

# PROCHEM

## 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.srainstruments.com

SAS 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

<b>1. PRESENTATION</b>	<b>5</b>
1.1 Fonctionnalités de base	5
1.2 Gestion de l'échantillonnage	5
1.3 Récupération de données annexes	5
1.4 Calculs analytiques	6
1.5 Interface utilisateur	6
1.6 Alarmes	6
1.7 Sauvegarde et archivage	7
1.8 Transmission de données	7
1.9 Compatibilités	7
<b>2. CONFIGURATION DE PROCHEM</b>	<b>8</b>
2.1 Le menu Instrument	9
2.2 Le menu Sampling	12
2.2.1 Configuration	13
a) Sélection par électrovannes	14
b) Sélection par vannes multi positions série	15
2.2.2 Vici valve serial control	15
2.2.3 Stream	17
2.2.4 Auxiliary commands	18
2.2.5 Alarm input	19
2.3 Le menu Module	20
2.3.1 Remote module	20
2.3.2 Configuration du module TES	21
2.3.3 Analog inputs	25
2.4 Le menu Alarms	26
2.4.1 Property	26
2.4.2 Options	27
2.5 Le menu Settings	28
2.5.1 Options	28
2.5.2 Calculated value	29
2.5.3 Report\Company	29
2.5.4 Report\Certificate	30
2.6 Le menu Maintenance	31

<b>3. UTILISATION DE PROCHEM</b>	<b>32</b>
<b>3.1 Gestion des séquences</b>	<b>32</b>
3.1.1 Table des séquences	32
3.1.2 Commandes auxiliaires	34
3.1.3 Scheduler	35
3.1.4 Control	36
3.1.5 Assignement	37
<b>3.2 Lancement des analyses</b>	<b>37</b>
<b>3.3 Impression des analyses</b>	<b>39</b>
<b>3.4 Sélection des résultats affichés</b>	<b>39</b>
<b>3.5 Alarmes</b>	<b>40</b>
3.5.1 Acquittement des alarmes	40
3.5.2 Définitions	40
3.5.3 Options	41
<b>3.6 Paramètres</b>	<b>42</b>
3.6.1 Export file	42
3.6.2 Tendances	44
3.6.3 Moyenne	46
3.6.4 Sorties analogiques 4-20 mA	47
3.6.5 User program	48
<b>3.7 Affichage</b>	<b>48</b>
<b>3.8 Couplage entre deux sessions</b>	<b>49</b>
<b>3.9 About ...</b>	<b>50</b>
<b>3.10 Calculs RGA</b>	<b>51</b>
3.10.1 Nom des constituants et valeurs	51
3.10.2 Sélection des calculs	51
<b>3.11 Calculs Excel</b>	<b>52</b>
<b>4. UTILISATION DU MODULE MODBUS</b>	<b>53</b>
<b>4.1 Installation du logiciel</b>	<b>54</b>
<b>4.2 Configuration du logiciel</b>	<b>54</b>
4.2.1 Configuration des paramètres de communication	54
4.2.2 Adresses Modbus	55
4.2.3 Options	59
<b>4.3 Le menu Action</b>	<b>59</b>
4.3.1 Sous-menu Connexion	59
4.3.2 Sous-menu Quitter	59
<b>4.4 Le menu Affichage</b>	<b>60</b>

4.4.1	Sous-menu Options affichage	60
4.4.2	Sélection des valeurs affichées	60
<b>4.5</b>	<b>Le menu A propos</b>	<b>61</b>
<b>4.6</b>	<b>Caractéristiques</b>	<b>62</b>
<b>5.</b>	<b>ANNEXE I : GESTION DES REPERTOIRES AVEC OPENLAB ET PROCHEM</b>	<b>63</b>
<b>6.</b>	<b>ANNEXE II : GESTION DU NOM DES OPERATEURS AVEC OPENLAB</b>	<b>64</b>
<b>7.</b>	<b>ANNEXE III : COUPLAGE AVEC MSD CHEMSTATION ET MASS HUNTER</b>	<b>66</b>
<b>7.1</b>	<b>Installation des logiciels</b>	<b>66</b>
<b>7.2</b>	<b>Utilisation avec Mass Hunter</b>	<b>66</b>
7.2.1	Lancement des analyses	66
7.2.2	Transfert des résultats	68
<b>8.</b>	<b>ANNEXE IV : UTILISATION DE PROCHEM AVEC UN THERMO DESORBEUR MARKES</b>	<b>72</b>
<b>8.1</b>	<b>Configuration de Prochem</b>	<b>72</b>
8.1.1	Menu Instrument	72
8.1.2	Menu Sampling/Configuration	73
8.1.3	Menu Commandes auxiliaires	74
<b>8.2</b>	<b>Utilisation de Prochem</b>	<b>75</b>
8.2.1	Table d'évènements	75
8.2.2	Séquences d'analyse	76
8.2.3	Lancement des analyses	76
<b>9.</b>	<b>ANNEXE V : DESCRIPTION DE LA BASE DE DONNEES PROCHEM</b>	<b>77</b>
<b>9.1</b>	<b>Définition des tables (d'information et communes)</b>	<b>77</b>
<b>9.2</b>	<b>Définition des tables pour chaque ligne d'échantillonnage (stream)</b>	<b>78</b>

# 1. Présentation

Prochem est un logiciel de supervision des logiciels station de travail d'Agilent Openlab Chemstation, MSD Chemstation et Mass Hunter, qui permet d'accroître les fonctionnalités de votre analyseur afin de l'utiliser en mode "en ligne".

Prochem est utilisé pour piloter des séquences d'analyses, soit en mode continu soit en mode différé et permettre de contrôler complètement un système de prélèvement avec différents dispositifs. Il peut recevoir quelques signaux analogiques pour les insérer dans les résultats d'analyses.

Prochem simplifie également l'interface opérateur et la visibilité des résultats en minimisant les actions requises par l'utilisateur grâce à la programmation de calculs intégrés, à l'intégration de capteurs externes...

En favorisant l'intégration de chromatographes de laboratoire Agilent en milieu industriel, Prochem permet ainsi d'allier les exigences de fonctionnement process et les performances analytiques.

## 1.1 Fonctionnalités de base

- Possibilité de piloter jusqu'à 16 voies d'échantillons par vanne multi position ou par électrovanne.
- Programmation de séquences d'analyses permettant de définir, pour chaque analyse, la voie sélectionnée, la méthode d'analyse, le nombre d'injections et la séquence d'événements (commandes auxiliaires).
- Possibilité de programmer les séquences pour lancer un certain nombre d'analyses, une séquence, les analyses en continu ou bien une séquence à une heure donnée (exemple : Séquence 1 à 14h, Séquence 2 à 16h30 ou vérification programmée toutes les semaines à heure fixe).
- Possibilité de changer de séquence suite à une alarme de composants, de lancer un logiciel spécifique afin de signaler l'information.

## 1.2 Gestion de l'échantillonnage

- Gestion des changements de voies intelligente : Prochem anticipe la sélection suivante pendant l'analyse en cours afin d'optimiser la durée d'analyse. Il peut aussi sélectionner une voie de purge après l'injection.
- Possibilité de piloter des pompes ou des éjecteurs de gaz annexes avec un temps de pompage programmable grâce à une table d'événement.
- Possibilité de mise à pression atmosphérique ou d'isolement de l'échantillon.
- Possibilité d'attente d'une action externe sur une entrée logique (attente matériel prêt, attente injection ...)

## 1.3 Récupération de données annexes

Prochem permet de récupérer des signaux de différents capteurs ou analyseurs annexes tels que la pression, la température, le débit ou les valeurs d'un analyseur externe (NOx, H<sub>2</sub>O, etc.), par lecture d'entrées analogiques, de capteurs de débit Keller ou Bronkhorst ou par Modbus. Il est possible de paramétrer des alarmes sur ces signaux et ainsi d'interdire ou non le lancement des analyses. Il est aussi possible d'envoyer ces valeurs par Modbus.

Au moment de l'injection, Prochem peut récupérer les valeurs de ces capteurs ou analyseurs et les intégrer aux résultats de l'analyse ; elles peuvent alors être utilisées dans des calculs post-analytiques. Il est possible de visualiser ces valeurs en mode retraitement.

## 1.4 Calculs analytiques

Prochem récupère les valeurs calculées par la méthode d'intégration :

- Temps de rétention
- Surface des pics
- Concentration brute
- Hauteur des pics
- Tout résultat annexe (température, pression)

afin d'effectuer des calculs programmés.

Les résultats de calculs peuvent être inclus au rapport final pour impression.

Possibilité de calculs spécifiques : NGA/RGA selon ISO 6976 :1995 ou GPA 2261 et GPL selon ISO 8973/ISO 7941/ISO 6578 ou calculs personnalisés.

## 1.5 Interface utilisateur

Prochem vous permet de visualiser :

- Tous les résultats sous forme de tableau.
- Tous les résultats sous forme de tendances : jusqu'à 8 graphiques de toute valeur dans le temps par voie d'analyse.
- Le calcul de moyenne horaire ou journalière ou sur une plage programmable (0-9999 h).
- Utilisé avec OpenLab ChemStation, il est possible d'avoir deux sessions sur le même ordinateur. Ces deux sessions peuvent être couplées afin de synchroniser les injections sur les deux chromatographes. Dans ce cas, les résultats peuvent être regroupés dans un même fichier résultats.

## 1.6 Alarmes

Prochem permet de :

- Programmer 16 alarmes de concentration sur l'ensemble des pics. Exemples :
  - o Préalarme à 10 %, puis Alarme 2 à 15 %, etc.
  - o Alarme sur la somme des pics connus ou la somme des pics inconnus
  - o Alarme sur les calculs effectués
  - o Alarme sur toute autre valeur lue

Ces alarmes affichent les résultats en couleur rouge à l'écran.

En option, Prochem peut associer ces alarmes à des relais.

- Changer de séquence d'analyse (méthode ou voie d'échantillonnage) dans le cas d'une présence d'alarme. Il est aussi possible de lancer un post-programme pour envoyer un message par courriel ou par SMS par exemple.

## 1.7 Sauvegarde et archivage

Création de fichiers d'archives par voie au fur et à mesure des analyses. Date et heure d'injection format horaire et différents résultats (compatible Excel®).

Utilisé avec Mass Hunter Data Analysis, il est possible d'exporter les résultats sous format PDF.

Dans tous les cas, les fichiers PDF générés peuvent être transférés vers des serveurs distants.

## 1.8 Transmission de données

En option, Prochem peut communiquer l'ensemble des résultats en fichier ASCII, 4-20 mA, Modbus, Profibus, Profinet.

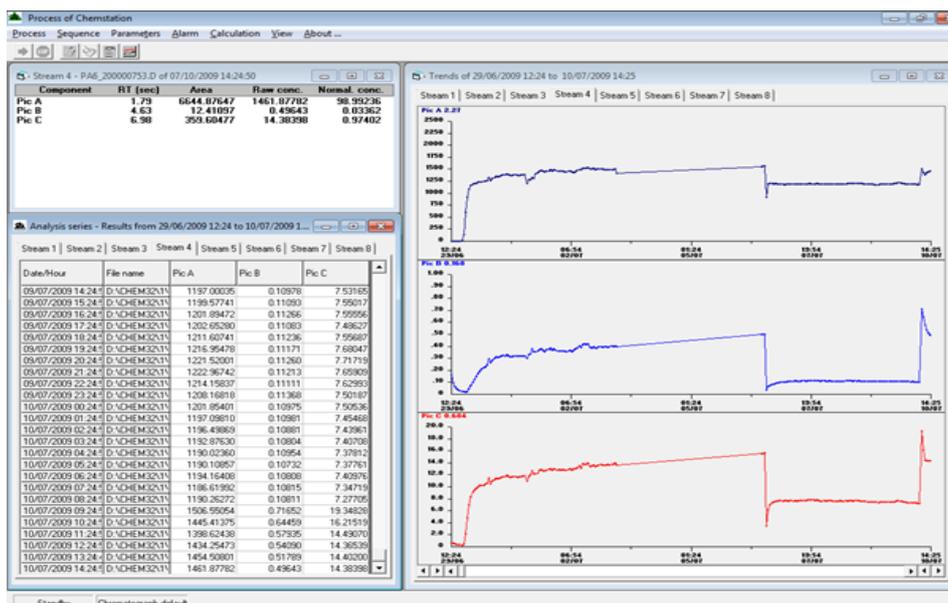
## 1.9 Compatibilités

Prochem est compatible avec les versions logicielles suivantes :

- Chemstation GC B.04.03 et versions précédentes
- Openlab CDS Chemstation C01.10 et versions précédentes
- Chemstation MSD E.02 et versions précédentes
- Mass Hunter pour GC/MS avec Data Analysis, version B.07.06/Build 7.06.0.2704 et versions précédentes

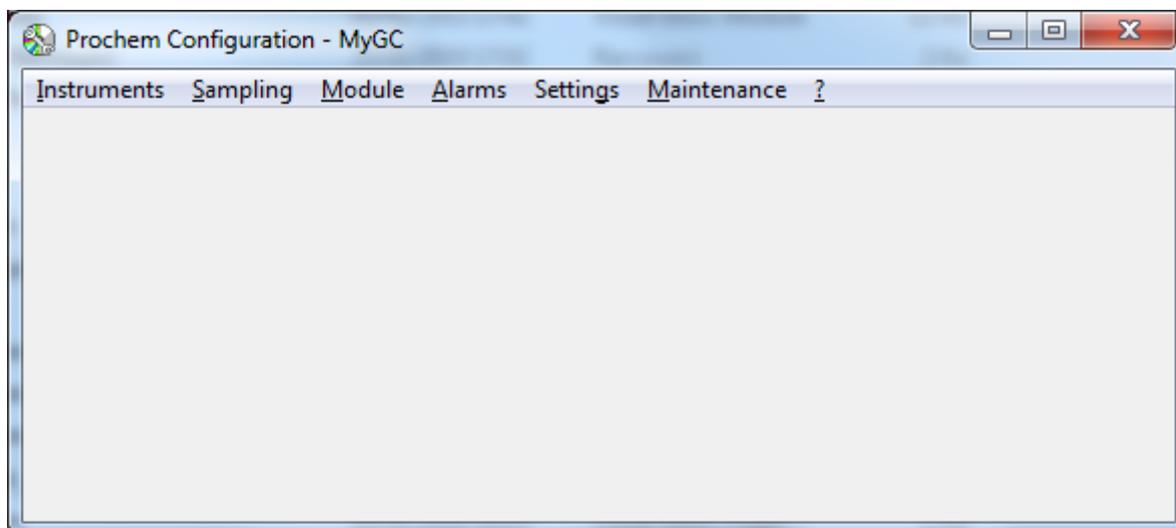
Prochem est compatible avec les instruments suivants :

- GC Agilent 5890, 6890, 6850, 7820, 7890, 8860 et 8890
- MSD Agilent 5973, 5975, 5977
- Interface 35900<sup>E</sup>
- Hplc 1260

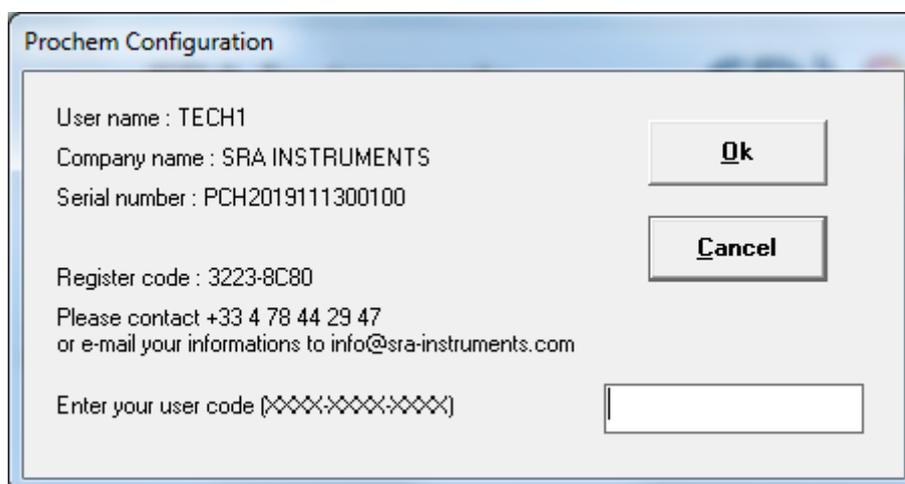


## 2. Configuration de Prochem

Le logiciel Prochem Setup présent dans le répertoire d'installation de PROCHEM permet de définir tous les paramètres. Il peut être appelé par la commande Démarrer / Programmes / SRA Instruments / Prochem Setup.



Si l'option "Utilisation de Prochem sans clé de protection" est activée, la fenêtre suivante apparaît afin de saisir un code utilisateur.



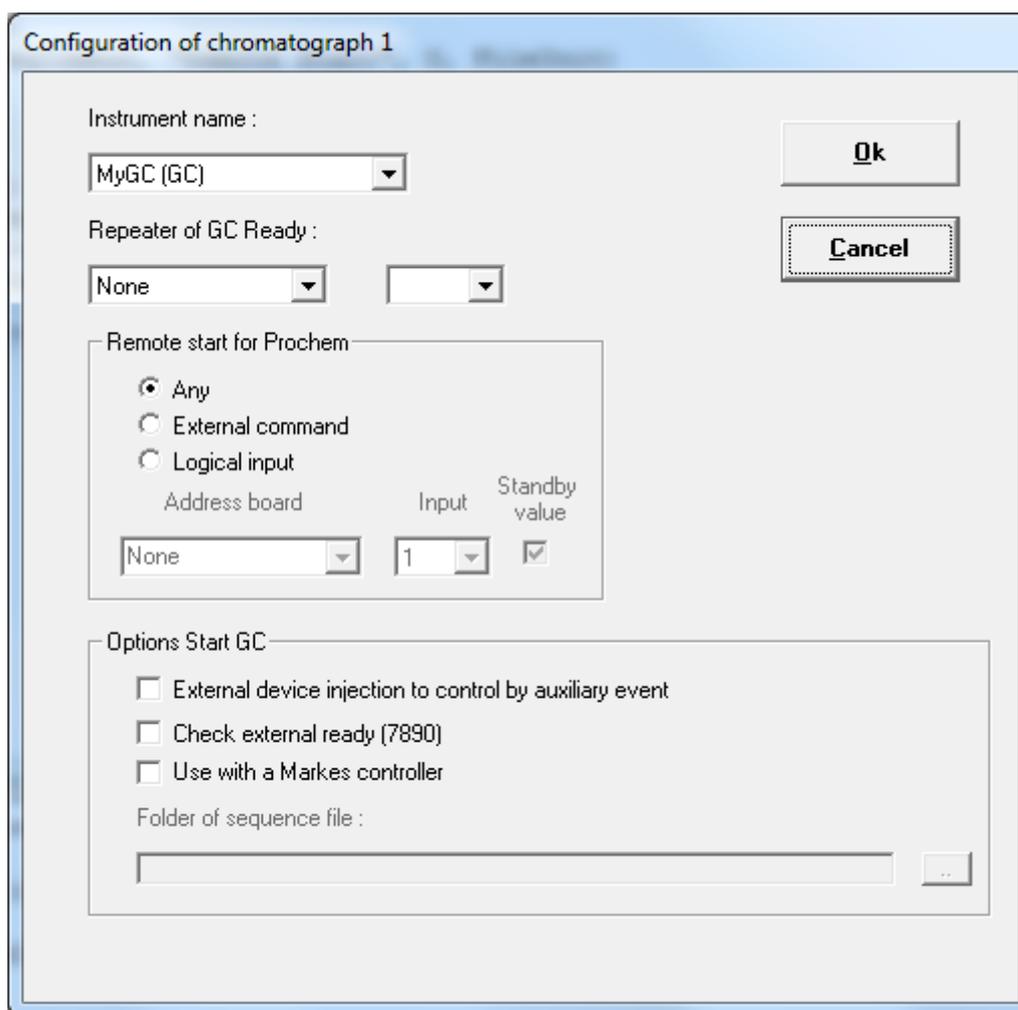
Contactez SRA Instruments et donnez les informations qui sont visualisées dans la fenêtre affichée. En retour, nous vous fournirons un code utilisateur à taper dans le champ sans omettre les tirets séparant les différents éléments constituant ce code.

**Attention :** En cas de défaillance ou changement du disque dur, vous devrez contacter la société SRA Instruments afin qu'elle vous fournisse un nouveau code.

## 2.1 Le menu Instrument

A partir de la version 3.0.0, Prochem peut piloter un ou deux chromatographes avec OpenLab ChemStation. Avec MSD Chemstation ou Mass Hunter, si vous avez installé plusieurs instruments sur le même ordinateur, vous devez faire un choix.

Le sous-menu "Instrument \Chromatograph n°1" vous permet de choisir l'un des analyseurs qui sera piloté par Prochem.



**'Repeater of GC Ready'** : cette option permet de transmettre l'état de l'analyseur (prêt/non prêt) à un autre appareil en activant (ou non) le relais défini selon l'état de l'analyseur.

**Options 'Remote start'** : Ces options permettent à un système externe (un automate, un superviseur ou autre) de transmettre un ordre de lancement d'analyse à Prochem soit via une entrée logique (définir le module et son entrée logique), soit par une commande DDE (External Command, commande 'Start').

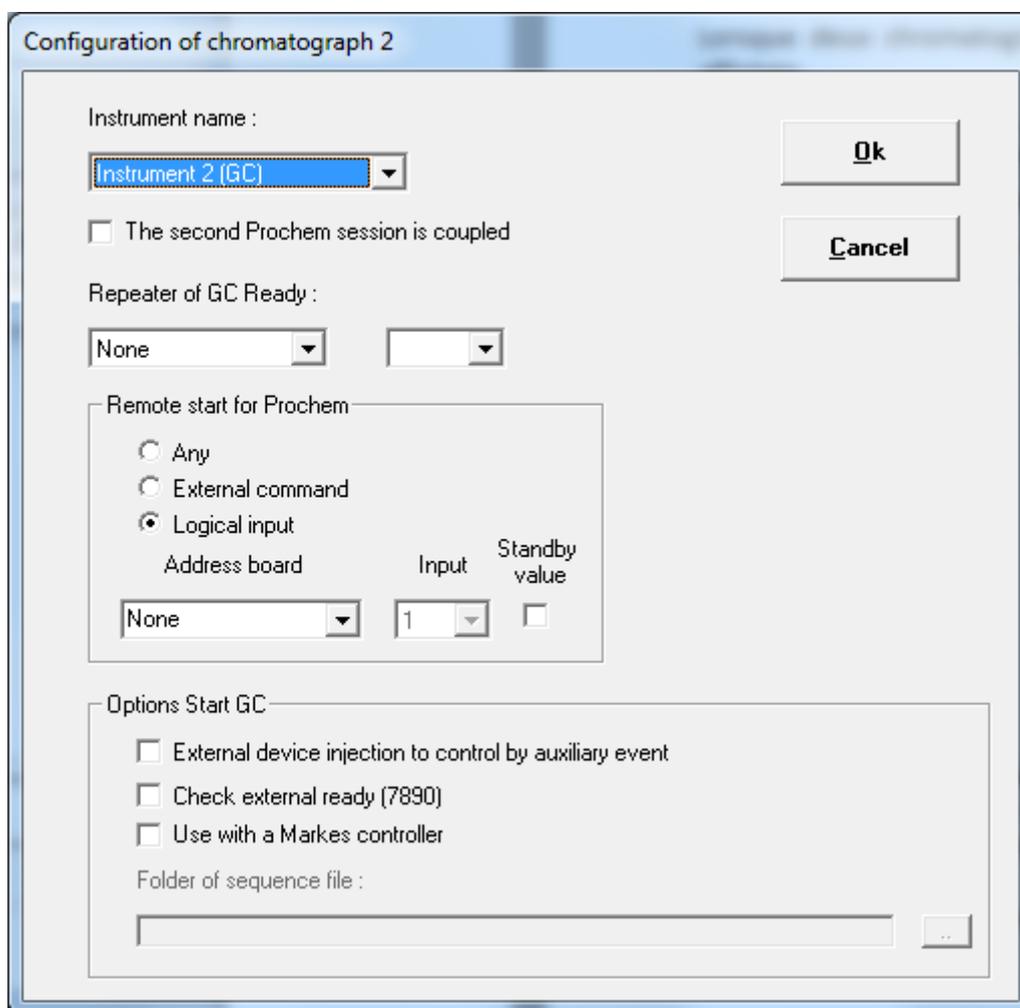
**Option 'External device injection'** : Cette option permet à Prochem de gérer le lancement d'analyse différemment selon des cas de figure particuliers. Si Prochem est utilisé avec Chemstation (ou Openlab Chemstation) sur un instrument doté d'un injecteur automatique ou piloté par un programme externe, Prochem devra lancer le cycle d'injection et attendre le start qui sera envoyé par le passeur. Dans ce cas il

faut cocher cette case. En revanche, si l'instrument utilise une vanne d'échantillonnage (GSV), le système fonctionne tout seul, cette option n'est pas nécessaire et la case ne doit pas être cochée.

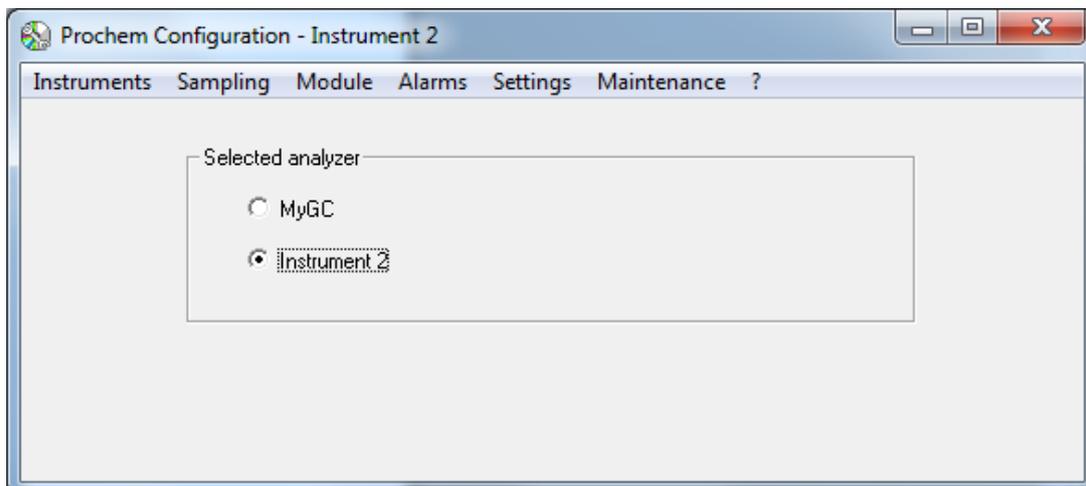
**Option 'Check external ready'** : Cette option est activée si le chromatographe utilisé est un GC7890. Elle permet d'attendre qu'un élément externe au chromatographe soit prêt pour lancer les analyses.

**Option 'Use with a Markes controller'** : Cette option est à activer lorsqu'un désorbeur thermique On-line de la marque Markes est couplé au chromatographe. Dans ce cas, Prochem récupère le numéro de la voie injectée par le multiplexeur d'échantillon et stocké dans le fichier 'sequence.csv' généré à chaque nouvelle séquence. Il est alors nécessaire de renseigner le répertoire de stockage de ces fichiers. Il est important aussi de cocher l'option 'Automatically export sequence report file' dans le menu Settings du logiciel Markes, onglet 'Sequence options'.

Le sous-menu "**Instrument \Chromatograph n°2**" vous permet de choisir l'autre analyseur qui peut être piloté par Prochem et, éventuellement couplé.



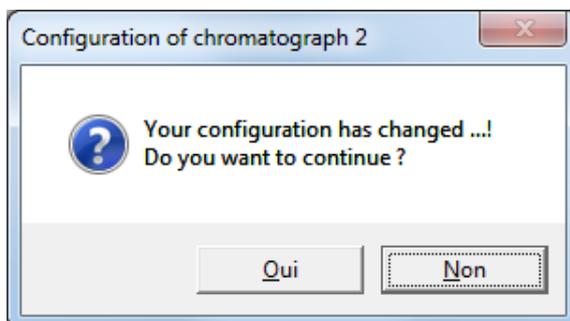
Lorsque deux chromatographes sont configurés, une sélection au niveau de la fenêtre principale est affichée.



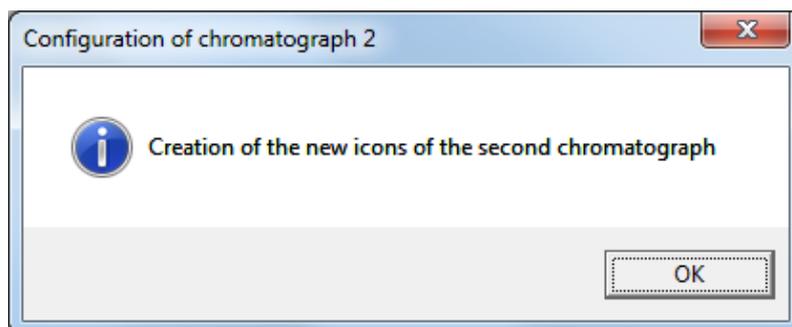
**Cette sélection permet de choisir l'instrument à configurer. Ces deux configurations sont dissociées : si elles utilisent des ports série pour communiquer à différents modules, elles doivent avoir leur propre port série.**

Si l'option '**The second session is coupled**' est sélectionnée, les deux sessions sont couplées et les analyses peuvent être lancées en même temps. Les résultats sont récupérés au niveau de la session maître (chromatographe n°1) lorsque les deux analyses sont terminées.

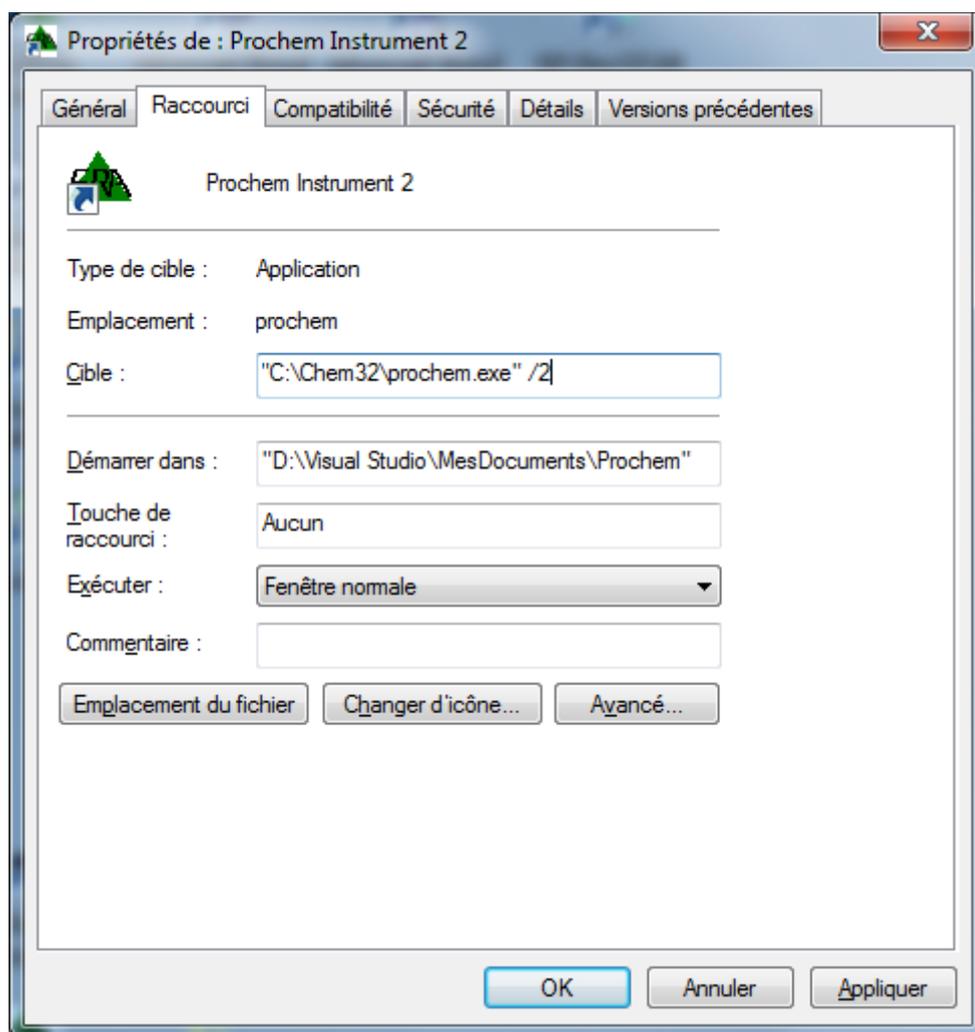
Après avoir renseigné le nom du chromatographe n°2 et valider, le programme vous demande de confirmer la nouvelle configuration.



Si vous validez, un raccourci au niveau du bureau 'Windows' est créé pour lancer cette deuxième session.



Si par mégarde, vous effacez ce raccourci, il suffit de créer un raccourci sur l'exécutable de Prochem et d'ajouter le terme '/2' à la propriété de ce raccourci précédé d'un espace.



