Le facteur de compressibilité.



SOPRANE offre la possibilité d'aller bien plus loin que les simples calculs de concentration et d'effectuer des calculs complémentaires.

Le menu "Paramètres / Configuration / Calculs / Coefficients de calcul" permet la définition de coefficients utilisés lors des calculs. De plus amples commentaires sur ces calculs sont donnés en appendice.

Coefficients					
	Constituants	Masse (g/mol)	PCI MJ/m3	PCS MJ/m3	Z
1	He	4.003	0.000	0.000	1.00050
2	H2	2.016	10.777	12.788	1.00060
3	O2	31.999	0.000	0.000	0.99900
4	N2	28.014	0.000	0.000	0.99950
5	CH4	16.043	35.818	39.840	0.99760
6	CO	28.010	12.620	12.620	0.99930
7	CO2	44.010	0.000	0.000	0.99330
8	C2H4	28.054	59.040	63.060	0.99250
9	C2H6	30.070	63.760	69.790	0.99000
10	C3H6	42.081	85.940	91.980	0.98100
11	C3H8	44.097	91.180	99.220	0.97890
12	iC4	58.123	118.180	128.230	0.95800
13	nC4	58.123	118.610	128.660	0.95720
14	1-Butene	56.108	113.380	121.420	0.96500
15	Iso-Butene	56.108	112.630	120.670	0.96500
16	Cis-2-Butene	56.108	113.080	121.120	0.96100

Les valeurs par défaut sont celles des composants parfaits à 1.01325 bars en respect de la norme ISO/DIS 6976:1995 et du standard expérimental X20-522.

Un clic de souris sur le bouton 'Coefficients' permet la sélection d'un jeu de paramètres. A l'intérieur de ce jeu de paramètres, il est possible de modifier les valeurs.

Une ligne peut être insérée ou supprimée et le nom d'un constituant peut être modifié.

ATTENTION : Le nom utilisé ici pour désigner le constituant doit être LE MEME que celui utilisé dans la table des constituants.

Un bouton 'Conditions' permet de préciser les conditions utilisées pour réaliser les calculs. Ceci suppose que vous disposez des valeurs de tous les coefficients dans ces conditions.



Conditions de combustion et référence (101.325 kPa)

Température de combustion :	<input type="text" value="0.00"/>	<input type="button" value="Ok"/>
Température de référence :	<input type="text" value="0.00"/>	
Unité de température :	<input type="text" value="°C"/>	<input type="button" value="Annuler"/>
Masse molaire de l'air :	<input type="text" value="28.9626"/>	
Fact. de compressibilité de l'air :	<input type="text" value="0.99941"/>	

Les valeurs de température écrites ici sont reportées dans la fenêtre précédente ainsi que dans les deux fenêtres de sélection des calculs.

14.3 Calculs spécifiques pour les analyses de GPL

Le menu "Paramètres / Configuration / Calculs / Sélection calculs 1" ou "Paramètres / Configuration / Calculs / Sélection calculs 2" permet cette programmation.

Un autre jeu de calculs spécifiques est accessible dans le cas d'un analyseur GPL.

Dans un tel cas, les calculs possibles sont :

- Le carbone total
- Les pouvoirs calorifiques massiques inférieur et supérieur
- La masse volumique liquide
- La densité liquide
- La pression de valeur absolue à 37.8 °C, 40°C, 50°C et 70°C
- Les sommes C3, C4, C5
- La somme des oléfines
- L'indice octane moteur
- La pression de vapeur relative à 37.8°C, 40°C, 50°C et 70°C



Sélection des calculs

Carbone total
 PCI massique
 PCS massique
 Masse volumique liquide
 Densité liquide
 Pression de vapeur absolue à 37.8°C
 Pression de vapeur absolue à 40°C
 Pression de vapeur absolue à 50°C
 Pression de vapeur absolue à 70°C
 Somme C3
 Somme C4
 Somme C5
 Somme oléfines
 Indice Octane moteur
 Pression de vapeur relative à 37.8°C
 Pression de vapeur relative à 40°C
 Pression de vapeur relative à 50°C
 Pression de vapeur relative à 70°C

Unités des calculs:
 kj/100g Gaz
 MJ/kg

Ok

Annuler

Conditions de températures:
 0°C/0°C

Calcul pression vapeur:
 % volume
 % mole
 % poids

Valeurs des coefficients

	Nom du pic	Nbr. Carbone	Coef. M Vol. kg/m3	Fact. PV 37.8°C kPa	Fact. PV 40°C kPa
1	CH4	1.00	0.00	0.00	0.00
2	C2H4	2.00	369.00	8106.00	8821.00
3	C2H6	2.00	375.76	5269.00	5611.00
4	C3H6	3.00	521.33	1570.00	1661.00
5	C3H8	3.00	507.30	1317.00	1352.00
6	iC4	4.00	562.98	507.00	531.00
7	nC4	4.00	584.06	355.00	377.00
8	1-Butene	4.00	601.15	415.00	457.00
9	Iso-Butene	4.00	600.50	426.00	467.00
10	Cis-2-Butene	4.00	627.20	314.00	337.00
11	Trans-2-Butene	4.00	610.00	340.00	365.00
12	1,2-Butadiene	4.00	658.00	0.00	272.00
13	1,3-Butadiene	4.00	627.30	405.00	436.00

Ok

Annuler

Inserer

Ajouter

Effacer

14.4 Calculs spécifiques pour la combustion

Le menu "Paramètres / Configuration / Calculs / Sélection calculs 1" ou "Paramètres / Configuration / Calculs / Sélection calculs 2" permet cette programmation.

Les calculs possibles sont :

- L'air stœchiométrique
- Le volume d'azote
- La vapeur d'eau totale
- Le volume de dioxyde de carbone



- Le CO₂ max
- Les pouvoirs fumigènes sec et humide
- Le pouvoir comburivore
- L'indice de comburité
- Les viscosités, absolue, relative et cinématique

Sélection des calculs

<input type="checkbox"/>	Air Stoechiométrique
<input type="checkbox"/>	Volume azote
<input type="checkbox"/>	Vapeur d'eau totale
<input type="checkbox"/>	Volume dioxyde de carbone
<input type="checkbox"/>	CO2 max
<input type="checkbox"/>	Pouvoir fumigène sec
<input type="checkbox"/>	Pouvoir fumigène humide
<input type="checkbox"/>	Pouvoir comburivore
<input type="checkbox"/>	Indice de Comburité
<input type="checkbox"/>	Viscosité absolue
<input type="checkbox"/>	Viscosité relative
<input type="checkbox"/>	Viscosité cinématique

Ok

Annuler

Valeurs des coefficients

	Nom du pic	H2O	CO2	O2	Coef. Comb.
1	N2	0.00	0.00	0.00	0.00
2	CH4	2.00	1.00	2.00	9.54
3	CO2	0.00	1.00	0.00	0.00
4	C2H6	3.00	2.00	3.50	16.84
5	C3H8	4.00	3.00	5.00	24.37
6	iC4	5.00	4.00	6.50	32.41
7	nC4	5.00	4.00	6.50	32.41
8	iC5	6.00	5.00	8.00	40.87
9	nC5	6.00	5.00	8.00	40.87
10	neoC5	6.00	5.00	8.00	40.87
11	C6	7.00	6.00	9.50	50.00

Ok

Annuler

Inserer

Ajouter


Effacer

15. Retraitement des analyses

Le retraitement se fait grâce au module Traitement déjà présenté lors de la programmation de tout ce qui concerne l'intégration, l'identification des pics ou l'étalonnage (voir chap. 6 à 8) ou à propos de l'impression des résultats (voir chap. 9).



A tout moment, il est possible d'appeler le module traitement puis de charger le fichier d'une analyse archivée pour modifier ou non sa méthode, changer l'intégration, refaire l'identification des pics, ...

Le menu "**Analyse / Charger analyse**", de même que l'icône représentant 2 pics séparés , permet la sélection du chromatogramme que l'on souhaite charger en mémoire.

Ce chromatogramme a été archivé avec sa propre méthode d'analyse.

Les principaux outils, palette de contrôle, palette des événements d'intégration, palette de ligne de base en manuel du menu "Intégration" ont été abordés précédemment (voir chap. 6.5).

Note importante :

Lorsque l'on utilise le module de traitement, on peut éditer la méthode et sauver cette nouvelle méthode sous son nom actuel ou sous un nouveau nom.

Dans bon nombre de logiciels, lorsque l'on charge un document "A" en mémoire et qu'on en effectue la sauvegarde sous le nom "B", on poursuit le travail avec "B" en mémoire, ce qui signifie que toutes les modifications en mémoire seront écrites sous le nom "B" lors d'une sauvegarde.

Le module de traitement travaille différemment. Si un document "A" est chargé en mémoire puis sauvegardé sous le nom "B", la mémoire est modifiée mais continue à s'appeler "A" et une opération de sauvegarde modifiera le fichier source "A".

16. Comparaison des analyses

16.1 Module Compare

A partir de SOPRANE, l'accès au module de comparaison est obtenu par le menu "**Traitement / Module Compare**", ou, plus rapidement, par l'icône correspondante.



Le module de comparaison est un outil puissant permettant la visualisation simultanée de plusieurs chromatogrammes. Ceci permet de suivre l'évolution d'un phénomène au cours des analyses, éventuellement la dégradation des colonnes.

16.2 Les menus "Fichier / Nouveau" et "Fichier / Ouvrir"

Le module de comparaison est un logiciel dans lequel on ouvre des documents, chaque document étant constitué de 1 (l'intérêt commence à 2) à 64 analyses.

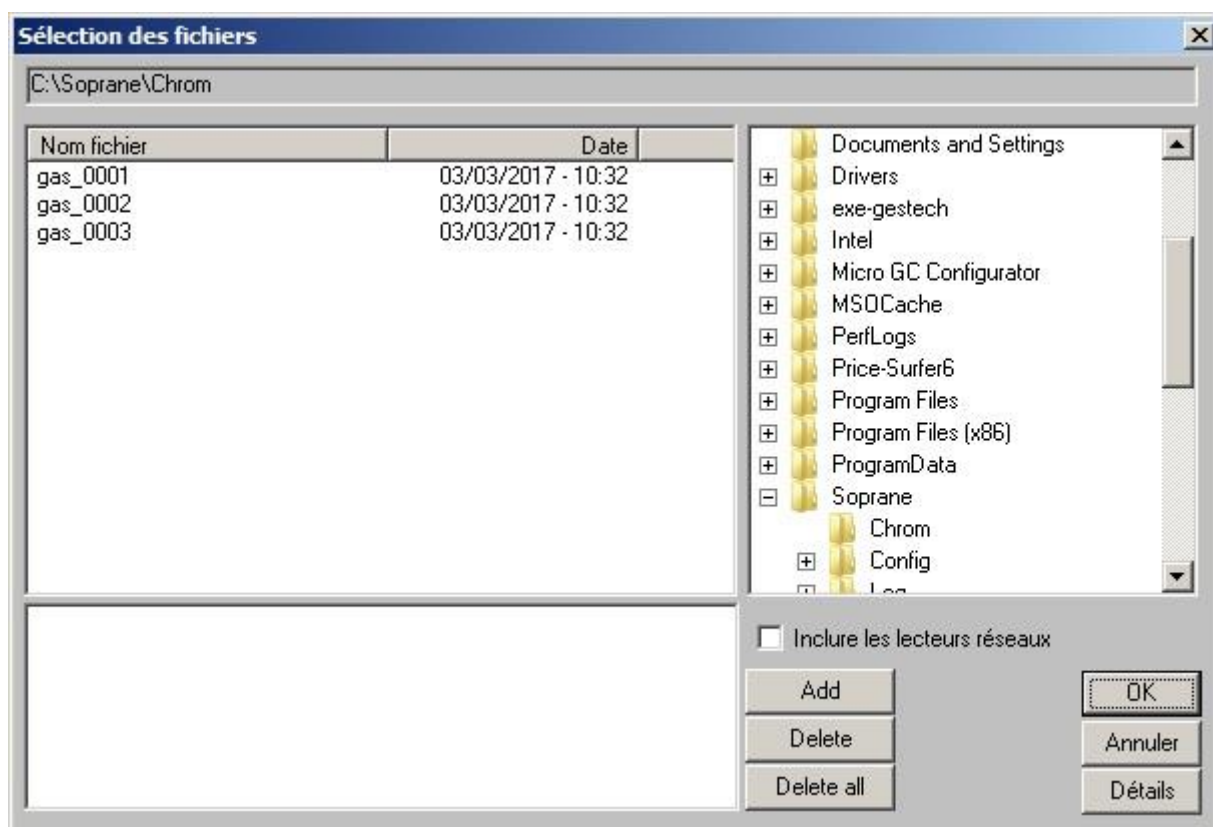
Chaque document peut être sauvegardé et ré-ouvert ultérieurement.

16.3 Choix d'un chargement normal ou séquentiel

Le choix ainsi offert permet la visualisation de toutes les courbes soit simultanément soit séquentiellement.

Ces deux moyens de charger les analyses passent par le menu "**Fichier / Charger**" ou "**Fichier / Chargement séquentiel**". La fenêtre affichée permet la sélection des fichiers à visualiser.

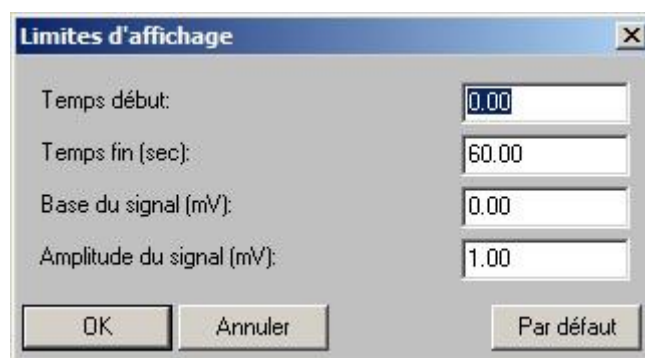




L'utilisateur n'a besoin que de sélectionner un ou plusieurs fichiers (utilisation des touches SHIFT ou CTRL et de la souris) et de demander l'ajout de ce qui est sélectionné en utilisant le bouton "Add". En cas d'erreur, les deux boutons "Delete" et "Delete all" seront utiles.

16.4 Edition des limites d'affichage des chromatogrammes

Le menu "Editer / Limites d'affichage" permet de modifier l'affichage.

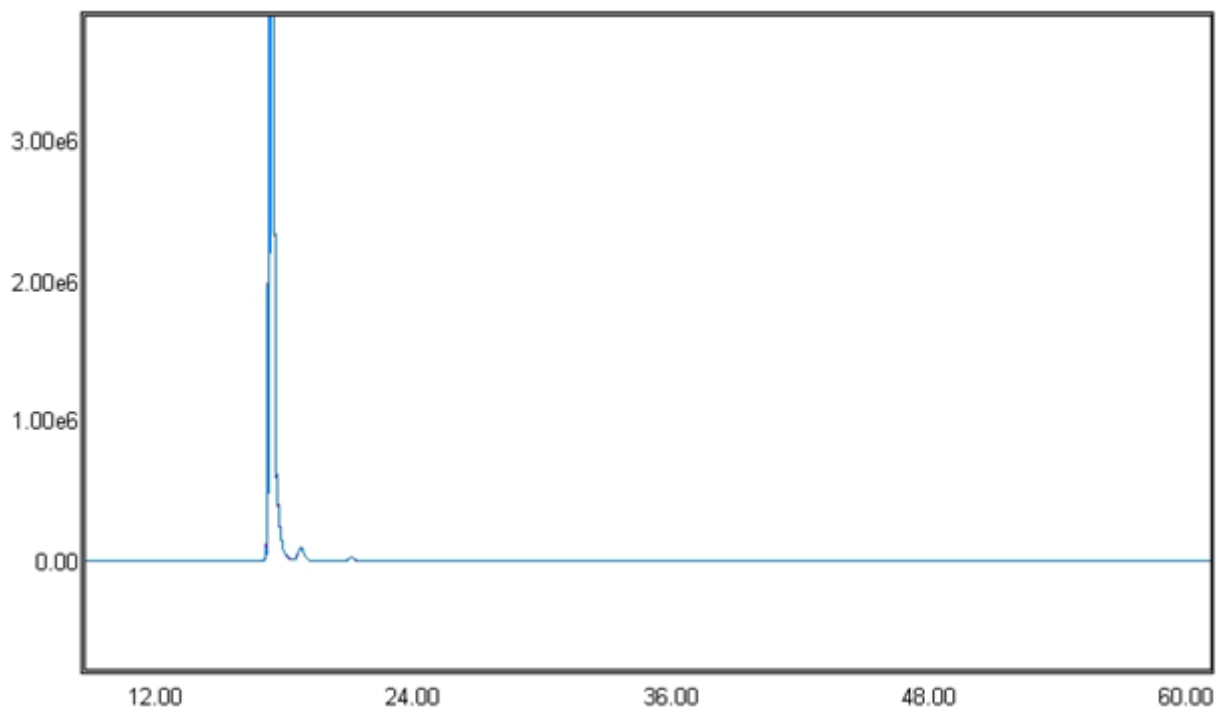


L'outil zoom est aussi un moyen de visualiser correctement les analyses.



16.5 Représentations 2D, 3D et 3D opaque

Par défaut, les chromatogrammes sont visualisés en mode 2D.



