

Soprane II

Documentation



Table des matières

1. INTRODUCTION	7
2. INSTALLATION	7
3. CONFIGURATION ANALYSEUR	9
3.1. Création	10
3.1.1. Création d'un analyseur avec connexion réseau	12
3.1.2. Création d'un analyseur avec liaison série	13
3.2. Sélection	14
3.3. Fermeture	15
3.4. Affichage de la configuration	16
3.5. Instrument	18
3.5.1. Modification des ports de communication	18
3.5.2. Renommer un instrument	19
3.5.3. Suppression d'un instrument	20
3.6. Définition matériel	20
3.6.1. Configuration échantillonnage	22
a) Vannes Valco	23
b) Electrovanne	24
3.6.2. Gestion des entrées sorties logiques	25
a) Gestion des voies par électrovannes	27
b) Gestion des pompes d'échantillonnage	29
c) Alarmes	31
d) Information GC prêt	32
e) Démarrage externe	32
f) Pompe auxiliaire	33
g) Commande démarrage analyse	35
h) Commande démarrage séquence	36
i) Contrôle débit échantillon	37
3.6.3. Test des entrées et sorties	39
a) Entrées logiques	39
b) Sorties logiques	40
c) Entrées analogiques	41
d) Test modules 4-20mA	43
e) Test Vannes	44
3.6.4. Sélection du gaz vecteur	45



3.7. Gestion entrées analogiques	46
3.8. Gestion des options	48
3.8.1. Onglet "Analyse"	48
3.8.2. Onglet "Avancées"	49
4. UTILISATION DE SOPRANE II	50
4.1. Menus	51
4.1.1. Analyses	52
4.1.2. Traitement	56
4.1.3. Journaux	56
4.1.4. Utilisateurs	57
4.2. Lecture du statut	57
4.2.1. Barre de statut	57
4.2.2. Barre de titres	58
4.2.3. Oeil	58
4.2.4. Statut	58
4.3. Méthodes and séquences	60
4.3.1. Gestion des méthodes d'analyse	60
a) Les conditions opératoires	61
b) Chargement d'une méthode d'analyse	68
c) Les 4 méthodes utiles	69
4.3.2. Gestion des séquences d'analyse	69
4.3.3. Gestion des séquences d'étalonnage	73
4.4. Gestion des analyses	76
4.4.1. Analyses	76
a) Temps réel	77
b) Lancement en analyse	79
c) Lancement séquence	80
d) Lancement étalonnage	82
e) Table d'événements d'analyse	83
4.4.2. Résultats des analyses	84
a) Série d'analyses	87
b) Résultats d'analyse	90
c) Tendances	91
d) Retraitement par lot	94
e) Etalonnage par retraitement	95



f) Actions rapides _____	96
4.5.Process _____	98
4.5.1. Principes _____	98
a) Intégration _____	98
b) Identification _____	107
c) Etalonnage _____	109
4.5.2. Gestion de l'intégration _____	120
a) Paramètres d'intégration _____	124
b) Chromatogramme _____	125
c) Table des composants _____	131
d) Table d'étalonnage _____	134
e) Tableau des résultats _____	137
f) Rapport _____	139
g) Configuration traitement _____	149
4.6.Traitement post-analyse _____	154
4.6.1. Alarmes composant _____	154
4.6.2. Pre et post commandes _____	155
4.6.3. Archivage _____	156
4.7.Calculs spécifiques _____	157
4.7.1. Calculs du pouvoir calorifique du gaz naturel (ISO 6976:2016) _____	158
a) Sélection des calculs _____	158
b) Définition des valeurs de référence _____	159
4.7.2. Calculs GPL (ISO 8973) _____	161
a) Sélection des calculs _____	161
b) Définition des valeurs de référence _____	162
4.7.3. Calculs combustion _____	163
4.7.4. Calculs annexes _____	164
a) Calcul de la pureté du gaz _____	164
b) Calcul de l'hélium _____	165
4.7.5. Calculs via Excel _____	165
4.8.Transmission des résultats d'analyse _____	167
4.8.1. L'émission de sorties analogiques _____	167
4.8.2. Modbus _____	168
a) Configuration matériel _____	169
b) Configuration logiciel _____	170
c) Test Modbus _____	177



d) Options Modbus _____	179
4.9. Graphique _____	179
4.10. Utilisation des tableaux de données _____	181
4.10.1. Exportation des données d'un tableau _____	181
a) Exportation vers Excel _____	181
b) Exportation vers Csv _____	181
c) Exportation vers Xps _____	183
d) Exportation vers Diff _____	183
4.10.2. Filtrer les données _____	184
a) Filtrage automatique _____	184
b) Filtrage personnalisé _____	184
5. COMPARAISON DES ANALYSES _____	186
6. GESTION DES UTILISATEURS _____	189
6.1. Identification d'un utilisateur _____	189
6.2. Création d'un utilisateur _____	190
6.3. Suppression d'un utilisateur _____	190
6.4. Modification du mot de passe _____	191
6.5. Gestion d'un utilisateur _____	192
7. MAINTENANCE _____	193
7.1. Réglage du temps de Backflush _____	193
7.1.1. Qu'est-ce que le backflush ? _____	193
7.1.2. Comment ajuster le temps de backflush avec Soprane II ? _____	193
7.2. Gestionnaire de fichiers _____	197
7.2.1. Exporter des données _____	198
7.2.2. Importer des données _____	199
7.3. Gestion des fichiers log _____	200
7.3.1. Le fichier des actions _____	200
7.3.2. Le fichier des alarmes _____	201
7.3.3. Le fichier des erreurs _____	201
7.3.4. Le fichier des événements _____	201
7.3.5. Historique d'étalonnages _____	201
8. ANNEXE : PILOTER UN SOLIA DEPUIS SOPRANE II _____	203
8.1. Installation _____	203
8.2. Configuration des instruments _____	203
8.2.1. Création de l'instrument Solia dans Soprane II _____	203



8.2.2. Création de l'instrument MSD dans Agilent GCMS Configuration _____	203
8.3. Configuration du couplage _____	204
8.4. Contrôle du Solia _____	205
8.4.1. Création d'une méthode d'analyse _____	207
8.4.2. Création d'une méthode d'analyse Soprane II _____	207
8.4.3. Création d'une méthode d'analyse MassHunter _____	207
8.5. Traitement des résultats _____	210
8.5.1. Création d'une méthode de traitement Soprane II _____	210
8.5.2. Création d'une méthode de traitement Chemstation Data Analysis _____	210



1. Introduction

SOPRANE II est un logiciel de chromatographie (Chromatography Data System). Il est plus particulièrement dédié aux micro-chromatographes (MicroGC) et à l'analyse en ligne. Le logiciel peut prendre plusieurs instruments en charge (jusqu'à 4) ainsi que les systèmes d'échantillonnage.

Voici les fonctionnalités disponibles :

- Définir une séquence d'analyses faisant appel à plusieurs flux et plusieurs méthodes d'analyse (voir chapitre [Méthodes et séquences](#)).
- Automatiser l'envoi des méthodes d'analyse aux différents modules de l'analyseur, (voir chapitre [Méthodes et séquences](#)).
- Faire l'acquisition des signaux et faire l'intégration en fin d'analyse, (voir chapitres [Gestion des analyses](#) et [Traitement](#))
- Déterminer les concentrations ainsi que d'autres calculs, (voir chapitre [Traitement](#))
- Procéder à l'étalonnage, (voir chapitre [Gestion des séquences d'étalonnage](#))
- Archiver les résultats,
- Imprimer ou les visualiser sous divers formats,
- Communiquer avec des applications (ou automates) tierces pour l'envoi de résultats de l'analyse (4-20 mA, relais, liaison Modbus, ...). (Voir chapitre [Transmission des résultats d'analyse](#))

La première partie de ce manuel définit la manière de configurer SOPRANE II.

Certains éléments décrits dans ce manuel ne correspondent pas à la définition "hardware" de l'analyseur et ne sont donc pas accessibles.

SOPRANE II utilise une clé USB (format micro) pour la gestion des licences. Si la licence USB n'est pas connectée, SOPRANE II se verrouille au bout de quelques secondes. Cette clé contient les informations relatives à (aux) l'analyseur(s), aux modes de communication (4-20mA, Modbus...), aux calculs spécifiques et bien d'autres.

Deux opérations seront nécessaires avant de pouvoir utiliser SOPRANE II : d'abord installer le logiciel sur votre ordinateur, puis définir les options qui vous concernent parmi les possibilités offertes par votre équipement et configurer en conséquence le logiciel.

Voir aussi :

[Installation](#)

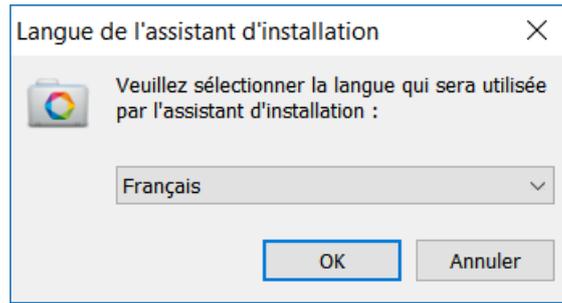
2. Installation

Le fichier d'installation de SOPRANE II comprend ce manuel et une clef USB à installer sur un port USB de l'ordinateur.

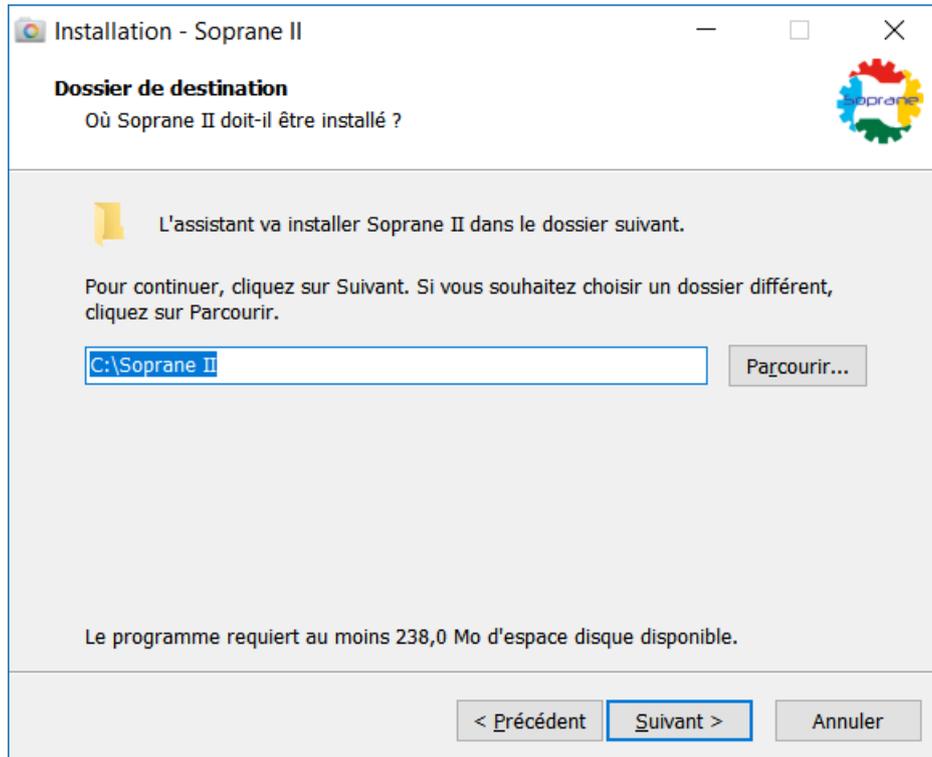
Insérez la clé (USB) SOPRANE II sur un port USB et démarrez l'installation du logiciel.

Dans la fenêtre qui s'affiche, sélectionnez la langue qui sera utilisée par l'assistant d'installation.





Une fois la langue sélectionnée, choisissez le dossier dans lequel vous souhaitez installer SOPRANE II.



La clef délivrée avec SOPRANE II répond à un double but : définir la configuration propre à l'analyseur et ses périphériques (et l'utilisation que l'on veut en faire), et maîtriser la licence du logiciel pour prévenir toute utilisation frauduleuse.

L'assistant d'installation demande l'installation du pilote de la clef. Si celui-ci est déjà installé (suite à une installation préalable), il n'est pas nécessaire de le réinstaller.

Après avoir installé SOPRANE II, il faudra configurer l'application (les analyseurs, les entrées / sorties, les répertoires d'analyses etc...). Chacun de ces éléments n'est accessible que si l'option est présente dans la licence USB fournie avec le média d'installation.

Voir le chapitre :

[Configuration analyseur](#)

[Création](#)

[Création d'un analyseur avec connexion réseau](#)



[Création d'un analyseur avec liaison série](#)

[Sélection](#)

[Fermeture](#)

[Affichage de la configuration](#)

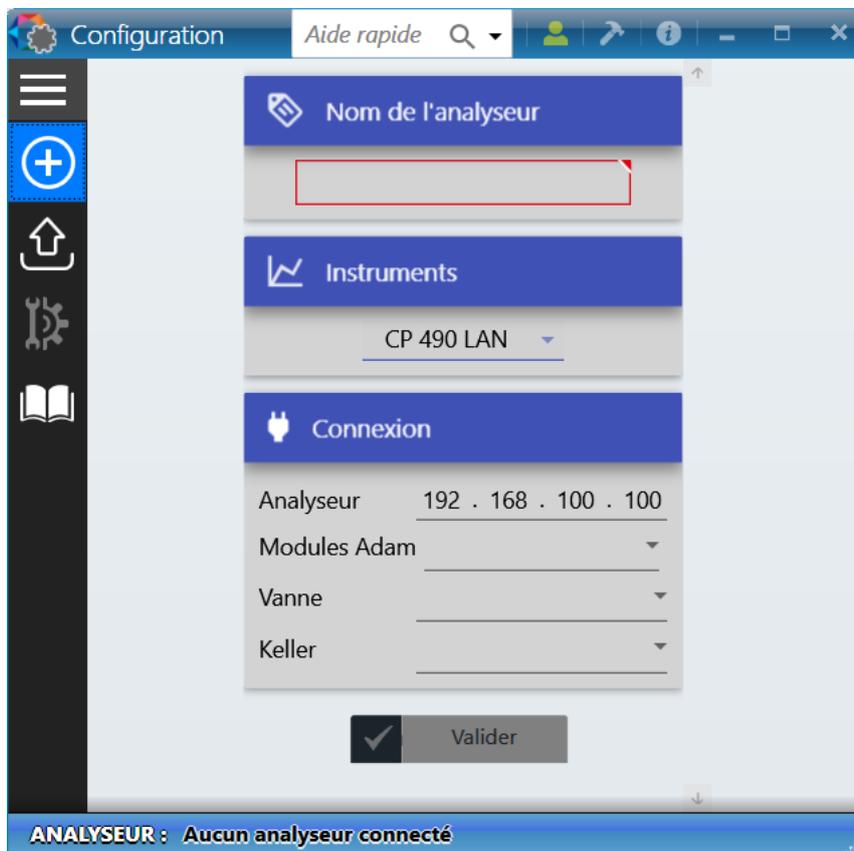
3. Configuration analyseur

La gestion d'une configuration d'un analyseur se gère avec l'application **Configuration**  présente dans le dossier d'installation de SOPRANE II. Ce logiciel peut être lancé par la commande Démarrer / Programmes / SRA Instruments / SOPRANE II Configuration.

Chaque analyseur est défini par un profil. Celui-ci est composé comme suit :

- Un nom (nom de l'analyseur)
- Le type de l'analyseur : MicroGC R3000 (Série), M3000 (LAN) Inficon, Agilent 490 (LAN), ...
- L'adresse du port de communication de l'analyseur. COM1, 2... pour un port série, 10.1.1.XXX pour une adresse IP. Cette adresse doit être sélectionnée ou saisie dans le champ "Analyseur" du cadre "Connexion".
- L'adresse du port série pour communiquer avec les modules d'entrées / sorties (champ "Modules Adam").
- L'adresse du port série pour piloter des vannes VALCO (champ "Vanne").
- L'adresse du port série pour piloter un ou plusieurs modules TES (champ "TES").

Une fois lancé, le premier affichage proposera de créer un instrument.



L'instrument peut être un MicroGC SRA R3000, un MicroGC Inficon 3000, un MicroGC Inficon Fusion, un MicroGC Agilent 490. SOPRANE II peut dialoguer avec les analyseurs via une liaison Ethernet (LAN) ou par un port série (RS232).

En fonction des informations de la licence USB, le mode de transmission pourra être limité à un seul type de connexion.

Pour aller plus loin, voir aussi les chapitres :

Création

[Création d'un analyseur avec connexion réseau](#)

[Création d'un analyseur avec liaison série](#)

Sélection

Fermeture

Affichage de la configuration

Instrument

[Modification des ports de communication](#)

[Renommage](#)

[Suppression](#)

Définition matériel

[Configuration échantillonnage](#)

[Vannes Valco](#)

[Electrovanne](#)

[Gestion des entrées sorties logiques](#)

[Gestion des voies par électrovannes](#)

[Gestion des pompes d'échantillonnage](#)

[Alarmes](#)

[Information GC prêt](#)

[Démarrage externe](#)

[Pompe auxiliaire](#)

[Commande démarrage analyse](#)

[Commande démarrage séquencé](#)

[Contrôle débit échantillon](#)

[Test des entrées et sorties](#)

[Entrées logiques](#)

[Sorties logiques](#)

[Entrées analogiques](#)

[Test modules 4-20mA](#)

[Test Vannes](#)

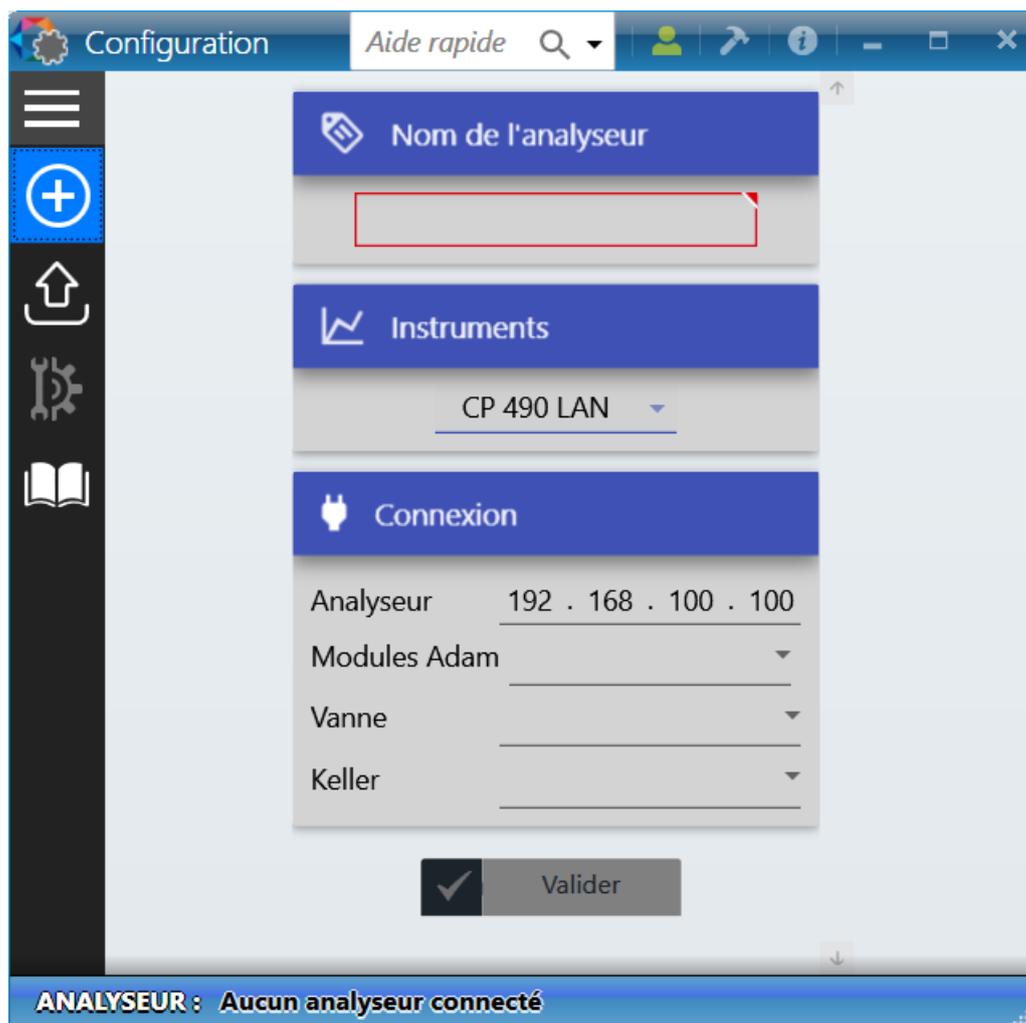
[Sélection du gaz vecteur](#)

3.1. Création

SOPRANE II autorise la création d'autant d'analyseurs que l'on souhaite. Le nombre d'instruments spécifié dans la licence USB définit le nombre d'analyseurs pouvant être utilisés en même temps. Pour pouvoir créer

un analyseur, cliquez sur le bouton  **Créer analyseur**.





Plusieurs types d'instrument sont disponibles :

- R 3000 : μ GC SRA une liaison série de type RS232 (longueur max du câble RS232 ~20m).
- M3000 : μ GC Inficon 3000 avec une connexion réseau, ne nécessite pas un ordinateur à proximité du chromatographe.
- Agilent 490 : μ GC Agilent 490 avec une connexion réseau, ne nécessite pas un ordinateur à proximité du chromatographe.

Toutes les définitions de connexion à des modules externes tels des modules Adams, des vannes et des modules TES se feront à partir de cet affichage.

Pour créer un instrument il suffira de renseigner le nom de l'instrument, son type, le port de connexion vers l'instrument et si nécessaire la connexion vers les modules externes (modules Adams, capteur Keller, vannes modules TES).

Lorsque les données sont validées, le programme teste l'existence d'un analyseur à l'adresse indiquée et la possibilité d'un dialogue.

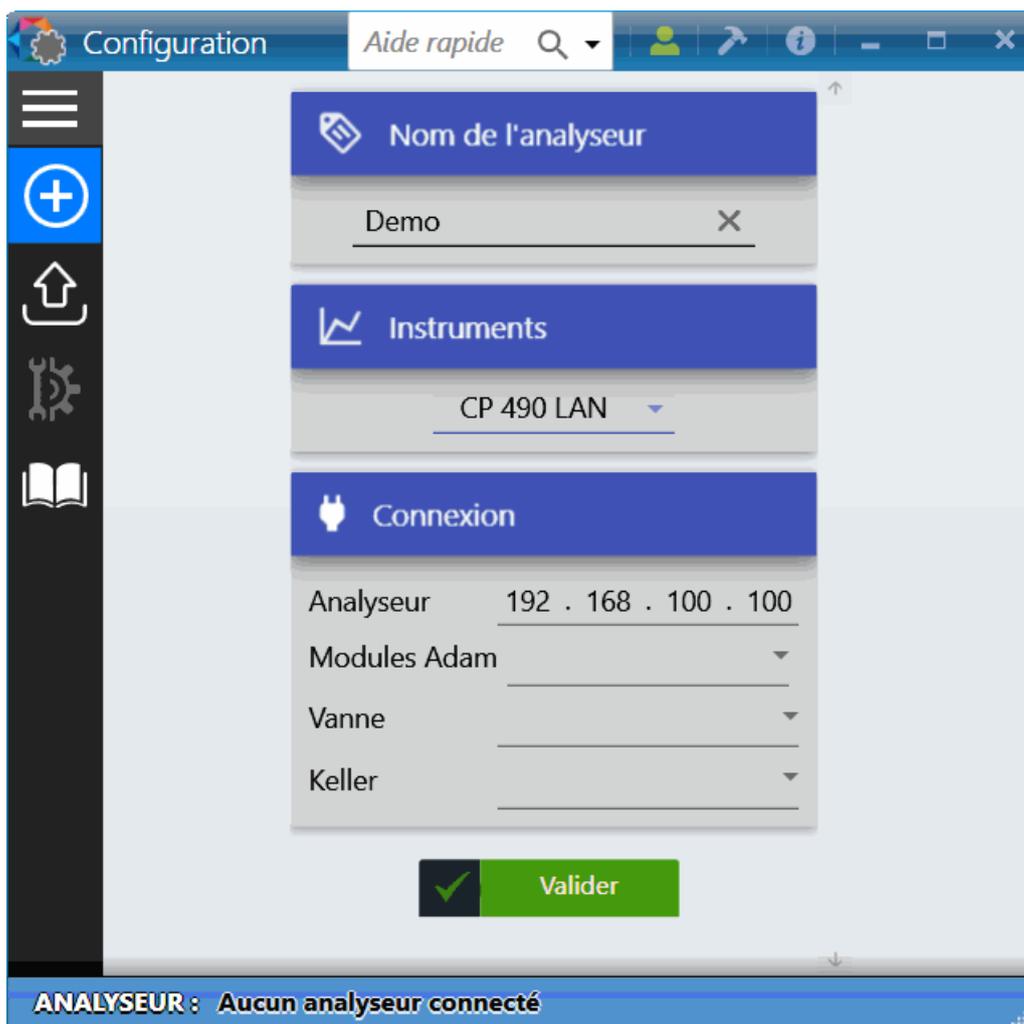


Pour voir comment créer un analyseur avec une liaison réseau, voir le chapitre : [Création d'un analyseur avec connexion réseau](#)

Pour voir comment créer un analyseur avec une liaison série, voir le chapitre : [Création d'un analyseur avec liaison série](#)

3.1.1. Création d'un analyseur avec connexion réseau

Le cas que nous examinons correspond à une connexion réseau, dans ce cas, c'est l'adresse IP de l'analyseur qui sera demandée :



Sans autres spécifications, les chromatographes sont livrés initialisés à l'adresse 192.168.100.100 pour les Agilent 490 et 10.1.1.101 pour les M3000Lan.

S'il s'avère nécessaire de changer cette adresse, la solution la plus simple consiste à établir une liaison directe entre l'ordinateur et l'analyseur (connexion TCP/IP), d'utiliser votre navigateur internet et d'adresser la page d'accueil de l'analyseur.

Pour ce faire, tapez directement l'adresse IP 10.1.1.1.190 (ou autre si modifiée) dans la barre d'adresse du



navigateur Web, comme indiqué dans la figure suivante.

La page d'accueil de l'analyseur offre plusieurs possibilités : lire et modifier la configuration IP, lire l'état du GC et de plusieurs utilités, pour définir, par exemple, le gaz vecteur utilisé sur l'analyseur.

La seule utilisation dont nous avons besoin ici est la modification de l'adresse IP.

The screenshot shows a web browser window with the URL 10.1.1.190. The page title is "490 Micro GC" and the Agilent Technologies logo is visible. The main content area is titled "Status: Instrument - Overview" and contains the following information:

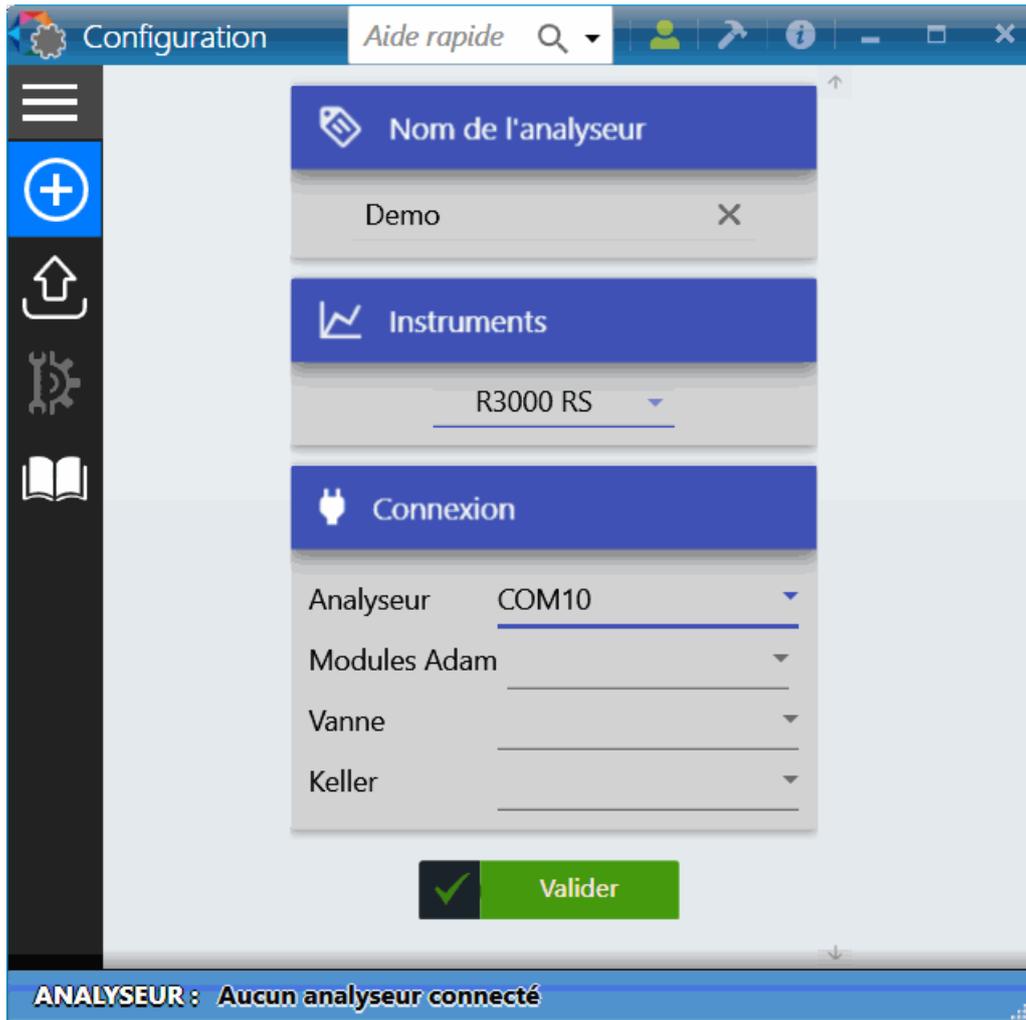
490 Micro GC				
Instrument name	microgc			
Site info				
Instrument serial number	123			
GC Time	23-11-2000 05:29:57			
Solution	*			
GC Status				
Column description	Channel 1		Channel 2	
	20m MSSA Heated Injector, Backflush		10m PPU, Heated Injector, BF, Ultimetel	
	Helium		Helium	
Carrier gas	Helium		Helium	
Channel serial number	655240		16235002	
Column temperature [°C]	Setpoint	Actual	Setpoint	Actual
	100.0	100.0	80.0	80.0
Injector temperature [°C]	90.0	90.1	90.0	90.0
Column pressure [kPa]	193.1	193.1	193.1	193.3
Auto zero [mV]		-50.1		-5.7

3.1.2. Création d'un analyseur avec liaison série

Le cas que nous examinons est celui d'une connexion série avec un µGC R3000 RS, dans ce cas, le logiciel demande le numéro du port série à utiliser pour communiquer avec l'analyseur.

The software asks for the number of the serial port used to communicate with the analyzer.

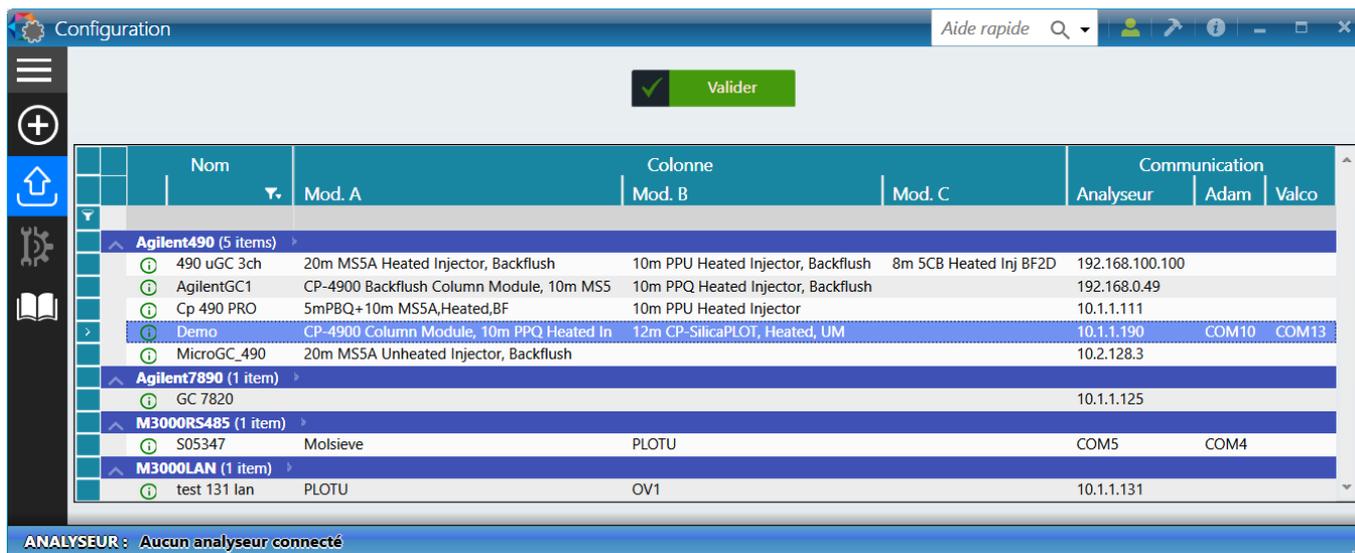




3.2. Sélection

Pour charger, ou changer d'analyseur, cliquez sur le bouton  **Sélectionner l'analyseur**.



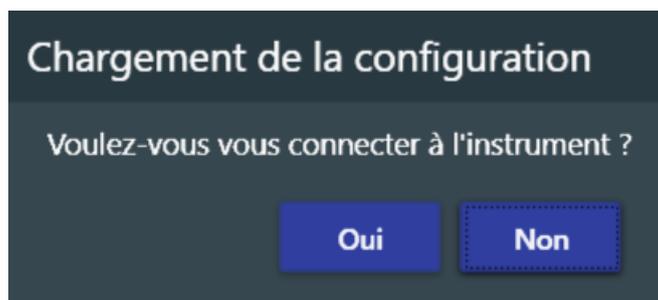


Chaque ligne représente un analyseur (leur configuration est sauvegardée dans une base de données).

En cliquant sur l’une d’elles, ou en sélectionnant avec les flèches, des informations sur cette configuration apparaissent.

- Nom de l'instrument.
- Type de l'instrument.
- Type de colonne par module.
- Description des différentes connexions de l'instrument.

Pour sélectionner l'instrument, cliquez sur le bouton de confirmation, puis la configuration sera chargée. Un afficheur vous demande si vous souhaitez vous connecter à l'instrument ou uniquement visualiser la configuration. Dans ce dernier cas, aucun changement ne sera autorisé.

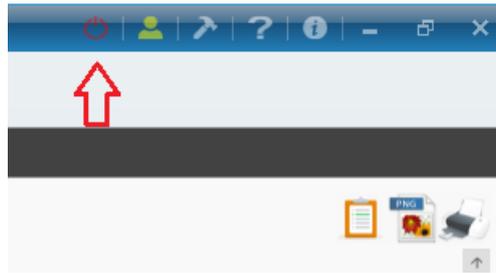


Dans tous les cas, la configuration sera affichée (voir le chapitre [Affichage de la configuration](#) pour plus de détails).

3.3. Fermeture

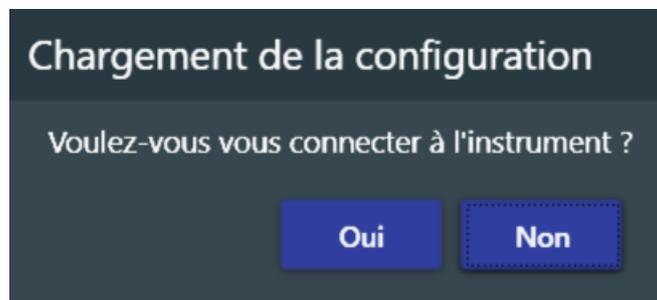
La fermeture d’un analyseur peut se faire en cliquant sur l’icône  située en haut à gauche sur la barre des titres, ou en quittant l'application.





3.4. Affichage de la configuration

Une fois l'analyseur sélectionné, une fenêtre demande si vous voulez vous connecter à l'instrument, ou seulement afficher la configuration (sans modification).

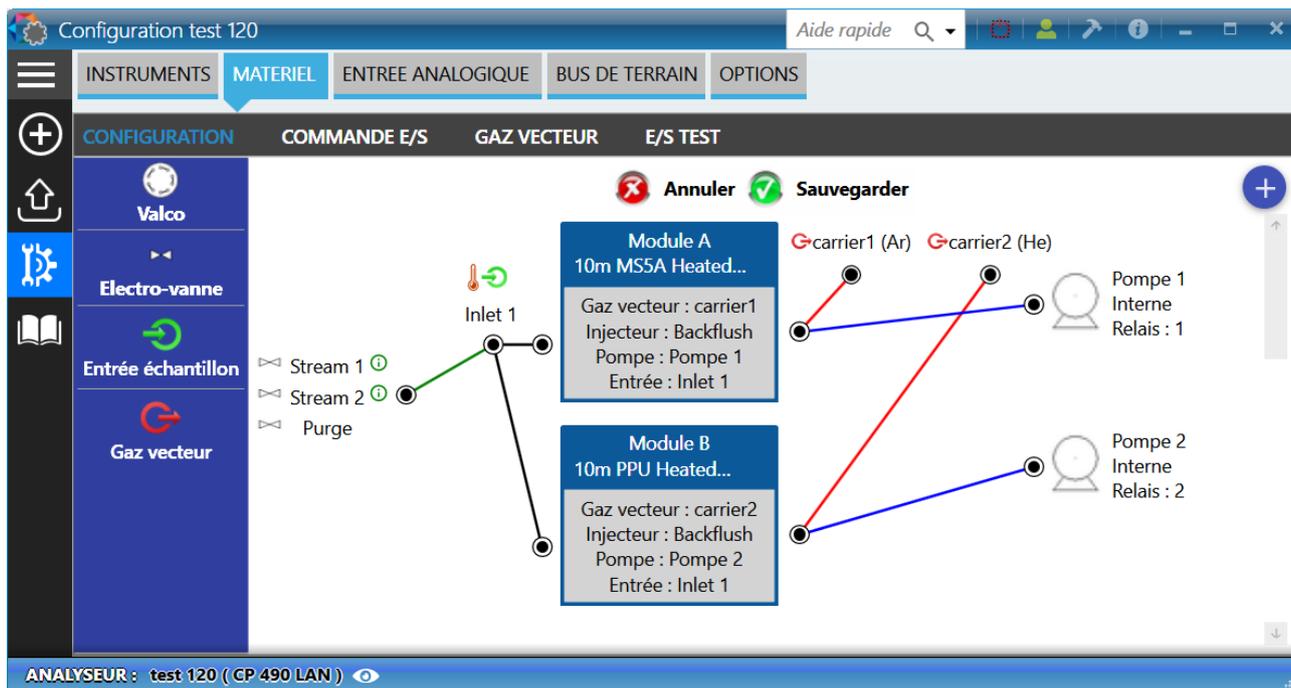


Deux affichages sont disponibles :

Le premier affichage correspond à la visualisation "graphique" de l'analyseur avec le récapitulatif de tous les éléments présents dans la configuration.

Pour y accéder, cliquez sur l'icône **Configuration**  , puis cliquez sur l'onglet **Matériel** et **Configuration**.





La partie centrale de la vue affiche tous les éléments connectés au(x) module(s) analytique(s) comme les pompes, les électrovannes, les entrées échantillon...

La définition d'éléments matériels complémentaires est également possible à cet endroit du logiciel, voir le chapitre [Définition matériel](#).

Un autre affichage plus détaillé est également disponible en sélectionnant l'onglet **Instrument** et **Affichage de la configuration**.



	Module A	Module B
Mod. SN	18105061	18015021
Mod. PN	494011360	494001460
Injeteur chauffé	✓	✓
Max inj. temp.	110	110
Min inj. temp.	30	30
Colonne	10m MS5A Heated Inj, Backflush, RTS opt	10m PPU Heated Injector, Backflush
Type d'injeteur	Backflush	Backflush
Max col. temp.	180	180
Min col. temp.	30	30
Gaz vecteur	Argon	Helium
Type de détecteur	TCD	TCD
Mode de contrôle de pression	EPC	EPC

A noter :

Sur la barre de statut en bas de la fenêtre, l'icône  (à côté du nom de l'instrument), permet de visualiser la configuration à n'importe quel instant, cette icône est également disponible au niveau de SOPRANE II.

3.5. Instrument

Voir aussi :

[Modification des ports de communication](#)

[Renommage](#)

[Suppression](#)

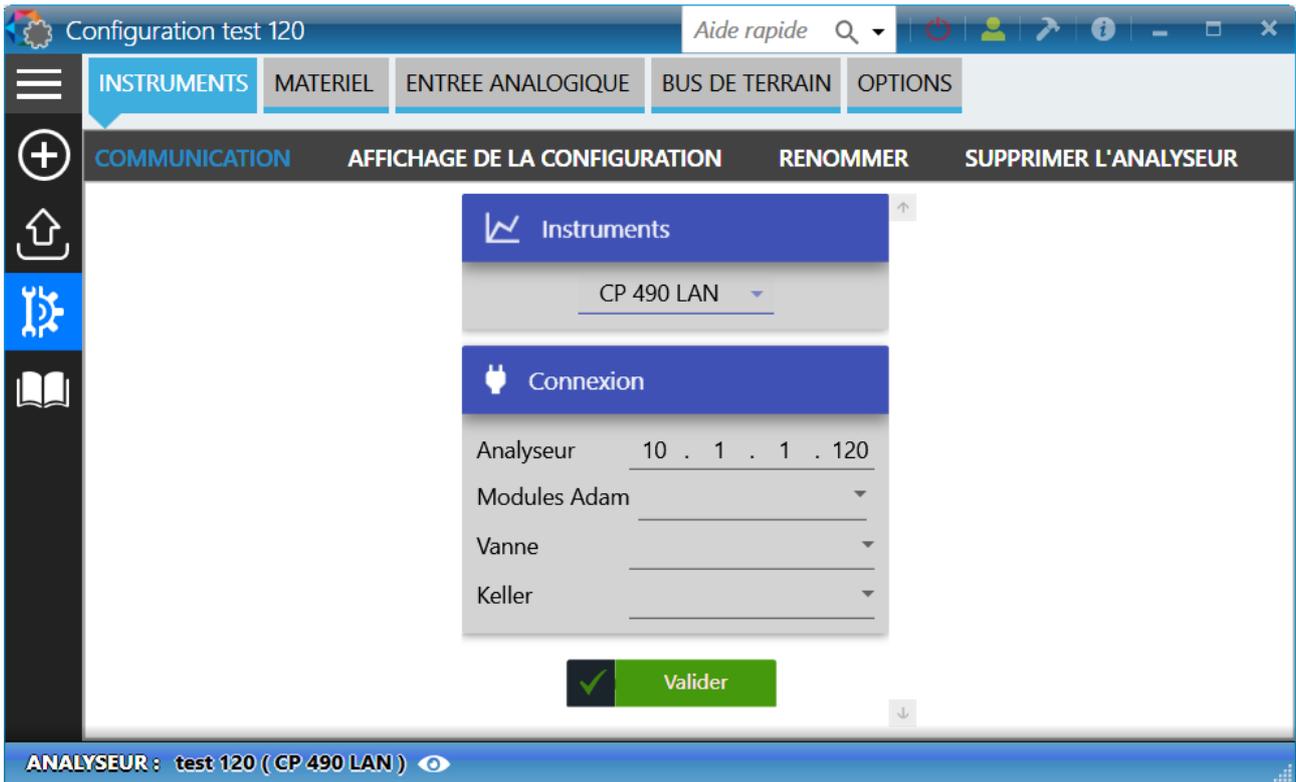
3.5.1. Modification des ports de communication

Pour modifier les ports de communication d'un instrument, il faut d'abord se connecter à celui-ci.

Une fois connecté, suivre le chemin : "**Configuration**  > **Instruments** > **Communication**".

L'affichage offre la possibilité de modifier le type d'instrument, le port de communication vers cet instrument, ainsi que les connexions vers les modules E/S, les vannes et les module Keller.



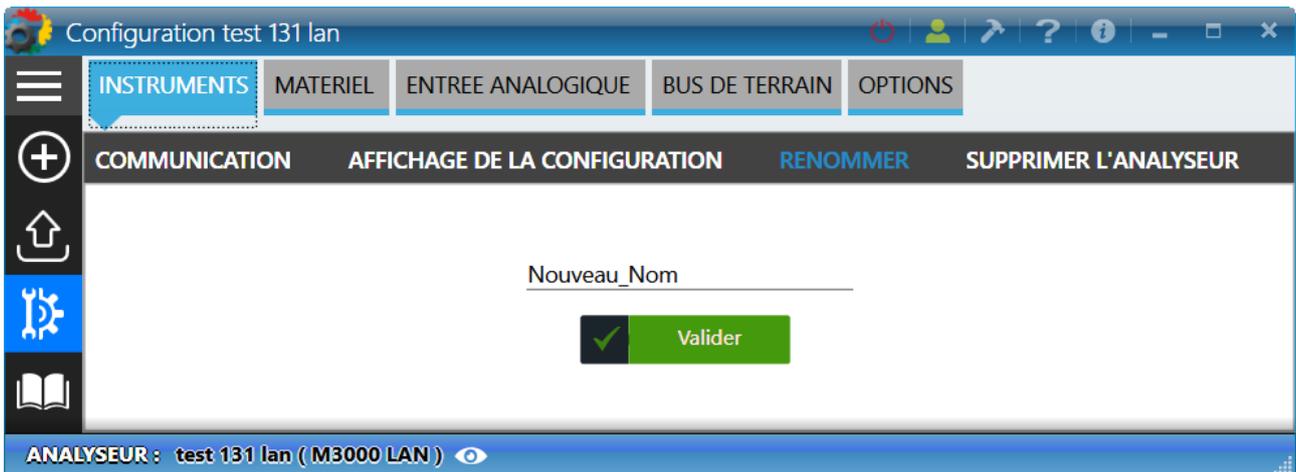


3.5.2. Renommer un instrument

Pour renommer un analyseur, connectez-vous à celui-ci. Une fois connecté, suivez le chemin suivant :

"Configuration  > Instruments > Renommer".

Indiquez alors un nouveau nom pour l'instrument puis cliquez sur "Valider".



3.5.3. Suppression d'un instrument

Pour supprimer un analyseur, connectez-vous à celui-ci. Une fois connecté, suivre le chemin suivant :

"**Configuration**  > **Instruments** > **Supprimer l'analyseur**".

Cliquez sur le bouton rouge pour supprimer l'instrument.



La suppression efface les méthodes et les analyses effectuées avec l'instrument.



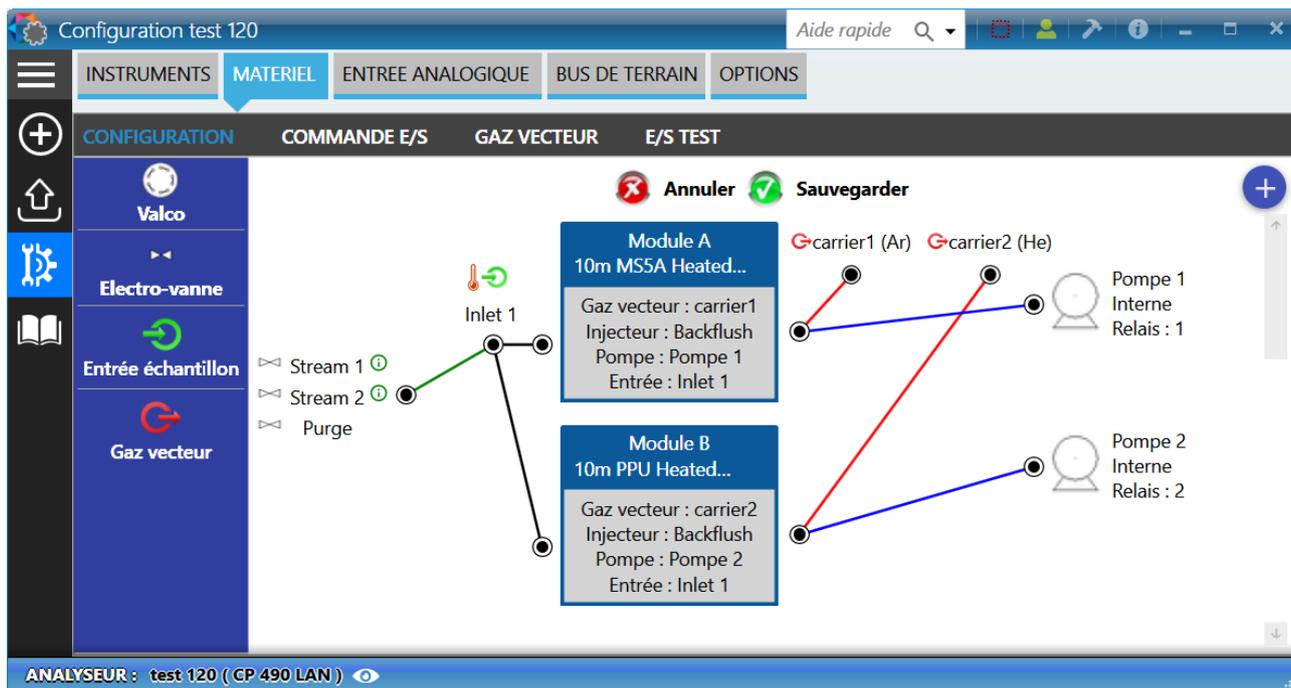
3.6. Définition matériel

Il est nécessaire de définir le matériel à utiliser pour réaliser les analyses : comment dialogue-t-on avec l'analyseur, combien de flux à gérer, comment sont-ils sélectionnés, utilise-t-on des entrées / sorties, ...

La licence USB connectée à l'ordinateur contient une définition de l'installation, il est nécessaire de configurer ces options pour pouvoir les utiliser.

Pour modifier la configuration "matériel", suivre le chemin : "**Configuration**  > **Matériel** > **Configuration**".





Ce menu présente la configuration de l'instrument.

- **Gestion des voies échantillons**

La gestion des voies d'échantillons se fait par le bouton  représentant la sélection par vannes Valco et le bouton  pour la gestion échantillon par électrovannes.

Le nombre total de flux utilisés (flux à analyser et flux d'étalonnage non différenciés, valeur de 1 à 16 flux), qui serviront pour l'étalonnage et, enfin, la façon dont la sélection sera assurée (jeu d'électrovannes, une vanne multi-positions à codage BCD ou une vanne multi-positions à entrée parallèle).

Voir également le chapitre [Configuration échantillonnage](#) pour savoir comment définir correctement les voies échantillons.

- **Pompe auxiliaire**

On y indique la présence d'une pompe auxiliaire (bouton ) qui permettra l'arrêt de la pompe avant ou après l'injection ou aspiration permanente de l'échantillon. Le dispositif utilisé pour piloter la pompe peut être soit un relais d'une carte extension, soit un des deux relais embarqués du MicroGC (si présent).

Voir également le chapitre [Pompe auxiliaire](#) pour savoir comment configurer la pompe auxiliaire.

- **Entrées échantillon**

La définition des entrées échantillon  permet de déterminer quelle entrée est connectée à quel module.

Note :

L'icône ci-dessus ne changera pas la configuration, elle est simplement à titre indicative.



- **Pompe**

Permet un échantillonnage rapide des composés. Les pompes d'échantillonnage sont indiquées à l'aide de l'icône  , on définit quel module pilote quelle pompe. La modification des pompes n'est possible que sur le MicroGC R3000, pour les autres instruments, les pompes sont affichées à titre indicatif.

Voir également le chapitre [Gestion des pompes d'échantillonnage](#) pour savoir comment configurer les pompes.

- **Entrées gaz vecteur**

On peut utiliser l'Azote, l'Argon, l'Hélium ou l'Hydrogène. Pour ajouter une entrée gaz vecteur, cliquer sur le bouton  . Par défaut le gaz vecteur est l'Argon.

Note :

En passant la souris au-dessus d'un élément, l'icône  permet de supprimer l'élément si nécessaire.

Voir aussi:

[Configuration échantillonnage](#)

[Vannes Valco](#)

[Electrovanne](#)

[Gestion des entrées sorties logiques](#)

[Gestion des voies par électrovannes](#)

[Gestion des pompes d'échantillonnage](#)

[Alarmes](#)

[Information GC prêt](#)

[Démarrage externe](#)

[Pompe auxiliaire](#)

[Commande démarrage analyse](#)

[Commande démarrage séquence](#)

[Contrôle débit échantillon](#)

[Test des entrées et sorties](#)

[Entrées logiques](#)

[Sorties logiques](#)

[Entrées analogiques](#)

[Test modules 4-20mA](#)

[Test vannes](#)

[Sélection du gaz vecteur](#)

3.6.1. Configuration échantillonnage

SOPRANE II permet de piloter jusqu'à 16 voies d'échantillons soit par électrovannes ou soit par vanne multi-positions. Ces dernières peuvent être gérées soit par lecture en BCD et avance pas à pas, soit par lecture et position en BCD ou soit par vanne type Valco pilotée par liaison série. Dans le cas de l'utilisation du BCD, votre ordinateur doit être équipé d'une carte entrées/sorties logiques.



Voir aussi :

- [Vannes Valco](#)
- [Electrovanne](#)

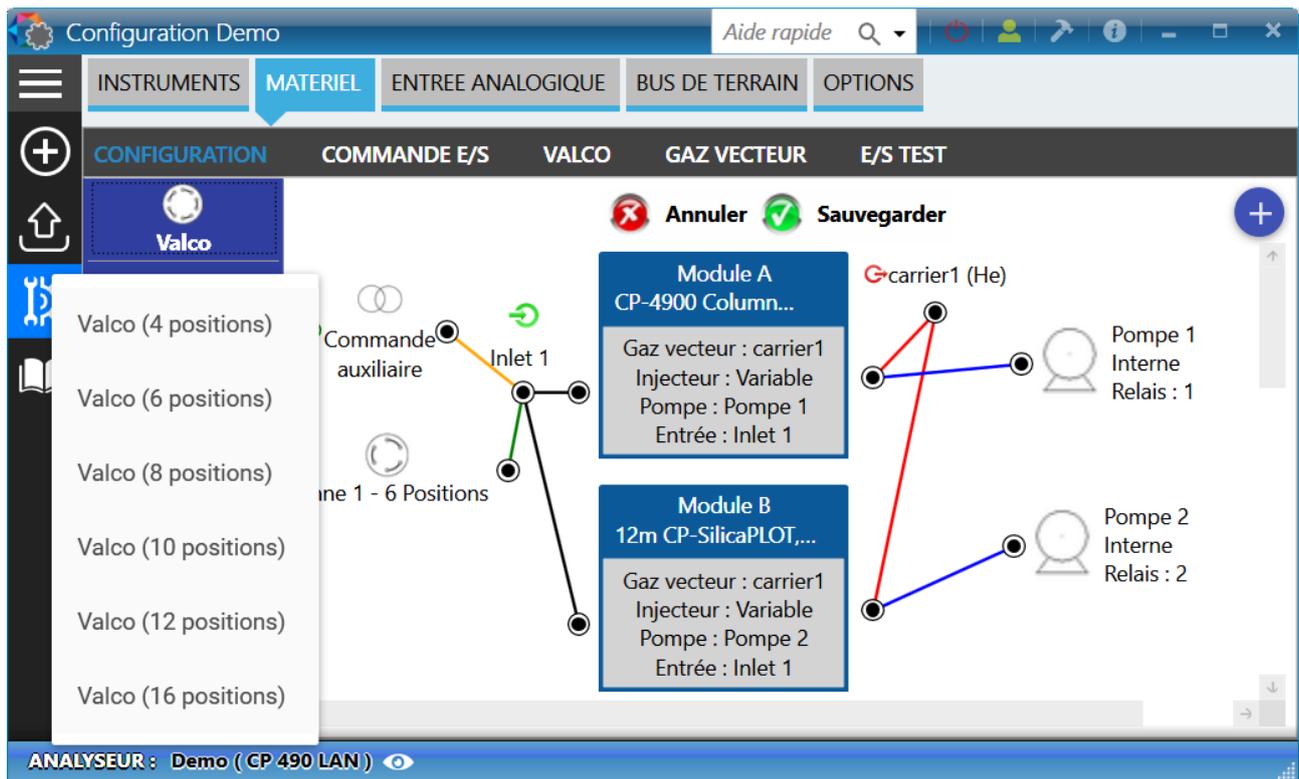
a) Vannes Valco

Pour définir la sélection des voies échantillons par vanne Valco, suivre le chemin suivant : "**Configuration**  > **Matériel** > **Configuration**".