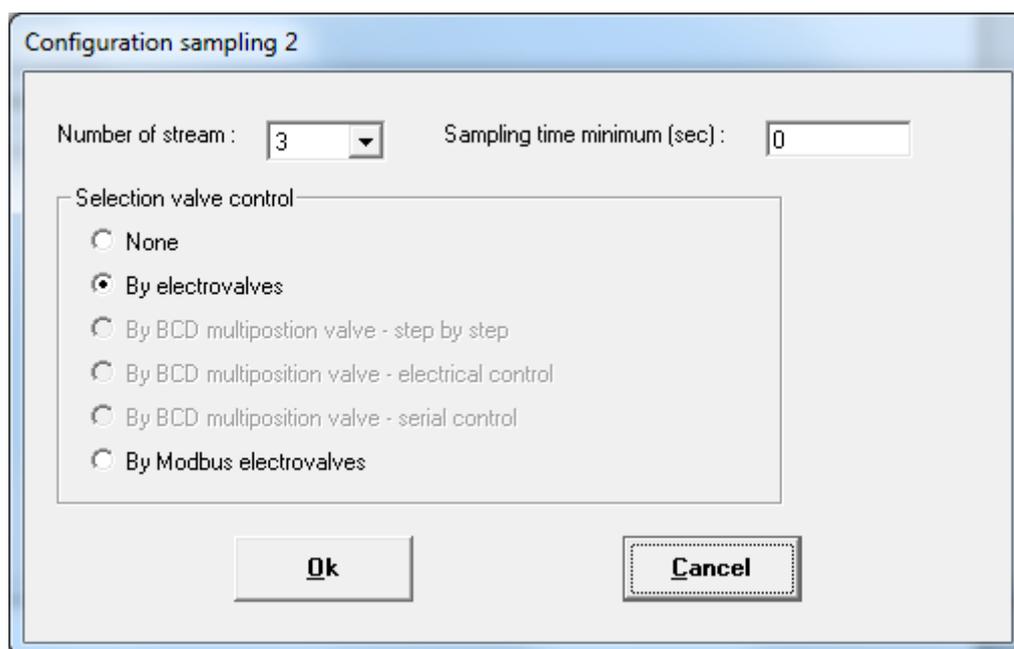
## 2.2 Le menu Sampling

Avant d'effectuer la configuration, vérifiez que vous avez sélectionné le bon instrument.

### 2.2.1 Configuration

**Attention, la sélection d'échantillons est une option du logiciel Prochem donc la description suivante n'est valable que dans le cas où cette option est présente dans la clé de protection.**

Remarque : Chaque instrument a sa propre configuration ; si les deux sessions sont couplées, vous devez configurer le système de commande au niveau du premier instrument mais il est important de renseigner le même nombre de streams et de noms, au niveau du deuxième instrument.



Prochem permet de piloter jusqu'à 16 voies d'échantillons :

- soit par électrovannes
- soit par vannes multi positions. Ces dernières peuvent être gérées soit par lecture en BCD et avance pas à pas, soit par lecture et positionnement en BCD ou soit par vanne type Valco pilotée par liaison série.
- soit par l'envoi d'une commande par Modbus.

Dans le cas de l'utilisation du BCD, votre ordinateur doit être équipé d'une carte entrées/sorties logiques.

L'option '**By Modbus electrovalves**' n'est disponible que si l'option Modbus est activée et que l'application correspondante est lancée. Dans ce cas, l'adresse correspondant au numéro de stream doit être saisie manuellement dans le fichier Prochem.ini avec un éditeur de texte type Bloc-Notes dans la section 'Chromato x' où x correspond au numéro d'affectation de l'analyseur dans la station de travail Agilent et sous la variable 'Adresse Stream y' où y correspond au numéro de stream.

Exemple pour le cas où les adresses sont définies sous forme de bit :

[Chromato 1]

Adresse Stream 1 =51	Adresse Stream 5 =55
Adresse Stream 2 =52	Adresse Stream 6 =56
Adresse Stream 3 =53	Adresse Stream 7 =57
Adresse Stream 4 =54	Adresse Stream 8 =58

Exemple pour le cas où il n'y a qu'une adresse commune sous forme d'entier :

[Chromato 1]

Adresse Stream 1 =51	Adresse Stream 5 =51
Adresse Stream 2 =51	Adresse Stream 6 =51
Adresse Stream 3 =51	Adresse Stream 7 =51
Adresse Stream 4 =51	Adresse Stream 8 =51

Le champ '**Sampling time minimum**' permet d'entrer une durée de balayage par défaut pour chaque voie. Ce temps est utilisé lorsqu'une commutation de ligne d'échantillonnage intervient juste avant l'injection. Elle permet ainsi d'assurer un minimum de balayage de l'échantillon avant injection.

Sélectionnez le type d'interface utilisé pour le pilotage des voies d'échantillons et cliquez sur le bouton "Ok".

Suivant l'option choisie, une nouvelle fenêtre s'affichera.

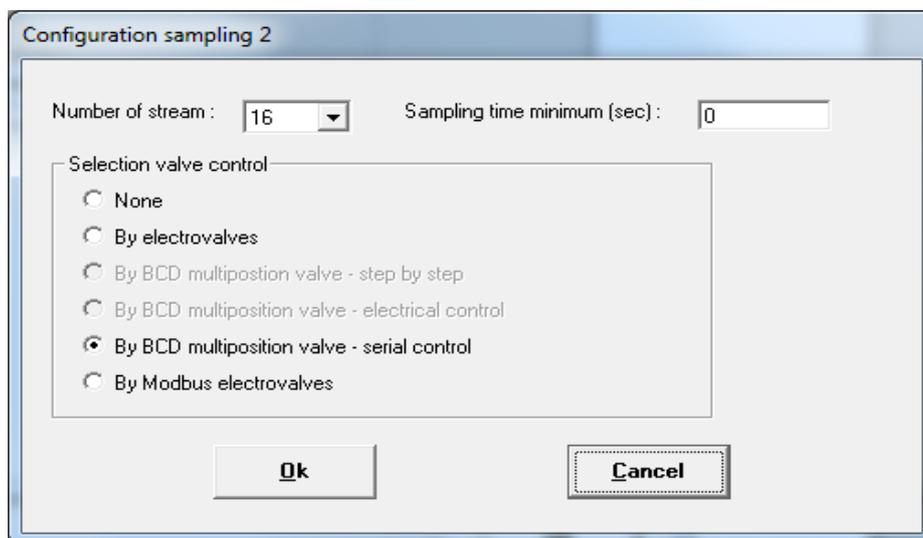
**a) Sélection par électrovannes**

Dans le cas de la sélection par électrovannes, la fenêtre suivante s'affiche :

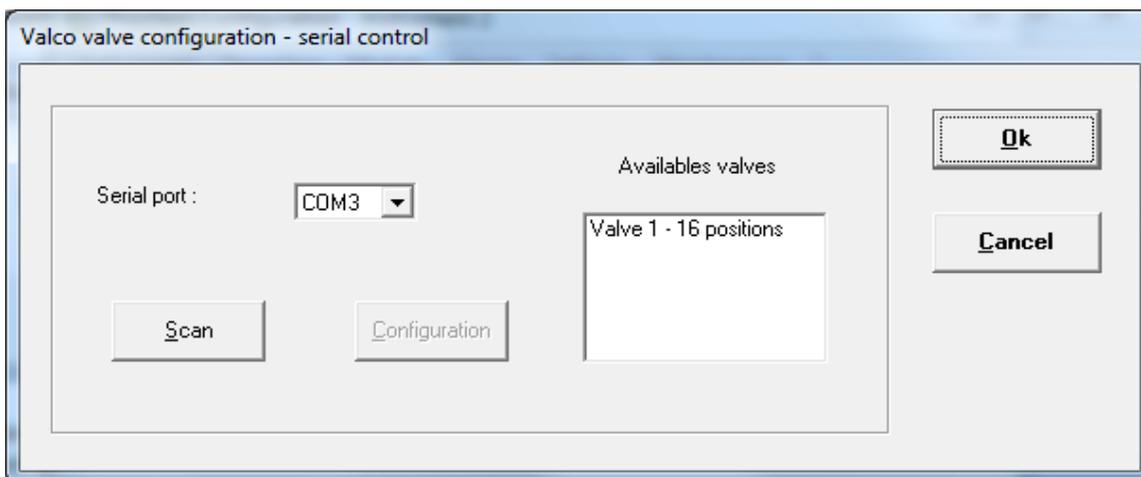
	Address board	Relay
Stream 1	4055 - 01	1
Stream 2	4055 - 01	2
Stream 3	4055 - 01	3

Sélectionnez la carte ou le module de commande et le numéro du relais correspondant à l'électrovanne.

**b) Sélection par vannes multi positions série**



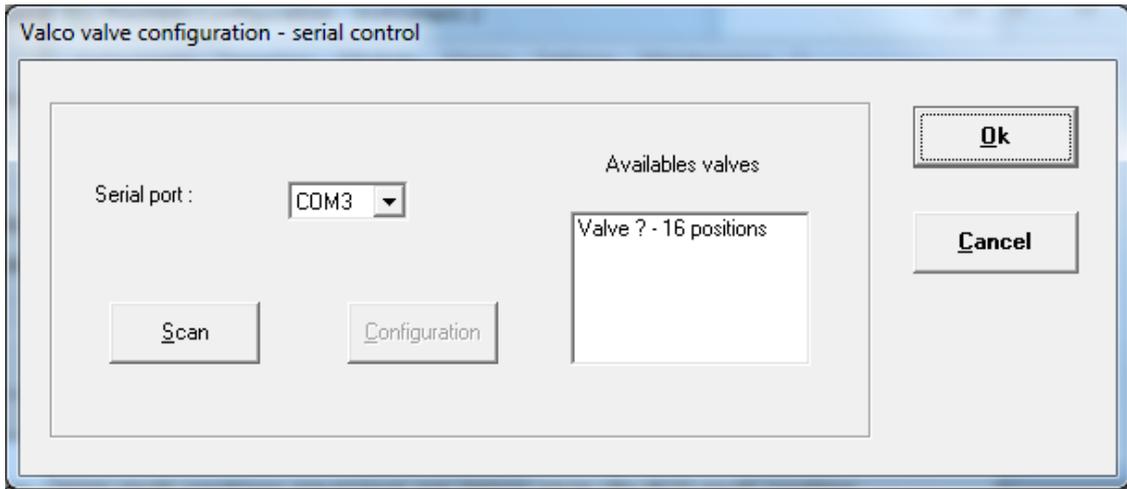
Dans le cas de la sélection d'une vanne multi positions électrique par liaison série (By BCD multi position valve – serial control), la fenêtre suivante s'affiche :



Voir le paragraphe suivant pour plus d'informations.

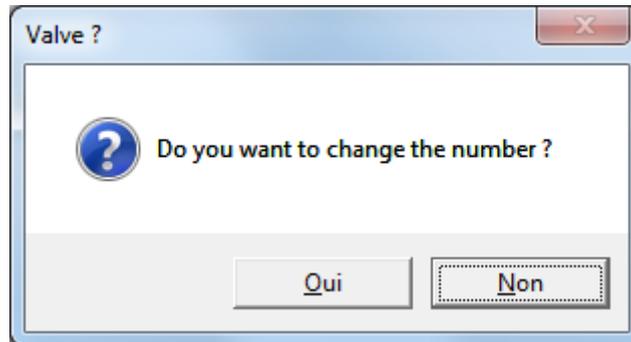
**2.2.2 Vici valve serial control**

Le sous-menu "Sampling\Vici valve serial control" permet de configurer les vannes multi-positions et les vannes de commutation utilisées par Prochem.

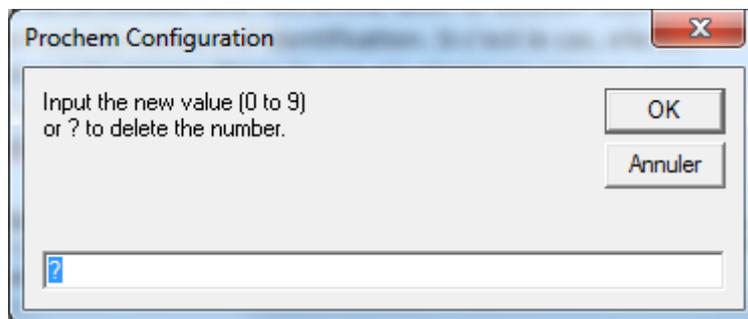


Sélectionnez le port série pour la communication et effectuez une recherche avec le bouton Scan. La recherche s'effectue d'abord sur les vannes n'ayant pas de numéro d'identification. Si c'est le cas, elle est stoppée afin de permettre d'assigner un numéro à la vanne. Dans le cas où plusieurs vannes sont connectées et sans identifiant, il est nécessaire d'effectuer cette recherche vanne par vanne. Les vannes détectées sont ensuite affichées dans la liste 'Available valves'.

Il est possible de changer l'identifiant en sélectionnant la vanne dans la liste et en utilisant le bouton 'Configuration'. Le message suivant s'affiche :

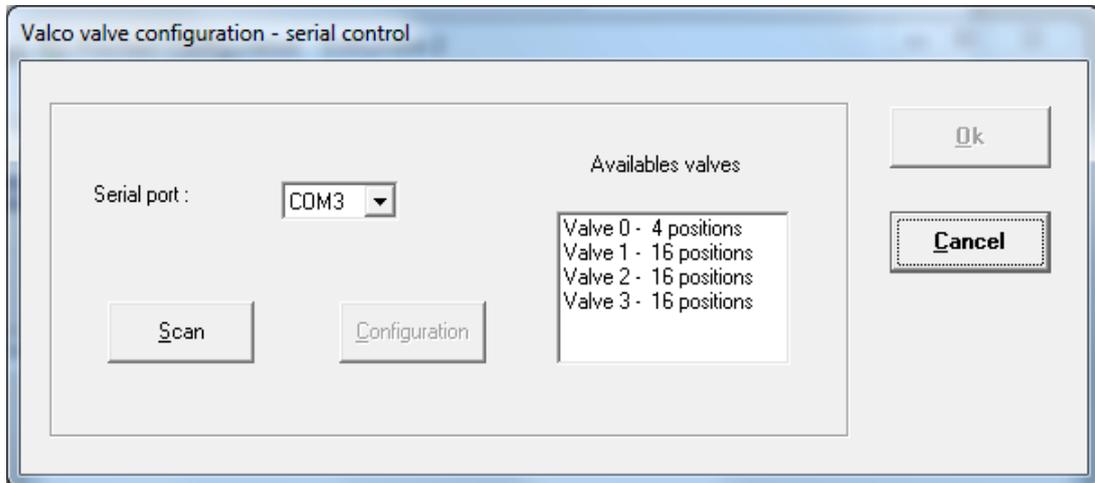


Validez par Oui, une nouvelle fenêtre vous permet d'entrer le numéro. Vous avez le choix entre 0 et 9 ou ? si vous voulez supprimer l'identifiant.



Après avoir validé par Ok, le logiciel effectue une nouvelle recherche.

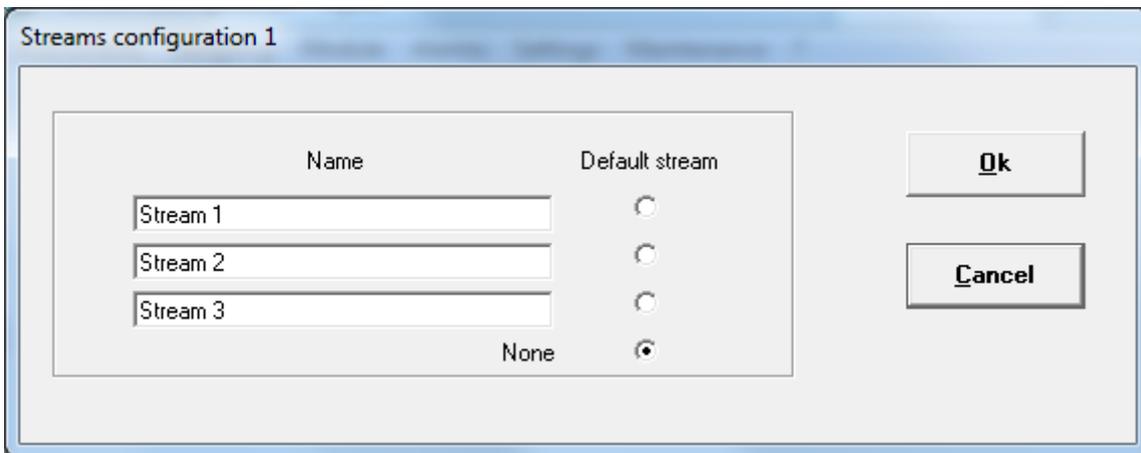
Notez qu'il se peut qu'il y ait plusieurs vannes multi-positions et que l'une d'elles soit utilisée pour la sélection des autres. Dans ce cas, cette vanne doit avoir l'identifiant 0.



### 2.2.3 Stream

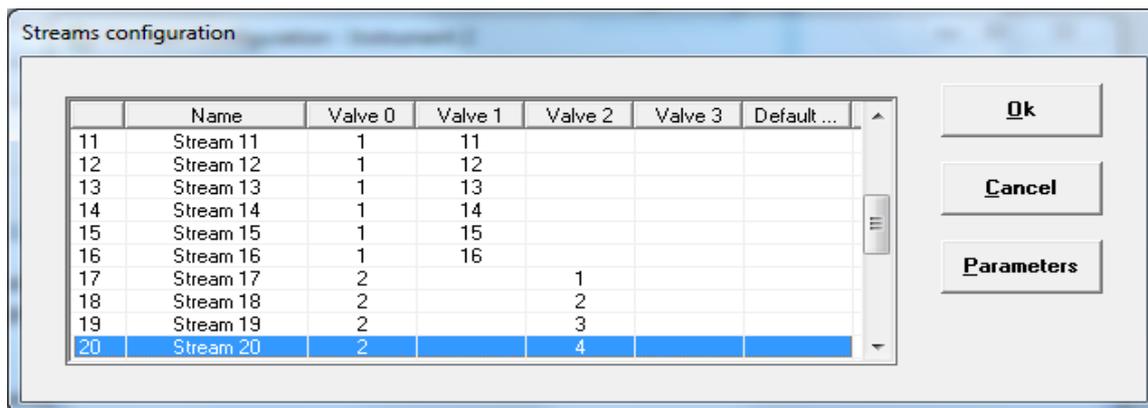
Lorsque vous avez configuré l'interface de sélection des voies d'échantillons, il est possible de nommer les différentes voies via le sous-menu "Sampling\Stream".

Si vous avez opté pour une sélection par électrovannes, la fenêtre suivante s'affiche :

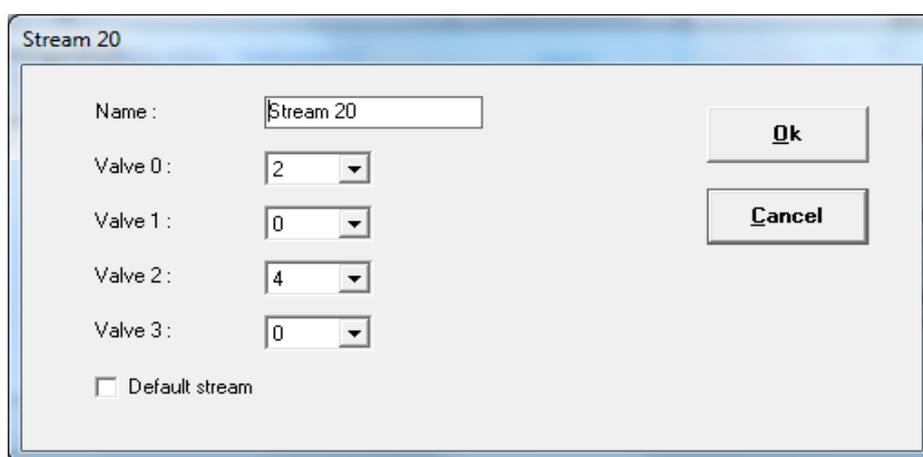


Entrez le nom des voies et validez par Ok. L'option 'Default stream' permet de définir si l'une des voies est utilisée comme voie de purge ou voie par défaut. Si aucune des voies n'est utilisée, sélectionnez le choix 'None'.

Si vous avez opté pour une sélection par vanne multivoies, la fenêtre suivante s'affiche :



Le bouton 'Parameters' vous permet de configurer les paramètres de chaque voie.



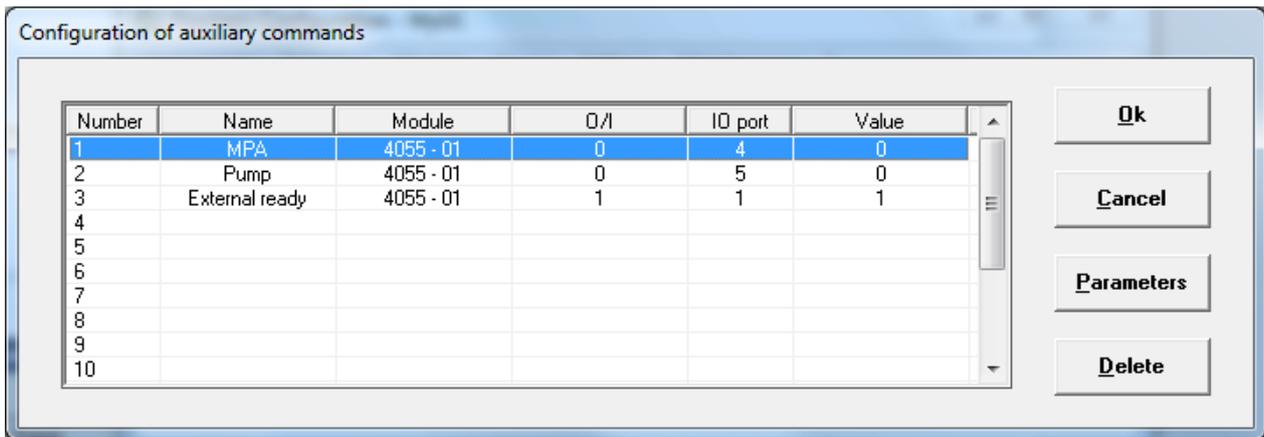
Entrez le nom et cochez l'option 'Default stream' s'il s'agit de la voie par défaut. Si la sélection nécessite la commutation de plusieurs vannes multi positions, indiquez les positions de chaque vanne.

### 2.2.4 Auxiliary commands

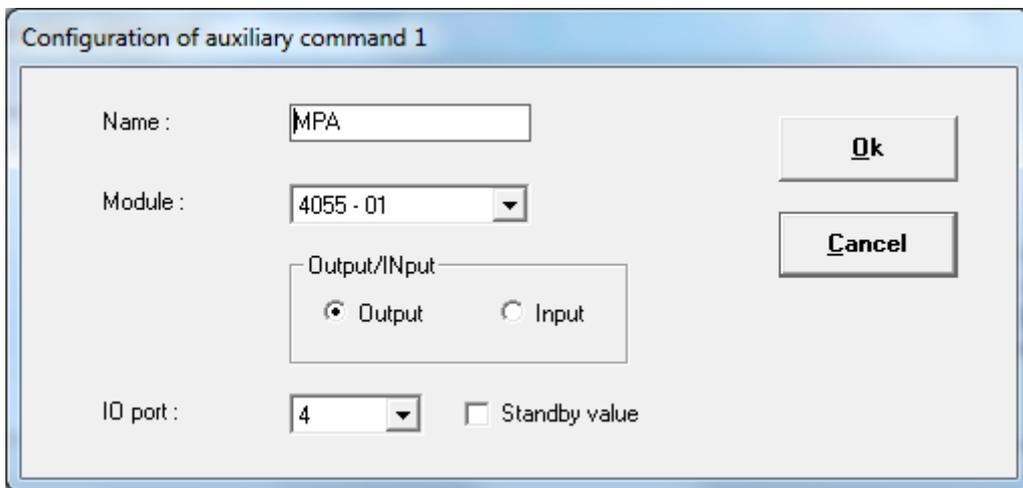
Prochem permet de piloter différentes commandes avant et après injection du genre pompe d'aspiration, vanne d'isolement ou de mise à pression atmosphérique. De même, si le chromatographe n'est pas équipé de vanne d'injection, Prochem peut gérer le lancement de l'analyse.

Dans certaines configurations, Prochem permet d'attendre une action externe pour continuer le cycle.

Pour cela, allez dans le sous-menu "**Sampling\Auxiliary commands**"; la fenêtre suivante s'affiche :



Les paramètres de ces commandes sont accessibles par le bouton 'Parameters'. Il suffit ensuite de sélectionner le périphérique de commande, le numéro de relais ou le numéro de l'entrée logique.

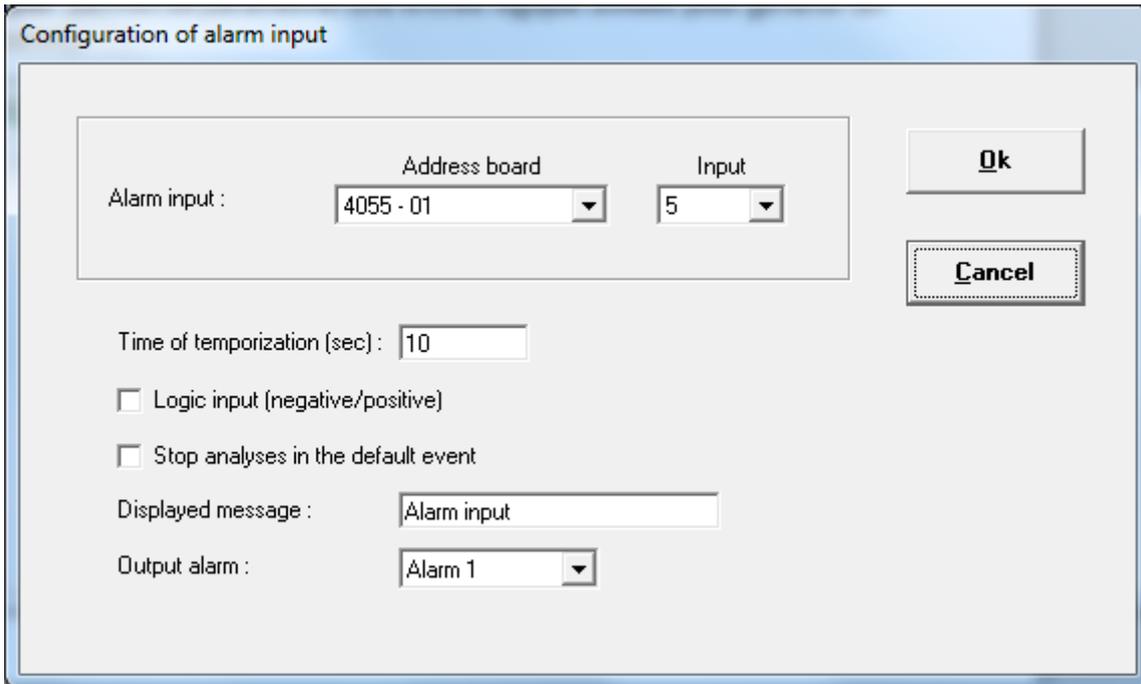


Si l'option 'Output' est sélectionnée, la configuration concerne une sortie logique. Si l'option 'Input' est sélectionnée, elle concerne une entrée logique. La valeur 'Standby value' correspond soit à l'état au repos pour un relais soit à la valeur lorsque l'entrée est inactive.

### 2.2.5 Alarm input

Le sous-menu "Sampling\Alarm input" permet de paramétrer une entrée logique utilisée pour générer un défaut (défaut de pression ou de débit).

La fenêtre suivante permet de définir les différents paramètres de cette alarme.



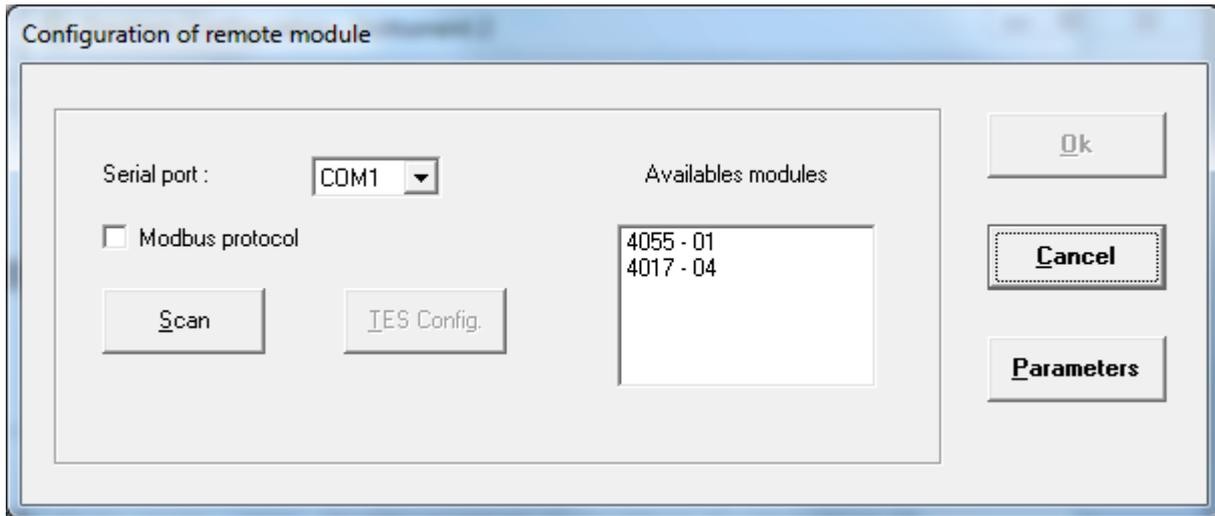
- Sélectionnez la carte ou le module puis l'entrée utilisée.
- La temporisation 'Time of temporization' permet de filtrer les changements d'état pour éviter des alarmes intempestives.
- La case à cocher 'Logic input' permet de définir le type d'entrée (positive ou négative) au repos.
- La case à cocher 'Stop analyses in the default event' permet de stopper le cycle en cas de défaut.
- Le message 'Displayed message' sera affiché dans la barre de Statut en cas de défaut.
- Le champ 'Output alarm' permet de définir le relais d'alarme qui sera activé en cas de défaut.

## 2.3 Le menu Module

### 2.3.1 Remote module

Prochem utilise soit des cartes relais installées dans l'ordinateur soit des modules déportés de type Adam ou TES. Si les cartes relais sont directement détectées par le logiciel, il est nécessaire de rechercher les modules utilisés.

Le sous-menu "**Module\Remote module**" vous permet de configurer le port série utilisé pour communiquer avec ces modules.



Lorsque vous avez sélectionné le port série vous pouvez rechercher les modules connectés à l'ordinateur.

Le bouton 'Parameters' permet de configurer les paramètres de communication.

Dans le cas des modules Adam, le protocole est 9600 bauds, 8 bits de données, sans parité et 1 bit d'arrêt. La configuration des modules Adam est effectuée directement à partir du logiciel du fournisseur.

Si la communication s'effectue en Modbus, cocher l'option 'Modbus protocol'.

Dans le cadre de module TES, vous devez cocher l'option 'Modbus protocol' et configurer les paramètres de communication avec le bouton 'Parameters'. A noter, si la communication est en RS232, les paramètres sont 9600 bauds, 8 bits de données, parité paire (even) et 1 bit d'arrêt. La configuration de ces modules est effectuée à partir du bouton Test et uniquement en RS232 (voir paragraphe 2.3.2).

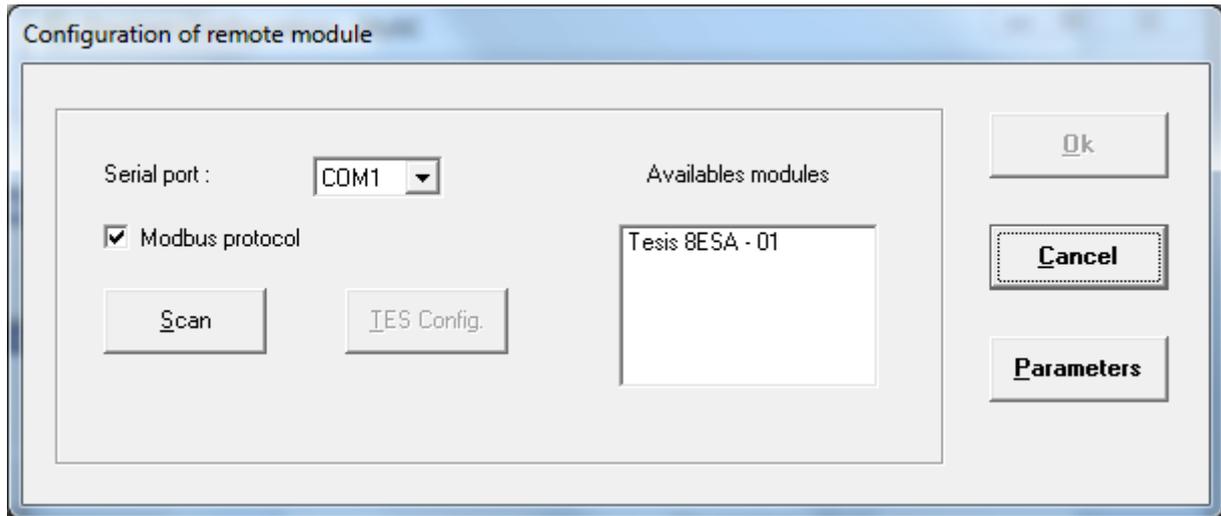
Si vous avez connecté des modules Adam 4024 ou un TES à l'ordinateur, vous pouvez transmettre les résultats par signaux analogiques 4-20 mA. La sélection des valeurs s'effectue directement à partir du logiciel Prochem.