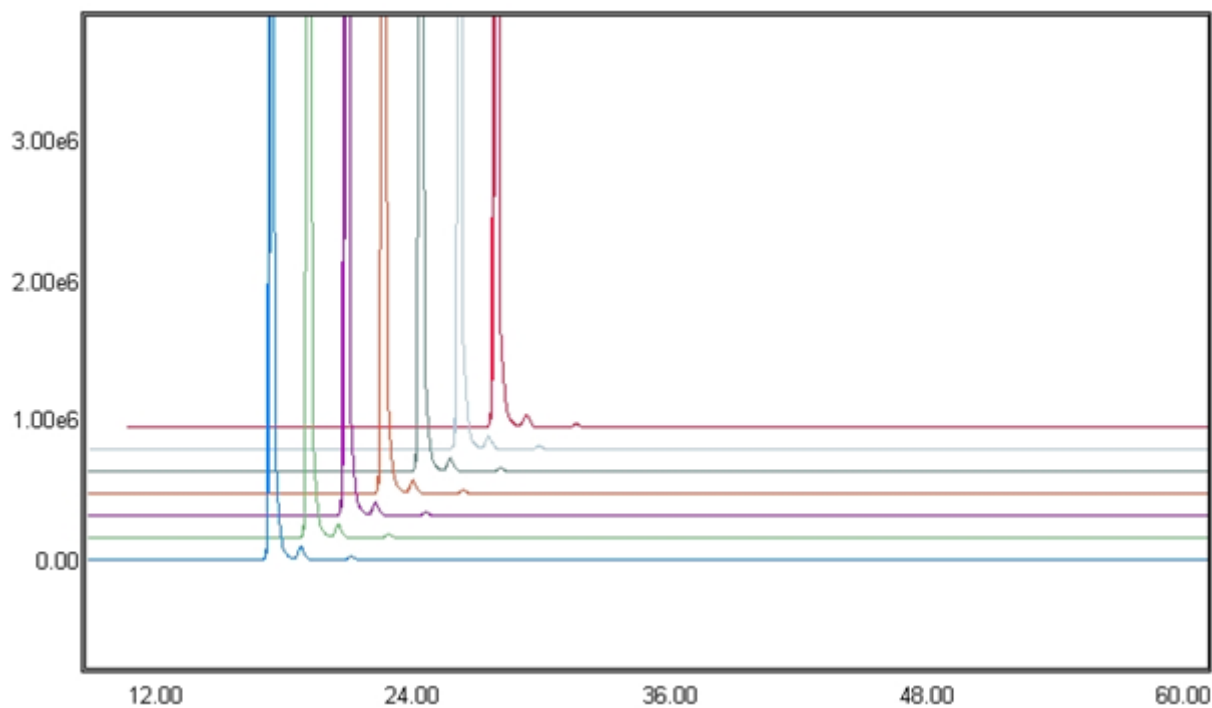
Le menu "**Options / 2D, Transparent 3D ou Opaque 3D**" permet d'améliorer l'affichage.

Lorsque l'on sélectionne une représentation 3D, transparent ou opaque, il ne semble pas y avoir beaucoup de modifications. Il suffit de placer la souris près du coin inférieur gauche de la fenêtre de visualisation, de maintenir la touche CTRL appuyée et d'effectuer un clic droit pour voir la différence.

Le fait de devoir appuyer sur la touche CTRL permet de faire la distinction entre une action de ce type et un double clic droit correspondant à l'annulation d'un niveau de zoom : l'outil zoom est actif durant la comparaison des chromatogrammes.

Lors d'un clic droit avec la touche CTRL appuyée, le module de comparaison redessine les chromatogrammes à l'écran de telle sorte que les origines de 2 chromatogrammes successifs soient espacées d'une quantité égale, en distance et en direction, à un cinquième du vecteur séparant le coin inférieur gauche de la fenêtre de visualisation et le curseur.

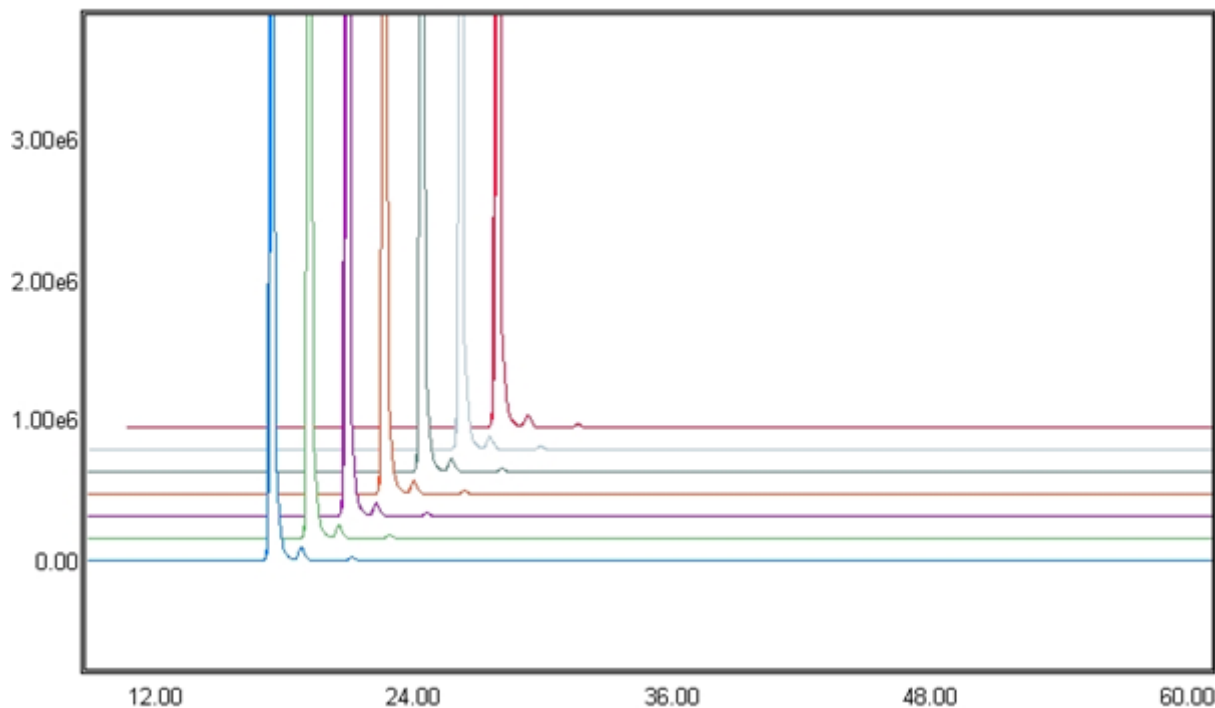




Ces chromatogrammes, qui correspondent à 7 analyses, sont visualisés en mode 3D transparent. Si l'analyse comporte de nombreux pics, bien que l'on utilise des couleurs différentes, il peut s'avérer difficile de dire qui est qui.

Dans une représentation 3D opaque, chaque chromatogramme masque partiellement ceux qui se trouvent derrière lui, alors qu'en mode 3D transparent on "voit au travers" des courbes.

La même vue, en mode 3D opaque est généralement plus facile à interpréter.




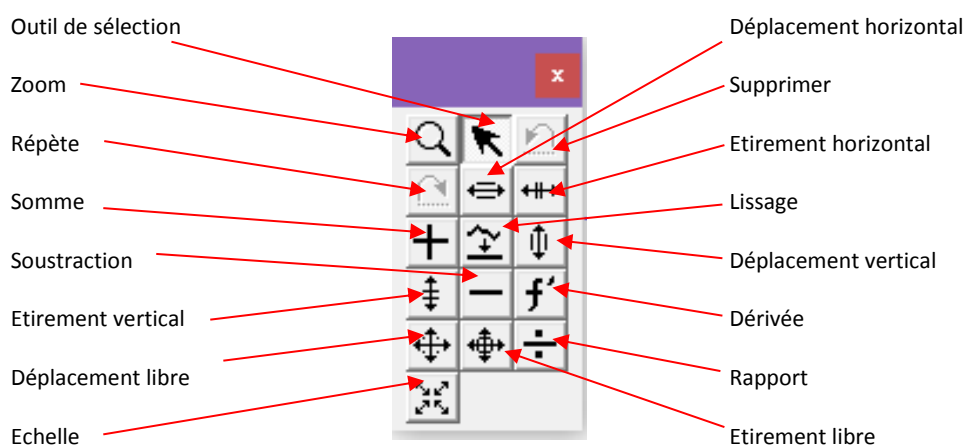
16.6 Options d'affichage

Normalement toutes les options sont sélectionnées pour faciliter le travail. Les menus "**Affichage / Position souris, / Grille et / Axes**" permettent respectivement de retirer l'indication de la position de la souris dans la ligne de statut, la grille d'arrière-plan d'écran ou l'indication des échelles (temps sur l'axe des X et tension sur l'axe des Y).

16.7 Utilisation de la palette d'outils

L'affichage, ou le retrait, de la palette est obtenu par le menu "**Affichage / Palette**" ou par l'icône de la barre

d'outil symbolisant une palette. 



Les outils de la palette fonctionnent en mode 2D.

La palette permet des opérations générales portant sur un chromatogramme ou mettant en jeu deux chromatogrammes. Les mêmes opérations sont obtenues par le biais des menus "**Math / Différence, / Somme, / Rapport, / Dérivée, / Lissage ou / Etirer**".

Pour une opération générale (zoom, par exemple) il suffit de cliquer sur l'icône de l'outil pour le rendre actif.

Une opération sur un chromatogramme (déplacement, étirement, mise à échelle ou dérivée première) est elle aussi immédiate : l'outil est d'abord sélectionné, puis l'on "saisit" le chromatogramme auquel on désire appliquer l'opération.

Une opération portant sur 2 chromatogrammes est réalisée en 3 temps : on sélectionne d'abord le premier chromatogramme (sa référence est visualisée dans la zone de liste située au-dessus de la zone de visualisation), puis on sélectionne l'outil, puis enfin le second chromatogramme concerné est sélectionné par un clic de souris.

Chaque fois qu'un chromatogramme est sélectionné, sa référence est indiquée dans la zone de liste située au-dessus de la fenêtre du chromatogramme. On peut aussi procéder dans l'autre sens et sélectionner un chromatogramme par la zone de liste.



Les outils "supprime" ou "répète" de la palette, ou les menus "**Editer / Annuler**" ou "**Editer / Refaire**" peuvent être utilisés pour supprimer ou répéter uniquement la dernière action.

16.8 L'impression

La fenêtre active peut être imprimée.

Les menus "**Fichier / Configurer impression**" et "**Fichier / Imprimer**" permettent de configurer l'imprimante, de visualiser l'aperçu avant impression ou d'imprimer la fenêtre active.

L'icône symbolisant une imprimante peut aussi être directement utilisée pour imprimer la fenêtre.

17. Gestion des fichiers

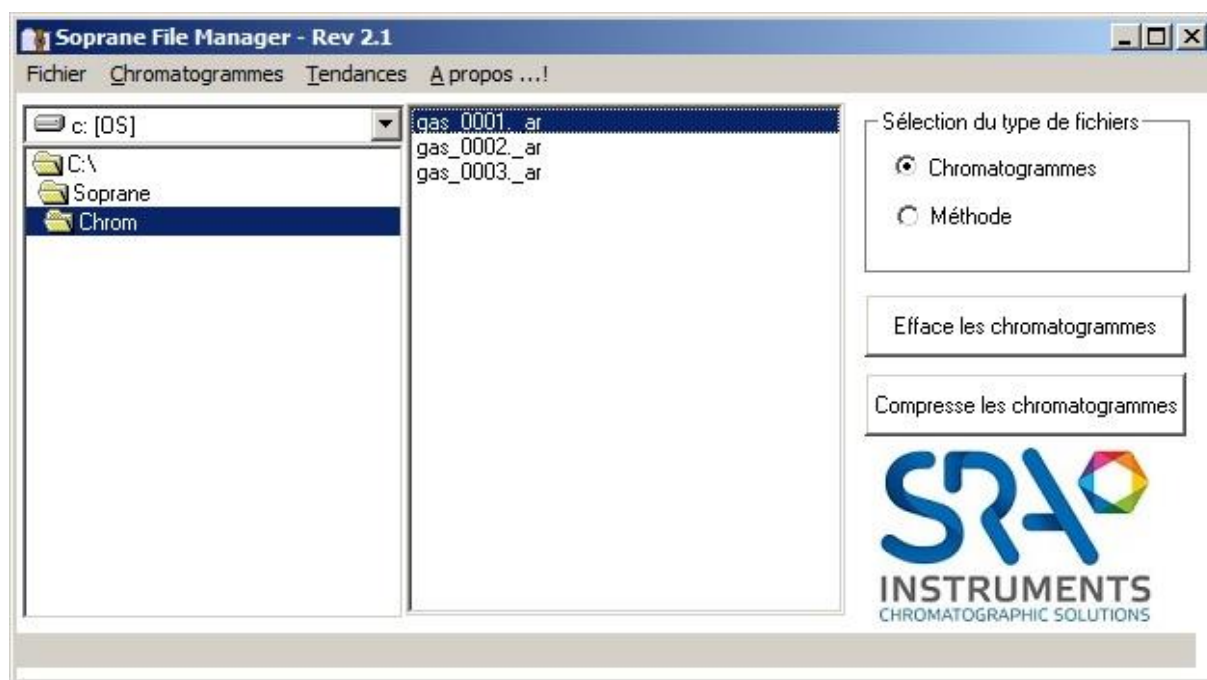
Soprane utilise plusieurs fichiers pour mémoriser la configuration de l'analyseur, les différentes méthodes d'analyses, les méthodes d'intégration, les résultats, ...

Ces fichiers sont, pour la plupart, liés entre eux et le fait de déplacer l'un de ces fichiers d'un répertoire à un autre peut avoir des conséquences fâcheuses.

La gestion des fichiers est facilitée grâce à l'utilisation de Soprane File Manager :



En cliquant sur l'icône, la fenêtre suivante s'affiche :



Vous pouvez choisir d'effectuer des opérations sur des chromatogrammes ou des méthodes, en sélectionnant le type de fichiers.

Vous pouvez :

SRA INSTRUMENTS
210 rue des Sources
69280 Marcy l'Etoile
FRANCE

T : 04.78.44.29.47
F : 04.78.44.29.62
info@sra-instruments.com
www.sra-instruments.com

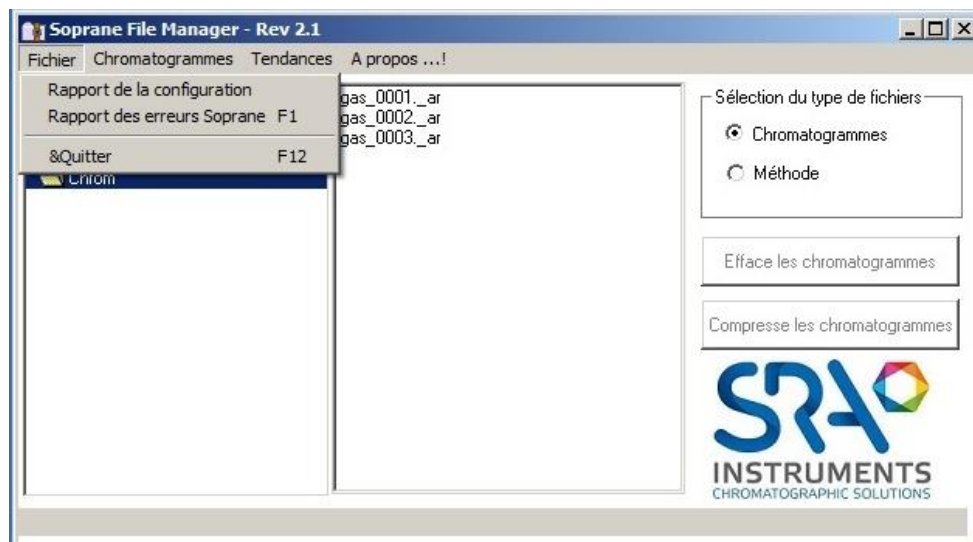
SA à Directoire et Conseil de
surveillance au capital de 150.000 €
RCS Lyon B 342 068 731
APE 4669B
SIRET: 342 068 731 00054
Code TVA FR 40342068731



- Effacer des chromatogrammes ou méthodes
- Compresser des chromatogrammes ou méthodes sous une extension .zip

Dans le menu "**Fichier**", vous avez également accès :

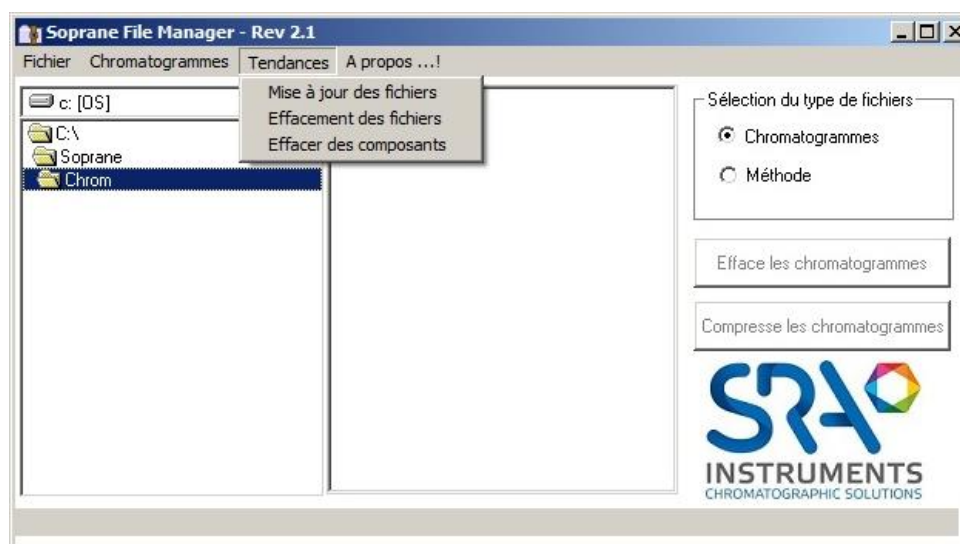
- Au rapport de la configuration de votre appareil
- Au rapport des erreurs Soprane, répertoriant toutes les erreurs qui ont eu lieu



Lorsque vous faites appel au SAV, il sera important de pouvoir lui communiquer ces rapports, afin d'aider à la résolution du problème à distance.