La fenêtre qui s'affiche permet la définition du type de vanne Valco à utiliser, ainsi que le nombre de voies.

En cliquant sur le bouton  un menu avec les différents types de Valco apparaît. Les différents choix sont :

- Valco 4 positions
- Valco 6 positions
- Valco 8 positions
- Valco 10 positions
- Valco 12 positions
- Valco 16 positions



Note :

En passant la souris au-dessus d'un élément, l'icône  permet de supprimer l'élément si nécessaire.

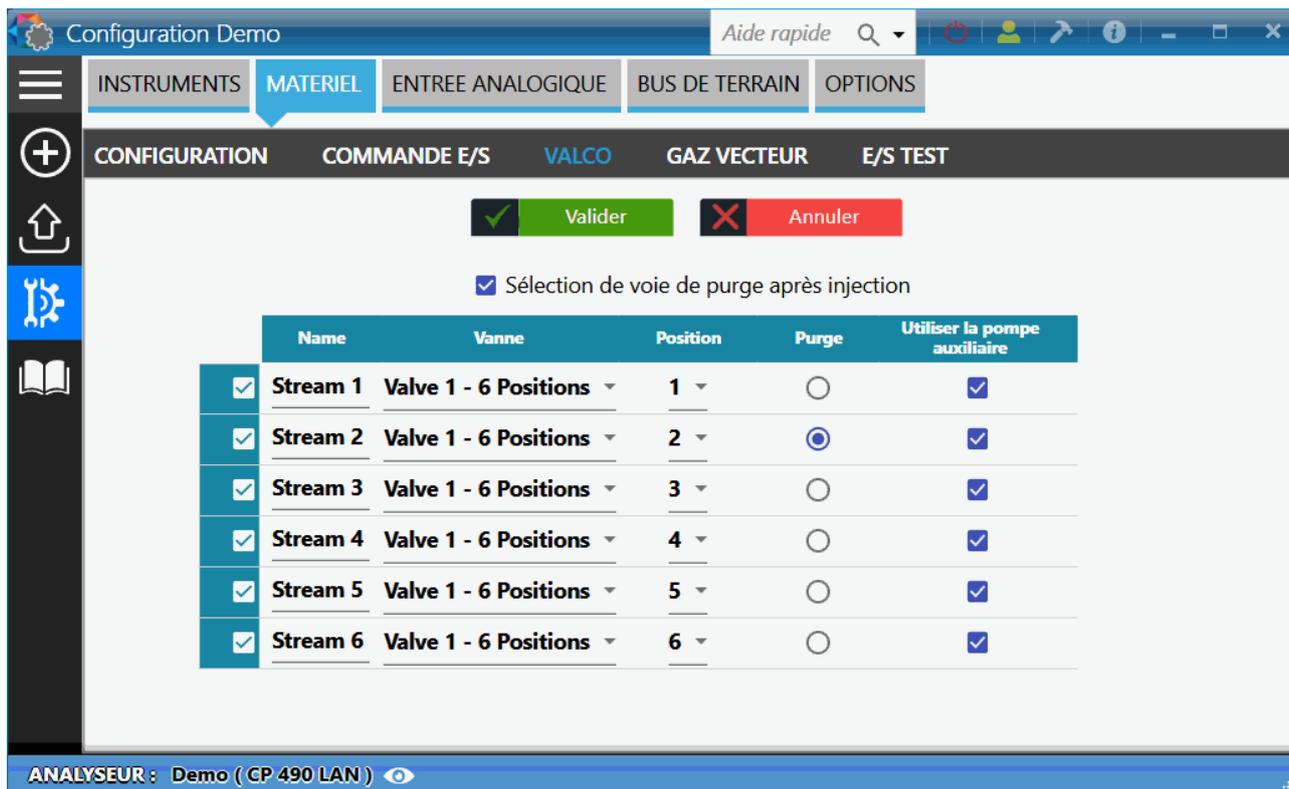


Une fois que la vanne Valco est correctement ajouté au graphique, pour configurer chaque voie, cliquez sur

"**Configuration**  > **Matériel** > **Valco**".

Dans la fenêtre suivante, vous pouvez définir :

- Le nom du flux
- La vanne
- La position de la vanne
- Si le flux est le flux de purge (sélectionné après injection ou analyse)
- Si la pompe auxiliaire est activée lorsque le flux est sélectionné



b) Electrovanne

Pour définir la sélection des voies échantillons par électrovanne, suivre le chemin suivant : "**Configuration**

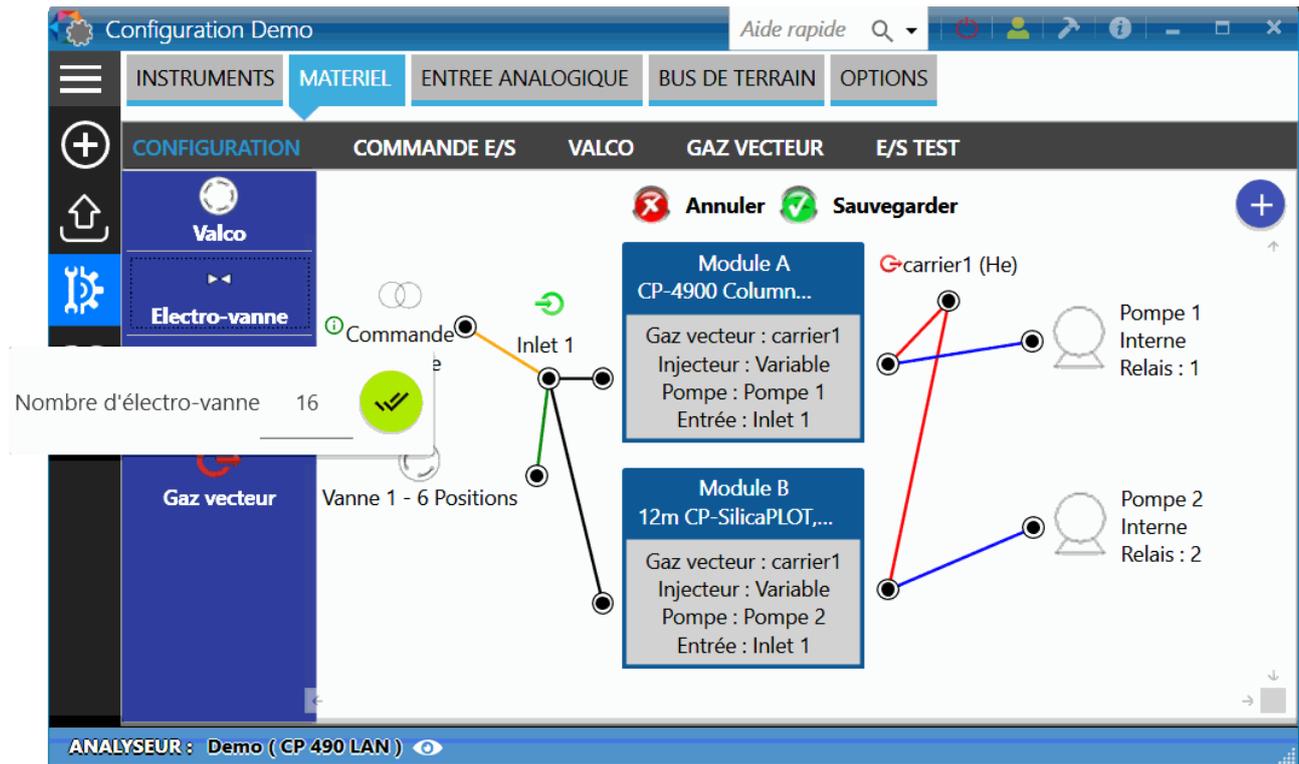
 > **Matériel** > **Configuration**".

La fenêtre qui s'affiche permet la définition du nombre de voie échantillon.

En cliquant sur le bouton  , un menu avec les différents types de Valco apparaît avec le nombre de voies à indiquer.

Pour configurer chacune des voies, voir le chapitre [Gestion des voies par électrovannes](#).





Note :

En passant la souris au-dessus d'un élément, l'icône  permet de supprimer l'élément si nécessaire.

3.6.2. Gestion des entrées sorties logiques

La gestion des Entrées / Sorties logiques permet de définir l'utilisation des relais. Pour y accéder, suivre le

chemin : "Configuration  > Matériel > Entrée I/O"

L'application détecte chaque module et les regroupe par noms, en séparant les entrées sorties.





L'ensemble des utilisations possibles en sortie sont :

- Pompe : définit une pompe à un relais
- Voie : définit une voie échantillon à un relais
- Alarme : Définit une alarme à un relais.
- Information GC prêt : lorsque le statut de l'instrument est prêt, active le relais.
- Démarrage externe : Lorsque le relais est activé, démarre l'analyse.
- Commande auxiliaire : choix de l'arrêt de la pompe auxiliaire avant ou après l'injection ou aspiration permanente de l'échantillon.
- Aucune



L'ensemble des utilisations possibles des entrées sont :

- Démarrage d'analyse : lorsque l'entrée est activée, démarre l'analyse
- Démarrage de séquence : lorsque l'entrée est activée, démarre la dernière séquence lancée.
- Contrôle du débit échantillon : lorsque l'entrée est activée, active l'alarme contrôle débit échantillon
- Aucune

Chaque entrée ou sortie peut avoir une logique positive (relais activé lorsqu'il y a contact) ou négative (relais activé lors qu'aucun contact n'est détecté).

Voir aussi :

[Gestion des voies par électrovannes](#)

[Gestion des pompes d'échantillonnage](#)

[Alarmes](#)

[Information GC prêt](#)

[Démarrage externe](#)

[Pompe auxiliaire](#)

[Commande démarrage analyse](#)

[Commande démarrage séquence](#)

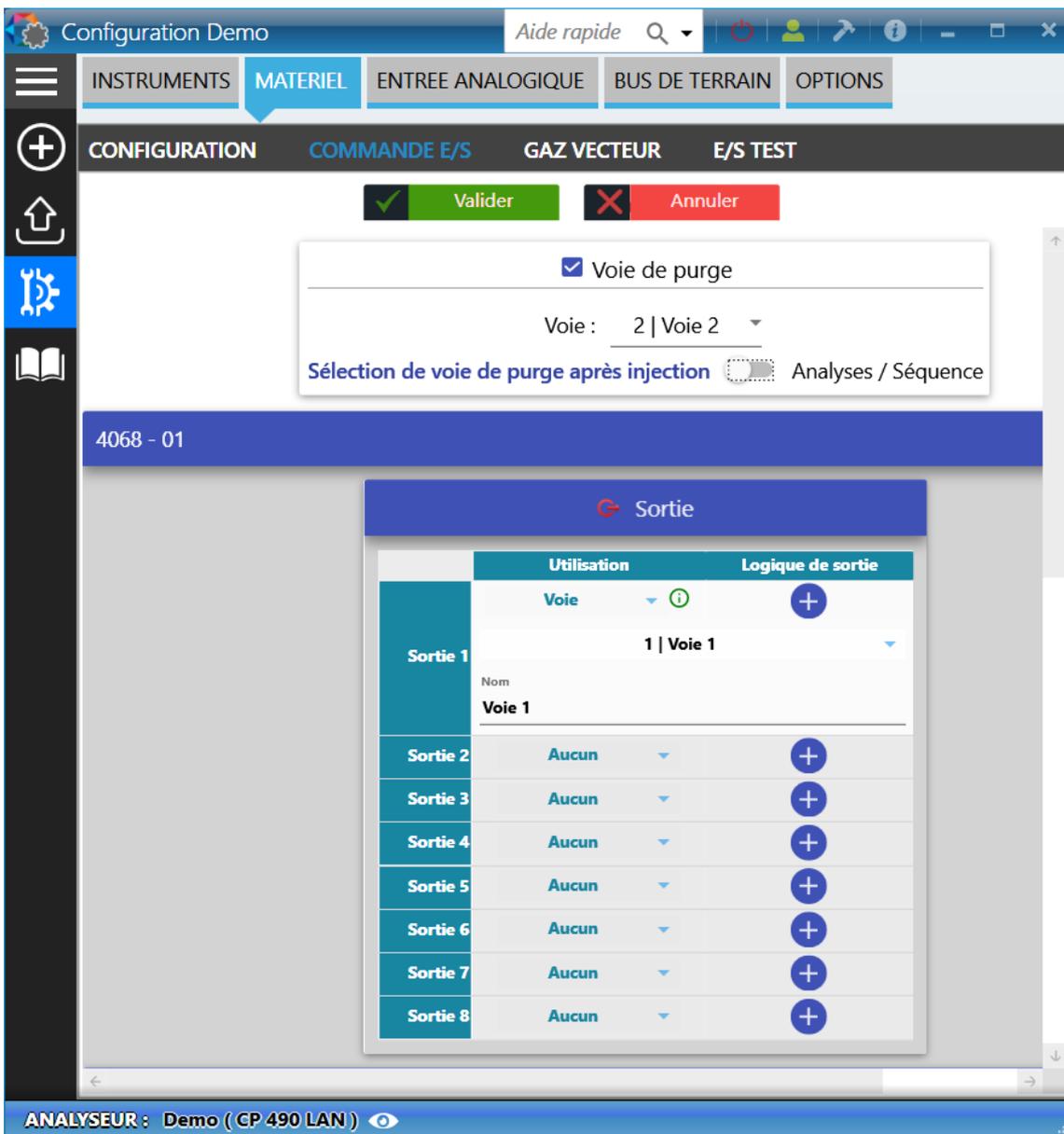
[Contrôle débit échantillon flow](#)

a) Gestion des voies par électrovannes

Pour gérer la sélection des voies échantillons il faut d'abord avoir effectué les actions indiquées au chapitre [Définition matériel](#).

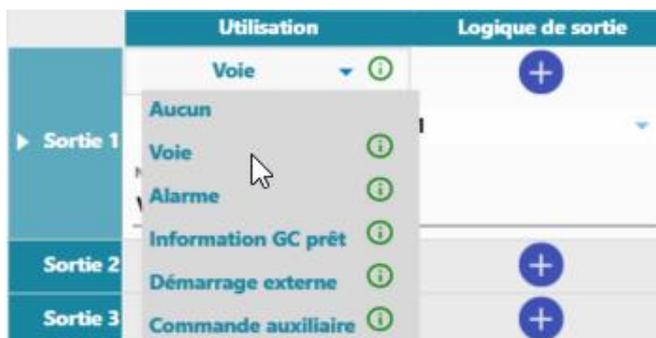
L'exemple suivant correspond à la configuration d'un instrument R3000, mais l'affichage est le même pour tous les instruments.





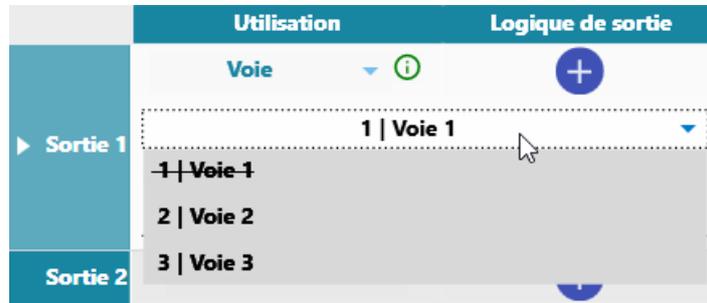
Si des relais sont disponibles (via modules Adam ou relais embarqués dans le MicroGC), la sélection de voies est disponible. Pour affecter une voie à un relais suivre les étapes suivantes :

1. Sélection de l’option Voie dans la colonne utilisation

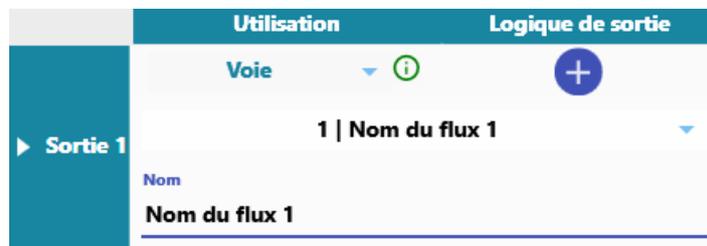


2. Sélection de la voie correspondante

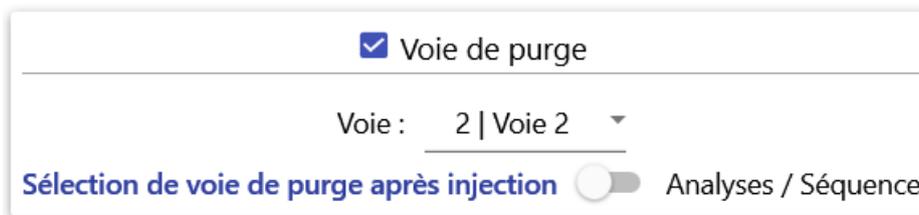
Le nombre de voies a été déterminé selon la configuration du chapitre [Définition matériel](#). Une liste déroulante contient toutes les voies disponibles.



Une fois sélectionné, le champ **Nom** permet de changer le nom de la voie.



Pour définir un flux par défaut, si coché, le flux par défaut sera sélectionné après chaque analyse/séquence ou si vous préférez après chaque injection.



b) Gestion des pompes d'échantillonnage

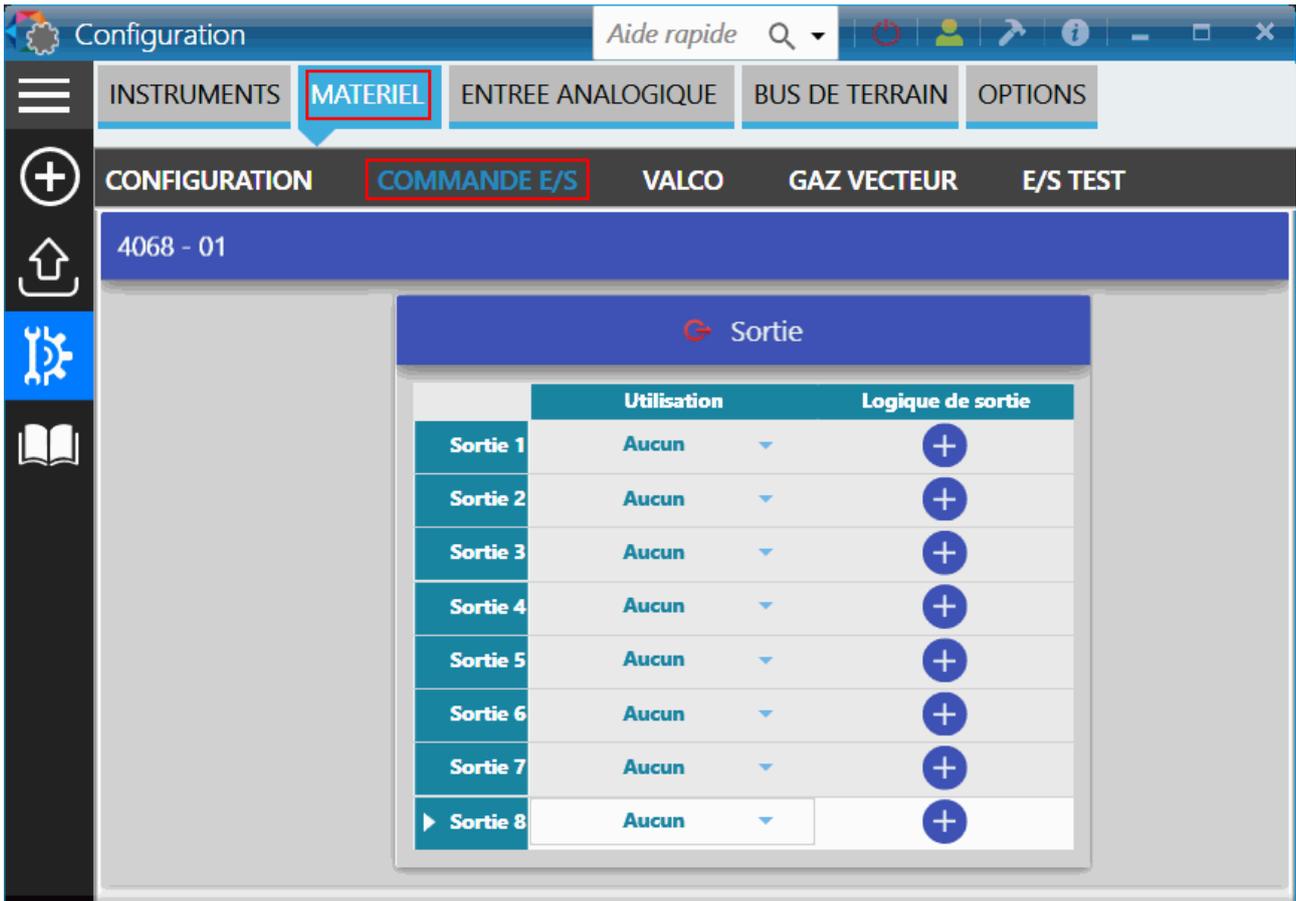
Pour gérer les pompes d'échantillonnage il faut d'abord avoir effectué les actions indiquées au chapitre [Définition matériel](#) pour ajouter le nombre de pompes désiré.

Les pompes d'aspiration échantillon sont soit gérées par l'analyseur lui-même (Inficon 3000 LAN, Inficon Fusion, Agilent 490) soit par les modules Adam (M3000 Rs485).

Dans le cas où elles sont gérées en interne, la modification de ces pompes ne sera pas possible, elles seront affichées à titre d'information.

Dans le cas contraire on aura l'affichage suivant :





Dans le cas où le module Adam possède des sorties, la sélection de la pompe est disponible. Pour affecter une pompe à un relais suivez les étapes suivantes :

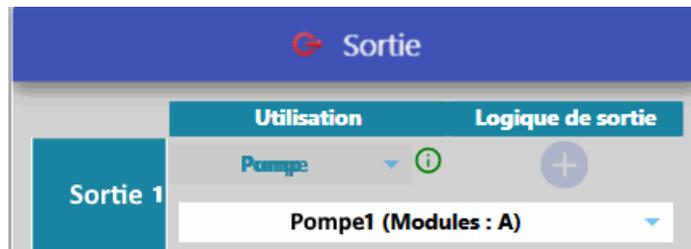
1. Sélection de l’option Pompe dans la colonne utilisation



2. Sélection de la pompe correspondante

Les pompes ont été déterminées selon la configuration du chapitre [Définition matériel](#). Une liste déroulante contient toutes les pompes disponibles (dans l'exemple suivant il n'y a que la pompe 1).

Une fois sélectionnés, les modules connectés sont affichés à titre d'information.



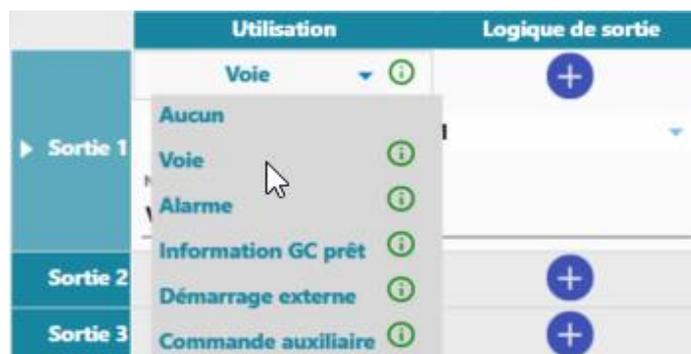
c) Alarmes

Les sorties peuvent être affectées à des alarmes qui dans le cas où elles sont activées, génèreront un défaut dans le logiciel SOPRANE II.

Pour qu'une alarme soit affectée à un relais, suivez le chemin suivant : "**Configuration**  **> Matériel > Configuration > Commande E/S**". Si des sorties logiques sont disponibles, la sélection d'une alarme sera alors disponible.

Pour affecter une alarme, suivez les étapes suivantes :

1. Sélection de l'option Alarme dans la colonne utilisation

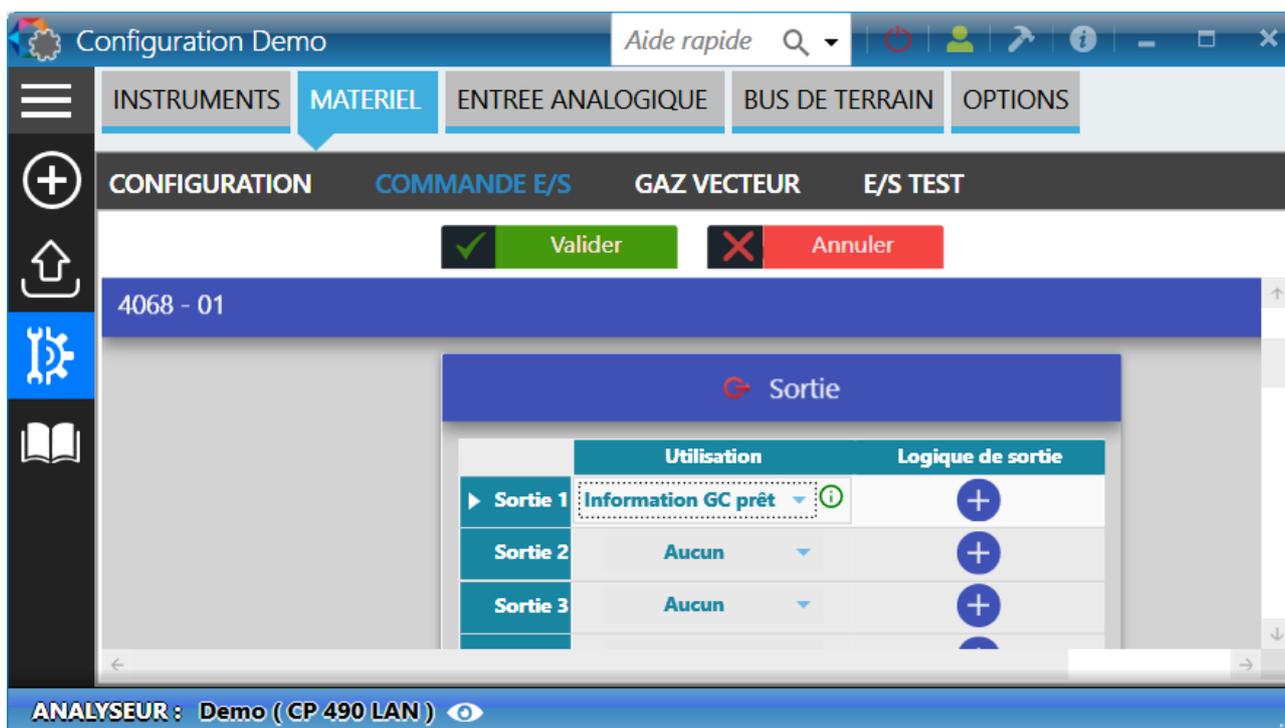


2. Sélection de l’alarme correspondante



d) Information GC prêt

SOPRANE II offre la possibilité d'activer un relais lorsque l'analyse a commencé. Suivez le chemin suivant : "Configuration > Matériel > Configuration > Commande E/S". Si des sorties logiques sont disponibles, l'option sera alors disponible.



e) Démarrage externe

La sortie de démarrage externe permet à un dispositif externe de démarrer une analyse sur l’analyseur.

Pour activer l'option, suivez le chemin suivant : "Configuration > Matériel > Configuration > Commande E/S". Si des sorties logiques sont disponibles, l'option sera alors disponible



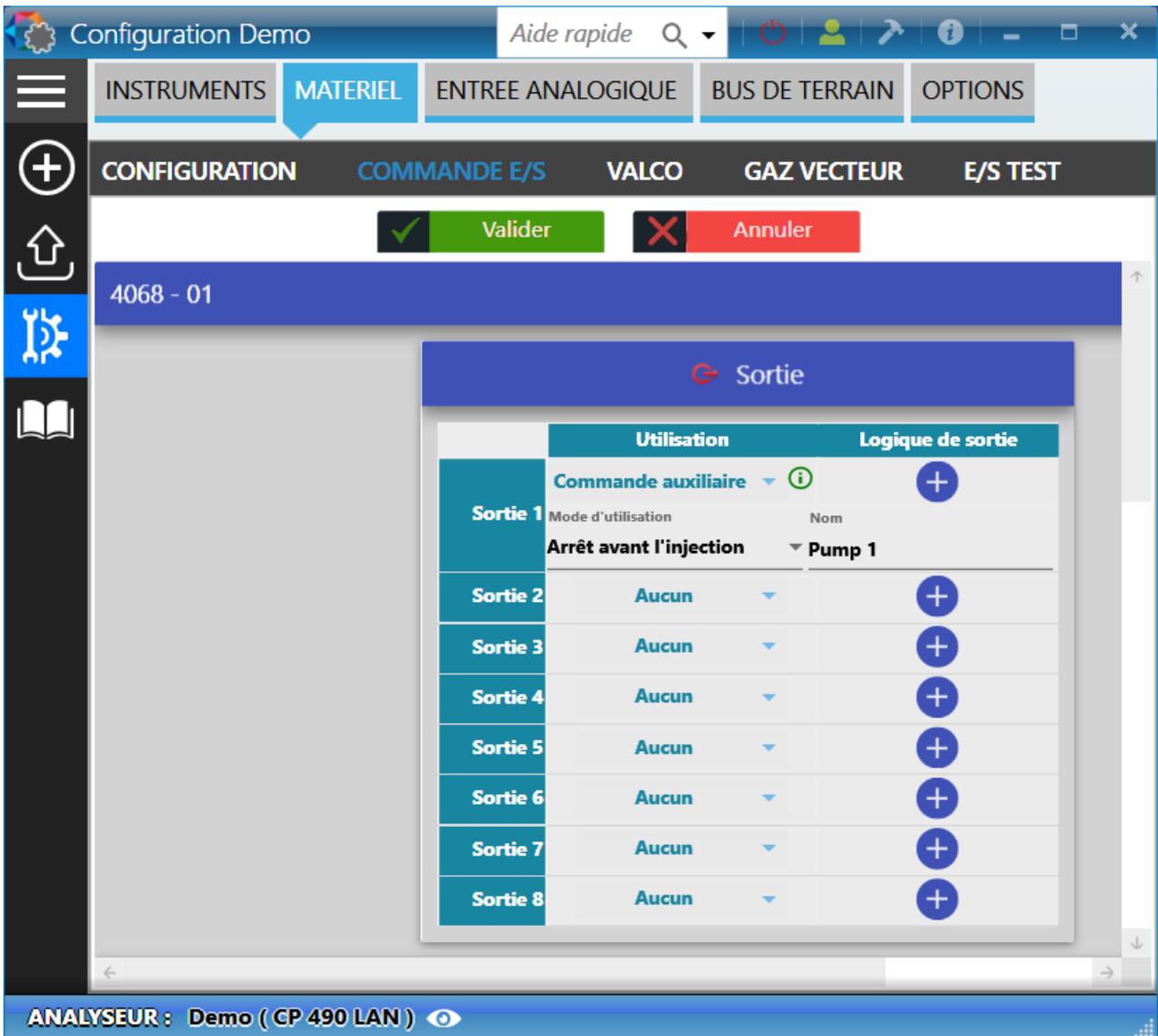


f) Pompe auxiliaire

La **Commande auxiliaire** permet de préciser la gestion d'une éventuelle pompe auxiliaire : référence du relais associé à son pilotage, choix de l'arrêt de la pompe avant ou après l'injection ou aspiration permanente de l'échantillon.

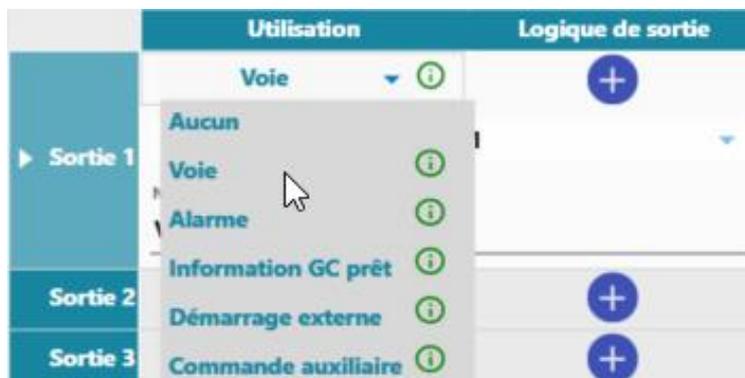
Pour activer l'option, suivez le chemin suivant : "**Configuration**  **> Matériel > Configuration > Commande E/S**". Si des sorties logiques sont disponibles, l'option sera alors disponible.





Pour utiliser la commande auxiliaire, suivez les étapes suivantes :

1. Sélection de l'option Commande auxiliaire dans la colonne utilisation



2. Sélection du mode d'utilisation

Une fois l'option sélectionnée, le choix de l'arrêt de la pompe peut se faire **avant** ou **après l'injection** ou **aspiration permanente** de l'échantillon.



Le mode **non utilisé** est utile si on a configuré une pompe et qu'on veut la mettre en attente pendant quelque temps ou si on veut la piloter par DDE.

Arrêt avant injection, cela signifie que la pompe va démarrer lors du changement de voie et elle va s'arrêter juste avant que l'on envoie la commande démarrage au MicroGC. Il est préférable, dans ce cas, de programmer un temps de balayage.

Arrêt après injection, cela signifie que la pompe s'arrête dès le début de l'acquisition (après l'injection du MicroGC).

Toujours en marche, cela signifie qu'elle est en marche pendant toute la durée des analyses et lorsqu'on arrête le cycle ou la séquence, on arrête la pompe.

Avec le mode **Manuel**, la pompe auxiliaire ne peut être activé qu'avec la table d'événements d'analyse (voir chapitre [Table d'événements d'analyse](#))

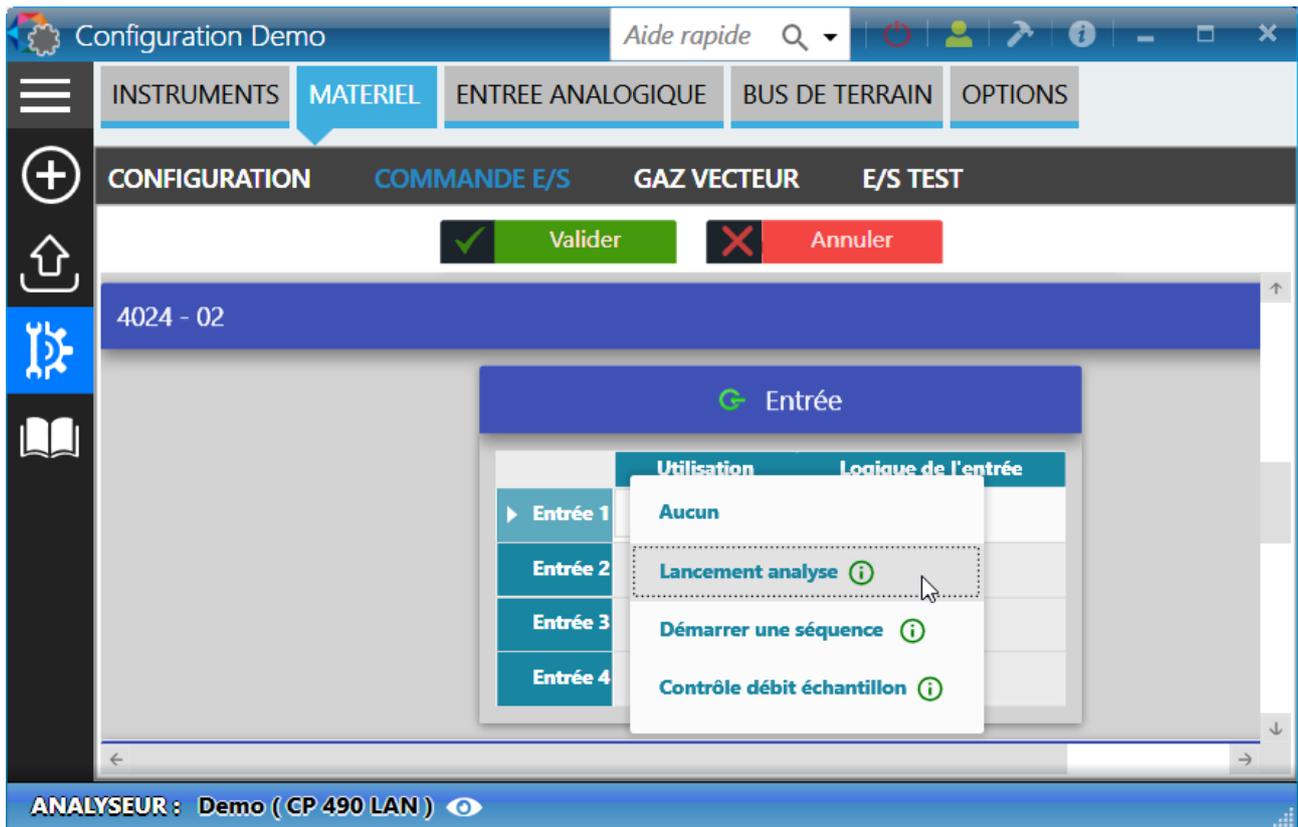
g) Commande démarrage analyse

La gestion d'un top départ en entrée, demande à l'appareil externe de démarrer la mise en balayage puis l'analyse.



Pour activer l'option, suivez le chemin suivant : "**Configuration** > **Matériel** > **Configuration** > **Commande E/S**". Si des entrées logiques sont disponibles, l'option sera alors disponible.



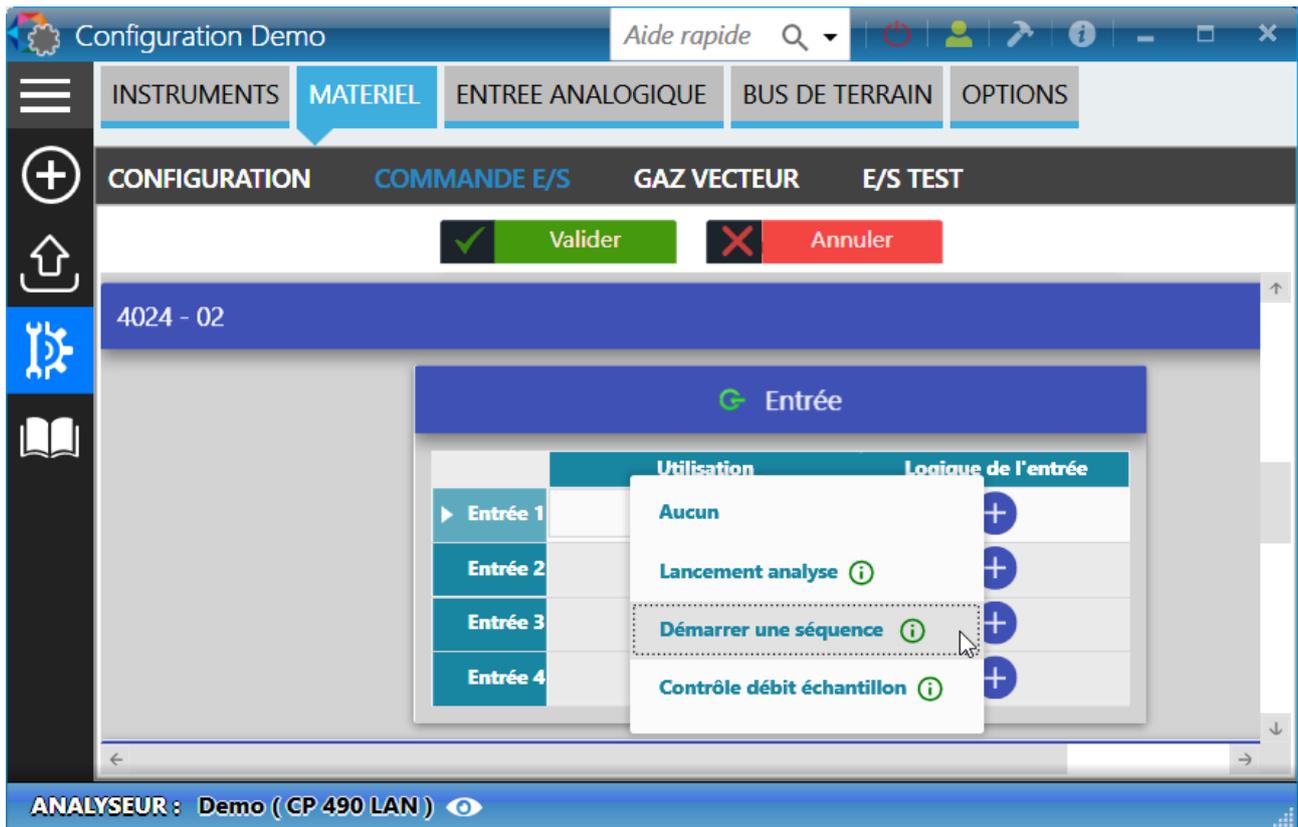


h) Commande démarrage séquence

La gestion d'un top départ d'une séquence en entrée, demande à l'appareil externe de démarrer la mise en balayage puis la séquence.

Pour activer l'option, suivez le chemin suivant : "**Configuration**  **> Matériel > Configuration > Commande E/S**". Si des entrées logiques sont disponibles, l'option sera alors disponible.





i) Contrôle débit échantillon

L'échantillon de flux de contrôle peut être utilisé pour détecter un problème avec l'échantillon. Si le système de prélèvement est équipé d'un rotamètre, cette fonction permet de gérer un défaut associé au défaut de l'analyseur.

Des variations de pression pouvant se produire, l'utilisateur peut définir une temporisation avant que cette valeur fautive ne soit considérée comme un défaut.



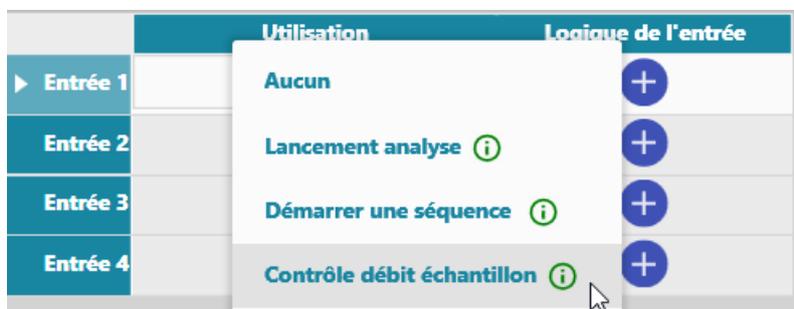
Pour activer l'option, suivez le chemin suivant : "**Configuration** > **Matériel** > **Configuration** > **Commande E/S**". Si des entrées logiques sont disponibles, l'option sera alors disponible.





Pour utiliser la commande contrôle débit échantillon, suivez les étapes suivantes :

1. Sélection de l’option Commande contrôle débit échantillon dans la colonne utilisation



2. Définition des variables gestion du défaut.

En cas de défaut, SOPRANE II attendra une certaine période défini par le champ : **durée de la temporisation**, et autorisera à nouveau une commande. Les analyses peuvent être totalement arrêtées si l'option est cochée.



3.6.3. Test des entrées et sorties

Voir aussi:

- [Entrées logiques](#)
- [Sorties logiques](#)
- [Entrées analogiques](#)
- [Test modules 4-20mA](#)
- [Test Vannes](#)

a) Entrées logiques

Pour tester les entrées logiques, suivez le chemin suivant : "**Configuration**  **> Matériel > Test E/S**".

Pour tester l'exemple suivant, nous sommes connectés sur un instrument M3000 avec une liaison série, la lecture des sorties se fera donc grâce à un module Adam 4024, ce qui ne changera rien pour d'autres types de modules possédant des sorties logiques.



Sortie	Minimum	Maximum	Consigne	Valeur	Entrée
1 : 	0 + -	0 + -	0 + -	 0.000 mA	1 :  <input type="checkbox"/>
2 : 	0 + -	0 + -	0 + -	 0.000 mA	2 :  <input type="checkbox"/>
3 : 	0 + -	0 + -	0 + -	 0.000 mA	3 :  <input type="checkbox"/>
4 : 	0 + -	0 + -	0 + -	 0.000 mA	4 :  <input type="checkbox"/>



Concentrons-nous seulement sur les entrées logiques. Le module contient 4 entrées, elles ne sont pas modifiables par logiciel, elles affichent l'état actuel des sorties.

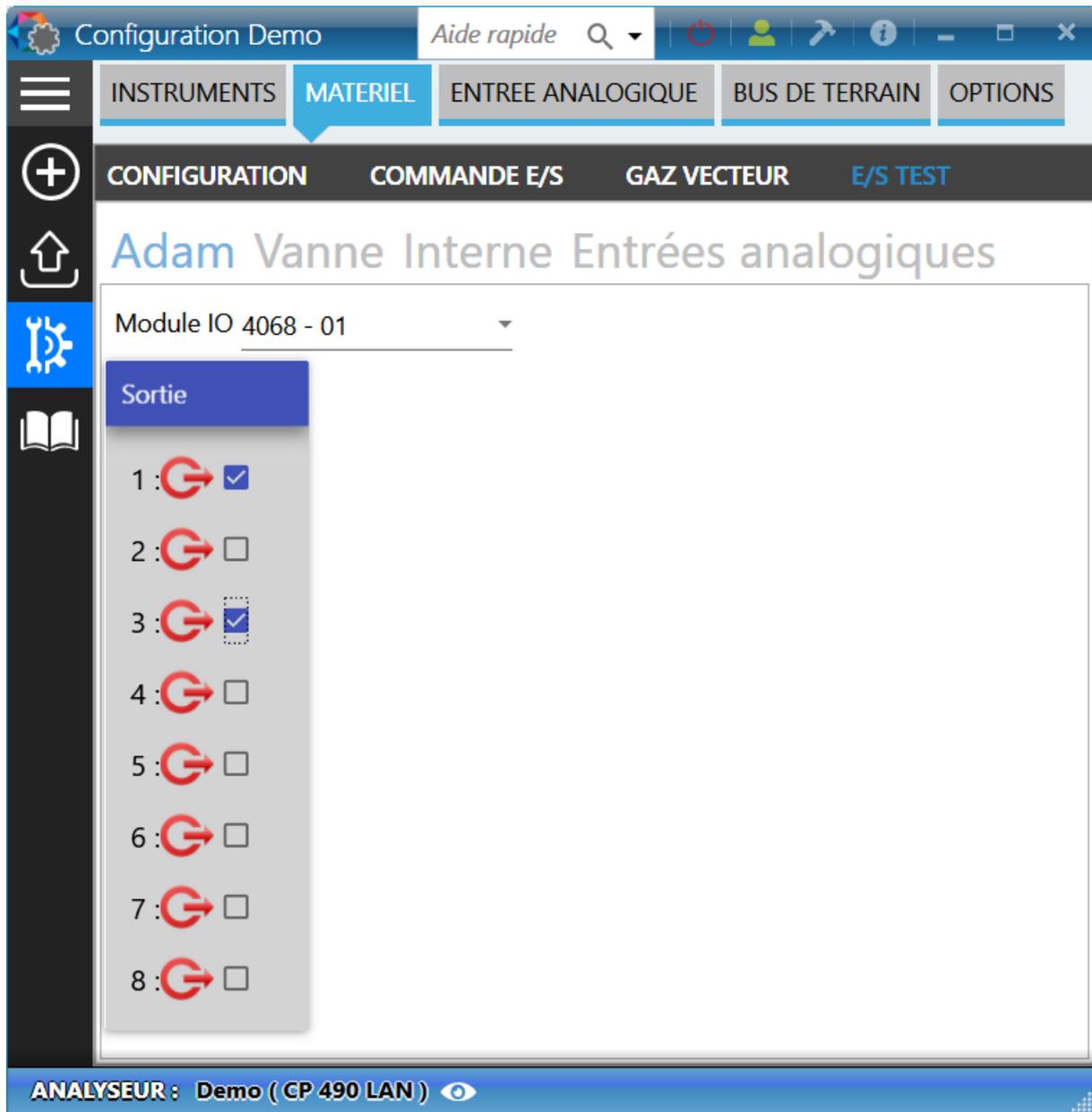


b) Sorties logiques

Pour tester les sorties logiques, suivez le chemin suivant : "**Configuration**  > **Matériel** > **Test E/S**".

Pour tester l'exemple suivant, nous sommes connectés sur un instrument M3000 avec une liaison série, la lecture des sorties se fera donc grâce à un module Adam 4068, ce qui ne changera rien pour d'autres types de modules possédant des sorties logiques.





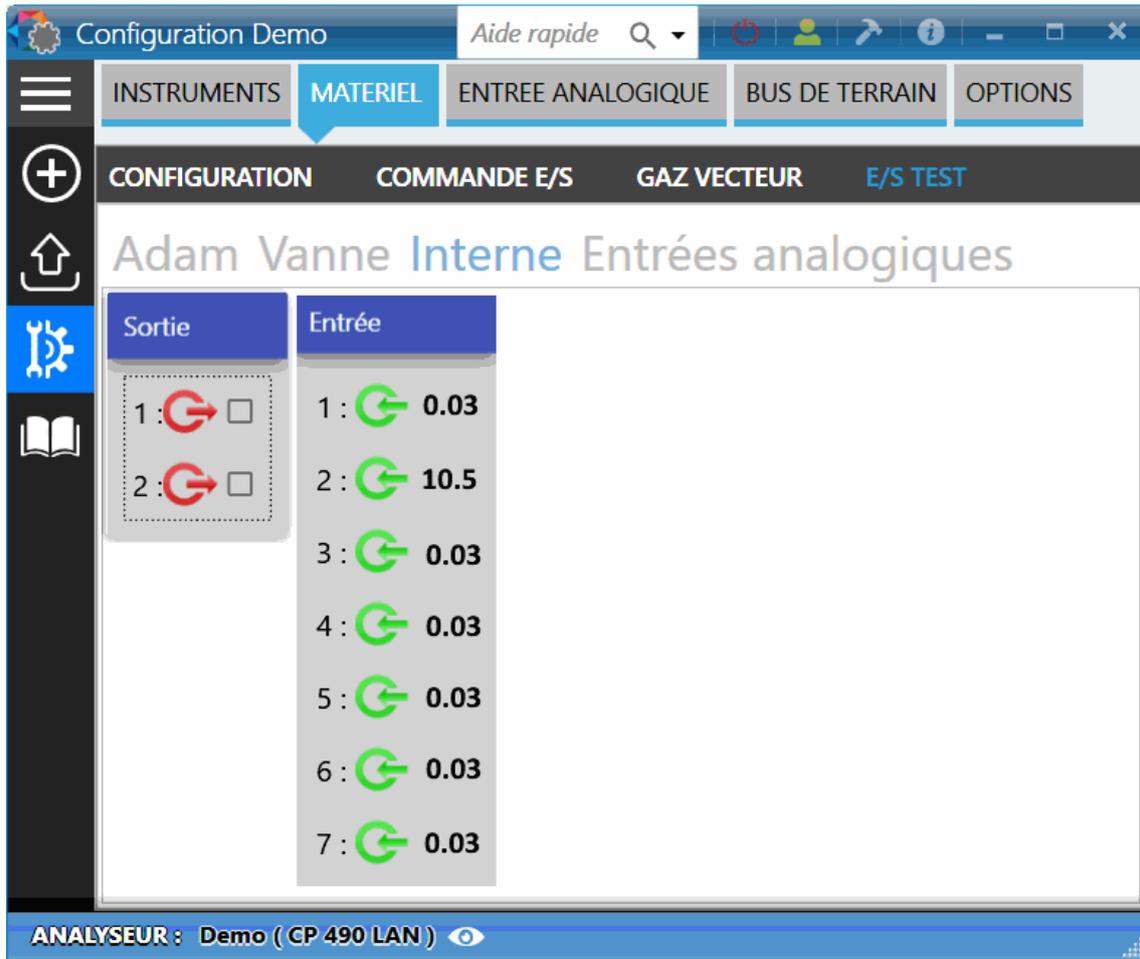
Lors de l'affichage de vue précédente, le logiciel ira lire l'état de chacune des sorties et changera l'état si l'utilisateur active ou désactive la sortie.

c) Entrées analogiques

Pour tester les entrées analogiques, suivez le chemin suivant : "**Configuration**  **> Matériel > Test E/S**".

Pour tester l'exemple suivant, nous sommes connectés sur un instrument Agilent 490, la lecture des entrées/sorties se fera donc en interne, ce qui ne changera rien pour d'autres types de modules possédant des entrées analogiques.





Concentrons-nous seulement sur les entrées analogiques. L'instrument contient 6 entrées, leurs valeurs sont indiquées en mV.