### 2.3.2 Configuration du module TES

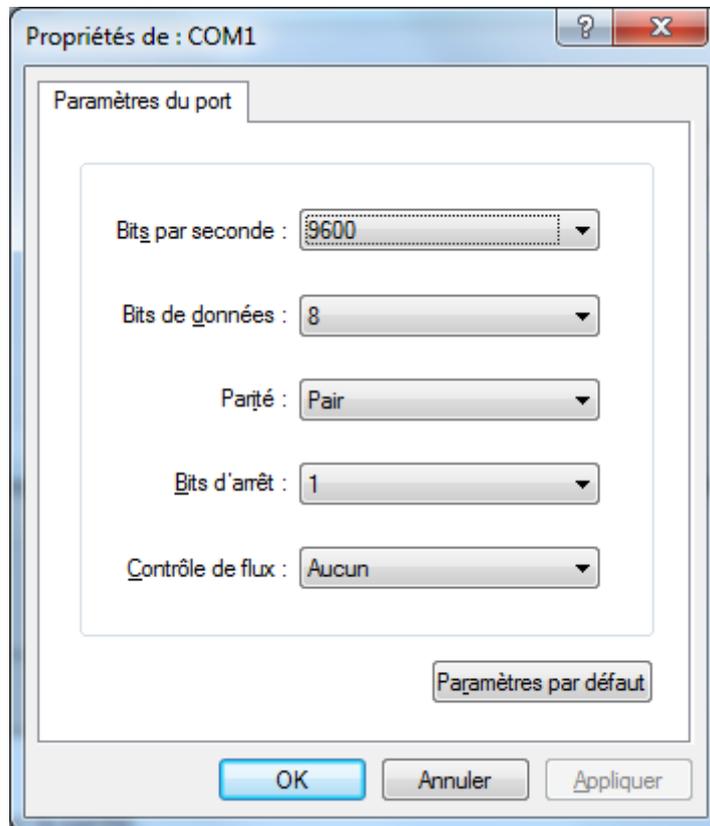
Pour configurer le module TES, utilisez le port série RS232.

A partir du logiciel Prochem setup, sélectionnez le sous-menu "**Module\Remote module**".

La fenêtre suivante s'affiche :

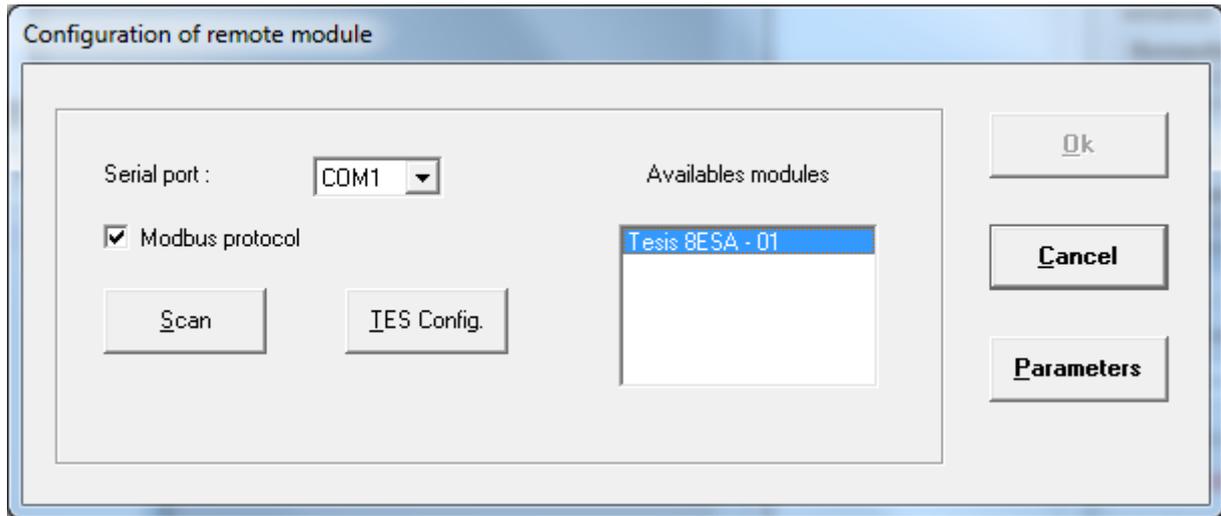


Cochez la case 'Modbus protocol' et vérifiez les paramètres du port RS232.

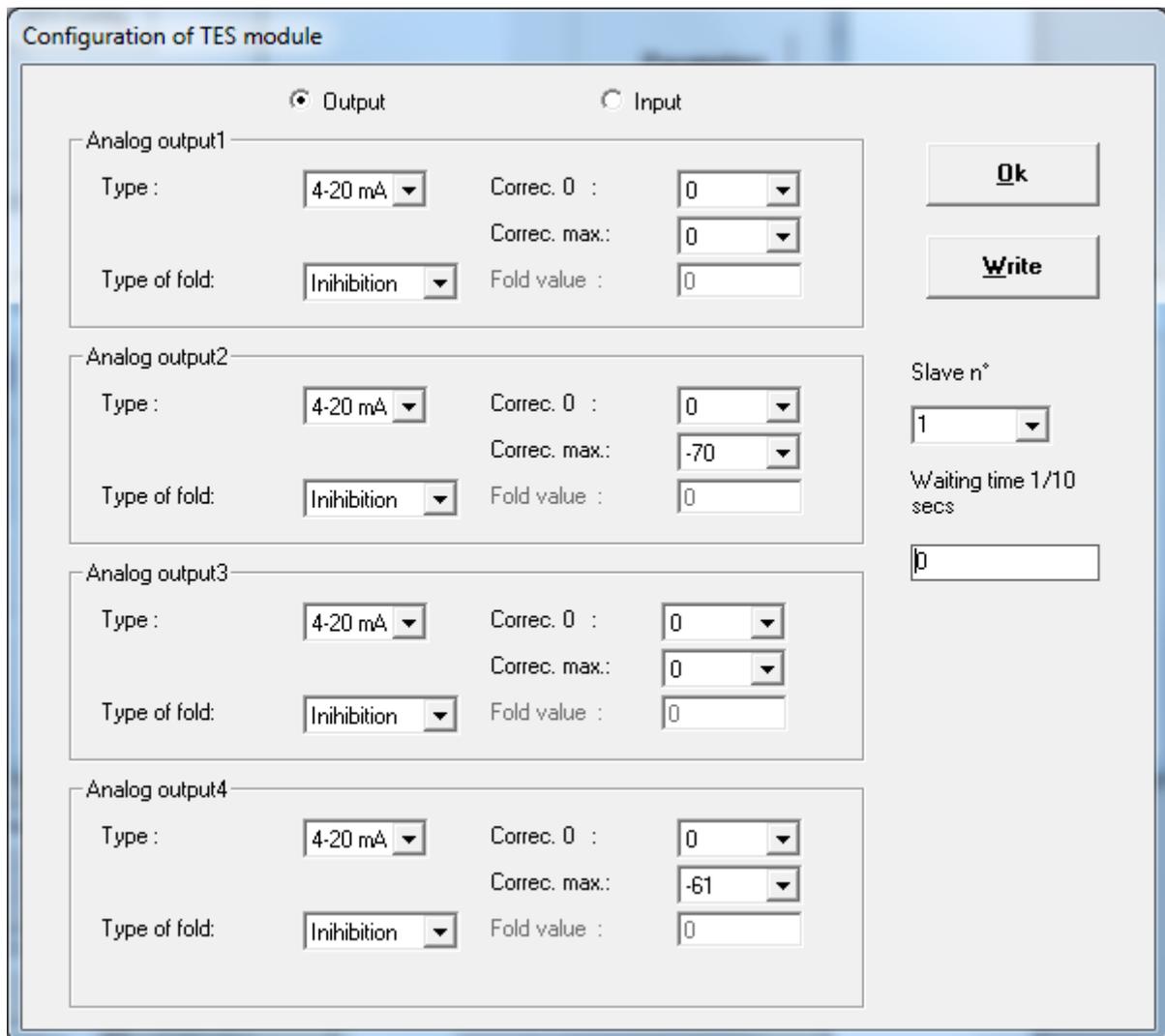


**Attention :** sélectionnez 'Even' pour la parité.

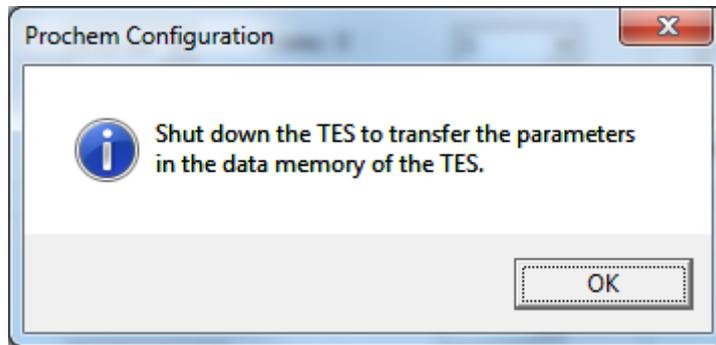
Cliquez ensuite sur le bouton 'Scan'.



Pour configurer le module TES, sélectionnez-le dans la liste et cliquez sur le bouton 'TES Config.'

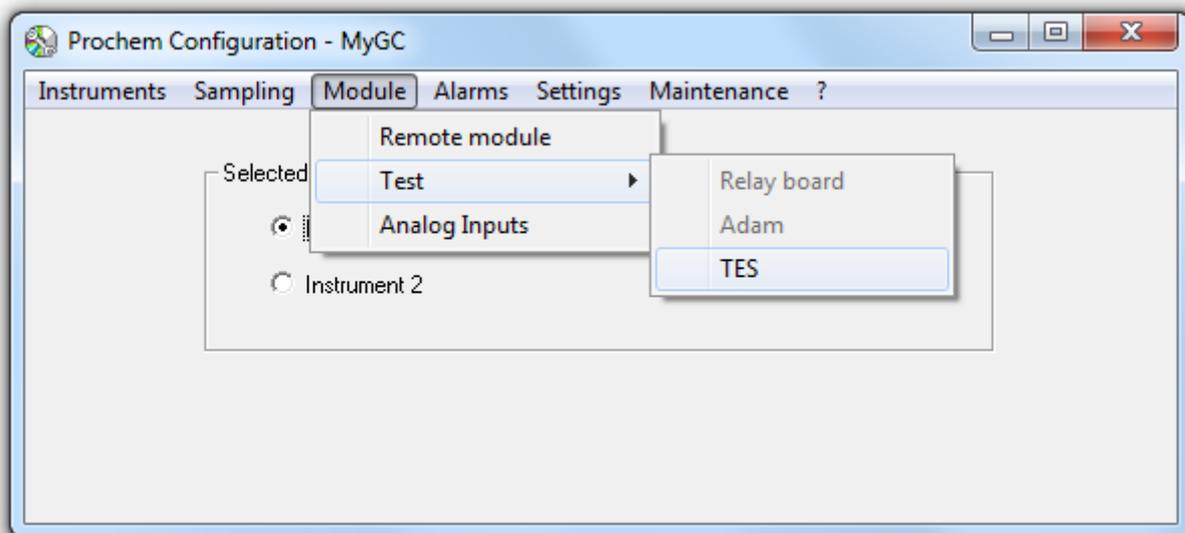


Modifiez les différents paramètres (Type de sortie analogique, numéro esclave, entrée analogique). Le temps d'attente n'est utilisé qu'avec une liaison série RS485. Elle permet en cas de perte de dialogue (blocage système ou perte d'alimentation de l'ordinateur) d'activer ou désactiver les relais et la sortie Watchdog du TES.

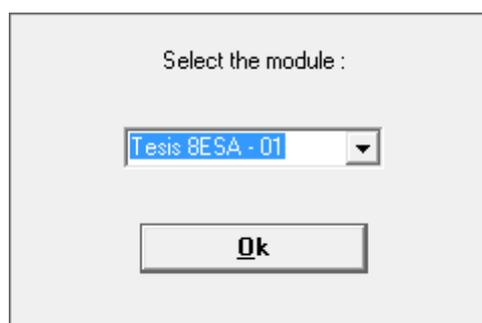


Lorsque tous les modules sont configurés, effectuez un marche-arrêt sur les modules afin que les modifications soient prises en compte. Si vous utilisez un port série RS485, connectez le ou les TES au bon port et refaites un nouveau scan.

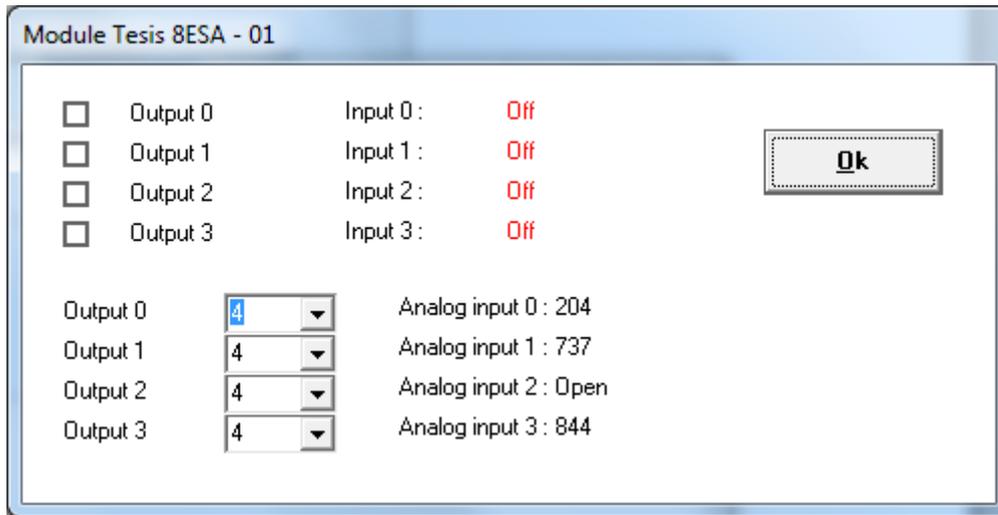
Pour tester le module TES, sélectionnez le sous-menu "**Module\Test\TES**".



Sélectionnez le module TES que vous souhaitez tester.



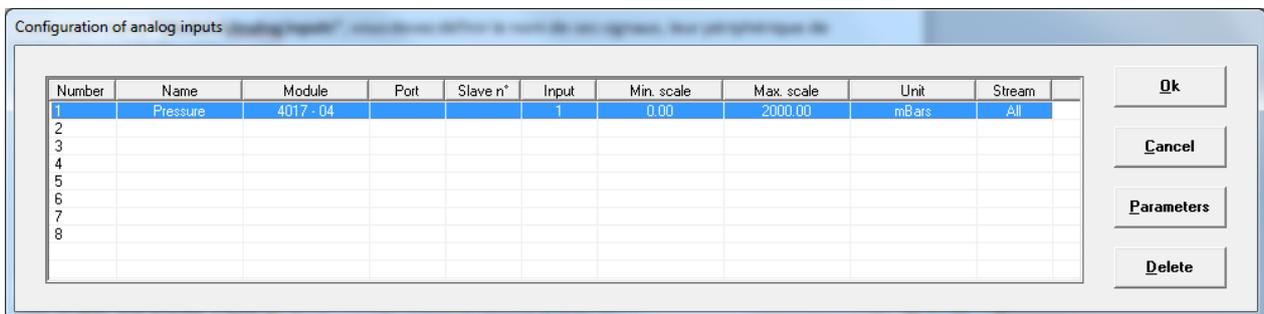
La fenêtre suivante s'affiche :



### 2.3.3 Analog inputs

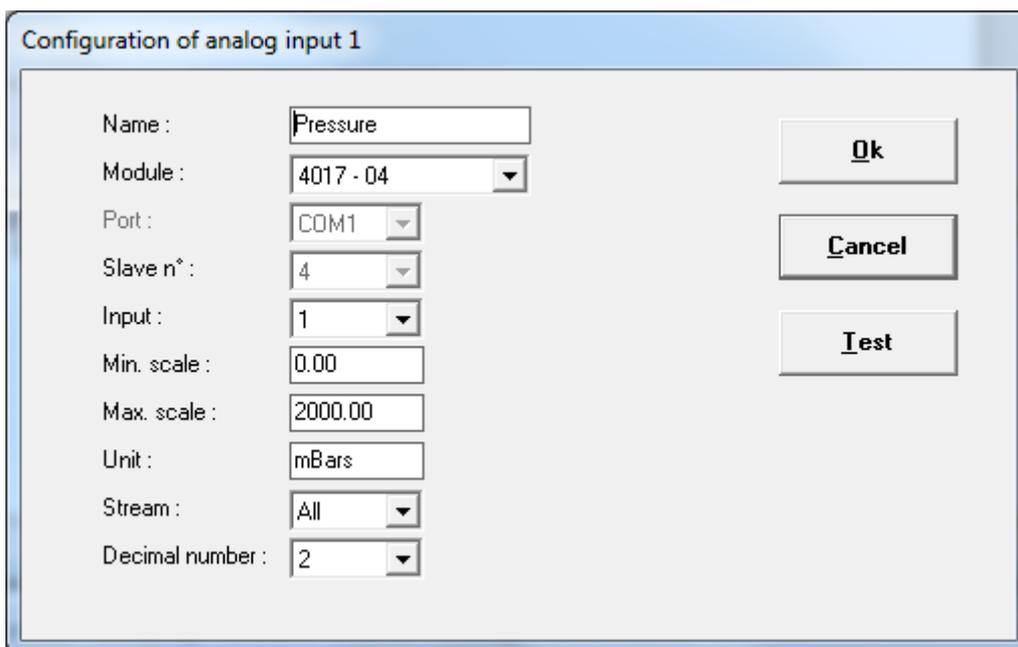
Comme expliqué précédemment, Prochem permet de faire l'acquisition de signaux analogiques afin d'intégrer la valeur aux résultats de l'analyse.

Via le sous-menu "**Module\Analog inputs**", vous devez définir le nom de ces signaux, leur périphérique de lecture, leurs échelles et leur unité.



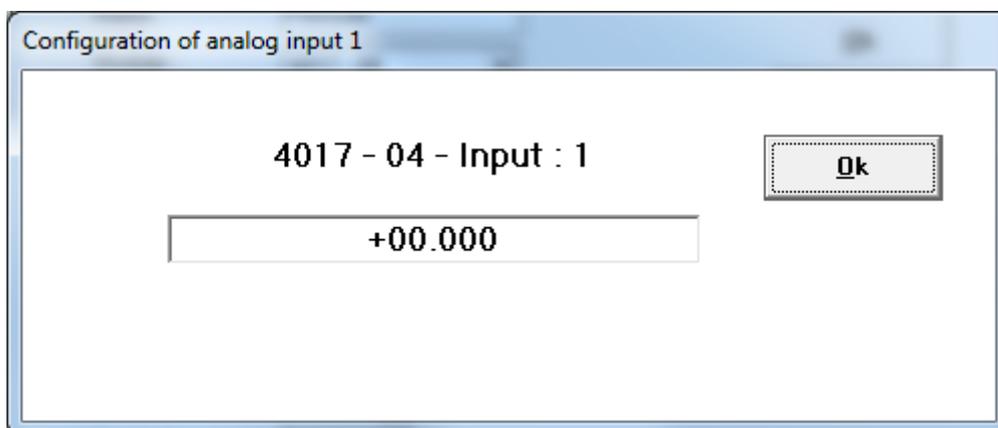
Pour effacer une entrée, il suffit d'effacer le nom renseigné dans le champ 'Name'.

Sélectionnez une ligne et cliquez sur le bouton 'Parameters' pour définir, modifier les paramètres des signaux analogiques.



Le choix des modules peut dépendre de la configuration définie : module Adam équipé d'entrées analogiques ou pas, module TES. Dans le cas de capteurs surveillés avec des modules West 8010, sélectionnez le module Modbus et l'adresse de la valeur lue dans la liste N° Input. Concernant les modules Bronkhorst, il est nécessaire d'installer le logiciel de ce fournisseur pour dialoguer avec ces capteurs.

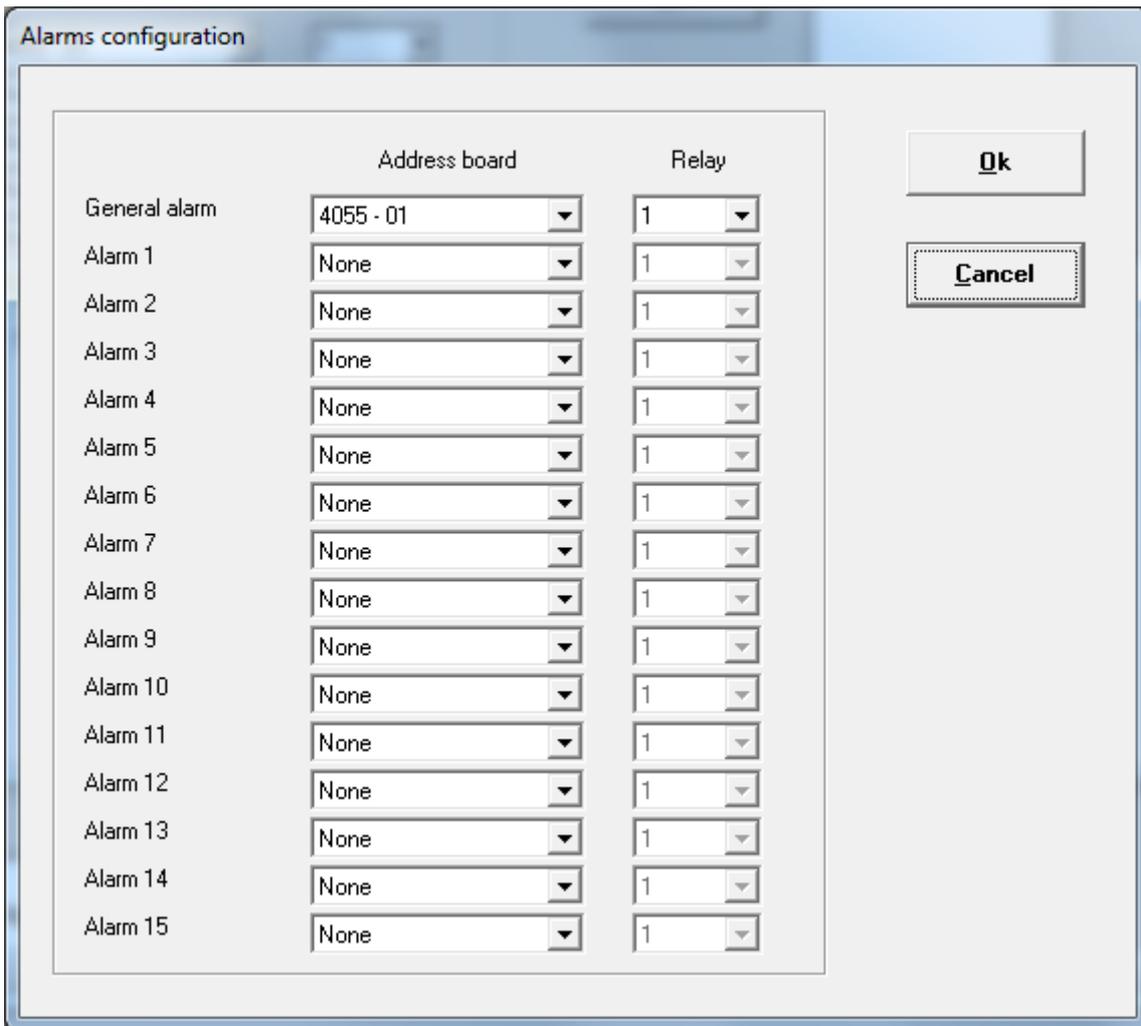
En cliquant sur le bouton 'Test', la fenêtre suivante apparaît :



## 2.4 Le menu Alarms

### 2.4.1 Property

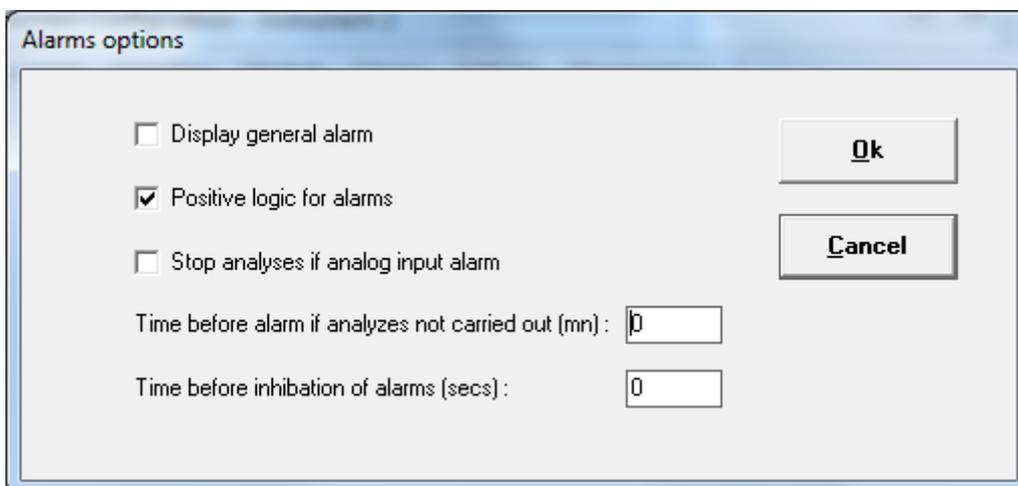
Dans le sous-menu "**Alarms\Property**", des alarmes peuvent être paramétrées sur les différentes valeurs liées aux composants détectés. De même, une alarme générale (Alarm 0) peut être générée en cas de défaut sur l'ensemble chromatographe-sélection de voies-cycle arrêté-application.



Vous devez affecter un périphérique de commande et un relais à chaque alarme.

### 2.4.2 Options

Dans le sous-menu "Alarms\Options", la fenêtre suivante apparaît :



S'il n'est pas nécessaire d'afficher l'alarme générale, décochez l'option '**Display general alarm**'.

Option '**Positive logic for alarms**' : cette option doit être cochée si le contact des relais doit être ouvert sur alarme.

Option '**Stop analyses if analog input alarm**' : cette option est utile s'il y a des entrées analogiques configurées. Si la valeur de l'entrée analogique dépasse un seuil programmé, il est alors possible de stopper le cycle d'analyses, par exemple si la température d'un four est inférieure à une consigne.

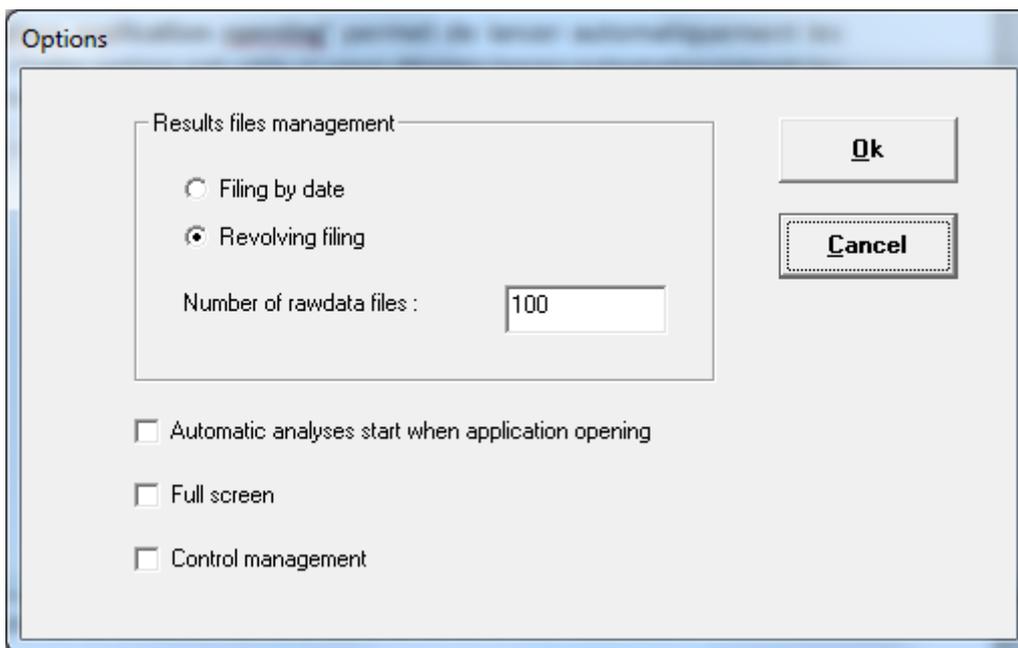
'**Time before alarm if analyzes not carried out**' : Si au bout de ce temps, aucune analyse n'a été effectuée, Prochem génère une alarme. Cette option permet de générer une alarme si le chromatographe a un défaut et qu'il n'arrive pas à obtenir son état prêt.

'**Time before inhibition of alarms**' : Si au bout de ce temps, les alarmes n'ont pas été acquittées, Prochem inhibe ces alarmes. Cette option est intéressante si aucune action n'est à effectuer en cas d'alarme.

## 2.5 Le menu Settings

### 2.5.1 Options

Via le sous-menu "**Settings\Options**", vous pouvez sélectionner les différentes options suivantes :



L'option '**Results files management**' permet de définir le nom des fichiers d'analyses et le répertoire de stockage. Il sera en fonction de la date avec l'option 'Filing by date'. Avec l'option 'revolving filing', le répertoire est toujours le même mais au bout d'un certain nombre, le compteur est remis à 1.

L'option '**Automatic analyses start when application opening**' permet de lancer automatiquement les analyses lorsque Prochem est lancé. Cette option est utile si vous désirez lancer automatiquement les analyses après une coupure secteur.

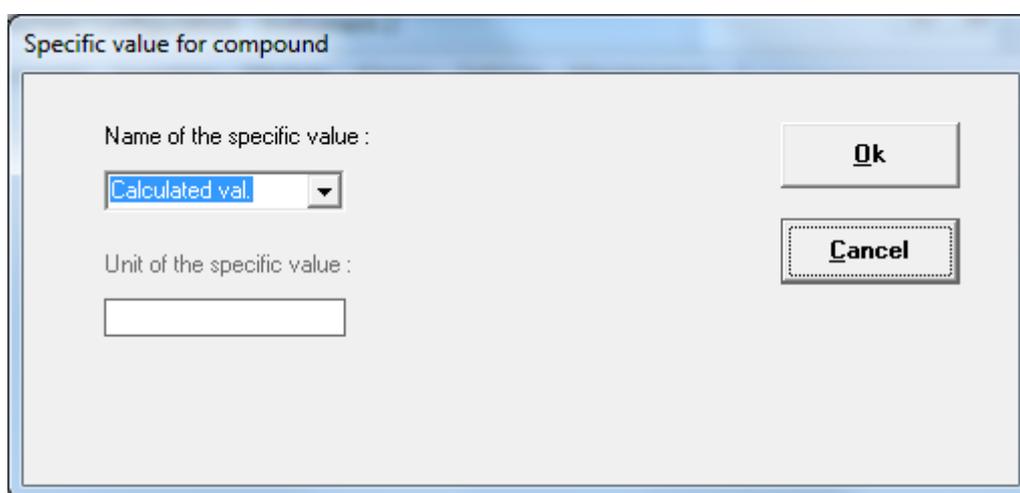
L'option '**Full screen**' n'est plus utilisée.

L'Option '**Control management**' : Par défaut, Prochem permet d'effectuer une programmation des séquences à heures fixes tous les jours. En cochant l'option 'Control management', cette programmation est modifiée et il est possible de programmer à heure fixe une séquence mais la programmation peut être repérée au bout d'un certain nombre d'heures (tous les jours, toutes les semaines, tous les mois) pour effectuer par exemple une vérification.

### 2.5.2 Calculated value

Le sous-menu "**Settings\Calculated value**" est utilisé lorsqu'il y a un calcul spécifique effectué dans la macro de traitement des résultats de la Chemstation.

Par exemple, elle peut permettre le calcul d'une quantité par rapport à un débit lu. Dans ce cas, il est nécessaire que Prochem tienne compte de ce calcul et l'affiche dans la fenêtre des résultats.