Dans le menu "**Tendances**", vous pouvez mettre à jour des fichiers que vous aviez créés avec une précédente version de Soprane et que vous souhaitez utiliser avec la version actuelle.

Vous pouvez également effacer des composants (voir chapitre 10).



18. Calculs via Excel

Une option de SOPRANE permet de faire le lien avec un fichier EXCEL pour définir tout type de calculs. Un certain nombre de choses sont imposées, de manière à ce que SOPRANE sache où écrire et où lire les données.

Si l'option existe, le menu "**Paramètres**" de SOPRANE permet d'accéder à un écran de "**Sélection de la feuille de calcul**".

The screenshot shows a dialog box titled "Sélection de la feuille de calcul". It contains the following fields and controls:

- Nom de fichier de la feuille de calcul : [C:\Users\rd2\Desktop\Générateur de rapport XLS\Cetiat bandg...]
- Nom de la feuille : [Soprane]
- Nom de cellule composant : [Composant]
- Nom de cellule résultats : [Calculs]
- Nom du fichier de la macro : []
- Exportation : [Mode expert]
- Buttons: Ok, Annuler

La première ligne de cet écran est le nom du fichier EXCEL.

Un dossier EXCEL pouvant comporter plusieurs feuilles, la deuxième ligne correspond à la référence de la feuille utilisée pour les échanges de données.

Deux points de repère sont nécessaires et se trouvent dans la colonne A : il s'agit d'une cellule que l'on va appeler "Nom des composants" et d'une autre appelée "Nom des calculs".

Si la réalisation des calculs nécessite le lancement d'une macro, le nom de cette macro sera indiqué dans la cinquième ligne.

A l'exécution, SOPRANE prépare la feuille de calcul.

Pour cela, il cherche dans la colonne A la cellule "Nom des composants". Les lignes suivantes correspondent obligatoirement au nom des constituants, tels qu'ils sont connus de SOPRANE (programmation de la table d'identification). Ceci permet à SOPRANE d'identifier chacun des constituants. Lorsqu'un constituant est trouvé, sa concentration brute est écrite sur la même ligne, en colonne B, puis sa concentration normalisée, toujours sur la même ligne en colonne C.

Le fichier EXCEL effectue les calculs. Eventuellement, SOPRANE lance la macro.



SOPRANE vient ensuite rechercher en colonne A une cellule "Nom des calculs".

Les résultats calculés par la feuille EXCEL doivent obligatoirement se trouver dans les lignes suivantes, selon le format suivant :

- Colonne A : nom du résultat,
- Colonne B : descriptif,
- Colonne C : valeur numérique,
- Colonne D : unités,
- Colonne E : nombre de décimales du résultat.

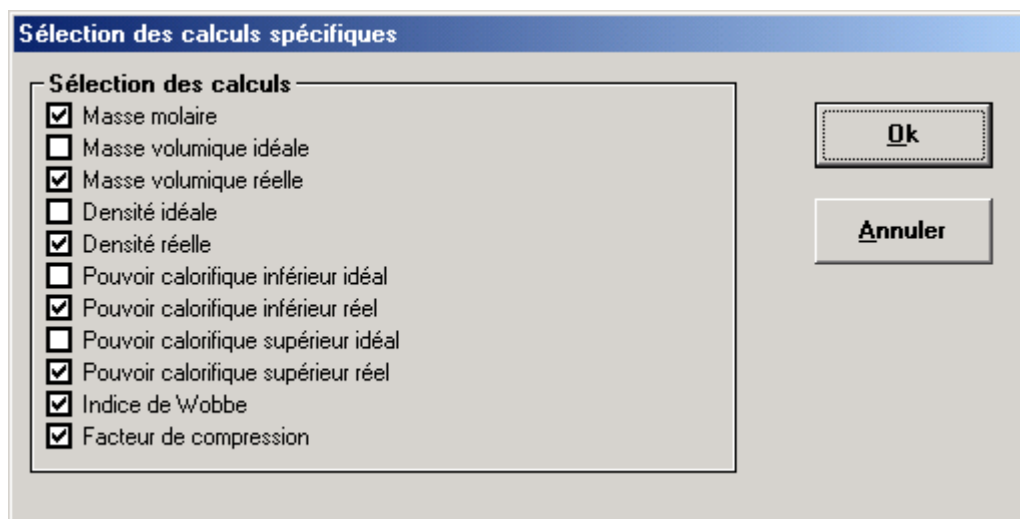
Le reste de la feuille est laissé à l'utilisateur qui peut y stocker des constantes ou des formules de calcul.

Lorsque SOPRANE imprime le résultat d'une analyse, ou lorsque l'on veut programmer le résultat d'un calcul sur une sortie tendance ou une sortie 4-20 mA, le calcul est référencé par son nom (Colonne A).

Nom composant	TR (sec)	Module	Conc. brute	Surface	C. normalisée	C. massique
Hydrogene	48.51	A	89.804	282079.582	39.081	17.695
Oxygene	0.00	A	0.000	0.000	0.000	0.000
Azote	71.01	A	27.607	8802.271	12.014	75.589
Methane	0.00	A	0.000	0.000	0.000	0.000
CO	0.00	A	0.000	0.000	0.000	0.000
CO2	0.00	B	0.000	0.000	0.000	0.000
Ethylene	0.00	B	0.000	0.000	0.000	0.000
Ethane	82.60	B	1.724	14960.875	0.750	5.067
H2S	137.01	b	0.523	4127.574	0.227	0.000
Composant inconnu	147.99	b	5.256	5.256	2.287	0.000
Propane	28.88	C	0.347	399.779	0.151	1.497
Propylene	0.00	C	0.000	0.000	0.000	0.000
iC4	0.00	C	0.000	0.000	0.000	0.000
nC4	38.51	C	0.009	31.943	0.004	0.049
Composant inconnu	40.32	c	43.250	43.250	18.821	0.000
Trans-2-Butene	0.00	C	0.000	0.000	0.000	0.000
1-Butene	0.00	C	0.000	0.000	0.000	0.000
Iso-Butene	0.00	C	0.000	0.000	0.000	0.000
Cis-2-Butene	0.00	C	0.000	0.000	0.000	0.000
iC5	0.00	C	0.000	0.000	0.000	0.000
nC5	70.11	C	0.015	77.333	0.006	0.103
Composant inconnu	75.86	c	61.255	61.255	26.657	0.000
1,3-Butadiene	0.00	C	0.000	0.000	0.000	0.000
Pic 1	0.00	d	0.000	0.000	0.000	0.000
			229.789	310589	100.000	
Masse molaire :	10.221					
MV réelle :	0.4563					
Densité réelle :	0.3529					
PCI réel :	16.53		MJ/m3			
PCS réel :	18.34		MJ/m3			
Wobbe :	51.98		MJ/m3			
Compression :	0.9993					

Lorsque SOPRANE indique quel calcul l'utilisateur souhaite prendre en compte, il reprend par contre le descriptif du calcul tel que défini en colonne B de la feuille EXCEL.





Les 2 pages suivantes donnent une représentation possible d'une feuille EXCEL servant à réaliser des calculs tels que définis ci-dessus.

On notera l'utilisation des colonnes A, B et C pour l'écriture des concentrations à partir de la ligne "Nom des composants", ainsi que l'utilisation des colonnes A, B, C, D et E pour la lecture des résultats calculés à partir de la ligne "Nom des calculs".



	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1	Nom des composants	Conc. brutes	Conc. normalisées	Formule	Masse molaire		Hi 0/0 °C		Hs 0/0 °C		z 0°C, 101.325 kPa		
2	He	0,000	0,000	He	4,0026	0,0000	0,000	0,000	0,000	0,000	1,005	0,0000	
3	Hydrogene	0,000	0,000	H2	2,0159	0,0000	10,777	0,000	12,788	0,000	1,006	0,0000	
4	Oxygene	0,000	0,000	O2	31,9988	0,0000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,999	0,0000	
5	Azote	0,000	0,000	N2	28,0135	0,0000	0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	0,0000	
6	Methane	0,000	0,000	CH4	16,0430	0,0000	35,818	0,000	39,840	0,000	0,998	0,0000	
7	CO	0,000	0,000	CO	28,0100	0,0000	12,620	0,000	12,620	0,000	0,999	0,0000	
8	CO2	0,000	0,000	CO2	44,0100	0,0000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,993	0,0000	
9	Ethane	0,000	0,000	C2H6	30,0700	0,0000	63,760	0,000	69,790	0,000	0,990	0,0000	
10	Ethylene	0,000	0,000	C2H4	28,0540	0,0000	59,040	0,000	63,060	0,000	0,993	0,0000	
11	Propane	0,000	0,000	C3H8	44,0970	0,0000	91,180	0,000	99,220	0,000	0,979	0,0000	
12	Propylene	0,000	0,000	C3H6	42,0810	0,0000	85,940	0,000	91,980	0,000	0,981	0,0000	
13	nC4	0,000	0,000	C4H10	58,1230	0,0000	118,610	0,000	128,660	0,000	0,957	0,0000	
14	iC4	0,000	0,000	C4H10	58,1230	0,0000	118,180	0,000	128,230	0,000	0,958	0,0000	
15	1-Butene	0,000	0,000	C4H8	56,1080	0,0000	113,380	0,000	121,420	0,000	0,965	0,0000	
16	Iso-Butene	0,000	0,000	C4H8	56,1080	0,0000	112,630	0,000	120,670	0,000	0,965	0,0000	
17	Cis-2-Butene	0,000	0,000	C4H8	56,1080	0,0000	113,080	0,000	121,120	0,000	0,961	0,0000	
18	Trans-2-Butene	0,000	0,000	C4H8	56,1080	0,0000	112,910	0,000	120,960	0,000	0,961	0,0000	
19	1,2-Butadiene	0,000	0,000	C4H6	54,0920	0,0000	109,840	0,000	115,870	0,000	0,955	0,0000	
20	1,3-Butadiene	0,000	0,000	C4H6	54,0920	0,0000	107,470	0,000	113,510	0,000	0,966	0,0000	
21	nC5	0,000	0,000	C5H12	72,1500	0,0000	146,000	0,000	158,070	0,000	0,918	0,0000	
22	iC5	0,000	0,000	C5H12	72,1500	0,0000	145,690	0,000	157,760	0,000	0,937	0,0000	
23	neo-pentane	0,000	0,000	C5H12	72,1500	0,0000	145,060	0,000	157,120	0,000	0,943	0,0000	
24	C6	0,000	0,000	C6H14	86,1770	0,0000	173,450	0,000	187,530	0,000	0,892	0,0000	
25	C7	0,000	0,000	C7H16	100,2040	0,0000	200,870	0,000	216,960	0,000	0,830	0,0000	
26	C8	0,000	0,000	C8H18	114,2310	0,0000	228,280	0,000	246,380	0,000	0,742	0,0000	
27	C9	0,000	0,000	C9H20	128,2580	0,0000	255,740	0,000	275,850	0,000	0,613	0,0000	
28	C10	0,000	0,000	C10H22	142,2580	0,0000	283,160	0,000	305,290	0,000	0,434	0,0000	
29	H2O	0,000	0,000	H2O	18,0153	0,0000	0,000	0,000	2,010	0,000	0,930	0,0000	
30	Air					28,96260						0,99941	
31													
32	Somme	0,000	0,000				0,000		0,000		0,000		0,000
33													

SRA INSTRUMENTS
210 rue des Sources
69280 Marcy l'Etoile
FRANCE

T : 04.78.44.29.47
F : 04.78.44.29.62
info@sra-instruments.com
www.sra-instruments.com

SA à Directoire et Conseil de
surveillance au capital de 150.000 €
RCS Lyon B 342 068 731
APE 4669B
SIRET: 342 068 731 00054
Code TVA FR 40342068731



Microsoft Excel - Calculs RGA Français.xls

Fichier Edition Affichage Insertion Format Outils Données Fenêtre ? eDocPrinter->PDF

Tapez une question

Arial 8 G I S

	A	B	C	D	Souligné	F	G	H	I	J	K	L	M
19	1,2-Butadiene	0,000	0,000	C4H6	54,0920	0,0000	109,840	0,000	115,870	0,000	0,955	0,0000	
20	1,3-Butadiene	0,000	0,000	C4H6	54,0920	0,0000	107,470	0,000	113,510	0,000	0,966	0,0000	
21	nC5	0,000	0,000	C5H12	72,1500	0,0000	146,000	0,000	158,070	0,000	0,918	0,0000	
22	iC5	0,000	0,000	C5H12	72,1500	0,0000	145,690	0,000	157,760	0,000	0,937	0,0000	
23	neo-pentane	0,000	0,000	C5H12	72,1500	0,0000	145,060	0,000	157,120	0,000	0,943	0,0000	
24	C6	0,000	0,000	C6H14	86,1770	0,0000	173,450	0,000	187,530	0,000	0,892	0,0000	
25	C7	0,000	0,000	C7H16	100,2040	0,0000	200,870	0,000	216,960	0,000	0,830	0,0000	
26	C8	0,000	0,000	C8H18	114,2310	0,0000	228,280	0,000	246,380	0,000	0,742	0,0000	
27	C9	0,000	0,000	C9H20	128,2580	0,0000	255,740	0,000	275,850	0,000	0,613	0,0000	
28	C10	0,000	0,000	C10H22	142,2580	0,0000	283,160	0,000	305,290	0,000	0,434	0,0000	
29	H2O	0,000	0,000	H2O	18,0153	0,0000	0,000	0,000	2,010	0,000	0,930	0,0000	
30	Air					28,96260						0,99941	
31													
32	Somme	0,000	0,000				0,000		0,000		0,000		0,000
33													
34	Nom des calculs	Description	Valeur à 0°	Unités	Décimales								
35	Masse molaire	Masse molaire	0		3								
36	MV idéale	Masse volumique idéale	0		4								
37	MV réelle	Masse volumique réelle	0		4								
38	Densité idéale	Densité idéale	0		4								
39	Densité réelle	Densité réelle	0		4								
40	PCI idéal	Pouvoir calorifique inférieur idéal	0	MJ/m3	2								
41	PCI réel	Pouvoir calorifique inférieur réel	0	MJ/m3	2								
42	PCS idéal	Pouvoir calorifique supérieur idéal	0	MJ/m3	2								
43	PCS réel	Pouvoir calorifique supérieur réel	0	MJ/m3	2								
44	Wobbe	Indice de Wobbe	0	MJ/m3	2								
45	Compression	Facteur de compression	1		4								
46													



19. Modbus

Un logiciel spécifique, dont le nom est SRAMODBUS, permet l'échange de données entre le logiciel SOPRANE et un autre ordinateur par le biais du bus de terrain Modbus.

Ainsi, les résultats d'une analyse peuvent être intégralement transmis : date, heure, flux, mesure ou calibration, concentrations, résultats de calculs.

Les données susceptibles d'être échangées sont stockées dans une table d'adresses. Le protocole de transmission respecte un standard qui consiste à demander ou à transmettre une question, et en réponse la valeur de la variable se trouvant à telle ou telle adresse est transmise.

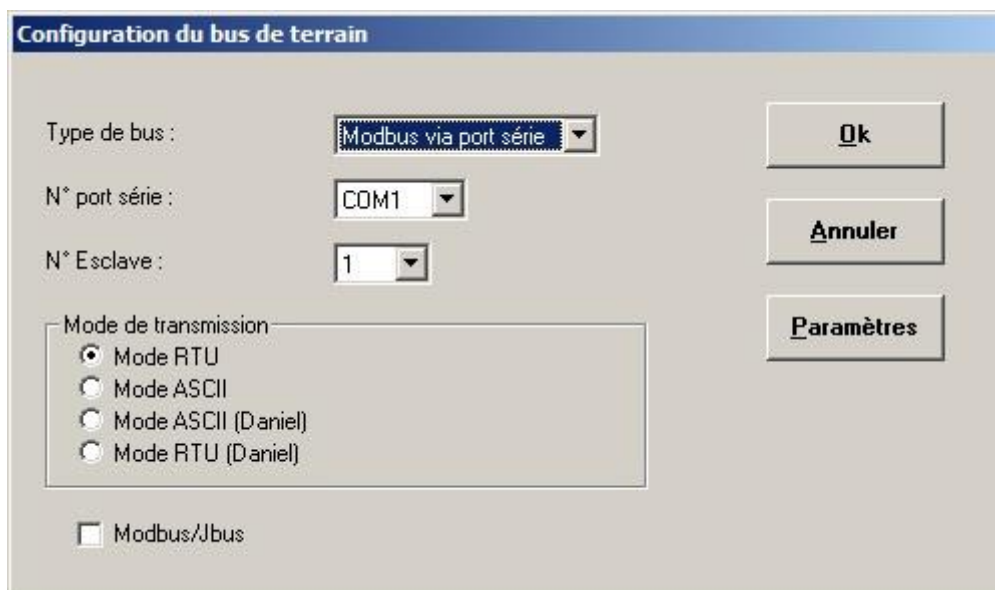
Vous avez tout simplement à définir une table d'échange définissant les variables que vous souhaitez lire, leur adresse et leur format.

Il est donc nécessaire dans un premier temps de définir la configuration hardware et de déterminer l'adresse d'écriture de chacune des informations.

19.1 Configuration hardware

Le programme PGCSETUP permet de définir la configuration de cette liaison série (se référer au manuel de configuration).

La fenêtre permettant la configuration Modbus n'est visualisée que si l'installation comprend une option Modbus.



Dans cette fenêtre :

- Choisissez le type de bus, c'est-à-dire le protocole de communication pour dialoguer avec le système distant.



- Si vous choisissez Modbus via port série, sélectionnez le port série utilisé. Dans ce cas, le bouton "paramètres" permet la visualisation et la modification des paramètres de transmission (vitesse, nombre de bits, parité, nombre de bits d'arrêt, type de contrôle).
- Si vous choisissez Modbus via TCP/IP, conservez la valeur 502 pour le numéro du port.
- Indiquez un numéro d'esclave pour SOPRANE.
- Sélectionnez un mode de transmission.
- Faites le choix d'un protocole Modbus/Jbus.