Entrée
1 :  0.03
2 :  10.5
3 :  0.03
4 :  0.03
5 :  0.03
6 :  0.03
7 :  0.03

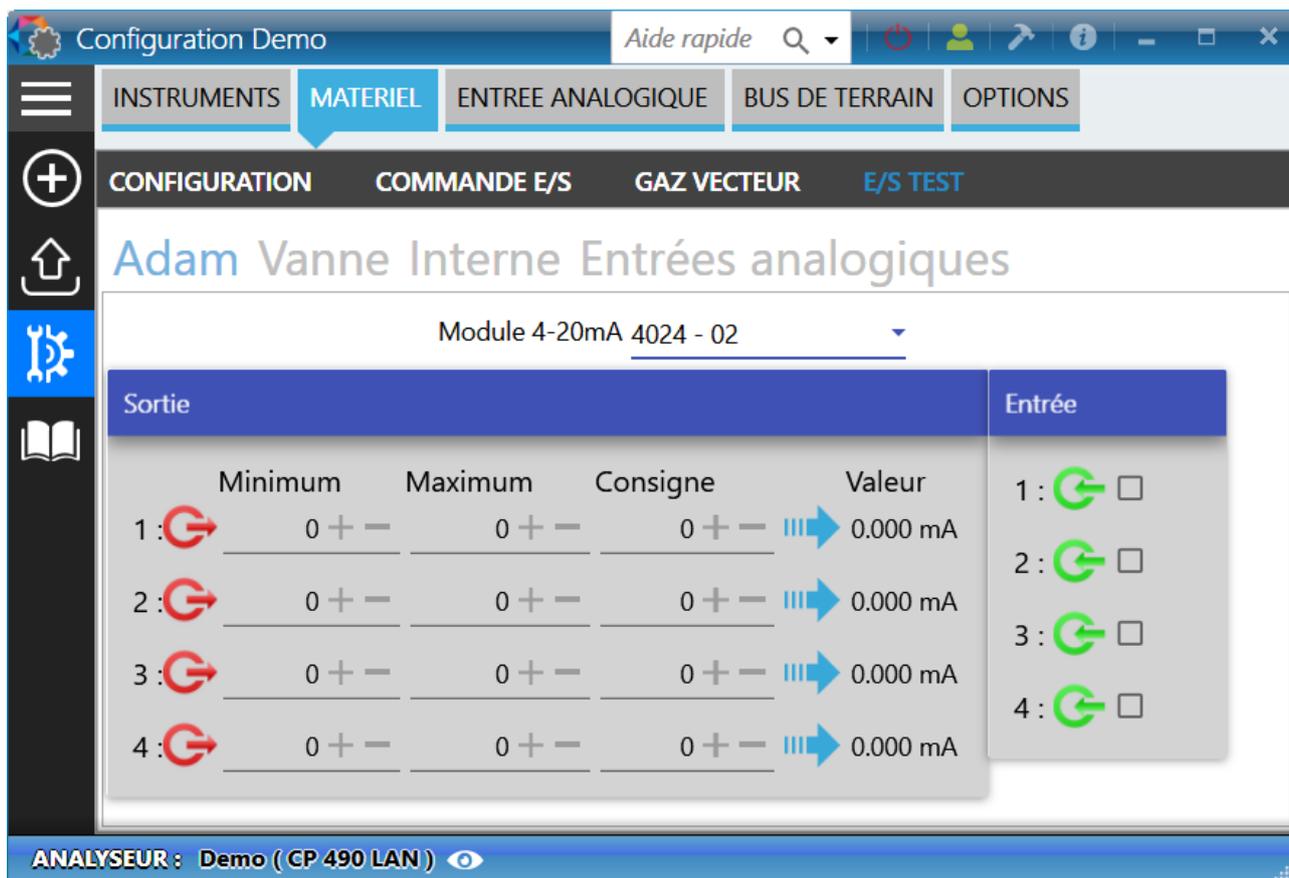


d) Test modules 4-20mA

Le test des modules 4-20mA est une option qui n'est autorisé que si la licence SOPRANE II l'autorise.

Pour tester les modules 4-20mA, suivez le chemin suivant : "Configuration  > Matériel > Test E/S".

Les modules 4-20mA disposent de 4 sorties analogiques et 4 entrées logiques.



1. Les sorties analogiques

Sortie				
	Minimum	Maximum	Consigne	Valeur
1 : 	5 + -	15 + -	8 + -	 8.800 mA
2 : 	1 + -	4 + -	2 + -	 9.333 mA
3 : 	0 + -	155 + -	14 + -	 5.445 mA
4 : 	6 + -	9 + -	7,5 + -	 12.000 mA



Pour chaque sortie sont proposés un minimum, un maximum et une consigne, la valeur est définie en fonction de ces trois paramètres.

Changez un de ces paramètres pour que la valeur soit modifiée.

2. Les entrées logiques

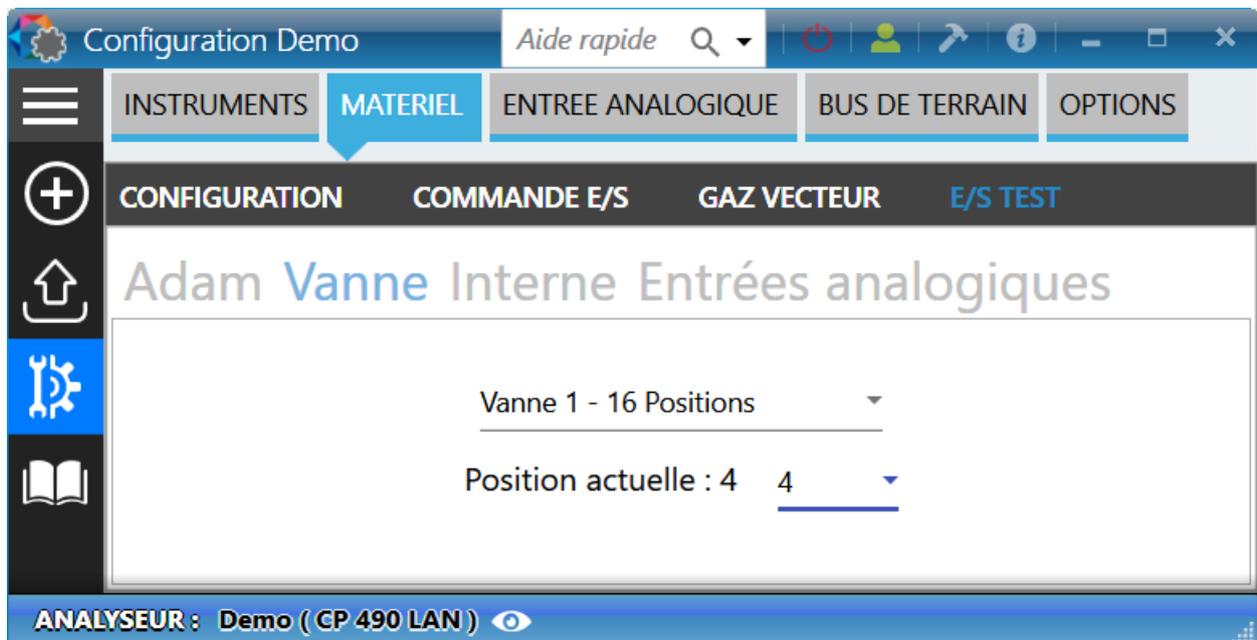


Les entrées logiques ne sont pas modifiables par logiciel, elles affichent l'état actuel des sorties.

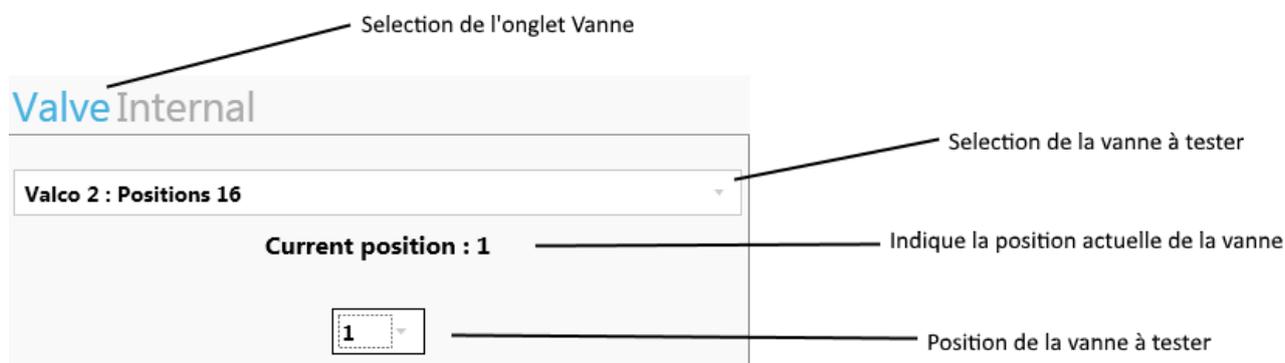
e) Test Vannes

Pour tester les vannes, suivez le chemin suivant : "Configuration  > Matériel > Test E/S".

Pour tester l'exemple suivant, nous sommes connectés sur un instrument Agilent 490, la lecture des vannes se fera donc en interne, ce qui ne changera rien pour d'autres types de modules possédant des vannes.



Voici la description des différents éléments présents :



3.6.4. Sélection du gaz vecteur

Les différents gaz vecteurs à utiliser pour le MicroGC, sont :

- Argon
- Azote
- Hélium
- Hydrogène

Leur qualité est primordiale pour le bon fonctionnement de votre analyseur.

Remarque importante :

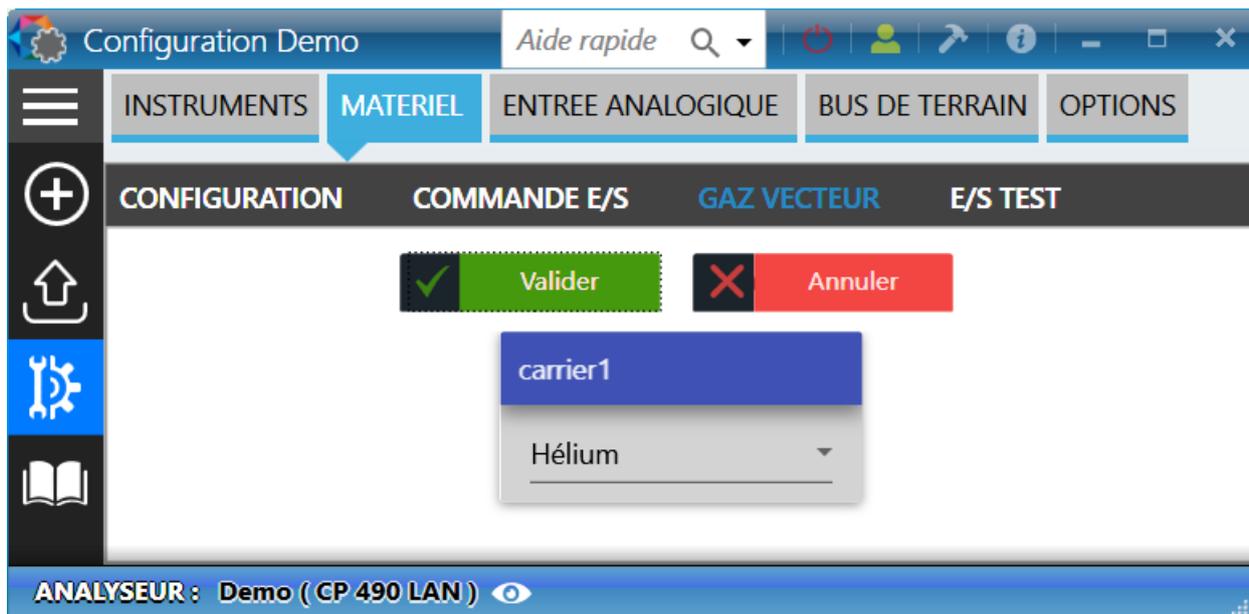
L'utilisation de l'Hélium comme gaz vecteur avec le MicroGC configuré Argon ou Azote a pour effet de diminuer la réponse d'un facteur 10, et d'inverser les pics, sans autre incidence.

L'utilisation de l'Argon comme gaz vecteur avec une configuration Azote ou Hélium a pour effet de détériorer de façon irréversible le détecteur.

Pour ajouter un gaz vecteur il faut d'abord avoir effectué les actions indiquées au chapitre [Définition matériel](#).

Une fois réalisées, suivez le chemin suivant : "Configuration  > Matériel > Configuration > Gaz vecteur".





3.7. Gestion entrées analogiques

SOPRANE II peut lire des entrées analogiques au cours de l'analyse et les intégrer aux résultats en fin d'acquisition. Pour cela il faut (pour chacune des entrées utilisées) entrer un nom, une unité, sélectionner le périphérique d'E/S et les échelles. Dans l'exemple suivant, il s'agit d'un MicroGC 490, l'utilisation est identique pour tous les autres instruments, les modules d'E/S sont remplacés par les modules Adam.



Pour ajouter une entrée analogique, cliquez sur le bouton  , des valeurs par défaut seront ajoutées. Les valeurs sont modifiables dans le tableau ci-dessus. Pour supprimer une ligne, cliquez sur le bouton .



Paramètres d'une analogique :

- **Nom** : Le nom identifiant l'entrée analogique.
- **Unité** : Unité de valeur de l'entrée analogique.
- **Périphérique** : Module d'acquisition de l'entrée analogique. (Module externe ou module embarqué dans l'instrument).
- **Voie** : Voie échantillon associée à l'entrée analogique.
- **Type** : Moment où la valeur est lue (avant pompage ou avant injection).

En plus de ces valeurs de base, des valeurs complémentaires peuvent être renseignées en fonction du périphérique :

- **E/S embarquées (dans l'analyseur) ou module Adam**

	+	Nom	Unité	Périphérique	Voie	Type	
		AI 0	V	Agilent 490 Entrée	1 Voie 1	Avant pompage	
▶ 1	N° relais						1
	Offset						2
	Echelle						5

- **DDE (Dynamic Data Exchange)**

DDE est utilisé pour l'échange dynamique de données entre applications, il ne nécessite pas de données complémentaires.

▶ 2		AI 1	V	DDE	2 Voie 2	Avant injection
-----	--	------	---	-----	------------	-----------------

- **BronkHorst**

Bronkhorst est une variété de débitmètres / régulateurs massiques. Pour communiquer avec cet appareil, un numéro d'identifiant (Esclave) est nécessaire.

▶ 3		AI 2	V	BronkHorst	3 Voie 3	Avant injection	
	Esclave						1



- **TES**

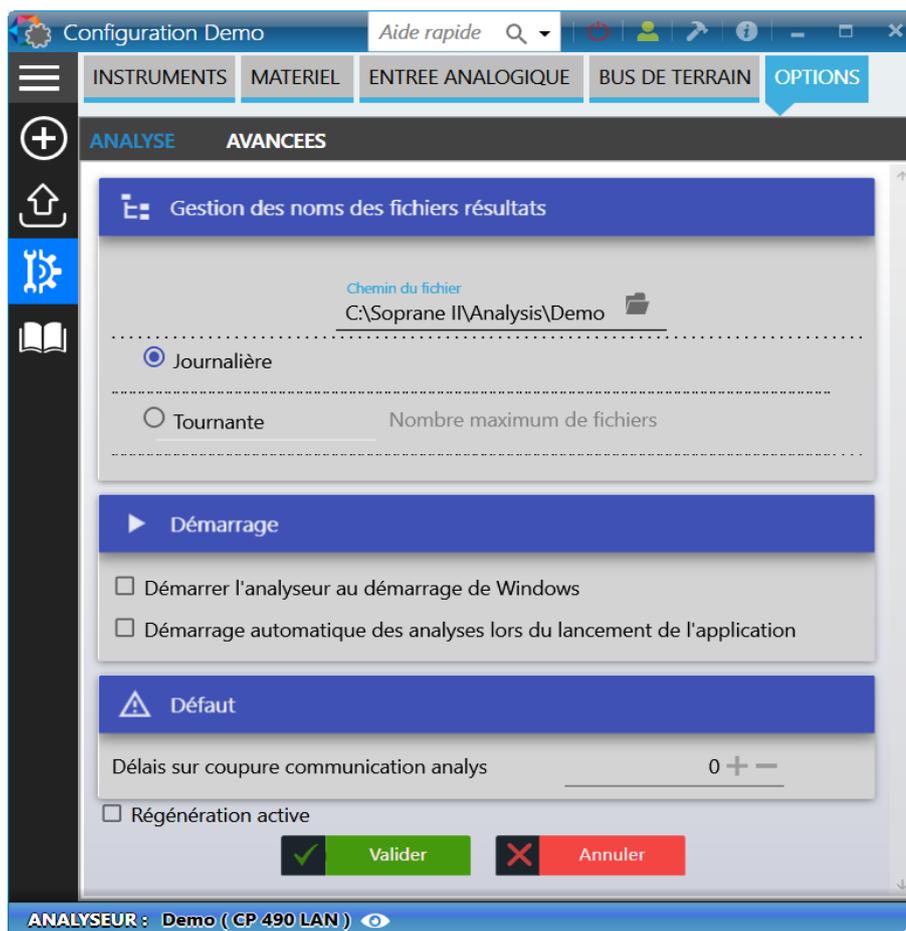
Le module TES est un module d'entrées/sorties utilisant une liaison Modbus RS485 en mode esclave asynchrone.

	AI 3	V	TES	1 Voie 1	Avant injection
Module	<input type="text"/>				
4 N° relais	<input type="text" value="1"/>				
Offset	<input type="text" value="2"/>				
Echelle	<input type="text" value="5"/>				

3.8. Gestion des options

Pour accéder aux options, suivez le chemin suivant : "Configuration  > Options".

3.8.1. Onglet "Analyse"



Section **Gestion des fichiers résultats** :

- Mode de gestion des analyses pour l'archivage des résultats : soit une gestion **journalière** basée sur la date (1 dossier par jour), soit une gestion **tournante** avec l'indication du nombre maximum d'analyses à mémoriser (toutes les analyses dans le même dossier).
- L'emplacement des fichiers de résultats.

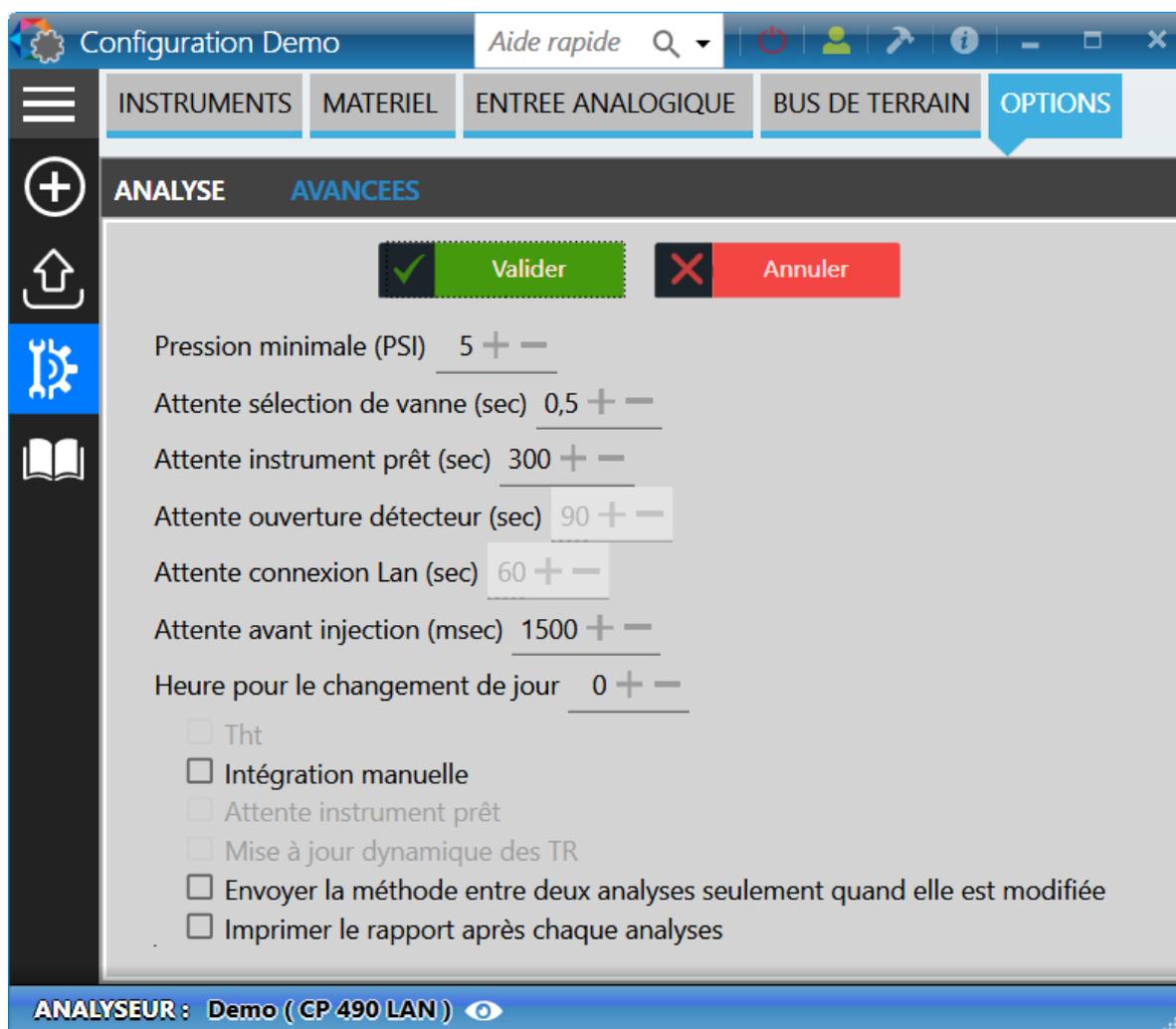
Section **Démarrage** :

- Le choix du démarrage de SOPRANE II lors du démarrage de l'ordinateur.
- Le choix d'un départ automatique en analyses lors du démarrage du logiciel.

Section **Défaut** :

- La durée de la purge et d'attente d'un signal ready. Il s'agit de la durée (normalement 300 secondes) pendant laquelle le dialogue avec l'analyseur est interdit suite à un défaut secteur. Étant en purge, l'analyseur ne peut pas travailler pendant ce temps.
- Activer (ou non) la régénération des colonnes analytiques.

3.8.2. Onglet "Avancées"



La **pression minimale** correspond à la valeur minimale de pression à affecter lors de l'envoi d'une méthode.

La valeur **Attente instrument prêt** (en secondes) est le temps limite avant de générer une alarme si le statut n'est pas prêt.

La valeur **Attente ouverture détecteur** (sec) est la durée avant de pouvoir allumer les détecteurs après un envoi de méthode.

Le paramètre **Heure pour le changement de jour** correspond à l'heure pour laquelle on doit créer un nouveau dossier lors de la sauvegarde d'analyses. Si la gestion des fichiers résultats n'est pas en mode journalier, ce paramètre n'a aucun effet.

L'intégration manuelle permet de modifier manuellement la ligne de base dans l'onglet Traitement (voir chapitre [Intégration manuelle](#)).

Si le paramètre "**Envoyer la méthode entre deux analyses uniquement en cas de modification**" est coché, la méthode sera envoyée uniquement lorsque la méthode est éditée, sinon la méthode sera envoyée avant chaque exécution.

Si le paramètre "**Imprimer le rapport**" est coché, le rapport sera imprimé après chaque analyse.

4. Utilisation de Soprane II

A ce point, nous supposons que SOPRANE II a été correctement installé et paramétré, ainsi que cela a été défini précédemment (voir chapitre [Configuration analyseur](#)).

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

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

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

- D'abord, nous allons visualiser les différents menus et nous vérifierons la possibilité d'établir un dialogue avec l'analyseur (voir chapitre [Les menus](#)),
- Nous créerons une méthode d'analyse (voir chapitre [Gestion des méthodes d'analyse](#)),
- Nous créerons une séquence d'analyse (voir chapitre [Gestion des séquences d'analyse](#)),
- Nous effectuerons des analyses (voir chapitre [Gestion des analyses](#)),
- A partir du chromatogramme d'une analyse, et directement, nous créerons une méthode d'intégration et une table d'identification des pics (voir chapitre [Traitement](#)),
- Nous verrons comment étalonner l'appareil (voir chapitre [L'étalonnage](#)),
- Nous programmerons des calculs post-analytiques (voir chapitre [Gestion des calculs](#)),
- Nous les visualiserons graphiquement, en tendance (voir chapitre [Tendances](#)),
- Nous programmerons des régénérations automatiques de colonnes (voir chapitre [Gestion des régénérations](#)).

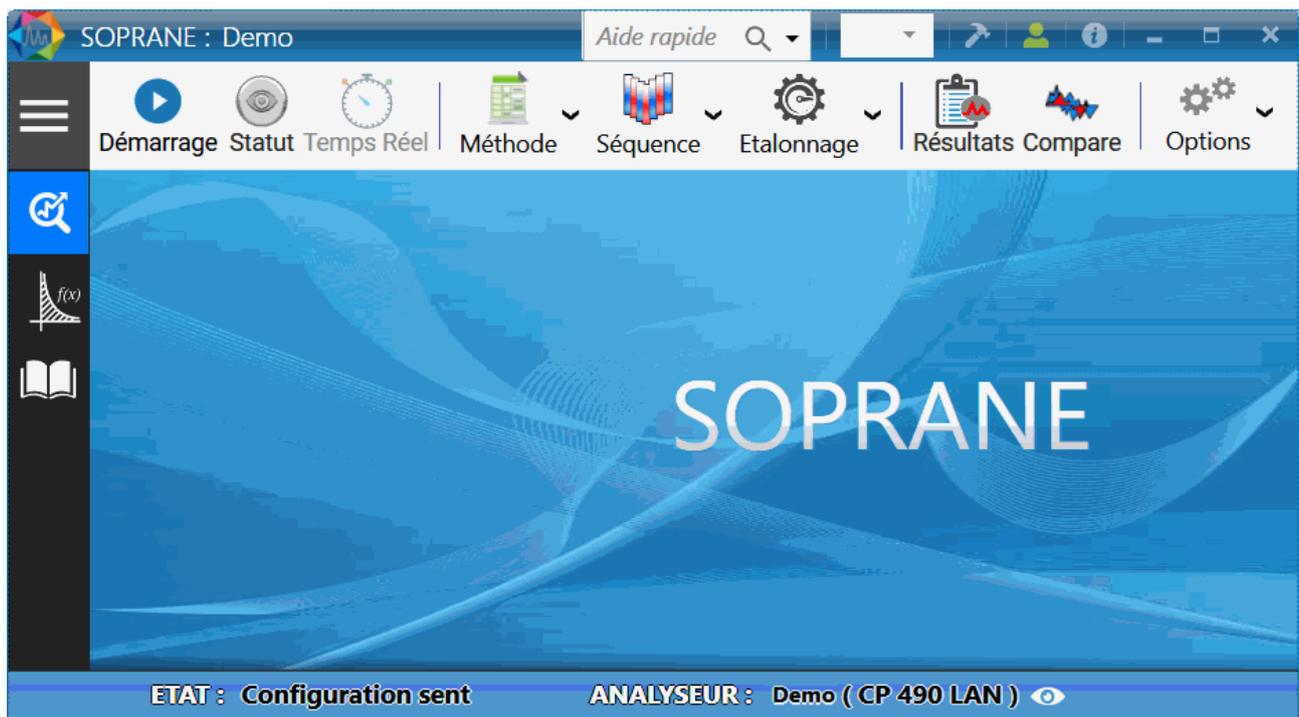


- Enfin, nous nous intéresserons aux possibilités de retraitement des analyses et de comparaison de chromatogrammes (voir chapitre [Résultats des analyses](#)).

4.1. Menus

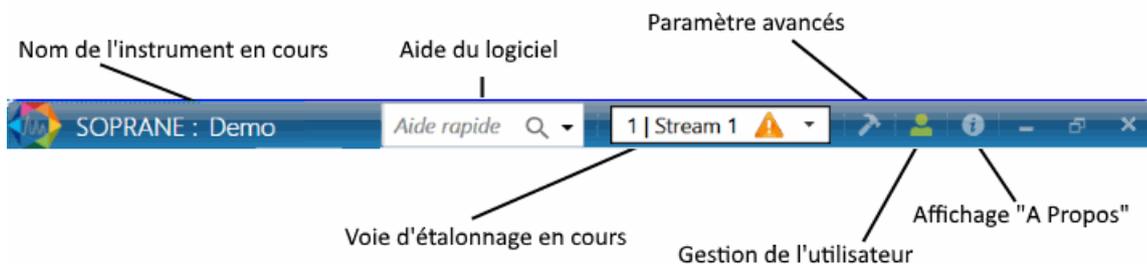
Pour fonctionner correctement, SOPRANE II doit connaître la configuration de l'analyseur. Si cette configuration est inconnue, ou si l'analyseur est en cours d'utilisation un message le signale.

Voici la page principale de SOPRANE II :



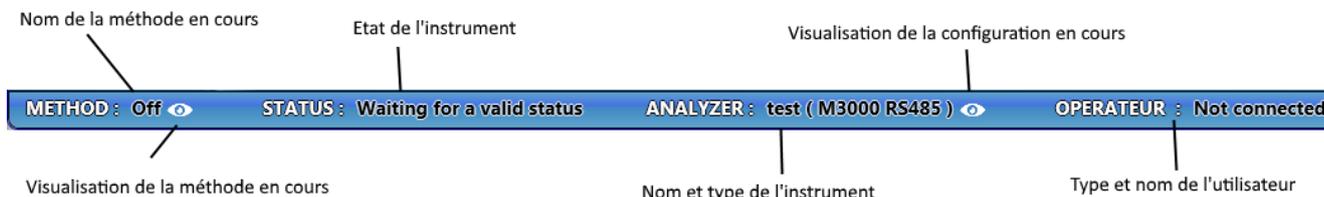
Les éléments importants à prendre en compte sont :

- La barre de titre



- La barre de statut

La barre de statut affiche en permanence les paramètres importants de l'instrument.



- Les menus

Les chapitres suivants décrivent les différents menus de SOPRANE II et la fonction des icônes.

- [Analyses](#)
- [Traitement](#)
- [Journaux](#)
- [Utilisateurs](#)

4.1.1. Analyses



Le menu **Analyses** possède dix actions possibles :

1. Démarrage ou arrêt d'une analyse (ou séquence)

Lorsque l'icône affiche  , le démarrage d'une analyse ou séquence est possible. Si l'icône est  il y a une analyse en cours et l'arrêt est alors possible.

Voir le chapitre [Analyses](#) pour savoir comment démarrer une analyse.

2. Affichage du statut

Permet la lecture du statut de l'instrument. Il peut être de différentes couleurs pour indiquer l'état du statut :



Indique que la lecture du statut n'est pas disponible (la configuration n'est pas chargée).



Indique que l'analyseur n'est pas opérationnel pour lancer une analyse.



Indique que l'analyseur est opérationnel pour lancer une analyse.





Indique que l'analyseur est en cours d'analyses.

Pour plus de détails sur l'affichage du statut, voir le chapitre : [Statut](#)

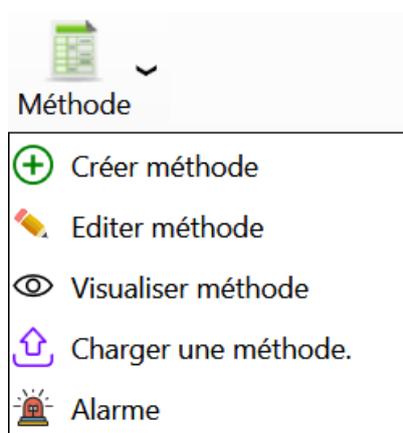
3. Affichage du temps réel



Affiche le signal en temps réel de l'analyseur en cours d'analyse.

Pour voir en détails l'affichage du signal temps réel, voir le chapitre : [Le temps réel](#)

4. Edition ou envoi de méthode



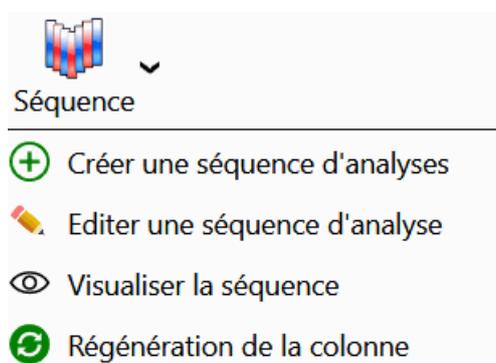
Permet la création, l'édition, la sauvegarde ou le chargement d'une méthode.

Pour savoir comment éditer une méthode, voir le chapitre : [Gestion des méthodes d'analyse](#)

L'alarme permettra de définir le dispositif et les relais utilisés pour recopier un défaut du chromatographe ou des alarmes seuil.

Ces relais peuvent travailler en logique positive ou négative. L'utilisateur a la possibilité de regrouper plusieurs alarmes sur la même sortie relais, voir chapitre [Alarmes composant](#).

5. Edition d'une séquence.

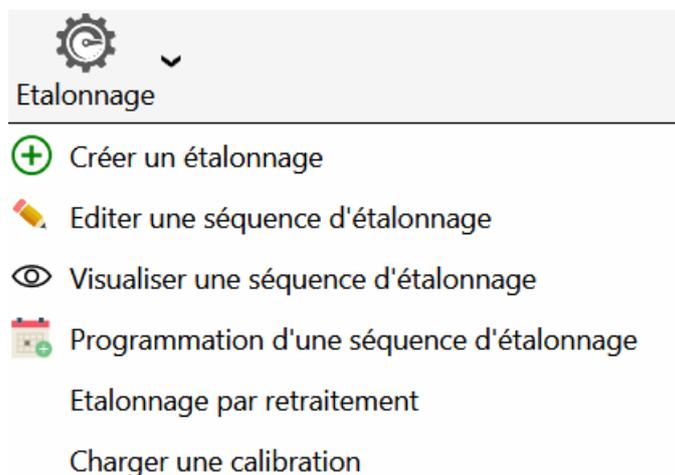


Permet la création, l'édition, la sauvegarde ou la visualisation d'une séquence.

Pour savoir comment éditer une séquence, voir le chapitre : [Gestion des séquences d'analyse](#)

Pour savoir comment régénérer la colonne, voir le chapitre : [Régénération des colonnes](#)

6. Edition ou programmation d'un étalonnage



Permet la création, l'édition, la sauvegarde ou la visualisation d'une méthode de calibration.

Remarque : Les deux derniers éléments ne sont disponibles que lorsque le résultat est visible.

Pour savoir comment éditer une méthode de calibration, voir le chapitre : [Gestion des séquences d'étalonnage](#)

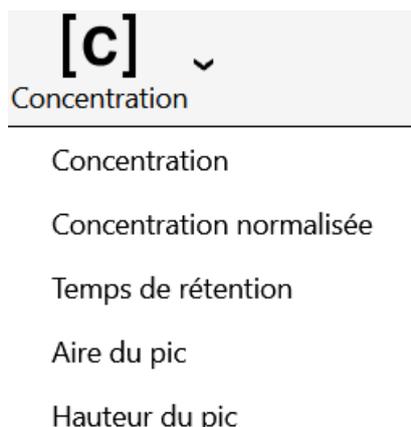
7. Gestion des résultats

Le bouton Résultats  est utilisé pour sélectionner et afficher la fenêtre de résultats.

Pour plus de détails sur l'affichage des résultats, voir le chapitre : [Résultats](#)

8. Sélection de la valeur de résultat visualisée





En cliquant sur le menu, la valeur des résultats et des tendances affichées seront mise à jour en fonction de la sélection.

Pour plus de détails, voir le chapitre [Résultats](#).

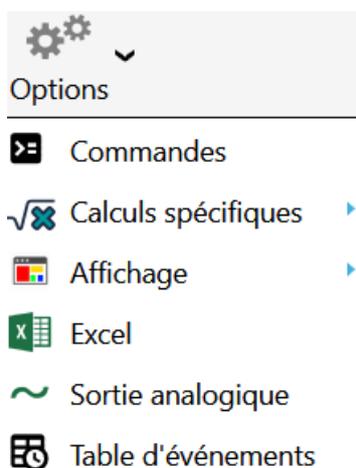
9. Tendances

SOPRANE II permet de visualiser l'évolution des concentrations ou des valeurs calculées sur une période (voir chapitre [Tendances](#))

10. Comparaison d'analyses

Le bouton  est utilisé pour ouvrir l'exécutable de comparaison et superposition d'analyses. Pour plus de détails sur la comparaison d'analyse, voir le chapitre : [Comparaisons des analyses](#)

11. Options



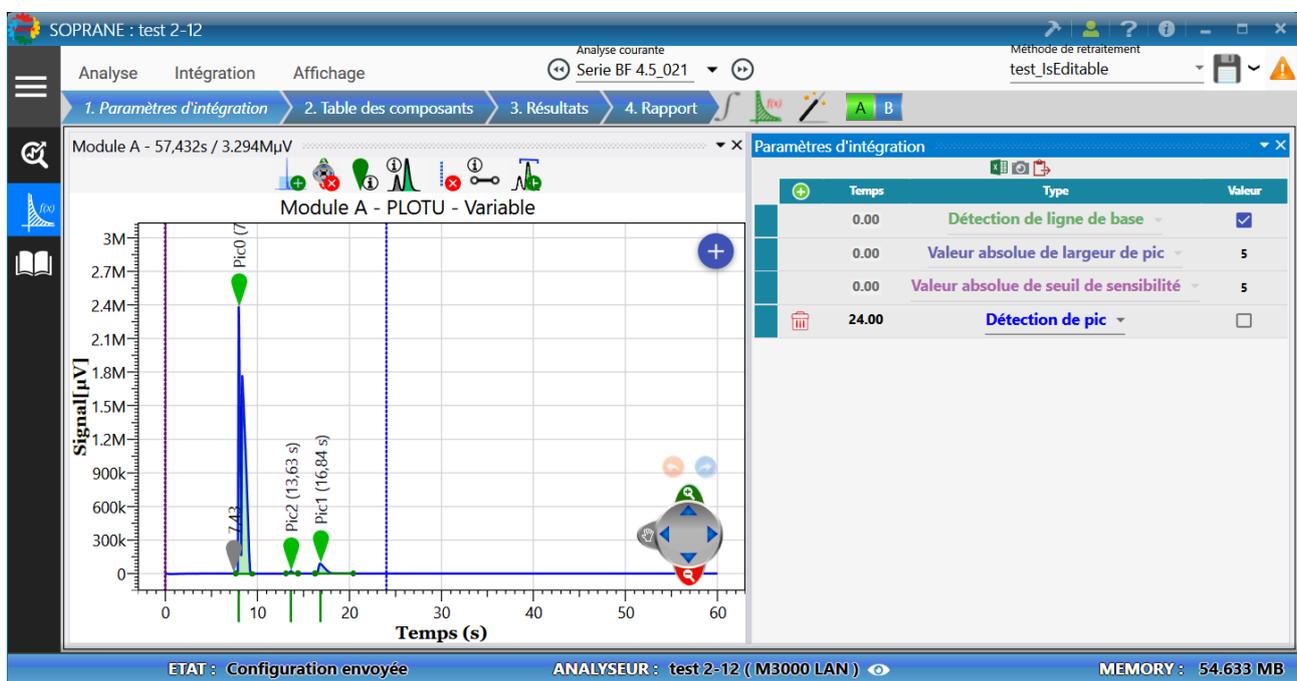
En cliquant sur le menu d'options, vous pourrez :

- Configurer les commandes pré et post analyses (voir chapitre [Pre et post commandes](#))
- Configurer un calcul spécifique (voir chapitre [Calculs spécifiques](#))
- Configurer l'affichage des résultats
- Sauvegardez automatiquement vos résultats dans un fichier Excel (voir le chapitre [Calculs via Excel](#))
- Envoyer les résultats vers des sorties analogiques (voir le chapitre [L'émission de sorties analogiques](#))
- Configurer une table d'événements de pré-analyse (voir le chapitre [Table d'événements d'analyse](#))

4.1.2. Traitement

Le module traitement est utilisé pour créer une méthode d'analyse et pour tout ce qui concerne le traitement ou le retraitement des pics.

Pour plus de détails sur le traitement d'une analyse, voir le chapitre : [Traitement](#)



4.1.3. Journaux

Permet l'affichage et la gestion des journaux.

Pour plus de détails, voir le chapitre : [Gestion des fichiers logs](#)

Voir aussi :

[Le fichier des actions](#), permet d'afficher les actions principales effectuées par l'utilisateur.

[Le fichier des alarmes](#), permet d'afficher les alarmes composants.

[Le fichier des erreurs](#), permet d'afficher les erreurs (destiné au débogage de l'application).

[Le fichier des événements](#), permet d'afficher les plantages de l'application (destiné au débogage de l'application).

[Historique d'étalonnages](#), permet d'afficher l'historique des étalonnages.



4.1.4. Utilisateurs

Cet onglet n'est disponible que si l'utilisateur connecté est de type administrateur.

Pour plus de détails sur la gestion des utilisateurs, voir le chapitre : [Gestion des utilisateurs](#)

Voir aussi :

[Identification d'un utilisateur](#)

[Création d'un utilisateur](#)

[Suppression d'un utilisateur](#)

[Modification du mot de passe](#)

[Gestion d'un utilisateur](#)

4.2. Lecture du statut

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

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

Il existe plusieurs endroits où trouver ces indications de statut ; voir les chapitres suivants :

[Barre de statut](#)

[Barre de titres](#)

[CEil](#)

4.2.1. Barre de statut

SOPRANE II permet de connaître à tout moment l'état dans lequel se trouve l'analyseur.

Ces informations se situent dans la barre horizontale en bas de l'écran principal de SOPRANE II.

Les informations données sont les suivantes :



Au passage du curseur sur le champ correspondant à l'analyseur, des informations complémentaires sur la configuration de l'analyseur apparaissent.

Module	A	B
Detector	TCD	TCD
Column	PLOTU	Molsieve

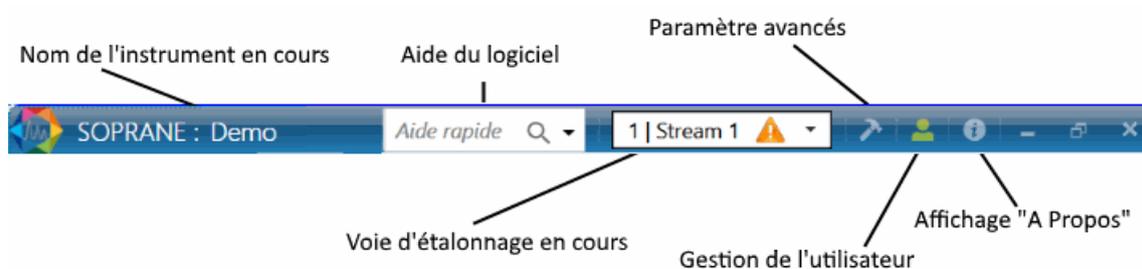


Au passage du curseur sur le champ correspondant à la méthode, des informations complémentaires sur la méthode en cours apparaissent.

	Module A	Module B
Sampling temperature (°C)	90	90
Injector Heating (°C)	50	50
Column temperature (°C)	50	50
Detector	×	×

4.2.2. Barre de titres

La barre de titres constitue un élément important pour connaître l'état de l'instrument.



4.2.3. Oeil

Le bouton représentant un œil dans l'onglet "Analyseur", permet la lecture du statut. Lorsqu'il clignote, la visualisation du statut est disponible.

Il peut être de différentes couleurs pour indiquer l'état du statut :

-  Indique que la lecture du statut n'est pas disponible (la configuration n'est pas chargée).
-  Indique que l'analyseur n'est pas opérationnel pour lancer une analyse.
-  Indique que l'analyseur est opérationnel pour lancer une analyse.
-  Indique que l'analyseur est en cours d'analyses.

4.2.4. Statut

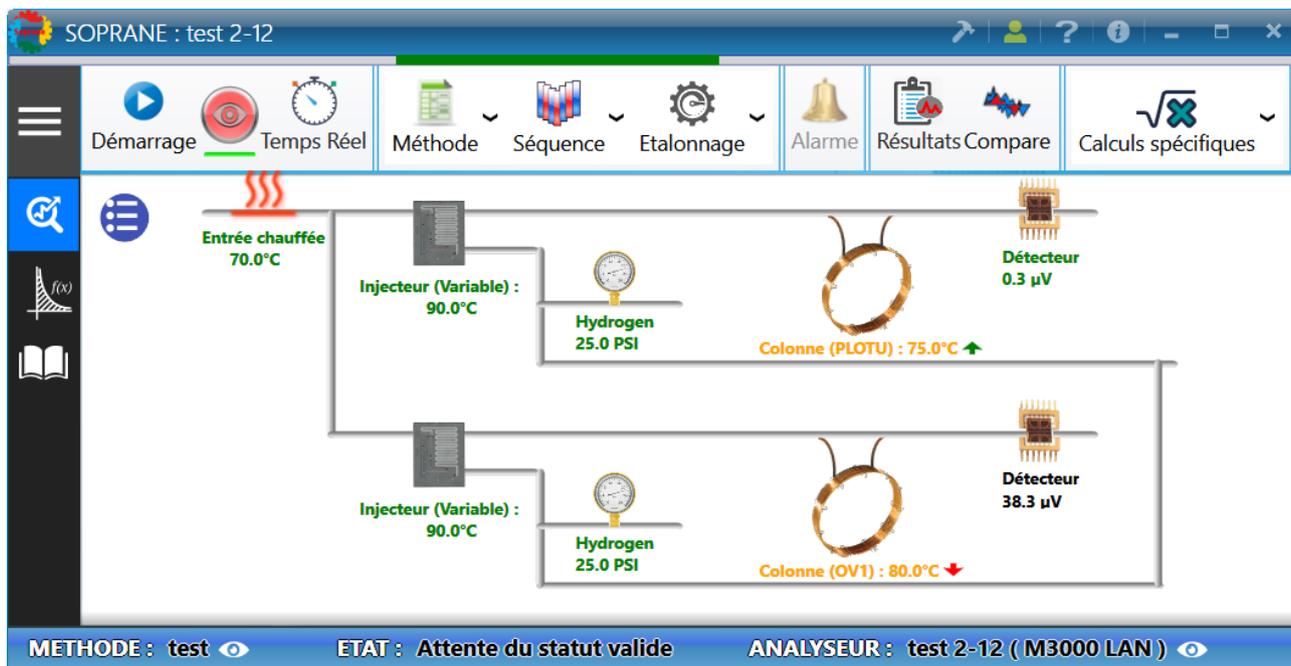
L'affichage indique tout ce qui concerne l'appareil : nombre de modules, températures, pressions, état des détecteurs. La partie supérieure de la fenêtre permet de voir immédiatement si le module est opérationnel (arrière-plan vert) ou non (arrière-plan rouge).



Module A - Column : PLOTU - Injector : Variable : Module est prêt.

Module B - Column : Molsieve - Injector : Variable : Module n'est pas prêt.

Dans l'exemple suivant, l'instrument est un M3000 avec une liaison réseau, l'affichage reste le même selon l'instrument.



Dans le cas où un élément n'a pas atteint sa consigne, c'est qu'il n'est pas prêt. Le texte sera en Orange

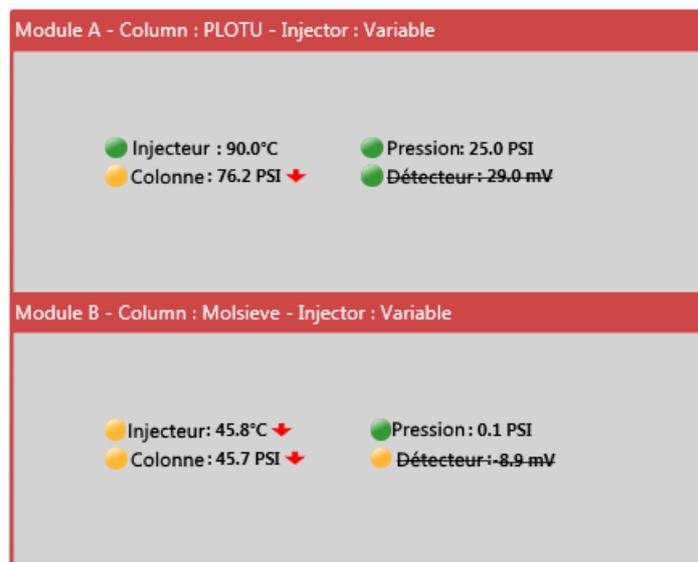
(exemple colonne )

Si la consigne a été atteinte, l'écriture sera en Vert (exemple Pression gaz vecteur ). Dans le cas où

l'élément n'est pas activé il sera alors en Noir (exemple détecteur ).

Une autre visualisation simple du statut est possible en cliquant sur le bouton  et sur le bouton  pour revenir à la visualisation graphique.





Dans les deux visualisations, lorsque le curseur de la souris passe au-dessus d'un élément dans la partie Statut ou sur la partie visuelle, des indications supplémentaires apparaissent comme l'état, la consigne ou la valeur actuelle de l'élément.

4.3. Méthodes and séquences

Voir aussi :

[Gestion des méthodes d'analyse](#)

[Les conditions opératoires](#)

[Les conditions opératoires CP490](#)

[Les conditions opératoires M3000](#)

[Chargement d'une méthode d'analyse](#)

[Les 4 méthodes utiles](#)

[Gestion des séquences d'analyse](#)

[Régénération des colonnes](#)

[Gestion des séquences d'étalonnage](#)

[Programmation d'étalonnage](#)

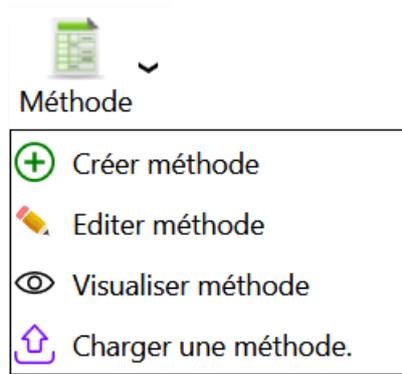
4.3.1. Gestion des méthodes d'analyse

SOPRANE II offre la possibilité d'intervenir directement sur une méthode d'analyse pour la visualiser et la modifier.

Excepté pour la première (parce que la première fois, il sera aussi nécessaire de créer une méthode d'intégration, une table des composants, ... et que tout cela est du ressort du module de traitement), SOPRANE II permet aussi la création d'une méthode d'analyse.

Pour accéder aux méthodes positionnez-vous sur l'onglet **Analyse**, et cliquez sur le bouton suivant :





Voir aussi :

[Les conditions opératoires](#)

[Les conditions opératoires M3000](#)

[Les conditions opératoires CP490](#)

[Chargement d'une méthode d'analyse](#)

[Les 4 méthodes utiles](#)

a) Les conditions opératoires

Une fois connecté à un analyseur, la gestion des méthodes est disponible.

L'affichage permet la visualisation, l'édition ou la modification de tous les paramètres de la méthode d'analyse.

- Pour la création d'une méthode, il faut se diriger dans l'onglet « **Analyseur** et cliquer sur **Créer méthode** ».
- Pour la modification ou l'édition d'une méthode, il faut se diriger dans l'onglet « **Analyseur** et cliquer sur **Éditer méthode** ».
- Pour le chargement d'une méthode, il faut se diriger dans l'onglet « **Analyseur** et cliquer sur **Charger méthode** ».

Le programme d'installation **Configuration**  a permis de configurer SOPRANE II selon le type d'analyseur que l'on utilise.

Ces appareils étant différents, les méthodes d'analyses seront elles aussi différentes.

Pour voir l'édition des conditions opératoire pour les appareils de type **M3000** voir le chapitre : [Les conditions opératoires M3000](#)

Pour voir l'édition des conditions opératoire pour les appareils de type **CP490/Varian 4900** voir le chapitre : [Les conditions opératoires CP490](#)

Voici les différents paramètres accessibles dans la méthode :

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

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



Entrée chauffée :

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

Chauffages injecteur et colonne :

Le fonctionnement est identique. Ces chauffages sont généralement nécessaires.

Durée balayage :

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

Durée injection :

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

Temps du backflush :

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

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

Durée analyse :

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

Pression colonne :

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

Détecteurs :

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

Sensibilité :

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

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

NOTE IMPORTANTE :

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

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

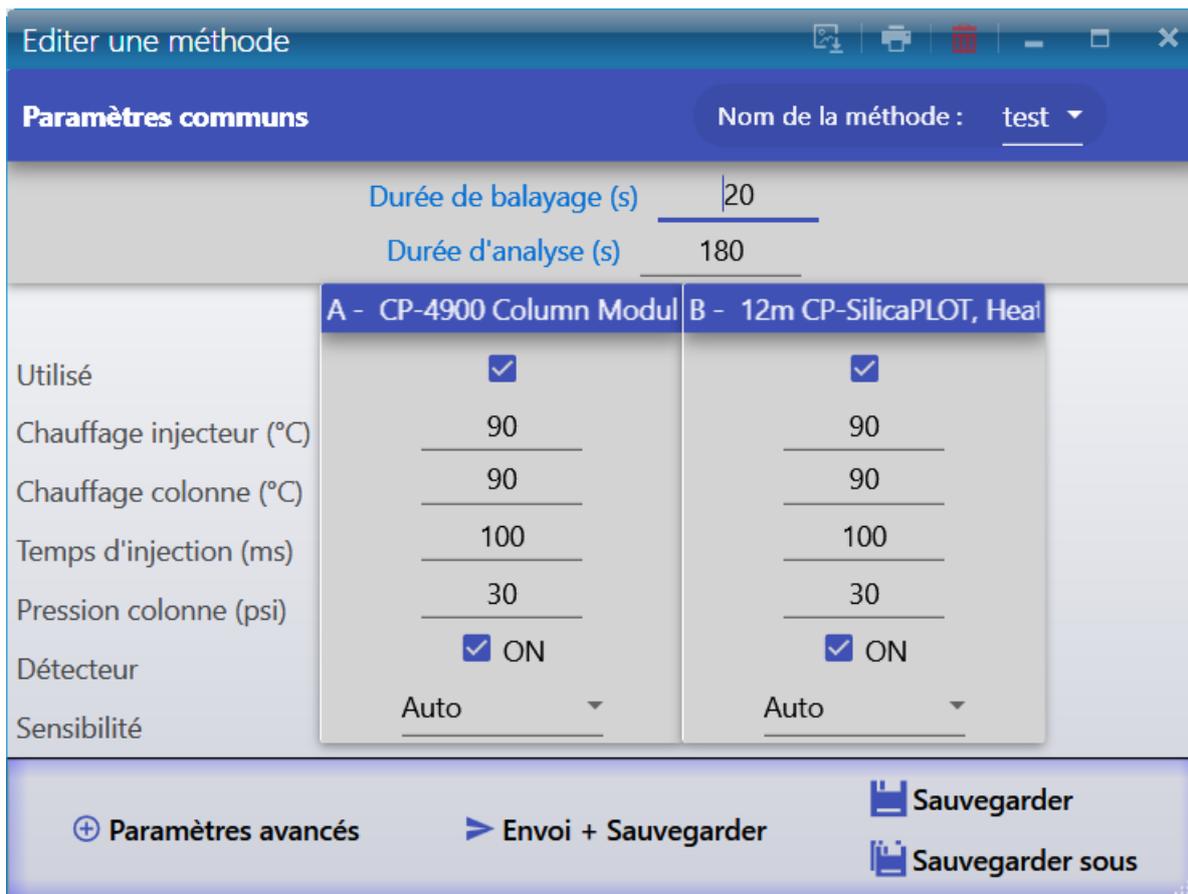
Le bouton "Param." ou "Paramètres avancés" permet l'ouverture d'une deuxième feuille de paramètres ; ces derniers seront mentionnés dans les paragraphes suivants, car ils diffèrent selon l'analyseur.

a) 1. Les conditions opératoires CP490

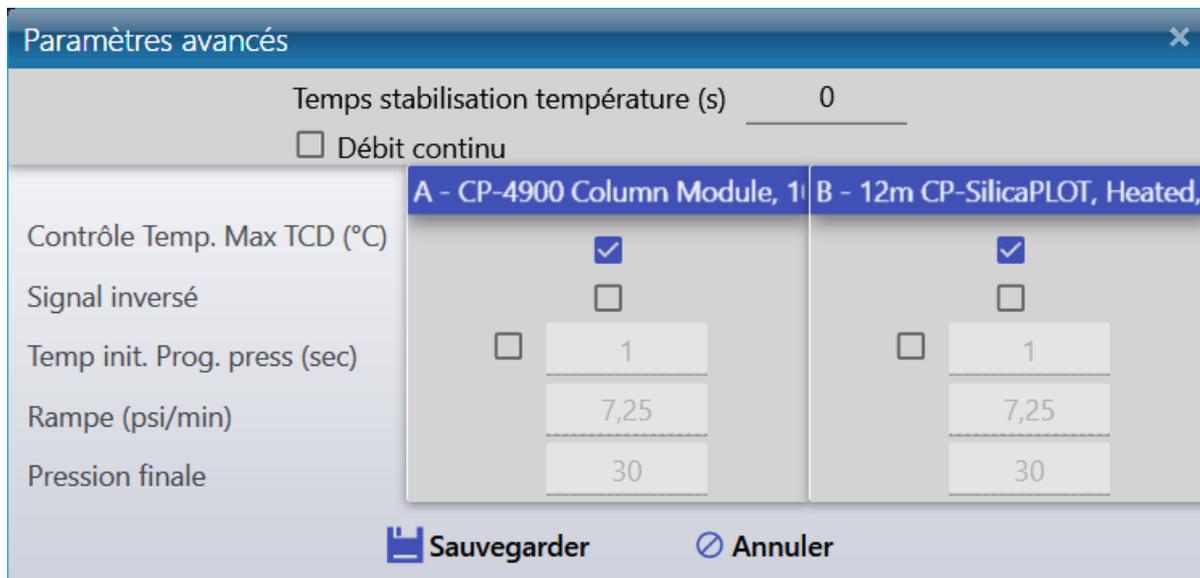
Voici la fenêtre dans laquelle les conditions analytiques d'un MicroGC 490 peuvent être définies :

Voir le chapitre [Conditions opératoires](#), pour avoir des informations sur chaque paramètre.