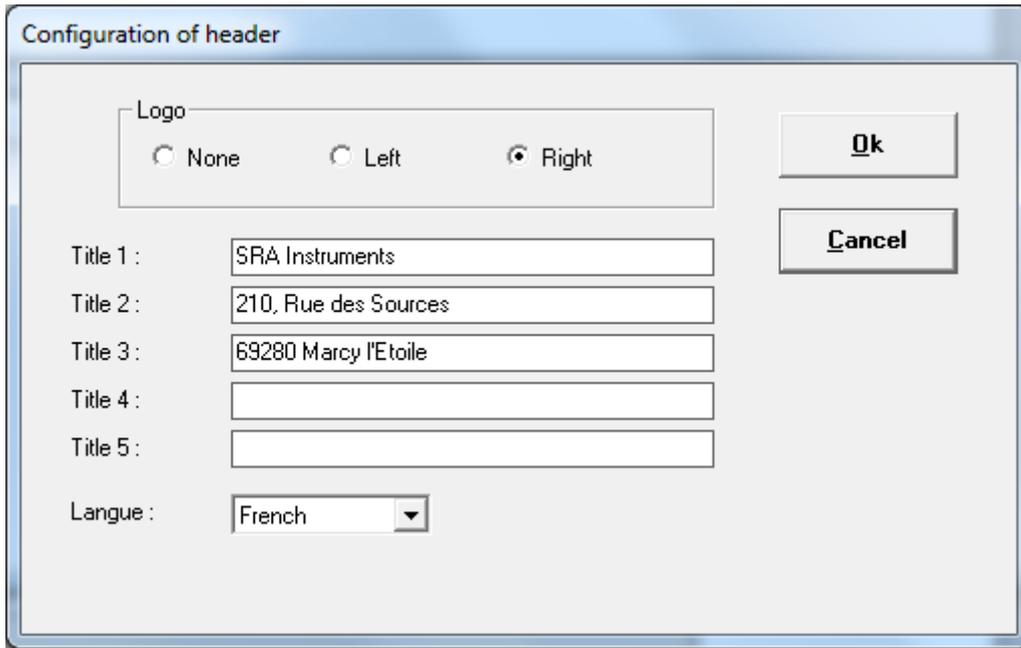


Si aucun calcul n'est effectué, il est alors possible d'afficher la hauteur de pic (height).

### 2.5.3 Report\Company

Dans certains cas, il est nécessaire que le nom de la société apparaisse lorsque le rapport d'une analyse est imprimé. Il est alors nécessaire de renseigner les informations de la société.

Cela peut être effectué via le sous-menu "**Settings\Report\Company**" ; la fenêtre suivante s'affiche :

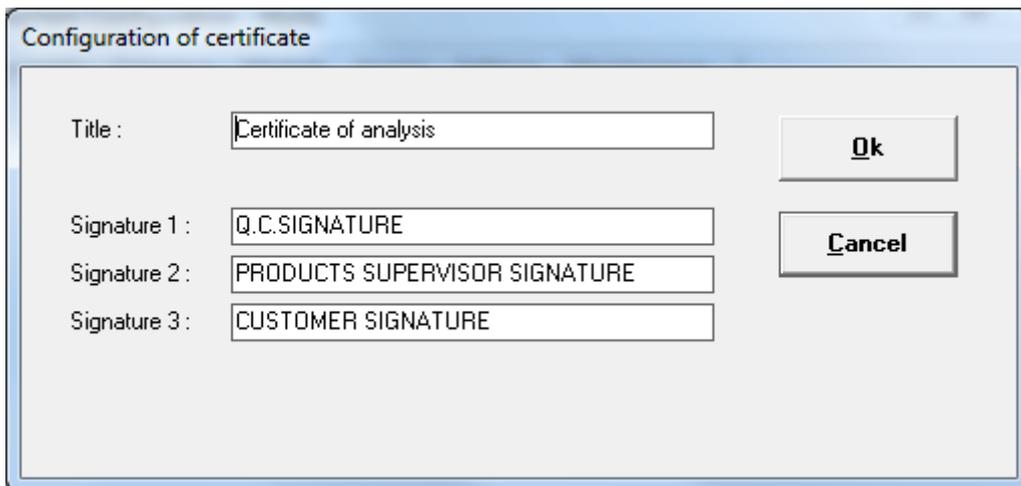


Il est possible d'ajouter un logo à l'impression. Le fichier doit être sous format d'une image, doit être dans le même répertoire que Prochem et doit s'appeler 'logo.bmp'

A noter, ce menu est protégé par le mot de passe 0478442947

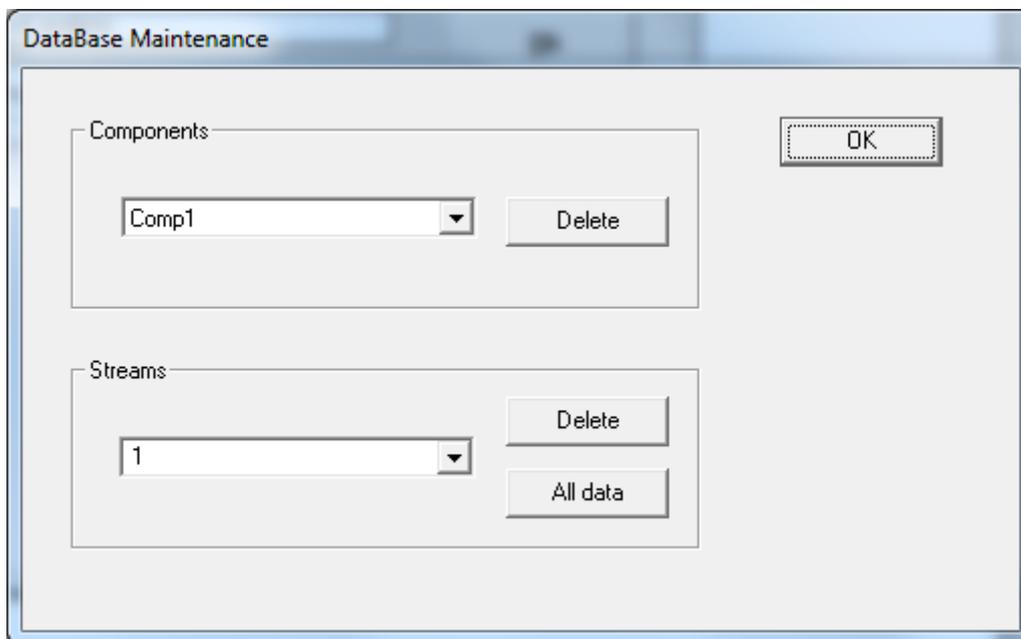
### 2.5.4 Report\Certificate

Dans certains cas, il est nécessaire que le rapport soit imprimé sous forme de certificat. Ce sous-menu permet de renseigner les différents champs du certificat. A noter, ce menu n'est visible que si l'option 'Calculs' est activée au niveau de la clé de protection.



## 2.6 Le menu Maintenance

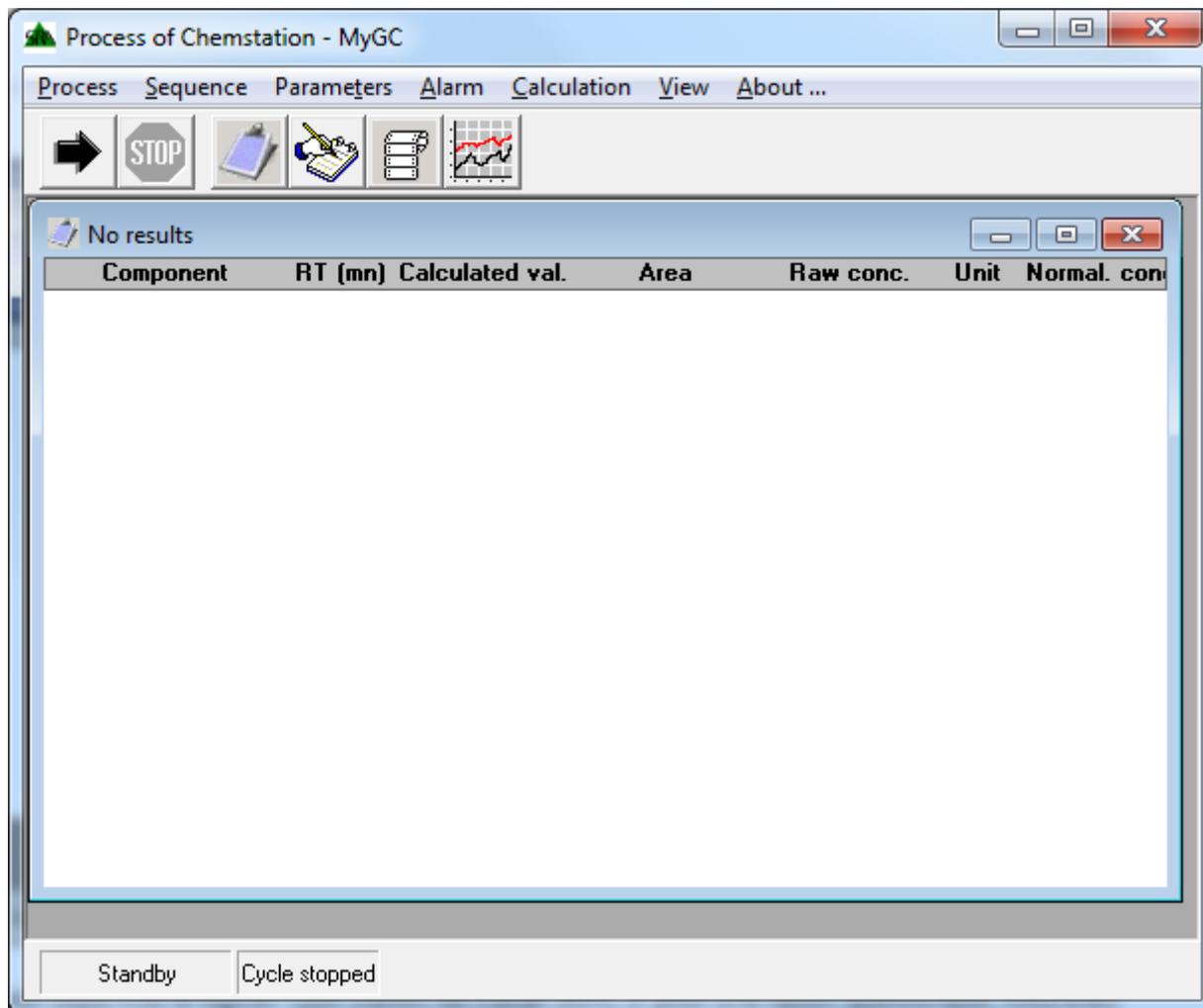
Le menu "**Maintenance**" permet d'effectuer certaines actions sur la base de données de Prochem (voir le chapitre 8 – Description de la base de données).



A chaque analyse, Prochem récupère les résultats de la station de travail et si un nouveau composant est créé, il ajoute ce nouveau composant à la base de données. Mais si un composant est retiré de la table, le nom de ce composant n'est pas supprimé de la base et il est toujours affiché. Vous pouvez donc le supprimer avec ce menu.

De même, dans certains cas, vous pouvez ne pas vouloir conserver certains résultats pour des voies d'analyses, il est donc possible de les supprimer à ce niveau.

## 3. Utilisation de Prochem



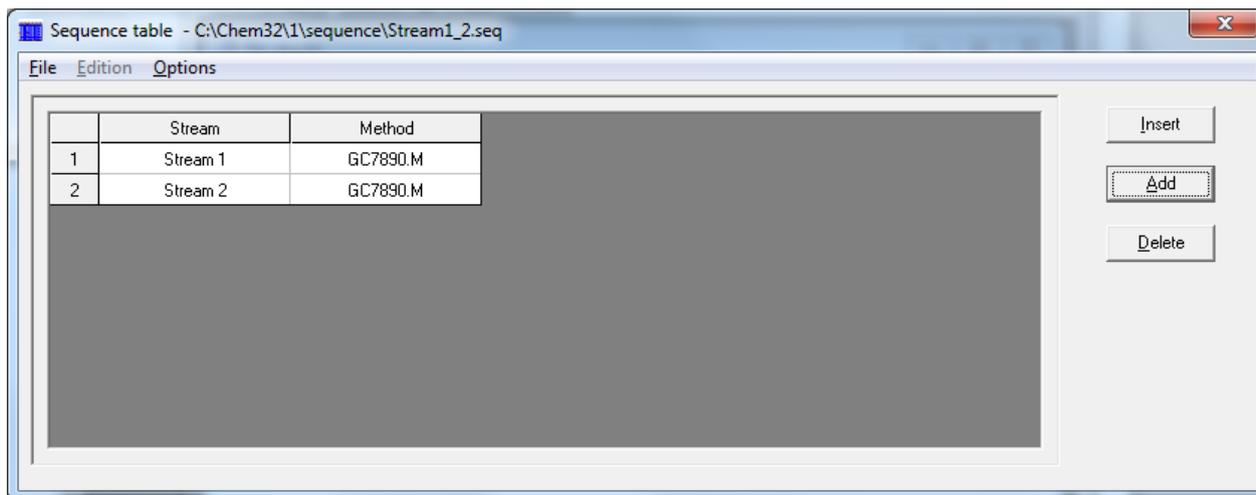
**NOTE :** Ce logiciel supervise le logiciel type station de travail donc, si pour une raison quelconque, vous êtes amené à fermer cette application, il est préférable de fermer aussi le logiciel Prochem.

### 3.1 Gestion des séquences

#### 3.1.1 Table des séquences

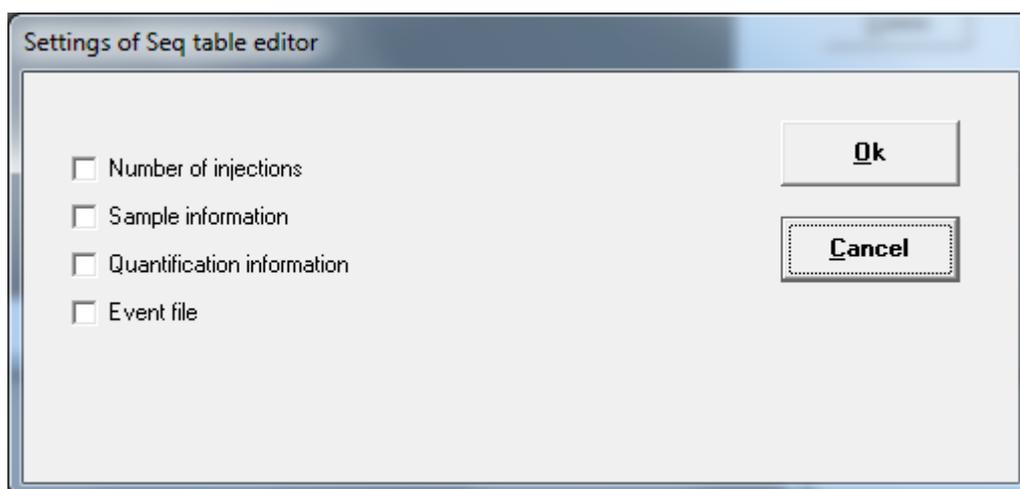
Prochem permet de créer et gérer les analyses par des séquences. Ces séquences sont éditées directement au niveau du logiciel via le menu "**Sequence\Sequence table**".

La gestion de ces séquences dépend ensuite du mode de lancement des analyses (voir le paragraphe 3.1.3).



Si l'option 'Sélecteur de stream' n'est pas active, le paramètre 'Stream' est remplacé par l'emplacement du flacon 'Location' à analyser.

Le menu Options permet d'ajouter des colonnes supplémentaires à l'édition de la séquence.



L'option 'Sample information' permet de faire apparaître les colonnes 'Sample Type' et 'Cal level' dans le tableau de séquences. Il est alors possible de définir des types d'analyse standard, blanc, vérification ou étalonnage. Dans ce dernier choix, il est nécessaire de renseigner le niveau de calibration dans la colonne 'Cal level'.

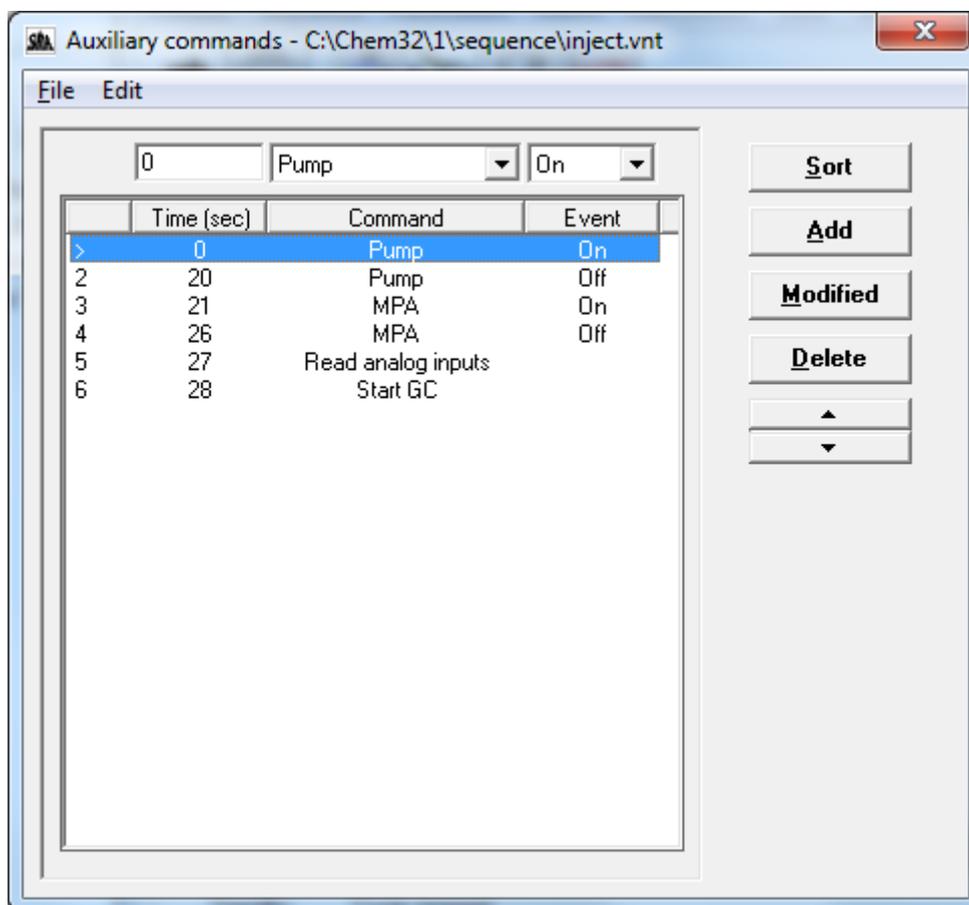
Si l'option 'Quantification information' est cochée, les colonnes suivantes sont affichées :

- Sample amount
- Istd amount
- Multiplier
- Dilution

Si l'option 'Event file' est cochée, il est possible de définir une table d'évènement pour chaque analyse. Mais dans ce cas, il n'est plus possible de sélectionner une table d'évènement lors du lancement des analyses.

### 3.1.2 Commandes auxiliaires

Prochem permet de piloter différentes commandes avant et après injection telles que la sélection d'une voie d'analyse, la commutation d'une pompe d'aspiration, vanne d'isolement ou de mise à pression atmosphérique. Ces commandes sont programmées dans une table d'évènement qui est éditable via le menu "Sequence\Auxiliary commands".



Suivant la configuration effectuée, vous avez le choix entre plusieurs commandes :

- **'Read analog inputs'** : cette commande permet de sauvegarder à un temps la valeur des entrées analogiques.
- **'Select the current stream'** : à utiliser généralement avant l'injection. Elle permet de sélectionner la voie à analyser et d'attendre un temps certain avant l'injection. Si ce temps n'est pas programmé, il peut être remplacé par le temps renseigné dans le champ 'Sampling time minimum' de Prochem Configuration.
- **'Select the next stream'** : ce temps est généralement renseigné après l'injection et permet de basculer sur la voie d'analyse qui sera effectuée ensuite.
- **'Select the default stream'** : ce temps est généralement renseigné après l'injection et permet de basculer sur la voie par défaut afin d'économiser l'échantillon à analyser.
- **'Select the stream'** : cet évènement permet de basculer sur une voie d'analyse particulière.

La commande '**Start GC**' est une fonction bien particulière suivant la configuration définie avec Prochem Configuration et suivant la station de travail pilotée ; elle indique à quel moment Prochem doit préparer l'analyse.

Dans le cas d'OpenLab ChemStation, plusieurs cas peuvent être rencontrés en fonction de la configuration :

- Si le paramètre de la ChemStation 'Injection source' est configuré en 'Manual' et que l'option 'External device injection' de Prochem n'est pas active, cette commande n'est pas nécessaire et Prochem prépare directement l'analyse.
- Si le paramètre de la ChemStation 'Injection source' est configuré en mode 'GC Valve' et qu'il n'y a aucun évènement à gérer ou que l'option 'External device injection' de Prochem est activée (exemple : cas où le start est donné par un logiciel exécuté en tant que PreRun Command dans la méthode de la ChemStation ou un contact sec pour la MSD ChemStation), la commande n'est pas nécessaire et Prochem prépare directement l'analyse.
- Dans les autres cas, elle doit être programmée dans la table d'évènements. Si elle n'est pas présente, elle est rajoutée en fin de table d'évènements.

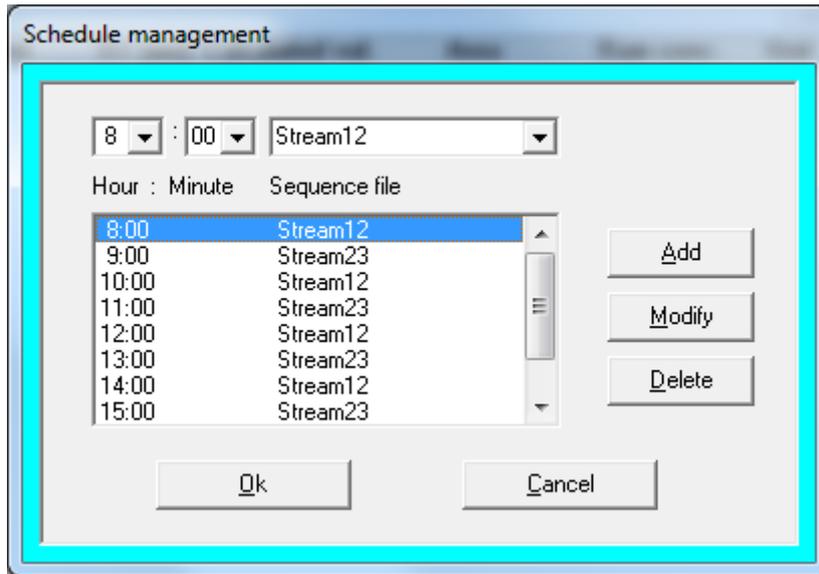
Dans le cas de Mass Hunter, elle n'est pas forcément nécessaire car Prochem lance automatiquement la préparation des analyses afin que Mass Hunter (chromatographe) passe de l'état 'Idle' à l'état 'Prerun'.

Suivant le système d'injection, le fait de passer à l'état 'PreRun' lance son cycle d'injection. Mais dans certains cas, Prochem doit activer une commande auxiliaire avant l'injection et désactiver cette commande après l'injection. Alors la commande 'Start GC' est nécessaire pour indiquer à Prochem qu'il doit attendre la fin de l'injection pour prendre en compte la durée d'injection et ne pas en tenir compte par rapport aux temps des commandes à effectuer après l'injection. Pour la configuration de la méthode, voir le chapitre 6.2.1.

A partir de la version 3.0.0, il est possible d'insérer une action à valider par une entrée logique dans le cycle de la table des événements (exemple : en attente d'un état prêt ou de démarrage externe). Tant que l'action n'a pas été validée, le cycle de la table d'évènements est en pause. Après validation, il reprend son cycle où il était. Si des actions doivent être effectuées ensuite, il n'est pas nécessaire de prendre en compte le temps.

### 3.1.3 Scheduler

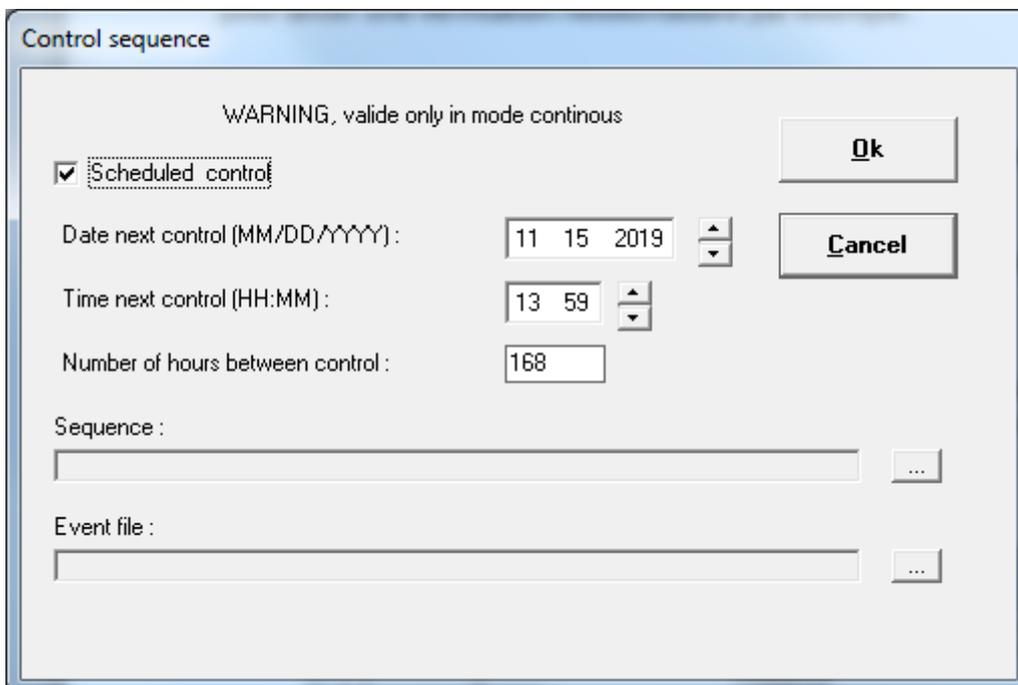
Dans le cas où l'option 'Control management' de Prochem Setup n'est pas activée, il est possible de programmer le lancement de séquences à heures fixes tous les jours.



Renseignez la liste des heures et séquences utilisées. A noter, le fichier des séquences doit être dans le répertoire Sequence du répertoire de l'instrument.  
 Bien sûr, cette table n'est active que si les analyses sont lancées avec l'option 'Schedule'.

### 3.1.4 Control

Dans le cas où l'option 'Control management' de Prochem Setup est activée, il est possible de programmer le lancement d'une séquence à une heure fixe et la répéter toutes les x heures. Cette option peut être utile pour lancer une vérification hebdomadaire par exemple.

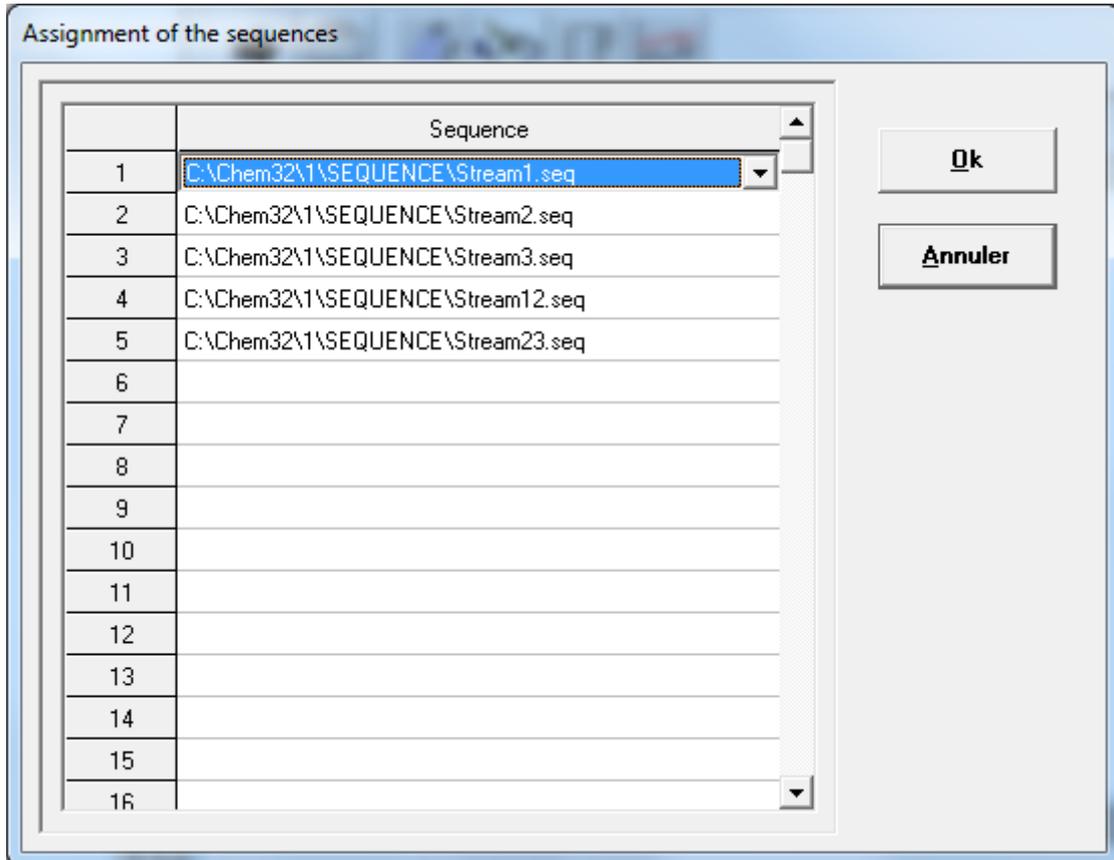


Renseignez l'heure et la date du lancement de la prochaine séquence, la séquence à effectuer et la table d'évènement à utiliser.

A noter : la séquence ne sera lancée que si les analyses sont effectuées en mode continu.

### 3.1.5 Assignment

Si l'option 'Modbus' est activée, il est possible de lancer des analyses depuis un superviseur externe soit en mode analyse soit en mode séquence. Pour le mode séquence, il est nécessaire de renseigner un numéro correspondant à la séquence choisie. Ces numéros sont affectés avec le sous-menu "Sequence\Assignment".



Le fichier des séquences doit être stocké dans le répertoire Sequence du répertoire de l'instrument.

## 3.2 Lancement des analyses

Les analyses sont lancées par le menu "Process\Start" ou par l'icône "Flèche".

Le répertoire de stockage des analyses est composé d'un paramètre 'path' et d'un sous-paramètre 'Subdirectory'. Le paramètre 'path' est configuré dans la ChemStation .

Le nom de l'analyse est constitué du paramètre 'Data file name' et du paramètre 'Counter'. Ce sera incrémenté à chaque analyse.

Vous pouvez sélectionner le mode de travail :

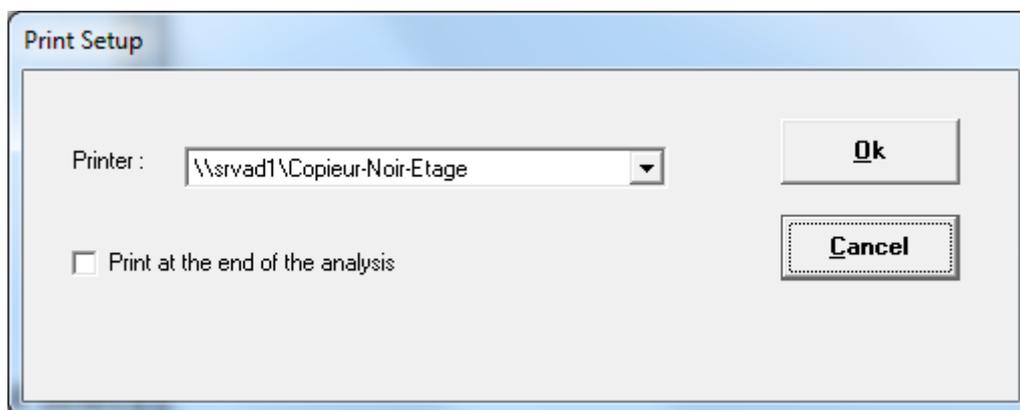
- **'Analysis'** : Prochem effectuera le nombre d'analyses programmées dans le champ 'Number of programmed analyses'. Si vous sélectionnez 'Continuous', il enchaînera en permanence les analyses. Vous devez choisir la méthode utilisée et sélectionner le stream à balayer. Le bouton 'Options' vous permet de programmer un temps entre chaque injection.
- **'Sequence'** : Vous devez sélectionner la séquence utilisée. Vous pouvez programmer un nombre de séquences à effectuer ou travailler en continu. Le bouton 'Option' vous permet de programmer un temps entre chaque séquence.
- **'Schedule'** : Avec cette option sélectionnée, les analyses sont effectuées suivant la programmation définie dans le menu "**Sequence\Scheduler**". A noter, le bouton 'Options' vous permet de modifier cette programmation.

Le bouton 'Apply' permet de valider les choix effectués (méthode et table d'évènements) dans le cas d'un lancement d'analyse par Modbus.