Par défaut, gardez le mode de transmission en mode RTU et l'option Modbus/Jbus décochée.

Validez par le bouton Ok et quittez Soprane Setup en validant la sauvegarde des modifications.

NOTE :

Le logiciel SRAMODBUS est lancé automatiquement après l'initialisation de Windows.

En conséquence, la prise en compte d'une modification des paramètres ne sera effective que lors du redémarrage de Windows.

19.2 Configuration du software

Note : Avant d'envisager la configuration, il est préférable d'effectuer quelques analyses depuis Soprane, de créer la table de pics et de sélectionner les calculs s'il y en a. Ainsi, à chaque fin d'analyse, le logiciel SRAMODBUS récupèrera les noms de toutes ces données et la configuration des adresses sera facilitée.

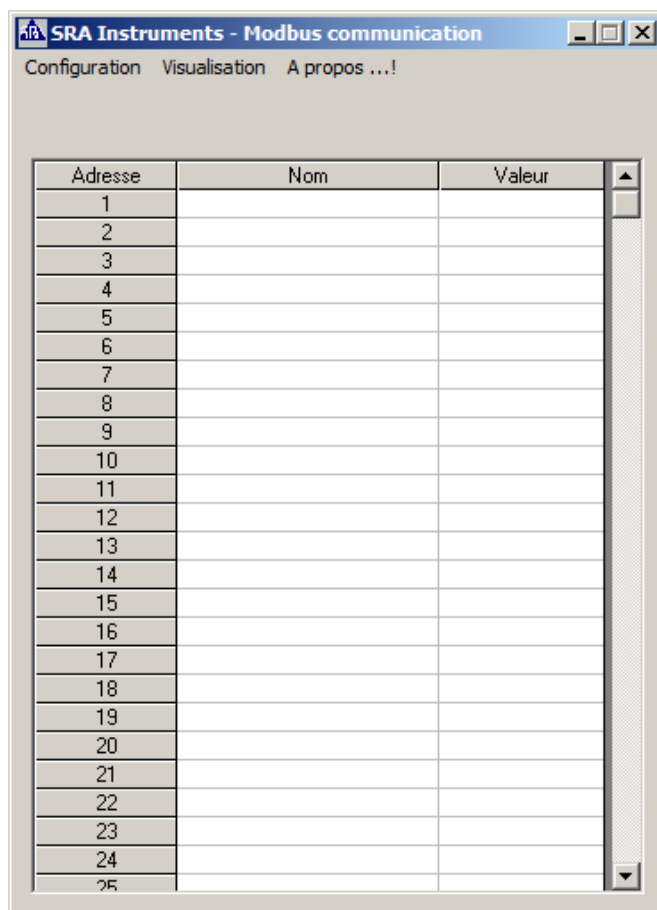
Le logiciel SRAMODBUS permet d'assigner une adresse et un facteur d'échelle pour chaque variable. Ce logiciel opère en tâche de fond et, en fonctionnement normal, sa fenêtre est masquée.

Si le logiciel SRAMODBUS s'exécute correctement, l'icône SRA Instruments doit être présente dans la zone de notification.



Effectuez un clic-droit sur l'icône et cliquez sur **Agrandir**. La fenêtre suivante s'ouvre :





Il est possible de donner un nom de variable ainsi qu'une valeur pleine échelle pour chacune des 8192 adresses que la base peut gérer.

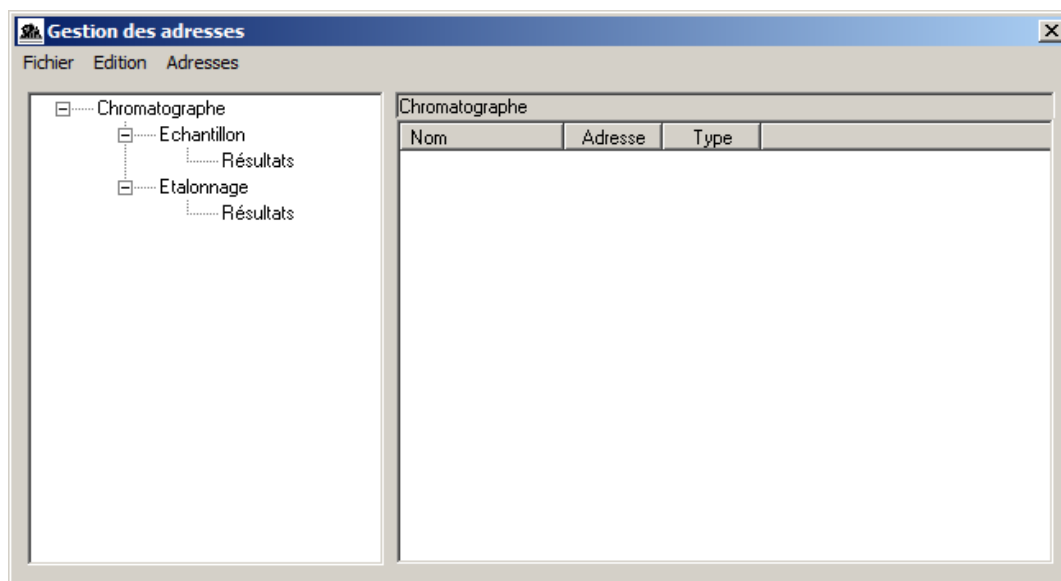
Les données sont séparées en 3 niveaux :

- Les variables système de l'analyseur : "**Chromatographe**"
- Les variables système de l'analyse : "**Echantillon / Etalonnage**"
- Les valeurs relatives aux constituants et aux calculs : "**Résultats**"

A chaque donnée transférée sont attribués une adresse, un type de valeur et pour les résultats, un coefficient lorsqu'ils sont soumis sous forme d'entier (court ou réel).

Ce paramétrage s'effectue directement au niveau du logiciel SRAMODBUS par le menu "**Configuration / Adresses**".





Dans un premier temps, il est préférable de tester si la communication est correcte (voir Chap. 22 – Annexe concernant les tests du Modbus).

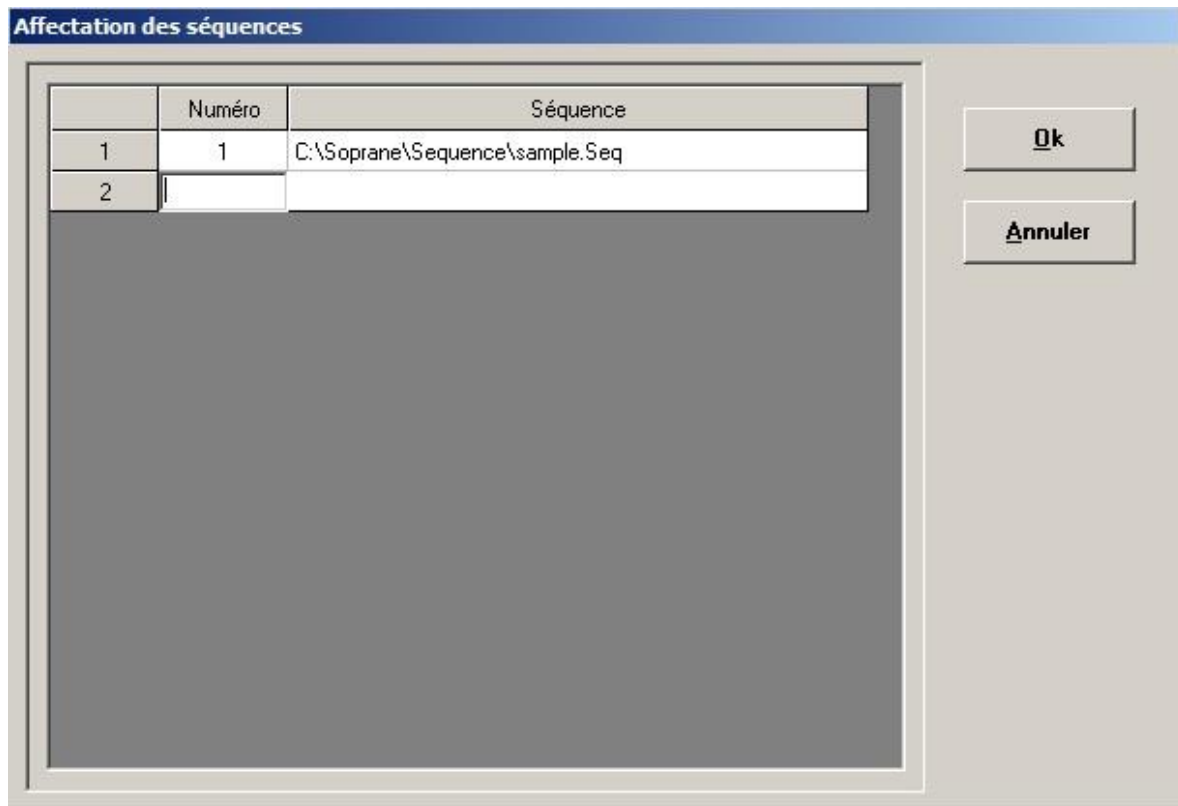
19.2.1 Variables système de l'analyseur

Les variables pouvant être utilisées sont :

- **Flag stream** : dans le cas d'une application multivoies, cette valeur indique le numéro de la voie analysée correspondant aux résultats affichés.
- **Type analyse** : cette valeur indique le type d'analyse effectuée, soit une mesure (0), soit une calibration.
- **Alarme** : cette valeur indique les différentes alarmes obtenues en cours de l'analyse dans le logiciel Soprane. Elle peut prendre plusieurs valeurs, ces valeurs sont obtenues suivant une combinaison de bits.
 - 0 : aucune alarme
 - Bit 1 : défaut chromatographe
 - Bit 2 : cycle à l'arrêt
 - Bit 3 : méthode invalide ou inconnue
 - Bit 4 : connexion défectueuse avec le chromatographe
 - Bit 5 : traitement des résultats impossible
 - Bit 6 : défaut débit échantillon (option)
 - Bit 7 : défaut avec le sélecteur de voie ou la vanne multi-positions (option)
 - Bit 8 : défaut de concentration sur un des résultats
 - Bit 9 : défaut d'étalonnage
- **Bit de vie** : cette variable permet de surveiller la transmission. Sa valeur est actualisée à chaque seconde.
- **Status** : cette variable permet de surveiller le cycle de Soprane. Elle peut prendre les valeurs suivantes :
 - 0 : Attente
 - 1 : Test ready chromatographe
 - 2 : Attente start
 - 3 : Attente injection



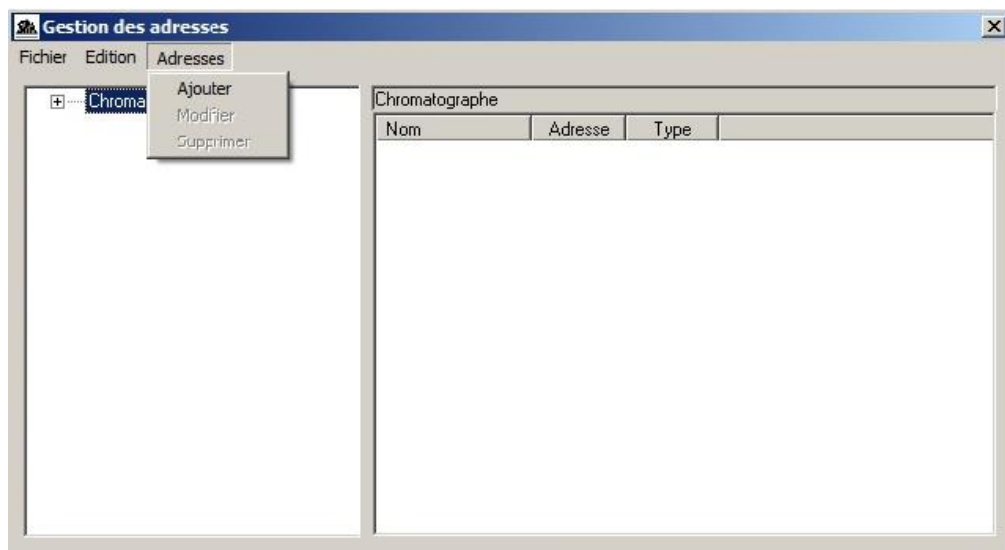
- 4 : Analyse en cours
 - 5 : Récupération des points
 - 6 : Post-traitement
 - 7 : Analyse finie
 - 8 : Traitement en cours
 - 9 : Calculs en cours
 - 10 : Régénération
 - 11 : Traitement des erreurs
- **GC Ready** : cette variable permet de connaître l'état du chromatographe. Elle peut prendre les valeurs suivantes :
 - 0 : défaut
 - 1 : non prêt
 - 2 : prêt
 - **Analyse** : cette variable est utilisée pour lancer des analyses via Soprane. Elle peut prendre plusieurs valeurs :
 - 0 : Aucune analyse demandée ou arrêt du cycle après l'analyse en cours.
 - 1 : Lancement des analyses en mode simple analyse.
 - 2 : Lancement des analyses en mode séquence unique.
 - 3 : Lancement des analyses en mode automatique.
 - 4 : Lancement des analyses en mode étalonnage.
 - **Temps analyse** : indique à l'instant t, le temps écoulé depuis le début de l'analyse.
 - **Séquence/nombre** : cette variable est utilisée pour indiquer le nombre d'analyses demandées dans les cas d'une demande d'analyse type 1. Pour les autres types, elle indique le numéro de la séquence que l'on souhaite effectuer. Cette affectation est effectuée dans le logiciel Soprane – Setup par l'intermédiaire du menu "Options / Affectation des séquences :



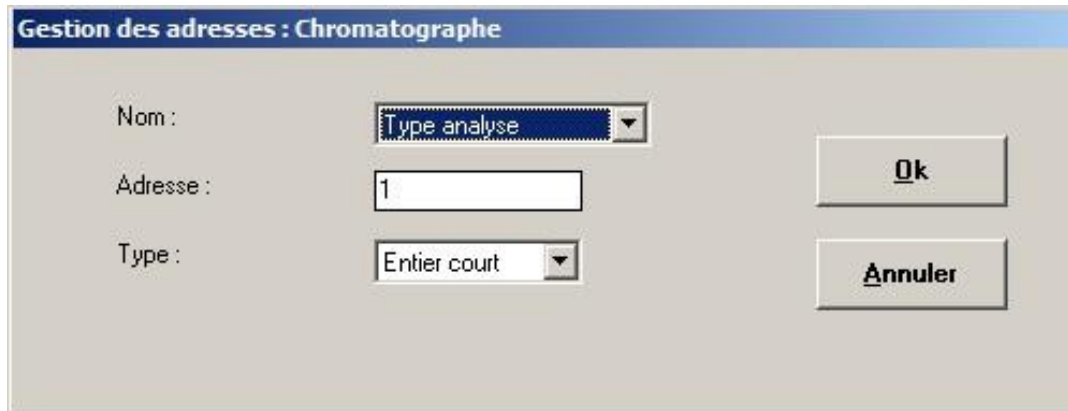
A noter, si cette variable a une valeur nulle, soit les analyses ne sont pas lancées soit les analyses sont stoppées à la fin de l'analyse en cours.

Pour ajouter ces variables :

- Sélectionnez "Chromatographe" en cliquant dessus
- Dans la barre de menus, sélectionnez "Adresses / Ajouter"



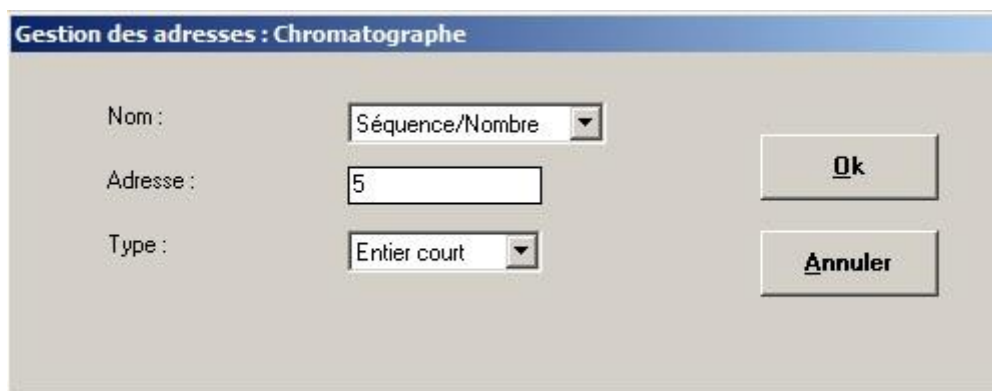
- Dans la fenêtre qui s'affiche, sélectionnez le nom de la variable, tapez le numéro d'adresse et sélectionnez le type (entier court, entier long, réel)



La notion de pleine échelle est ignorée pour ces variables.

Pour lancer des analyses, il suffit de mettre une valeur dans la variable Analyse et Séquence/Nombre. Les analyses sont effectuées tant que la valeur de la variable Analyse n'est pas changée et nulle. Vous pouvez changer à volonté le numéro de la séquence.