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



- Le **temps de stabilisation** correspond à la durée de latence avant que le micro GC passe dans l'état « prêt »
- **Débit continu** : Si cette case est cochée, la pompe est désactivée puisque l'échantillon circule "en

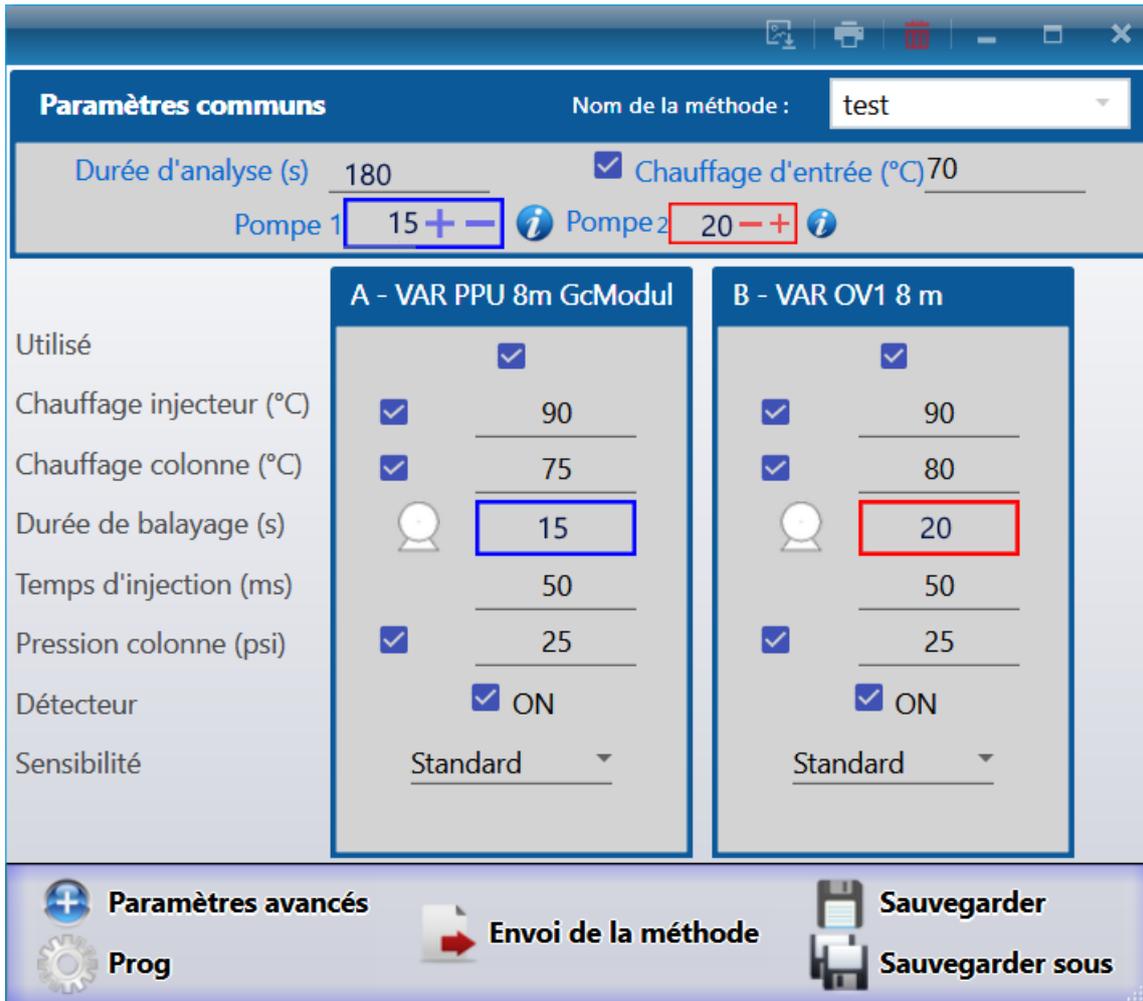


continu" dans la boucle d'injection, on peut activer le débit continu uniquement dans la configuration de Soprane II (voir chapitre [Contrôle débit échantillon](#)).

- **Ctrl temp. TCD** : contrôle de la température du TCD, si le TCD chauffe suite à une mauvaise configuration des gaz vecteurs, par exemple, une sécurité coupe le TCD.
- **Inversion signal** : permet d'inverser le signal lorsque l'on utilise le gaz vecteur Argon ou Azote
- **Prog. Pression** : permet de programmer la pression si besoin

a) **2. Les conditions opératoires M3000**

L'affichage suivant est identique pour les instruments M3000 série et Lan.



- **Description des paramètres à renseigner**

Un premier écran visualise les principaux paramètres.

Pour chacun des modules analytiques, 2 types de renseignements doivent être fournis : des cases à cocher qui correspondent à des états ON / OFF et des valeurs numériques.



La **durée de l'analyse** est exprimée en secondes.

L'**entrée chauffée** se rapporte au tube entre le raccord d'arrivée d'échantillon et l'injecteur. Si la case est cochée, une température cohérente exprimée en degrés Celsius doit être indiquée. **Les chauffages injecteur et colonne**, généralement utilisés, se programment de la même manière.

Le **temps d'échantillonnage** est la durée, exprimée en secondes, durant laquelle l'échantillon balaye la boucle d'injection avant l'injection proprement dite. Si la pompe auxiliaire est utilisée, elle sera active durant toute la durée de l'échantillonnage. Pour modifier la valeur, il faut renseigner le champ "**Pompe**". La valeur sera actualisée au niveau des modules connectés à cette pompe.

La **durée d'injection**, exprimée en millisecondes, correspond au temps pendant lequel le contenu de la boucle d'injection est envoyé vers la colonne.

Le **temps du backflush**, exprimé en secondes, est le temps (référence zéro lors de l'injection) durant lequel le sens de circulation dans la pré-colonne est inversé. Ceci permet d'éviter l'envoi de produits lourds dans la colonne et ainsi de la protéger d'une éventuelle pollution.

La **pression de la colonne**, exprimé en PSI représente la pression de gaz vecteur en tête de colonne. Le gaz ne circule dans la colonne que si la case à cocher est cochée.

La coche dans la case **détecteur** permet, similairement, de mettre ou non le TCD sous tension.

Le choix de **sensibilité** permet de définir la gestion de l'amplificateur avec une double possibilité, sensibilité haute ou standard (Voir la note ci-après).

Note importante :

Nous venons de préciser que le paramètre **sensibilité** pouvait prendre les valeurs "**haute**" ou "**normale**" et que ceci permettait de gérer le gain de l'amplificateur.

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

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

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

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

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

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



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

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

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

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

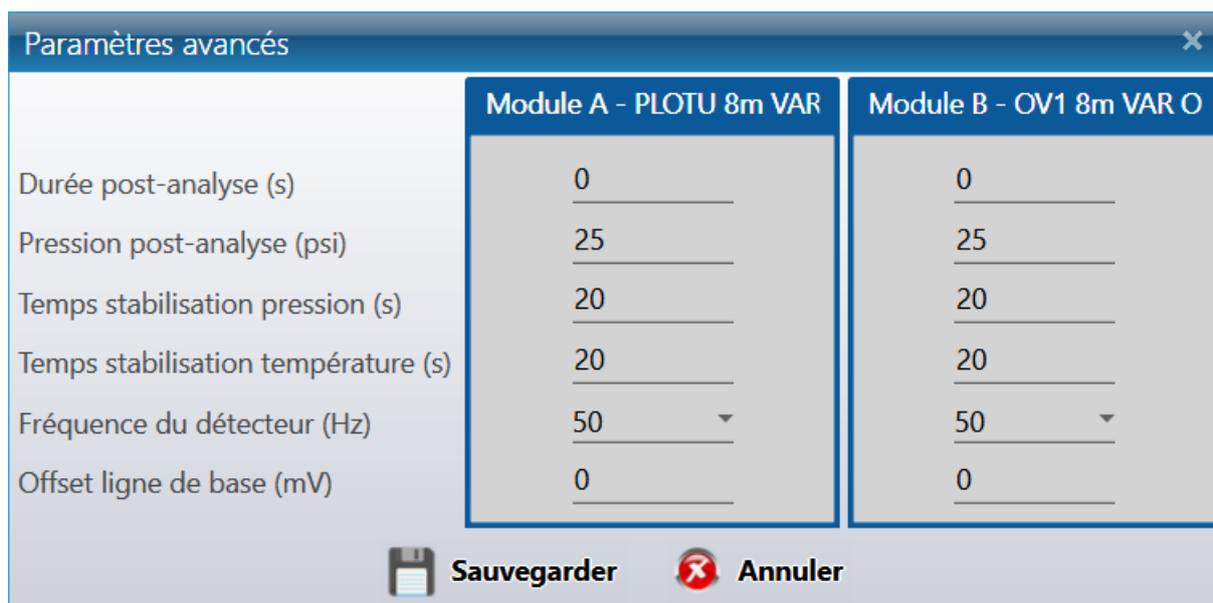
- Paramètres avancés

Un bouton "paramètres avancés"  Paramètres avancés permet d'atteindre un deuxième écran.

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

La **durée d'équilibrage des températures ou des pressions**, exprimée en secondes, permet de limiter la gestion de défauts. Si une consigne est programmée, la nouvelle valeur de température ou de pression ne peut pas être atteinte instantanément. La valeur programmée ici correspond à la durée pendant laquelle la différence normale entre valeur réelle et nouvelle consigne n'est pas gérée comme un défaut.

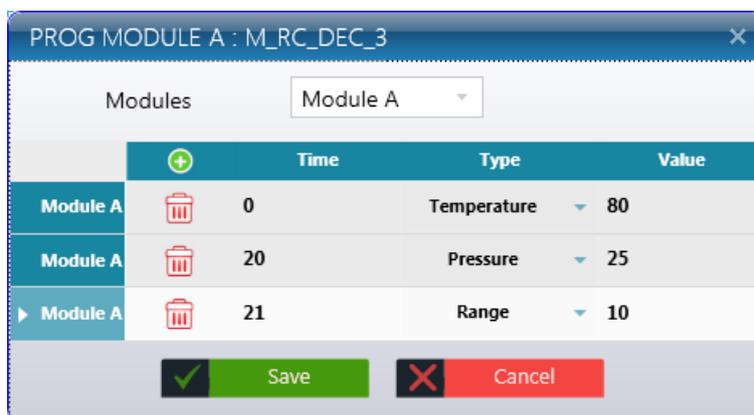
La **fréquence** (20, 50 ou 100 Hz) est la fréquence à laquelle le signal d'analyse sera scruté.



- **Programmation**

Sur le premier écran des conditions opératoires, un bouton, nommé Prog , permet l'écriture de pas de programmation de manière à modifier la température, la pression ou la sensibilité durant l'analyse.

Ces pas de programme doivent être écrits par temps croissants.



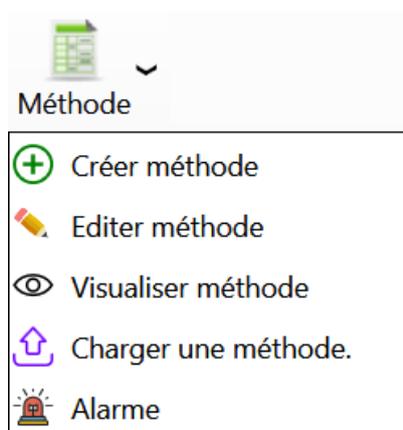
Lorsque l'on valide l'ensemble de ces écrans, SOPRANE II propose de sauvegarder les modifications.

Une méthode n'est pas seulement constituée de conditions opératoires, mais aussi de paramètres et d'événements d'intégration, de données d'identification des constituants, de rapports, ...

Pour voir comment définir une séquence d'analyse, voir le chapitre : [Gestion des séquences d'analyse](#).

b) Chargement d'une méthode d'analyse

Le chargement d'une méthode est accessible dans l'onglet « **Analyses** et cliquer sur **Méthode** ».



Charger une méthode.

✓ Valider ✗ Annuler

	Nom	Entrée	Injecteur		Colonne		Pression		Injection		Détecteur	
			Mod. A	Mod. B	Mod. A	Mod. B	Mod. A	Mod. B	Mod. A	Mod. B	Mod. A	Mod. B
	off	70,0 °C	90,0 °C	90,0 °C	75,0 °C	80,0 °C	5,0 PSI	5,0 PSI	50 ms	50 ms	OFF	OFF
	off 1	70,0 °C	90,0 °C	90,0 °C	75,0 °C	80,0 °C	5,0 PSI	5,0 PSI	50 ms	50 ms	OFF	OFF
	test	70,0 °C	90,0 °C	90,0 °C	75,0 °C	80,0 °C	25,0 PSI	25,0 PSI	50 ms	50 ms	ON	ON
	test_1	70,0 °C	90,0 °C	90,0 °C	75,0 °C	80,0 °C	25,0 PSI	25,0 PSI	50 ms	50 ms	ON	ON

Pour valider la sélection de la configuration il suffit d'appuyer sur le bouton **Valider**, et la méthode sera chargée.

c) Les 4 méthodes utiles

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

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

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

4.3.2. Gestion des séquences d'analyse

Avant de pouvoir créer une séquence il faut au préalable avoir créé une méthode d'analyse (voir chapitre [Gestion des méthodes d'analyse](#)).

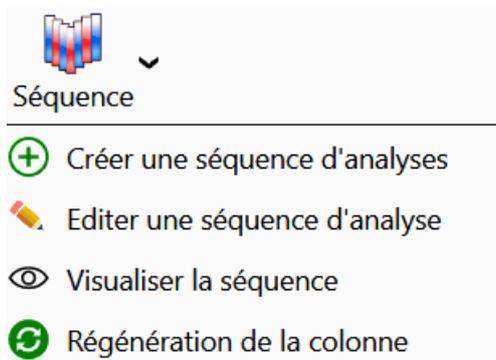
Nous souhaitons réaliser des cycles d'analyses. Il va donc être nécessaire de préciser quel flux on souhaite analyser, quelle méthode d'analyse sera utilisée pour cela, combien de temps il faudra attendre avant les injections, ...

Supposons que le chromatogramme autorise de travailler sur plusieurs flux. Ces flux peuvent être sélectionnés par campagnes (on travaille toujours sur le même flux) ou séquentiellement, tous les flux ayant

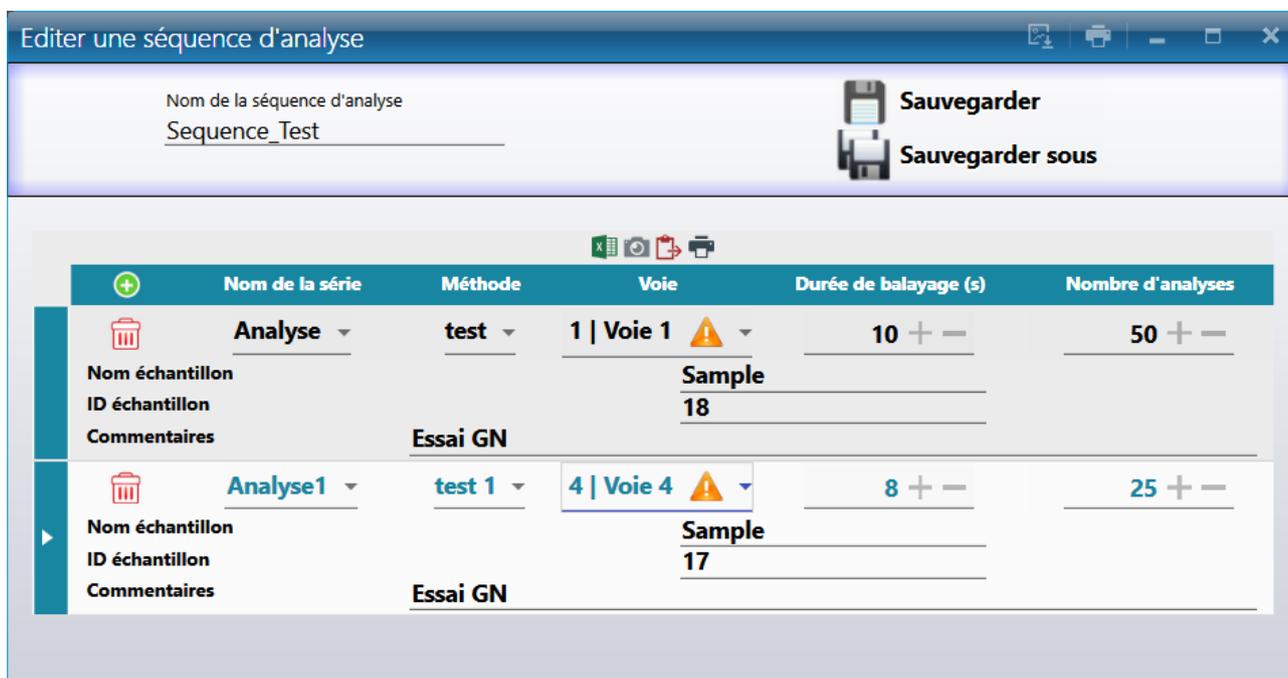


la même fréquence d'analyse, ou certains étant considérés comme étant plus importants que d'autres.

Pour accéder à l'édition des séquences positionnez-vous sur l'onglet **Analyseur** et cliquez sur le bouton suivant.



La fenêtre suivante s'affichera :



Dans cette table, il est possible de **définir les analyses en leur donnant un nom**, de **sélectionner une méthode d'analyse** (chaque case est une zone de liste visualisant toutes les méthodes), d'indiquer **quel flux est concerné** (autre zone de liste) et de préciser la **durée minimale d'échantillonnage avant l'injection** et le **nombre de répétitions de ce pas**.

Des informations complémentaires concernant l'échantillon peuvent être ajoutées. Ces valeurs sont le **nom de l'échantillon**, son **identifiant** et un **commentaire** si nécessaire.

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



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

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

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

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

NOTE :

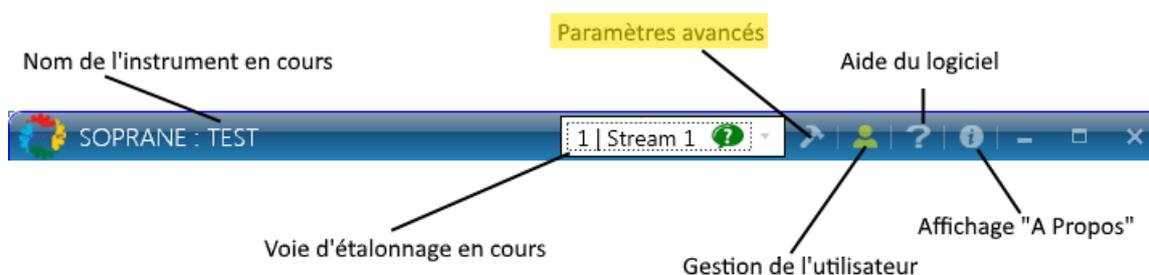
Une séquence d'analyses peut bien évidemment comprendre la référence d'un flux défini par ailleurs comme servant à la calibration. Il faut garder à l'esprit qu'il s'agit d'une séquence d'analyses, ce qui signifie que ces étalons seront alors analysés comme n'importe quel autre échantillon et donneront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

Pour voir comment éditer une séquence d'étalonnage, voir le chapitre [Editer une séquence d'étalonnage](#).

Régénération des colonnes

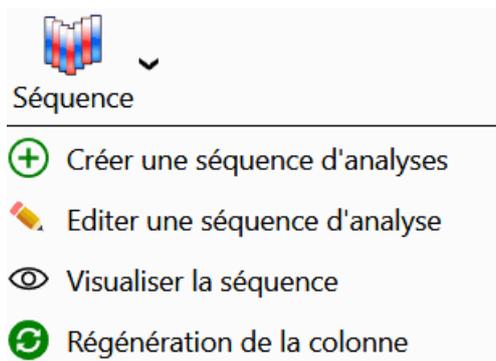
Lors de la configuration de SOPRANE II (voir chapitre [Configuration analyseur](#)) nous avons pu demander la gestion de la régénération des colonnes (voir chapitre [Gestion des options](#)).

Si une telle requête a été faite, cliquez sur "Paramètres avancés"  de SOPRANE II.

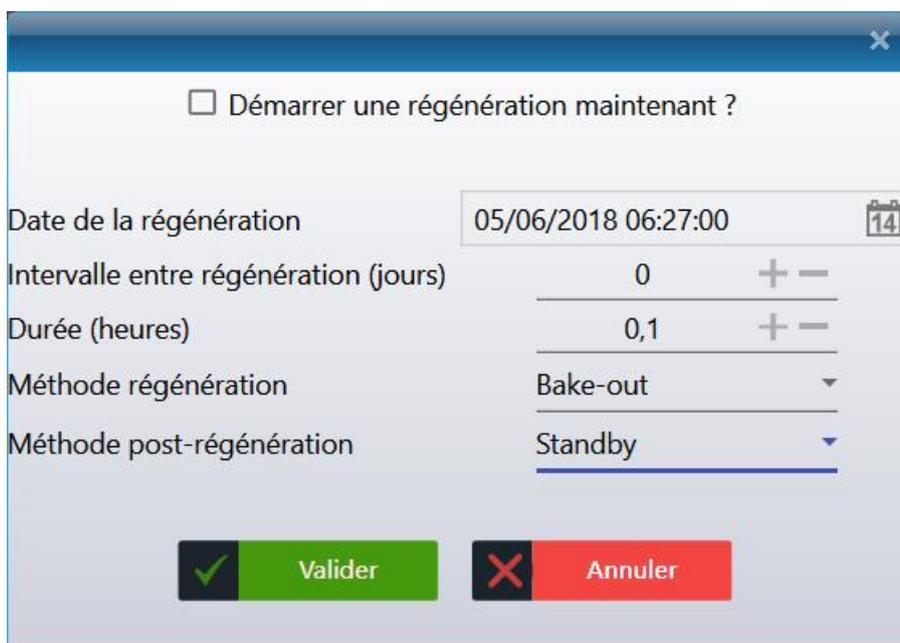


L'option "Régénération Colonne" sera accessible (voir chapitre [Gestion des options](#)). Cette option fonctionne de la même manière que l'étalonnage automatique, ce qui signifie qu'elle a priorité sur le déroulement d'une séquence d'analyses





Voici ci-dessous la fenêtre qui s'ouvrira.



Il suffit d'indiquer la **date et l'heure de la prochaine régénération** ainsi que le **nombre de jours devant séparer deux régénérations successives** (0 si une seule régénération doit être effectuée).

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

Enfin, une **méthode de post régénération** doit être indiquée.

Il y a 2 façons de procéder à la régénération. Il est possible d'arrêter les analyses et de demander une régénération immédiate ou de programmer cette régénération pour qu'elle s'effectue un peu plus tard. Dans ce cas, lorsque la régénération sera terminée, la méthode de post régénération sera envoyée à l'analyseur. Cette méthode de post régénération est similaire aux méthodes utilisées pour faire les analyses mais avec les détecteurs OFF. Une telle régénération peut être effectuée pendant la nuit ou le week-end, et à la fin l'utilisateur a un appareil prêt à l'utilisation.

La seconde manière consiste à programmer la régénération à intervalles réguliers puis à lancer une séquence



d'analyse. Lorsqu'une régénération doit être effectuée, la séquence est momentanément interrompue. A la fin de la régénération, la méthode de post régénération est ignorée et la méthode correspondant à l'analyse suivante est envoyée à l'analyseur. SOPRANE II attend alors le temps nécessaire pour disposer d'un statut READY de l'analyseur, puis la séquence reprend son cours normal.

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

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

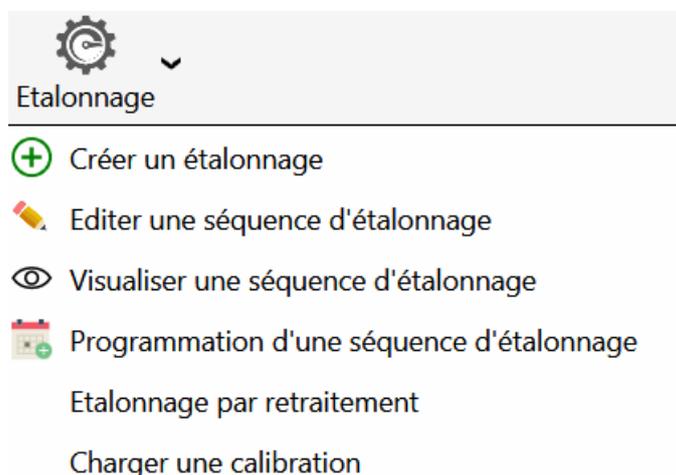
4.3.3. Gestion des séquences d'étalonnage

Avant de pouvoir créer une séquence d'étalonnage il faut au préalable avoir créé une méthode d'analyse (voir chapitre [Gestion des méthodes d'analyse](#)).

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

Supposons que le chromatogramme autorise de travailler sur plusieurs flux. Ces flux peuvent être sélectionnés par campagnes (on travaille toujours sur le même flux) ou séquentiellement, tous les flux ayant la même fréquence d'analyse, ou certains étant considérés comme étant plus importants que d'autres.

Pour accéder à l'édition d'une séquence d'étalonnage positionnez-vous sur l'onglet **Analyseur** et cliquez sur le bouton étalonnage et édition d'un étalonnage.



La fenêtre suivante s'affichera :



Editer une séquence d'étalonnage

Nom de la séquence d'analyse
Calibration test

Sauvegarder
Sauvegarder sous

Nom de la série	Méthode	Voie	Durée de balayage (s)	Nombre d'analyses	Niveau d'étalonnage	Type d'étalonnage
Analyse Nom échantillon ID échantillon Commentaires	test 1	1 Voie 1	7 + -	50 + -	1 + -	Remplacer
Sample 18 Essai GN						
Analyse1 Nom échantillon ID échantillon Commentaires	test	3 Voie 3	12 + -	25 + -	1 + -	Moyenne
Sample 17 Essai GN						

Dans cette table, il est possible de **définir les analyses en leur donnant un nom**, de **sélectionner une méthode d'analyse** (chaque case est une zone de liste visualisant toutes les méthodes), d'indiquer **quel flux est concerné** (autre zone de liste) et de préciser la **durée minimale d'échantillonnage avant l'injection** et le **nombre de répétitions de ce pas**.

Ce sont les mêmes paramètres que lors d'une édition de séquence (voir chapitre [Gestion des séquences d'analyse](#)), il faut également ajouter la **référence d'un flux** défini par ailleurs comme servant à la calibration. Il faut garder à l'esprit qu'il s'agit d'une séquence d'analyses, ce qui signifie que ces étalons seront alors analysés comme n'importe quel autre échantillon et donneront lieu au calcul de concentrations. Le **type de calibration** sera également à renseigner.

Des informations complémentaires concernant l'échantillon peuvent être ajoutées. Ces valeurs sont le **nom de l'échantillon**, son **identifiant** et un **commentaire** si nécessaire.

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

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

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

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

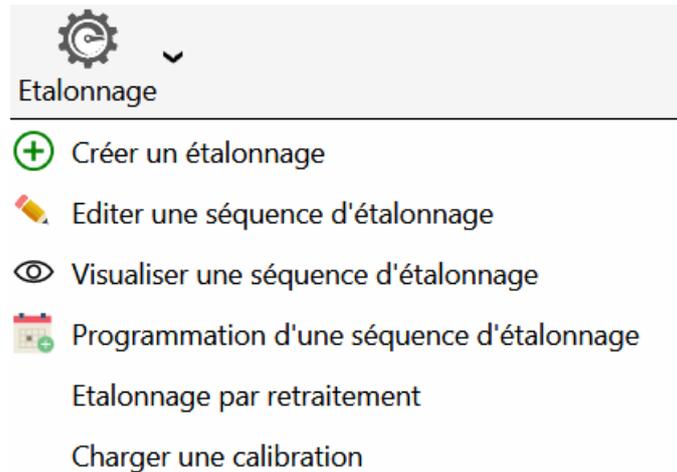
Si la durée de balayage est supérieure à la durée séparant la fin de l'injection de l'analyse en cours du début de l'analyse suivante, une temporisation est implicitement ajoutée par SOPRANE II.



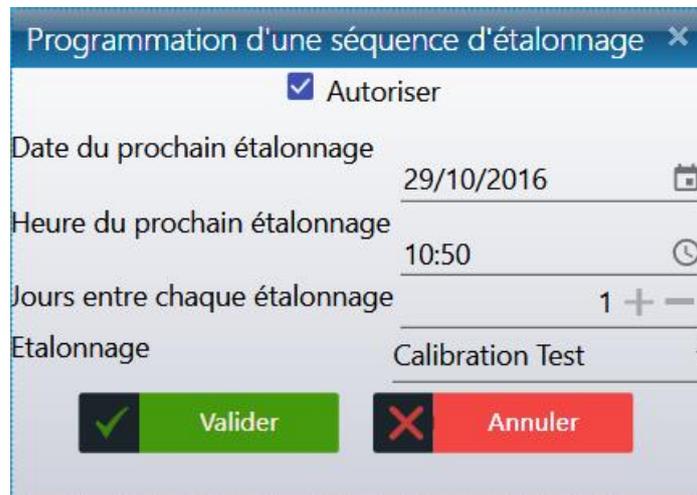
Programmation étalonnage

Pour accéder à la programmation d'un étalonnage positionnez-vous sur l'onglet **Analyseur** et cliquez sur le bouton étalonnage et programmation d'un étalonnage.

To access to automatic calibration, go to the **Analysis** tab and click on the calibration button and then select the **Automatic calibration**.



La fenêtre suivante s'affichera :



Pour que la programmation d'un étalonnage soit détectée, il faut tout d'abord **l'activer**, s'il est désactivé l'étalonnage n'aura pas lieu.

Une fois activé, la **date** et **l'heure** de la calibration peuvent être modifiées.

L'étalonnage sélectionné sera effectué aux date et heure indiquées, avec une fréquence déterminée par le nombre de **jours d'intervalle**.

La programmation d'étalonnage ne sera effectuée qu'avec un démarrage d'analyse en fonctionnement automatique.



L'historique des étalonnages peut être visualisé (voir chapitre [Historique d'étalonnages](#)).

4.4. Gestion des analyses

Voir les chapitres :

[Lecture du statut](#)

[Barre de statut](#)

[Barre de titres](#)

[Œil](#)

[Analyses](#)

[Le temps réel](#)

[Lancement en analyse](#)

[Lancement séquence](#)

[Lancement étalonnage](#)

[Résultats des analyses](#)

[Série d'analyses](#)

[La page de résultats](#)

[Les tendances](#)

[Retraitement par lot](#)

[Étalonnage par retraitement](#)

4.4.1. Analyses

Le bouton "**Démarrage**"  de l'onglet "**Analyses**", permet le départ des analyses selon la séquence qui a été programmée.

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

De la même façon, l'arrêt d'un cycle d'analyses peut être demandé par le bouton symbolisant un panneau STOP. Par sécurité une fenêtre de dialogue permet de confirmer (ou non) la demande et précise que l'arrêt effectif surviendra à la fin de l'analyse en cours.

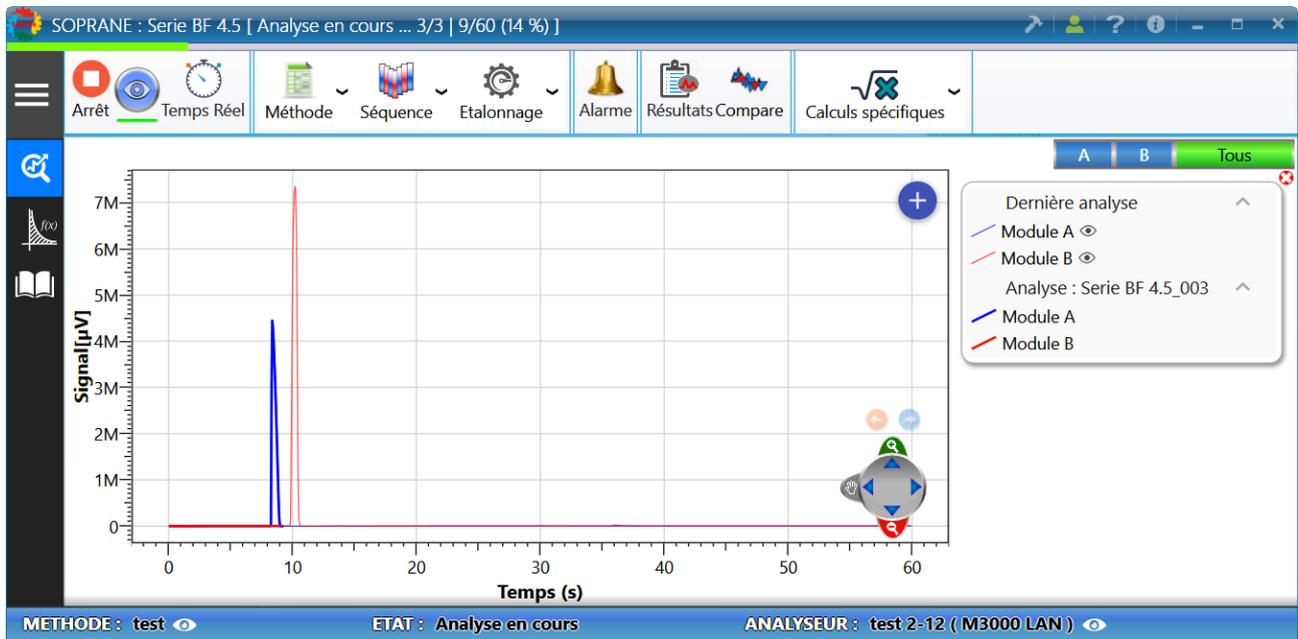
Trois modes d'analyse sont possibles :

- Analyse : Lancera un nombre défini d'analyses avec la même méthode (voir le chapitre [Lancement en analyse](#)).
- Séquence : Lancera une séquence d'analyses (voir le chapitre [Lancement séquence](#)).
- Calibration : Lancera une séquence d'étalonnage (voir le chapitre [Lancement étalonnage](#)).



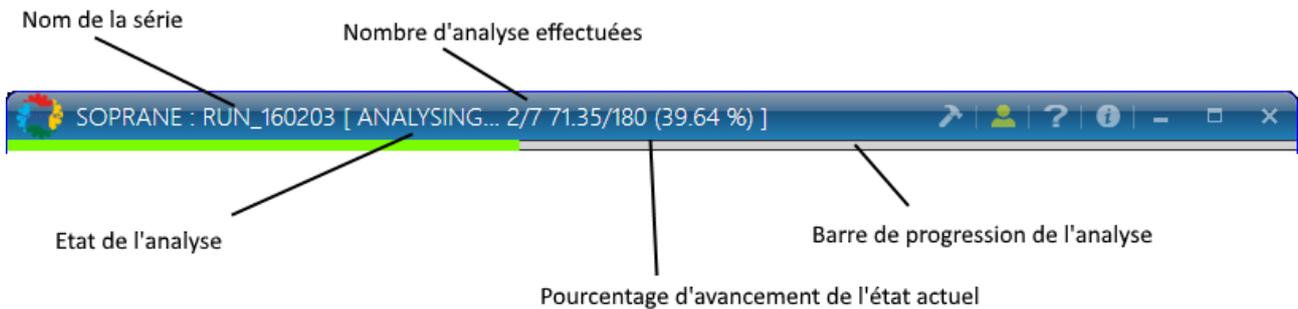
a) Temps réel

Lors du démarrage de l'analyse, l'affichage suivant s'affiche :

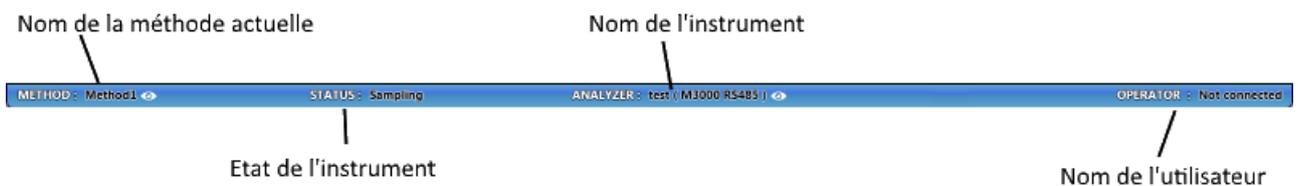


Il y a plusieurs éléments à prendre en compte pour connaître l'avancement de l'analyse :

1. La barre de titres



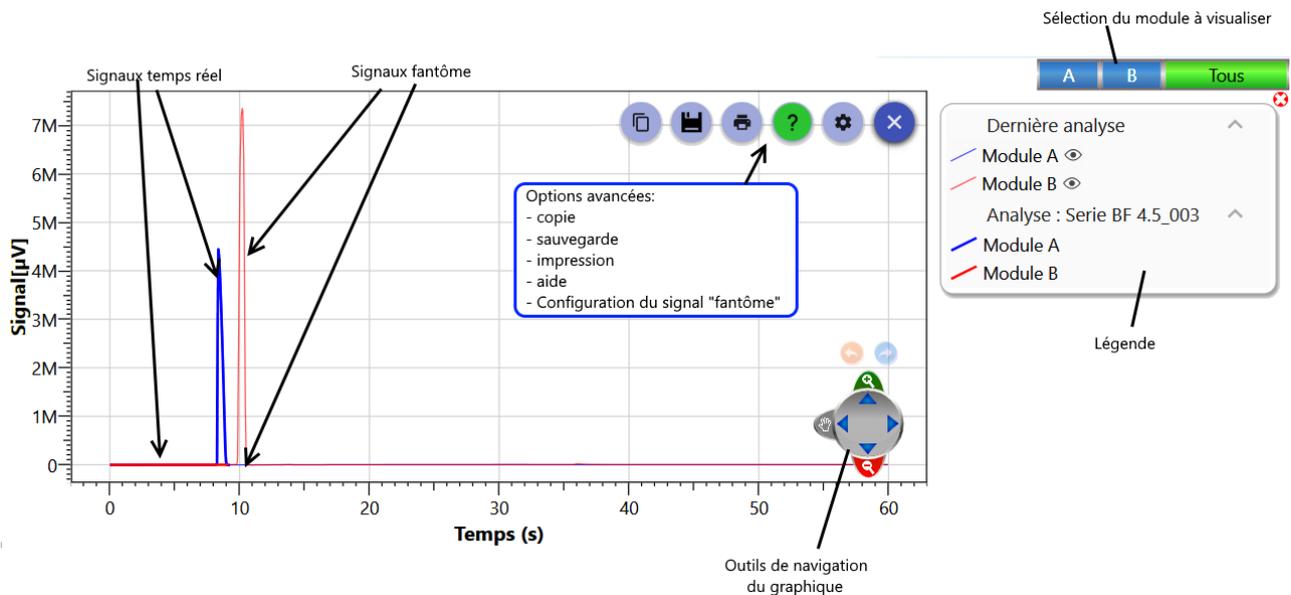
2. La barre de statut



3. Le signal temps réel

Lors d'une analyse, SOPRANE II affiche le signal reçu des détecteurs. Par défaut, tous les modules sont affichés sur le même graphique, la sélection du module à afficher peut être modifiée en cliquant sur le nom du module correspondant.

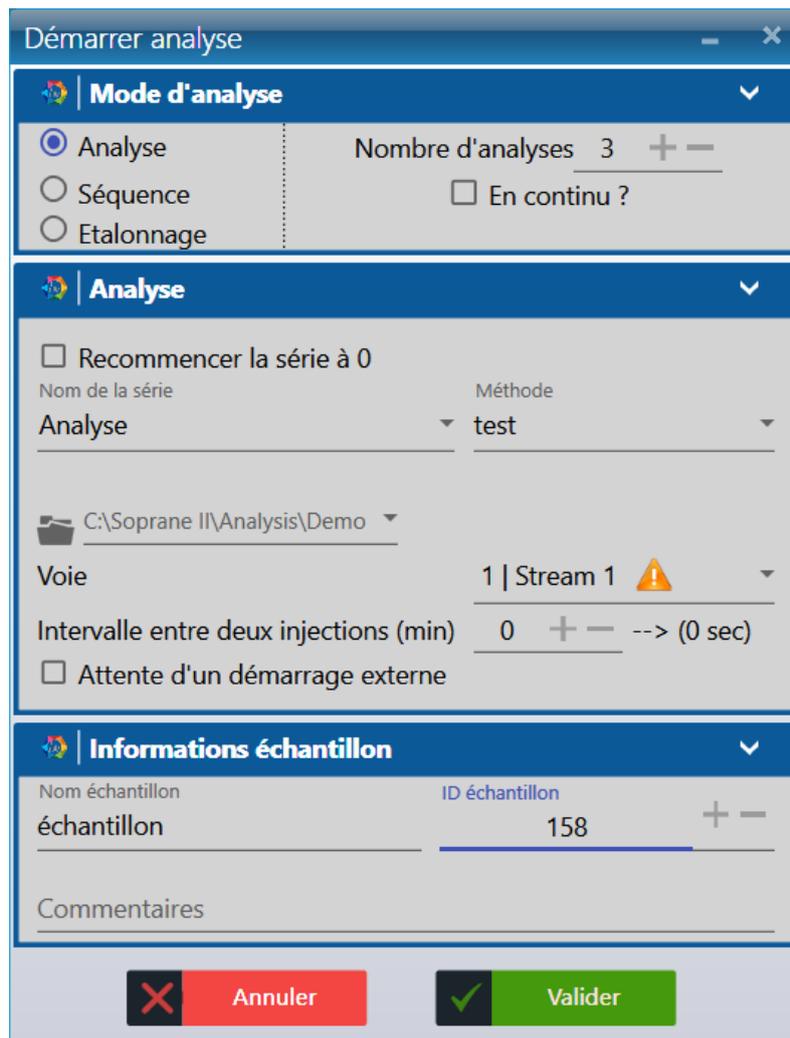
Le graphique offre la possibilité de pouvoir comparer le signal temps réel avec l'analyse précédente, pour enlever le signal précédent cliquez sur  pour l'afficher à nouveau sur le bouton .



Le signal temps réel offre la possibilité de se déplacer et zoomer sur le graphique pour plus d'information, voir le chapitre [Graphique](#).

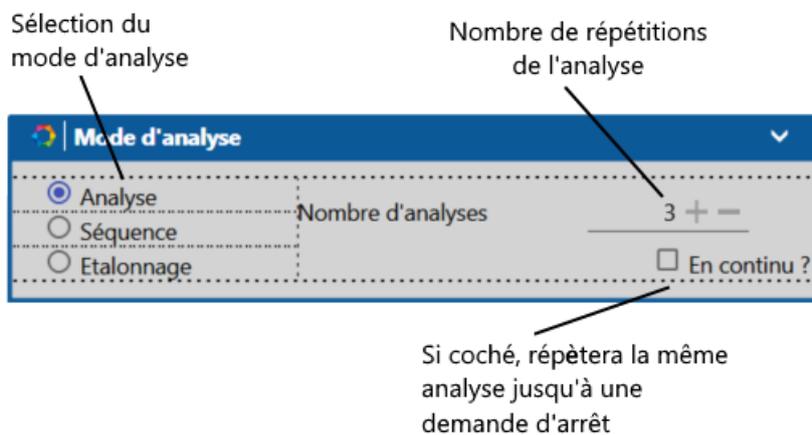


b) Lancement en analyse

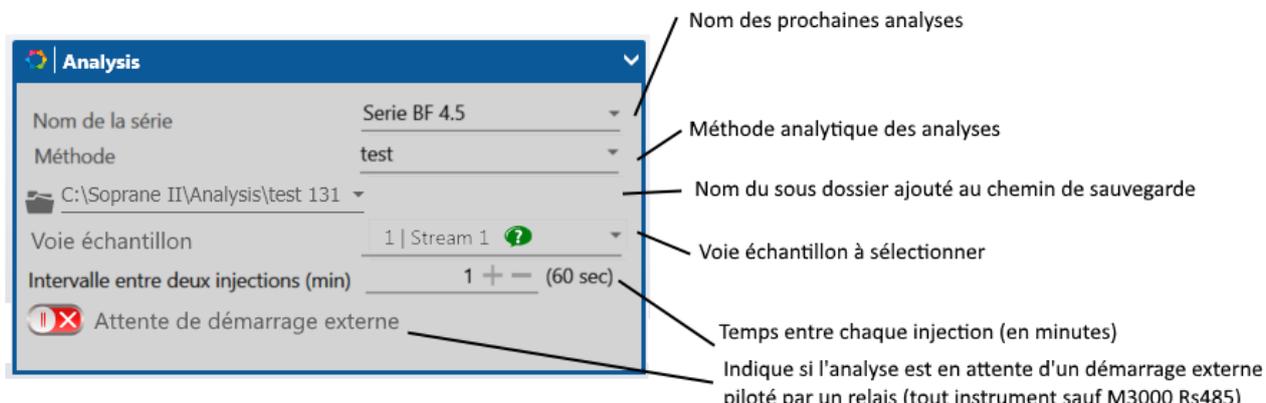


Avant de lancer une (ou plusieurs) analyse(s), il faudra renseigner plusieurs champs :

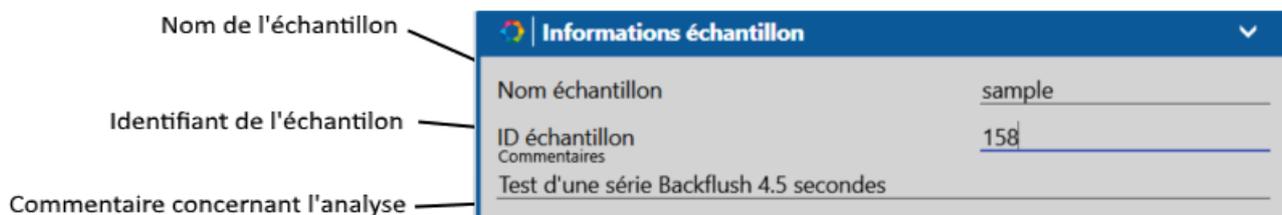
1. Mode d'analyse



2. Informations analyse



3. Informations échantillon



A noter : L'icône  permet d'agrandir ou de réduire le panneau correspondant.

Une fois toutes les informations renseignées, l'analyse démarrera lors de la confirmation.

Pour aller plus loin, voir le chapitre [Temps réel](#).

Voir aussi les chapitres [Lancement séquence](#) and [Lancement étalonnage](#).

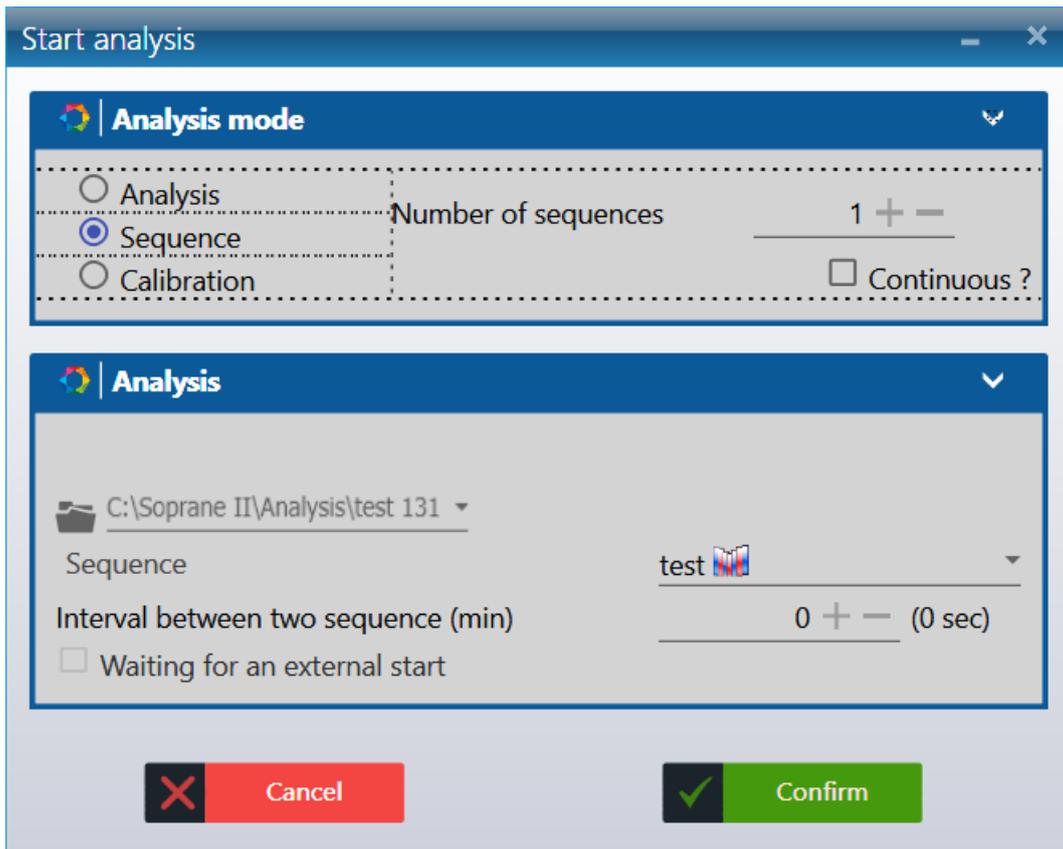
Pour voir comment créer une méthode, voir le chapitre [Gestion des méthodes d'analyse](#).

c) Lancement séquence

Supposons que le chromatogramme autorise de travailler sur plusieurs flux. Ces flux peuvent être sélectionnés par campagnes (on travaille toujours sur le même flux) ou séquentiellement, tous les flux ayant la même fréquence d'analyse, ou certains étant considérés comme étant plus importants que d'autres.

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

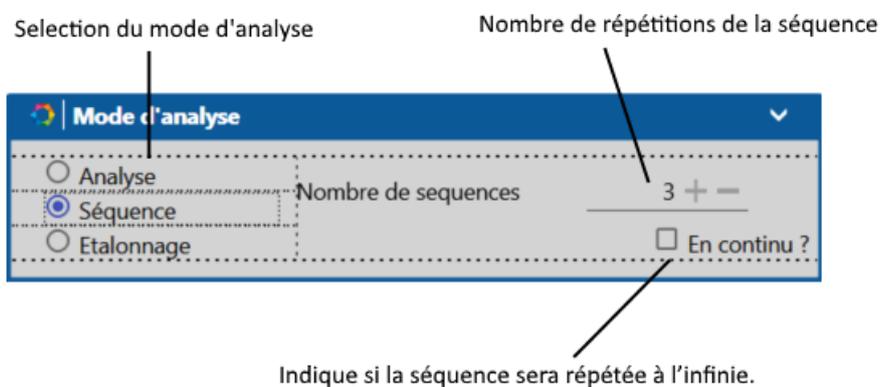




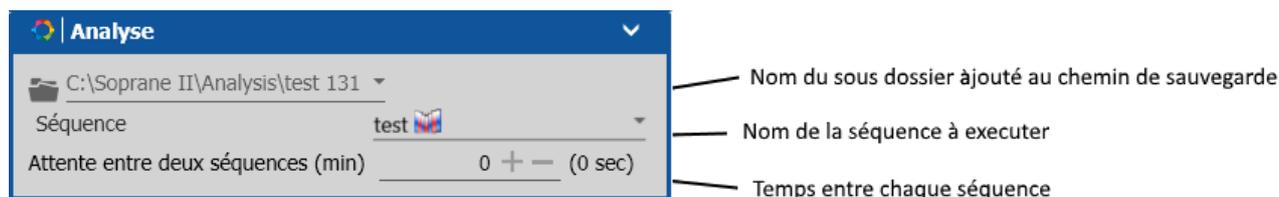
Le champ **Séquence** est utilisé pour charger une séquence d'analyses (Ceci suppose que plusieurs flux ont été définis).

Avant de lancer une (ou plusieurs) analyse(s), il faudra renseigner plusieurs champs :

1. Mode d'analyse



2. Informations séquence



A noter : L'icône  permet d'agrandir ou de réduire le panneau correspondant.

Une fois toutes les informations renseignées, la séquence démarrera lors de la confirmation.

Pour aller plus loin, voir le chapitre [Temps réel](#).

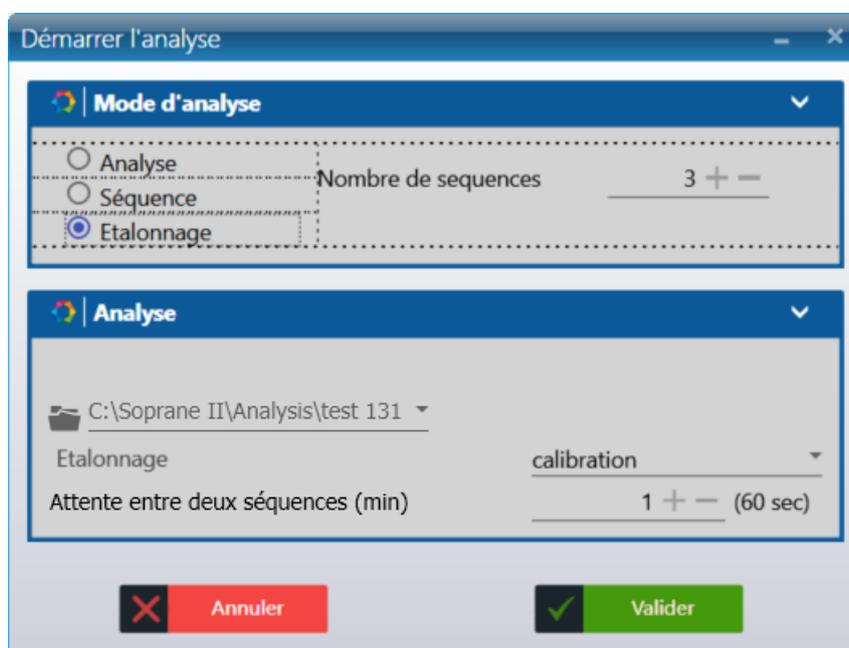
Voir aussi les chapitres [Lancement en analyse](#) et [Lancement étalonnage](#).