### 3.3 Impression des analyses

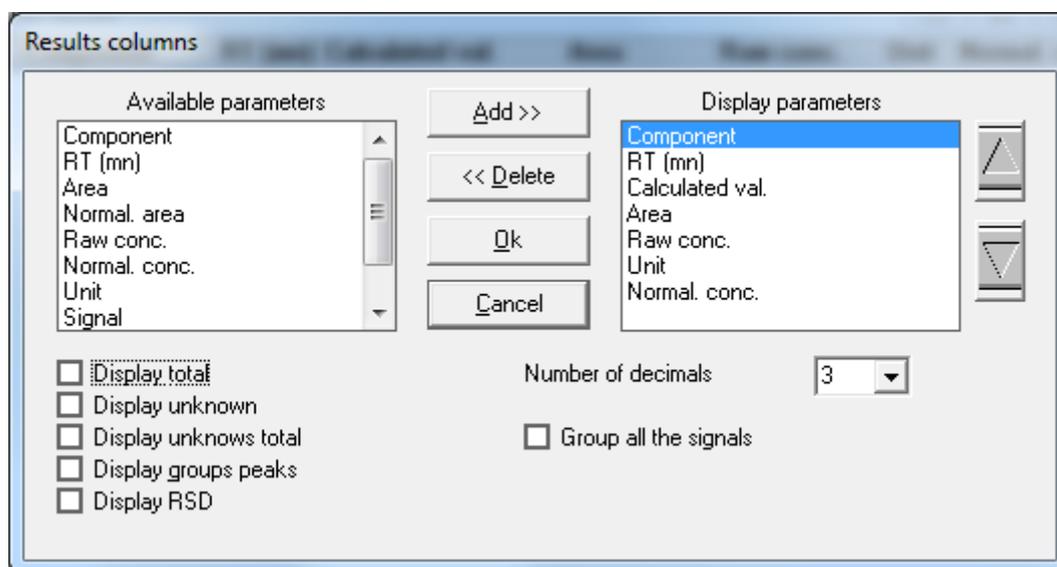
Le sous-menu "Process\Print\Analysis" permet d'imprimer les résultats affichés dans la fenêtre "Results".

Le sous-menu "Process\Print\Setup" vous permet de configurer l'imprimante à utiliser. Vous pouvez aussi demander à imprimer ces résultats à chaque fin d'analyse.



### 3.4 Sélection des résultats affichés

Le sous-menu "Parameters\Display columns" vous permet de sélectionner les résultats affichés dans la fenêtre "Results".



Sélectionnez le paramètre dans la liste 'Available parameters' et cliquez sur le bouton 'Add' pour l'ajouter à la liste 'Display parameters'.

Le paramètre '**Normal. area**' correspond à la normalisation des surfaces. Ce calcul est effectué sur l'ensemble des détecteurs du chromatographe si l'option 'group all the signals' est active.

Le paramètre '**Signal**' correspond au numéro du détecteur utilisé pour analyser le composant.

Le paramètre '**Normal. conc.**' correspond à la normalisation des concentrations. Ce calcul est effectué sur l'ensemble des détecteurs du chromatographe si l'option 'group all the signals' est active.

Le paramètre '**Calculated val.**' correspond à l'affichage d'une valeur calculée en relation avec la concentration. Dans le cas d'une version Prochem RGA, ce sera la concentration massique mais cette valeur peut correspondre aussi à une valeur de concentration corrigée par rapport à un débit, une pression, une température ou un calcul défini par une macro développée spécialement (voir paragraphe 2.5.2 Calculated value). Ce paramètre peut être remplacé par la hauteur (height).

Le '**Number of decimals**' permet de définir le nombre de chiffres significatifs lors de l'affichage des concentrations dans la fenêtre "Results" et dans la fenêtre "Analysis series".

De même, les options d'affichage : affichages totaux ('**Display total**'), affichages inconnus ('**Display unknown**'), affichage du total des inconnus ('**Display unknowns total**') et affichage des groupes de pics ('**Display groups peaks**') sont utilisées pour ces deux fenêtres.

Seule, l'option Affichage RSD ('**Display RSD**') est utilisée pour l'affichage de la somme des carrés des écarts (Relative Standard Deviation) dans la fenêtre "Analysis series".

Les résultats peuvent être affichés de façon complète pour une analyse (menu "**View\Results**") ou sous forme de série d'analyse (menu "**View\Analysis series**"). Dans ce cas, la valeur affichée est sélectionnée en effectuant un clic-droit sur le tableau de la fenêtre "Analysis series".

Si vous effectuez un double-clic gauche sur la ligne d'une analyse, vous pouvez visualiser l'ensemble des résultats de cette analyse dans la fenêtre "Results".

## 3.5 Alarmes

### 3.5.1 Acquiescement des alarmes

L'acquiescement des alarmes s'effectue par le sous-menu "**Alarm\Acquit**", que ce soit pour une alarme liée au chromatographe, au sélecteur d'échantillons ou qu'elle soit liée à un défaut de dépassement de seuils.

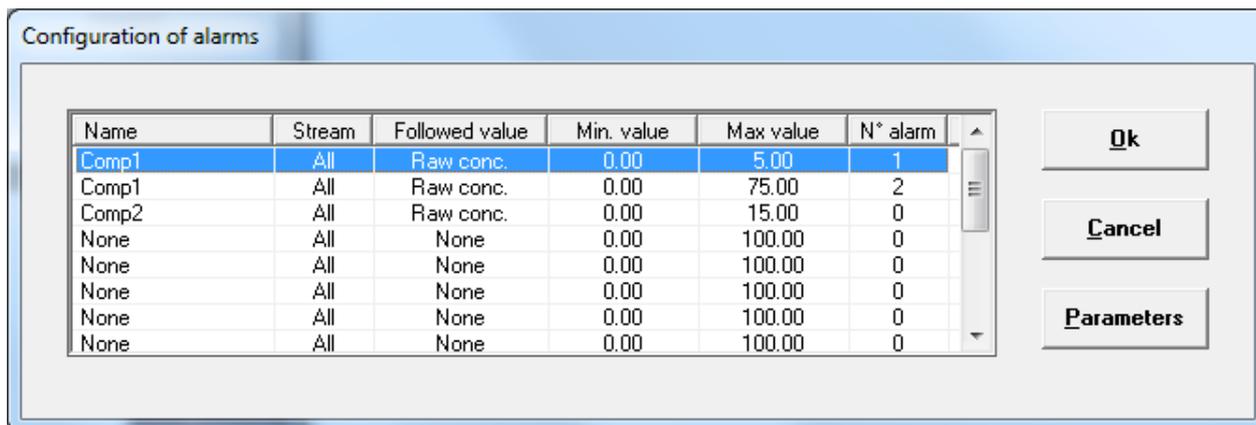
Vous pouvez aussi cliquer sur l'icône "Alarme".

Pour le dépassement de seuil, le défaut est acquiescé lors du traitement de nouveaux résultats.

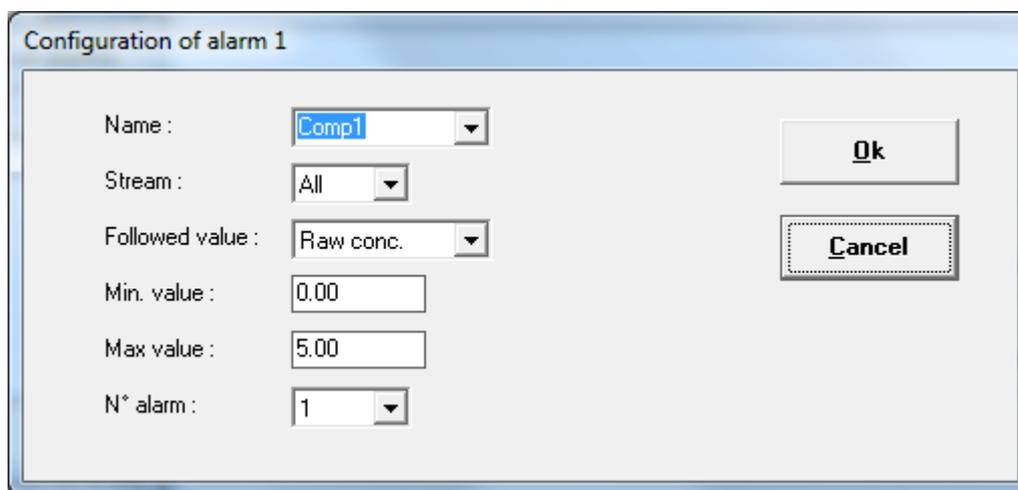
### 3.5.2 Définitions

Prochem permet de programmer 16 alarmes seuil liées à la concentration des constituants. En cas d'alarme, les valeurs correspondant à ce composant sont affichées en rouge. Ces alarmes peuvent être associées à des relais en fonction du numéro d'alarme, sachant que l'alarme 0 correspond à l'alarme générale.

Vous pouvez définir les alarmes par le sous-menu "**Alarm\Parameters**".



Si vous cliquez sur le bouton 'Parameters', vous obtenez l'affichage suivant :

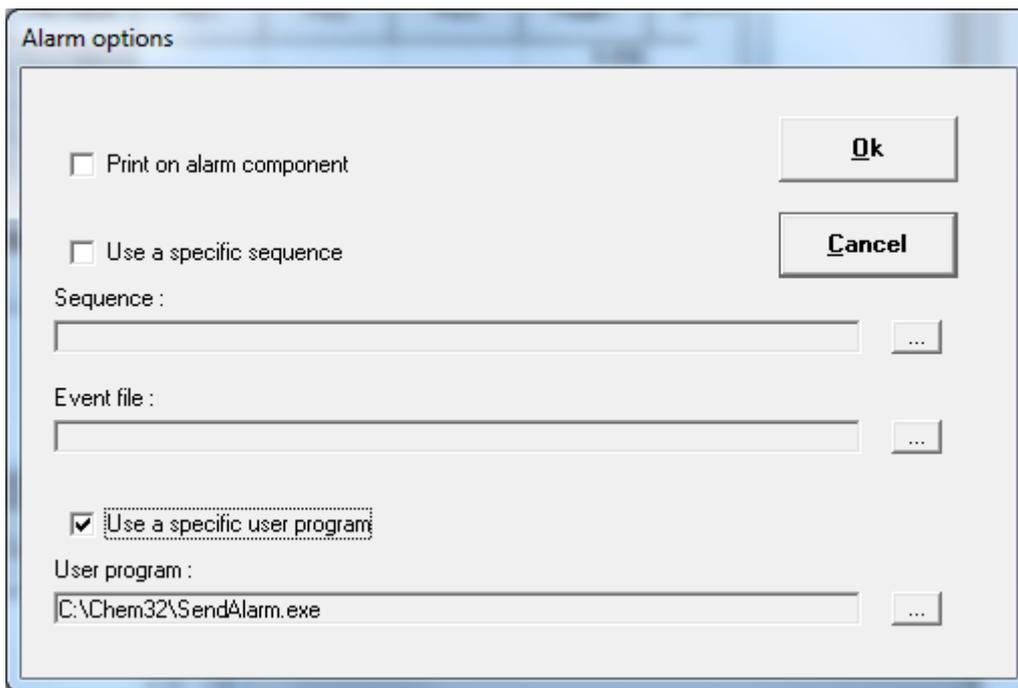


Le numéro de l'alarme permet d'affecter un relais à cette alarme (voir chapitre 3.4).

### 3.5.3 Options

En cas d'alarme composant, il est possible de modifier la gestion des séquences ou lancer un programme spécifique, via le sous-menu "**Alarm\Options**".

Renseignez les différents champs de cette fenêtre pour effectuer l'action adéquate.

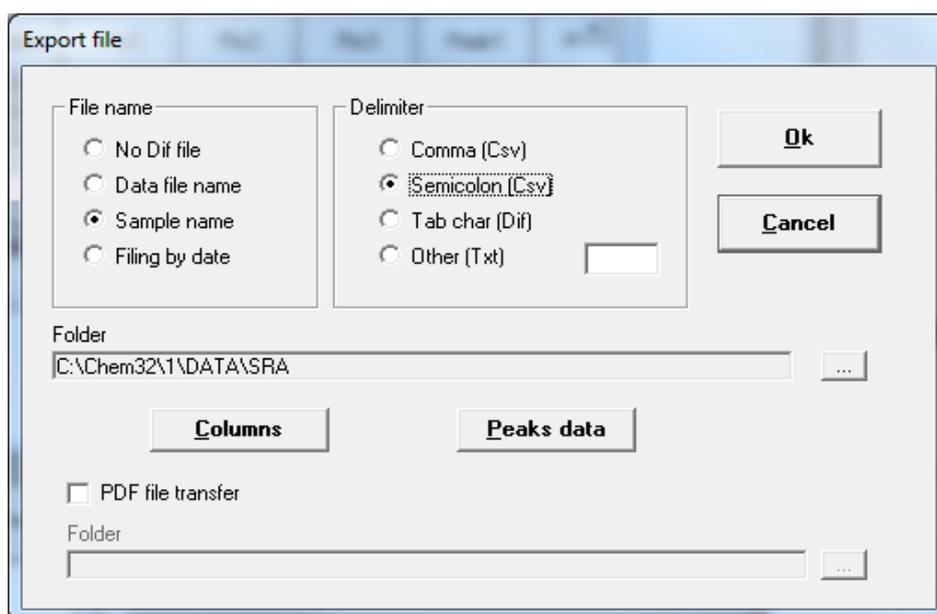


### 3.6 Paramètres

#### 3.6.1 Export file

Prochem permet de stocker les résultats des analyses, sous forme historique, dans un fichier directement exploitable par des tableurs (Excel par exemple). Ces fichiers sont également visualisables par un éditeur de texte car chaque champ est en ASCII séparé par un caractère spécial. Prochem crée un fichier pour chaque voie d'échantillon.

Pour configurer l'édition de ces fichiers, sélectionnez le sous-menu "Parameters\Export file". La fenêtre ci-dessous s'affiche :

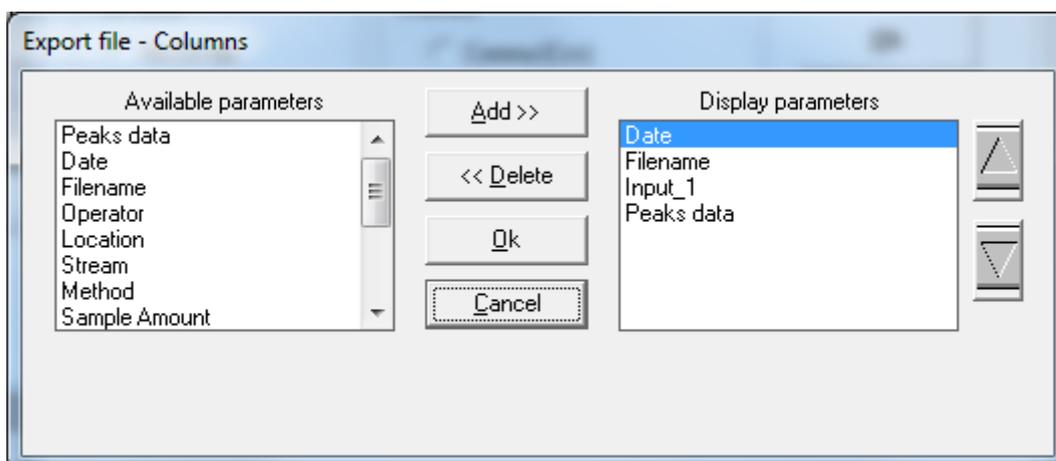


Sélectionnez la façon dont le fichier sera nommé, le type de fichier désiré.

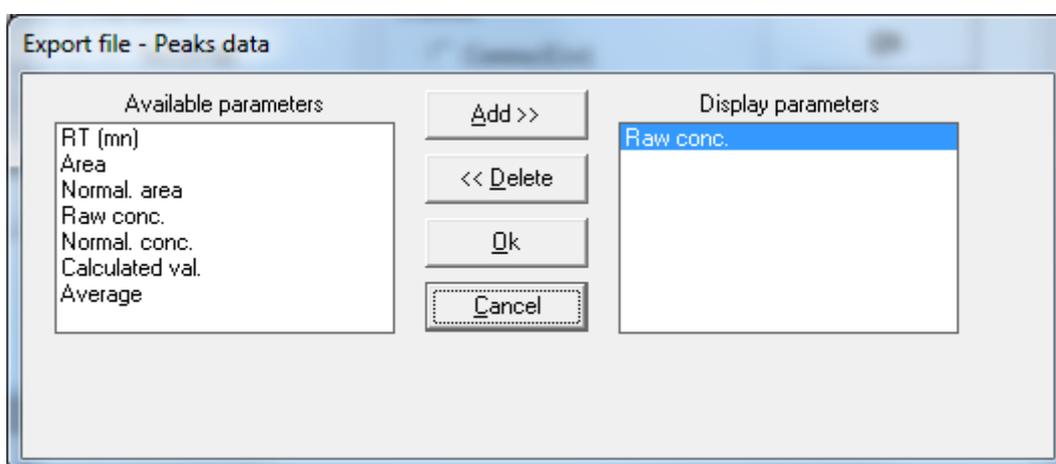
Le nom du fichier est obtenu soit en récupérant le nom de l'analyse ('Data file name'), soit le nom de l'échantillon ('Sample name') ou soit à partir de la date de l'analyse si l'option 'Filing by date' est cochée.

Vous pouvez aussi définir le répertoire de ces fichiers. S'il n'est pas défini, Prochem stocke le fichier dans le répertoire de l'analyse.

Le bouton 'Columns' donne accès aux différentes informations de l'analyse.

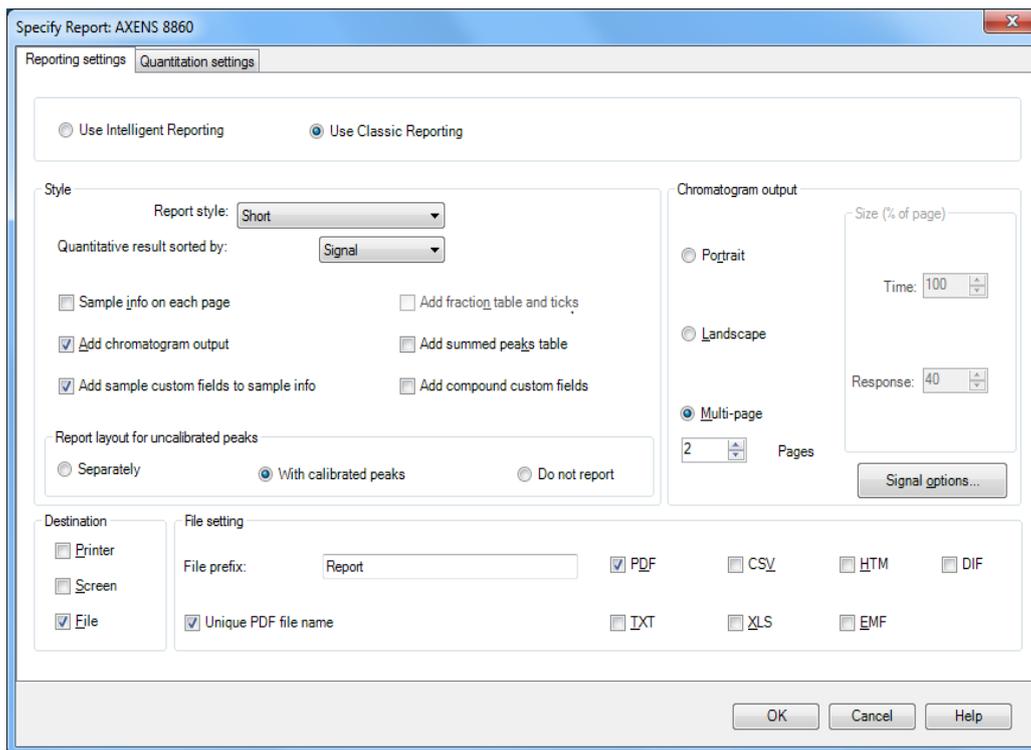


Le bouton 'Peaks data' donne accès à l'ensemble des résultats des composants.



### Option PDF file transfer

Avec OpenLab Chemstation, il est possible de créer des fichiers PDF dans le répertoire de l'analyse mais il n'est pas possible de les transférer vers un disque réseau. Prochem permet cette possibilité grâce à l'option '**PDF file transfer**'. Sélectionner le répertoire sur le réseau et Prochem stockera les fichiers générés au même endroit. Si le réseau n'est pas disponible au moment de la création, il les stocke sur l'ordinateur en attendant que le réseau soit restauré puis il copiera les fichiers stockés. Cette option nécessite que la génération des fichiers PDF soit configurée correctement au niveau de la Chemstation.

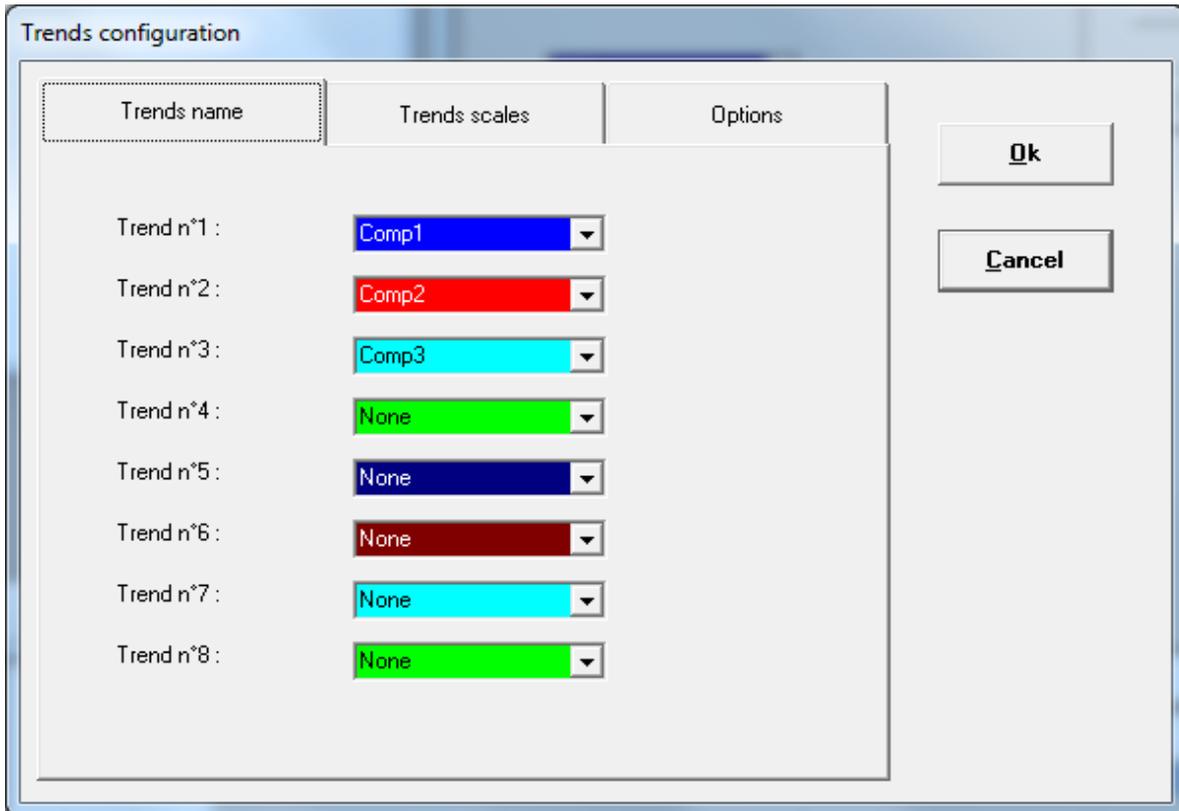


Avec Mass Hunter, il n'est pas possible de générer des fichiers PDF. Prochem utilise alors l'application 'PDF Creator' pour générer ses propres rapports PDF. Cette application est disponible sur la clé USB d'installation de Prochem.

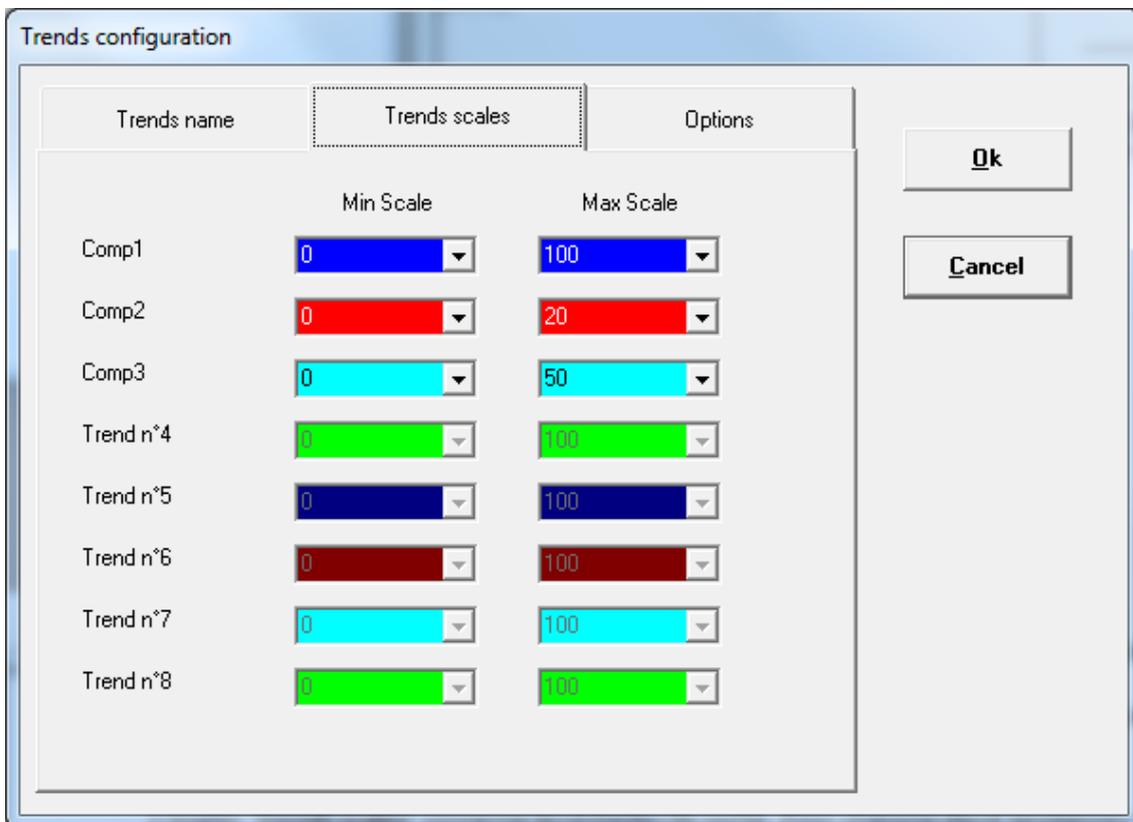
### 3.6.2 Tendances

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

Le sous-menu "**Parameters\Trends\Property**" permet l'accès à une feuille utilisée pour la programmation de ces tendances :

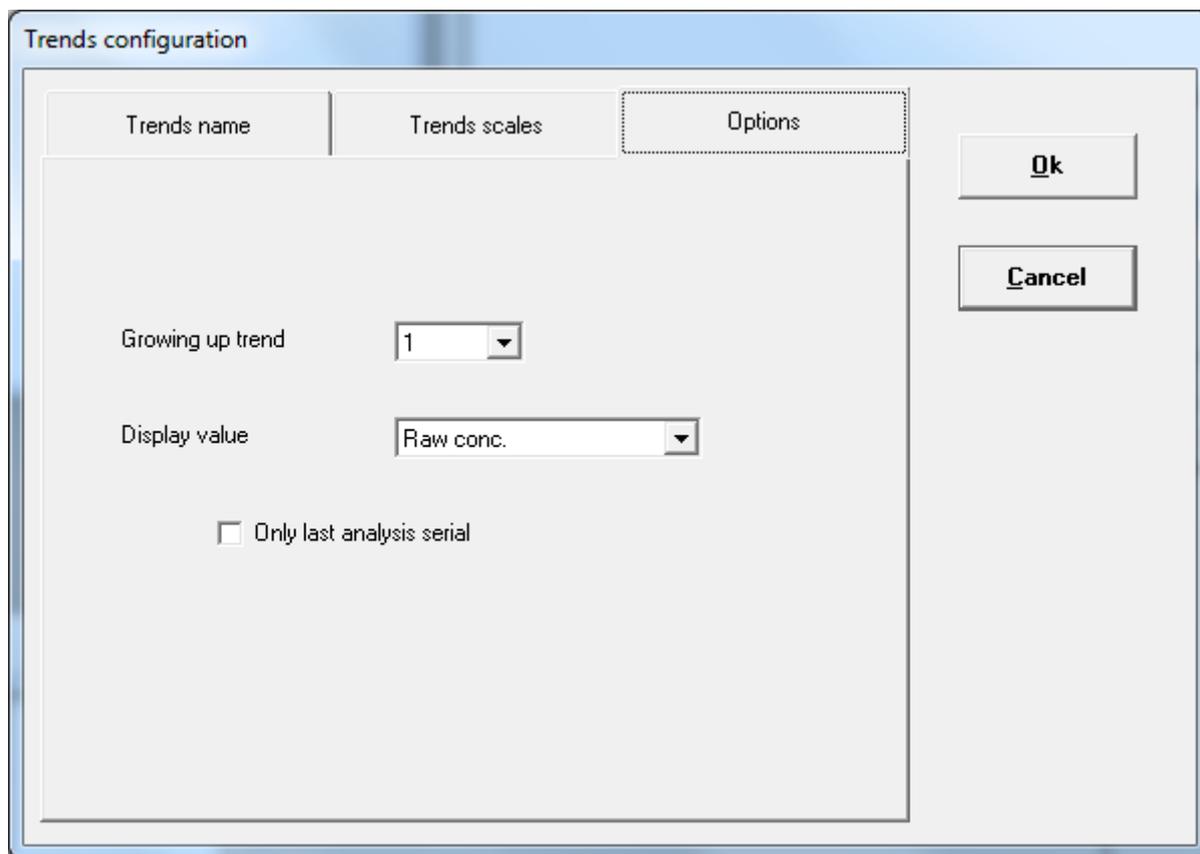


L'onglet 'Trends name' permet de définir les 8 valeurs suivies indépendamment les unes des autres.



L'onglet '**Trends scales**' concerne les échelles de sortie. Pour chacune des 8 tendances, vous devez 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. **Il est préférable de modifier d'abord la valeur maximale.**

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

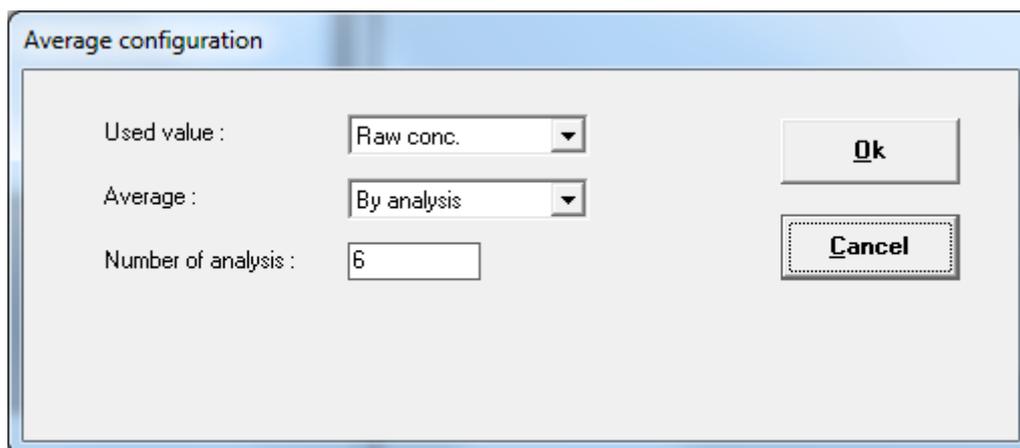


Dans l'onglet '**Options**', vous pouvez définir une plage d'heure de façon à visualiser l'évolution des valeurs ou afficher la totalité de tendances. Vous pouvez aussi définir la valeur visualisée.

### 3.6.3 Moyenne

Prochem permet de calculer des valeurs moyennes horaire ou sur un nombre d'analyses.

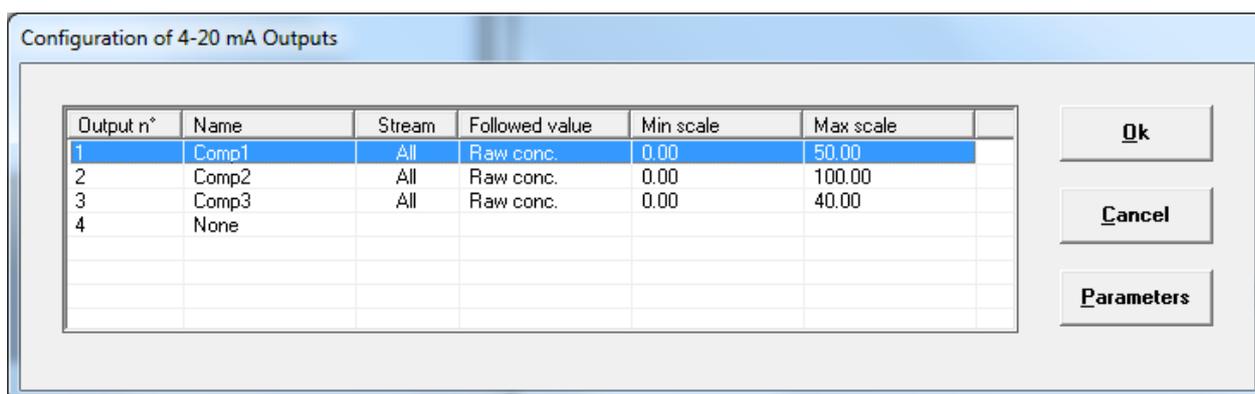
Sélectionnez le sous-menu "**Parameters\Average**" ; la fenêtre ci-dessous s'affiche :



Vous devez sélectionner la valeur suivie, le type de moyenne et soit la plage horaire soit le nombre d'analyses.