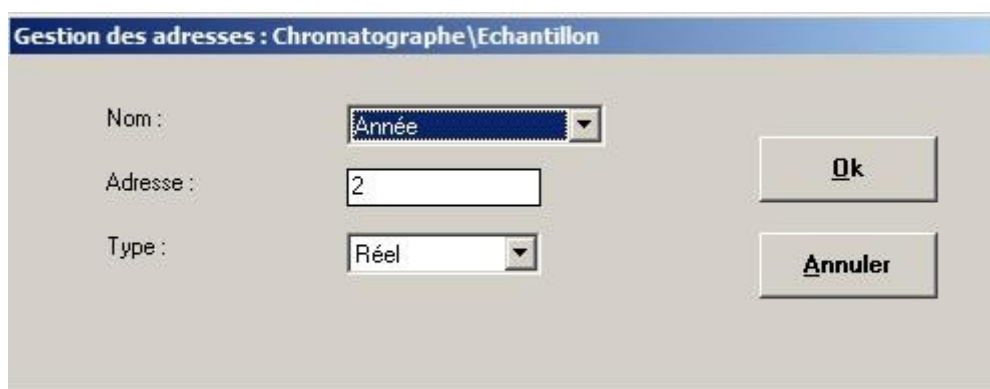
19.2.2 Variables système de l'analyse

Les variables pouvant être utilisées sont :

- **L'année** de l'analyse
- **Le mois** de l'analyse
- **Le jour** de l'analyse
- **L'heure** de l'analyse
- **Les minutes** de l'analyse
- **Les secondes** de l'analyse
- **Les données prêtes** : SRAModbus utilise cette variable et la passe à 1 pour indiquer que les résultats de l'analyse sont disponibles. C'est à l'ordinateur distant de la remettre à 0 lorsqu'il a lu ces valeurs.
- **L'alarme composants** : la valeur de cette variable est décomposée en 16 bits. Si une alarme de Soprane est déclenchée, le bit correspondant à cette alarme sera actif.

Pour ajouter ces variables le principe est le même que précédemment :

- Sélectionnez "Echantillon" ou "Etalonnage" en cliquant dessus
- Dans la barre de menus, sélectionnez "Adresses / Ajouter"
- Dans la fenêtre qui s'affiche, sélectionnez le nom de la variable, tapez le numéro d'adresse et sélectionnez le type (entier court, entier long, réel)



19.2.3 Valeurs relatives aux constituants et aux calculs

SRAMODBUS offre la possibilité de choisir parmi un éventail de 6 valeurs :

- Surface
- Concentration brute

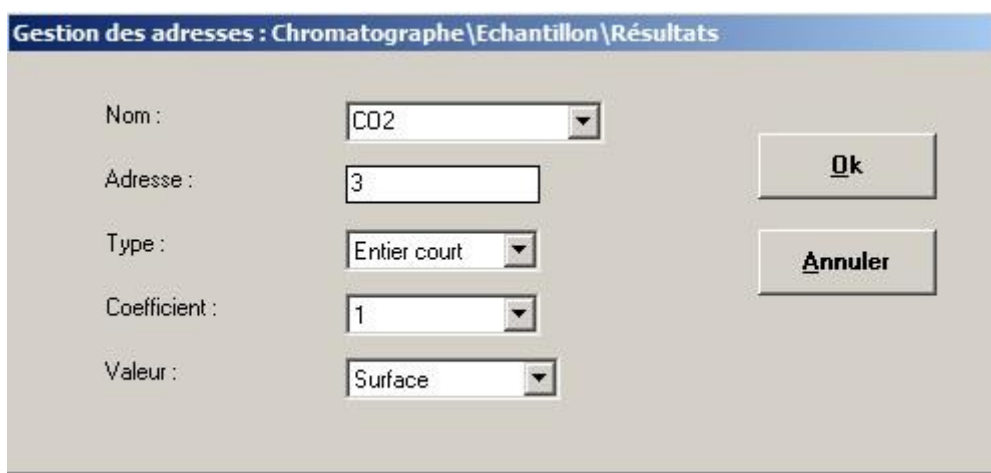


- Concentration normalisée
- Concentration en poids
- Calcul 1
- Calcul 2

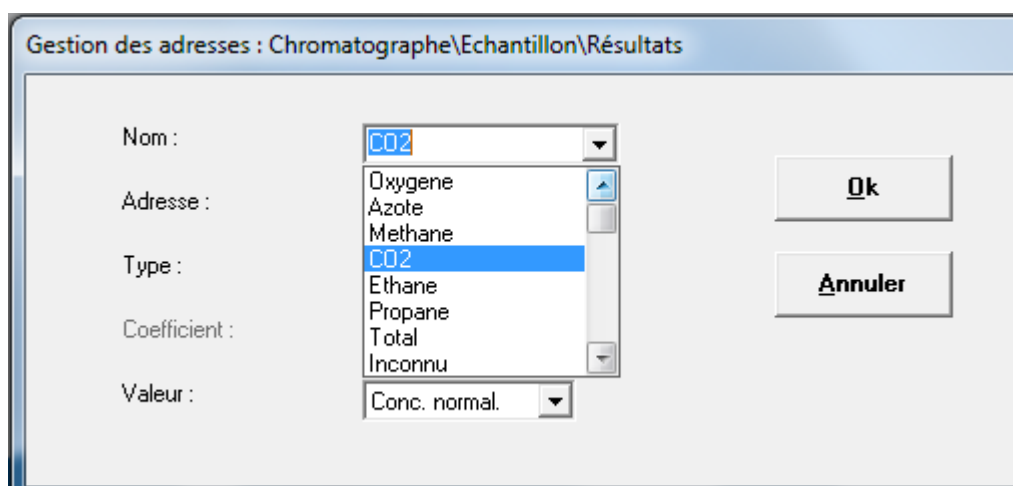
Pour ajouter ces variables le principe est le même que précédemment :

- Sélectionnez "Résultats" en cliquant dessus
- Dans la barre de menus, sélectionnez "Adresses / Ajouter"
- Dans la fenêtre qui s'affiche, sélectionnez le nom de la variable, tapez le numéro d'adresse et sélectionnez le type (entier court, entier long, réel)

Le nom du constituant (qui doit être EXACTEMENT LE MEME que ce qui est programmé dans la table des constituants de SOPRANE) doit être inscrit dans le combo box.



Si vous avez effectué des analyses auparavant et que les composants sont correctement identifiés, la liste des composants sera disponible.



Pour les composants, si vous utilisez le type 'Entier court' ou 'Entier long', la liste 'Coefficient' est accessible. Ce coefficient permet de transférer les décimales de la valeur. En effet, les valeurs transmises avec ce choix de 'type' sont toujours des valeurs entières et donc les décimales sont supprimées. Par exemple, si vous voulez avoir deux chiffres après la virgule, l'astuce est de fixer le coefficient à 100. La valeur sera alors



multipliée par 100 avant l'envoi et il suffira de diviser par 100 la valeur reçue pour obtenir une valeur avec deux décimales. **Attention, la valeur maximale envoyée ne peut pas dépasser 65535 avec le type 'entier court'** donc il est nécessaire de configurer correctement ce coefficient en fonction de l'unité du composant. Cette valeur maximale peut être modifiée avec la valeur 'Plaine échelle' du menu "**Configuration / Options**" (voir § 19.2.4).

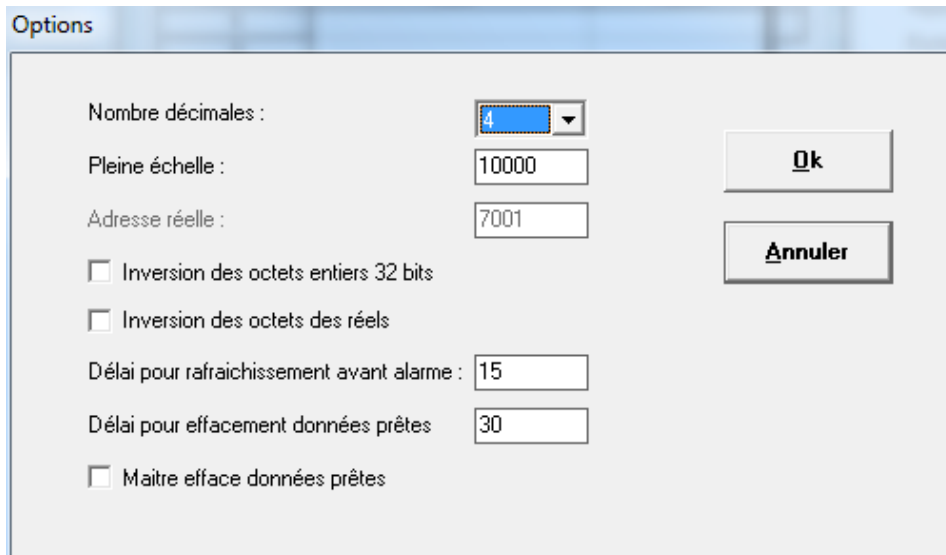
SOPRANE peut effectuer des calculs post-analytiques. Ces calculs sont, par exemple, la masse molaire, la masse volumique, la densité, les capacités calorifiques, ... Deux jeux de calculs sont utilisables, les calculs pouvant éventuellement être les mêmes mais réalisés dans des conditions de température ou de pression différents.

Si la valeur correspond à un calcul effectué dans Soprane, il est nécessaire de sélectionner la valeur Calcul 1 ou Calcul 2.

19.2.4 Options

- **Nombre de décimales** : permet de paramétrer le nombre de décimales à visualiser pour l'affichage de toutes les valeurs de la fenêtre principale du logiciel.
- **Plaine échelle** : En mode RTU, et si le format des valeurs est d'entier 16 bits il est nécessaire d'indiquer une valeur pleine échelle qui est utilisée pour convertir la donnée en échelle 0-10000 ou 0-65535. Dans ce mode, la valeur représentant le constituant ou le calcul est transmise après avoir été convertie en un nombre dans la gamme 0-10000 ou 0-65535.
Supposons un constituant dont la concentration est 5. La valeur d'échelle programmée est supposée être 20. Nous sélectionnons ici une échelle de 10000, ce qui signifie que 20 devient 10000. La valeur transmise à l'ordinateur hôte sera de 2500.
- **Adresse réelle** : Si vous avez opté pour une transmission des résultats en mode ASCII (mode Daniel), les valeurs ne sont pas converties. Le logiciel demande alors une adresse de variable réelle. SRAMODBUS considère que toutes les adresses inférieures à cette adresse correspondent à des variables entières (stockées sur 16 bits), et toutes les adresses supérieures correspondent à des variables réelles stockées sur 32 bits.
- **Inversion des octets entiers 32 bits** : si l'option est cochée, le poids faible et le poids fort des valeurs transmises sous le format entier 32 bits sont inversés.
- **Inversion des octets des réels** : si l'option est cochée, le poids faible et le poids fort des valeurs transmises sous le format réel sont inversés.
- **Délai pour rafraîchissement avant alarme** : si les valeurs ne sont pas rafraîchies au bout de ce délai, SRAMODBUS remonte une alarme de non rafraîchissement.
- **Délai pour effacement données prêtes** : en fin d'analyse, le flag Données prêtes passe à 1. Au bout du délai paramétré, le flag repasse à 0. Si le délai est à 0, cette option n'est pas activée.
- **Maître efface données prêtes** : si l'option est cochée, c'est au maître de passer le flag Données prêtes à 0. Autrement, lorsque Soprane relance une analyse, le flag repasse automatiquement à 0.





19.3 Mode visualisation

Le menu "**Visualisation / Résultats**" permet d'afficher les adresses correspondant aux résultats des analyses.

Le menu "**Visualisation / Valeurs**" permet d'afficher l'ensemble de la table des données mémorisées dans la base sous le format de valeurs hexadécimales, entières ou décimales.

Adresse	Nom	Valeur
1	Analyse	0
2	Séquence/Nombre	0
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	Année	0
11		
12		
13		
14		
15		
16		
17		
18		
19		
20	CO	0.0
21	CO2	0.0
22		
23		



20. Annexe I : paramètres et erreurs d'intégration

20.1 Commentaires à propos de l'intégration

Il est important de bien comprendre comment fonctionne l'intégrateur et quels sont les effets consécutifs à l'utilisation de mauvais paramètres ou événements d'intégration.

Pendant l'analyse, le signal est échantillonné à une fréquence suffisante pour assurer une mesure correcte. La fréquence (20, 50 ou 100 Hz) à laquelle cet échantillonnage est effectué est indiquée dans la méthode d'analyse. Toutes les valeurs sont archivées pour l'affichage en temps réel, pour l'intégration et pour un éventuel retraitement ultérieur.

L'intégration est réalisée en plusieurs étapes :

- D'abord, le signal est examiné pour détecter tous les points où il se passe "quelque chose". Il s'agit du début d'un pic, d'un sommet ou d'une fin. A ce moment, un tableau est mémorisé avec toutes les données concernant les pics détectés.
- Ensuite, ces pics détectés sont inspectés en détail en fonction de ce que l'utilisateur souhaite faire. Est-ce que le début ou la fin d'un pic doit être assimilé à la ligne de base ou à une vallée ? Faut-il regrouper le pic avec celui qui précède ou celui qui suit ? Où est-il pertinent de placer la ligne de base ? Doit-on rejeter le pic ?, ...
- Enfin, tous les calculs permettant de déterminer la surface, la hauteur, le temps de début, la valeur de début, le temps de rétention, ... sont effectués et les résultats sont stockés dans une table de pics intégrés.

Un autre processus est alors activé pour identifier les pics et calculer les concentrations ou les facteurs de réponse.

La détection des pics constitue la principale partie du processus d'intégration. Si l'on ne détecte pas les pics, il est absurde de chercher à en corriger la surface. Si l'on détecte des pics là où il n'y a que du bruit de fond, le problème est identique : rien ne permettra d'affirmer que la valeur de concentration obtenue est représentative de la présence d'un constituant.

En conséquence, durant la phase de détection des pics, il est essentiel d'utiliser des paramètres de détection corrects.

20.2 La détection des pics

La détection des pics utilise un algorithme mathématique basé sur le calcul des dérivées première et seconde du signal.

Parce qu'il n'est pas nécessaire d'avoir la même précision que pendant l'acquisition, et principalement parce qu'il faut filtrer un éventuel bruit de fond, les valeurs obtenues lors de l'acquisition (tranches de 1/20ième, 1/50ième ou 1/100ième de secondes) sont regroupées en tranches plus larges. Les calculs sont opérés sur ces tranches élargies et font intervenir un nombre plus ou moins important de ces tranches.

A chaque fois que l'utilisateur autorise la détection des pics (programmation de l'évènement PD, Peak Detection), ou modifie la largeur de pic (programmation de l'évènement SAP, Set Absolute Peak width, ou de l'évènement SRP, Set Relative Peak width), ou modifie la sensibilité de pente (Programmation de l'évènement SAS, Set Absolute Sensitivity, ou de l'évènement SRS, Set Relative Sensitivity) le système détermine la largeur des tranches regroupées et le nombre de ces tranches à utiliser lors des calculs.



L'algorithme est optimisé lorsque le système dispose de suffisamment de valeurs pour voir les variations de la courbe sans perdre son temps à effectuer des calculs inutiles.

Le paramètre principal est la largeur de pic et une valeur "correcte" est la largeur exprimée en secondes et mesurée à mi-hauteur.

Il est facile de déterminer cette largeur de pic : les coordonnées de la souris peuvent être visualisées dans l'angle inférieur gauche de la fenêtre. Ces coordonnées sont directement exprimées en microvolts et en secondes.

Deux remarques :

- Le pic est supposé être une courbe de Gauss. Dans la plupart des cas, le pic est asymétrique. Si le pic est très asymétrique, le paramètre largeur de pic devra être réduit. Ce paramètre peut aussi être la valeur de temps séparant le début du sommet du pic.
- La valeur retenue peut être plusieurs fois plus grande ou plus petite que la valeur réelle. Le processus d'intégration est suffisamment souple pour conduire à un résultat correct à partir d'un paramètre approximatif.

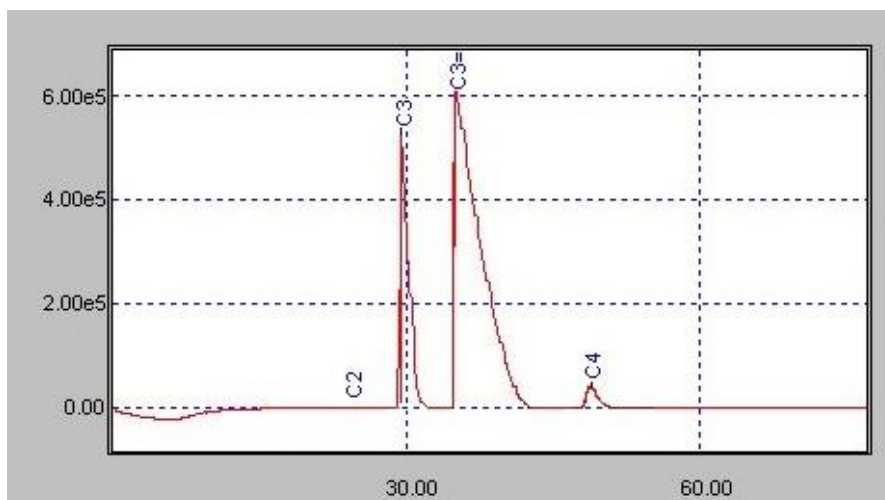
La valeur de seuil ou de sensibilité de pente doit correspondre à la réalité. Si cette valeur est trop élevée, les pics ne sont pas détectés ou la correction de ligne de base n'est pas satisfaisante. Si elle est trop faible, le bruit est intégré. Il est possible de déterminer une valeur approximative à partir de la courbe en utilisant la souris et les coordonnées de 2 points. La bonne valeur est proche du rapport différence de signal sur différence de temps. Là aussi, le processus d'intégration est en mesure de s'adapter.

Si la concentration d'un constituant peut varier, il est préférable d'essayer plusieurs valeurs à partir de plusieurs chromatogrammes avant d'imposer une valeur. De la sorte, et puisque les temps de rétention peuvent fluctuer lorsque les concentrations varient, ces essais seront utiles pour déterminer les temps auxquels les événements devront être programmés.