Pour voir comment créer une méthode, voir le chapitre [Gestion des méthodes d'analyse](#). Voir le chapitre [Gestion des séquences d'analyse](#) pour créer une séquence.

d) Lancement étalonnage

Supposons que le chromatogramme autorise de travailler sur plusieurs flux. Ces flux peuvent être sélectionnés par campagnes (on travaille toujours sur le même flux) ou séquentiellement, tous les flux ayant la même fréquence d'analyse, ou certains étant considérés comme étant plus importants que d'autres.

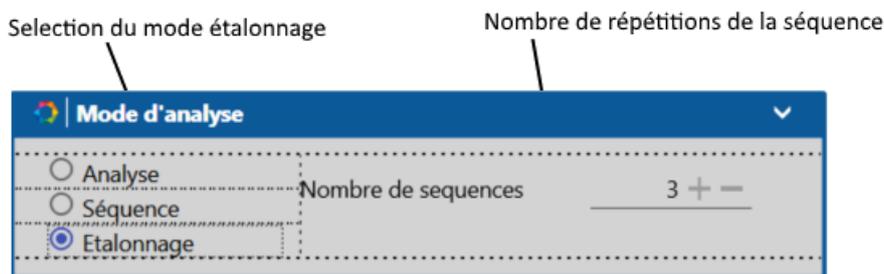
A la différence d'une séquence d'analyses, à la fin d'une analyse, les étalons seront alors analysés et donneront lieu au calcul de concentrations.



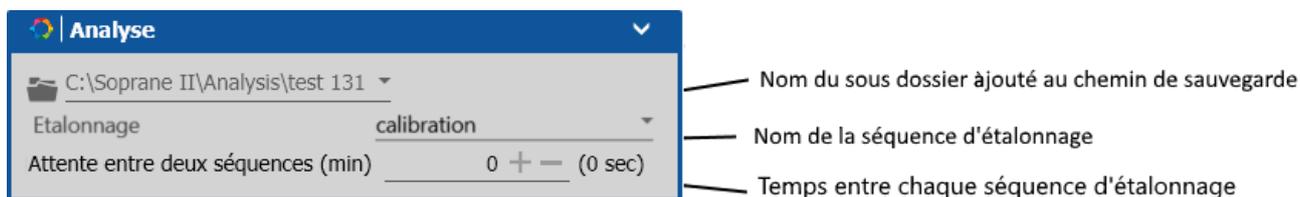
Avant de lancer une (ou plusieurs) analyse(s), il faudra renseigner plusieurs champs :



1. Mode d'analyse



2. Informations séquence



A noter : L'icône  permet d'agrandir ou de réduire le panneau correspondant.

Une fois toutes les informations renseignées, la séquence d'étalonnage démarrera lors de la confirmation.

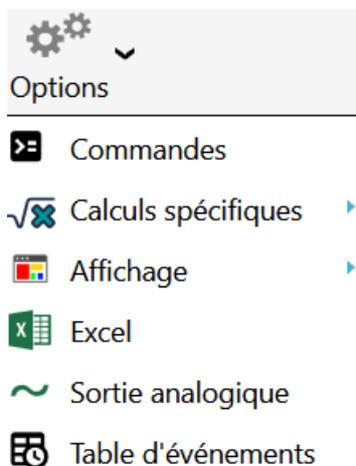
Pour aller plus loin, voir le chapitre [Temps réel](#).

Voir aussi les chapitres [Lancement en analyse](#) et [Lancement séquence](#).

Pour voir comment créer une méthode, voir le chapitre [Gestion des méthodes d'analyse](#), voir le chapitre [Gestion des séquences d'étalonnage](#) pour créer une séquence d'étalonnage.

e) Table d'événements d'analyse

Soprane II permet de contrôler différentes commandes avant et après l'injection comme l'activation de la pompe auxiliaire, la sélection du flux. Ces commandes sont accessibles via le menu "**Options > Table d'événements**".



Pour chaque étape d'événement, vous devez indiquer :

- L'heure de début de l'événement
- La commande (Aucune, Commande auxiliaire, modifier la voie, sélectionner la voie par défaut, un message personnalisé et lire l'entrée analogique)
- La valeur de commande (peut être différente en fonction du type de commande)

The screenshot shows a software window titled 'Table d'événements'. At the top, there is a search bar with the text 'test'. Below it are icons for Excel, camera, and printer. The main area is a table with the following structure:

	+	Temps (s)	Commandes	Valeur
	0	+ -	Changer de voie	1 Stream 1 ?
	3	+ -	Commande auxiliaire <input checked="" type="checkbox"/>	Pump 1 4068 - 01 - 1 : Arrêt avant l'injection
	5	+ -	Commande auxiliaire <input type="checkbox"/>	Pump 1 4068 - 01 - 1 : Arrêt avant l'injection
	6	+ -	Changer de voie	
	8	+ -	Changer de voie	3 Stream 3 ?
	9	+ -	Voie de purge	
	11	+ -	Message	Commentaires Test message <input type="checkbox"/> Vérifié la valeur avant d'analyser

At the bottom of the window are two buttons: 'Sauvegarder' (with a floppy disk icon) and 'Sauvegarder sous' (with a printer icon).

Soprane II lancera automatiquement l'analyse à la fin de la séquence d'événements.

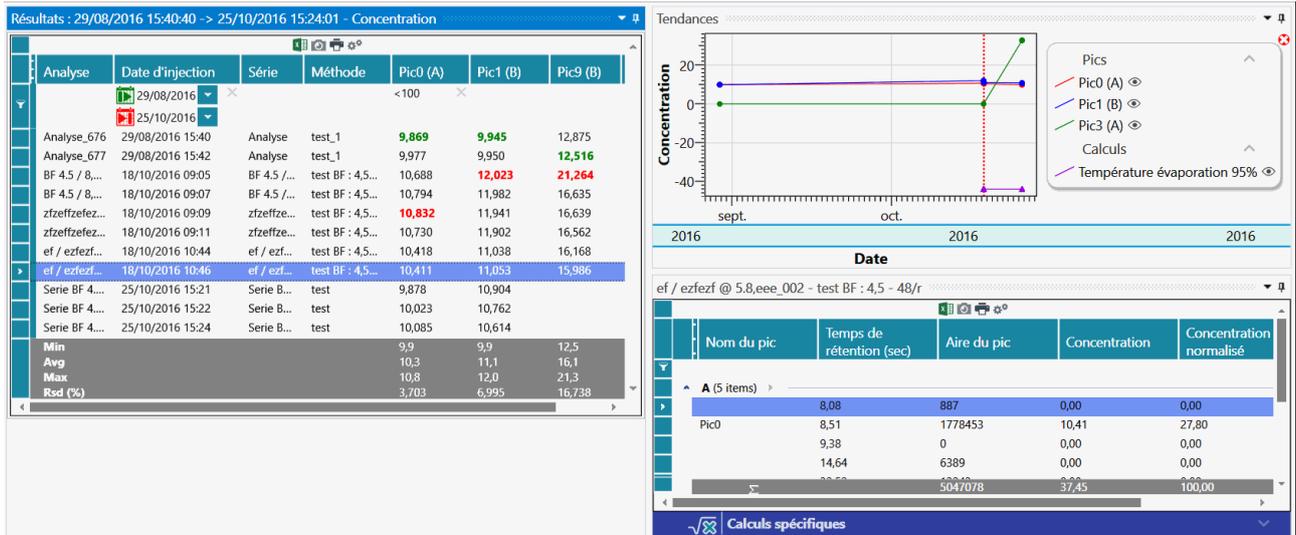
Une fois la configuration de la table des événements terminée, enregistrez-la et sélectionnez la table des événements dans la pré-commande (voir chapitre [Pre et post commandes](#))

4.4.2. Résultats des analyses

En fonctionnement normal, SOPRANE II permet la visualisation simultanée de 3 fenêtres relatives aux analyses.

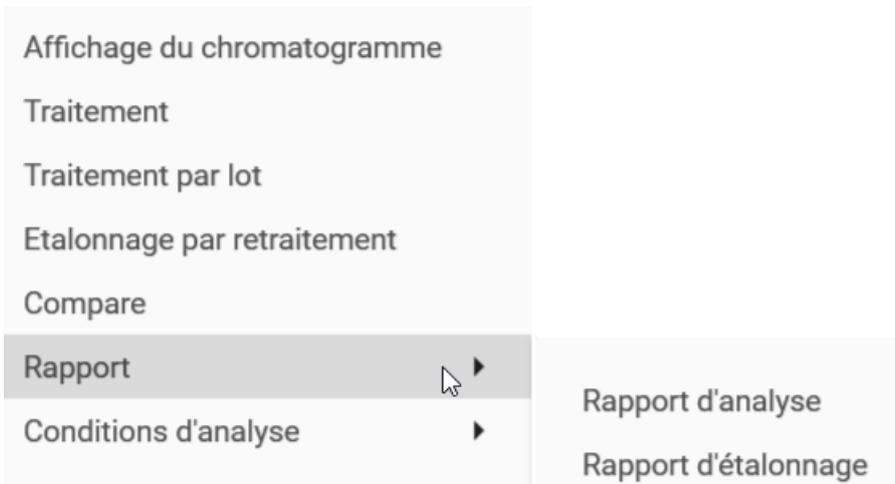
Ces 3 fenêtres permettent la visualisation des **résultats de toutes les analyses**, de **l'analyse sélectionnée** et des **tendances**. Ces fenêtres peuvent être redimensionnées, réduites ou restaurées.

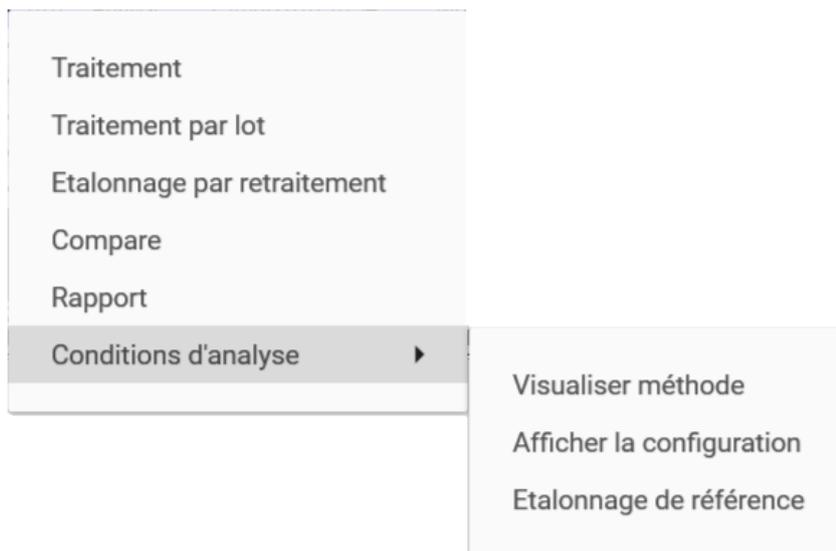




1. Description des menus

Le menu "Action" permet d'effectuer certaines opérations en fonction de la sélection des analyses dans le tableau d'analyses, les mêmes actions sont possibles en faisant un clic droit au niveau du tableau des résultats d'analyse (Pour plus de détails, voir la rubrique [Actions rapides](#)).





Les différentes opérations sont :

- Affichage du chromatogramme : Ouvre le chromatogramme avec les paramètres d'intégration dans une autre fenêtre (le raccourci est un double-clic sur la ligne de résultat) (Disponible uniquement si un seul résultat est sélectionné)
- Traitement : Permet de charger l'analyse sélectionnée dans la partie traitement. (Disponible que si un seul résultat est sélectionné, voir la rubrique [Traitement](#))
- Traitement par lot : Retraite chaque analyse sélectionnée avec une méthode spécifiée. (Voir la rubrique [Retraitement par lot](#)).
- Étalonnage par retraitement : Étalonne toutes les analyses sélectionnées avec une méthode spécifiée. (Voir la rubrique [Étalonnage par retraitement](#))
- Compare : Ouvre l'outil de comparaison d'analyses (Voir le chapitre [Comparaison des analyses](#)).
- Report: Rapport : Affiche les différents choix rapports (Disponible que si un seul résultat est sélectionné)
 - Rapport d'analyse : Affiche le rapport d'analyse (voir le chapitre [Rapport](#))
 - Rapport d'étalonnage : Affiche le rapport d'étalonnage (si un étalonnage a été effectué) (voir chapitre [Rapport d'étalonnage](#))
- Condition d'analyses : N'est disponible que si une seule analyse est sélectionnée, voici les différentes opérations possibles :
 - Permet d'afficher les paramètres de méthode d'injection.
 - Permet d'afficher la configuration de l'analyseur lors de l'injection.
 - Permet d'afficher l'étalonnage de référence (voir chapitre [Étalonnage de référence](#)).

Le menu "**Tendance**" du menu, offre la possibilité d'ajouter de nouvelles tendances et de les configurer (Voir chapitre [Tendances](#)).

Le dernier menu "**Options**", offre la possibilité de configurer la nature et la position des fenêtres. Elles peuvent être mémorisées de telle sorte que SOPRANE II puisse restaurer l'affichage à chaque lancement du programme.



2. Description des différents modes d'affichage

Les valeurs des tableaux ainsi que les tendances ne s'affichent que sous un seul mode en même temps. Le changement de mode se fait en le sélectionnant dans la liste proposée en haut au centre de la fenêtre.

Voici les différents modes d'affichage :

- Le mode **Table des résultats** affiche toutes les analyses avec les résultats en fin d'injection.
- Le mode **Retraitement** affiche toutes les analyses qui ont été retraitées.
- Le mode **Étalonnage** affiche toutes les analyses qui ont été étalonnées par retraitement.

3. Description des différents résultats à afficher

Le tableau principal ainsi que les tendances ne se concentrent que sur un seul type de résultat. Le changement du résultat à afficher se fait en le sélectionnant dans la liste proposée en haut à droite de la fenêtre.

Voici les différentes valeurs qui peuvent être affichées :

- Concentration
- Concentration normalisée
- Temps de rétention (en seconde)
- Aire du pic
- Hauteur du pic

Pour voir en détails le fonctionnement de ces trois fenêtres, voir les chapitres suivants :

[Série d'analyses](#)

[La page de résultats](#)

[Les tendances](#)

Pour aller plus loin, voir aussi :

[Actions rapides](#)

[Traitement](#)

[Retraitement par lot](#)

[Retraitement par étalonnage](#)

[Comparaison des analyses](#)

[Rapport](#)

a) Série d'analyses

La fenêtre "**Série d'analyses**" offre la possibilité de voir les résultats d'analyses, de retraitement ou d'étalonnage.



Résultats : 29/08/2016 15:40:40 -> 25/10/2016 15:24:01 - Concentration

Analyse	Date d'injection	Série	Méthode	Pic0 (A)	Pic1 (B)	Pic9 (B)
	29/08/2016			<100		
	25/10/2016					
Analyse_676	29/08/2016 15:40	Analyse	test_1	9,869	9,945	12,875
Analyse_677	29/08/2016 15:42	Analyse	test_1	9,977	9,950	12,516
BF 4.5 / 8,...	18/10/2016 09:05	BF 4.5 /...	test BF : 4,5...	10,688	12,023	21,264
BF 4.5 / 8,...	18/10/2016 09:07	BF 4.5 /...	test BF : 4,5...	10,794	11,982	16,635
zfeffzfez...	18/10/2016 09:09	zfeffze...	test BF : 4,5...	10,832	11,941	16,639
zfeffzfez...	18/10/2016 09:11	zfeffze...	test BF : 4,5...	10,730	11,902	16,562
ef / ezfezf...	18/10/2016 10:44	ef / ezf...	test BF : 4,5...	10,418	11,038	16,168
ef / ezfezf...	18/10/2016 10:46	ef / ezf...	test BF : 4,5...	10,411	11,053	15,986
Serie BF 4...	25/10/2016 15:21	Serie B...	test	9,878	10,904	
Serie BF 4...	25/10/2016 15:22	Serie B...	test	10,023	10,762	
Serie BF 4...	25/10/2016 15:24	Serie B...	test	10,085	10,614	
Min				9,9	9,9	12,5
Avg				10,3	11,1	16,1
Max				10,8	12,0	21,3
Rsd (%)				3,703	6,995	16,738

Le haut de cette fenêtre présente plusieurs boutons . (Voir le chapitre [Exportation des données d'un tableau](#) pour plus de détails).

Il est possible d'ouvrir l'outil de **traitement** ou l'outil de **comparaison** mais également de **retraiter** ou **d'étalonner** à nouveau les analyses sans gêner le déroulement de la séquence. Si une seule analyse est sélectionnée, le rapport de l'analyse peut être consulté ainsi que les conditions d'analyse (méthode, configuration de l'analyseur et l'étalonnage de référence)

Pour cela, il suffit de sélectionner une (ou plusieurs) analyse(s) en même temps dans le tableau, faire un clic droit (ou par le menu Action) et le menu contextuel suivant apparaîtra :



Analyse	Série	Date d'injection	Type	Pic0 (A)	Pic1 (B)	Pic9 (B)	Niveau
		01/01/2015					
		26/10/2016					
Analyse_679	Analyse	29/08/2016 16:38	Remplacer	855,621	10,010	4,152	1
Analyse_678	Analyse	29/08/2016 16:34	Moyenne	855,945	10,030	4,203	1
Analys			yenne	852,941	10,016	0,000	1
Analys			yenne	843,707	10,012	5,148	1
Analys			yenne	853,351	9,972	24,852	1
Analys			yenne	853,556	10,108	3,951	1
Analys			yenne	856,126	10,064	4,030	1
Min				843,7	10,0	0,0	
Avg				853,0	10,0	6,6	
Max				856,1	10,1	24,9	
Rsd (%)				0,507	0,439	123,989	

Traitement	
Traitement par lot	
Etalonnage par retraitement	
Compare	
Rapport	
Conditions d'analyse	Visualiser méthode
	Afficher la configuration
	Etalonnage de référence

Les différentes opérations sont :

- **Affichage du chromatogramme** : Ouvre le chromatogramme avec les paramètres d'intégration dans une autre fenêtre (le raccourci est un double-clic sur la ligne de résultat) (Disponible uniquement si un seul résultat est sélectionné)
- **Traitement** : Permet de charger l'analyse sélectionnée dans la partie traitement. (Disponible que si une seule analyse est sélectionnée, voir la rubrique [Traitement](#))
- **Traitement par lot** : Retraite chaque analyse sélectionnée avec une méthode spécifiée. (Voir la rubrique [Retraitement par lot](#)).
- **Étalonnage par retraitement** : Étalonne toutes les analyses sélectionnées avec une méthode spécifiée. (Voir la rubrique [Etalonnage par retraitement](#))
- **Compare** : Ouvre l'outil de comparaison d'analyses (Voir le chapitre [Comparaison des analyses](#)).
- **Rapport** : Affiche les différents choix rapports (Disponible que si une seule analyse est sélectionnée)
 - Rapport d'analyse : Affiche le rapport d'analyse (voir le chapitre [Rapport](#))
 - Rapport d'étalonnage : Affiche le rapport d'étalonnage (si un étalonnage a été effectué) (voir chapitre [Rapport d'étalonnage](#))
- **Condition d'analyses** : N'est disponible que si une seule analyse est sélectionnée, voici les différentes opérations possibles :
 - Permet d'afficher les paramètres de méthode d'injection.
 - Permet d'afficher la configuration de l'analyseur lors de l'injection.
 - Permet d'afficher la référence d'étalonnage (voir chapitre [Etalonnage de référence](#)).

Le tableau présente tous les pics existants dans la table des composants de la méthode, ainsi que les valeurs minimale, maximale, la valeur moyenne et le RSD en % (Coefficient de variation).



Les valeurs minimales sont affichées en **vert** et les maximales en **rouge**.

L'analyse sélectionnée dans ce tableau sera indiquée par une barre verticale dans le graphique des tendances (Voir chapitre [Tendances](#)) et modifiera les informations contenues dans le tableau des résultats (voir chapitre [Résultats](#)).

Le tableau contient par défaut toutes les séries d'analyses effectuées, il est possible d'effectuer certains filtres (voir le chapitre [Filtrer les données](#)).

Voir aussi :

[Tendances](#)

[Résultats](#)

b) Résultats d'analyse

Le tableau suivant affiche les résultats de l'analyse sélectionnée dans le tableau série d'analyses (voir chapitre [Série d'analyses](#)).

Le titre du tableau indique le nom de l'analyse et la méthode analytique utilisée.

etalon 1000ppm_002 - Méthode air					
	Peak name	TR (sec)	Area	Concentration	Normalized [c]
▲	A (4 items)				
>	He	51.67 sec	10744 µV.s	0.0000 ppm	0.00 %
	H2	55.43 sec	17657 µV.s	0.0000 ppm	0.00 %
	O2	74.54 sec	342858 µV.s	20.6325 %	20.38 %
	N2	96.68 sec	1108252 µV.s	80.6197 %	79.62 %
▲	B (25 items)				
	Pic6	22.28 sec	4673604 µV.s	0.0000 %	0.00 %
	CH4	25.89 sec	5876 µV.s	0.0000 ppm	0.00 %
		26.89 sec	0 µV.s	0.0000 %	0.00 %
		27.47 sec	0 µV.s	0.0000 %	0.00 %
		27.58 sec	0 µV.s	0.0000 %	0.00 %
	CO2	72.02 sec	808 µV.s	0.0000 ppm	0.00 %
		110.04 sec	0 µV.s	0.0000 %	0.00 %

Les valeurs affichées sont :

- Nom du pic
- Temps de rétention
- Surface
- Concentration brute
- Concentration normalisée
- Unité
- Nom du Groupe du pic

Le pic sélectionné dans ce tableau s'affichera en surbrillance dans le graphique des tendances (voir chapitre [Tendances](#)).



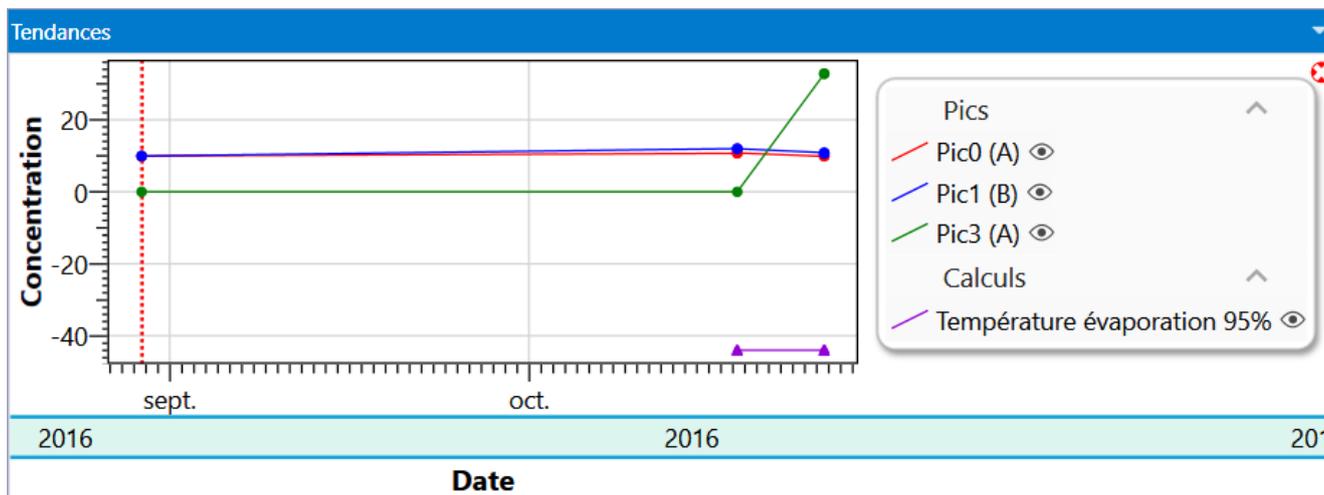
Le haut de cette fenêtre présente plusieurs boutons . (Voir le chapitre [Exportation des données d'un tableau](#) pour plus de détails).

Le tableau contient par défaut toutes les séries d'analyses effectuées, il est possible d'effectuer certains filtres (voir le chapitre [Filtrer des données](#)).

c) Tendances

1. Description

En fonctionnement normal, SOPRANE II permet la visualisation simultanée de 4 fenêtres relatives aux analyses et permet ainsi de visualiser l'évolution des valeurs ou des valeurs calculées sur un laps de temps.



Ces 4 fenêtres permettent la visualisation du chromatogramme, des résultats, de la séquence d'analyse en cours et des tendances. Ces fenêtres peuvent être redimensionnées, réduites ou restaurées.

Pics, calculs et entrées analogiques peuvent être visualisés indépendamment les uns des autres. L'accès aux feuilles de tendances est interdit tant que l'utilisateur n'a pas programmé un minimum de données concernant les pics identifiés dans l'analyse et les calculs post-analytiques.

L'identification d'un pic se fait par son nom et le module. Si le nom d'un pic est modifié, il ne sera plus reconnu sur les feuilles de tendance. Ainsi, par exemple, j'intègre un pic d'azote dont le nom est N2 et je fais la visualisation en tendance de sa valeur de concentration.

Je change le nom de ce pic de N2 en AZOTE dans la table des constituants. Il m'est nécessaire de réécrire la demande de visualisation en tendance sous ce nouveau nom.

L'axe horizontal représente la date d'injection de l'analyse, l'axe vertical correspond à la valeur que vous avez choisi d'afficher. Pour changer la valeur à afficher, sélectionnez le menu Résultat, la fenêtre contextuelle suivante apparaîtra.



[c] v

Concentration

Concentration

Concentration normalisée

Temps de rétention

Aire du pic

Hauteur du pic

Au niveau du graphique, un point représente une valeur d'analyse, la barre verticale rouge représente l'emplacement de l'analyse sélectionnée dans le tableau de série d'analyses (voir chapitre [Série d'analyses](#)). Si on clique sur un point d'analyse, l'analyse sélectionnée dans le tableau série d'analyse sera changée.

Une info-bulle apparaît lorsque le curseur est au-dessus d'un point des tendances.

Nom : Analyse_676
 Nom du pic : N2 (Module B)
 Date : 18/10/2016 09:07:18
 Valeur : 11,982 %

2. Configuration des tendances

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

Le menu **Option / Ajouter une nouvelle tendance** ouvrira le même type de fenêtre.

Sélection des pics

Nom : Tendances

Combustion	ISO 8973 - GPL
Sélection des pics	ISO 6976 / ASTM-GPA

<input type="checkbox"/> Pic0 (A) <input type="checkbox"/> Pic1 (B)	<input type="checkbox"/> Pic3 (A) <input type="checkbox"/> Pic9 (B)
--	--



Entrées analogiques

ISO 6976 / ASTM-GPA	Combustion	ISO 8973 - GPL
Sélection des pics		Entrées analogiques
<input checked="" type="checkbox"/> AI 0	<input checked="" type="checkbox"/> AI 1	
<input checked="" type="checkbox"/> AI 2		

Calculs ISO 6976 + ASTM-GPA

Nom : Tendances

Sélection des pics	ISO 6976 / ASTM-GPA	Combustion	ISO 8973 - GPL
<input type="checkbox"/> Masse mol.		<input type="checkbox"/> Masse vol. idéale	
<input type="checkbox"/> Masse vol. réelle		<input type="checkbox"/> Densité idéale	
<input type="checkbox"/> Densité réelle		<input type="checkbox"/> PCI idéal	
<input type="checkbox"/> PCI réel		<input type="checkbox"/> PCS idéal	
<input type="checkbox"/> PCS réel		<input type="checkbox"/> Indice de Wobbe	
<input type="checkbox"/> Indice de Wobbe idéal		<input type="checkbox"/> Fact. de compression	

Calculs Combustion

Nom : Tendances

Sélection des pics	ISO 6976 / ASTM-GPA	Combustion	ISO 8973 - GPL
<input type="checkbox"/> Air stoechiometrique		<input type="checkbox"/> Volume H2O	
<input type="checkbox"/> Volume Azote		<input type="checkbox"/> CO2 Max	
<input type="checkbox"/> Volume CO2		<input type="checkbox"/> Pouvoir fumigène humide	
<input type="checkbox"/> Pouvoir fumigène sec		<input type="checkbox"/> Index de comburité	
<input type="checkbox"/> Pouvoir comburivore			



Calculs ISO 8973 - GPL

Nom : Tendances

Sélection des pics
ISO 6976 / ASTM-GPA
Combustion
ISO 8973 - GPL

<input type="checkbox"/> Carbone Total	<input type="checkbox"/> Indice octane
<input type="checkbox"/> PCI MJ/kg	<input type="checkbox"/> PCS MJ/kg
<input type="checkbox"/> Masse vol. liquide	<input type="checkbox"/> Densité liquide
<input type="checkbox"/> Press. abs. vapeur @ 37.8°C	<input type="checkbox"/> Press. abs. vapeur @ 40°C
<input type="checkbox"/> Press. abs. vapeur @ 50°C	<input type="checkbox"/> Press. abs. vapeur @ 70°C
<input type="checkbox"/> Somme C3	<input type="checkbox"/> Somme C4
<input type="checkbox"/> Somme C5	<input type="checkbox"/> Somme Oléfines
<input checked="" type="checkbox"/> Température évaporation 95%	<input type="checkbox"/> Masse mol.

NOTE :

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

d) Retraitement par lot

Le retraitement par lot consiste à refaire les calculs d'intégration, identification ainsi que les calculs post-analyses pour plusieurs analyses à la fois. Une fois l'opération effectuée, le tableau de retraitement affichera les analyses avec les valeurs de résultats mises à jour. La fenêtre des tendances est également actualisée.

Résultats : 25/04/2018 16:36:14 -> 02/05/2018 13:40:26 - Concentration

Analyse	Date d'injection	Série	Méthode	Test (A)	Pic3 (A)
Analyse_001	25/04/2018 16:36	Analyse	test		
Analyse_005	26/04/2018 07:45	Ana			
Analyse_012	02/05/2018 13:09	Ana		0,080	12,683
Analyse_014	02/05/2018 13:40	Ana		0,091	12,815
Min				0,1	12,7
Avg				0,1	12,7
Max				0,1	12,8
Rsd (%)				0,639	0,730



La première étape consiste à sélectionner les analyses à retraiter, ensuite faire un clic droit sur les analyses et cliquer sur **Retraitement** (ou avec le menu **Résultats > Retraitement**).

Une fois le retraitement demandé, une fenêtre apparaîtra vous proposant de sélectionner une méthode d'intégration.

Lorsque la méthode a été choisie, chacune des analyses sera intégrée avec la méthode indiquée. Le tableau de retraitement et le graphique des tendances seront mis à jour.

A NOTER :

Si une analyse a été mise à jour dans la partie traitement (voir le chapitre [Traitement](#)), les résultats du tableau sont automatiquement mis à jour, il n'y aura pas besoin de refaire un retraitement pour actualiser les valeurs.

e) Etalonnage par retraitement

L'étalonnage par retraitement consiste à refaire les calculs **d'intégration, d'identification, d'étalonnage** ainsi que les **calculs post-analyses** pour plusieurs analyses à la fois. Une fois l'opération effectuée, le tableau d'étalonnage affichera les analyses avec les valeurs de résultats mises à jour. La fenêtre des tendances est également actualisée.

Résultats : 25/04/2018 16:36:14 -> 02/05/2018 13:40:26 - Concentration

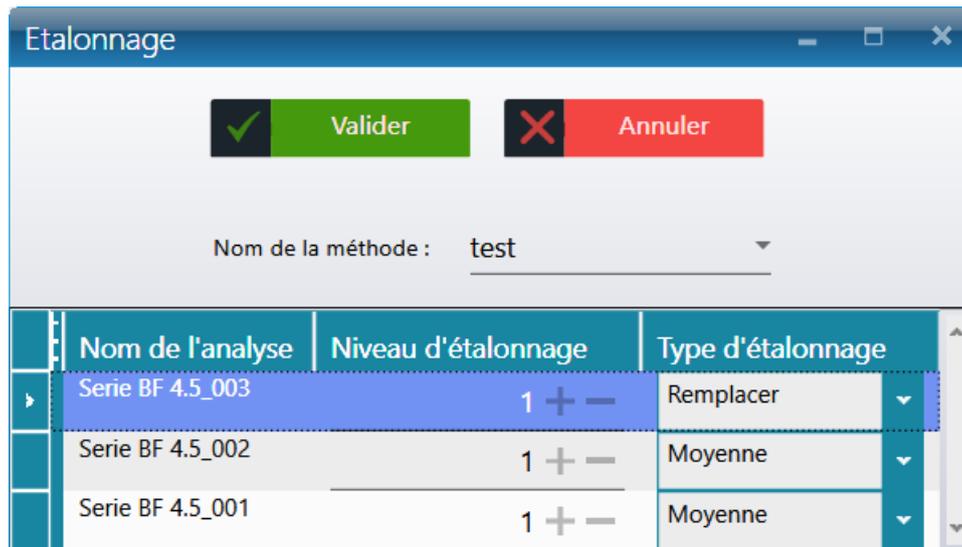
Analyse	Date d'injection	Série	Méthode	Test (A)	Pic3 (A)
Analyse_001	25/04/2018 16:36	Analyse	test		
Analyse_005	26/04/2018 07:45	Analyse	test		
Analyse_012	02/05/2018 13:09	Analyse			12,683
Analyse_014	02/05/2018 13:40	Analyse			12,815
Min					12,7
Avg					12,7
Max					12,8
Rsd (%)					0,730

Context menu options: Traitement par lot, Etalonnage par retraitement, Compare

La première étape consiste à sélectionner les analyses à étalonner, ensuite faire un clic droit sur les analyses et cliquer sur **Étalonnage par retraitement** (ou avec le menu **Résultats > Étalonnage par retraitement**).

Une fois l'étalonnage par retraitement demandé, la fenêtre suivante apparaîtra vous proposant de sélectionner une méthode d'intégration et pour chacune des analyses sélectionnées, de choisir le **niveau d'étalonnage** et le **type d'étalonnage** à effectuer.





Les différents types d'étalonnage sont :

- **Blanc** : L'analyse est définie comme étant un blanc à ignorer. Ceci permet le rinçage et l'attente de stabilisation après passage sur un nouvel étalon.
- **Remplacer** : Cette analyse remplace tout ce qui était connu pour ce niveau et constitue donc la première mesure d'une éventuelle série qui sera moyennée.
- **Moyenne** : Cette analyse est utilisée pour effectuer une moyenne avec les données connues pour ce niveau, de telle sorte que chaque mesure conserve la même importance.
- **Pondéré** : Cette analyse est utilisée pour effectuer une moyenne avec les données connues pour ce niveau, de telle sorte que chaque analyse compte autant que toutes celles qui l'on précédée.

Une fois validée, chacune des analyses sera étalonnée avec les paramètres demandés et la méthode indiquée. Le tableau d'étalonnage et le graphique des tendances seront mis à jour.

Pour plus d'informations concernant l'étalonnage, voir le chapitre [L'étalonnage](#).

A NOTER :

Si une analyse a été mise à jour dans la partie traitement (voir le chapitre [Traitement](#)), les résultats du tableau sont automatiquement mis à jour, il n'y aura pas besoin de refaire un étalonnage par retraitement pour actualiser les valeurs.

f) Actions rapides

Des actions rapides sont accessibles soit par le menu **Action** dans la page **Résultat**, ou par un clic droit au niveau du tableau de résultats.



Analyse	Série	Date d'injection	Type	Pic0 (A)	Pic1 (B)	Pic9 (B)	Niveau
		01/01/2015					
		26/10/2016					
Analyse_679	Analyse	29/08/2016 16:38	Remplacer	855,621	10,010	4,152	1
Analyse_678	Analyse	29/08/2016 16:34	Moyenne	855,945	10,030	4,203	1
Analyse			Moyenne	852,941	10,016	0,000	1
Analyse			Moyenne	843,707	10,012	5,148	1
Analyse			Moyenne	853,351	9,972	24,852	1
Analyse			Moyenne	853,556	10,108	3,951	1
Analyse			Moyenne	856,126	10,064	4,030	1
Min				843,7	10,0	0,0	
Avg				853,0	10,0	6,6	
Max				856,1	10,1	24,9	
Rsd (%)				0,507	0,439	123,989	

Traitement	
Traitement par lot	
Etalonnage par retraitement	
Compare	
Rapport	
Conditions d'analyse	Visualiser méthode
	Afficher la configuration
	Etalonnage de référence

Les différentes opérations sont :

- **Affichage du chromatogramme** : Ouvre le chromatogramme avec les paramètres d'intégration dans une autre fenêtre (le raccourci est un double-clic sur la ligne de résultat) (Disponible uniquement si un seul résultat est sélectionné)
- **Traitement** : Permet de charger l'analyse sélectionnée dans la partie traitement. (Disponible que si une seule analyse est sélectionnée, voir la rubrique [Traitement](#))
- **Traitement par lot** : Retraite chaque analyse sélectionnée avec une méthode spécifiée. (Voir la rubrique [Retraitement par lot](#)).
- **Étalonnage par retraitement** : Étalonne toutes les analyses sélectionnées avec une méthode spécifiée. (Voir la rubrique [Etalonnage par retraitement](#))
- **Compare** : Ouvre l'outil de comparaison d'analyses (Voir le chapitre [Comparaison des analyses](#)).
- **Rapport** : Affiche les différents choix rapports (Disponible que si une seule analyse est sélectionnée)
 - Rapport d'analyse : Affiche le rapport d'analyse (voir le chapitre [Rapport](#))
 - Rapport d'étalonnage : Affiche le rapport d'étalonnage (si un étalonnage a été effectué) (voir chapitre [Rapport d'étalonnage](#))
- **Condition d'analyses** : N'est disponible que si une seule analyse est sélectionnée, voici les différentes opérations possibles :
 - Permet d'afficher les paramètres de méthode d'injection.
 - Permet d'afficher la configuration de l'analyseur lors de l'injection.
 - Permet d'afficher la référence d'étalonnage (voir chapitre [Etalonnage de référence](#)).



4.5. Process

L'intégration d'un chromatogramme s'effectue dans le module Traitement, accessible via l'onglet "Traitement".

Voir les chapitres :

Gestion de l'intégration

Principe de l'intégration

Les événements agissant sur l'intégration

Détection des pics

Détection de pics négatifs

Valeur absolue de largeur de pic

Valeur absolue de seuil de sensibilité

Valeur relative de largeur de pic

Valeur relative de seuil de sensibilité

Forcer l'intégration

Les événements agissant sur la correction de la ligne de base

Détection de ligne de base

Forçage de ligne de base à la prochaine vallée

Forçage de ligne de base à toutes les vallées

Partage de ligne de base

Pénétration de ligne de base

Détection de pics sur épaulement

Regroupement de pics

Les événements de rejet

Aire minimale pour rejet

Aire maximale pour rejet

Hauteur minimale pour rejet

Hauteur maximale pour rejet

4.5.1. Principes

a) Intégration

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

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

L'intégration est réalisée en plusieurs étapes :

- D'abord, le signal est examiné pour détecter tous les points où il se passe "quelque chose". Il s'agit du début d'un pic, d'un sommet ou d'une fin. A ce moment, un tableau est mémorisé avec toutes les données concernant les pics détectés.



- Ensuite, ces pics détectés sont inspectés en détail en fonction de ce que l'utilisateur souhaite faire. Est-ce que le début ou la fin d'un pic doit être assimilé à la ligne de base ou à une vallée ? Faut-il regrouper le pic avec celui qui précède ou celui qui suit ? Où est-il pertinent de placer la ligne de base ? Doit-on rejeter le pic ? ...
- Enfin, tous les calculs permettant de déterminer la surface, la hauteur, le temps de début, la valeur de début, le temps de rétention, ... sont effectués et les résultats sont stockés dans une table de pics intégrés.

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

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

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

1. La détection des pics

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

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

A chaque fois que l'utilisateur autorise la détection des pics (programmation de l'évènement [Détection de pics](#)), ou modifie la largeur de pic (programmation de l'évènement [Valeur absolue de largeur de pic](#), ou de l'évènement [Valeur relative de largeur de pic](#)), ou modifie la sensibilité de pente (Programmation de l'évènement [Valeur absolue de seuil de sensibilité](#), ou de l'évènement [Valeur relative de seuil de sensibilité](#)) le système détermine la largeur des tranches regroupées et le nombre de ces tranches à utiliser lors des calculs.

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

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

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

Deux remarques :

- Le pic est supposé être une courbe de Gauss. Dans la plupart des cas, le pic est asymétrique. Si le pic est très asymétrique, le paramètre largeur de pic devra être réduit. Ce paramètre peut aussi être la valeur de temps séparant le début du sommet du pic.



- La valeur retenue peut être plusieurs fois plus grande ou plus petite que la valeur réelle. Le processus d'intégration est suffisamment souple pour conduire à un résultat correct à partir d'un paramètre approximatif.

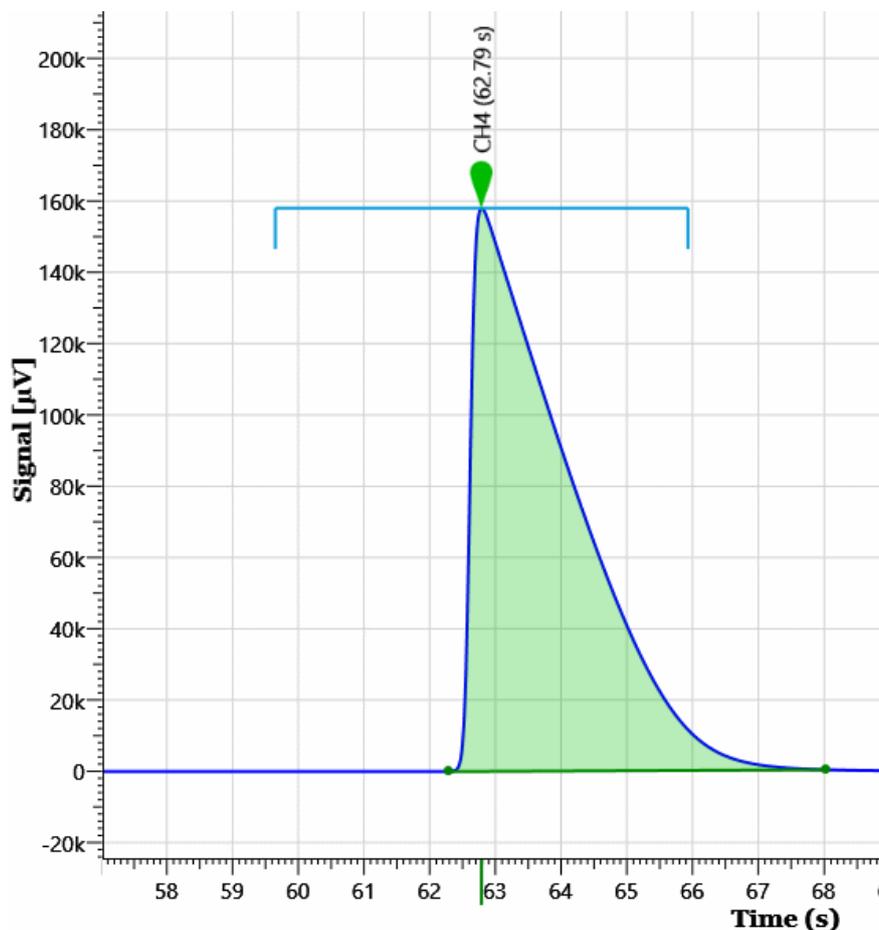
La valeur de seuil ou de sensibilité de pente doit correspondre à la réalité. Si cette valeur est trop élevée, les pics ne sont pas détectés ou la correction de ligne de base n'est pas satisfaisante. Si elle est trop faible, le bruit est intégré. Il est possible de déterminer une valeur approximative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

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

2. Intégration effectuée avec de mauvais paramètres

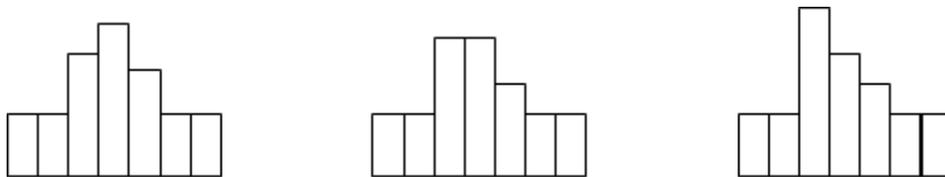
Nous souhaitons intégrer les pics du chromatogramme ci-dessous. Ils sont très asymétriques, et le pic référencé CH4 par exemple mesure une seconde à mi-hauteur mais il n'y a que 0,3 seconde pour aller du début au sommet du pic.

Ainsi, pour détecter correctement, avec la meilleure précision, la première partie de la courbe, la valeur de largeur de pic à utiliser pour le paramètre SAP devrait être de 0,3 secondes. Si le pic était symétrique, cette valeur serait de 1.5 seconde.

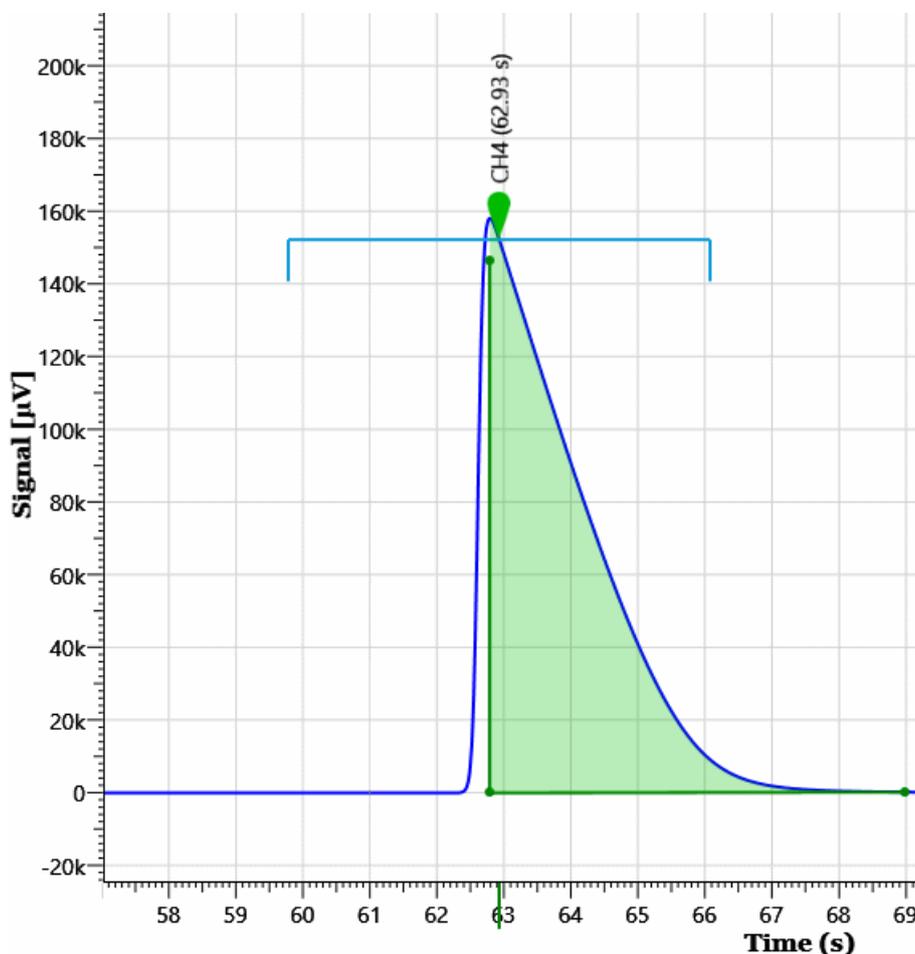


Supposons que l'on programme une valeur beaucoup plus grande, par exemple 4 secondes. Nous voulons détecter les pics, donc, deuxième erreur, on utilise la sensibilité la plus basse possible, soit 0,001 $\mu\text{V}/\text{S}$.

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



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



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



Nous utiliserons maintenant une valeur "acceptable" de 1.5 seconde comme paramètre [Valeur absolue de largeur de pic](#). Étant donné l'asymétrie, la meilleure valeur devrait être 0,3 secondes pour la première partie du pic (du début au sommet) et 2 secondes pour la seconde partie (du sommet à la fin). Une seconde paraît être un bon compromis, puisque, avec cette valeur, nous sommes assurés de disposer de 2 points au cours de la première partie du pic : après regroupement, la taille des tranches est environ 1/10ième de la valeur programmée comme largeur de pic.

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

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

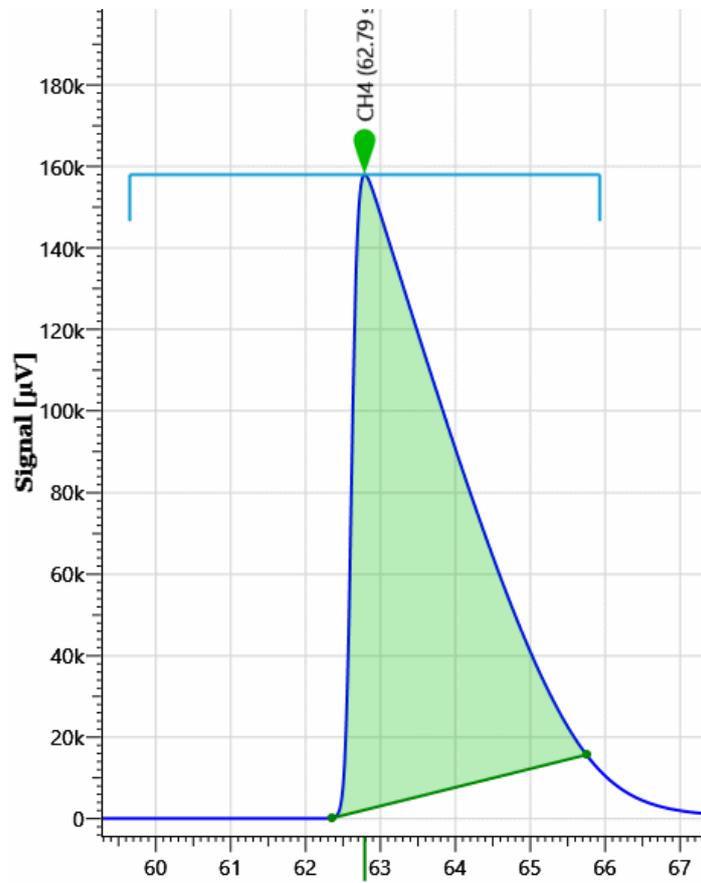
Le chromatogramme ci-après a été intégré avec ces valeurs.

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

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

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

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



Si l'analyseur utilise plusieurs flux et une large gamme de concentrations, nous devons ajuster le paramètre de sensibilité de pente de manière à avoir une bonne détection des pics dans tous les cas de figure. Des valeurs autres de concentrations et surtout de rapports de concentrations impliquent des pics pouvant avoir des allures différentes, et nous devons prendre en compte ces modifications.

Pour obtenir une bonne intégration, il est nécessaire de modifier les valeurs de largeur de pic et de seuil de sensibilité au cours de l'analyse. Cela est obtenu en programmant des événements. Certains événements concernent la détection des pics, d'autres le mode de correction de ligne de base et les derniers servent à rejeter des pics.

Voir les chapitres :

[Les événements agissant sur l'intégration](#)

[Détection de pics](#)

[Détection de pics négatifs](#)

[Valeur absolue de largeur de pic](#)

[Valeur absolue de seuil de sensibilité](#)

[Valeur relative de largeur de pic](#)

[Valeur relative de seuil de sensibilité](#)

[Forcer l'intégration](#)

[Les événements agissant sur la correction de la ligne de base](#)

[Détection de ligne de base](#)

[Forçage de ligne de base à la prochaine vallée](#)

[Forçage de ligne de base à toutes les vallées](#)

[Partage de ligne de base](#)

[Pénétration de ligne de base](#)

[Détection de pics sur épaulement](#)

[Regroupement de pics](#)

[Les événements de rejet](#)

[Aire minimale pour rejet](#)

[Aire maximale pour rejet](#)

[Hauteur minimale pour rejet](#)

[Hauteur maximale pour rejet](#)

a) 1. Les événements agissant sur l'intégration

Voir les chapitres :

[Détection de pics](#)

[Détection de pics négatifs](#)

[Valeur absolue de largeur de pic](#)

[Valeur absolue de seuil de sensibilité](#)

[Valeur relative de largeur de pic](#)

[Valeur relative de seuil de sensibilité](#)

[Forcer l'intégration](#)

Détection de pics

Parce qu'il n'est pas nécessaire d'intégrer tous les pics, depuis le début de l'injection jusqu'à la fin de l'analyse et parce que des pics parasites peuvent être la conséquence de la commutation d'une vanne, par exemple, un événement permet de désactiver l'intégration. Par défaut, l'intégration est active.

Attention, le logiciel considère être à la ligne de base lorsque l'intégration devient autorisée ou lorsqu'elle



devient interdite, et une partie du pic qui se trouverait avant ou après serait simplement ignorée.

Détection de pics négatifs

Il arrive qu'un pic soit négatif, et dans ce cas la logique de travail doit être inversée. L'événement Détection de pics négatif permet de remplir ce rôle. Par défaut, l'événement est désactivé et le logiciel attend des pics positifs.

Attention, cet événement vient en complément de l'événement autorisant l'intégration. Pour éviter des interprétations non souhaitées si le signal n'est pas à l'état "ligne de base" lorsque l'on inverse la logique de travail, il est souvent préférable d'interdire l'intégration (ce qui force la reconnaissance de la ligne de base), d'inverser la logique, puis de ré-autoriser l'intégration.

Valeur absolue de largeur de pic

Cet événement est la valeur de largeur de pic exprimée en secondes utilisée pour détecter les pics. La valeur programmée prend effet immédiatement et jusqu'à ce qu'une autre valeur la remplace. Par défaut, le logiciel utilise une valeur de 0,5 secondes.

Valeur absolue de seuil de sensibilité

Cet événement correspond à la pente exprimée en $\mu\text{V/s}$ et permet de fixer le seuil de détection des éléments significatifs (début ou fin de pic, sommet ou vallée, épaulement). Par défaut, le logiciel utilise une valeur de 5 $\mu\text{V/S}$.

Valeur relative de largeur de pic

La largeur des pics augmente à mesure que le temps de rétention augmente. L'intérêt est assez limité mais, au lieu de gérer plusieurs événements, on peut chercher à affiner un premier événement puis considérer qu'à un temps donné on doublera sa valeur, qu'à un autre temps on multipliera encore par deux, ... L'événement Valeur relative de largeur de pic permet, lorsqu'il est programmé actif, de doubler la valeur de largeur de pic. Il permet, lorsqu'il est programmé inactif, de diviser par deux la valeur de largeur de pic.