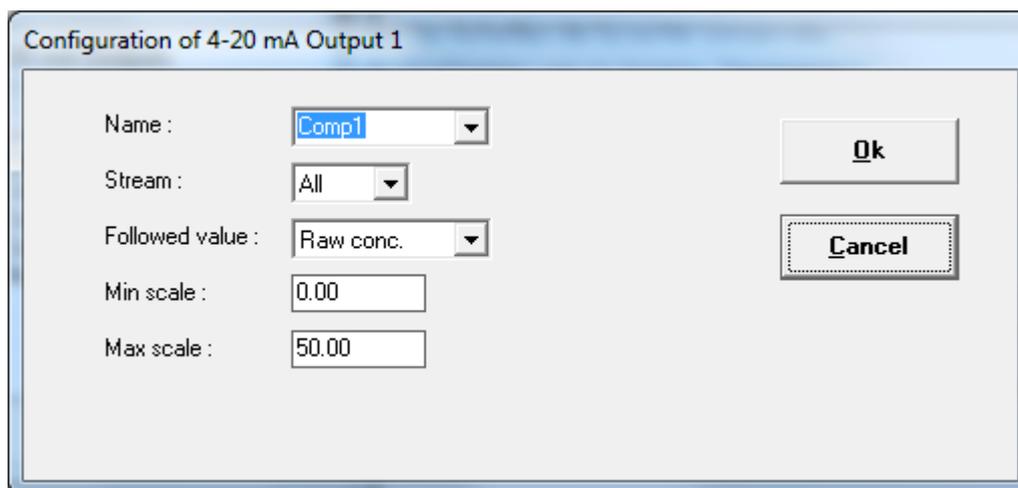
### 3.6.4 Sorties analogiques 4-20 mA

Ce menu n'est accessible que si votre configuration est équipée de sorties analogiques 4-20 mA.



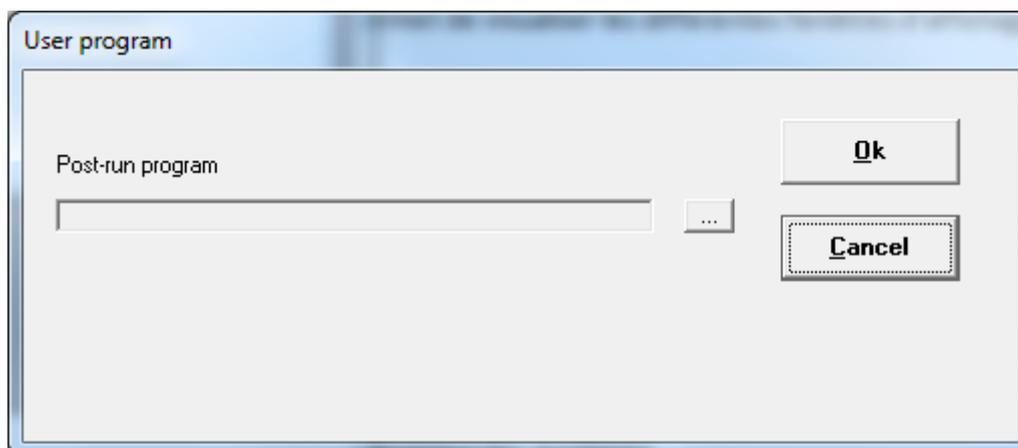
Vous pouvez alors définir le nom du constituant, le numéro de la voie d'échantillon si la valeur est propre à une voie, la valeur suivie et les échelles de la sortie concernée.

Tous ces paramètres sont modifiables par le bouton 'Parameters'.



### 3.6.5 User program

Cette fenêtre permet de sélectionner un programme qui sera lancé lorsque les résultats de l'analyse auront été transmis à Prochem.



## 3.7 Affichage

Le menu "View" vous permet de visualiser les différentes fenêtres d'affichage des résultats.

Lorsque vous avez défini un ordre précis d'affichage, il peut être sauvegardé par le sous-menu "Save windows positions". Ainsi, si vous cliquez sur le menu "View\Customized", les fenêtres affichées se recadreront automatiquement.

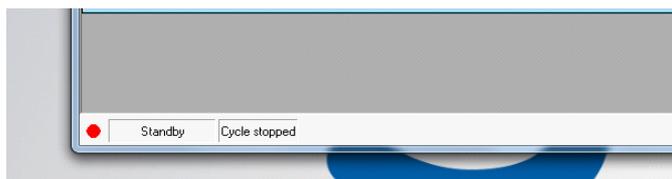
Le sous-menu "Last analyse" permet de visualiser les derniers résultats traités dans la station de travail. Dans le cas d'OpenLab, ces résultats peuvent provenir d'un retraitement.

La fenêtre "Prochem Status" permet d'afficher une fenêtre où sont visualisés le stream sélectionné, l'état des commandes auxiliaires, la valeur des entrées analogiques et l'état de Prochem (temps, prochain évènement). Lorsque le système est hors analyse, il est possible de changer de stream manuellement ou d'activer/désactiver des commandes auxiliaires.

A partir de la fenêtre "**Analysis series**", si vous effectuez un clic droit dans les colonnes de résultats, vous pouvez sélectionner la valeur à afficher, le nombre de décimales et la visualisation des statistiques. Si vous effectuez le clic droit dans l'entête des lignes, vous pouvez copier les lignes sélectionnées et les transférer vers une autre application (Bloc-Note, Word, Excel etc...). Si vous effectuez un double-clic gauche, vous pouvez visualiser l'ensemble des résultats de l'analyse dans la fenêtre "Results".

### 3.8 Couplage entre deux sessions

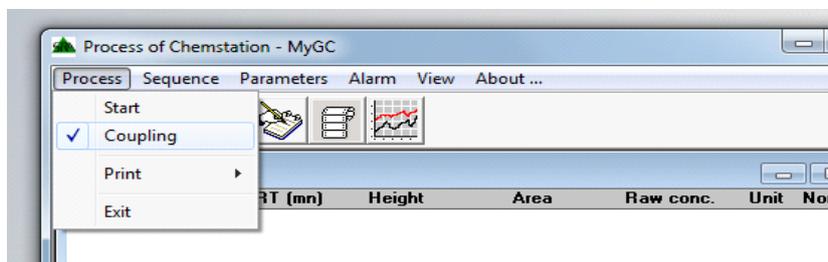
Depuis la version 3.0.0, il est possible de coupler deux sessions de Prochem présentes sur le même ordinateur. Dans cette configuration, un voyant apparaît à gauche de la barre de statut au bas de l'écran.



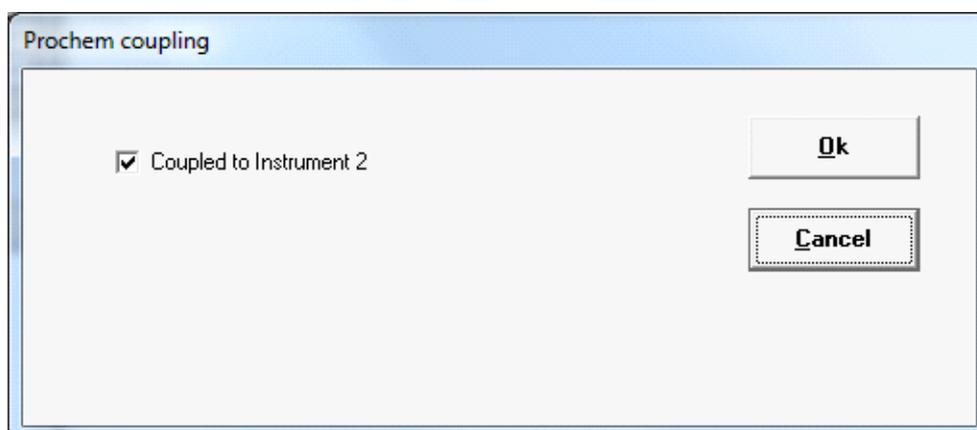
Suivant l'état, il peut prendre plusieurs couleurs :

- Rouge : il n'y a aucun dialogue entre les deux sessions.
- Noir : le couplage est désactivé.
- Bleu : il s'agit de la session maîtresse.
- Vert : il s'agit de la session esclave.

Quand les deux sessions sont couplées, il est possible d'interrompre provisoirement le couplage avec le menu "**Coupling**".



En décochant la case, les deux instruments peuvent alors être lancés séparément.



Lorsque les deux instruments sont couplés, les analyses doivent être lancées normalement depuis l'instrument maître. Si les analyses sont lancées en mode 'Analysis', vous devez vous assurer que la méthode de l'instrument esclave est bien chargée.

Il est possible de changer le répertoire et le nom des fichiers analyses ; pour cela, ouvrir la fenêtre Start de l'instrument esclave, renseigner les champs et valider par le bouton 'Apply'.

Si vous lancez les analyses en mode 'Séquence', vous devez créer les mêmes séquences au niveau de la session esclave et leur assigner les mêmes numéros avec le menu 'Sequence\Assignment'. Il n'est pas nécessaire qu'elles aient le même nom.

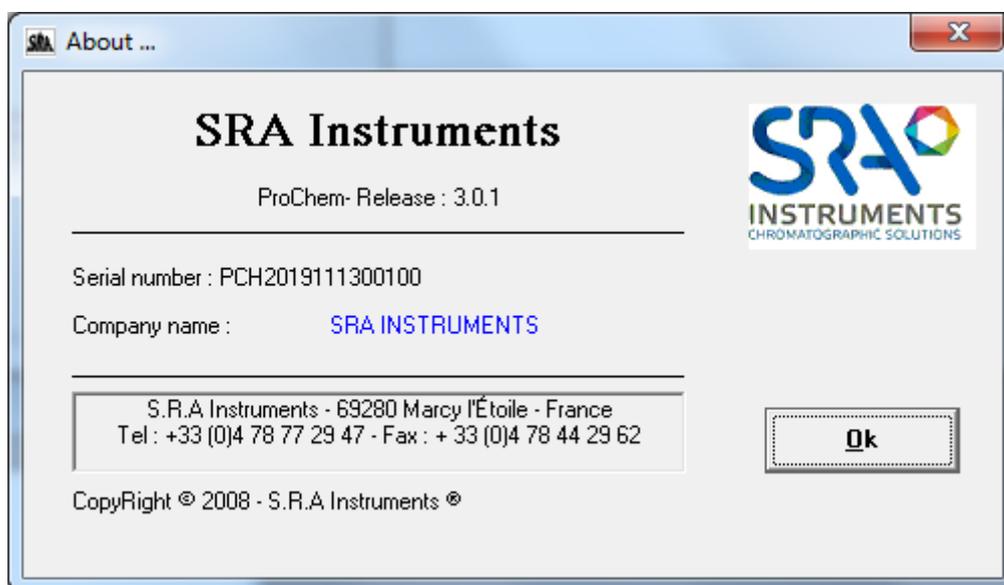
Concernant la table d'évènements, toutes les commandes doivent être gérées par la session maîtresse.

Il n'est pas nécessaire que la durée d'analyse soit identique, la session maîtresse attend que la session esclave ait terminé son analyse pour traiter l'ensemble des résultats : impression, alarme, sorties 4-20 mA et fichier résultats. Si au niveau de la session esclave, il est nécessaire de programmer des alarmes sur les composants, elles doivent être configurées à ce niveau pour l'affichage mais également au niveau du maître pour la gestion des relais.

Pour le Modbus, chaque session a sa propre table d'adresse.

### 3.9 About ...

Ce menu affiche la version de Prochem.



## 3.10 Calculs RGA

Ces menus ne sont accessibles que si l'option "Calculations" est activée.

### 3.10.1 Nom des constituants et valeurs

Le menu "Name, molar and calorific values" permet la définition des noms des constituants et de leurs coefficients utilisés lors des calculs.

	Components	Formula	Molar mass g/mol
1	Helium	He	4.003
2	Hydrogen	H2	2.016
3	Oxygen	O2	31.999
4	Nitrogen	N2	28.014
5	Methane	CH4	16.043
6	Carbon monoxide	CO	28.010
7	Carbon dioxide	CO2	44.010
8	Ethylene	C2H4	28.054
9	Ethane	C2H6	30.070
10	Propylene	C3H6	42.081
11	Propane	C3H8	44.097

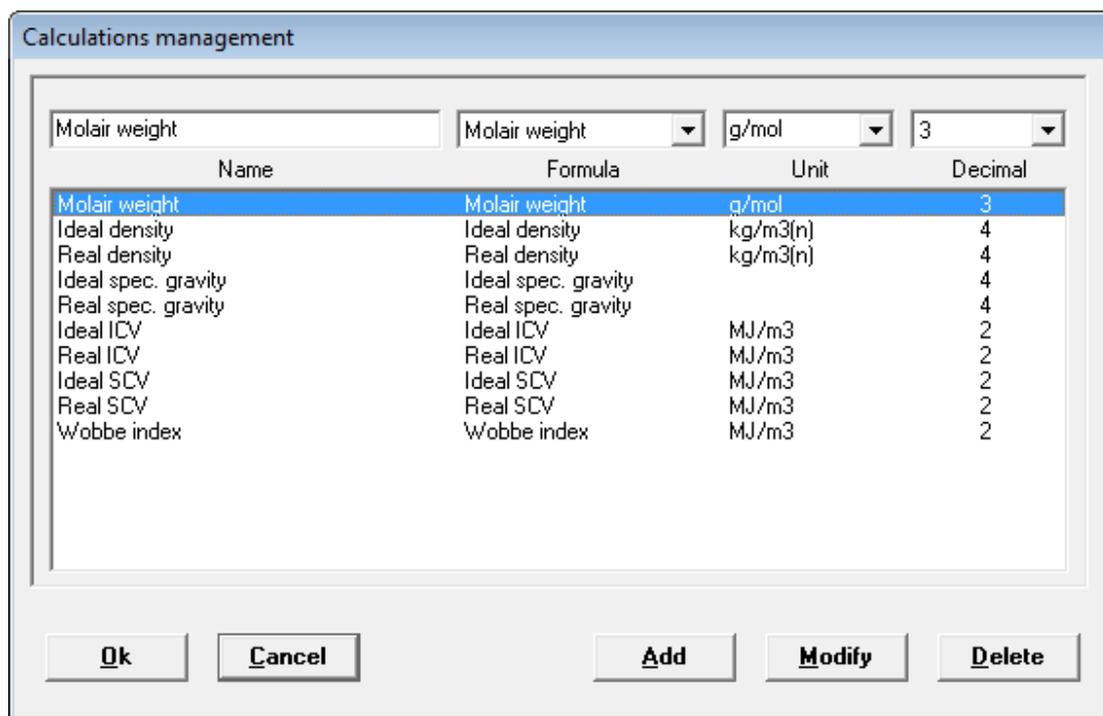
L'orthographe du nom des constituants doit être identique aux majuscules près par rapport à la table des pics de la Chemstation. La formule du constituant est utilisée pour le calcul du Carbone.

Le menu "Compounds" permet de renseigner le nom du constituant, sa formule chimique et la masse molaire. Le menu "Calorific values 1" permet de définir les valeurs pour les calculs de la première colonne et le menu "Calorific values 2" pour les calculs de la deuxième colonne. Les valeurs par défaut sont issues de la norme ISO/DIS 6976:1995. Le menu "Conditions" permet de renseigner les conditions des calculs et n'est utilisé qu'à titre de commentaires.

Pour afficher la deuxième colonne de calcul, il est nécessaire de cocher l'option "Display the second calculation".

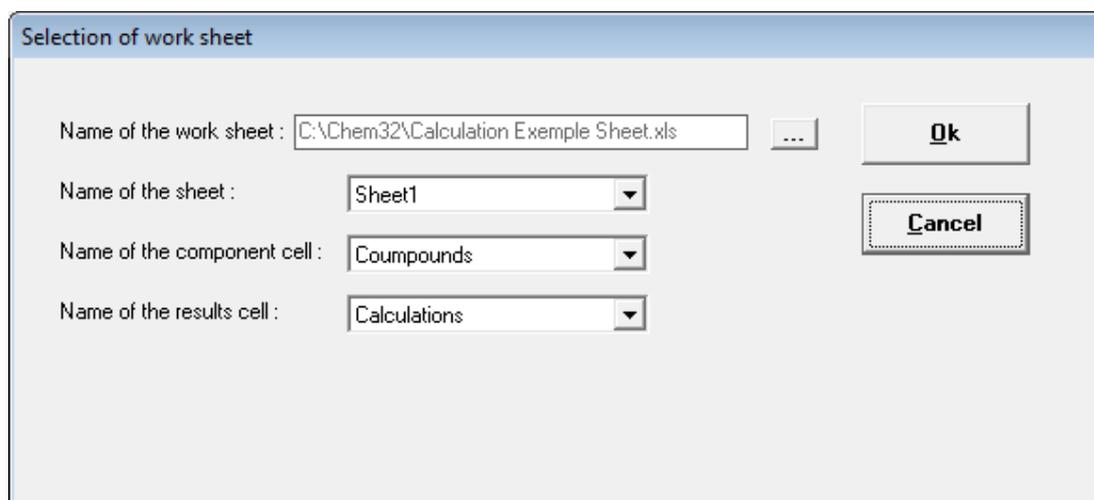
### 3.10.2 Sélection des calculs

Le menu "Calculation select" est utilisé pour définir les calculs désirés. La formule de ces calculs respecte la norme ISO/DIS 6976:1995 et du standard expérimental X 20-522 et ne sont pas accessibles. Par contre, le nom du calcul peut être modifié.



### 3.11 Calculs Excel

Le menu "Excel Calculations" n'est accessible que si l'option "Excel" est activée.



La feuille Excel doit respecter un format précis.

Sélectionnez le nom de la cellule de la colonne A de la feuille correspondant au nom de composants.  
Sélectionnez le nom de la cellule de la colonne A de la feuille correspondant au nom des calculs.

A chaque analyse, Prochem stockera dans la deuxième colonne, la concentration brute correspondant au nom du composant de la première colonne. Si des calculs sont effectués dans la feuille, il récupérera ces calculs dans les lignes suivantes à la cellule "results cell".

Un exemple de feuille est livré par défaut. Nous contacter pour plus d'informations.

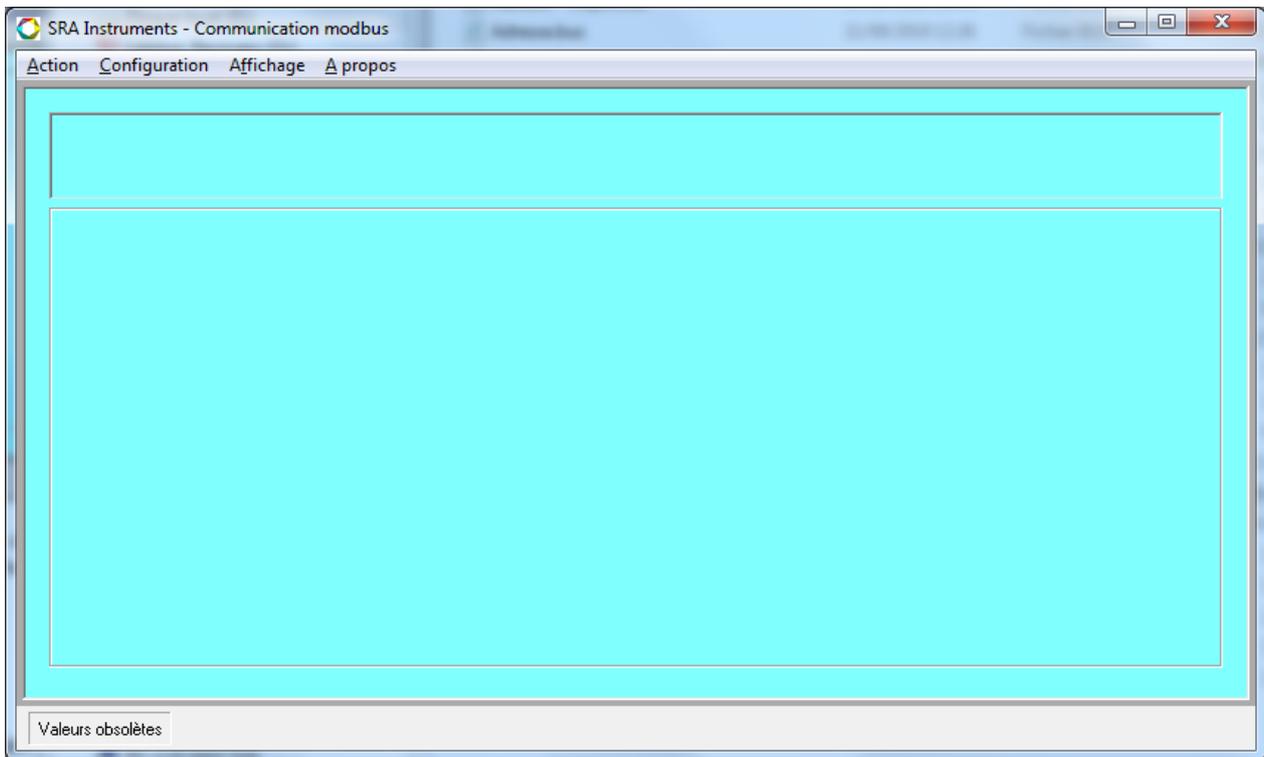
## 4. Utilisation du module Modbus

Le logiciel spécifique SendToBus, permet l'échange de données entre Prochem et un autre ordinateur distant ou une conduite centralisée par le biais d'un bus de terrain type Modbus (Lan ou série), Profibus ou Profinet.

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

Les données sont stockées dans une table d'adresses et la communication consiste à échanger ces informations (entier 16 bits, entiers 32 bits ou réels) entre l'équipement maître et un ou plusieurs équipements esclaves. Le maître pose une question ou demande la valeur d'une ou de plusieurs adresses, et en réponse, l'esclave renvoie la valeur stockée à ces adresses .

Il suffit de définir une table d'échange suivant les variables que vous souhaitez lire et affecter l'adresse et le format désirés. Ces paramètres ne sont pas figés et sont modifiables à souhait.



La présence du logiciel est visible dans la barre des tâches de Windows sous l'icône SRA. Vous pouvez afficher la fenêtre principale en effectuant un clic droit sur cette icône et en sélectionnant 'Maximized'.



## 4.1 Installation du logiciel

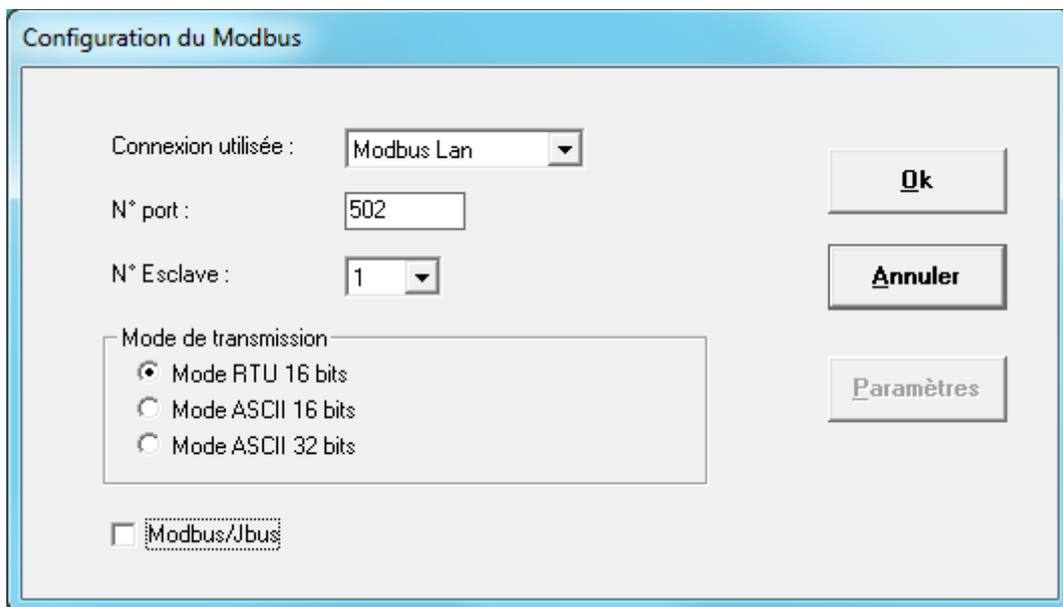
L'installation de ce module s'effectue lors de l'installation de Prochem si la case Modbus est cochée.

## 4.2 Configuration du logiciel

### 4.2.1 Configuration des paramètres de communication

Sélectionnez le sous-menu "**Configuration\Paramètres de communication**". La page suivante s'affiche.

Attention, ce menu n'est accessible que si la liaison est déconnectée, c'est-à-dire si le message 'Déconnecté' apparaît dans la barre de statut. Pour vous déconnecter, aller dans le menu "Action\Déconnexion".



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 Prochem.
- Sélectionnez un mode de transmission. Le mode ASCII 32 bits correspond au mode ASCII type Daniel.
- 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.

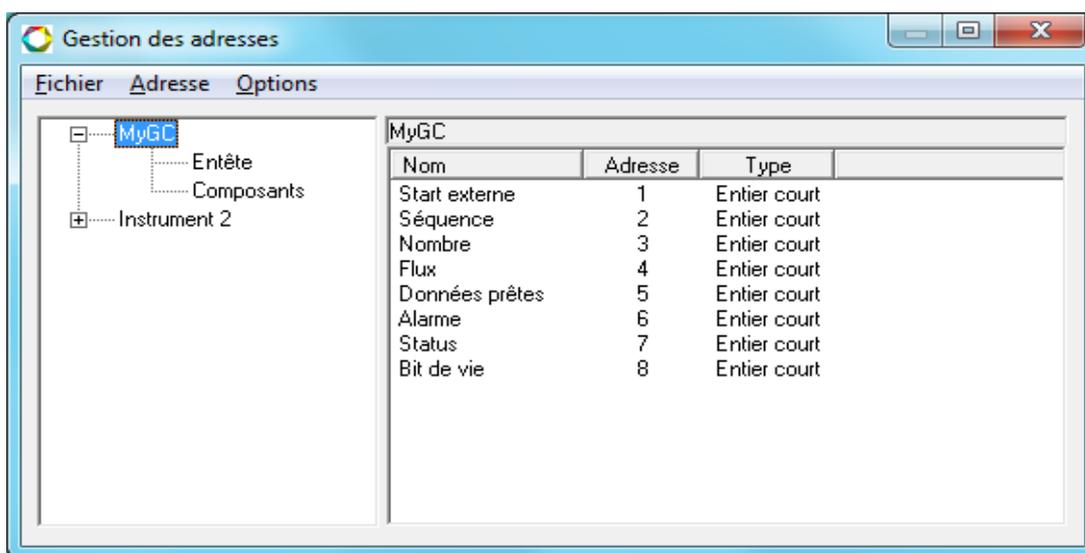
### 4.2.2 Adresses Modbus

Les données disponibles sont séparées en trois types :

- Données concernant l'analyseur.
- Données concernant l'analyse.
- Données concernant les résultats.

A chaque donnée transférée sont attribués une adresse, un type de valeur et pour les résultats, un coefficient lorsqu'ils sont transmis sous forme d'entier.

Ce paramétrage s'effectue en sélectionnant le sous-menu "**Configuration\Adresses Modbus**".

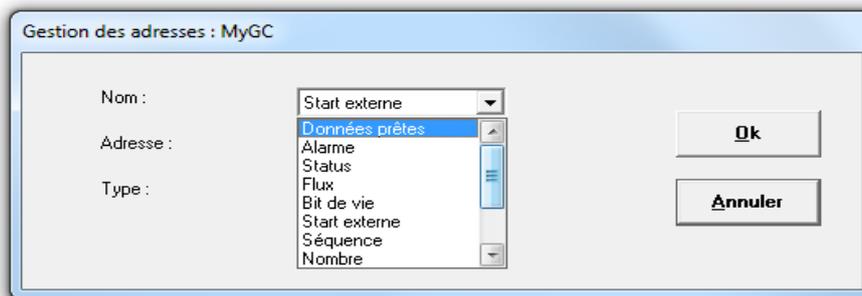


Cet écran fait apparaître deux zones :

- La zone de gauche permettant la sélection et l'affichage de l'ensemble des variables spécifiques à un type. (Cliquez sur le + pour développer l'arborescence du chromatographe).
- La zone de droite permettant l'édition des valeurs souhaitées pour chaque type soit par le menu "Adresse" ou soit en effectuant un clic droit à l'intérieur de cette zone.

Aucun test n'est effectué concernant l'entrée des adresses, aussi vous devez porter attention à ne pas utiliser deux fois une même adresse, celle-ci étant de toute façon imposée par la conduite centralisée.

**Données concernant l'analyseur :**



- **Données prêtes :** SendToBus 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.
- **Alarme :** Cette variable indique les défauts concernant l'analyseur ou les alarmes provenant des résultats. Elle peut prendre plusieurs valeurs ; ces valeurs sont obtenues suivant une combinaison de bits.
  - Bit 0 : défaut chromatographe
  - Bit 1 : cycle à l'arrêt
  - Bit 2 : résultats non récupérés à la fin de l'analyse
  - Bit 3 : défaut avec le sélecteur de voie
  - Bit 4 : défaut de la Chemstation qui ne s'est pas ouverte
  - Bit 5 : défaut de l'entrée alarme
  - Bit 6 : défaut d'étalonnage
  - Bit 7 : avec le Modbus, les résultats ne sont pas rafraîchis
  - Bit 8 : alarme concentration
- **Status :** Cette variable est utilisée pour surveiller l'état du cycle d'analyse. La valeur 0 indique que le tout est hors analyse, la valeur 1 qu'il est en attente d'injection et la valeur 2 que l'analyse est en cours.
- **Flux :** Dans le cas d'une application multivoies, cette valeur indique le numéro de la voie sélectionnée à changer.
- **Bit de vie :** Cette variable permet de surveiller la transmission. Sa valeur est actualisée à chaque seconde.
- **Start externe :** cette variable est utilisée pour lancer des analyses.
  - 0 : arrêt du cycle
  - 1 : mode simple analyse, n'importe quelle valeur pour Séquence ; si Nombre à la valeur = 0, analyse en continu ; si elle est différente de 0, il s'agit du nombre d'analyses
  - 2 : mode séquence d'analyse, Séquence = le numéro de la séquence désirée ; si Nombre à la valeur = 0, mode continu ; si elle est différente de 0, il s'agit du nombre que la séquence est répétée.
  - 3 : arrêt demandé à la fin du cycle

- **Séquence** : numéro de la séquence
- **Nombre** : 0 = mode continu ; autre = nombre de cycles

**Données concernant l'analyse :**

- **Valeurs concernant la date de l'analyse**, c'est-à-dire l'année, le mois, le jour, l'heure, les minutes et les secondes.
- **Flux analysé** : indique la voie d'échantillonnage de la dernière analyse.
- **Type analyse** : (réservé pour des applications futures)
- **Alarme composants** : la valeur de cette variable est décomposée en 16 bits. Si une alarme est déclenchée, le bit correspondant à cette alarme sera actif. *Exemple : si la valeur est 5, cela veut dire que l'alarme 1 est activée, l'alarme 2 non activée et l'alarme 3 activée.*

The screenshot shows a dialog box titled "Gestion des adresses : MyGC\Entête". It has three rows of input fields: "Nom" with a dropdown menu set to "Jour", "Adresse" with a text box containing "11", and "Type" with a dropdown menu set to "Entier court". To the right of these fields are two buttons: "Ok" and "Annuler".

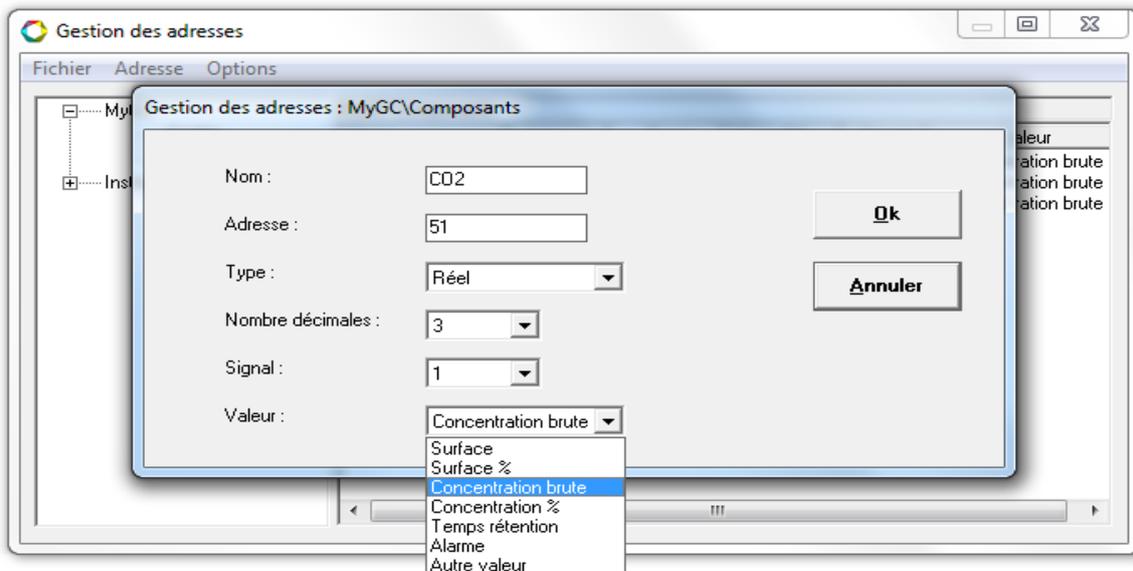
**Données concernant les résultats :**

C'est dans cette section que vous pouvez sélectionner le nom des pics, des groupes de pics et des éventuels calculs qui seront transmis.