20.3 Intégration effectuée avec de mauvais paramètres

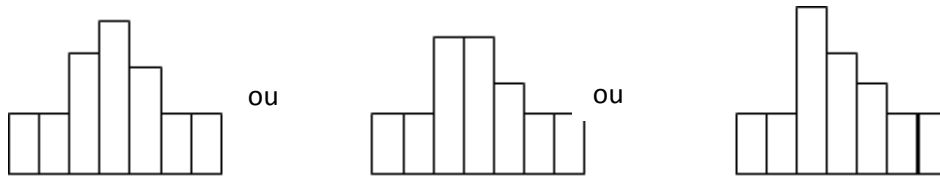
Nous souhaitons intégrer les pics du chromatogramme ci-dessous. Ils sont très asymétriques, et le pic référencé C3 par exemple mesure une seconde à mi-hauteur mais il n'y a que 0,2 seconde pour aller du début au sommet du pic.

Ainsi, pour détecter correctement, avec la meilleure précision, la première partie de la courbe, la valeur de largeur de pic à utiliser pour le paramètre SAP devrait être de 0,2 secondes. Si le pic était symétrique, cette valeur serait de 1 seconde.

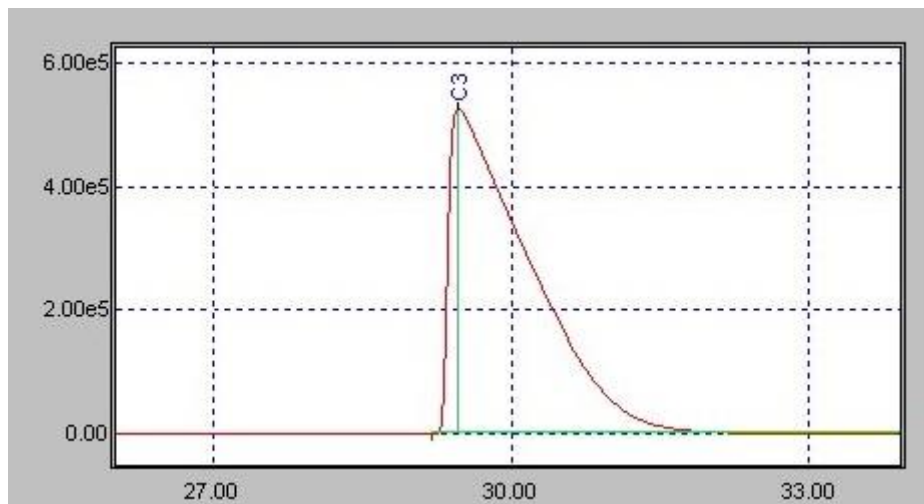


Supposons que l'on programme une valeur beaucoup plus grande, par exemple 4 secondes. Nous voulons détecter les pics, donc, deuxième erreur, on utilise la sensibilité la plus basse possible, soit 0,001 $\mu\text{V/S}$.

Avec ces valeurs, le processus d'intégration ne dispose que de 3 ou 4 valeurs pour représenter le pic. Le système est très sensible, mais à cause des variations du temps de rétention, le pic peut être représenté selon l'une des figures ci-après :



Dans la majorité des cas, SOPRANE sera capable de détecter correctement le début, le sommet et la fin du pic, mais quelque fois, le processus considère avoir une ligne de base au sommet et il divise le pic en 2 pics mal résolus avec le même temps de rétention.



La première chose à faire lorsque l'on est confronté à ce type d'intégration non souhaitée est de vérifier la valeur des paramètres, notamment la largeur de pic et la sensibilité de pente.

Nous utiliserons maintenant une valeur "acceptable" de 1 seconde comme paramètre SAP. Etant donné l'asymétrie, la meilleure valeur devrait être 0,2 secondes pour la première partie du pic (du début au sommet) et 2 secondes pour la seconde partie (du sommet à la fin). Une seconde paraît être un bon compromis, puisque, avec cette valeur, nous sommes assurés de disposer de 2 points au cours de la première partie du pic : après regroupement, la taille des tranches est environ 1/10^{ème} de la valeur programmée comme largeur de pic.

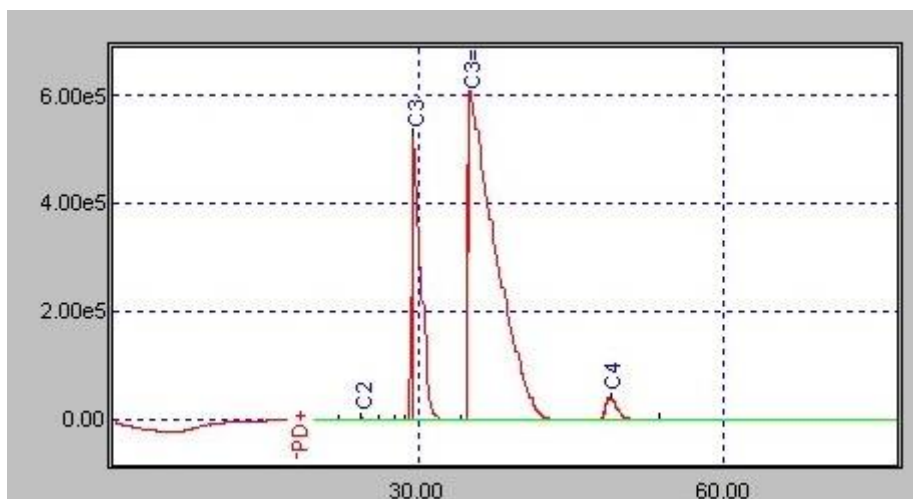
Deux points constituent le minimum pour être certain que SOPRANE verra la partie croissante du pic.

Si la sensibilité de pente est imposée à la valeur la plus faible possible, il est pratiquement impossible de retrouver la ligne de base. Le pic dure tant que le signal varie.

Le chromatogramme ci-après a été intégré avec ces valeurs.

Dès que l'intégration est autorisée (Paramètre PD ON) le système détecte un pic et il n'est jamais en mesure de retrouver la ligne de base.

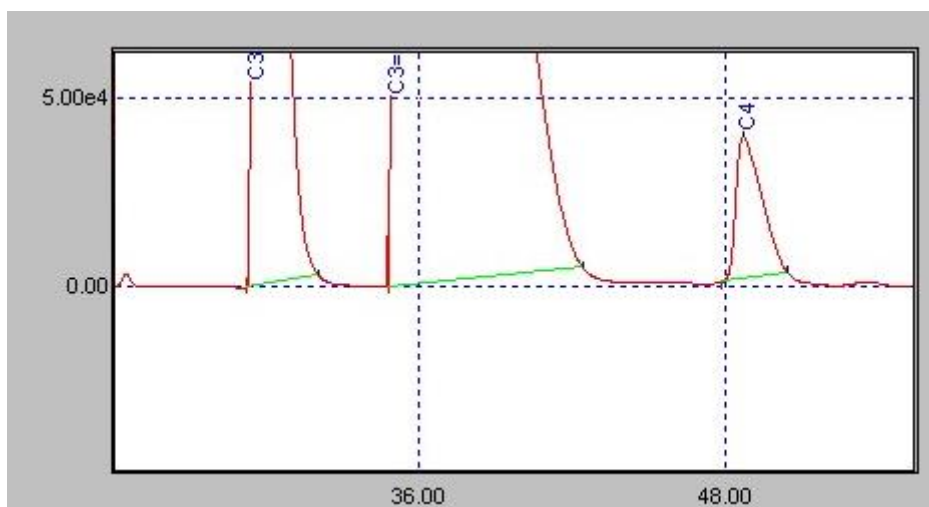




Si l'on effectue l'opération inverse en utilisant une valeur trop grande pour le paramètre de sensibilité de pente, par exemple 1000 $\mu\text{V/s}$, les pics sont correctement détectés mais le système considère avoir retrouvé la ligne de base avant la fin effective du pic.

Le fait que les pics soient correctement détectés est la conséquence de l'asymétrie qui fait que la pente est très élevée durant la partie croissante du pic. Avec un pic plus symétrique un défaut similaire aurait été observé au début du pic.

Le chromatogramme ci-après a été intégré avec ces valeurs.

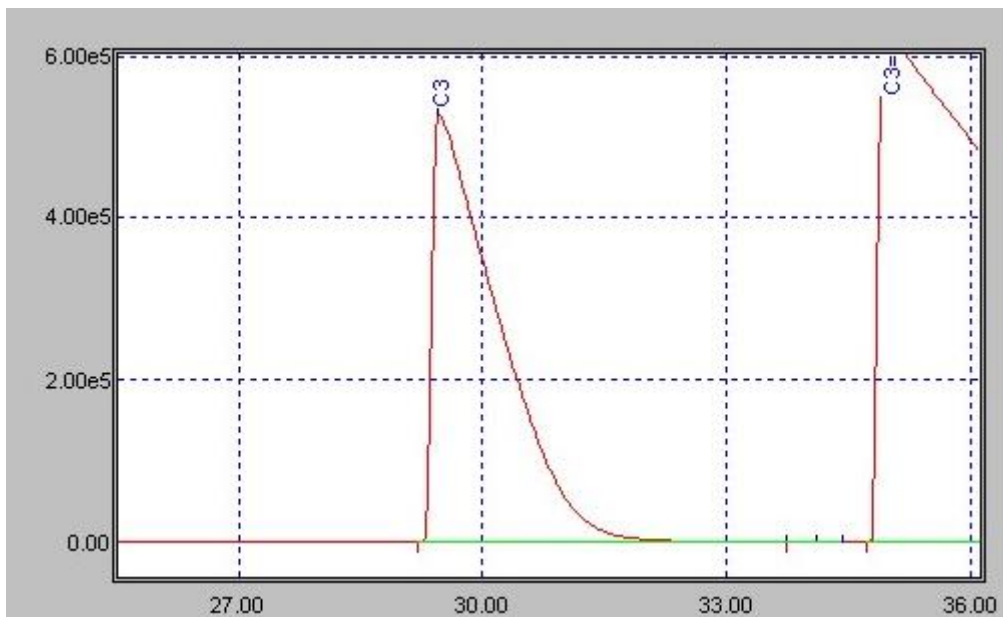


Si l'analyseur utilise plusieurs flux et une large gamme de concentrations, nous devons ajuster le paramètre de sensibilité de pente de manière à avoir une bonne détection des pics dans tous les cas de figure.

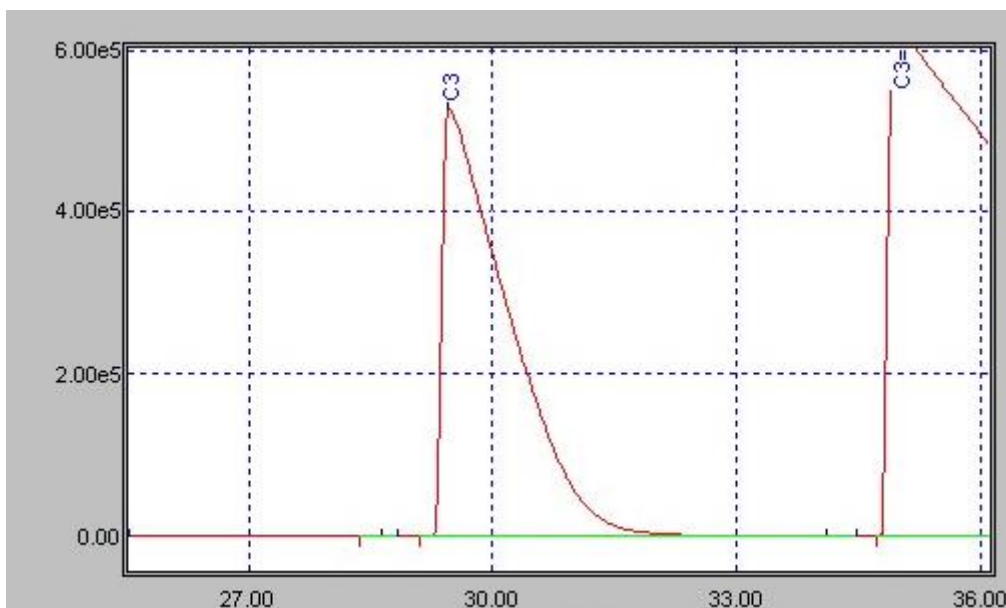
Des valeurs autres de concentrations et surtout de rapports de concentrations impliquent des pics pouvant avoir des allures différentes, et nous devons prendre en compte ces modifications.

La même analyse a été intégrée avec différentes valeurs pour bien montrer la capacité de SOPRANE à obtenir un résultat correct avec des valeurs plusieurs fois trop grandes ou trop petites.





L'intégration du chromatogramme ci-dessus a toujours été réalisée avec une largeur de pic de 1 seconde mais en utilisant une valeur de sensibilité de pente égale à 50 $\mu\text{V/s}$. La fin du pic de C3 est détectée à environ 33,7 secondes.



Cette intégration a été réalisée toujours avec une largeur de pic de 1 seconde et en utilisant une sensibilité de pente de 5 $\mu\text{V/s}$. La fin du pic de C3 est détectée à environ 34,1 secondes. La différence avec le cas précédent n'est pas significative.

Si la concentration varie, la meilleure valeur à utiliser sera peut-être de 20 $\mu\text{V/s}$, ceci dépendant de la gamme de concentrations attendues.

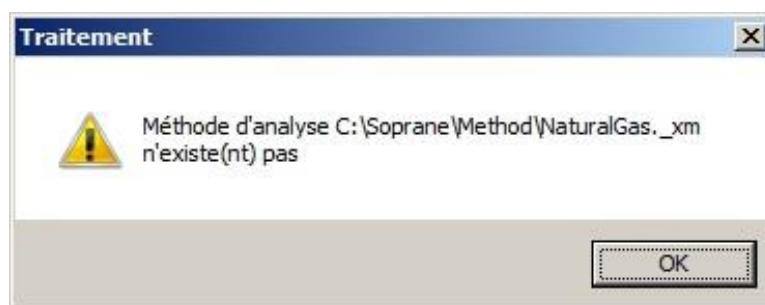


21. Annexe II : Récupération de méthode analyse et traitement à partir d'un chromatogramme

Dans le cas où une méthode a été effacée par erreur, il est possible de récupérer la partie analytique et la partie traitement à partir d'un chromatogramme.

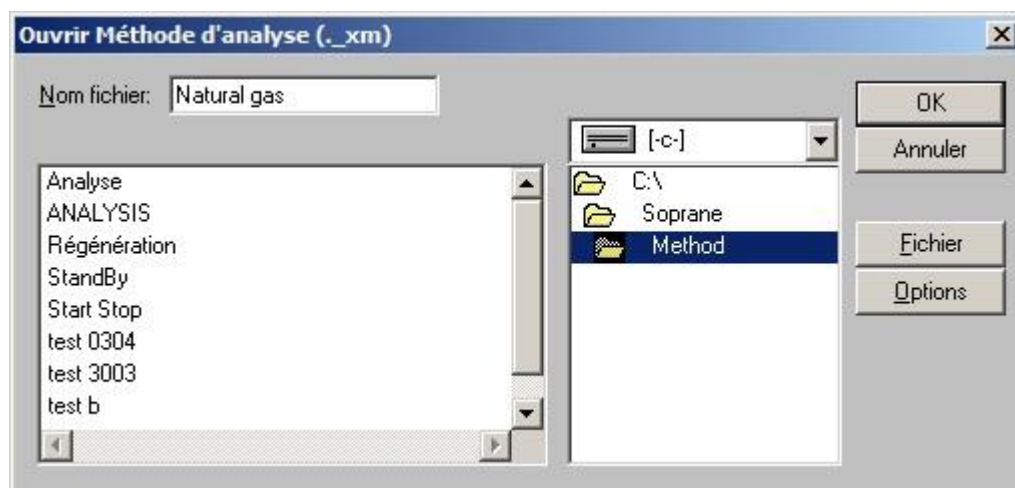
Pour cela suivez les instructions suivantes :

1. Dans la barre de menus de Soprane, cliquez sur l'icône du module Traitement.
2. Cliquez sur le menu "**Analyse / Charger une analyse**" et sélectionnez le chromatogramme.
→ Un message apparaît, indiquant que la méthode n'existe pas.



3. Cliquez sur **Ok**.
→ Le chromatogramme s'ouvre.
4. Cliquez sur le menu "**Méthode / Enregistrer la méthode archivée sous**"

Dans la fenêtre qui s'affiche, renseignez le champ « Nom fichier » avec le nom que vous souhaitez donner à la méthode, puis cliquez sur Ok.



5. Cliquez sur **Oui** dans la ou les fenêtre(s) qui s'affiche(nt) successivement.
6. Cliquez sur le menu "**Méthode / Fermer tous les documents**"
7. Cliquez sur le menu "**Méthode / Ouvrir une méthode**", sélectionnez la méthode et cliquez sur Ouvrir.
8. Cliquez sur le menu "**Analyse / Charger Analyse**"
→ L'analyse est chargée et un message demandant si vous voulez garder la méthode s'affiche :





9. Cliquez sur **Oui**
→ La méthode a été récupérée.



22. Annexe III : Calculs

22.1 Commentaires à propos des calculs

L'intégration des pics conduit à des valeurs de concentration normalisées.

Lorsque l'on utilise les calculs, SOPRANE commence par calculer la masse molaire de l'échantillon par la formule :

$$M_{mol} = \sum_i^n CONC_i * M_{mol_i} / 100$$

Ensuite, SOPRANE calcule la masse volumique idéale, la densité idéale, le pouvoir calorifique inférieur idéal, le pouvoir calorifique supérieur idéal et le facteur de compressibilité du gaz en utilisant les formules suivantes :

$$\text{Masse volumique idéale} = \sum_i^n CONC_i * (M_{mol_i} * P / (R * T)) / 100$$

M_{mol_i} est la masse molaire de chaque constituant,

P est la pression

R est la constante des gaz parfaits (8.31451)

T est la température exprimée en degrés Kelvin.

$$\text{Densité idéale} = \sum_i^n CONC_i * M_{mol_i} / M_{molAir}$$

M_{mol_i} est la masse molaire de chaque constituant,

M_{molAir} est la masse molaire de l'air.

$$PCI \text{ idéal} = \sum_i^n CONC_i * P_{ci} / 100$$

P_{ci} est le pouvoir calorifique inférieur de chaque constituant exprimé en MJ/m³.

$$PCS \text{ idéal} = \sum_i^n CONC_i * P_{cs_i} / 100$$

P_{cs_i} est le pouvoir calorifique supérieur de chaque constituant exprimé en MJ/m³.

$$Z_{\text{sample}} = 1 - (\sum_i^n CONC_i * (1 - Z_i))^{1/2}$$

Z_i est le facteur de compressibilité de chaque constituant.