Valeur relative de seuil de sensibilité

Similairement, si la largeur des pics augmente, la pente varie elle aussi.

L'événement Valeur relative de seuil de sensibilité permet, lorsqu'il est programmé actif, de doubler la valeur de pente absolue. Il permet, lorsqu'il est programmé inactif, de diviser par deux la valeur de pente absolue.

Forcer l'intégration

Dans de très nombreux cas, on n'effectuera pas uniquement une analyse d'un échantillon isolé. Très souvent, l'analyseur fonctionnera en continu pour suivre l'évolution des concentrations d'un ou de plusieurs flux.

Les valeurs des paramètres seront alors définies pour permettre l'intégration de mélanges pouvant être très différents, avec des temps de rétention qui vont fluctuer, avec des pics qui seront plus ou moins bien séparés, avec des rapports d'asymétrie des pics qui pourront évoluer.

Certains cas de figure, notamment les pics fortement asymétriques et les faibles concentrations, peuvent montrer les limites de l'intégration : le nombre de points n'est pas suffisant pour caractériser quelque chose.

Un moyen de s'en sortir consiste à forcer l'intégration. Les mécanismes décrit précédemment restent actifs, mais comme le logiciel sait qu'il y a de très fortes chances pour qu'un pic soit présent il est beaucoup plus tolérant et conclut à la présence d'un pic dès qu'il voit des variations de niveau.

L'événement **Forcer l'intégration** permet de délimiter une fenêtre de temps où l'intégration est facilitée.



Un pic en cours d'intégration est stoppé lorsque l'on entre dans une telle fenêtre. De même, on impose la fin d'un éventuel pic en cours de traitement lorsque l'on ressort de la fenêtre.

Attention : si la largeur de pic permet déjà une intégration relativement facile, l'utilisation de l'événement **Forcer l'intégration** fait que l'on détectera les moindres variations comme autant de pics mal séparés. Lorsque l'on utilise l'événement **Forcer l'intégration**, il peut être nécessaire d'augmenter la valeur de largeur de pic de manière à limiter ce phénomène.

a) 2. Correction de ligne de base

[Détection de ligne de base](#)

[Forçage de ligne de base à la prochaine vallée](#)

[Forçage de ligne de base à toutes les vallées](#)

[Partage de ligne de base](#)

[Pénétration de ligne de base](#)

[Détection de pics sur épaulement](#)

[Regroupement de pics](#)

Détection de ligne de base

Cet évènement possède 2 états ON et OFF.

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

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

Le retour à la ligne de base ne peut donc survenir qu'après la deuxième utilisation du paramètre.

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

Forçage de ligne de base à la prochaine vallée

Cette fois-ci, il s'agit d'un forçage.

La première vallée qui suit le temps auquel cet évènement est programmé est considérée comme la ligne de base.

Forçage de ligne de base à toutes les vallées

Cet autre forçage permet d'imposer, sur la fenêtre de temps où il est actif, que toutes les vallées soient traitées comme des passages par la ligne de base.

L'évènement est inactif par défaut.

Partage de ligne de base

Cet évènement permet d'imposer une ligne de base commune pour l'ensemble des pics situés dans une fenêtre de temps où il est actif.

L'évènement est inactif par défaut.

Pénétration de ligne de base

Normalement, la ligne de base est tangente à un pic isolé ou à un massif et le pic ou le massif se trouve intégralement d'un seul côté de la ligne de base.

Un pic situé dans la fenêtre de temps où l'évènement Pénétration de ligne de base est actif peut avoir son



début et sa fin de part et d'autre de la ligne de base.

Attention, dans un tel cas de figure, la partie située sous la ligne de base est retirée de la partie située au-dessus.

L'événement est inactif par défaut.

Détection de pics sur épaulement

Un pic peut également être appuyé à un autre. On parle alors de pic sur épaulement.

La pente peut croître, par exemple, continuer à croître plus lentement ou même s'annuler puis recroître de nouveau pour atteindre un sommet. Il n'y a ni décroissance ni vallée pour séparer les deux pics, juste un point d'inflexion. Un phénomène similaire peut également se produire sur la pente décroissante d'un pic.

L'événement Détection de pics sur épaulement permet la détection de ce genre de phénomène à l'intérieur de la fenêtre de temps où il est actif.

L'événement est inactif par défaut.

Regroupement de pics

Cet événement permet de définir une fenêtre de temps où tous les pics, isolés ou non, seront regroupés en un seul pic pour le calcul des coefficients de réponse ou le calcul de la concentration.

La surface du groupe de pics sera égale à la somme des surfaces individuelles. La hauteur du groupe de pics sera égale à la somme des hauteurs individuelles. Le temps de rétention du groupe de pics sera égal à la demi-somme temps de début de fenêtre plus temps de fin de fenêtre ou de fin d'analyse. Ces valeurs seront arbitrairement attribuées au pic le plus proche du temps de rétention ainsi déterminé. Pour assurer l'identification, il suffira de prendre le temps milieu et une fenêtre permettant de couvrir toute la zone. Un pic détecté au début, au milieu ou à la fin de la fenêtre sera ainsi reconnu.

L'événement est inactif par défaut.

a) 3. Les événements de rejet

Malgré toutes les précautions, on pourrait détecter des pics là où il n'y a que du bruit de fond ou un parasite. Il peut être intéressant d'ignorer les pics qui ne répondent pas à l'un des critères suivants.

Voir les chapitres suivants :

[Aire minimale pour rejet](#)

[Aire maximale pour rejet](#)

[Hauteur minimale pour rejet](#)

[Hauteur maximale pour rejet](#)

Aire minimale pour rejet

Un pic est rejeté si sa surface est inférieure à la valeur que possède cet événement au temps trouvé comme temps de rétention.

La valeur par défaut est de 0.

Aire maximale pour rejet

Un pic est rejeté si sa surface est supérieure à la valeur que possède cet événement au temps trouvé comme temps de rétention.

La valeur par défaut est de 10 puissances 100.

Hauteur minimale pour rejet

Un pic est rejeté si sa hauteur est inférieure à la valeur que possède cet événement au temps trouvé comme



temps de rétention.

La valeur par défaut est de 0.

Hauteur maximale pour rejet

Un pic est rejeté si sa hauteur est supérieure à la valeur que possède cet événement au temps trouvé comme temps de rétention.

La valeur par défaut est de 10 puissances 100.

b) Identification

L'identification est le processus qui permet de dire qu'un pic correspond à un constituant.

L'identification repose sur le temps de rétention et une fenêtre d'identification.

La fenêtre d'identification est définie à partir d'un intervalle de temps situé de part et d'autre du temps de rétention et pouvant être constitué d'une partie constante (fenêtre fixe) et d'une partie proportionnelle au temps de rétention (fenêtre variable ou fenêtre %).

Supposons un pic attendu au temps de rétention de 50 secondes avec une fenêtre fixe de 2 secondes et une fenêtre variable de 10 %.

L'intervalle de temps sera égal à 2 secondes plus 10% de 50 secondes, soit un total de 7 secondes et tout pic dont le temps de rétention réel est compris entre 43 secondes et 57 secondes pourrait être identifié comme correspondant au pic attendu.

Le problème de l'identification consiste à choisir quel pic prendre lorsque plusieurs candidats possibles se trouvent à l'intérieur de la fenêtre d'identification.

Le logiciel admet un maximum de 10 pics à l'intérieur d'une fenêtre d'identification.

Il tient compte également de l'ordre dans lequel les pics sont attendus. Supposons un pic A déjà identifié et la recherche d'un pic B dans une fenêtre comportant plusieurs pics dont le pic A. Si le temps de rétention attendu du pic B est inférieur (supérieur) à celui du pic A, la recherche à l'intérieur de la fenêtre se limitera aux pics dont le temps de rétention réel est inférieur (supérieur) à celui du pic A.

b) 1. Pics références

L'identification peut être rendue plus difficile parce que les temps de rétention fluctuent, ce qui oblige à choisir des fenêtres d'identification plus larges.

C'est vrai, mais souvent les temps de rétention fluctuent de la même manière pour tous les pics et l'analyse comporte un ou plusieurs pics faciles à identifier parce que correctement isolé(s).

Cette remarque est également vraie dans le cas de colonnes nécessitant des régénérations régulières. Dans ce cas on agrandit les fenêtres d'identification pour compenser la dérive progressive des valeurs.

Il est pratique d'utiliser une fenêtre large pour identifier un pic isolé (on pourra également forcer l'identification de ce pic, comme on le verra plus tard), de définir ce pic comme pic référence (on lui attribue une lettre de A à Z pour le représenter), puis de dire que certains autres pics utilisent ce pic référence (on rappelle l'identifiant A à Z). Dans ce cas, le logiciel considère que les temps de rétention se décalent de la même manière et le pic référencé sera recherché dans une fenêtre centrée sur un temps égal au temps de rétention attendu pour ce pic, divisé par le temps de rétention attendu pour le pic référence et multiplié par le temps de rétention trouvé pour le pic référence. Ceci permet d'utiliser des fenêtres de recherche plus étroites, donc de réduire le nombre de pics susceptibles de se trouver dans une fenêtre de recherche.

Bien que cela n'apporte pas grand-chose, un pic peut utiliser comme référence un pic qui utilise lui-même un pic référence qui utilise lui-même ... et ainsi de suite.



Au cas où plusieurs références seraient utilisées, le processus d'identification part du principe qu'un même pic ne pourrait pas se trouver dans la fenêtre de recherche de plusieurs pics référence (pics référence suffisamment distincts les uns des autres) et l'attribution des pics se fait dans l'ordre de traitement sans gérer ce type d'erreur.

Le programme d'identification signale une erreur en cas de bouclage menant à une impossibilité de traitement, du type pic x sert de référence pour le pic y qui sert de référence pour le pic x. L'erreur est signalée mais elle n'entraîne pas de blocage et les pics concernés sont identifiés comme des pics normaux.

Si un pic est défini comme référence mais n'est pas utilisé en tant que tel, il sera simplement identifié en priorité selon le processus d'identification des pics référence, sans que cela conduise à une erreur.

De même, si un pic utilise une référence non définie, la référence sera ignorée sans que l'erreur ne soit signalée.

b) 2. Forçages

Lorsque plusieurs pics sont présents dans une fenêtre de recherche, le logiciel calcule une note tenant compte de l'importance du pic (pic majoritaire) et une de sa position dans la fenêtre (pic le plus proche du centre) puis il prend le pic dont la somme des 2 notes est la plus élevée.

Le forçage d'identification consiste à ignorer un des deux processus.

Le champ de la table des constituants permettant de définir le forçage a la valeur 0 en l'absence de forçage (valeur par défaut), la valeur 1 pour forcer le pic le plus important ou 2 si on veut forcer le pic le plus proche du centre.

1. Le pic le plus important

Lorsque les pics sont suffisamment séparés, on peut espérer n'avoir qu'un pic par fenêtre et considérer que les autres pics ne sont que des traces ou du bruit. Il apparaît logique de dire que le pic principal est le produit à identifier.

Cette façon de procéder peut entraîner des erreurs si on travaille en hauteur de pic. Un parasite peut avoir une hauteur importante, plus importante même que celle du produit analysé, tout en ayant une surface très faible.

Si les pics ne sont pas suffisamment isolés, et si les temps de rétention ont tendance à fluctuer, les fenêtres d'identification de deux constituants voisins peuvent se chevaucher et une même fenêtre peut comporter des pics de hauteurs ou de surfaces similaires.

Le champ de la table des constituants permettant de définir le forçage a la valeur 1 si on veut forcer le pic le plus important.

2. Le pic le plus proche du centre

Cette autre façon de procéder consiste à considérer que l'on connaît précisément le temps de rétention des constituants et que le pic le plus proche du centre de la fenêtre (donc du temps auquel on l'attend) est le meilleur candidat.

Cela paraît logique mais ne tient pas compte du fait que le temps de rétention d'un produit est modifié par la concentration des constituants ayant un temps de rétention proche : un produit en forte concentration a tendance à repousser un produit en plus faible concentration.

Le champ de la table des constituants permettant de définir le forçage a la valeur 2 si on veut forcer le pic le



plus proche du centre.

b) 3. Cas général

Faire la synthèse de ces deux conceptions, c'est dire qu'elles existent l'une et l'autre et qu'il est préférable de les utiliser toutes les deux.

Lorsque plusieurs pics sont présents dans une fenêtre, on détermine pour chacun d'eux une note fonction de sa taille et une note fonction de son écart par rapport au centre de la fenêtre et on utilise la somme de ces deux notes pour choisir le pic à identifier.

La note liée à la taille est obtenue en recherchant le pic principal et en divisant la hauteur ou la surface de chacun des pics par la hauteur ou la surface du pic majoritaire. Les notes obtenues sont donc comprises entre 0 et 1.

La note liée à la position par rapport au centre de la fenêtre est obtenue en divisant le plus court écart entre le milieu de la fenêtre et un sommet par l'écart réel entre le milieu de la fenêtre et le sommet de chaque pic. Là aussi, on obtient une note comprise entre 0 et 1.

Le pic ayant la somme la plus élevée sera le pic important situé près du centre de la fenêtre.

b) 4. Optimisation du processus

Les identifications des pics référence et des pics avec forçage se font par temps croissants.

Le programme d'identification commence par identifier les pics référence, en gérant un éventuel niveau de référence (pic référence qui utilise un pic référence, qui utilise ...). Les pics référence peuvent être identifiés avec ou sans forçage.

Les pics avec forçage non définis comme pics référence sont identifiés ensuite.

Les pics restants sont identifiés ensuite de manière globale. Après avoir défini la note de chaque pic de chaque fenêtre, le programme calcule toutes les combinaisons possibles en respectant l'ordre des pics, y compris celui des pics déjà identifiés.

Le programme retient alors la combinaison dont la note résultante (somme des notes individuelles) est la plus élevée.

c) Etalonnage

Soprane II offre plusieurs possibilités d'étalonnage :

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

L'application **Configuration**



permet de définir le nombre total de flux ainsi que le nombre de flux d'étalonnage.



1. Etalonnage manuel

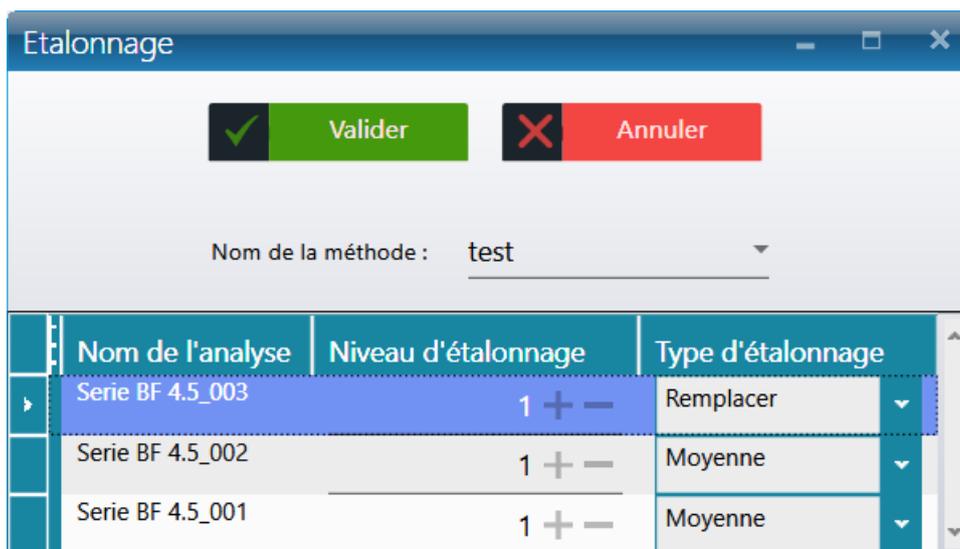
L'étalonnage manuel consiste à modifier directement les coefficients de réponse de la méthode par le module de traitement. Il suffit donc de lancer l'interface de traitement, de charger une analyse réalisée sur le gaz étalon et de charger la méthode associée à cette analyse, de sélectionner le module analytique, de sélectionner l'affichage dans le mode Calibration (voir chapitre [Table d'étalonnage](#)), de sélectionner le composant et de renseigner directement la valeur de la surface. Vous pouvez récupérer la valeur de cette surface dans l'affichage Table résultats (voir chapitre [Résultats d'analyse](#)).

2. Etalonnage par retraitement

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

L'étalonnage par retraitement est accessible dans Soprane II dans l'onglet "Analyses" par le menu "Étalonnage / Étalonnage par retraitement".

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



Pour chaque analyse, le logiciel vous demande quel type d'action vous voulez réaliser et sur quel niveau. Il existe 4 types d'actions pour l'étalonnage :

- **Remplace** : Les coefficients de réponse stockés dans la méthode sont remplacés par les coefficients calculés au cours de cette analyse.
- **Moyenne** : Le logiciel effectue une moyenne entre les coefficients de réponse stockés dans la méthode et ceux obtenus au cours de cette analyse. Le résultat de cette moyenne est ensuite stocké dans la méthode. (Moyenne arithmétique).
- **Pondérer** : Le logiciel effectue une moyenne entre les coefficients de réponse stockés dans la méthode et ceux obtenus au cours de cette analyse en pondérant moins lourdement les anciens coefficients. Le résultat de cette moyenne est ensuite stocké dans la méthode. (Moyenne géométrique).



- **Blanc** : Aucune modification des coefficients de réponse n'est effectuée. Ce type d'analyse est utilisé pour purger les lignes ou pour effectuer des vérifications d'étalonnage sans modifier la méthode.

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

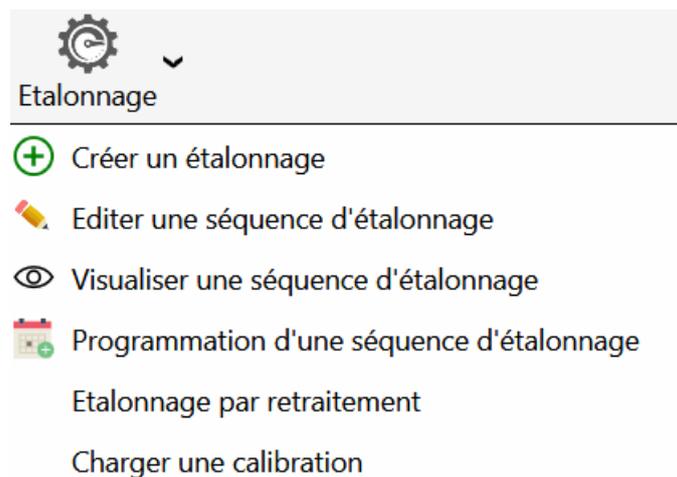
Vous pouvez ensuite afficher le rapport d'étalonnage si vous sélectionnez une seule analyse, faites un clic droit et sélectionnez le menu "**Rapport> Rapport d'étalonnage**".

La méthode est sauvegardée automatiquement.

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

3. Etalonnage automatique

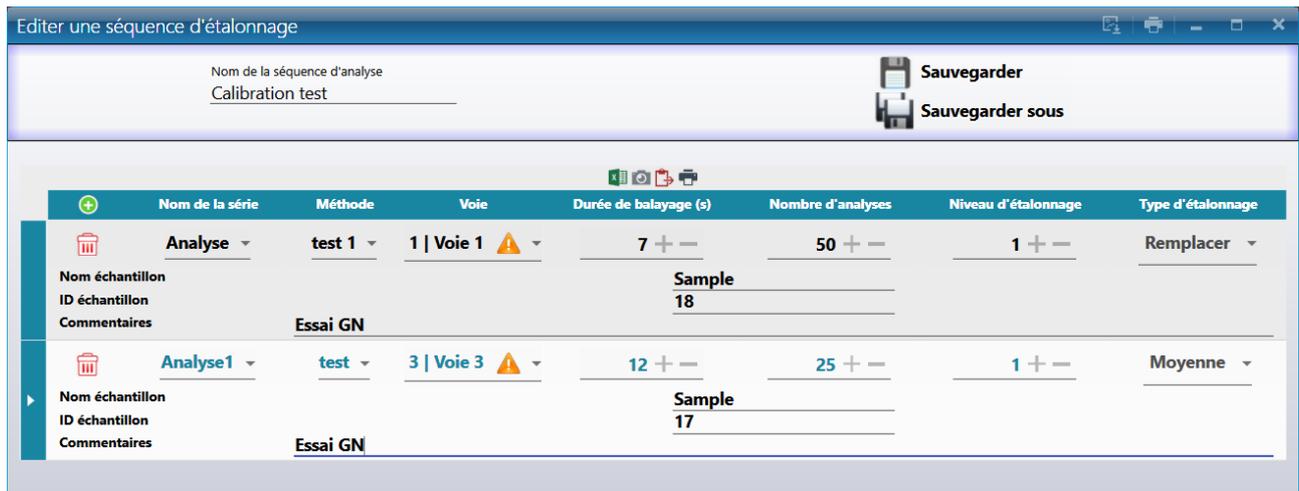
Nous avons indiqué au chapitre [Gestion des séquences d'analyse](#) comment définir une séquence d'analyses. De la même façon nous pouvons définir une séquence d'étalonnage (voir chapitre [Gestion des séquences d'étalonnage](#)). Ce type d'étalonnage est utilisé principalement lorsque l'appareil est doté d'un sélecteur de voies.



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

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

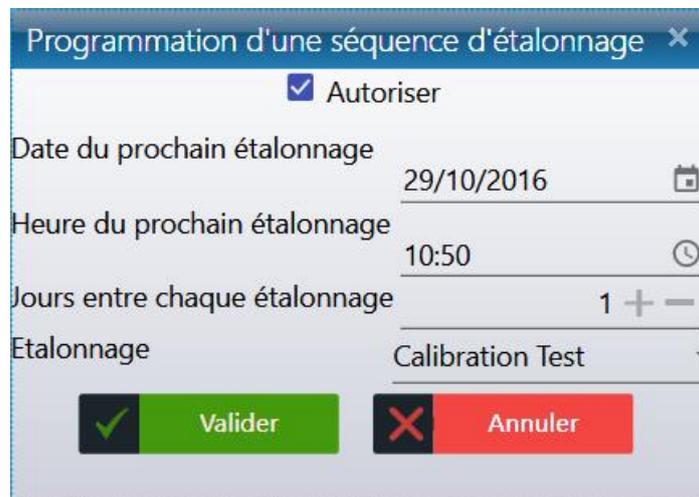




Par rapport à la table de séquence d'analyses, deux colonnes sont ajoutées. La première, type, est utilisée pour définir quel type d'action sera utilisée pour le nouvel étalonnage. La seconde est le niveau d'étalonnage, nécessaire lorsque plusieurs points servent à définir une courbe de réponse.

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

Le sous-menu "Étalonnage / Programmation d'un étalonnage" permet de définir une demande de calibration automatique et, dans ce cas, la fréquence des étalonnages.



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

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



4. Etalonnage par le menu Lancement

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

5. Niveaux d'étalonnage

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

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

En règle générale : 1 Niveau = 1 bouteille

L'historique des étalonnages a pu être visualisé (voir chapitre [Historique d'étalonnages](#)).

c) 1. Principe de l'étalonnage

La chromatographie est une méthode d'analyse qui procède par comparaison : on analyse une quantité connue d'un produit et on mesure la surface ou la hauteur du pic qui y correspond. Lorsque l'on procède à l'analyse d'une quantité non connue du même produit, on effectue l'opération inverse : on mesure la surface ou la hauteur du pic et on en déduit la quantité.

La question principale est donc de savoir comment le détecteur se comporte lorsqu'un constituant le traverse.

Le TCD (Thermal Conductivity Detector), ou le μ TCD dans le cas des μ GC, offre l'avantage d'être un détecteur très linéaire sur une large gamme de concentrations.

Le FID (Flame Ionization Detector) reste un détecteur dont la réponse est linéaire mais sur une gamme de concentrations plus restreinte.

Dans de nombreux cas, on pourra assimiler la réponse du détecteur à une droite passant par l'origine. Il sera parfois nécessaire de considérer que la réponse est une droite ne passant pas par l'origine ou qu'il s'agit d'une courbe.

Il sera toujours préférable d'utiliser un ou plusieurs étalons dont la ou les concentration(s) sont proche(s) de la quantité que l'on souhaite analyser.



c) 2. Choix d'une courbe de réponse

Un ou plusieurs étalons sont nécessaires pour étalonner un analyseur et un étalon donné peut ne pas contenir tous les constituants analysés sur un appareil.

SOPRANE II parle de "niveaux d'étalonnage" et une méthode de calculs devra définir tous les niveaux utilisables en précisant pour chaque constituant s'il est ou non présent à un niveau donné, et si oui, en quelle quantité.

Pour un constituant donné, une séquence d'étalonnage devra faire appel à un nombre minimum de niveaux utilisés fonction de l'équation souhaité pour la courbe de réponse.

Il faut ainsi un point pour définir une droite passant par l'origine, 2 points pour définir une droite quelconque, et ainsi de suite.

Un nombre de points supérieur au minimum permettra une amélioration de la réponse avec recherche de la courbe optimale selon un processus à définir.

L'équation de la courbe de réponse donnée par SOPRANE II représente toujours la surface ou la hauteur du pic exprimée en fonction de la concentration.

Droite passant par l'origine :

Il n'y a qu'une inconnue et un seul niveau d'étalon est exigé.

Droite ne passant pas par l'origine :

Il y a 2 inconnues et deux niveaux sont nécessaires.

Droite ne passant pas par l'origine complétée par une droite passant par l'origine pour les valeurs de concentration inférieures à la plus basse concentration utilisée lors de l'étalonnage :

Il y a 2 inconnues et deux niveaux sont nécessaires.

Quadratique (courbe de degré 2) :

Il y a 3 inconnues et trois niveaux sont nécessaires.

Cubique (courbe de degré 3) :

Il y a 4 inconnues et quatre niveaux sont nécessaires.

Courbe de degré 4 :

Il y a 5 inconnues et cinq niveaux sont nécessaires.

Exponentielle :

Il y a 2 inconnues et deux niveaux sont nécessaires.

Logarithmique :

Il y a 2 inconnues et deux niveaux sont nécessaires.

Optimisation de la réponse :

Si, pour un constituant donné, on utilise un nombre de niveaux supérieur au nombre minimum requis, SOPRANE II utilisera tous les points et définira la réponse optimale en appliquant la méthode des moindres carrés.

L'utilisateur a le choix de définir la grandeur à utiliser pour cette optimisation.

La correction est définie par :



- Égale : l'importance des points est la même,
- Quantité : l'importance des points est proportionnelle à la quantité de produit,
- Quantité inversée : l'importance des points est inversement proportionnelle à la quantité de produit,
- Quantité carrée : l'importance des points est proportionnelle au carré de la quantité de produit,
- Quantité carré inversée : l'importance des points est inversement proportionnelle au carré de la quantité de produit,
- Logarithme de la quantité : l'importance des points est proportionnelle au logarithme de la quantité de produit,
- Logarithme de la quantité inversé : l'importance des points est inversement proportionnelle au logarithme de la quantité de produit,
- Logarithme de la quantité au carré : l'importance des points est proportionnelle au carré du logarithme de la quantité de produit,
- Logarithme de la quantité au carré inversé : l'importance des points est inversement proportionnelle au carré du logarithme de la quantité de produit.

c) 3. Rejet de l'étalonnage

L'étalonnage d'un analyseur peut être lourd de conséquences, en particulier s'il s'agit d'un étalonnage réalisé automatiquement. SOPRANE II a donc prévu la possibilité de valider un minimum de choses et, éventuellement, de rejeter l'étalonnage d'un ou plusieurs constituants.

Dans le cas général, une séquence d'étalonnage fait appel à plusieurs mesures réalisées sur un ou plusieurs étalons.

Pour chaque analyse de chaque étalon (SOPRANE II parle de niveaux d'étalonnage, utilisés ou pas pour un constituant donné, pour définir les étalons), il est possible de préciser la manière dont le résultat de la mesure doit être utilisé.

Chaque mesure peut être qualifiée de :

- Blanc : L'analyse est définie comme étant un blanc à ignorer. Ceci permet le rinçage et l'attente de stabilisation après passage sur un nouvel étalon.
- Remplacer : Cette analyse remplace tout ce qui était connu pour ce niveau et constitue donc la première mesure d'une éventuelle série qui sera moyennée.
- Moyenne : Cette analyse est utilisée pour effectuer une moyenne avec les données connues pour ce niveau, de telle sorte que chaque mesure conserve la même importance.
- Pondéré : Cette analyse est utilisée pour effectuer une moyenne avec les données connues pour ce niveau, de telle sorte que chaque analyse compte autant que toutes celles qui l'ont précédées.

Lorsque l'on réalise un étalonnage automatique (lancement d'une séquence d'étalonnage) ou un étalonnage par retraitement de plusieurs analyses mémorisées, on impose un processus qui permettra de calculer des équations de réponse uniquement lorsque la dernière analyse du dernier niveau aura été traitée. C'est uniquement à ce stade que SOPRANE II envisagera de vérifier, constituant par constituant, la validité de l'étalonnage selon la déviation maximale renseignée par l'utilisateur pour ce constituant.

4 cas sont envisageables :

- La variation maximale autorisée est de 0%. Une déviation nulle n'a aucun sens, mais cette valeur de déviation de 0% permet d'indiquer qu'aucune validation des résultats n'est à effectuer. Cette valeur est à utiliser lorsque la méthode n'a jamais été étalonnée ou lorsque l'on sait que l'étalonnage précédent ne peut pas constituer une référence fiable.
- La variation maximale autorisée est de x% et l'écart entre le résultat de l'étalonnage et les données



mémorisées lors de l'étalonnage précédent est inférieur à x%. L'étalonnage de ce constituant est validé. Les données précédentes sont perdues et remplacées par les données de l'étalonnage que l'on vient de réaliser.

- La variation maximale autorisée est de x%, l'écart entre le résultat de l'étalonnage et les données mémorisées lors de l'étalonnage précédent est supérieur à x% et les quantités d'étalon présentes aux niveaux pour lesquels ce "défaut" est observé ne sont pas les mêmes que lors de l'étalonnage précédent (variation de la quantité supérieure à 1%). Rien ne permet de conclure à un manque de reproductibilité, mais on peut se poser la question. SOPRANE II accepte l'étalonnage de ce constituant mais signale le problème pour que l'utilisateur puisse refaire un étalonnage si nécessaire.
- La variation maximale autorisée est de x%, l'écart entre le résultat de l'étalonnage et les données mémorisées lors de l'étalonnage précédent est supérieur à x% et les quantités d'étalon présentes aux niveaux pour lesquels ce "défaut" est observé sont les mêmes que lors de l'étalonnage précédent. La variation de réponse est anormale et SOPRANE II rejette l'étalonnage. Le rejet est signalé et SOPRANE II continue à travailler avec les valeurs de l'étalonnage précédent.

Un autre contrôle de validité est effectué ensuite pour confirmer que la courbe de réponse de chaque constituant est une fonction croissante.

SOPRANE II effectue donc, lorsque c'est nécessaire, une vérification de cette croissance entre les valeurs de concentrations minimale et maximale utilisées pour réaliser l'étalonnage, mais aussi entre zéro et la plus faible valeur de concentration ou entre la plus forte valeur de concentration et 10 fois cette valeur. Un éventuel défaut, dont la probabilité est extrêmement faible, sera signalé mais n'entraînera pas le rejet de l'étalonnage.

c) 4. Etalonnage de référence

L'étalonnage de référence est le dernier étalonnage utilisé pour obtenir les résultats actuels.

L'étalonnage de référence est disponible de plusieurs manières.

La première provient du tableau des résultats (ou du retraitement / étalonnage). Sélectionnez une seule analyse et faites un clic droit. Développez "**Conditions d'analyse**" et sélectionnez "**Étalonnage de référence**"



Analyse	Série	Date d'injection	Type	Pic0 (A)	Pic1 (B)	Pic9 (B)	Niveau
		01/01/2015					
		26/10/2016					
Analyse_679	Analyse	29/08/2016 16:38	Remplacer	855,621	10,010	4,152	1
Analyse_678	Analyse	29/08/2016 16:34	Moyenne	855,945	10,030	4,203	1
Analyse_677	Analyse	29/08/2016 16:34	Moyenne	852,941	10,016	0,000	1
Analyse_676	Analyse	29/08/2016 16:34	Moyenne	843,707	10,012	5,148	1
Analyse_675	Analyse	29/08/2016 16:34	Moyenne	853,351	9,972	24,852	1
Analyse_674	Analyse	29/08/2016 16:34	Moyenne	853,556	10,108	3,951	1
Analyse_673	Analyse	29/08/2016 16:34	Moyenne	856,126	10,064	4,030	1
Min				843,7	10,0	0,0	
Avg				853,0	10,0	6,6	
Max				856,1	10,1	24,9	
Rsd (%)				0,507	0,439	123,989	

Traitement
Traitement par lot
Etalonnage par retraitement
Compare
Rapport
Conditions d'analyse
Visualiser méthode
Afficher la configuration
Etalonnage de référence

La deuxième façon d'accéder est à partir de l'onglet **Traitement**. Sélectionnez le menu "**Étalonnage**" et cliquez sur "**Étalonnage de référence**".

Sur le premier onglet, une table de résultats sera visualisée :

Reference calibration

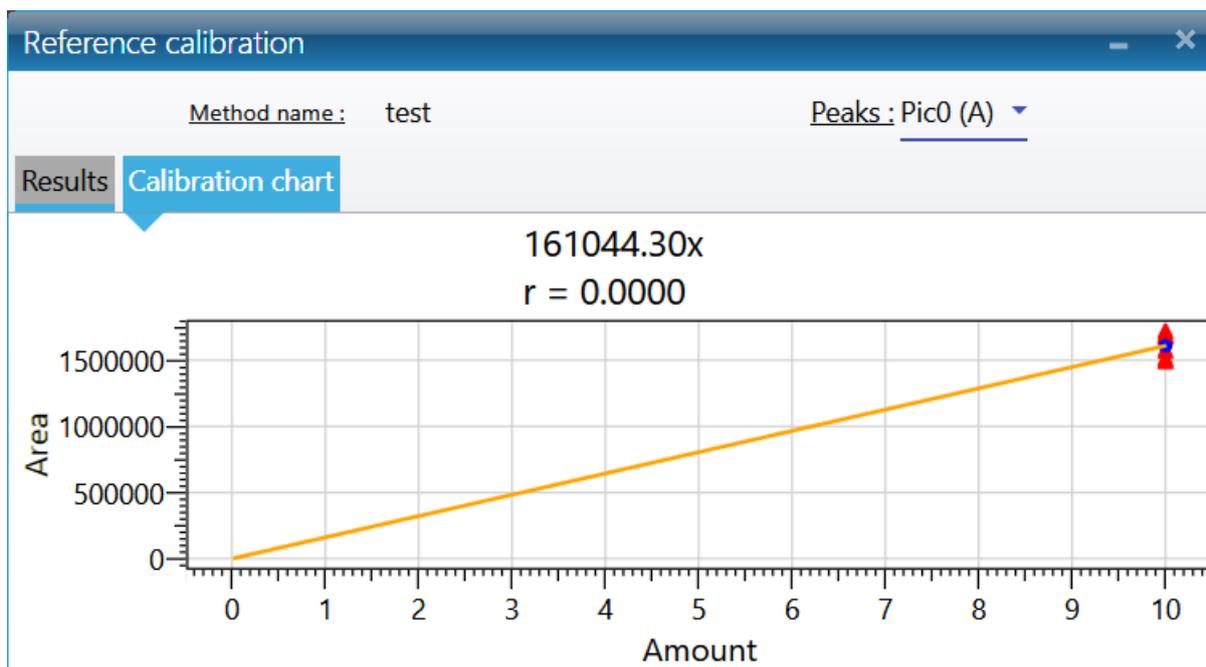
Method name : test Results : Concentration

Results Calibration chart

Analysis name	Level	Type	Pic0 (A)	Pic1 (A)	Pic2 (A)	Pic3 (B)	Pic4 (B)
Analysis_198	1	Replace	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000
Analysis_193	1	Average	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000
Analysis_194	1	Average	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000
Analysis_195	1	Average	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000
Analysis_196	1	Average	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000
Analysis_197	1	Average	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000



Sur le deuxième onglet, un graphique d'étalonnage pour tous les pics sera visualisé :



Voir aussi les chapitres [Historique des étalonnages](#) et [Rapport d'étalonnage](#).

c) 5. Rapport d'étalonnage

Le rapport d'étalonnage est disponible de plusieurs façons, la première provient du tableau des résultats (ou du retraitement / étalonnage). Sélectionnez une seule analyse et faites un clic droit. Développez "**Conditions d'analyse**" et sélectionnez "**Rapport d'étalonnage**"



The screenshot displays the 'Reference calibration - test' window in the Soprane II software. The interface is divided into two main panels. The left panel shows a 'Calibration report' for 'Soprane II' dated '04.06.2018'. It includes a 'Component table' with two tables of analysis results and 'Integration parameters' for modules A and B. The right panel contains two calibration graphs. The top graph is for 'Pic1 (A)' with a correlation coefficient $r = 0.9990$. The bottom graph is for 'Pic1 (A)' with a correlation coefficient $r = 0.9990$. Both graphs plot 'Area' against 'Amount' and show a linear fit with data points and error bars.

Calibration report
 Calibration date: 15/31/2018 2:02:42 PM Method: plot

Component table

Analysis name	Level	Type	Pic1 (A)		Pic2 (A)		Pic3 (A)	
			Area	Concentration	Area	Concentration	Area	Concentration
Analysis_198	1	Replace	167792 μ V.s	10.000 %	1016 μ V.s	10.000 %	15993 μ V.s	10.000 %
Analysis_199	1	Average	1492344 μ V.s	10.000 %	1028 μ V.s	10.000 %	12326 μ V.s	10.000 %
Analysis_194	1	Average	1510497 μ V.s	10.000 %	822 μ V.s	10.000 %	13290 μ V.s	10.000 %
Analysis_195	1	Average	1573905 μ V.s	10.000 %	966 μ V.s	10.000 %	14228 μ V.s	10.000 %
Analysis_196	1	Average	1688915 μ V.s	10.000 %	984 μ V.s	10.000 %	15034 μ V.s	10.000 %
Analysis_197	1	Average	1719815 μ V.s	10.000 %	1040 μ V.s	10.000 %	15468 μ V.s	10.000 %

Analysis name	Level	Type	Pic1 (B)		Pic1 (B)	
			Area	Concentration	Area	Concentration
Analysis_198	1	Replace	2720248 μ V.s	10.000 %	1866 μ V.s	10.000 %
Analysis_199	1	Average	2720024 μ V.s	10.000 %	2115 μ V.s	10.000 %
Analysis_194	1	Average	2721968 μ V.s	10.000 %	1681 μ V.s	10.000 %
Analysis_195	1	Average	2722968 μ V.s	10.000 %	1889 μ V.s	10.000 %
Analysis_196	1	Average	2724199 μ V.s	10.000 %	1815 μ V.s	10.000 %
Analysis_197	1	Average	2722764 μ V.s	10.000 %	1888 μ V.s	10.000 %

Integration parameters

Module	Time	Type	Value
A	0.00	Baseline detection	ON
A	0.00	Absolute peak width	0.5
A	0.00	Absolute peak slope	5
B	0.00	Baseline detection	ON
B	0.00	Absolute peak width	0.2
B	0.00	Absolute peak slope	2

La deuxième façon d'accéder est à partir de l'onglet **Traitement**. Sélectionnez le menu "Étalonnage" et cliquez sur "Rapport d'étalonnage".

The screenshot shows the 'Étalonnage' (Calibration) menu. The menu items are: 'Affichage du chromatogramme', 'Traitement', 'Traitement par lot', 'Étalonnage par retraitement', 'Compare', 'Rapport', 'Conditions d'analyse', 'Rapport d'analyse', and 'Rapport d'étalonnage'. The 'Rapport' item is highlighted, and a mouse cursor is pointing at it.



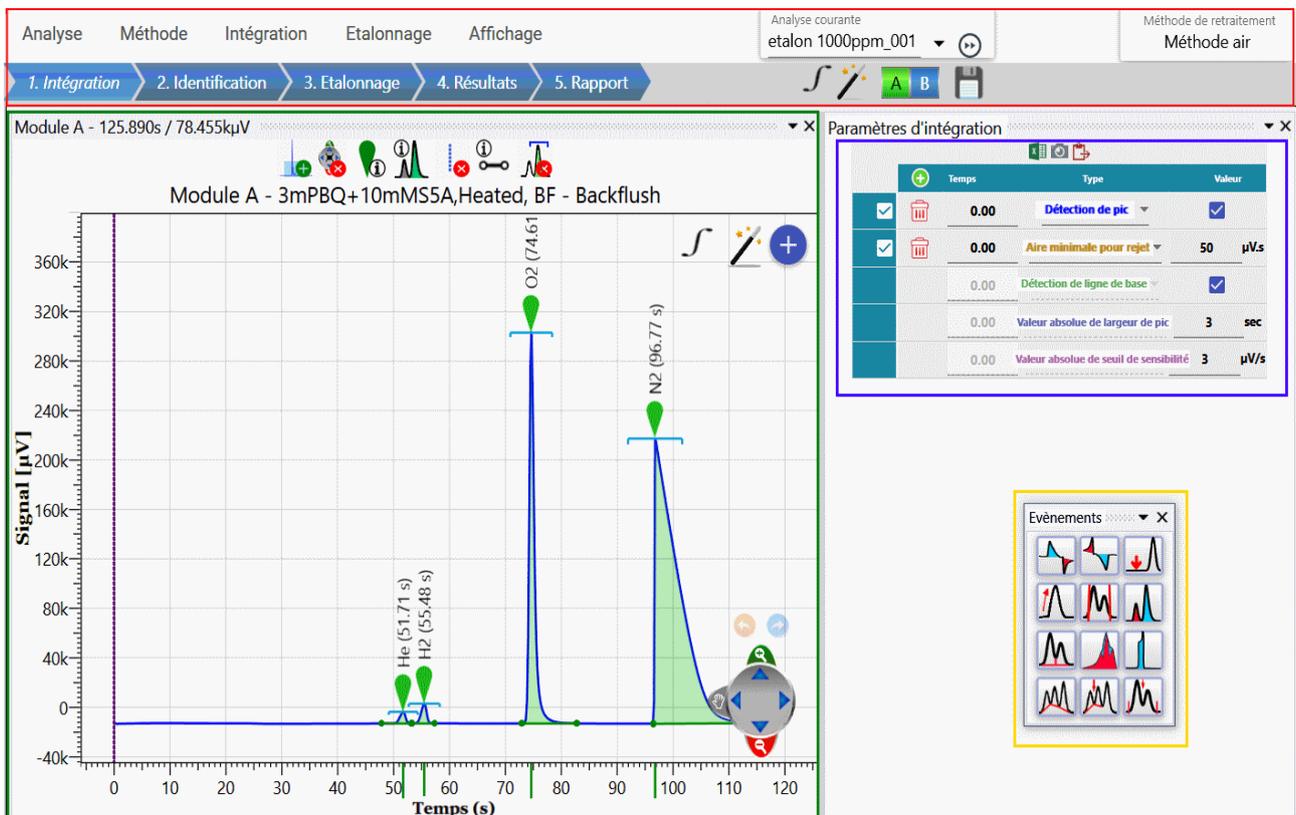
Bien sûr, vous pouvez modifier le rapport, voir le chapitre [Rapport](#).

Voir aussi les chapitres [Etalonnage de référence](#) et [Historique d'étalonnages](#).

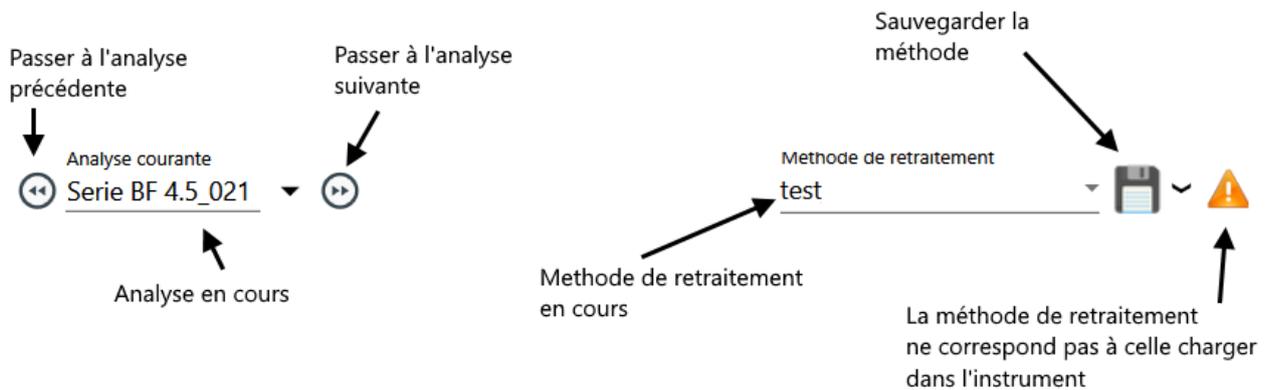
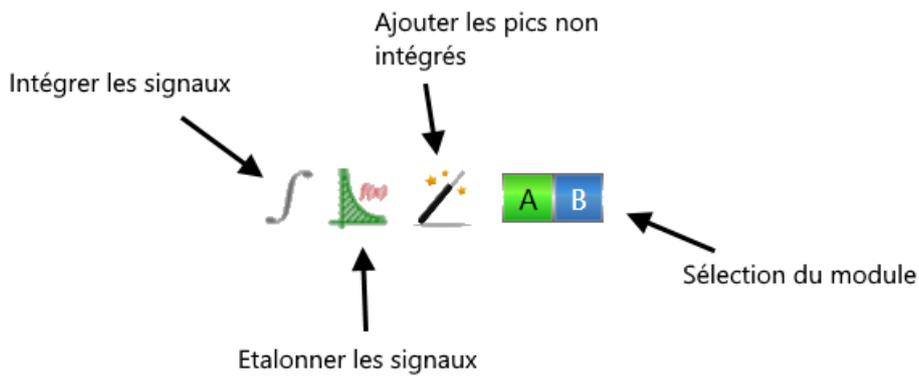
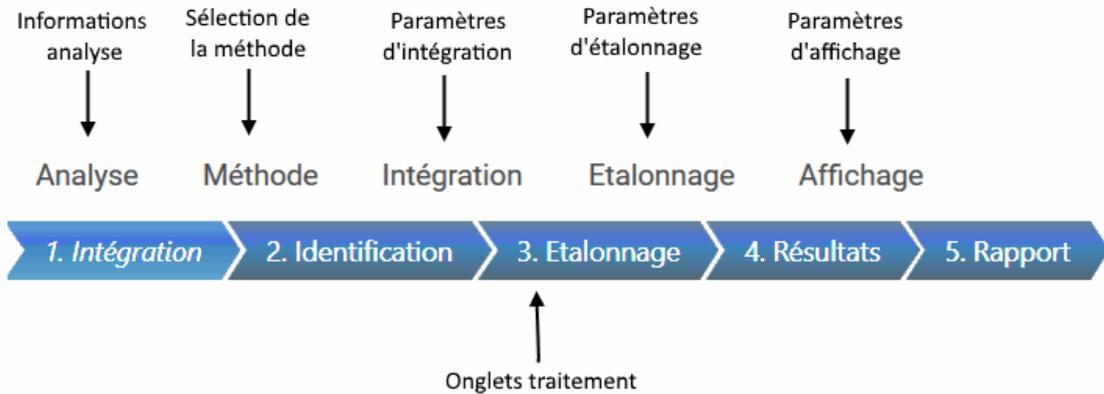
4.5.2. Gestion de l'intégration

La page "Paramètre d'intégration" se divise en 4 parties :

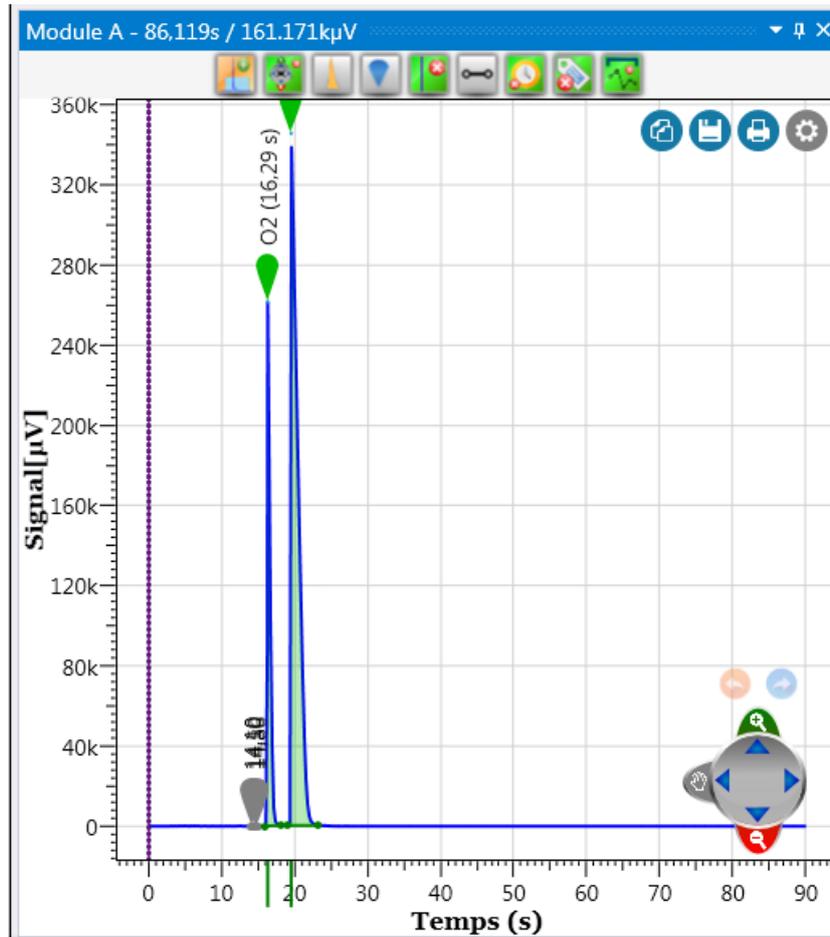
- Bouton de commandes
- Graphique
- Tableau d'évènements
- Palette



1. Bouton de commandes



2. Graphique



Le graphique donne accès au signal intégré et à tous les événements ajoutés par l'utilisateur.

Chaque ligne verticale représente un événement du tableau d'intégration avec une couleur correspondante.

Lorsque la souris est sur la ligne d'événement, le nom de l'événement apparaît et la ligne pourra être déplacée.





Pour plus d'informations concernant la navigation sur le graphique, voir le chapitre [Graphique](#).

3. Tableau d'événements

		Temps	Type	Valeur
<input checked="" type="checkbox"/>		0,00	Détection de pic	<input checked="" type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>		0,00	Aire minimale pour rejet	50 $\mu V/s$
		0,00	Détection de ligne de base	<input checked="" type="checkbox"/>
		0,00	Valeur absolue de largeur de pic	3 sec
		0,00	Valeur absolue de seuil de sensibilité	3 $\mu V/s$

Les événements d'intégration peuvent être ajoutés grâce au tableau d'intégration. Chaque ligne présente dans ce tableau permet d'ajouter une ligne verticale sur le graphique, de la couleur correspondant à l'événement.

Une ligne peut être ajoutée ou supprimée de deux manières différentes. Soit en cliquant sur l'icône (l'icône supprimera la ligne) puis par un clic droit qui affichera un menu qui proposera ces possibilités. De façon graphique, positionnez le curseur de la souris au-dessus d'une ligne d'événement et appuyez sur la touche "suppr".



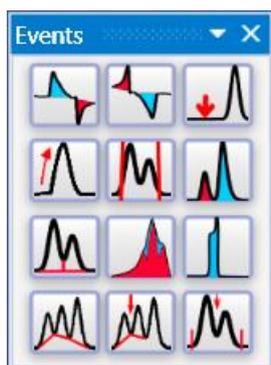
Les différentes valeurs attendues sont :

- Le temps
- Le type d'événement
- La valeur, qui peut être une valeur numérique ou une valeur à cocher.

Pour voir la liste des événements d'intégration, voir le chapitre [Les événements d'intégration](#).

Pour plus d'informations sur l'édition des paramètres d'intégration, voir le chapitre : [Paramètres d'intégration](#)

4. Palette



Les événements peuvent également être ajoutés par cette petite palette, chaque icône représente un événement, le passage sur l'une des icônes affichera sa description détaillée.

Pour plus d'informations sur la palette, voir le chapitre [Chromatogramme](#).

Pour voir la liste des événements d'intégration, voir le chapitre [Les événements d'intégration](#).

a) Paramètres d'intégration

L'intégration d'un chromatogramme fait appel à deux processus distincts : d'abord il est nécessaire de détecter la présence de pics ; dans un second temps il faut interpréter la forme de ces pics pour pouvoir appliquer différentes méthodes de correction de ligne de base.

Les événements d'intégration répondent à ces deux fonctions.

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

Le signal d'analyse est scruté avec une fréquence (comme cela a été défini dans la méthode d'analyse). Toutes les valeurs sont ensuite regroupées en tranches de manière à disposer d'un processus optimisé selon la taille du pic. Le regroupement s'opère en fonction de la valeur de largeur de pic programmée par l'utilisateur, ce qui autorise ensuite un suivi du signal en comparant la pente à la valeur de seuil de sensibilité programmée par l'utilisateur. Ce processus permet une flexibilité assez importante. Multiplier ou diviser par 2 la largeur de pics n'entraîne généralement pas de modifications importantes. Il est toutefois préférable d'utiliser des valeurs en rapport avec la réalité.

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

La valeur par défaut de 5 $\mu\text{V/s}$ pour le seuil de sensibilité permet également la détection de pics "courants".



Pour rendre l'intégration plus sensible, il est préférable de commencer par s'assurer que la largeur de pic est cohérente. La meilleure valeur est la largeur du pic estimée à mi-hauteur. Ensuite, il est possible d'ajuster le seuil de sensibilité.

Un ordre de grandeur peut être lu directement sur le chromatogramme : la pente moyenne d'un pic est la différence entre les valeurs de signal au sommet et à la base divisée par la différence de temps entre le sommet et le début du pic.

	+	Temps	Type	Valeur
<input checked="" type="checkbox"/>		0,00	Détection de pic	<input checked="" type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/>		0,00	Aire minimale pour rejet	50 $\mu V/s$
		0,00	Détection de ligne de base	<input checked="" type="checkbox"/>
		0,00	Valeur absolue de largeur de pic	3 sec
		0,00	Valeur absolue de seuil de sensibilité	3 $\mu V/s$

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

Il n'existe pas de priorité entre 2 événements envisagés au même temps : SOPRANE II les gère simultanément.

Les événements d'intégration peuvent être ajoutés grâce au tableau d'intégration. Chaque ligne présente dans ce tableau ajoute une ligne verticale sur le graphique, de la couleur correspondant à l'événement.

Une ligne peut être ajoutée ou supprimée de deux manières différentes. La première, en cliquant sur l'icône (l'icône supprimera la ligne) puis par un clic droit qui affichera un menu qui proposera ces possibilités. De façon graphique, positionnez le curseur de la souris au-dessus d'une ligne d'événement et appuyez sur la touche "suppr".