Vous devez renseigner le nom de la valeur dans le champ "Nom". Ce champ est une zone de saisie libre, donc il est nécessaire que le mot tapé corresponde à un nom de composants ou de groupes utilisés dans Prochem, l'application ne tenant pas compte des majuscules.

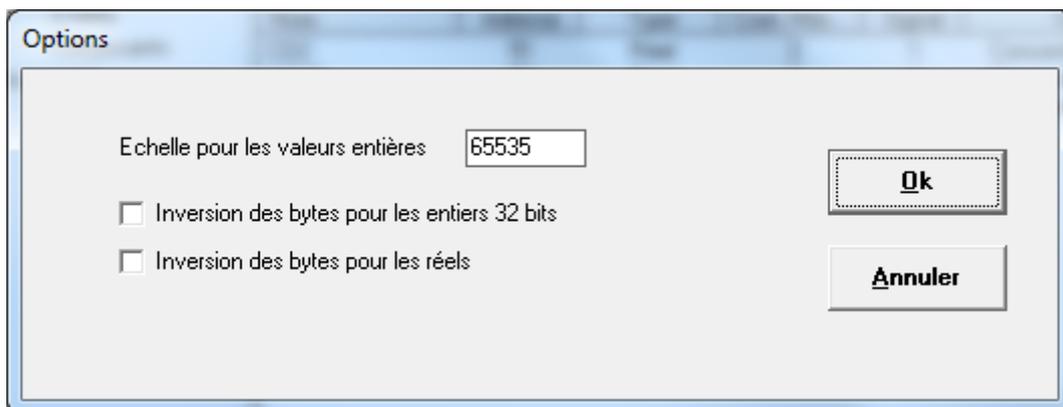
Vous devez aussi entrer l'adresse, le type de valeur (flottant ou entier), la voie d'analyse (signal) et la valeur remontée. Dans le cas d'une valeur flottante, vous devez indiquer le nombre de décimales à transmettre et dans le cas d'une valeur entière, vous devez aussi renseigner le coefficient de décimales, c'est-à-dire si vous voulez remonter des valeurs avec 2 chiffres après la virgule, vous devez sélectionner la valeur 100. Ainsi lorsque le logiciel déposera la valeur dans l'adresse, elle sera multipliée par 100 et l'ordinateur distant devra effectuer l'opération inverse.

Dans le choix de la valeur à transmettre, vous avez la possibilité de sélectionner une "autre valeur". Ce choix n'est possible que dans le cas où vous effectuez des calculs complémentaires sur les pics.



### Options

Ce menu est accessible depuis la fenêtre de configuration des adresses. Elles concernent le format des valeurs transmises.



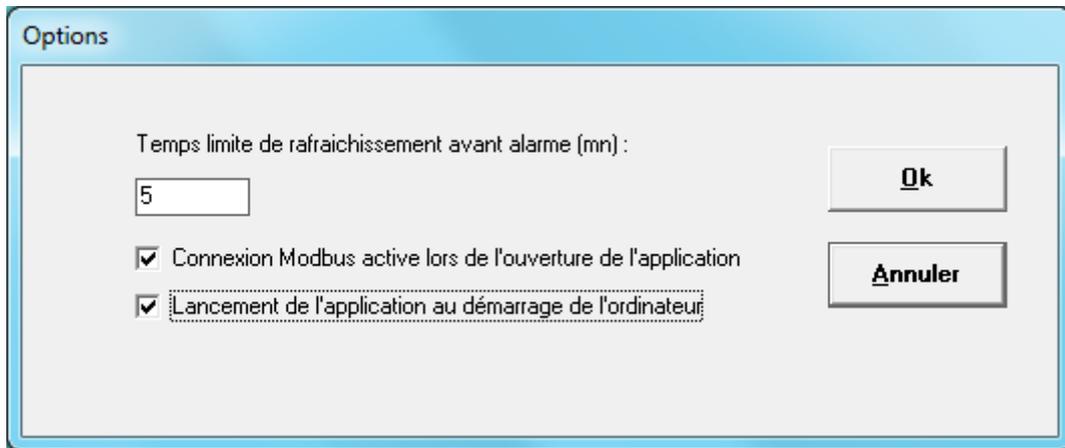
La valeur '**Echelle pour les valeurs entières**' est utilisée lorsque vous avez choisi de remonter des valeurs sous le format entier. Si la valeur obtenue dans les résultats et multipliée par le coefficient fixé est supérieure à cette valeur, alors le logiciel fixe cette valeur à la pleine échelle.

Si les valeurs sont envoyées sous type de données 'entier 32 bits', elles utilisent deux adresses. En règle générale, le mot de poids fort est le premier et le mot de poids faible est le deuxième. Mais il se peut que cette règle soit inversée et donc, dans ce cas, il est nécessaire de cocher l'option '**Inversion des bytes pour les entiers 32 bits**' (ordre Big Endian ou Little Endian).

Si les valeurs sont envoyées sous type de données réel ou flottant, elles utilisent deux adresses. En règle générale, le mot de poids fort est le premier et le mot de poids faible est le deuxième. Mais il se peut que cette règle soit inversée et donc, dans ce cas, il est nécessaire de cocher l'option '**Inversion des bytes pour les réels**' (ordre Big Endian ou Little Endian).

### 4.2.3 Options

Ce menu est accessible depuis la fenêtre principale. Elles concernent l'utilisation du logiciel.



Cette fenêtre permet de sélectionner différentes options disponibles dans ce logiciel.

- **Temps limite de rafraichissement avant alarme.** Cette valeur permet de générer une alarme si les valeurs ne sont pas rafraichies au bout du laps de temps programmé dans ce champ.
- **Connexion Modbus active lors de l'ouverture de l'application.** Lorsque vous lancez l'application SendToBus, le logiciel se connecte automatiquement au réseau Modbus.
- **Lancement de l'application au démarrage de l'ordinateur.** Lorsque vous allumez l'ordinateur, l'application est directement chargée en mémoire. Ces deux dernières options permettent de reconnecter le système lors du défaut d'alimentation électrique.

**Remarque :**

Si vous optez pour un lancement automatique du logiciel, SendToBus est automatiquement lancé lors de l'initialisation de Windows et la fenêtre principale est cachée. Pour accéder à cette fenêtre, vous devez effectuer un clic droit au-dessus de l'icône de l'application situé dans la barre des tâches et sélectionner le menu Agrandir. Si des modifications de communications sont apportées à la configuration, vous devez redémarrer SendToBus ou Windows.

## 4.3 Le menu Action

### 4.3.1 Sous-menu Connexion

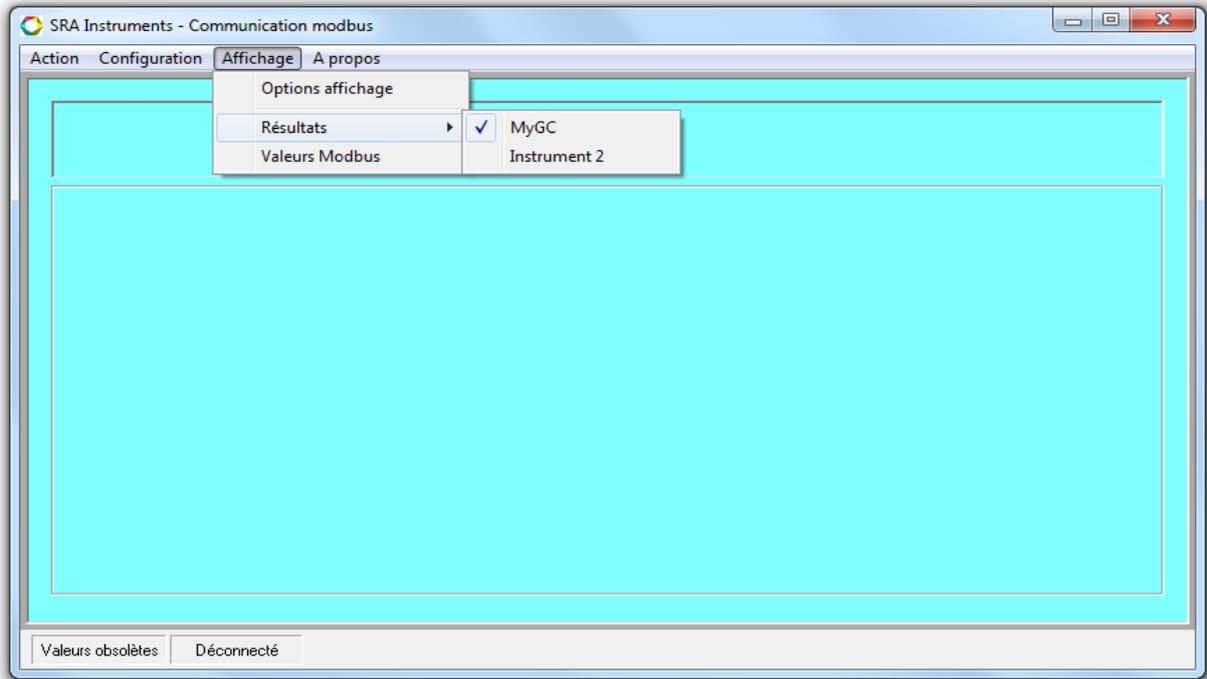
Ce sous-menu permet de connecter l'application sur le réseau Modbus afin d'assurer le dialogue avec l'ordinateur distant. Ce menu est remplacé par le menu Déconnexion lorsque la connexion est active.

Le logiciel indique l'état de la connexion dans la barre de statut si elle est inactive. Autrement, vous avez un point rouge qui s'affiche dans le coin droit inférieur de la fenêtre à chaque dialogue.

### 4.3.2 Sous-menu Quitter

Ce sous-menu permet de fermer l'application.

## 4.4 Le menu Affichage



Si vous avez configuré deux instruments au niveau de Prochem, il n'est pas possible de visualiser tous les résultats obtenus sur le même écran. Vous devez sélectionner l'instrument dont vous souhaitez visualiser les résultats.

### 4.4.1 Sous-menu Options affichage

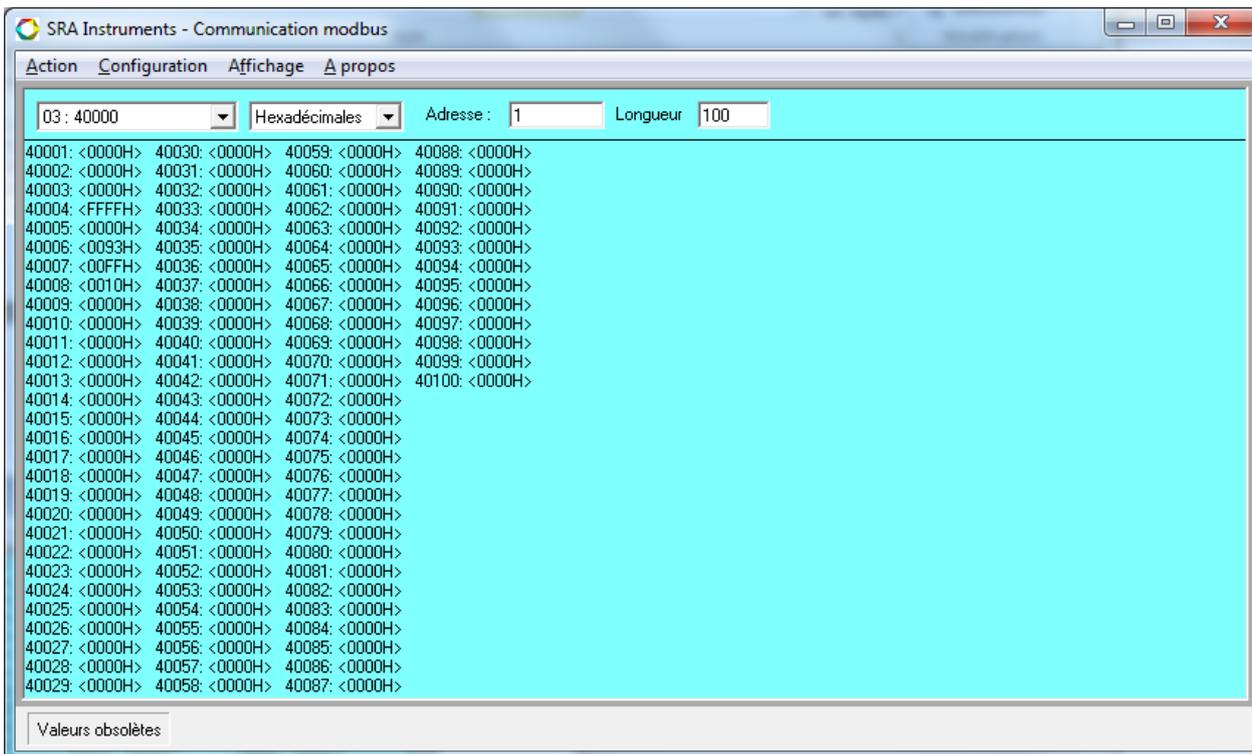
Ce sous-menu permet de définir le nombre de décimales pour les valeurs affichées dans la fenêtre 'Résultats'



### 4.4.2 Sélection des valeurs affichées

Le sous-menu **Affichage**\**Résultats** permet d'afficher les valeurs de la dernière analyse effectuée.

Le sous-menu **Affichage\ Valeurs Modbus** permet d'accéder à :



- Sélectionner dans la liste la table à visualiser (01:0000 – bit en lecture/écriture, 02:10000 – bit en lecture seulement, **03:40000 – mot en lecture/écriture**, 04:30000 – mot en lecture seulement)
- Sélection dans la liste le type de valeurs que vous voulez visualiser (hexadécimale, décimale, flottant).
- Saisir la valeur de la première adresse à visualiser
- Saisir le nombre d'adresses

### 4.5 Le menu A propos



Ce menu permet de visualiser la version du logiciel.

**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.srainstruments.com

SAS au capital de 150.000 €  
 RCS Lyon B 342 068 731  
 APE 4669B  
 SIRET: 342 068 731 00054  
 Code TVA FR 40342068731



## 4.6 Caractéristiques

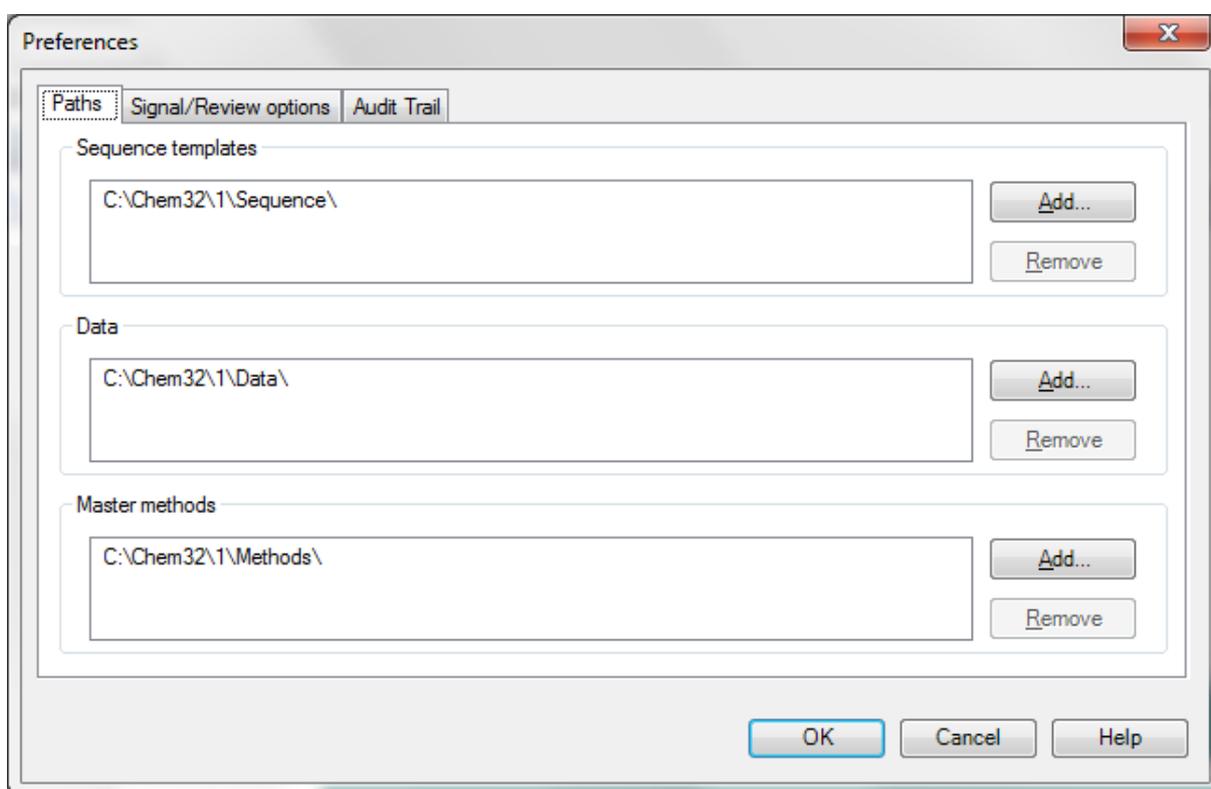
- Liaison :
  - Protocole :
    - Modbus série standard : RS 232, RS 422, RS 485 (dépend du port de l'ordinateur)
    - Modbus Lan
    - Profibus
    - Profinet
  - Paramètres pour liaison série : 75 à 115200 bauds, parité : aucune, paire et impaire, 1 ou 2 stop bits.
  - Esclave : 1 à 255
  - Mode : RTU, ASCII 16 bits, ASCII 32 bits (Daniel)
  - Temps de retournement : 300 ms (dépend de la longueur de la trame)
  - Interrogation cyclique par pas de 100 ms
  
- Données :
  - Plage d'adresse : 1 à 8192 mots de 2 octets
  - Type : Mots entiers sur 16 bits ou mots réels sur 32 bits
  
- Requête :
  - 3 Lecture de n mots
  - 6 Ecriture d'un mot
  - 16 Ecriture de n mots

## 5. Annexe I : Gestion des répertoires avec OpenLab et Prochem

Avec la version de OpenLab ChemStation, la gestion des répertoires a changé et maintenant il n'est plus possible de créer des répertoires pour la sauvegarde de fichiers lors du lancement des analyses comme précédemment. Ces répertoires doivent être connus de la ChemStation.

Dans un premier temps, il est nécessaire de créer le répertoire de sauvegarde avec l'explorateur Windows. Ensuite, il faut identifier au niveau d'OpenLab, ce répertoire comme répertoire de sauvegarde des data.

A partir de l'écran principal, cliquez sur le menu **View** puis **Preferences**. La fenêtre suivante s'ouvre :



Cliquez sur le bouton **Add** du cadre Data et sélectionnez le nouveau répertoire désiré.

Lorsque ce choix aura été effectué, ce répertoire sera alors visible dans Prochem dans la fenêtre Start.

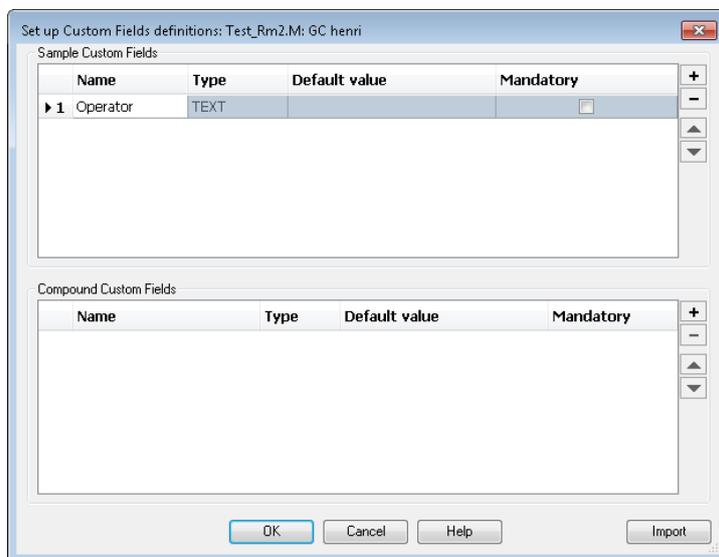
Ensuite, vous pouvez taper le nom du SubDirectory, ce répertoire sera créé comme sous-répertoire du répertoire principal des datas Path, sélectionné dans la liste.

## 6. Annexe II : Gestion du nom des opérateurs avec OpenLab

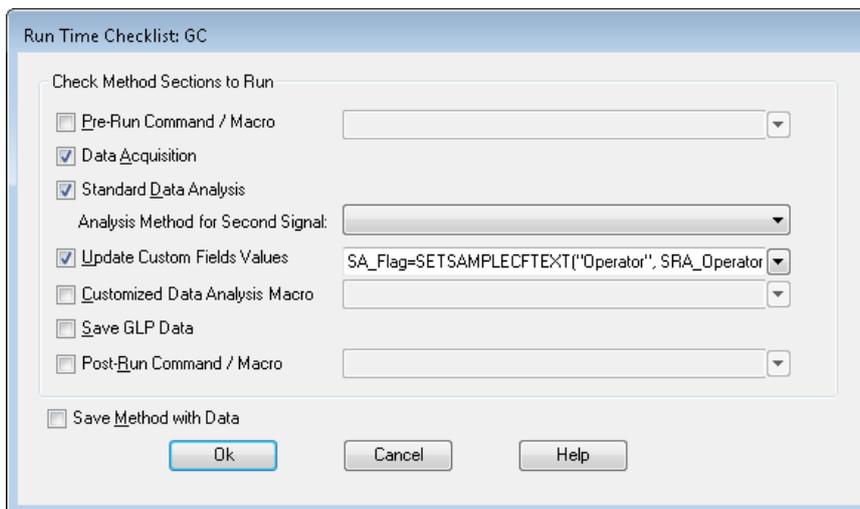
Depuis la version C.01.08 d'OpenLab, il n'est plus possible de changer le nom de l'opérateur. L'application utilise toujours le nom 'System'.

Dans certains cas, l'utilisateur veut pouvoir identifier la personne qui a effectué les analyses. Dans Prochem, il existe un champ spécifique dans la fenêtre 'Start'. Pour pouvoir transmettre ce nom aux résultats finaux, il est nécessaire de configurer OpenLab correctement.

Dans l'écran '**Method and Run Control**', cliquez sur le menu '**Method\Custom fields setup**'. La fenêtre suivante est affichée :



Dans le cadre '**Sample Custom Fields**', cliquez sur le bouton + : une nouvelle ligne est ajoutée à la liste. Saisissez **Operator** dans le champ **Name**, sélectionnez **Text** dans la cellule **Type**, validez par Ok. Cliquez ensuite sur le menu '**Method \Run Time Checklist**', la fenêtre suivante s'affiche :



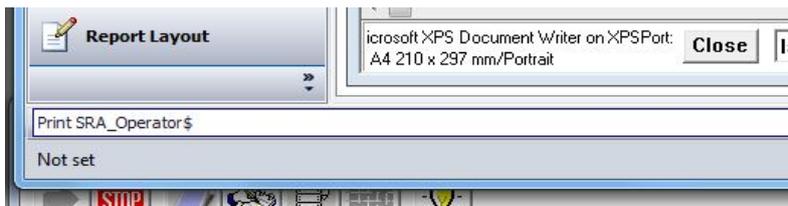
Cochez la case **"Update Custom Fields Values"** et, dans le champ suivant, entrez la commande en respectant bien les majuscules :

SA\_Flag=SETSAMPLECFTEXT("Operator", SRA\_Operator\$)

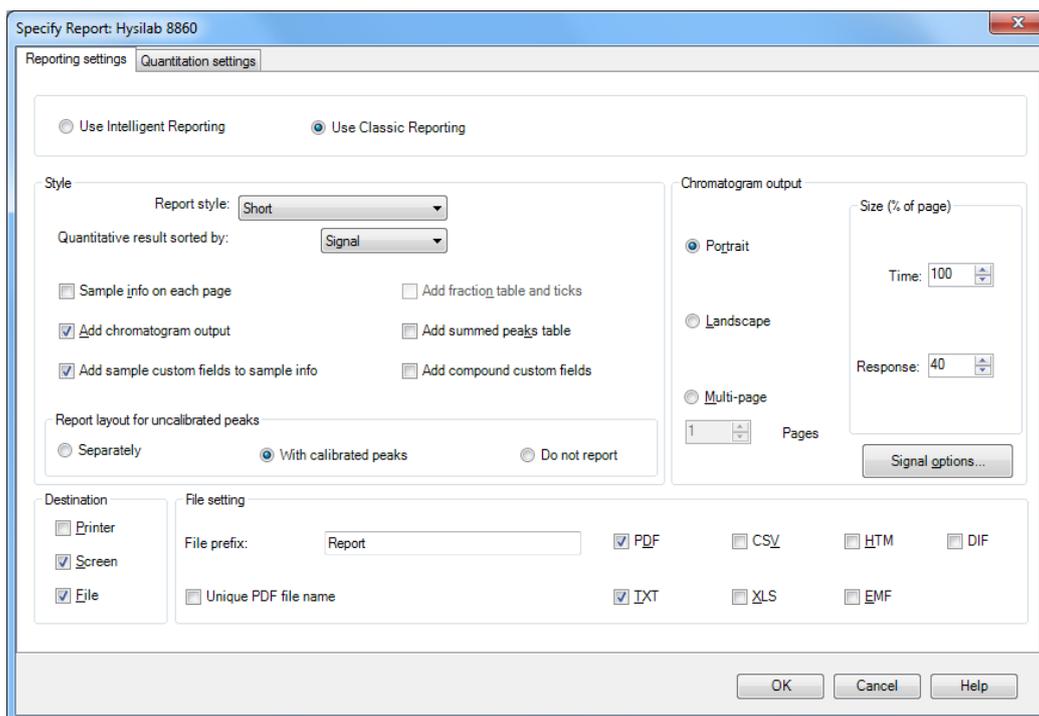
où **"Operator"** est le même nom que **"Sample Custom Field"**.

**SRA\_Operator\$** est le nom de l'opérateur transmis par Prochem. Pour vérifier si ce nom est correct, tapez **"Print SRA\_Operator\$"** dans la ligne de commande.

Le nom doit normalement être affiché comme ci-dessous. Cela vous permet de vérifier si les macros de SRA Instruments sont correctement installées.



Pour afficher le nom de l'opérateur dans le rapport, sélectionnez l'écran **'Data Analysis'** et cliquez sur le menu **'Report\Specify report'**. La fenêtre suivante s'affiche :



Cochez la case **'Add sample custom fields to sample info'** et validez par Ok.

**! Ces modifications sont à effectuer pour chaque méthode.**

## 7. Annexe III : Couplage avec MSD ChemStation et Mass Hunter

### 7.1 Installation des logiciels

Pour que l'installation s'effectue correctement, Mass Hunter doit être installé et configuré en premier. Puis, l'utilisateur doit installer Prochem sur le même ordinateur.

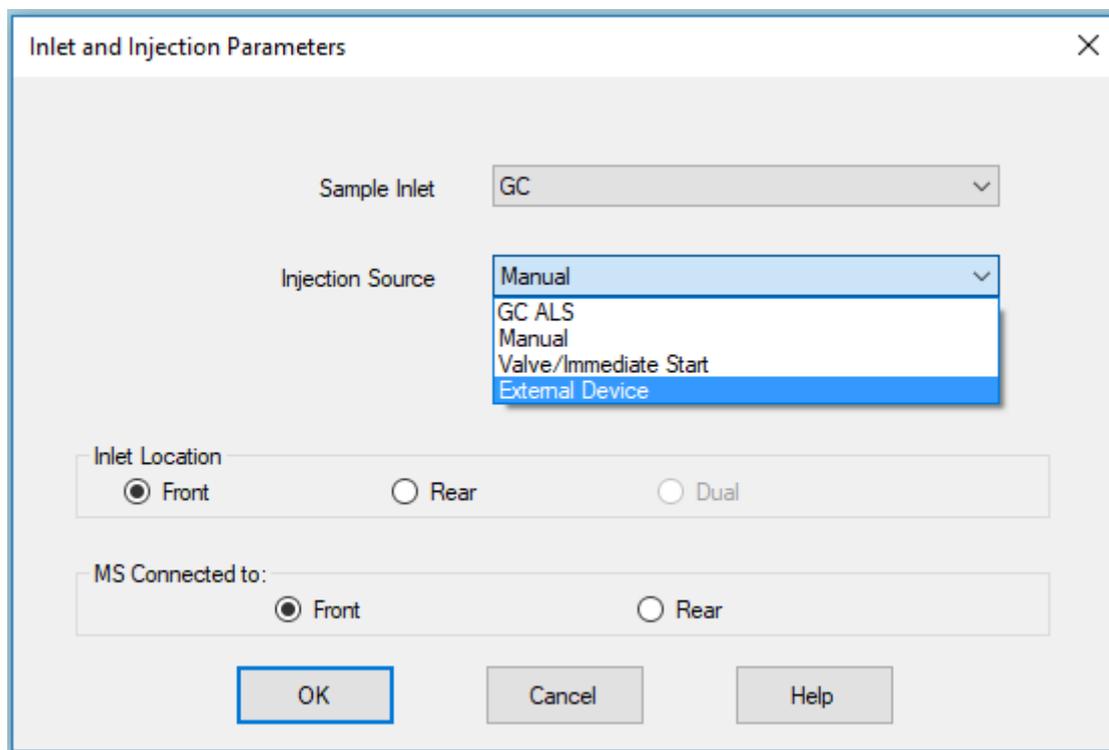
L'installation de Prochem installe différentes macros au niveau de Mass Hunter et le logiciel intermédiaire CpPHunter.exe (programme SRA). Après cette installation, il est nécessaire de relancer Mass Hunter afin qu'il prenne en compte les modifications apportées par l'installation de Prochem.

### 7.2 Utilisation avec Mass Hunter

#### 7.2.1 Lancement des analyses

Le lancement des analyses est assuré par Prochem. Lorsqu'il est hors analyse, l'état de Mass Hunter est 'Idle'. Lorsque le chromatographe est 'Ready', Prochem demande à Mass Hunter de se mettre en mode préparation d'analyse 'PreRun' et l'analyse est ensuite démarrée soit par l'action d'une vanne, soit par un contact sec piloté par Prochem ou soit par un système d'injection (purge & trap ou désorbeur).

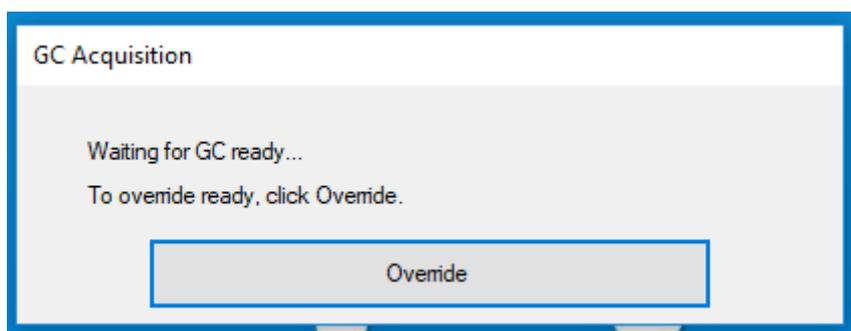
Lors de l'édition de la méthode du GC, il est important de choisir le bon mode d'injection 'Injection source'.



Dans le cas d'une vanne, sélectionnez le mode 'Valve/Immediate Start'.

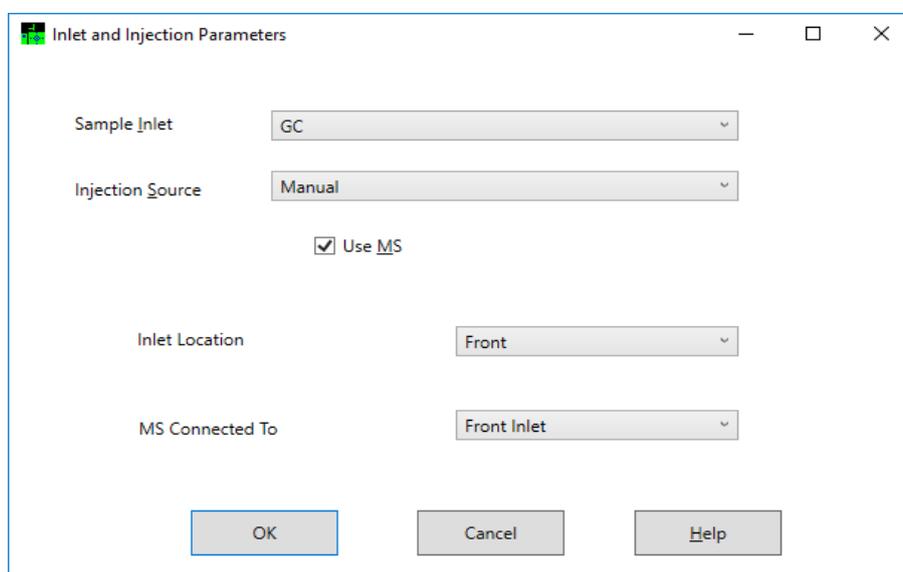
Dans les autres cas, il est préférable de privilégier le mode 'External Device' à la place de 'Manual' surtout dans le cas d'un système d'injection type 'purge & trap' ou 'désorbeur' qui attend que Mass Hunter soit en mode 'PreRun' pour lancer leur cycle d'injection.