Le logiciel calcule alors la masse volumique réelle, la densité réelle, le pouvoir calorifique inférieur, le pouvoir calorifique supérieur à partir du facteur de compressibilité du gaz.

$$\text{Masse volumique} = \text{Masse volumique idéale} / Z_{\text{sample}}$$

$$\text{Densité} = \text{Densité idéale} * Z_{\text{air}} / Z_{\text{sample}}$$

Z_{air} est le facteur de compressibilité de l'air.

$$PCI = PCI \text{ idéal} / Z_{\text{sample}}$$

$$PCS = PCS \text{ idéal} / Z_{\text{sample}}$$

L'indice de Wobbe est déterminé ensuite. $Wobbe = PCS / (\text{Densité})^{1/2}$



22.2 Valeurs initiales utilisées par Soprane

Toutes les valeurs sont celles des constituants parfaits à 0 °C, par volume à 0 °C et 1,01325 Bar en respect de la norme ISO/DIS 6976:1995 et du standard expérimental X 20-522.

Masse molaire de l'air : $M_{molAir} = 28,9626$

Facteur de compressibilité de l'air : $Z_{air} = 0,99941$

Constituant	Masse molaire	PCI (MJ/m3)	PCS (MJ/m3)	Z
Hélium	4,0026	0	0	1,0005
Hydrogène	2,0159	10,777	12,788	1,0006
Oxygène	31,9988	0	0	0,999
Azote	28,0135	0	0	0,9995
Méthane	16,043	35,818	39,84	0,9976
Monoxyde de carbone	28,01	12,62	12,62	0,9993
Dioxyde de carbone	44,01	0	0	0,9933
Ethylène	28,054	59,04	63,06	0,9925
Ethane	30,07	63,76	69,79	0,99
Propylène	42,081	85,94	91,98	0,981
Propane	44,097	91,18	99,22	0,9789
Iso-Butane	58,123	118,18	128,23	0,958
N-Butane	58,123	118,61	128,66	0,9572
1 Butène	56,108	113,08	121,42	0,965
Iso-Butène	56,108	112,63	120,67	0,965
Cis 2 Butène	56,108	113,08	121,12	0,961
Trans 2 Butène	56,108	112,91	120,96	0,961
1,2 Butadiène	54,092	109,84	115,87	0,955
1,3 Butadiène	54,092	107,47	113,51	0,966
Néo-Pentane	72,15	145,06	157,12	0,943
Iso-Pentane	72,15	145,69	157,76	0,937
N-Pentane	72,15	146	158,07	0,918
1-Pentène	70,134	140,8	150,86	0,938
Hexane	86,177	173,45	187,53	0,892
Heptane	100,2019	200,87	216,96	0,83
Octane	114,2285	228,28	246,38	0,742
Nonane	128,2285	255,74	275,85	0,613
Décane	142,2817	283,16	305,29	0,434
Water	18,056	0	0	0,93

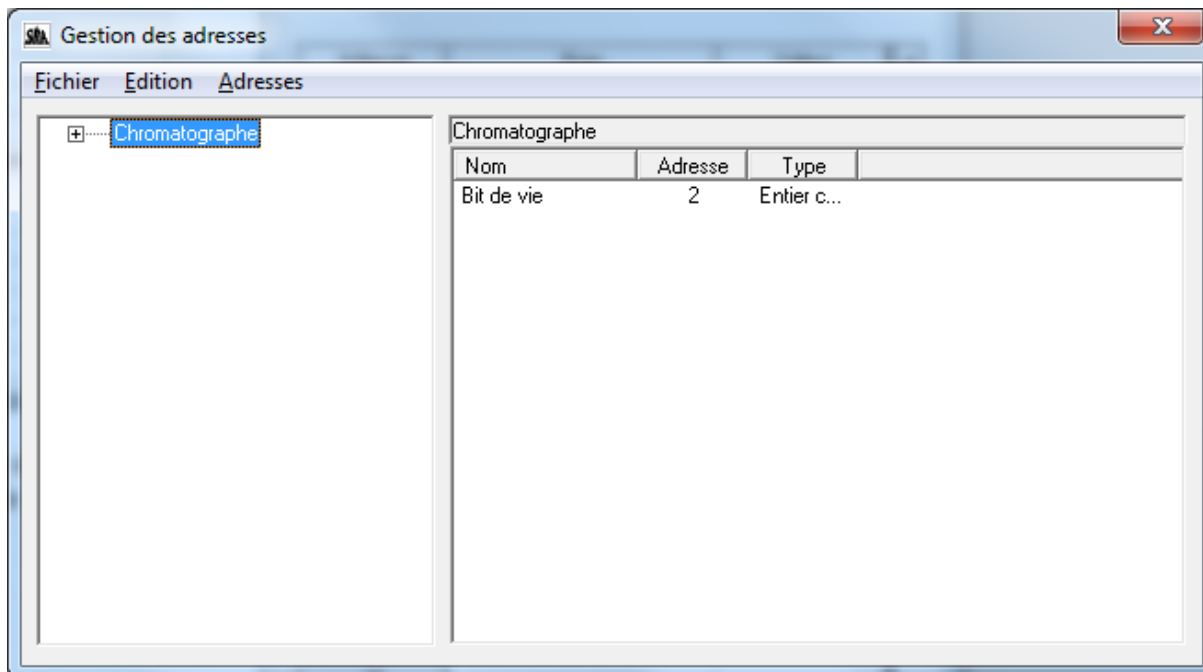


23. Annexe IV : Tests Modbus

23.1 Tests de communication

Dans un premier temps, il est préférable de tester si la communication est correcte.

Configurez le paramètre de bit de vie à l'adresse 2 avec le menu "**Configuration / Adresses**".



Sélectionnez la branche **Chromatographe** et cliquez sur le menu "**Adresses / Ajouter**".



Sélectionnez les paramètres suivants et validez par le bouton Ok.

Sélectionnez le menu "**Fichier / Enregistrer**" puis "**Fichier / Quitter**" pour revenir à l'écran principal.

Depuis votre superviseur :

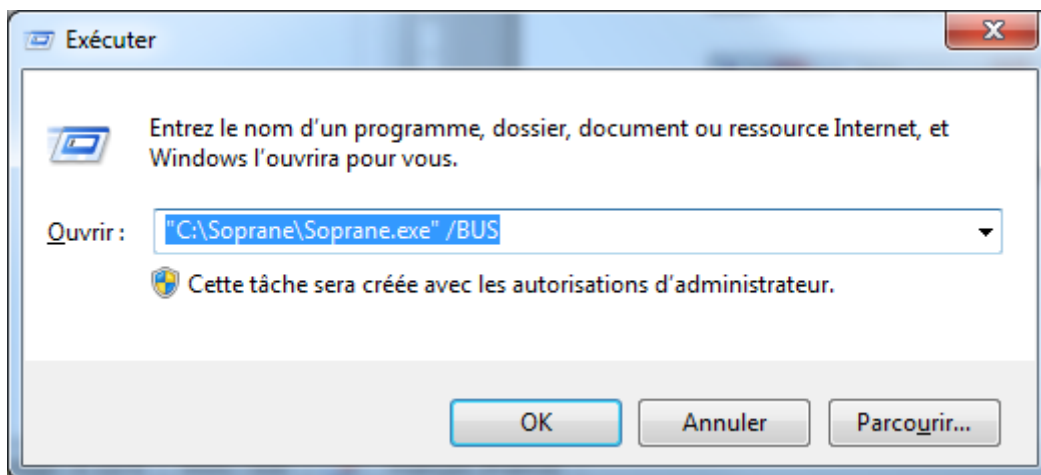


- Vérifiez que la configuration correspond à la configuration définie dans Soprane : support de communication, adresse IP si mode TCP/IP ou protocole de communication (vitesse, parité) et n° esclave si liaison série.
- Programmez une lecture Modbus de 3 premières adresses en entier (adresse 1, 2 et 3). En effet, dans certains cas, il peut y avoir un décalage d'une adresse et donc en définissant une trame de lecture ainsi, ceci vous permettra de vérifier si les numéros d'adresses correspondent. Il est préférable de prévoir un temps de rafraîchissement assez long (> 100 ms voire toutes les secondes) car les valeurs n'évoluent qu'après chaque analyse et ainsi, cette fonction n'utilise pas trop de ressources au niveau du PC.

Si la lecture est correcte, la configuration des adresses est alors envisageable.

23.2 Tests de transmission des valeurs

Les résultats des analyses sont envoyés à chaque fin d'analyse. Malheureusement, ceci n'est pas pratique lors des essais de communication. Il existe une possibilité d'envoyer les résultats après chaque retraitement d'analyses. Pour ceci, il est nécessaire de lancer Soprane depuis le menu Exécuter de Windows en saisissant la ligne suivante :



Ensuite à partir de Soprane, sélectionner le menu "**Traitement / Traitement par lot**", sélectionner la méthode puis l'analyse et valider par Ok. Les résultats sont transmis.

Attention, si vous lancez chaque fois Soprane de cette façon, les résultats seront envoyés à chaque fin d'analyse et aussi à chaque retraitement.



24. Annexe V : Commentaires sur le couplage Soprane – Mass Hunter

Par défaut, Soprane permet d'être couplé au logiciel Msd ChemStation d'Agilent si ce logiciel est installé sur le même ordinateur.

Une version spéciale de Soprane existe, 'Soprane-Couplage', qui permet de coupler Soprane à différents logiciels : Chemstation GC, Mass Hunter, Soprane. Pour les deux premiers, il est nécessaire que ces applications soient installées sur le même ordinateur. Pour Soprane, il doit être installé sur un autre ordinateur. Dans tous les cas, ce couplage permet de regrouper les résultats des deux logiciels sous un seul rapport.

A savoir : tous les commentaires décrits ci-dessous sont aussi valables pour une installation de Soprane avec le logiciel Msd ChemStation. Il n'y a que la partie 'Liaison avec Soprane' qui est différente car elle est par défaut paramétrée avec Soprane.

24.1 Couplage avec Mass Hunter

Soprane peut piloter un MicroGC M3000 Lan, R3000 ou Cp490 et être couplé au logiciel Mass Hunter qui pilote soit un 5977B MSD soit un 5975T LTM-GC/MSD. Il peut aussi piloter un MicroGC Solia qui a la particularité de pouvoir connecter la sortie d'un module à l'analyseur d'Agilent via une vanne de sélection type Valco Vici. Dans tous les cas, c'est Soprane qui lance les analyses sur le MicroGC et sur Mass Hunter via un logiciel intermédiaire. C'est ce logiciel qui récupère les résultats de Mass Hunter et les transfère à Soprane.

24.2 Installation des logiciels

Pour que l'installation s'effectue correctement, Mass Hunter doit être installé et configuré en premier. Puis, vous devez installer Soprane version Couplage sur le même ordinateur.

L'installation de Soprane installe différentes macros au niveau de Mass Hunter et le logiciel intermédiaire CpMsHunter.exe (programme SRA). Après cette installation, il est nécessaire de relancer Mass Hunter afin qu'il prenne en compte les modifications apportées par l'installation de Soprane.

24.3 Liaison avec Soprane

Au niveau de Soprane, le dialogue s'effectue par DDE avec le logiciel CpMsHunter. Il est donc nécessaire de configurer ce dialogue avec PGCSepCp (programme SRA) via le menu "**Instrument / Couplage Analyseur**". Le logiciel vérifie les logiciels installés sur l'ordinateur.

L'option 'Couplage avec Chemstation' n'est valide que si le fichier ChemStation.ini se trouve dans le répertoire Windows.

L'option 'Couplage Solia' n'est valide que si le fichier MsdChem.ini se trouve dans le répertoire Windows.



Les paramètres sont les suivants :

- Nom de l'application : **CpMsHunter**
- Nom rubrique source : **System**
- Nom paramètre commande : **MsCommand**
- Nom paramètre status : **MassStatus**

Sélection des modules

Non couplé
 Couplé avec la ChemStation
 Couplage SOLIA
 Couplé avec un autre analyseur

Nom de l'application :

Nom rubrique source :

Nom paramètre commande :

Nom paramètre status :

Ok
Annuler

A savoir, il est possible de coupler Soprane à Mass Hunter en utilisant l'option 'Couplage avec un autre analyseur' et les mêmes paramètres. La différence est que l'option Solia permet d'utiliser la vanne de sélection des modules pour connecter le MicroGC à la Masse et que pour l'autre option, la vanne n'est pas utilisée et la sélection du module devra se faire manuellement.

Dans le cas de l'option 'Couplage Solia', le menu "**Sélection des modules**" est actif.

Sélection des modules

Position 1 :

Position 2 :

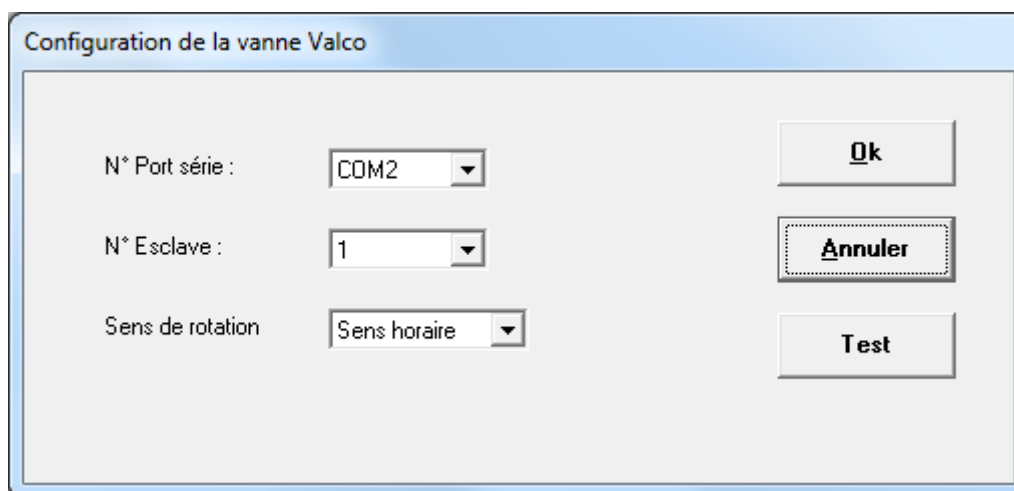
Position 3 :

Position 4 :

Ok
Annuler



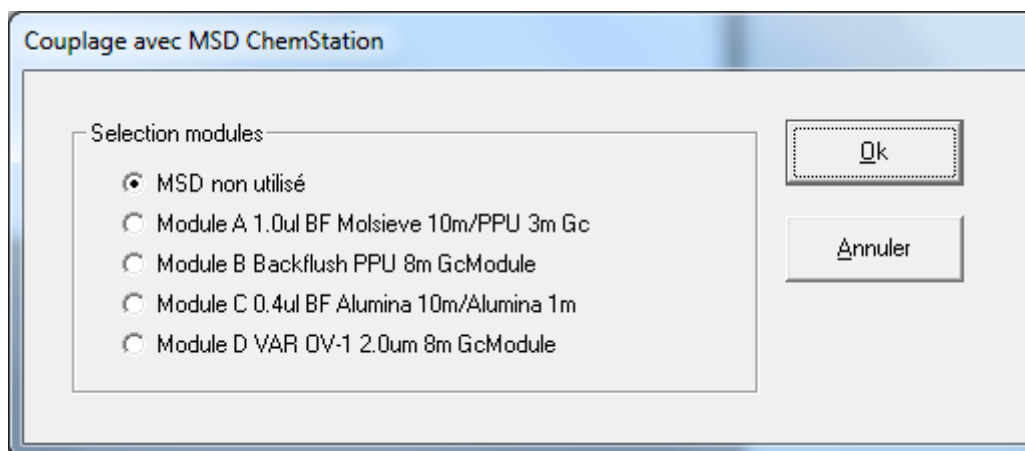
Il permet de renseigner la position utilisée de la vanne pour connecter un module à la Masse. Bien sûr, il est aussi impératif qu'il y ait une vanne Valco configurée via le menu "**Echantillonnage / Vanne Valco**".



24.4 Utilisation avec Soprane

Lorsque la configuration a été réalisée, un menu "**Couplage**" est disponible dans le menu "**Instrument**".

Dans le cas d'un couplage avec un Solia, une fenêtre s'affiche permettant de sélectionner le module à connecter à la Masse.



Si une vanne Valco a été configurée, la sélection du module se fera automatiquement.

L'option 'MSD non utilisé' permet d'utiliser le logiciel Soprane seul sans liaison avec Mass Hunter.

Si le couplage est effectué avec un autre analyseur, le fait de cliquer sur le menu "**Couplage**" active ou désactive la connexion avec le logiciel.

Dans le cas d'un couplage Solia avec une vanne, il est aussi possible de créer des séquences d'analyses qui permettent de changer le module connecté, colonne Chan.



Sequence table : C:\Soprane\Sequence\etal.Seq

	Analysis name	Method	Stream n°	Sampling (secs)	Chan.
1	bout B	So_UCB._xm	2	30	D
2	bout B	So_UCB._xm	2	30	D
3	bout B	So_UCB._xm	2	30	D

Lors du lancement des analyses avec le bouton Start, vous avez plusieurs possibilités pour travailler.

Start of analysis

Start analysis:

- Analysis mode
- Single sequence
- Automatic mode
- Calibration

Number of runs: 3

Sampling (secs): 0

Method: So_Biogaz ppu._xm

Name: blc

Path: D:\Analyses\2017\SAV_171219

Sample name: air

Operator: sra

Interval in minutes between injections: 0.00

Waiting for external start

Only one MSD acquisition

Ok

Cancel



Si vous choisissez le 'mode Analyses', une case à cocher 'Une seule acquisition Msd' est valide.