Les différentes valeurs attendues sont :

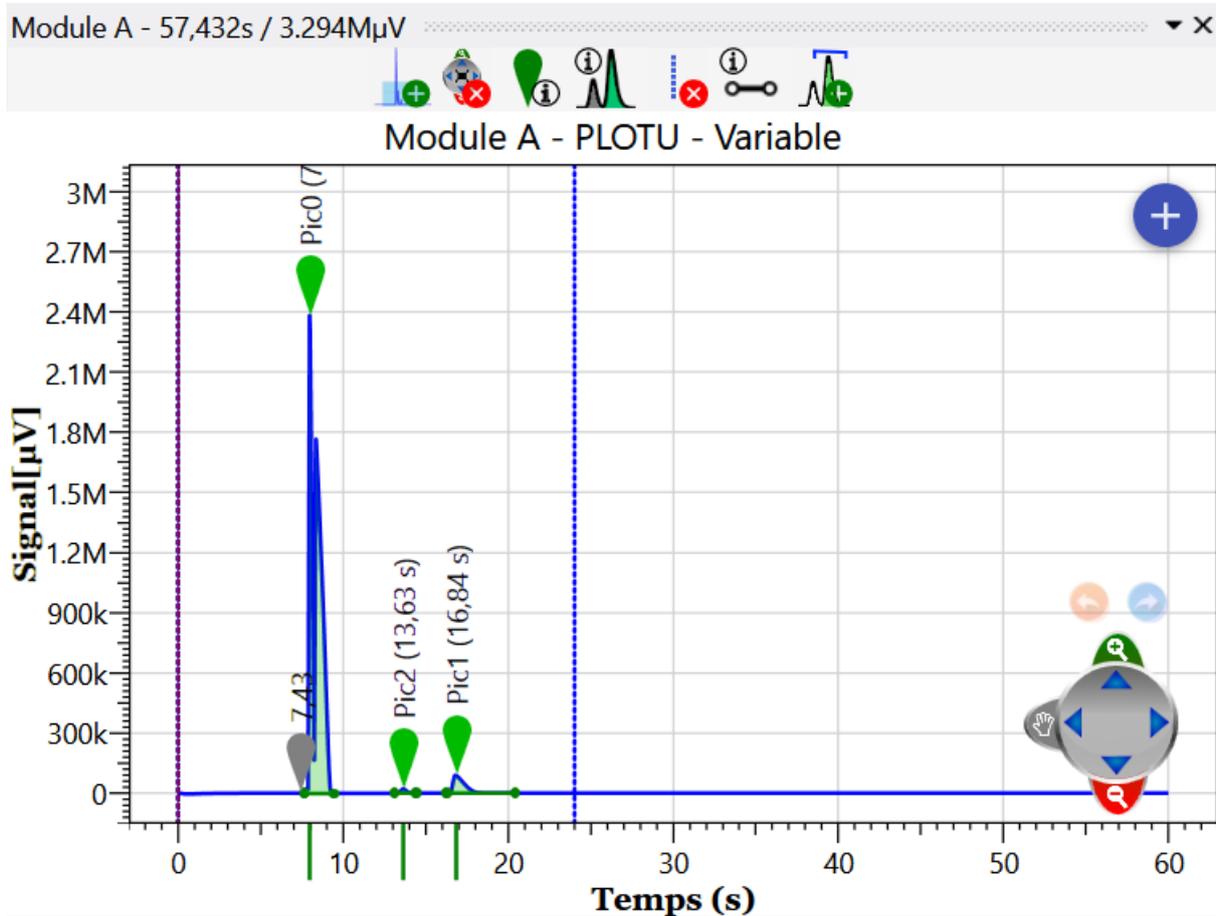
- Le temps
- Le type d'événement
- La valeur, qui peut être une valeur numérique ou une valeur à cocher.

Pour voir la liste des événements d'intégration, voir le chapitre [Les événements d'intégration](#).

b) Chromatogramme

Voici un exemple de graphique dans la partie traitement.



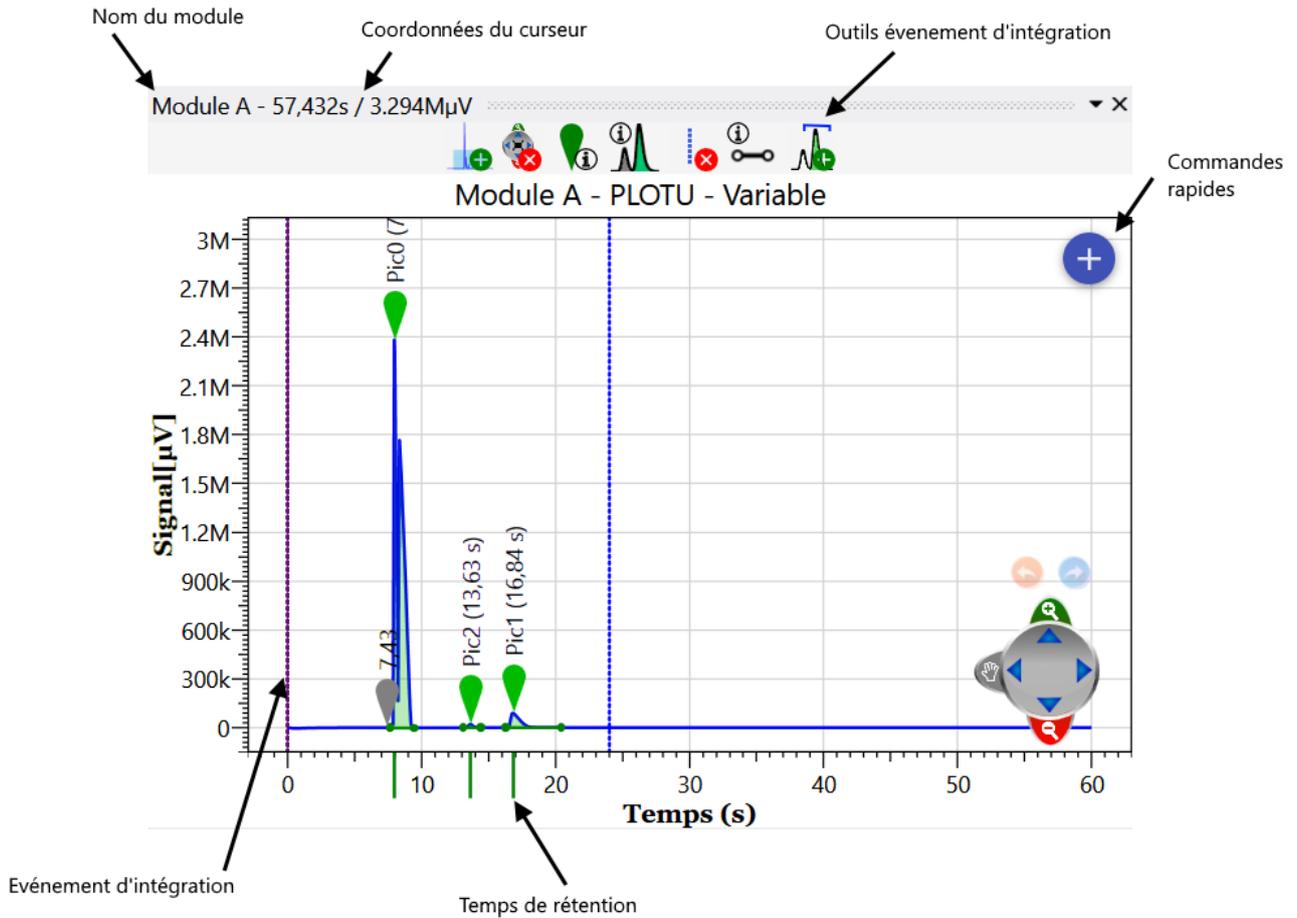


Dans ce chapitre nous allons voir en détails chacun des éléments importants concernant le chromatogramme.

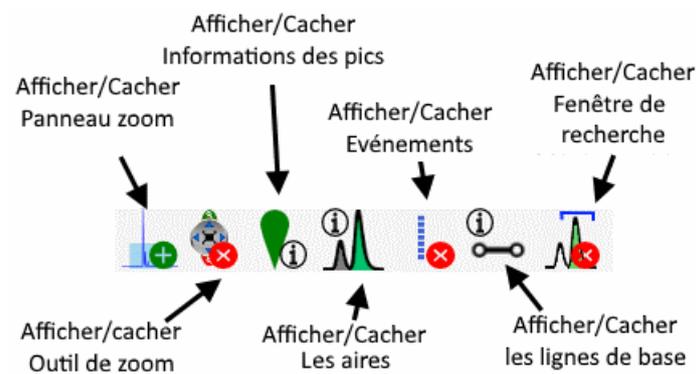
1. Graphique

Le graphique est un élément visuel important pour la visualisation du chromatogramme, mais aussi pour visualiser rapidement les éléments d'intégration.



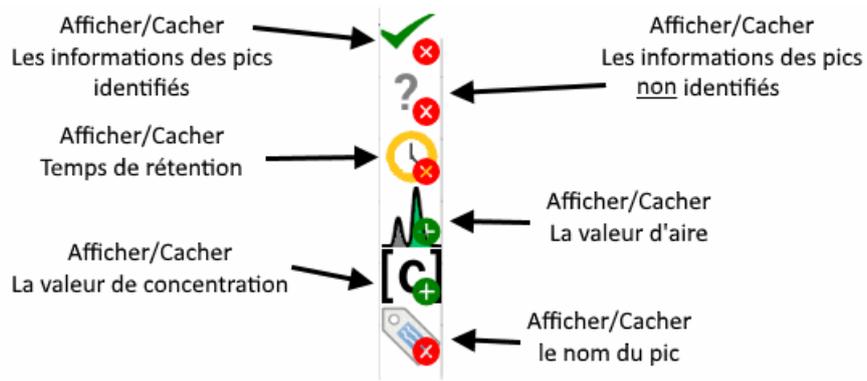


Voici la description de chaque information d'événement graphique

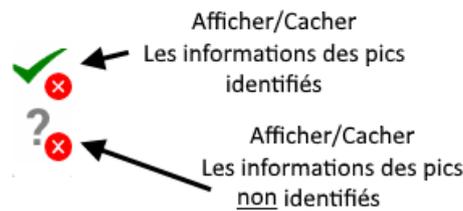


Si vous cliquez sur "**Information des pics**", vous pourrez changer la description du pic, voir la description ci-dessous :

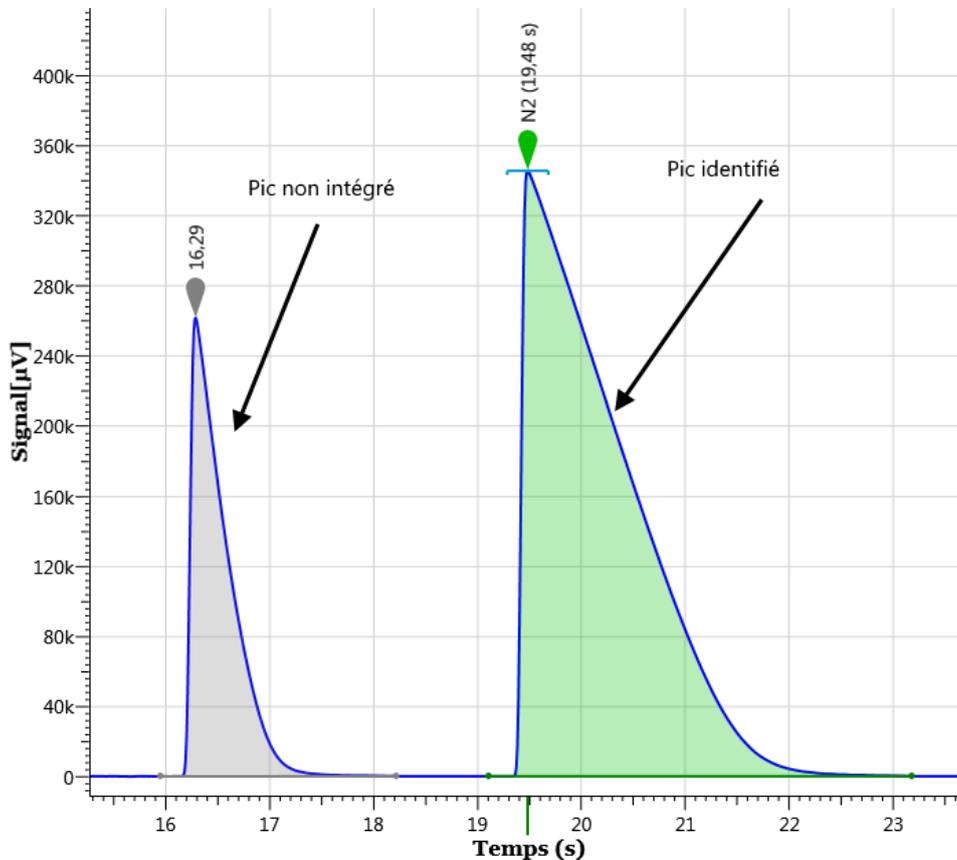




Si vous cliquez sur "Informations des aires" ou "Informations lignes de base", vous pourrez modifier la visibilité du paramètre, voir la description ci-dessous :



Voici ci-dessous la visualisation d'un pic non identifié, et un pic identifié :



Il existe un raccourci utile à connaître pour ajouter un pic, il suffit de faire Ctrl + clic gauche et l'ajout du pic se fera à l'emplacement du curseur. Un glissé-déposé du pic vers le tableau des composants ajoutera également le pic.

Un double clic sur l'icône  ou  affichera les informations sur le pic comme dans l'affichage suivant.



Type de pic	Ligne de base
Temps de rétention (sec)	19.479
Valeur du pic (µV)	3.457E5
Largeur de pic	4.07E0
Aire du pic	3.771E5
Hauteur de pic (µV)	3.454E5

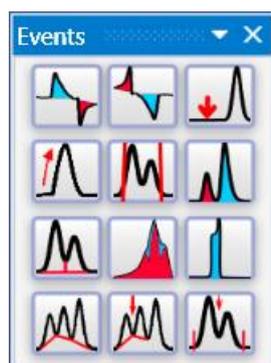
2. Palette

Le chapitre [Paramètres d'intégration](#) décrit comment ajouter directement les événements d'intégration dans la table. Il peut être plus rapide de les placer directement sur le chromatogramme. L'examen de divers chromatogrammes permet de définir les zones où les pics sont attendus. Le zoom permet alors un positionnement précis de chaque événement.

Pour afficher la palette d'intégration cliquez sur le menu "Affichage / Afficher la palette des événements d'intégration".

Lorsqu'elle est visualisée, la palette des événements peut être fermée par un clic de souris sur la croix en haut à droite de la palette.

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



Les événements peuvent également être ajoutés par cette petite palette, chaque icône représente un événement, le passage sur l'une des icônes affichera sa description détaillée.

Voici la liste des raccourcis présents dans la palette :

-  : Détection de pic positif (voir chapitre [Détection de pics](#))
-  : Détection de pic négatif (voir chapitre [Détection de pics négatifs](#))



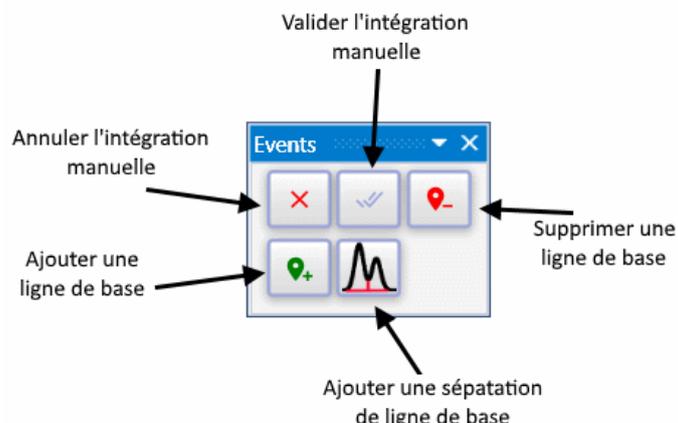
-  : Détection de ligne de base (voir chapitre [Détection de ligne de base](#))
-  : Valeur absolue de seuil de sensibilité (voir chapitre [Valeur absolue de seuil de sensibilité](#))
-  : Valeur absolue de largeur de pic (voir chapitre [Valeur absolue de largeur de pic](#))
-  : Aire minimale pour rejet (voir chapitre [Aire minimale pour rejet](#))
-  : Partage de ligne de base (voir chapitre [Partage de ligne de base](#))
-  : Regroupement de pics (voir chapitre [Regroupement de pics](#))
-  : Détection de pics sur épaulement (voir chapitre [Détection de pics sur épaulement](#))
-  : Forçage de ligne de base sur toutes les vallées (voir chapitre [Forçage de ligne de base à toutes les vallées](#))
-  : Forçage de ligne de base sur la prochaine vallée (voir chapitre [Forçage de ligne de base à la prochaine vallée](#))
-  : Forcer intégration (voir chapitre [Forcer l'intégration](#))

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

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

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

Si la ligne de base manuelle est activée, la palette suivante sera visible :



Voir le chapitre [Gestion des options](#), pour savoir comment activer la "Ligne de base manuelle", et voir le chapitre [Intégration manuelle](#) pour savoir comment utiliser cette fonction.

c) Table des composants



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

1. Les colonnes de la table des composants :

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

Le bouton permet d'atteindre un écran de sélection des colonnes qui seront affichées ultérieurement. A la table des composants est associée une table des niveaux de présentation similaire.



Pour la table des constituants, les colonnes à visualiser sont :

Nom du pic : Il s'agit du nom du constituant. Le nom programmé ici sert de référence pour identifier le pic dans les autres modules de SOPRANE II. C'est sous ce nom que le constituant sera identifié lors des calculs



post-analytiques ou pour les sorties tendances par exemple.

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

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

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

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

Mode de forçage : Le logiciel permet de travailler avec des pics en surface ou en hauteur.

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

REMARQUE IMPORTANTE :

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

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

2. Table des composants :

La table des composants permet l'édition des valeurs nécessaires à l'identification de chacun des constituants à analyser.

Identification des pics					
		Nom du pic	Temps de rétention (sec)	Temps de rétention attendu	Fenêtre relative (%)
		He	51.67	51,72	5,000
		H2	55.43	55,47	5,000
		O2	74.54	76,59	5,000
		N2	96.68	100,24	5,000



Le bouton  permet l'ajout d'une nouvelle ligne,  supprimera la ligne.

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

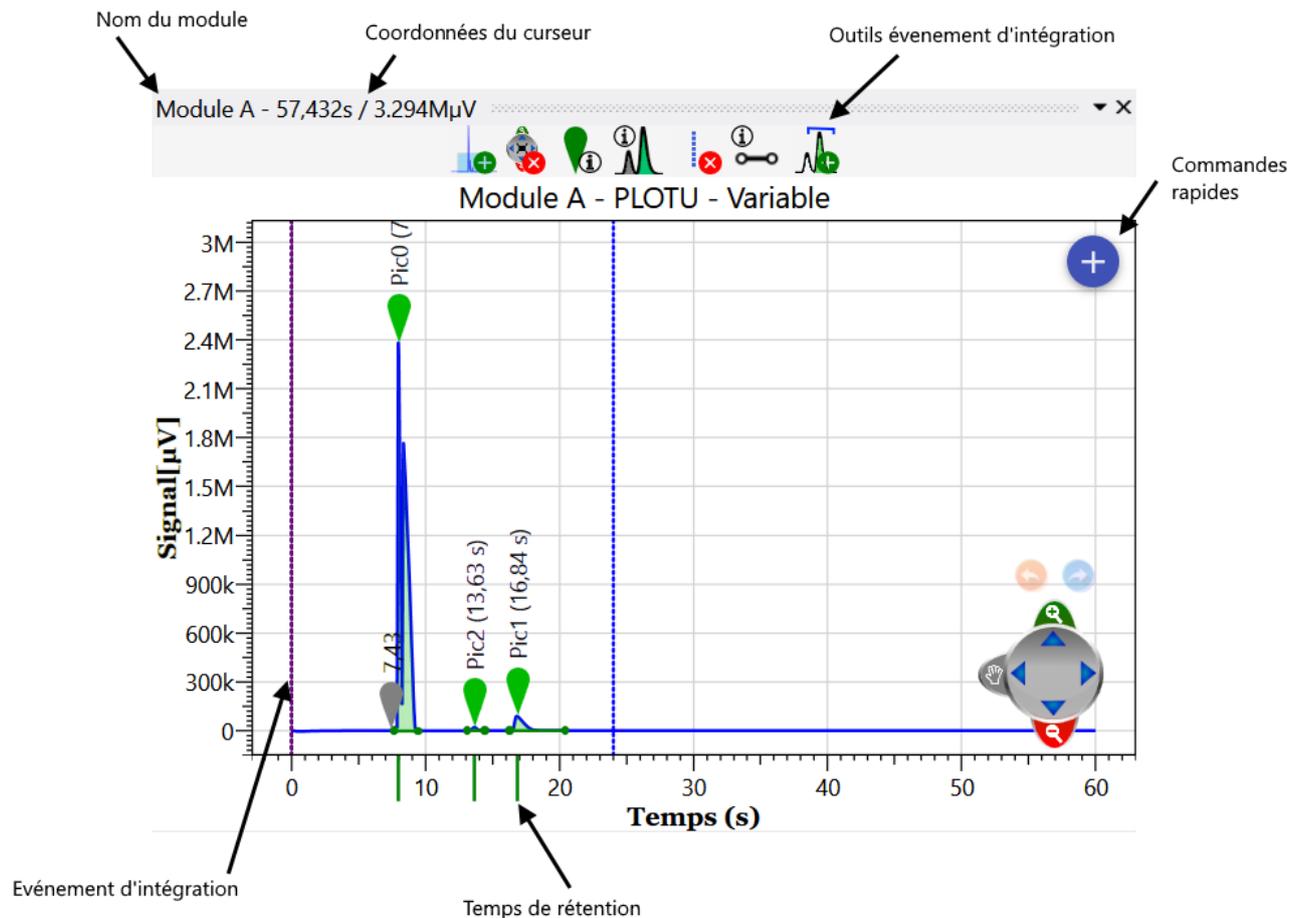
Il est possible de tester la validité d'une ligne complète en effectuant un double clic dans sa marge gauche. Les données du constituant sont vérifiées et une fenêtre avertit que tout est correct, ou qu'il manque des informations ou encore que l'une des informations est erronée.

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

Si l'option "**Mise à jour des temps de rétention après intégration**" est activé, le temps de rétention attendu sera corrigé à la fin de chaque analyse.

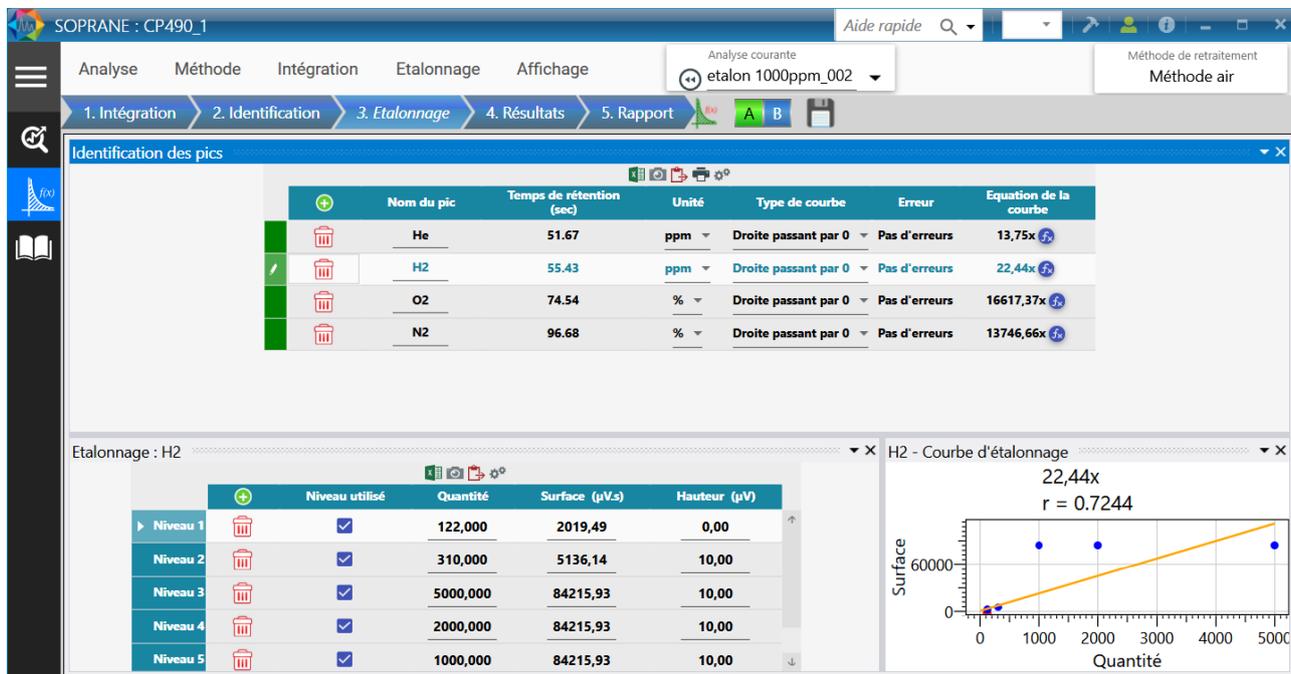
Si l'option "**Mise à jour des temps de rétention après étalonnage**" est activé, le temps de rétention attendu sera corrigé à la fin de chaque étalonnage. (Voir chapitre [Mise à jour des temps de rétention](#)).

3. Graphique

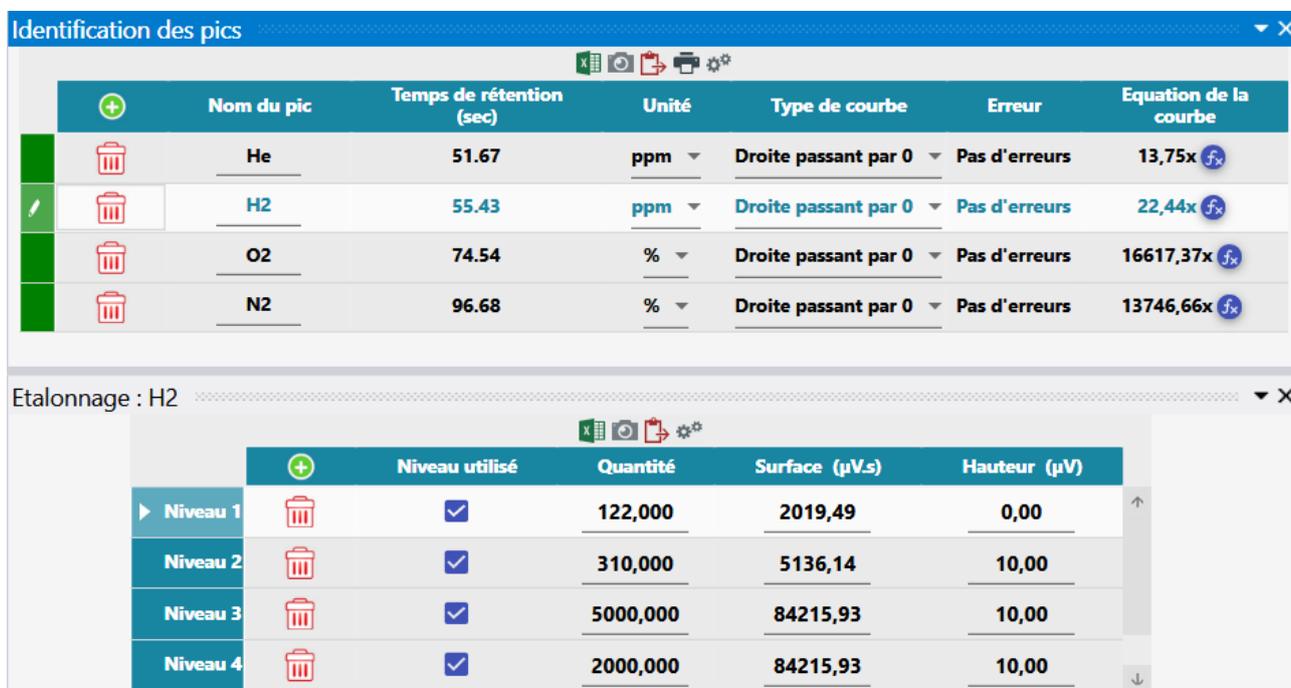


d) Table d'étalonnage

Le menu "3. Étalonnage" permet d'analyser les valeurs nécessaires à l'identification et au calcul des concentrations de chaque composant à analyser.



Deux tableaux sont visualisés :



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



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

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

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

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

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

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

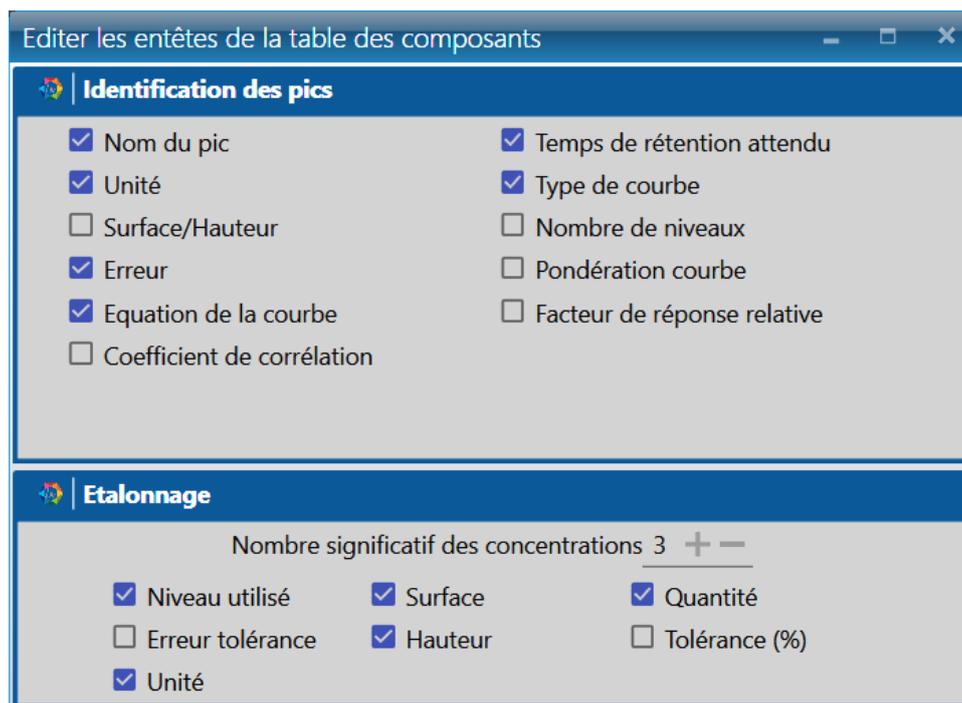
Dans la première table, l'utilisateur indique le temps de rétention de chaque constituant, ainsi que deux fenêtres de temps, l'une relative, l'autre absolue, utilisées pour identifier le pic. La fenêtre d'identification du pic est la somme des 2 valeurs programmées.

La seconde table est relative à l'étalonnage :

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

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





Pour la table d'étalonnage, les colonnes à visualiser sont :

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

Temps de rétention : C'est le temps de rétention exprimé en secondes. Cette valeur est utilisée comme référence pour l'identification des composants.

Unités : C'est l'unité utilisée pour exprimer la valeur de concentration.

Type de courbe : En fonction du nombre de points utilisés pour définir la courbe, il est possible de définir plusieurs types de courbes. Un point permet de définir une ligne passant par l'origine. Deux points définissent une ligne qui ne passe pas par l'origine. De la même manière, nous pouvons définir une courbe du deuxième, troisième ou quatrième degré, une courbe exponentielle ou logarithmique.

Surface ou Hauteur : Le logiciel permet de travailler indifféremment en surface ou en hauteur de pics.

Nombre de niveaux : C'est le nombre de valeurs de concentration successives utilisées pendant l'étalonnage pour déterminer la courbe de réponse pour un composant donné.

Erreur : la description de l'erreur d'étalonnage

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



Équation d'étalonnage : Si la courbe de réponse n'est pas une ligne passant par l'origine, l'équation de la courbe, avec ses coefficients, sera visualisée ici.

Facteur de réponse : C'est le facteur de réponse "classique", c'est-à-dire correspondant à une courbe de réponse passant par l'origine.

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

Pour la table des niveaux, les colonnes à visualiser sont :

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

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

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

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

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

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

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

e) Tableau des résultats

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

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



SOPRANE : test 2-12

Analyse courante Serie BF 4.5_021 Méthode de retraitement test_IsEditable

1. Paramètres d'intégration 2. Table des composants 3. Résultats 4. Rapport

Module	Nom du pic	Temps de rétention (sec)	Aire du pic	Concentration	Concentration normalisée (%)	Unité	Type de pic	Valeur du pic (μV)
A		7,43	15528,16	0,00	0,00	%	Ligne de base	915
A	Pic0	7,96	1377770,36	688885,18	32,78	%	Ligne de base	2.381852M
A	Pic2	13,63	7901,64	3950,82	0,19	%	Ligne de base	20.897k
A	Pic1	16,84	69145,84	34572,92	1,65	%	Ligne de base	88.08k
B		8,91	55,28	0,00	0,00	%	Ligne de base	2.613k
B	Pic3	9,74	2748224,19	1374112,10	65,39	%	Ligne de base	6.483173M
B		11,02	269,15	0,00	0,00	%	Ligne de base	958
B		11,57	308,83	0,00	0,00	%	Ligne de base	1.397k
B		12,23	131,54	0,00	0,00	%	Ligne de base	1.144k
Σ			4219334,99	2101521,02	100,00			

ETAT : Configuration envoyée ANALYSEUR : test 2-12 (M3000 LAN) MEMORY : 76.021 MB

Editer les entêtes du tableau des résultats

Générale

Nombre de colonnes fixes 2 + - Afficher/Cacher les pics inconnus

Afficher/Cacher les statistiques Grouper par groupe de pics

Sauvegarde des paramètres du tableau

Changer les colonnes visibles

Nom du pic Temps de rétention (sec)

Surface Concentration

Concentration normalisée (%) Unité

Type de pic Saturé

Début du pic (s) Valeur max. du pic (μV)

Valeur début de pic (μV) Fin du pic (s)

Valeur de fin de pic (μV) Largeur de pic (s)

Largeur de pic à mi-hauteur Hauteur du pic

Type début ligne de base Type fin ligne de base



f) Rapport

La partie "Calcul" permet de définir tous les rapports dont on peut avoir besoin à la fin d'une analyse. Ces rapports peuvent être affichés ou imprimés.

Soprane :

Nom de l'analyse : etalon 1000ppm_002 Date d'injection : 05/23/2018 14:39:17 Méthode : Méthode air
 Type : Echantillon Chemin du fichier : C:\Soprane II\Analysis\CP490_1\msd\180523\etalon 1000ppm_002.jm
 N° d'instrument : 1805015

Chromatogram

Module A : pmPFD1.comMS2A.Heated_BF_Backflush Module B : 1000 PPU Heated Injector Variable

Integration parameters

Module	Temps	Type	Valeur
A	0.00	Détection de pic	ON
A	0.00	Aire minimale pour rejet	50
A	0.00	Détection de ligne de base	ON
A	0.00	Valeur absolue de largeur de pic	3
A	0.00	Valeur absolue de seuil de sensibilité	3
B	0.00	Détection de pic	ON
B	0.00	Hauteur maximale pour rejet	1E+04M
B	0.00	Détection de ligne de base	ON
B	0.00	Valeur absolue de largeur de pic	3
B	0.00	Valeur absolue de seuil de sensibilité	3
B	70.00	Forcer l'intégration	ON

Component table

Module	Nom du pic	Temps de rétention (s)	Concentration	Concentration normalisée (%)	Unité	Largeur de pic (s)
A	He	23.67	0	0	ppm	3.543
A	He2	35.479	0	0	ppm	4.155
A	O2	74.543	203.623	203.277	%	9.89
A	N2	98.676	Scute	79.652	%	21.68

Table of Results (Right Panel):

Module	Nom du pic	Largeur de pic à 1σ	Aire du pic	Hauteur de pic (µV)	Valeur max. du pic (µV)	Type de pic
A	He	3.595	10743.892	9474.343	2907.04	Ligne de base
A	He2	3.042	17656.82	15969.648	3641.65	Ligne de base
A	O2	0.002	342498.194	316076.376	303676.05	Ligne de base
A	N2	4.411	1108231.682	490440.395	217875.98	Ligne de base
B	Pic6	1.053	467954.342	4470520.597	4470225.16	Ligne de base
B	CH4	1.075	5875.856	5476.2	5773.34	Ligne de base
B		0.025	0.006	0.035	0.043	Ligne de base
B		0	0.005	0.036	0.07.63	Ligne de base
B		0.029	0.009	0.121	0.07.03	Ligne de base
B	CO2	1.576	807.386	278.099	135.06	Ligne de base
B		0.099	0.025	0.035	0.22.31	Ligne de base
B		0.022	0.004	0.044	0.22.38	Ligne de base
B		0.037	0.007	0.107	0.22.65	Ligne de base
B		0.054	0.014	0.244	0.22.86	Ligne de base
B		0.067	0.029	0.185	0.22.22	Ligne de base

Le rapport est largement configurable ; on peut paramétrer la visualisation du rapport ainsi que son contenu.

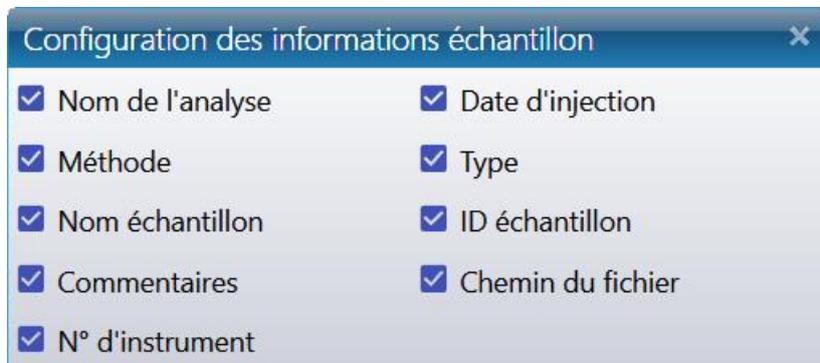
Paramétrer la visualisation du rapport :

- : Imprimer
- : Copier la sélection active
- : Zoomer et dézoomer
- : Afficher le rapport en taille réelle
- : Afficher le rapport en fonction de la largeur
- : Afficher la page entière
- : Afficher le rapport sur deux pages



Paramétrer le contenu du rapport :

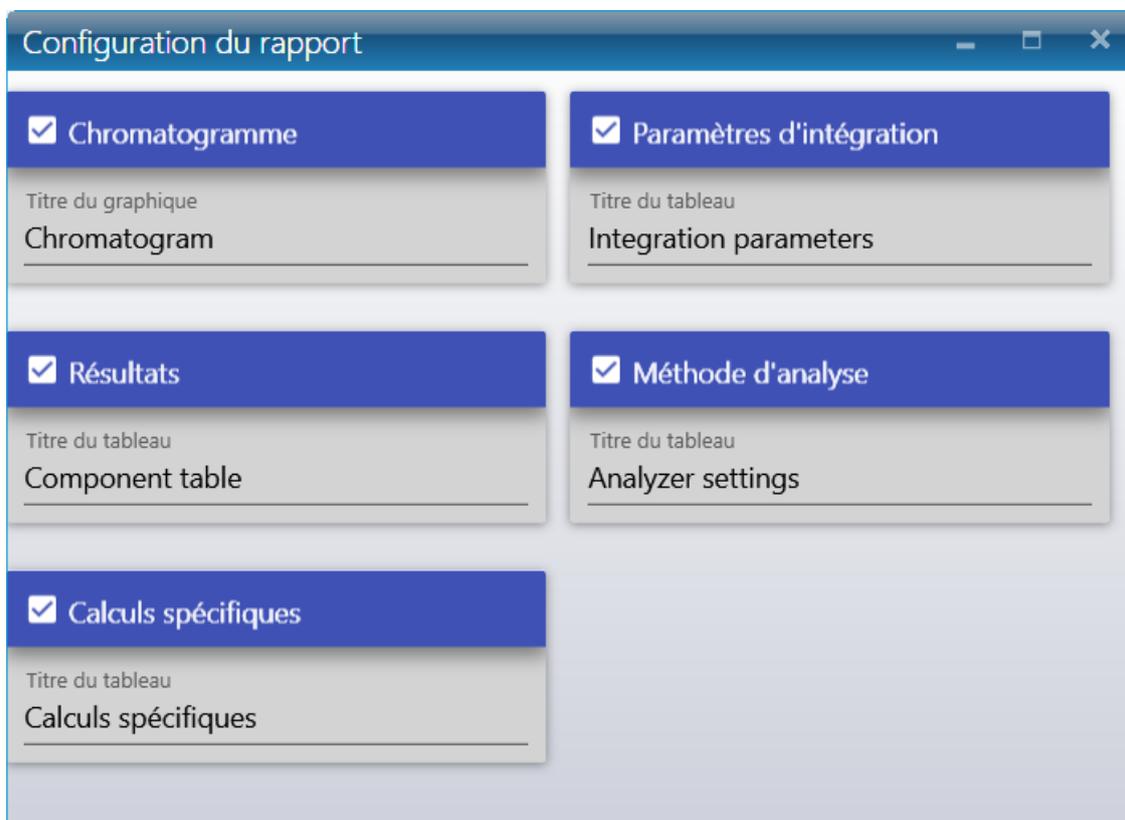
- Éditer les informations d'analyse  :



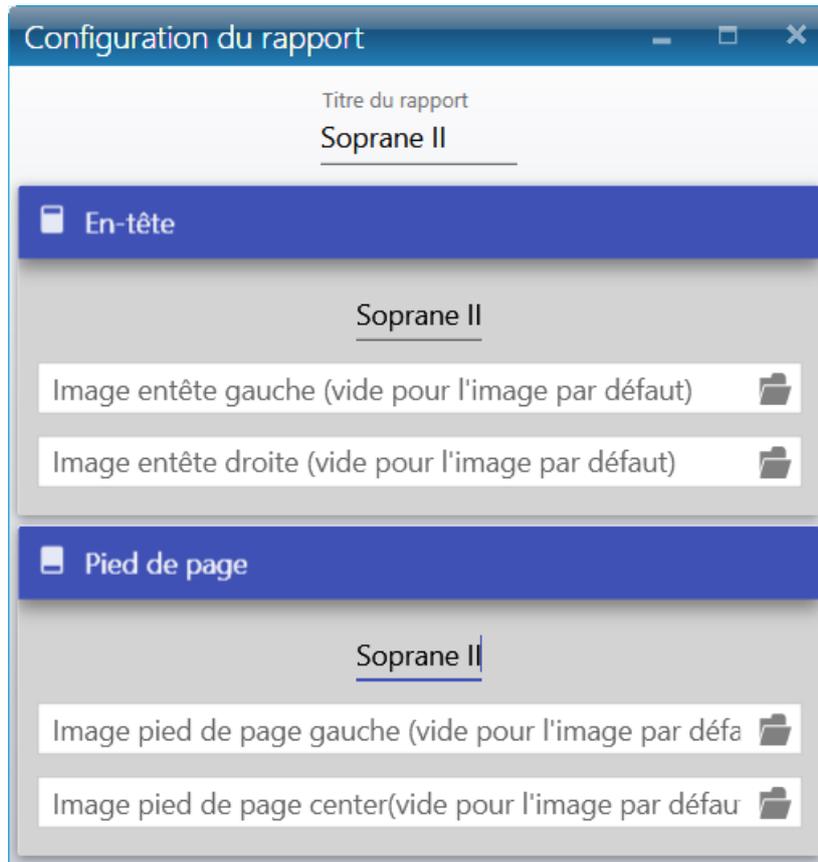
-  Configuration du rapport

Il existe plusieurs parties dans le rapport : le chromatogramme, les paramètres d'intégration, la table des composants, la méthode d'analyse et les calculs spécifiques.

Chacune de ces parties peuvent être visible ou non, et leurs titres sont modifiables.



-  : Changer les entêtes et pieds de pages



En cliquant sur l'icône  une fenêtre demandera de choisir une image afin de remplacer celle déjà existante.

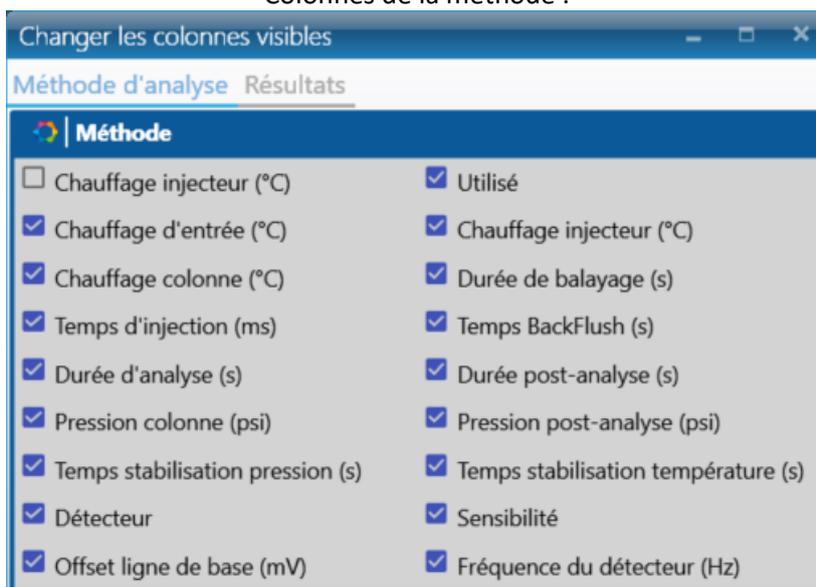
Si le champ est vide, les images par défaut seront ajoutées.

-  Changer l'orientation du rapport (Paysage ou Portrait)
-  Changer les colonnes des tableaux

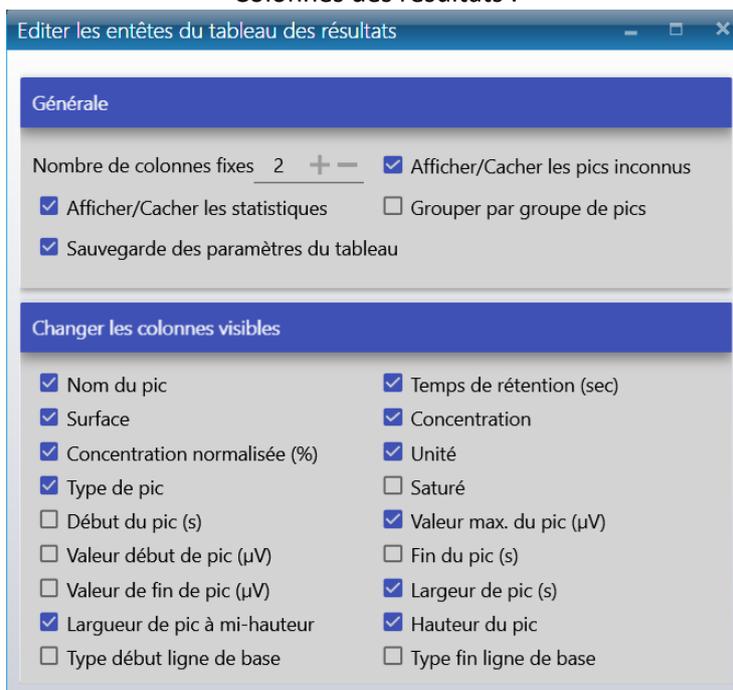
Si dans la majorité des cas on se satisfait des colonnes *ID Pic*, *nom du constituant*, *temps de rétention*, *surface du pic*, *hauteur du pic*, *quantité ajustée et concentration*, toutes les variables, et leur colonne correspondante, dont un utilisateur aurait besoin peuvent être sélectionnées.



Colonnes de la méthode :



Colonnes des résultats :



-  Permet de remplir automatiquement un document Word (voir chapitre [Rapport personnalisé](#))
-  Permet de mettre à jour le rapport
-  Lors de l’affichage, il est possible de visualiser le module actif, mais également d’avoir un seul rapport pour tous les modules sélectionnés.

REMARQUE : La partie visible du chromatogramme correspond au zoom du chromatogramme dans la partie "Intégration ou Identification"

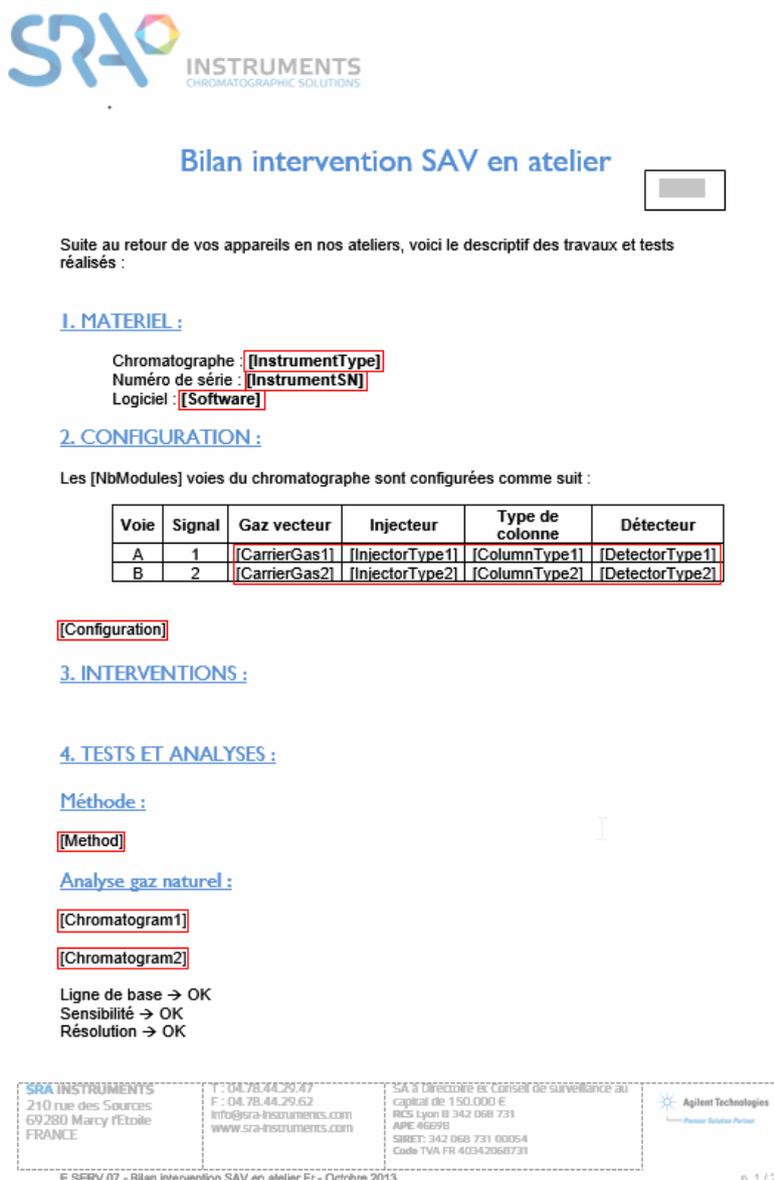


f) 1. Rapport personnalisé

Soprane II offre la possibilité de créer votre rapport personnalisé à partir d'un modèle de document Word.

1. Créez un modèle de document Word, avec toutes les informations que vous souhaitez afficher. Ce document est un fichier Word normal qui peut inclure du texte, des images, des graphiques ...
2. Vous devez remplir ce document avec des mots-clés (voir la liste des mots-clés après l'exemple).
3. Soprane II lira le document et vérifiera si le document contient des mots-clés et remplacera chaque mot-clé par la valeur désirée.

Voici un exemple de modèle de document Word :



Bilan intervention SAV en atelier

Suite au retour de vos appareils en nos ateliers, voici le descriptif des travaux et tests réalisés :

1. MATERIEL :

Chromatographe : [InstrumentType]
 Numéro de série : [InstrumentSN]
 Logiciel : [Software]

2. CONFIGURATION :

Les [NbModules] voies du chromatographe sont configurées comme suit :

Voie	Signal	Gaz vecteur	Injecteur	Type de colonne	Détecteur
A	1	[CarrierGas1]	[InjectorType1]	[ColumnType1]	[DetectorType1]
B	2	[CarrierGas2]	[InjectorType2]	[ColumnType2]	[DetectorType2]

[Configuration]

3. INTERVENTIONS :

4. TESTS ET ANALYSES :

Méthode :

[Method]

Analyse gaz naturel :

[Chromatogram1]
 [Chromatogram2]

Ligne de base → OK
 Sensibilité → OK
 Résolution → OK

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

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

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

Agilent Technologies
 Premier Solution Partner

E SERV 07 - Bilan intervention SAV en atelier FR - Octobre 2013

p. 1 / 2



Les mots entre crochet sont des mots-clés; ces mots-clés seront remplacés par Soprane II avec les valeurs de résultat attendues.