Si la méthode utilise une rampe de température, il est possible qu'après le chargement de la méthode, le CPG passe plusieurs fois de l'état Prêt à Non prêt. Lorsque Prochem prépare Mass Hunter pour exécuter l'analyse (Idle to PreRun), le message suivant peut s'afficher :



Si le contact 'Start' se ferme à ce moment-là, le cycle est lancé au niveau du GC mais pas au niveau du spectromètre de masse. Ce signal n'est donc pas acquis.

La solution pour éviter ce phénomène consiste à utiliser la table d'événements Prochem, à programmer une commande "**Start GC**" et à configurer la source d'injection en mode "**Manual**". Lors de la préparation de l'analyse, Mass Hunter peut passer sans problème de l'état Prêt à Non prêt et afficher la fenêtre 'Override'. Prochem attendra que la fenêtre 'Start' s'affiche pour valider le démarrage et exécuter ainsi l'analyse sur les deux canaux.



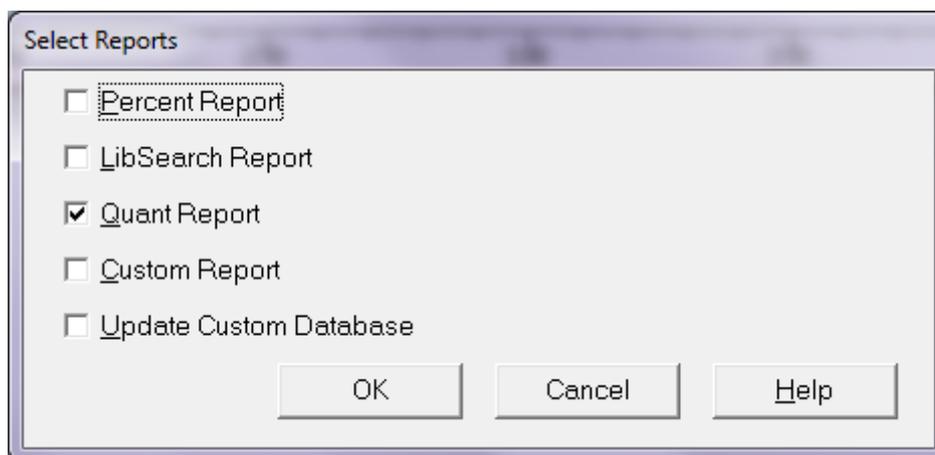
Cela peut également être une solution pour démarrer les analyses sans commande auxiliaire (contact sec via Adam).

## 7.2.2 Transfert des résultats

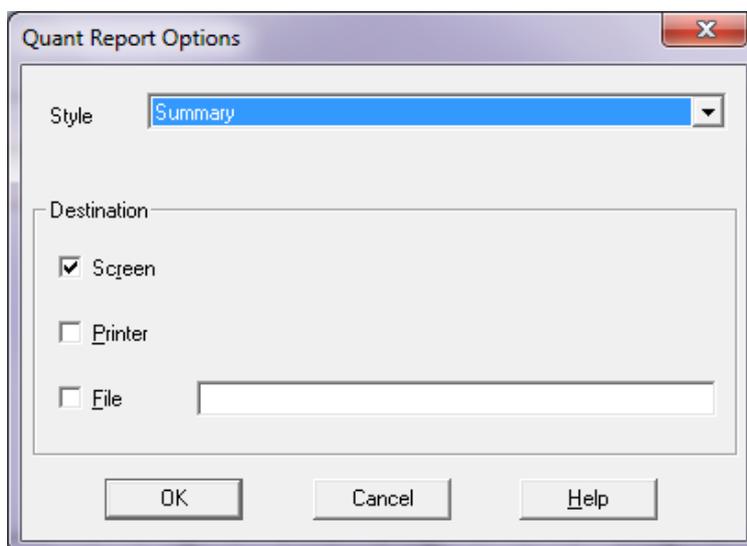
Prochem récupère les résultats de Mass Hunter **seulement si les analyses sont traitées avec Data Analysis**.

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 :

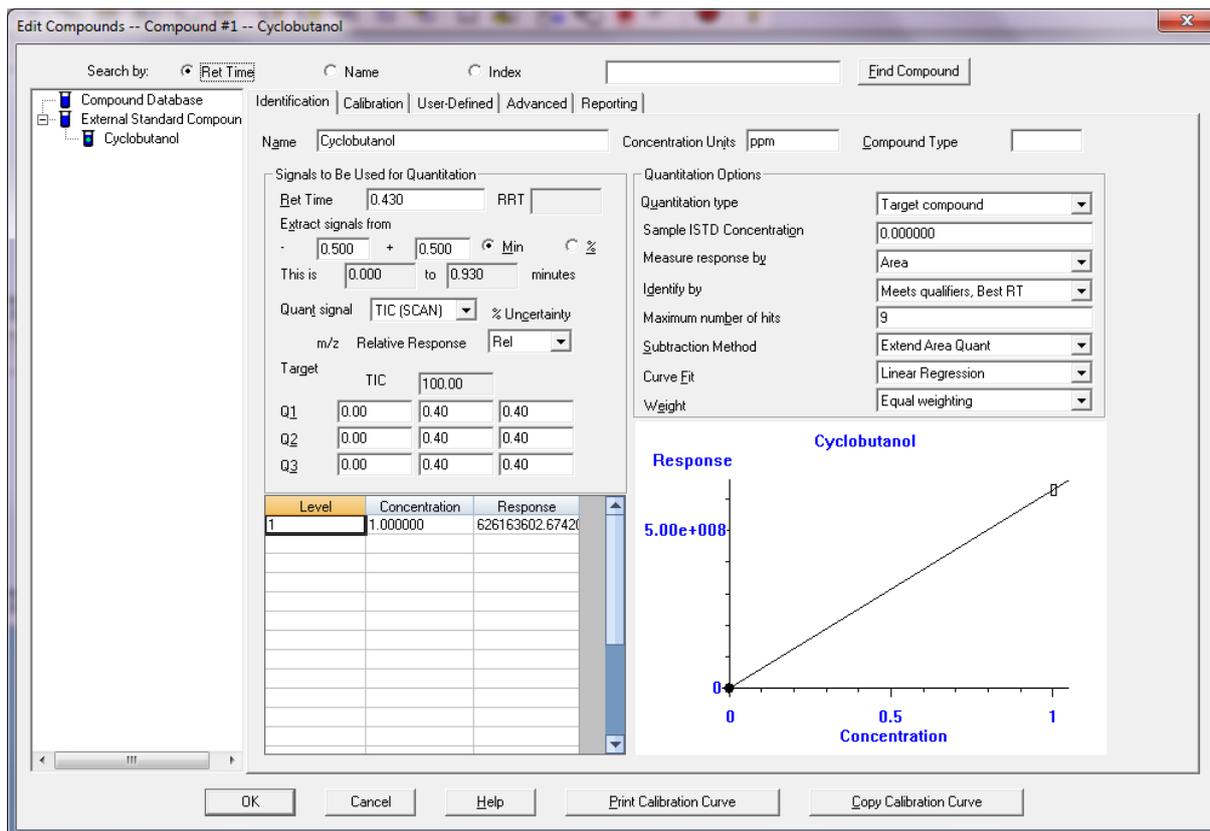


Cochez la case 'Quant Report' et validez avec Ok, la fenêtre suivante s'affiche.



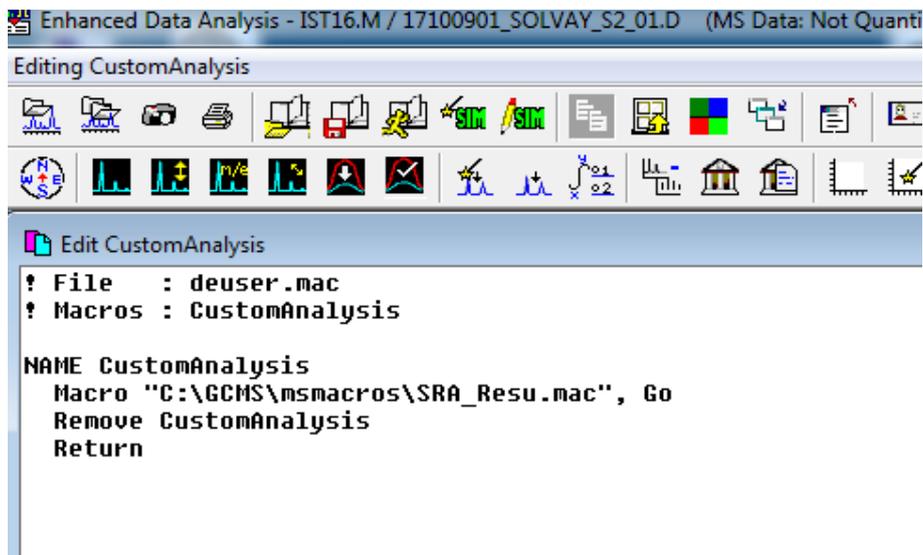
Il n'est pas nécessaire de cocher une des cases, validez par Ok.

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

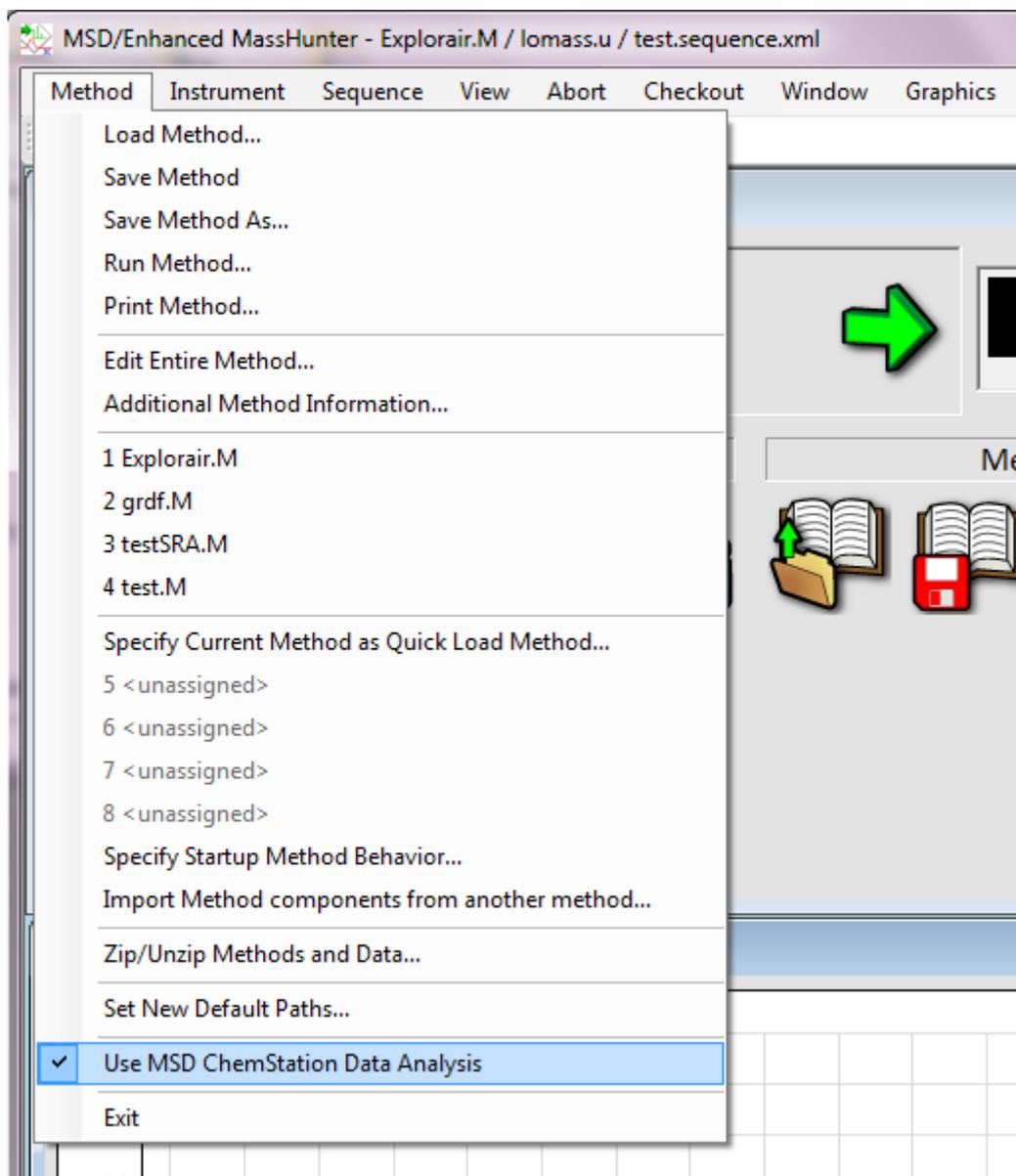


Créez un composant en renseignant ses différents paramètres d'intégration et de quantification, validez par Ok, et sauvegardez la méthode pour terminer.

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 'Result transfer' et 'Add Custom macro in method'. Le résultat de cette action peut être visualisée 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).

## 8. Annexe IV : Utilisation de Prochem avec un Thermo Désorbeur Markes

Prochem peut être utilisé avec un thermo désorbeur Unity-xr de la société Markes.

Dans la configuration standard, l'utilisateur prépare la séquence à injecter au niveau du logiciel Markes Instrument Control. Le désorbeur lance les analyses dès que le chromatographe est prêt via sa commande start.

Pour une configuration avec Prochem, il est nécessaire d'utiliser un relais qui interceptera l'état prêt du chromatographe et empêchera le lancement des analyses du désorbeur.

De même, le système peut être équipé d'un échantillonneur CIA Advantage Markes qui permet l'injection de plusieurs lignes au niveau du désorbeur. Dans ce cas, Prochem doit récupérer le numéro de la ligne injectée.

### 8.1 Configuration de Prochem

La configuration de Prochem est réalisée à trois niveaux.

#### 8.1.1 Menu Instrument

Configuration of chromatograph 1

Instrument name :  
 TD-GC (GC)

Repeater of GC Ready :  
 None

Remote start for Prochem

Any  
 External command  
 Logical input

Address board: None    Input: 1    Standby value:

Options Start GC

External device injection to control by auxiliary event  
 Check external ready (7890)  
 Use with a Markes controller

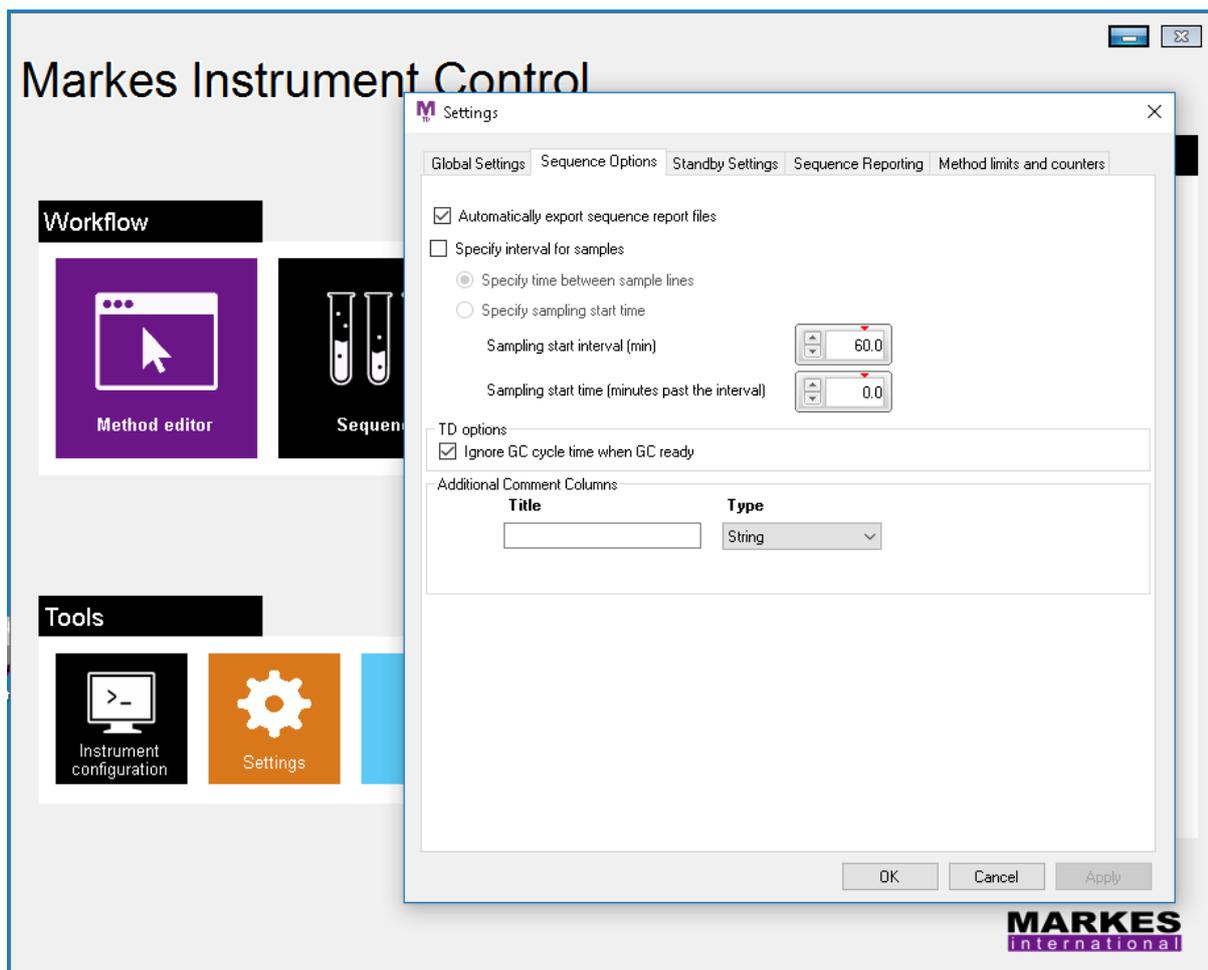
Folder of sequence file :  
 C:\ProgramData\Markes International\TD\Sequences

Buttons: Ok, Cancel

La case à cocher 'External device ...' permet de signaler à Prochem qu'il y a une commande externe qui permet de lancer les analyses, c'est-à-dire le start du désorbeur.

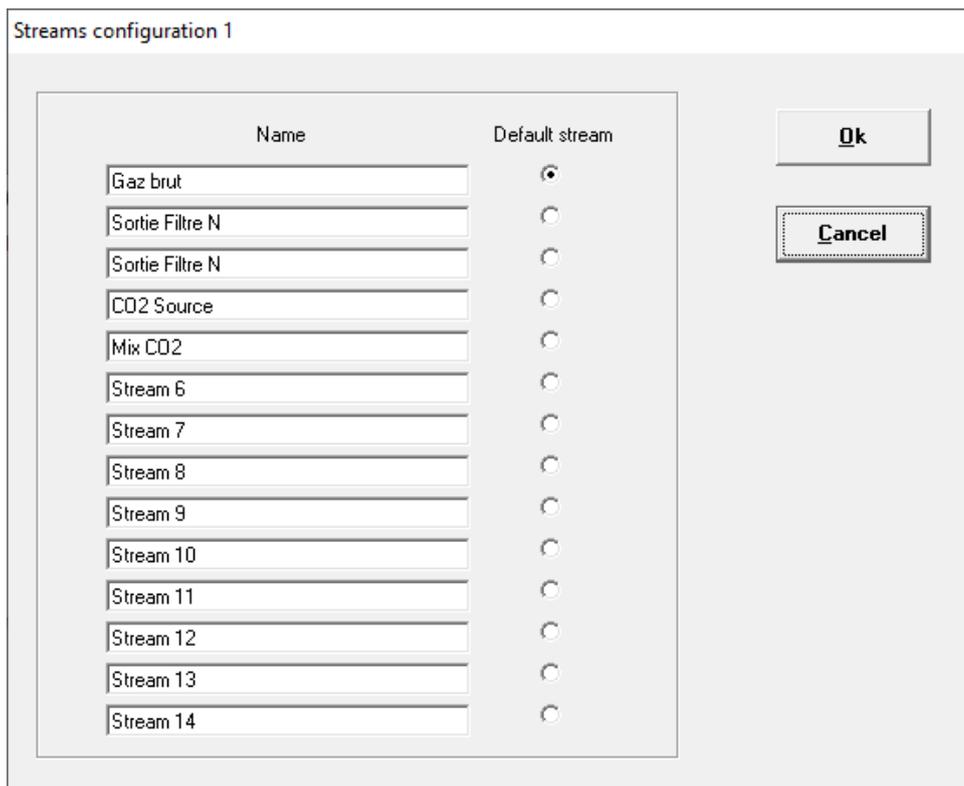
La case à cocher 'Use with a Markes controller' ajoute une commande optionnelle 'Read Markes channel' à la table des événements qui permettra de lire le numéro de la voie injectée. Il est aussi nécessaire de renseigner le répertoire où est stocké le fichier à lire pour connaître cette information.

Au niveau du logiciel Markes, l'utilisateur doit vérifier que l'option 'Automatically export sequence report files' du menu Settings de Tools est activée.

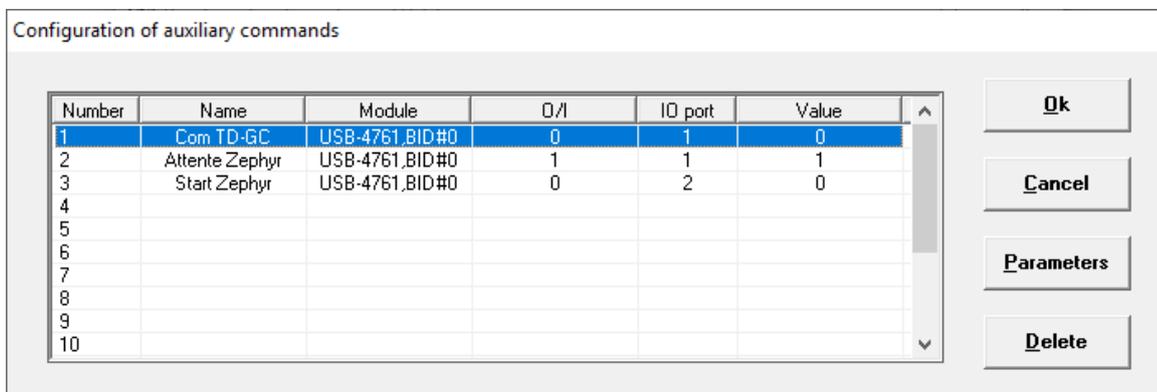


### 8.1.2 Menu Sampling/Configuration

Il est nécessaire d'indiquer à Prochem le même nombre de « streams » qu'il y a de lignes d'analyse au niveau du CIA Advantage. Les noms des « streams » doivent correspondre au nom des lignes.



### 8.1.3 Menu Commandes auxiliaires



Il est nécessaire d'ajouter un contact relais entre la sortie GC Ready du chromatographe et l'entrée du désorbteur afin que Prochem puisse imposer le lancement des analyses.

**Configuration of auxiliary command 1**

Name :

Module :

Output/Input  
 Output     Input

ID port :   Standby value

## 8.2 Utilisation de Prochem

Au niveau du logiciel Prochem, il est nécessaire d'utiliser une table d'évènements qui permettra de gérer la commande du relais et d'indiquer au désorbteur que le chromatographe est prêt pour effectuer une analyse.

### 8.2.1 Table d'évènements

Auxiliary commands - C:\Chem32\1\Sequence\robert.vnt

File Edit

0 Start GC

	Time (sec)	Command	Event
>	0	TD - GC	On
2	2	Read Markes channel	
3	5	Start GC	

Sort  
Add  
Modified  
Delete  
▲  
▼

La commande 'Read Markes channel' doit être programmée afin de connaître la ligne injectée par le TD. Enfin, il est nécessaire d'ajouter une commande 'Start GC' afin de préparer l'analyse.

### 8.2.2 Séquences d'analyse

Si le lancement des analyses nécessite une séquence au niveau du logiciel Markes, il est nécessaire d'utiliser une séquence aussi au niveau de Prochem afin d'indiquer la méthode GC et la table d'évènements qui sont utilisées.

The screenshot shows a window titled 'Sequence table - C:\Chem32\1\Sequence\Perrier.seq'. It contains a table with the following data:

	Stream	Method	Sample Type	Cal Level	Event file
1	Gaz brut	méthode HC.M	Sample		Sra.vnt
2	Sortie Filtre N°1	méthode HC.M	Sample		Sra.vnt
3	Sortie Filtre N° 2	méthode HC.M	Sample		Sra.vnt
4	CO2 Source	méthode HC.M	Sample		Sra.vnt
5	Mix CO2	méthode HC.M	Sample		Sra.vnt
6	Gaz brut	méthode H2S.M	Sample		Sra.vnt
7	Sortie Filtre N°1	méthode H2S.M	Sample		Sra.vnt
8	Sortie Filtre N° 2	méthode H2S.M	Sample		Sra.vnt
9	CO2 Source	méthode H2S.M	Sample		Sra.vnt
10	Mix CO2	méthode H2S.M	Sample		robert.vnt

On the right side of the window, there are three buttons: 'Insert', 'Add', and 'Delete'.

Au niveau du paramètre 'Sample Type', le type 'Sample' est à utiliser par défaut et il n'est pas nécessaire d'indiquer le nom de la ligne, et donc le numéro, car il sera récupéré lors de l'injection du désorbeur. Cependant, dans certains cas, l'utilisateur peut vouloir imposer le nom de l'échantillon si l'analyse n'est pas réalisée dans le cadre d'un échantillon standard mais plutôt dans le cadre d'une vérification ou d'un étalonnage. L'utilisateur doit alors changer le type soit par Calibration, Control ou Blank et renseigner le nom dans le champ 'Sample name' lors du lancement des analyses.

### 8.2.3 Lancement des analyses

Avant de lancer les analyses, l'utilisateur doit préparer la séquence au niveau du logiciel Markes Instrument Control et s'assurer qu'elle comporte le bon nombre d'analyses.

## 9. Annexe V : Description de la base de données Prochem

Prochem utilise une base de données pour sauvegarder les résultats des analyses. C'est une base de données compatible Microsoft Access sauvegardée sous le nom Resultsx.mdb où x représente le numéro de l'instrument correspondant au numéro de session de la ChemStation.

A chaque fin d'analyse, le logiciel vérifie les résultats stockés dans la base dont l'analyse a été effectuée sur le même stream que l'analyse terminée et efface les résultats antérieurs à 31 jours.

### 9.1 Définition des tables (d'information et communes)

Il y a 2 tables d'information :

- **Version** contenant le numéro de version de la base de données (champ et enregistrement unique)
- **Last analyse** contenant 12 champs ; cette table contient les renseignements de la dernière analyse effectuée et n'a donc qu'un seul enregistrement.
  - o Stream : numéro de la ligne d'échantillonnage
  - o Number : numéro de l'analyse
  - o Vial : numéro du vial ou ligne d'échantillonnage
  - o SampleAmount : quantité injectée
  - o ISTDAmount : quantité de standard interne
  - o Multiplier : coefficient de multiplication
  - o Dilution : facteur de dilution
  - o InjVolume : Volume injecté
  - o SampleType : type d'échantillon (échantillon, étalon, blanc)
  - o CalLevel : niveau de calibration dans le cas d'un étalonnage
  - o UpdateRF indique si les coefficients de réponse sont rafraîchis après un étalonnage
  - o UpdateRT indique si les temps de rétention sont rafraîchis après un étalonnage

Il y a 5 tables communes à tous les streams.

- **Stream** contenant trois champs en référence aux lignes d'échantillonnage :
  - o IndStream : index de la table
  - o Name représentant le nom du stream
  - o Etalon indiquant si le stream est un échantillon ou un étalon
- **Peak name** contenant trois champs en référence aux composants analysés :
  - o IndName : index de la table
  - o Name représentant le nom du composant
  - o IdLims contenant le numéro de Lims (non utilisé)
- **Calcul name** contenant 7 champs :
  - o IndName : index de la table
  - o Name correspondant au nom du calcul
  - o Unit correspondant à l'unité du calcul
  - o IdLims correspondant au numéro de Lims (non utilisé)
  - o Value1

- Value2
- Value3
  
- **Input name** contenant 4 champs en référence aux entrées analogiques :
  - IndName : index de la table
  - Name correspondant au nom de l'entrée analogique
  - Unit correspondant à l'unité de l'entrée analogique
  - IdLims correspondant au numéro de Lims (non utilisé)
  
- **Alarm** contenant 6 champs en référence aux alarmes programmées :
  - Number indiquant le numéro de l'alarme
  - Nom correspondant au paramètre suivi (Pic ou calcul)
  - Stream correspondant au numéro du stream auquel est lié l'alarme (0 pour toutes les voies d'échantillonnage).
  - Value correspondant à la valeur suivie pour cette alarme (surface, surface normalisée, concentration brute, concentration normalisée, temps de rétention)
  - Valeur mini à ne pas dépasser
  - Valeur maxi à ne pas dépasser

## 9.2 Définition des tables pour chaque ligne d'échantillonnage (stream)

Pour chaque ligne d'échantillonnage, il y a 4 tables. Dans la présentation suivante X correspondra au numéro de la ligne.

- **AnalyzeX**
  - IndAnal : index de la table
  - DateInject correspond à la date d'injection
  - RawData correspond au nom du fichier résultats
  - Number : numéro de l'analyse
  - Method correspond au nom de la méthode utilisée pour l'analyse
  - SampleName correspond au nom de l'échantillon
  - Operator correspond au nom de l'opérateur
  - IdLims correspond au numéro de Lims du composant (non utilisé)
  - Vial correspond au numéro de flacon ou de la ligne d'échantillon
  - FirstPeak : index du premier pic de la table PeakX pour cette analyse
  - LastPeak : index du dernier pic de la table PeakX pour cette analyse
  - FirstCalcul : index du premier calcul de la table CalculX pour cette analyse, si cette valeur est à zéro, il n'y a pas de calculs
  - Last Calcul : index du dernier calcul de la table CalculX pour cette analyse
  - FirstInput : index de la première entrée analogique pour cette analyse, si cette valeur est à zéro, il n'y a pas d'entrée analogique
  - SampleAmount : quantité injectée
  - ISTDAmount : quantité de standard interne
  - Multiplier : coefficient de multiplication
  - Dilution : facteur de dilution
  - InjVolume : volume injecté
  - SampleType : type d'échantillon (échantillon, étalon, blanc)
  - CalLevel : niveau de calibration dans le cas d'un étalonnage
  - UpdateRF indique si les coefficients de réponse sont rafraîchis après un étalonnage

- UpdateRT indique si les temps de rétention sont rafraîchis après un étalonnage
- Flag (non utilisé en réserve)
  
- **PeakX**
  - IndPeak : index de la table
  - Analyze correspondant au numéro de l'analyse
  - Number correspondant à l'index de la table Peak name
  - RetTime correspondant au temps de rétention
  - Area correspondant à la surface
  - AreaNormal correspondant à la surface normalisée
  - Concentration correspondant à la concentration brute
  - ConcUnit correspondant à l'unité de la concentration
  - Normalize correspondant à la concentration normalisée
  - Value correspondant à la valeur calculée (masse volumique)
  - ValueUnit correspondant à l'unité de la valeur calculée
  - Average : moyenne calculée lors de l'analyse (dépend de la valeur utilisée pour le calcul et du type de calculs par analyse ou par temps)
  - Signal correspond au numéro du signal du chromatographe
  - IsStd indique si le composant est un standard interne
  - Type correspond au type du pic (1 pic connu, 2 groupe, 3 inconnu, 4 total, 5 total des inconnus)
  - Group correspond au numéro du groupe
  - Cal Amount correspond à la concentration étalon
  - Alarm indique si le résultat de ce composant était en alarme
  - Low Limit correspond à la valeur mini programmée dans la ChemStation
  - High Limit correspond à la valeur maxi programmée dans la ChemStation
  
- **CalculX**
  - IndCalcul : index de la table
  - Analyze correspondant au numéro de l'analyse
  - Number correspondant à l'index de la table Calcul name
  - Value : les différentes valeurs
  - Value1            "
  - Value2            "
  - Value3            "
  
- **AnalogInputsX**
  - IndInput : index de la table
  - Analyze correspondant au numéro de l'analyse
  - Number correspondant à l'index de la table Input name
  - Value correspondant à la valeur de l'entrée analogique