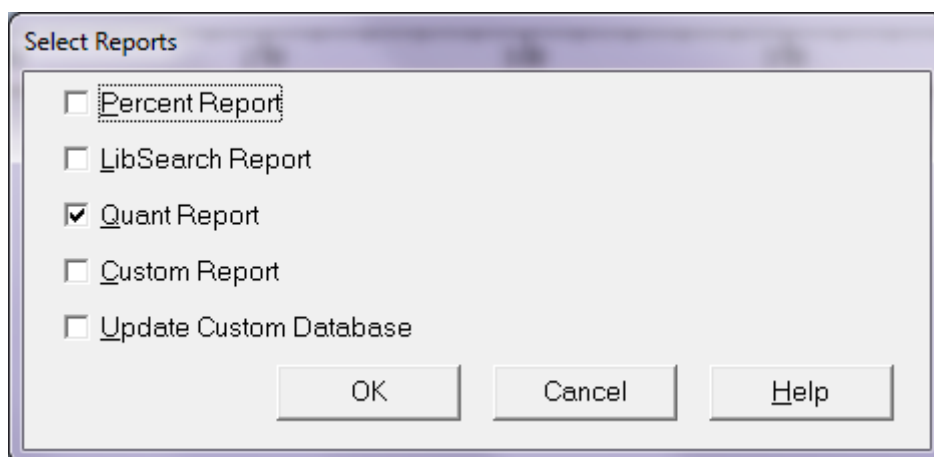
Si elle est décochée, cela permet de lancer le nombre d'analyses défini dans le champ 'Nombre d'analyses'. A chaque fin d'analyse, Soprane attendra la fin d'analyse de Mass Hunter pour en relancer une autre. Dans ce cas, il est préférable que la durée d'analyse de la Masse soit supérieure ou au moins égale à la durée d'analyse du MicroGC. Si elle est cochée, Soprane lancera une analyse au niveau de Mass Hunter et lancera des analyses au niveau du MicroGC tant que l'analyse de Mass Hunter se déroulera.

24.5 Utilisation avec Mass Hunter

Lorsque Mass Hunter est couplé à Soprane, il est possible de récupérer les résultats de cette application **seulement si les analyses sont traitées avec Data Analysis**. Un rapport commun peut alors être généré au niveau de Soprane et les valeurs de Mass Hunter seront intégrées aux fichiers résultats historiques de Soprane.

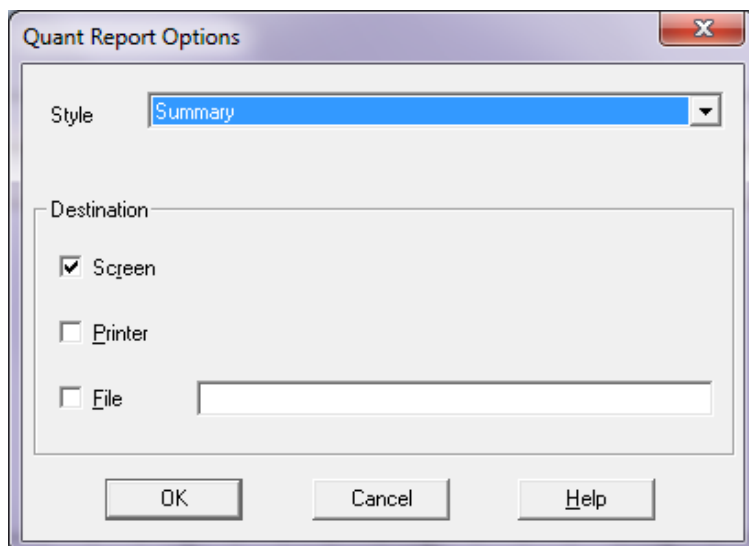
Pour obtenir ce transfert, il est nécessaire de paramétrer correctement la méthode de Mass Hunter afin de générer les résultats. Ce paramétrage s'effectue à partir de l'application Data Analysis.

Sélectionnez le menu "**Method**" puis "**Edit Method**". La fenêtre suivante s'affiche :

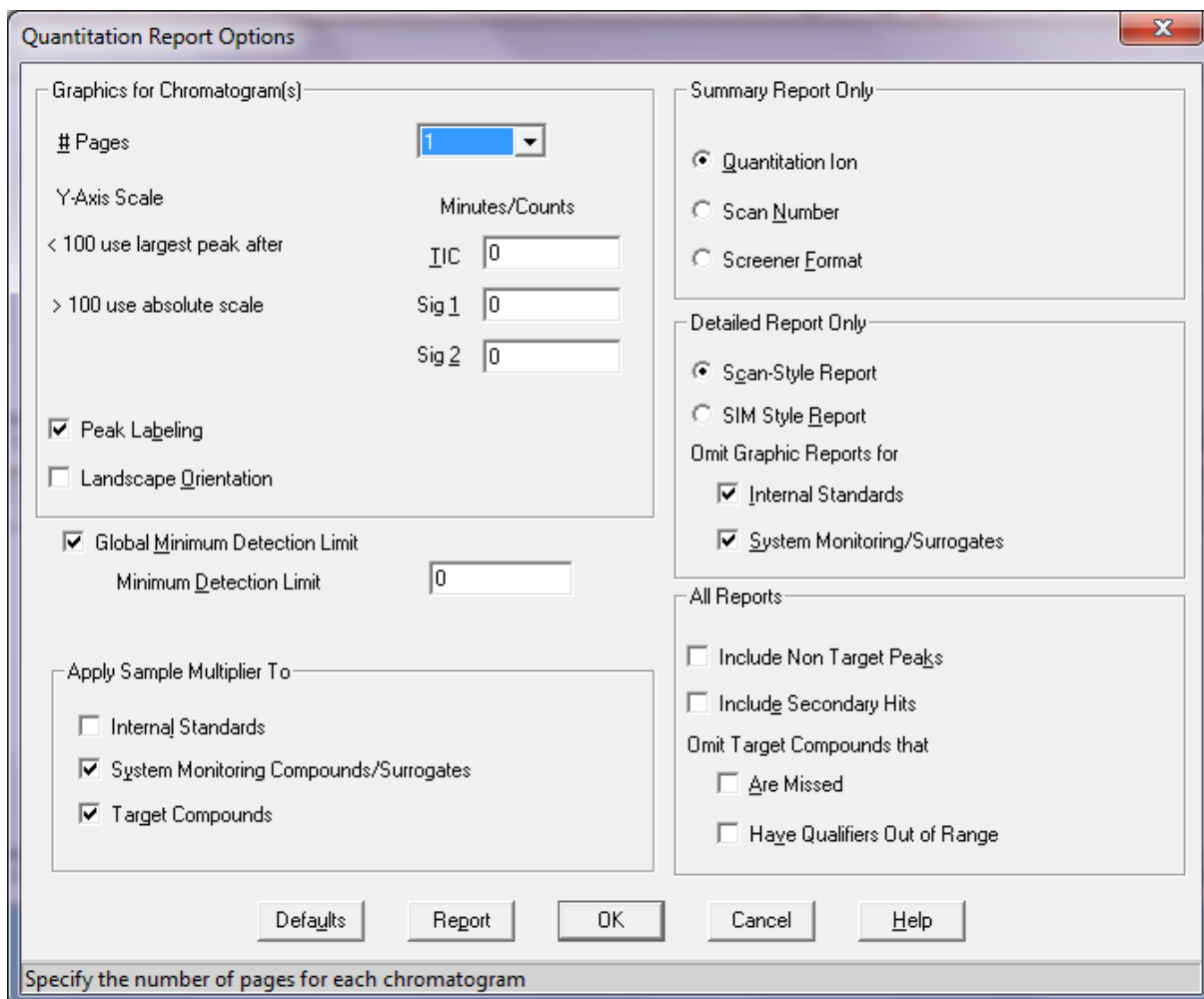


Cochez la case 'Quant Report' et validez avec Ok, la fenêtre suivante s'affiche.





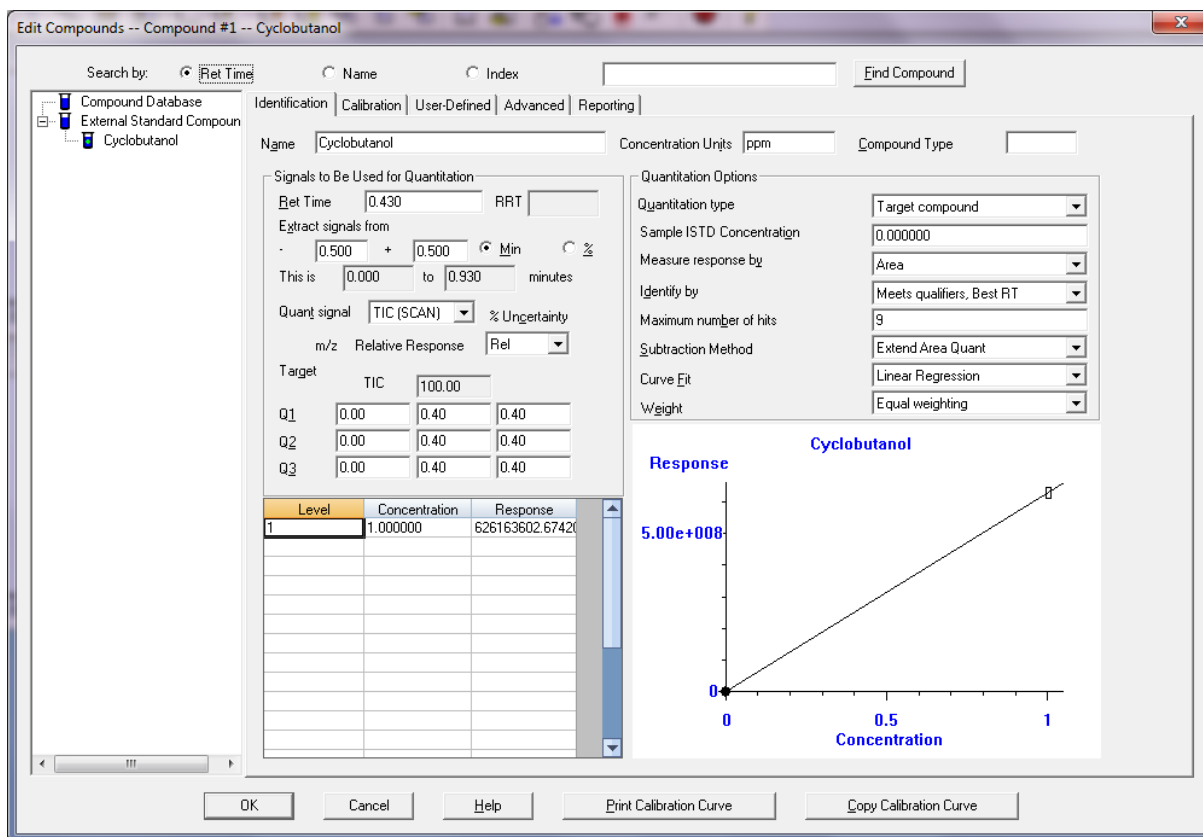
Il n'est pas nécessaire de cocher une des cases, validez par Ok, la fenêtre suivante s'affiche.



Validez par Ok et sauvegardez la méthode pour terminer.



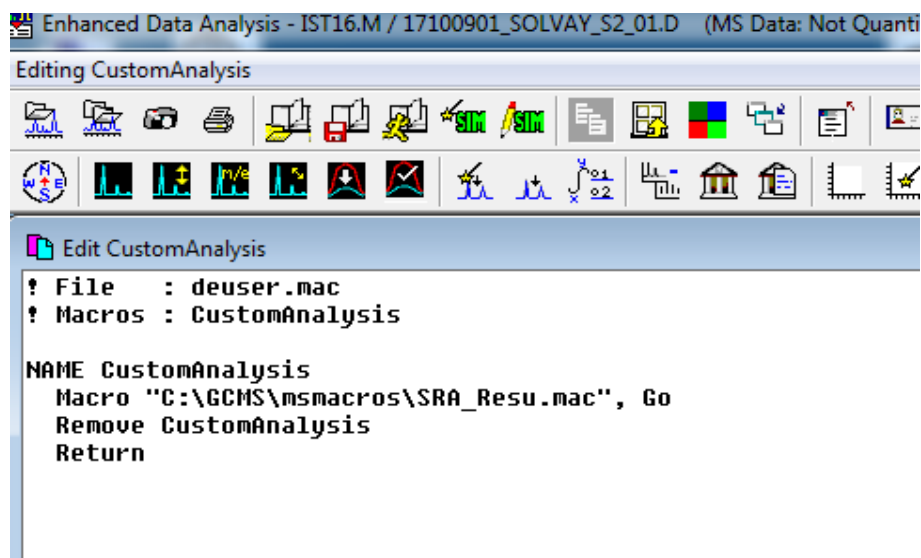
Ensuite, il est nécessaire de créer une table avec au moins un composant. Sélectionnez le menu "Calibrate" puis "Edit Compounds".



Créez un composant en renseignant ses différents paramètres d'intégration et de quantification, validez par Ok, et sauvegardez la méthode pour terminer.

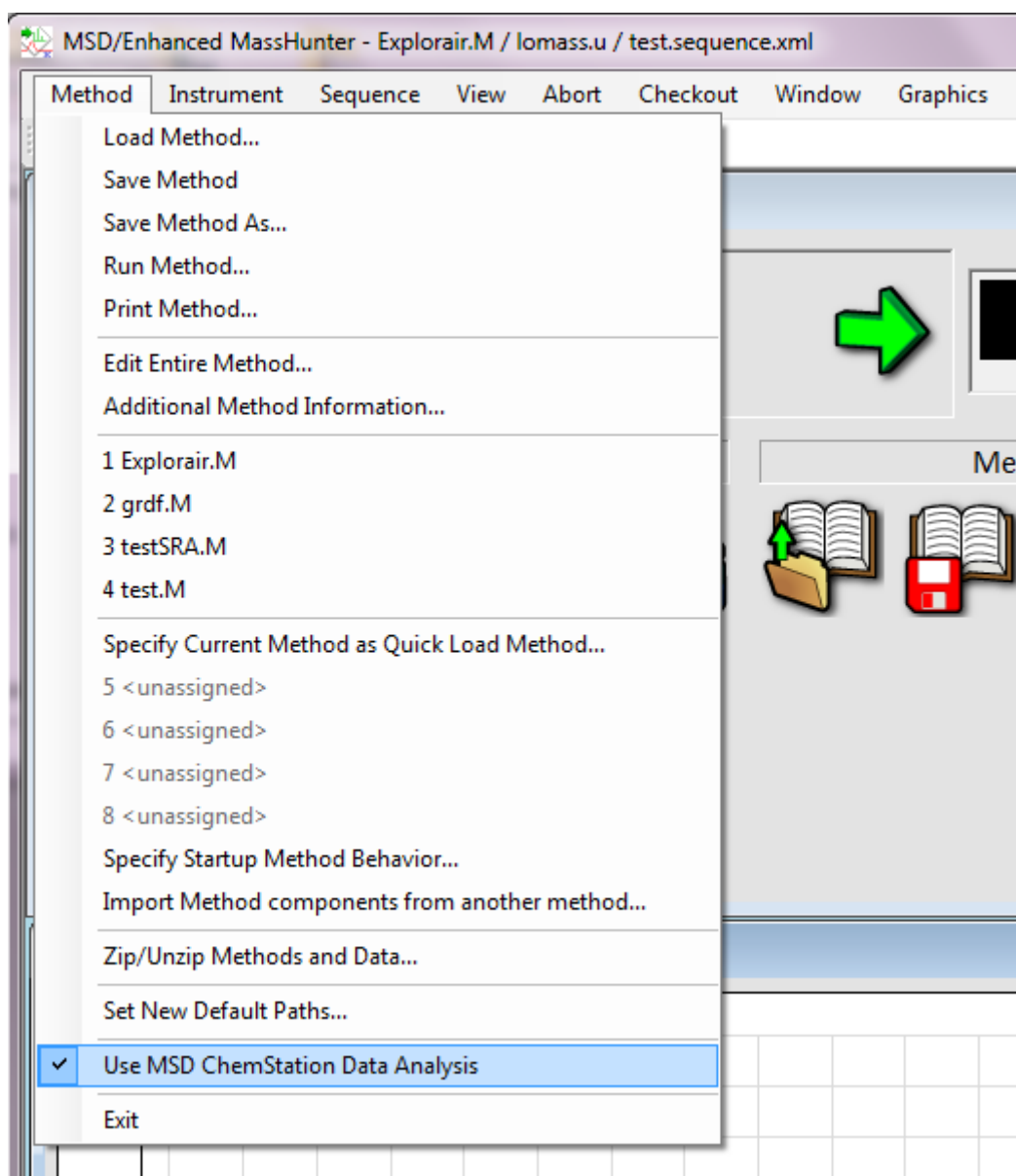
Pour finaliser ce paramétrage au niveau de Data Analysis, il est nécessaire de modifier la partie 'CustomAnalysis' de la méthode afin que la macro qui génère le fichier de résultats soit lancée en fin de traitement. Cette action est effectuée en utilisant le menu "Tranfert Data" et "Add Custom macro in method". Le résultat de cette action peut être visualisé en utilisant le menu "Method" et "Edit CustomAnalysis".





Enfin pour terminer le paramétrage de Mass Hunter, il est nécessaire de demander à l'application GC-MS Acquisition d'utiliser Data Analysis lors du traitement. Cette action est activée lorsque le menu "**Method / Use MSD ChemStation Data Analysis**" est coché.





Lorsque ces actions sont réalisées, le fichier 'SRA_Results.Txt' doit être créé à chaque fin d'analyse dans le répertoire 'Exécutable' de Mass Hunter (C:\GCMS).