Voici un exemple du fichier résultat :

Page 1:



Bilan intervention SAV en atelier



Suite au retour de vos appareils en nos ateliers, voici le descriptif des travaux et tests réalisés :

1. MATERIEL :

Chromatographe : CP 490 LAN
 Numéro de série : 18016015
 Logiciel : Soprane II (1.1.502)

2. CONFIGURATION :

Les 2 voies du chromatographe sont configurées comme suit :

Voie	Signal	Gaz vecteur	Injecteur	Type de colonne	Détecteur
A	1	Argon	Backflush	3mPBQ+10mMS5A,Heated, BF	TCD
B	2	Helium	Variable	10m PPU Heated Injector	TCD

	Module A	Module B
Mod. SN	18025011	18025012
Mod. PN	35810036	492001460
Injecteur chauffé	✓	✓
Max inj. temp.	110	110
Min inj. temp.	30	30
Colonne	3mPBQ+10mMS5A,Heated, BF	10m PPU Heated Injector
Type d'injecteur	Backflush	Variable
Max col. temp.	180	180
Min col. temp.	30	30
Gaz vecteur	Argon	Helium
Type de détecteur	TCD	TCD
Mode de contrôle de pression	EPC	EPC



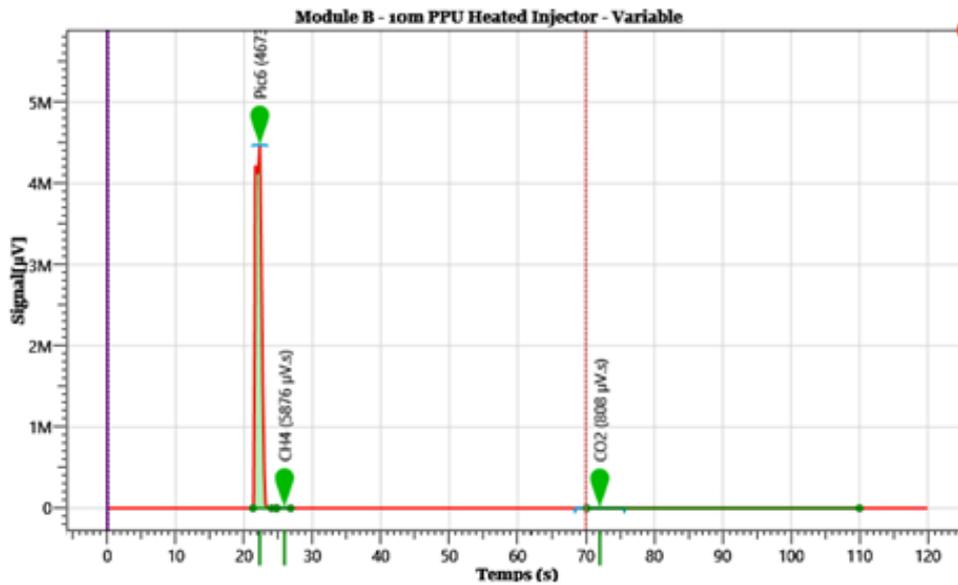
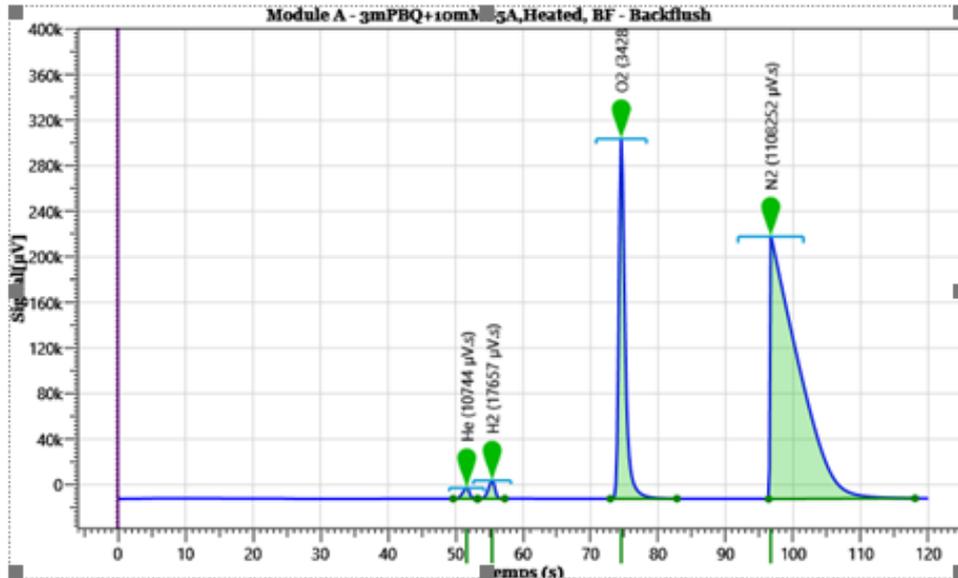
3. INTERVENTIONS :

4. TESTS ET ANALYSES :

Méthode :

Paramètres communs			
Durée de balayage (s)	60	Entrée chauffée	90
	Durée d'analyse (s)	120	
	A - 3mPBQ+10mMS5A,Heated, I		B - 10m PPU Heated Injector
Utilisé	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	
Chauffage injecteur (°C)	60	70	
Chauffage colonne (°C)	60	100	
Temps d'injection (ms)	250	250	
Temps BackFlush (s)	0		
Pression colonne (psi)	22	22	
Détecteur	<input checked="" type="checkbox"/> ON	<input checked="" type="checkbox"/> ON	
Sensibilité	Auto	Auto	





Ligne de base → OK
Sensibilité → OK
Résolution → OK

Test de répétabilité :

Répétabilité → OK (%RSD <1% sur au moins 1 pic par module)

La seule chose à savoir est quels mots-clés utiliser, voici la liste de tous les mots-clés :



1. Mots clés qui génèrent des images

[Method] : Importe la méthode analytique

[Configuration] : Importe la configuration de l'instrument

[ResultTable] : Importe les résultats d'analyses

[Chromatogram{IndicateurModule}] : Importe le chromatogramme en fonction du numéro de l'indicateur du module (exemple [Chromatogram1] pour le module A)

2. Mots clés qui génèrent des mots

//Valeurs globales

[DateNow] : Écrit la date de génération du rapport

[Software] : Écrit le logiciel utilisé ainsi que le numéro de version

//Paramètres instruments

[InstrumentSN] : Écrit le numéro de série de l'instrument

[NbPump] : Écrit le nombre de pompe installé

[NbModules] : Écrit le nombre de module installé

[InstrumentType] : Écrit le type d'instrument (exemple CP490, M3000 Lan...)

// Valeurs générale

[NbRuns] : Écrit le nombre d'analyses effectués avec la méthode d'analyse actuelle

[TotalRunTime] : Écrit le temps d'exécution total en secondes réalisé avec la méthode d'analyse actuelle

[LastRun] : Écrit la date de la dernière injection faite avec la méthode d'analyse actuelle

//Résultats

[AnalysisDate] : Écrit la date d'injection de l'analyse

[AnalysisName] : Écrit le nom de l'analyse

[AnalysisSerie] : Écrit le nom de la série d'analyse

[AnalysisMethod] : Écrit le nom de la méthode

[AnalysisPath] : Écrit l'emplacement du fichier résultat

[AnalyzerName] : Écrit le nom de l'instrument

[SampleType] : Écrit le type d'échantillon (Blanc, étalon, échantillon)

[CalibrationLevel] : Écrit le niveau d'étalonnage

[Stream] : Écrit la voie d'échantillonnage analysée

//Module configuration

[ModuleSN{IndicateurModule}] : Écrit le numéro de série du module (exemple [Chromatogram1] pour le module A)

[ModulePN{IndicateurModule}] : Écrit le numéro d'article du module (exemple [ModulePN1] pour le module A)

[InjectorHeated{IndicateurModule}] : Écrit "Oui" si l'entrée est chauffé sinon, écrit "Non" (exemple [InjectorHeated1] pour le module A)

[InjectorTempMin{IndicateurModule}] : Écrit la température minimale de l'injecteur (exemple [InjectorTempMin1] pour le module A)

[InjectorTempMax{IndicateurModule}] : Écrit la température maximale de l'injecteur (exemple [InjectorTempMax1] pour le module A)

[ColumnType{IndicateurModule}] : Écrit le type de colonne (exemple [ColumnType1] pour le module A)

[HasBackflush{IndicateurModule}] : Écrit "Oui" si la colonne du module spécifié est un Backflush sinon écrit "Non" (exemple [HasBackflush1] pour le module A)



[**ColumnTempMin**{IndicateurModule}] : Écrit la température minimale de la colonne (exemple [**ColumnTempMin1**] pour le module A)

[**ColumnTempMax**{IndicateurModule}] : Écrit la température maximale de la colonne (exemple [**ColumnTempMax1**] pour le module A)

[**CarrierGas**{IndicateurModule}] : Écrit le gaz vecteur utilisé pour le module (exemple spécifié [**CarrierGas1**] pour le module A)

[**DetectorType**{IndicateurModule}] : Écrit le type de détecteur utilisé pour le module spécifié (exemple [**DetectorType1**] pour le module A)

[**InjectorType**{IndicateurModule}] : Écrit le type d'injecteur utilisé pour le module spécifié (exemple [**InjectorType1**] pour le module A)

[**ChannelEnabled**{IndicateurModule}] : Écrit "Oui" si le module est utilisé, sinon écrit "Non" (exemple [**ChannelEnabled1**] pour le module A)

[**InjectorTemp**{IndicateurModule}] : Écrit la température de l'injecteur pour le module spécifié (exemple [**InjectorTemp1**] pour le module A)

[**ColumnTemp**{IndicateurModule}] : Écrit pour le module spécifié (exemple [**CColumnTemp1**] pour le module A)

[**InjectTime**{IndicateurModule}] : Écrit le temps d'injection pour le module spécifié (exemple [**InjectTime1**] pour le module A)

[**BackflushTime**{IndicateurModule}] : Écrit le temps de backflush pour le module spécifié (exemple [**BackflushTime1**] pour le module A)

[**AnalysisTime**{IndicateurModule}] : Écrit le temps d'analyse pour le module spécifié (exemple [**AnalysisTime1**] pour le module A)

[**RampRate**{IndicateurModule}] : Écrit la valeur de la rampe de pression pour le module spécifié (exemple [**RampRate1**] pour le module A)

[**Pressure**{IndicateurModule}] : Écrit la pression en PSI pour le module spécifié (exemple [**Pressure1**] pour le module A)

[**TCD**{IndicateurModule}] : Écrit "Oui" si le module est utilisé, sinon écrit "Non" (exemple [**TCD1**] pour le module A)

[**Range**{IndicateurModule}] : Écrit la valeur de sensibilité pour le module spécifié (exemple [**Range1**] pour le module A)

[**Rate**{IndicateurModule}] : Écrit la fréquence d'acquisition pour le module spécifié (exemple [**Rate1**] pour le module A)

[**SampleTime**{IndicateurModule}] : Écrit le temps d'échantillonnage pour le module spécifié (exemple [**SampleTime1**] pour le module A)

[**InletTemp**{IndicateurModule}] : Écrit la température de l'entrée échantillon pour le module spécifié (exemple [**InletTemp1**] pour le module A)

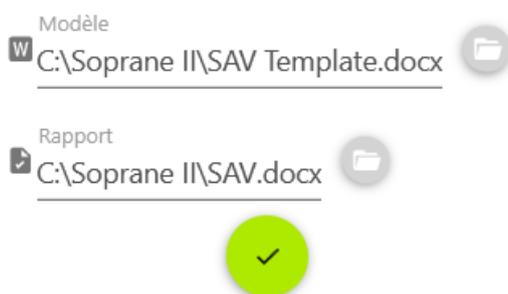
[**ContinuousFlow**{IndicateurModule}] : Écrit "Oui" si le module utilise le mode "Débit continu", sinon écrit "Non" (exemple [**ContinuousFlow1**] pour le module A)

Pour générer un rapport personnalisé, allez dans "**Traitement > 5. Rapport**" et cliquez sur l'icône suivante



Le chemin du fichier modèle d'origine et le rapport final doivent être remplis. Cliquez sur le bouton de validation pour générer le rapport.





g) Configuration traitement

g) 1. Options mathématiques

Le menu "**Intégration / Opération de calcul**" permet d'accéder à une fenêtre où sont définis les traitements mathématiques à effectuer à la fin de l'analyse.

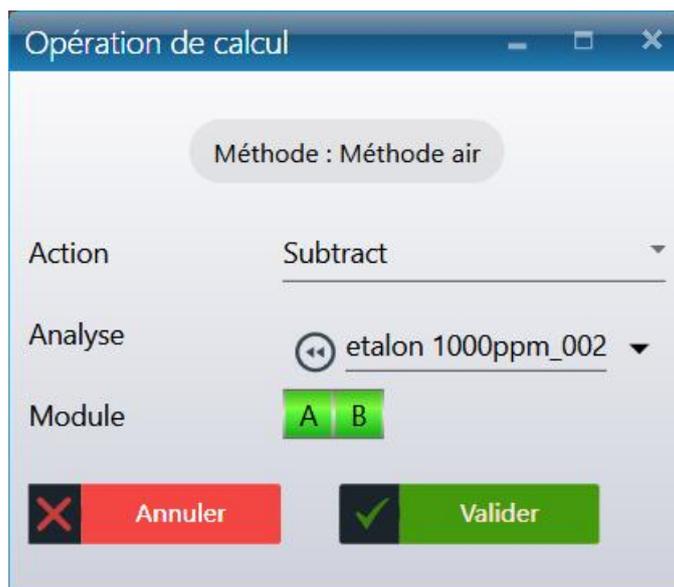


La fenêtre affichée offre la possibilité de soustraire ou de réduire le bruit de fond sur un module.

Deux options sont proposées.

La première option permet de soustraire un chromatogramme de référence de l'analyse.



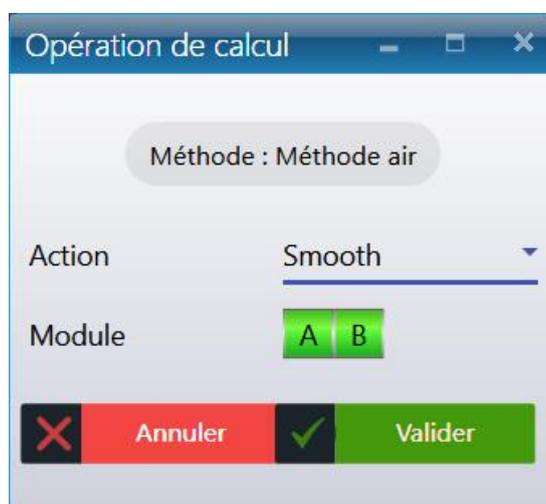


Les calculs portent sur la différence entre les deux courbes.

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

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

La deuxième option consiste en un lissage du chromatogramme avant traitement.



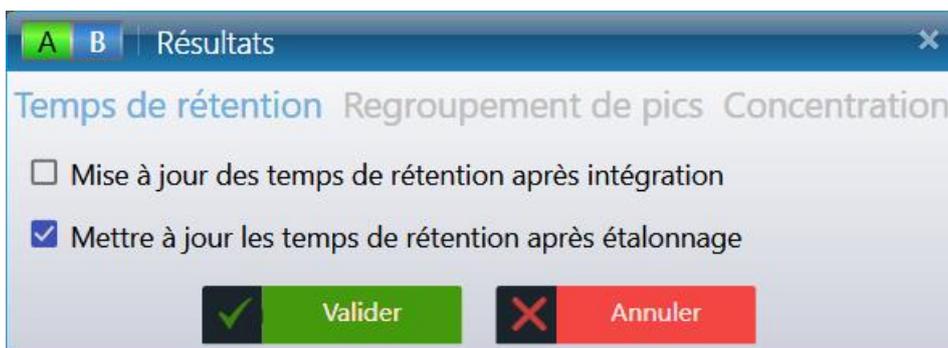
Là aussi, l'utilisateur sélectionne le ou les canaux sur lesquels cette action doit être effectuée.

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



g) 2. Mise à jour des temps de rétention

Le fait de ne pas trouver un pic peut ne pas être dû à un défaut d'intégration des pics mais à un défaut d'identification des pics (temps de rétention attendu non conforme, fenêtre de recherche trop étroite, ...). L'identification des pics est effectuée à partir du temps de rétention programmé dans la table des composants et des valeurs de fenêtre de recherche absolue et relative. Si l'on corrige une telle erreur, il n'est pas nécessaire de refaire une calibration : la surface ou la hauteur des pics n'a pas varié. Le menu "Intégration / Identifier pics" permet de refaire l'identification des pics du chromatogramme.

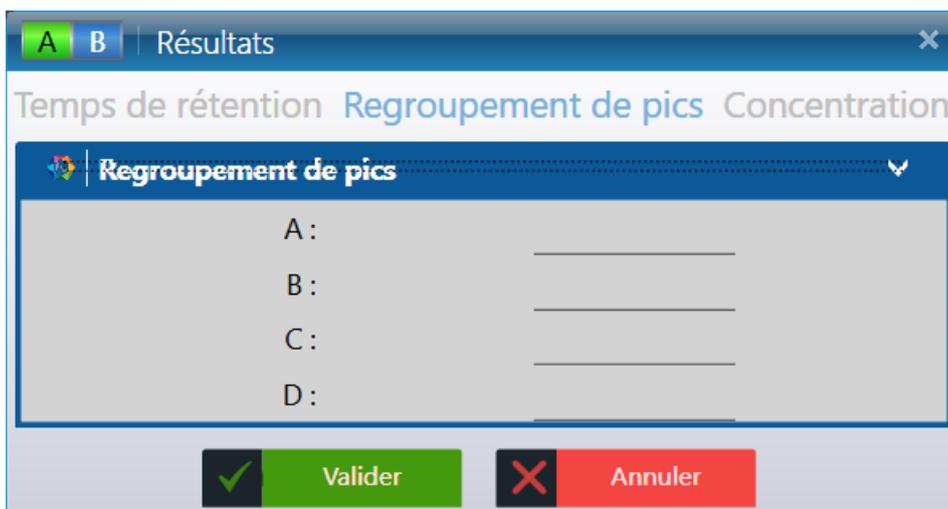


g) 3. Groupement de pics

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

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

La colonne "Groupe de pics" permet de donner un nom à chacun de ces 4 groupes de pics. Ceci peut être fait avant ou après l'édition de la table des composants.

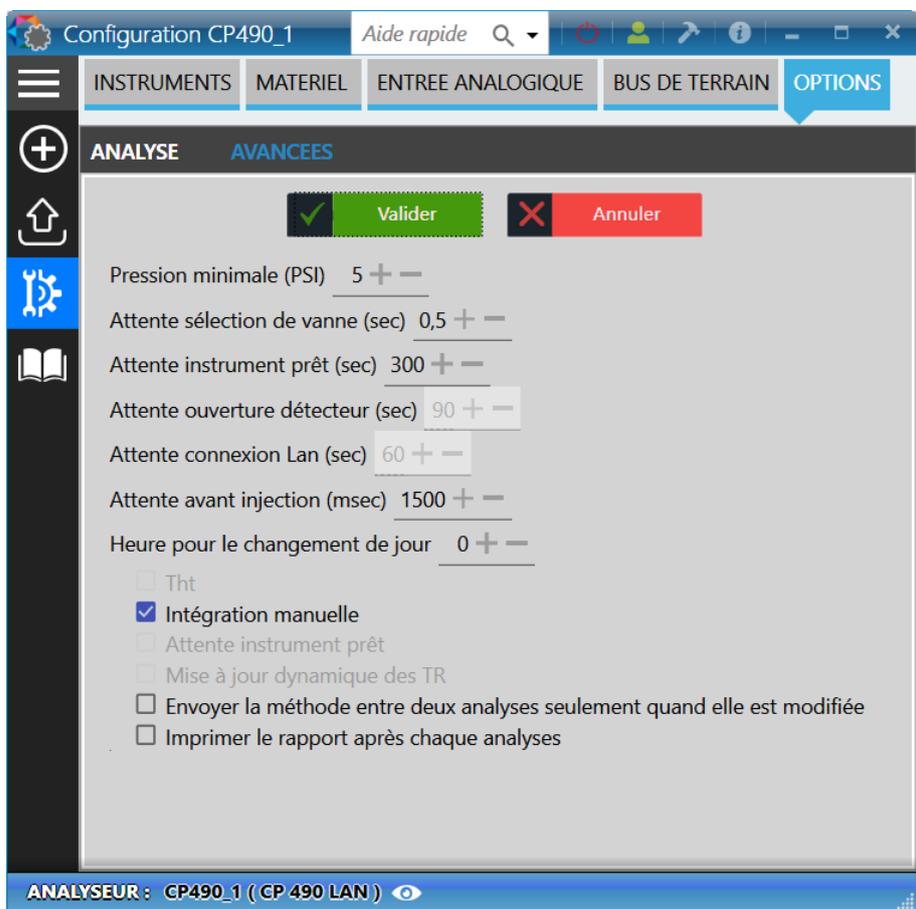


g) 4. Intégration manuelle

Parfois, il peut être nécessaire d'aller encore plus loin sur un chromatogramme particulier et d'imposer une correction de ligne de base qui est normalement impossible à obtenir avec les événements d'intégration. Ces modifications sont alors spécifiques de ce chromatogramme et n'ont pas à être écrites dans la méthode d'analyse.

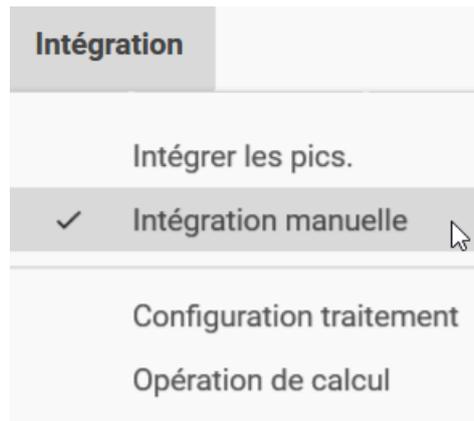
Pour activer l'intégration manuelle, suivez la procédure suivante :

1. Fermez Soprane II
2. Ouvrez la configuration
3. Sélectionnez l'instrument
4. Allez dans l'onglet **Option** et sélectionnez "Avancés" (voir chapitre [Gestion des options](#))
5. Cochez l'option "intégration manuelle"
6. Cliquez sur Valider



7. Fermez la configuration
8. Ouvrez l'instrument avec Soprane II
9. Accédez à l'onglet Traitement
10. Dans le menu "Intégration", cochez "Intégration manuelle"

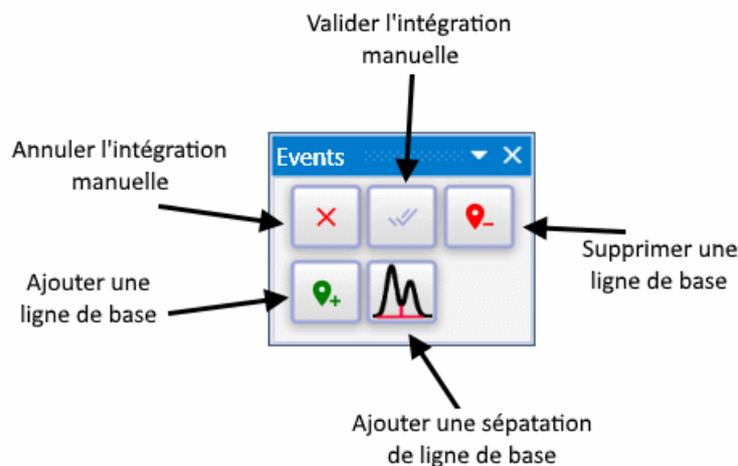




Avec la fonction intégration manuelle, vous serez en mesure d'ajouter/supprimer, de déplacer une ligne de base et d'ajouter une séparation de ligne de base.

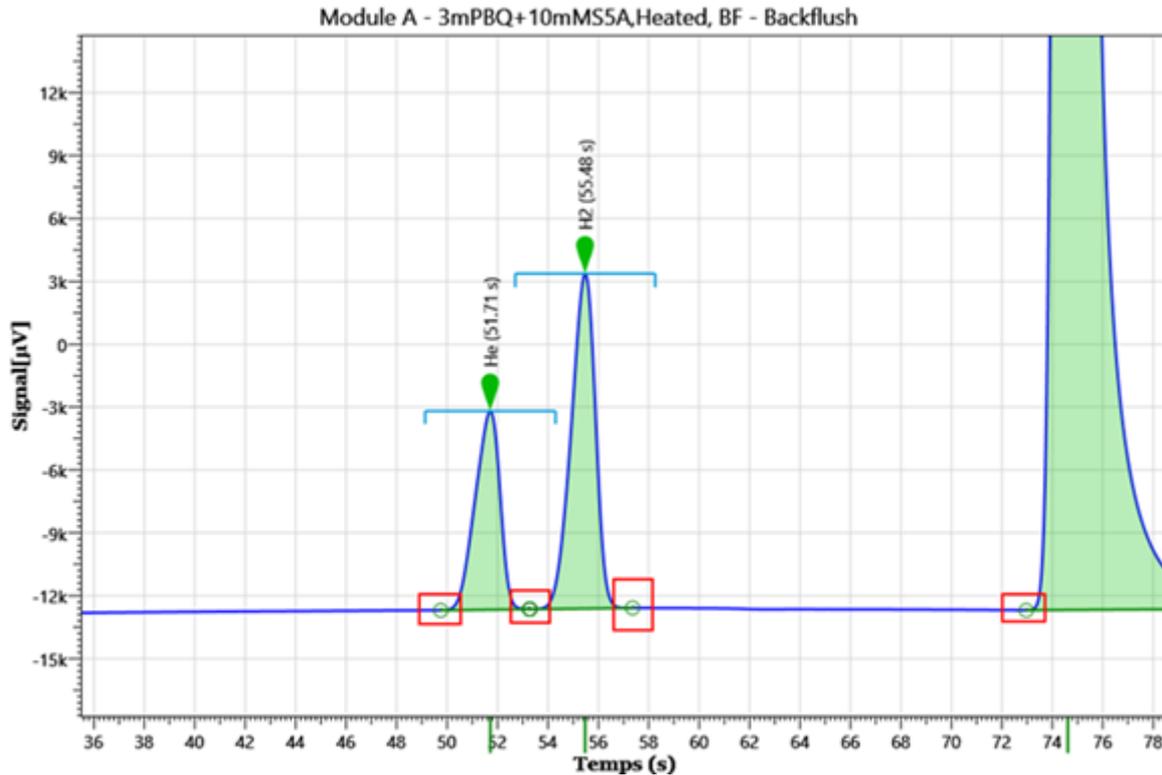
Attention, la ligne de base manuelle n'est pas sauvegardée avec la méthode, c'est une fonctionnalité pour ajuster les résultats, donc si vous faites un traitement par lots ou une intégration, les lignes de base manuelles seront effacées.

Si la ligne de base manuelle est activée, la palette suivante sera visible :



Une fois que le paramètre "intégration manuelle" est vérifié dans la configuration et dans la partie Traitement, les début et fin de la ligne de base doivent être entourés (voir l'image ci-dessous). Vous pouvez déplacer ces lignes de base en cliquant sur le cercle tout en maintenant la souris enfoncée.





4.6. Traitement post-analyse

4.6.1. Alarmes composant

SOPRANE offre la possibilité de gérer des alarmes seuils liées à la concentration des constituants. Si des relais ont été définis (Voir chapitre [Alarmes](#)), 16 alarmes sont ainsi disponibles. Une sortie relais est généralement utilisée pour signaler un défaut analyseur. Les autres relais peuvent être utilisés pour ces alarmes seuil.

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

- La référence du constituant surveillé (une liste déroulante permet d'éviter tout risque d'erreur).
- Le flux sur lequel ce constituant est surveillé.
- La variable utilisée pour ce défaut (concentration brute, concentration normalisée, le temps de rétention, aire du pic ou la hauteur).
- La valeur de seuil bas.
- La valeur de seuil haut.
- L'alarme à associer.
- L'action à exécuter si défaut (facultatif)





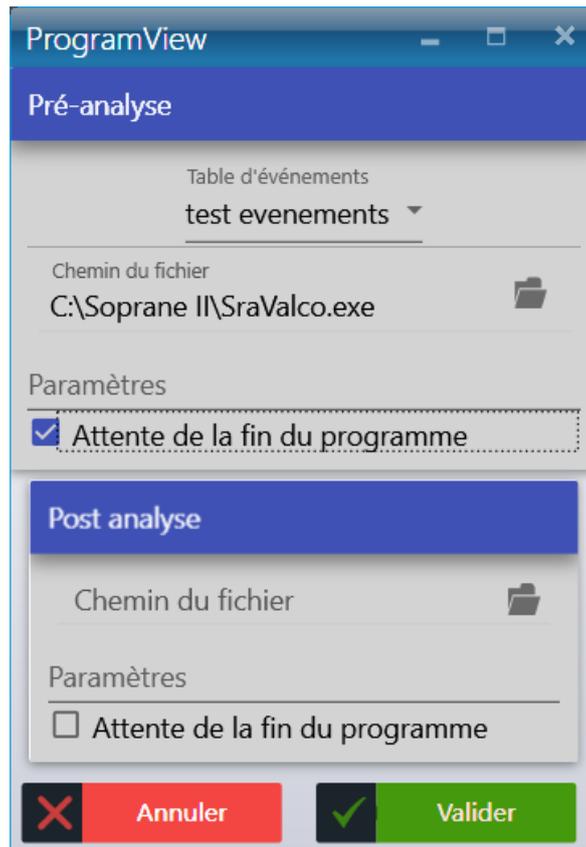
4.6.2. Pre et post commandes

SOPRANE II offre la possibilité de lancer un programme avant ou après l'analyse par le menu "**Options / Commandes**".

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

Nous avons mentionné (voir chapitre [Table d'événements d'analyse](#)) qu'il était possible de démarrer une table d'événements personnalisée (pour changer de voies échantillon, activer un relais ...) avant l'analyse (pré-exécution).





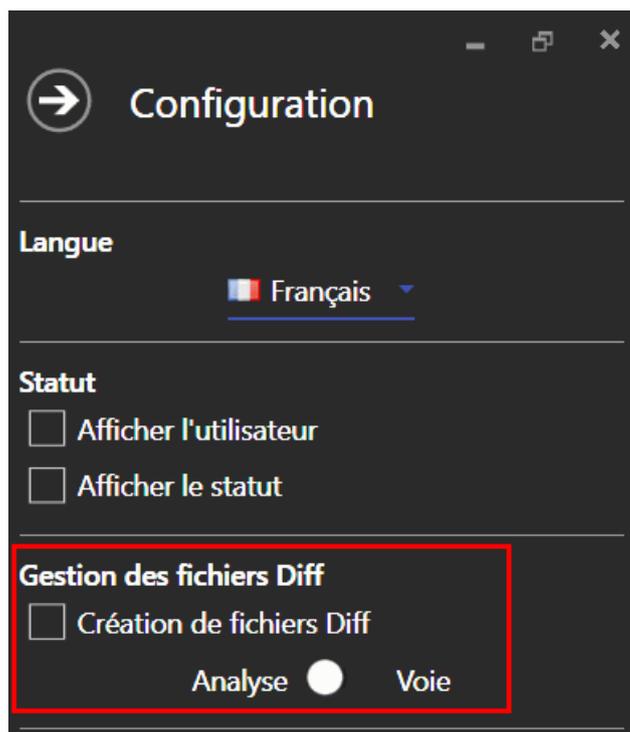
Si nécessaire, un bouton situé à droite de la zone d'édition est utilisé pour afficher les répertoires et les fichiers et pour sélectionner directement le programme utilisateur.

4.6.3. Archivage

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

Le menu "**Paramètres / Configuration / Fichiers résultats**" permet l'affichage d'une fenêtre volante où est indiqué le nom du répertoire sous lequel les résultats seront stockés.





Les données stockées dans ces fichiers sont :

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

Un nouveau fichier est généré automatiquement chaque jour (si gestion quotidienne voir le chapitre [Gestion des options](#)). Le nom du fichier sera le nom de la série si le champ "**Analyse**" est coché sinon, il sera nommé comme le nom de la voie d'échantillonnage.

4.7. Calculs spécifiques

La méthode d'analyse, telle que décrite précédemment (voir chapitres [Méthodes et séquences](#) et [Ecriture d'une méthode d'intégration](#)), suffit pour tout ce qui concerne les calculs ordinaires de la chromatographie.

SOPRANE II offre la possibilité d'aller bien plus loin que les simples calculs de concentration et d'effectuer des calculs complémentaires. Les options de calculs spécifiques sont accessibles si elles sont activées dans la licence. (Calculs ISO 6976, Calculs GPL, Calculs Combustion, Calculs Annexes, Calculs Excel).

Les valeurs par défaut sont celles des composants parfaits à 1.01325 bars en respect de la norme ISO/DIS 6976 :2016 et du standard expérimental X20-522.

Les composants détectés et identifiés dans l'analyse sont pris en compte que si le nom a une correspondance dans les tables de référence.



4.7.1. Calculs du pouvoir calorifique du gaz naturel (ISO 6976:2016)

Des rapports de calculs spécifiques selon la norme ISO 6976 :2016 peuvent être générés en fin d'analyse. Il est possible de créer ces rapports avec une série de calculs, une unité spécifique pour les PCI, PCS, et des conditions de température différentes.

a) Sélection des calculs

La sélection des calculs se trouve dans l'onglet "Analyse", menu "Calculs spécifiques", commande "**Sélection des calculs**". 5 rapports peuvent être définis à chaque fin d'analyse.

Pour définir les calculs "ISO 6976 :2016", cliquez sur "+" pour ajouter des calculs (maximum 5) et "-" pour réduire le nombre de rapports.

Sélectionner les calculs
✕

ISO 6976 Gaz naturel
Combustion
ISO 8973:1999 - GPL
Calculs annexes

Nombre de calculs 1 + -

Calculs #1

⚙️
Conditions de référence

Utilisé

T° Ref Combustion
0°C

T° Ref mesurage
0°C

Unité de calcul
Mj/m3

☰
Sélection des calculs à effectuer

Masse mol.

Fact. de compression

Masse vol. idéale

Masse vol. réelle

Densité idéale

Densité réelle

PCI molaire idéal

PCI molaire réel

PCI massique idéal

PCI massique réel

PCI volumétrique idéal

PCI volumétrique réel

PCS volumétrique idéal

PCS volumétrique réel

PCS molaire idéal

PCS molaire réel

PCS massique idéal

PCS massique réel

Indice de Wobbe idéal

Indice de Wobbe réel

Indice de Wobbe inférieur idéal

Indice de Wobbe inférieur réel

✓ Valider



Pour chaque calcul, vous pouvez :

- Activer le calcul (coche "Utilisé"). Cette action permettra la création du rapport en fin d'analyse. Si la case "Utilisé" est décochée, les paramètres des calculs seront pris en comptes mais le rapport ne sera pas créé en fin d'analyse.
- Définir les conditions de températures. La norme ISO6976 peut être appliquée à des conditions de températures spécifiques. Sélectionner les conditions de températures désirées.
- Sélectionner l'unité pour le calcul des PCI et PCS.
- Sélectionner les calculs à effectuer.

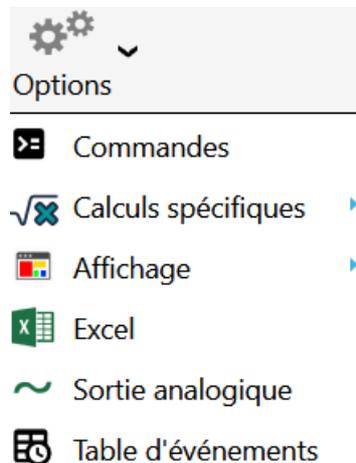
Ces calculs ne sont applicables qu'à partir des concentrations normalisées. A noter que les composants inconnus et non présents dans la table de référence ISO6976 sont pris en compte dans les calculs des concentrations normalisées (et donc des calculs de la norme). Pour les exclure, il faut décocher l'affichage des composants inconnus du rapport et ne pas activer les composés (hors spécifications ISO6976) de la table des composants de la méthode utilisée.

Note :

L'indice de Wobbe et le facteur de compression ne seront pas effectués si l'unité sélectionnée est "Btu/scf", "MJ/mol", "kJ/mol".

b) Définition des valeurs de référence

La table des coefficients de référence de la norme ISO6976 :2016 est enregistrée dans le fichier "iso6976.coef" (dans le répertoire d'installation de SOPRANE II). Pour éditer les valeurs, allez dans l'onglet "Analyse" puis dans le menu "Calculs spécifiques" et cliquez sur la commande "Table des coefficients".



La table des coefficients de référence de la norme ISO 6976:2016 se trouve dans la section de l'onglet "ISO6976 Gaz naturel".

L'éditeur se présente sous la forme d'un tableau contenant les coefficients de référence, d'une liste contenant les conditions de température et de référence indiquées dans la norme ISO 6976 et d'un panel de commandes.



Tables des coefficients					
Iso 6976:2016		Combustion	ISO 8973:1999 - GPL		
	+	Composant	Masse mol.	PCS	Facteur de sommation
1		CH4	16,042	892,920	0,049
2		C2H6	30,069	1564,350	0,100
3		C3H8	44,096	2224,030	0,147
4		nC4	58,122	2883,350	0,202
5		iC4	58,122	2874,210	0,189
6		nC5	72,149	3542,910	0,259
7		iC5	72,149	3536,010	0,246
8		neoC5	72,149	3521,750	0,225
9		nC6	86,175	4203,240	0,332
10		iC6	86,175	4195,640	0,311
11		Methyl-3 Pentane	86,175	4198,270	0,300

Temp. de référence

T° Ref Combustion
0°C

T° Ref mesurage
0°C

+ Insérer

⌛ Restaurer

⊗ Nbre atomes

Coefficients de l'Air

📁 Enregistrer

Le tableau est composé des colonnes "**Composant**", "**Masse mol**", "**PCS**" et "**Fact. de sommation**". Pour chaque composé de référence, vous trouverez leur masse molaire, les PCS de référence en fonction des conditions de températures de référence ainsi que le facteur de compression qui varie également en fonction des conditions de référence.

Vous pouvez supprimer un composant en cliquant sur . Pour ajouter un composant cliquez sur . Une nouvelle ligne sera ajoutée à la fin du tableau. Pour insérer un composant dans le tableau à une position spécifique, cliquez dans une cellule du composant qui succédera à ce nouveau composant puis cliquez sur la commande "**Insérer**". Entrez le nom et les coefficients de référence de ce composant puis sauvez les informations en cliquant sur le bouton "**Enregistrer**".

L'utilisateur peut redéfinir ses propres valeurs de référence pour chaque condition de température et de référence. Ces valeurs seront enregistrées dans la base de données de l'analyseur en cours d'utilisation. À tout moment, l'utilisateur peut restaurer les valeurs d'origine en cliquant sur le bouton "**Restaurer**".

Si vous changez de conditions de température (de 0°C / 0°C à 15°C / 0°C par exemple), la table de coefficients sera mise à jour en fonction de ces informations. Les PCS et facteurs de sommation sont différents selon les conditions de température.

Pour restaurer la table d'origine, cliquez sur la commande "**Restaurer**" dans la fenêtre de la table des coefficients. SOPRANE II affichera les valeurs des coefficients du fichier "iso6976.coef".

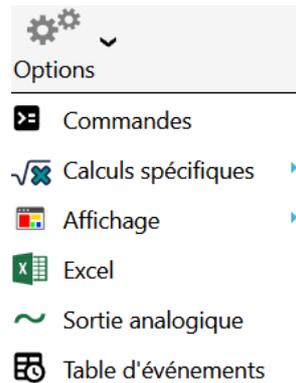
Cliquez sur le bouton "**Restaurer**" pour une remise à zéro des coefficients de référence de l'analyseur. Vous pouvez ajouter, modifier ou supprimer ces coefficients. Validez les modifications en cliquant sur le bouton "**Enregistrer**".



4.7.2. Calculs GPL (ISO 8973)

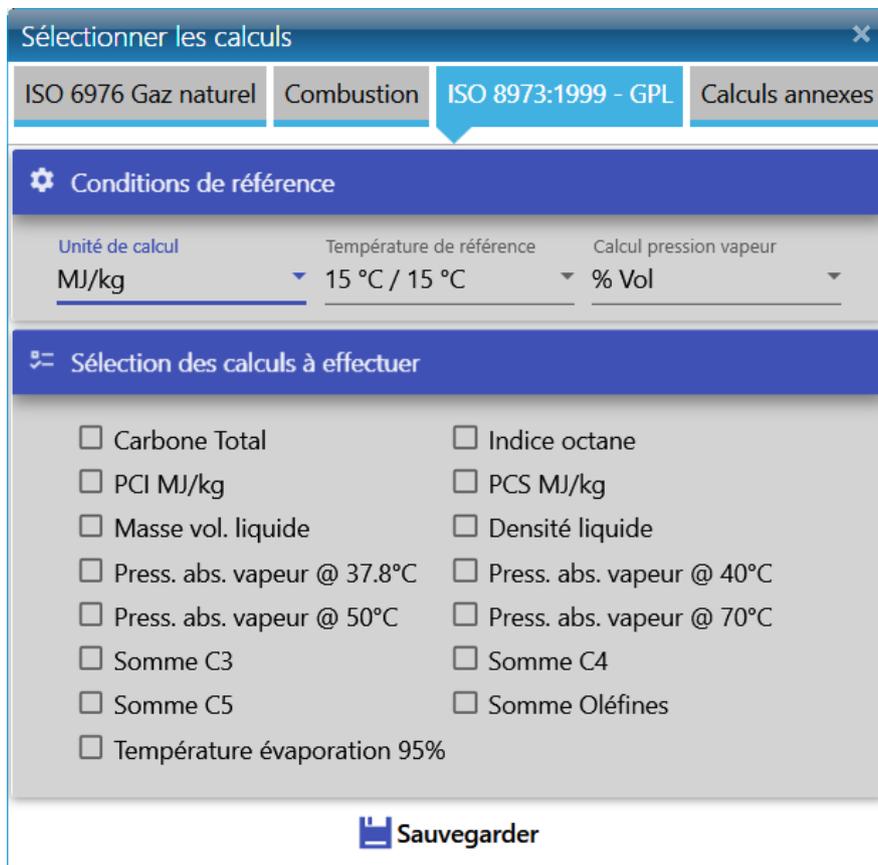
Dans le cas d'analyses de GPL, SOPRANE II peut afficher un rapport annexe de résultats conforme à la norme ISO 8973. L'utilisateur sélectionne les paramètres de référence ainsi que les calculs à effectuer et les résultats seront générés à chaque fin d'analyse.

Pour paramétrer le rapport, allez dans l'onglet "Analyse" puis dans le menu "Options > Calculs spécifiques" et cliquez sur la commande "Sélectionner les calculs". Cliquez sur l'onglet "ISO 8973 - GPL" pour afficher les paramètres de référence.



a) Sélection des calculs

L'onglet "ISO 8973 - GPL" présente les options de calculs ISO 8973. Sélectionnez les paramètres de base (unité de calcul, température de référence et unité de concentration) puis sélectionnez les calculs à effectuer.



Ces calculs ne sont applicables qu'avec les concentrations normalisées des composants de l'analyse. Les composants inconnus et non présents dans la table de référence sont pris en compte dans les calculs des concentrations normalisées (et donc des calculs de la norme). Pour les exclure, il faut décocher l'affichage des composants inconnus du rapport et ne pas activer les composés (hors spécifications) de la table des composants de la méthode utilisée.

Les résultats seront affichés dans une section spécifique du rapport final qui sera généré à chaque fin d'analyse.

b) Définition des valeurs de référence

La table des coefficients de référence de la norme ISO 8973 est enregistrée dans le fichier "gpl.coef" (dans le répertoire d'installation de SOPRANE II). Pour éditer les valeurs, allez dans l'onglet "**Analyse**" puis dans le menu "**Options > Calculs spécifiques**" et cliquez sur la commande "**Table des coefficients**".

	+	Composant	Masse mol.	Nb carbone	Somme C3	Somme C4
1		CH4	16,043	1	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
2		C2H4	28,054	2	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
3		C2H6	30,07	2	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
4		C3H6	42,081	3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
5		C3H8	44,097	3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
6		iC4	58,123	4	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
7		nC4	58,123	4	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
8		1-Butene	56,108	4	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
9		Iso-Butene	56,108	4	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
10		Cis-2-Butene	56,108	4	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

La table des coefficients de référence de la norme ISO 8973 se trouve dans la section de l'onglet "ISO 8973 - GPL".

L'éditeur se présente sous la forme d'un tableau contenant les coefficients de référence, d'une liste contenant les conditions de température et de référence indiquées dans la norme et un panel de commandes.

Le tableau est composé des colonnes "Composant", "Masse mol", "Nb carbone", "Somme C3", "Somme C4", "Somme C5", et "Coef. M Vol", "Press abs Vapeur @ 37.8, 40, 50 et 70°C", "Olefines" et "Fact. indice octane".



Vous pouvez supprimer un composant en cliquant sur . Pour ajouter un composant cliquez sur . Une nouvelle ligne sera ajoutée à la fin du tableau. Pour insérer un composant dans le tableau à une position spécifique, cliquez dans une cellule du composant qui succédera à ce nouveau composant puis cliquez sur la commande "Insérer un composant". Entrez le nom et les coefficients de référence de ce composant puis sauvez les informations en cliquant sur le bouton "**Enregistrer**".

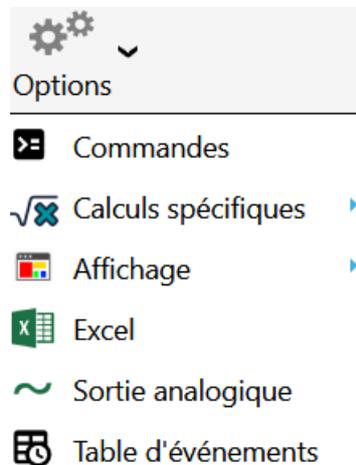
L'utilisateur peut redéfinir ses propres valeurs de référence pour chaque condition de température et de référence. Ces valeurs seront enregistrées dans la base de données de l'analyseur en cours d'utilisation. À tout moment, l'utilisateur peut restaurer les valeurs d'origine en cliquant sur le bouton "**Restaurer**". Cette action videra la table actuelle (propre à l'analyseur) et insérera les valeurs par défaut du fichier gpl.coef.

L'utilisateur peut également mettre ce fichier à jour à partir de la table actuelle.

4.7.3. Calculs combustion

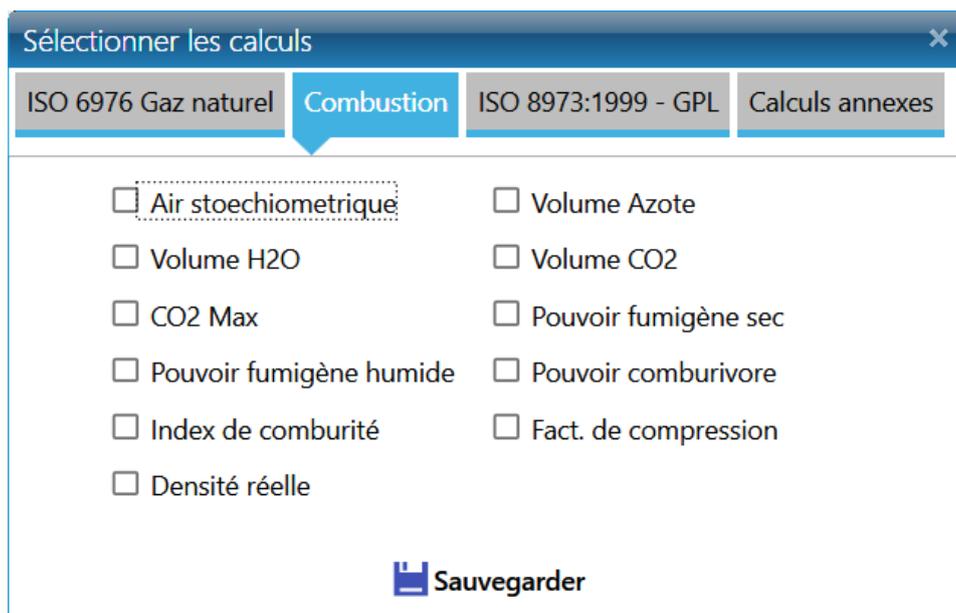
L'attention accrue portée à la qualité des émissions de combustion et le coût élevé de l'énergie impose un plus grand intérêt dans l'optimisation de la combustion dans les chaudières et les brûleurs en général. Le rapport entre l'air et le carburant, les produits de combustion, sont des paramètres critiques qui doivent être surveillés et contrôlés.

SOPRANE II effectue les calculs de combustion et génère un rapport en fin d'analyse. Sélectionnez les calculs à intégrer dans le rapport final en allant dans le menu "**Options > Calculs spécifiques**" (onglet "**Analyse**" à gauche de SOPRANE II).



Dans la fenêtre de sélection des calculs, cliquez sur l'onglet "**Combustion**" puis cochez les calculs à effectuer. Pour ces calculs, il n'y a pas de coefficients de référence.



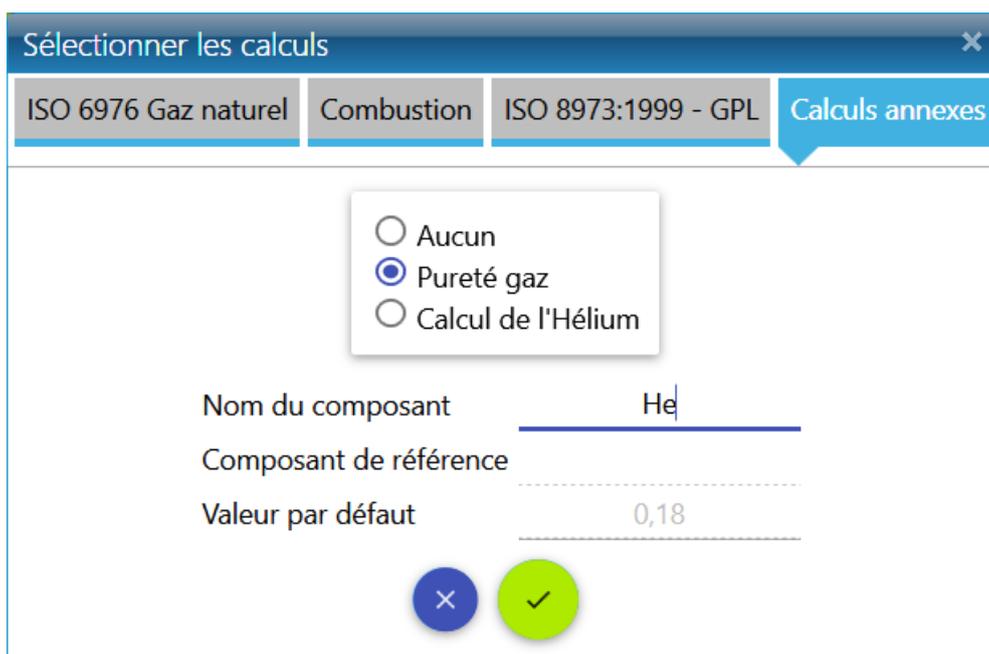


4.7.4. Calculs annexes

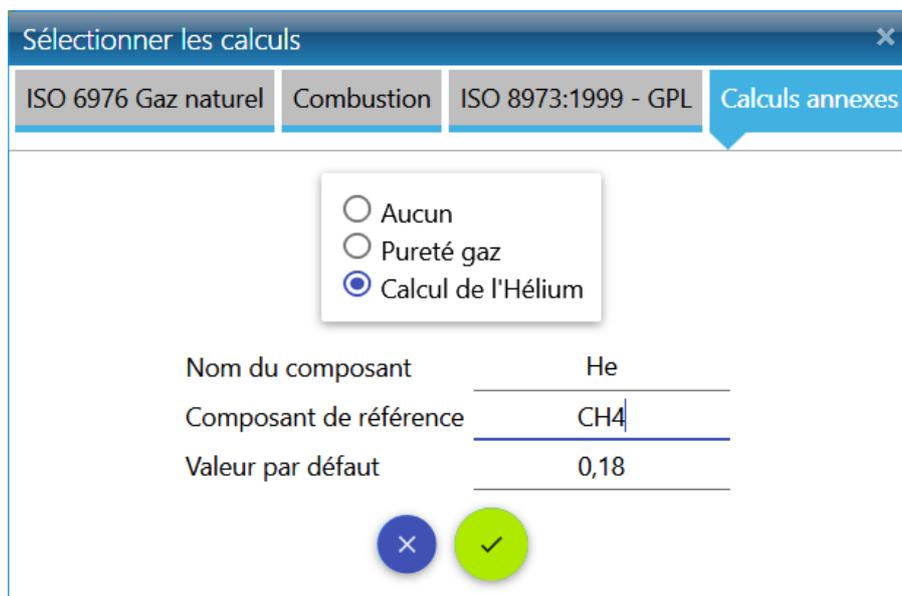
D'autres calculs spécifiques peuvent être appliqués aux résultats d'analyses. Pour cela, allez sur l'onglet "**Options > Calculs spécifiques > Sélection des calculs > Calculs annexes**". Cochez la case qui correspond au calcul à effectuer. Si vous ne souhaitez pas faire de calculs, cochez la case "Aucun".

a) Calcul de la pureté du gaz

Le calcul de la pureté du gaz s'effectue avec les concentrations normalisées. La concentration du composant référencé (ici l'Hélium), est calculée en soustrayant à 100 la somme des concentrations normalisées de tous les autres composés de l'analyse. Si des unités sont différentes de %, un calcul est appliqué à la concentration normalisée pour la ramener en %.



b) Calcul de l'hélium



L'estimation de l'hélium est liée à la norme ISO 6976 et à l'analyse des gaz naturels, elle doit être ajoutée à l'option de calcul ISO 6976.

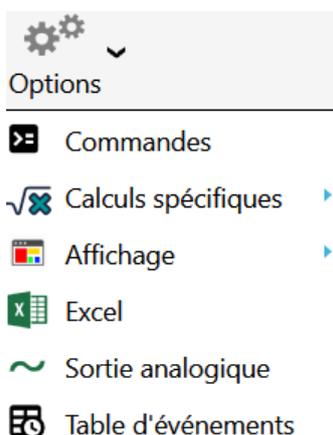
L'hélium est naturellement présent dans le gaz naturel, mais il n'est pas mesuré par un analyseur GC classique (car l'hélium est utilisé par le gaz porteur).

Cette option est utilisée pour calculer la concentration d'hélium, en l'estimant à partir de la concentration de CH4 mesurée.

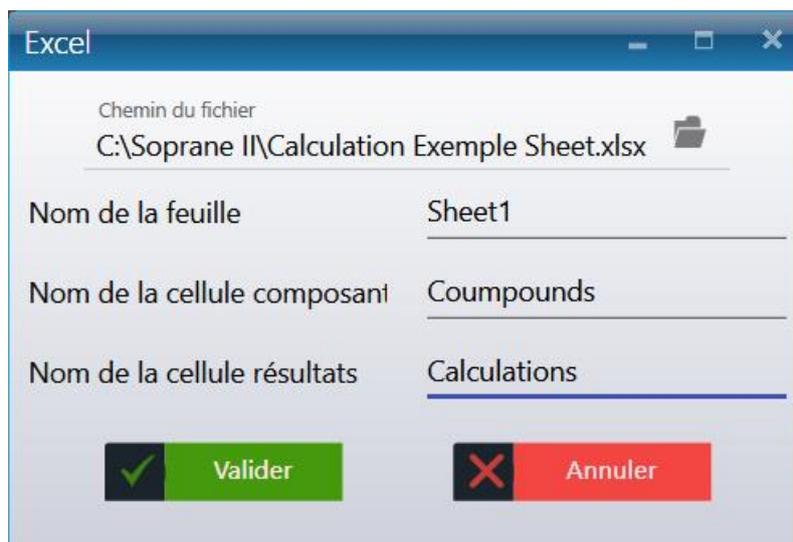
4.7.5. Calculs via Excel

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

Si l'option est activée, cliquez sur le menu "Options > Excel" :



La première ligne de cet écran est l'emplacement du fichier EXCEL.



Un dossier EXCEL pouvant comporter plusieurs feuilles, la deuxième ligne correspond à la référence de la feuille utilisée pour les échanges de données (dans notre cas **Sheet1**).

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

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

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

SOPRANE II vient ensuite rechercher en colonne A une cellule "**Calculations**".

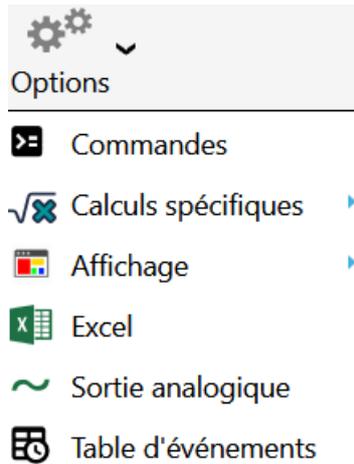
Les résultats calculés par la feuille EXCEL doivent obligatoirement se trouver dans les lignes suivantes, selon le format suivant :

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

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

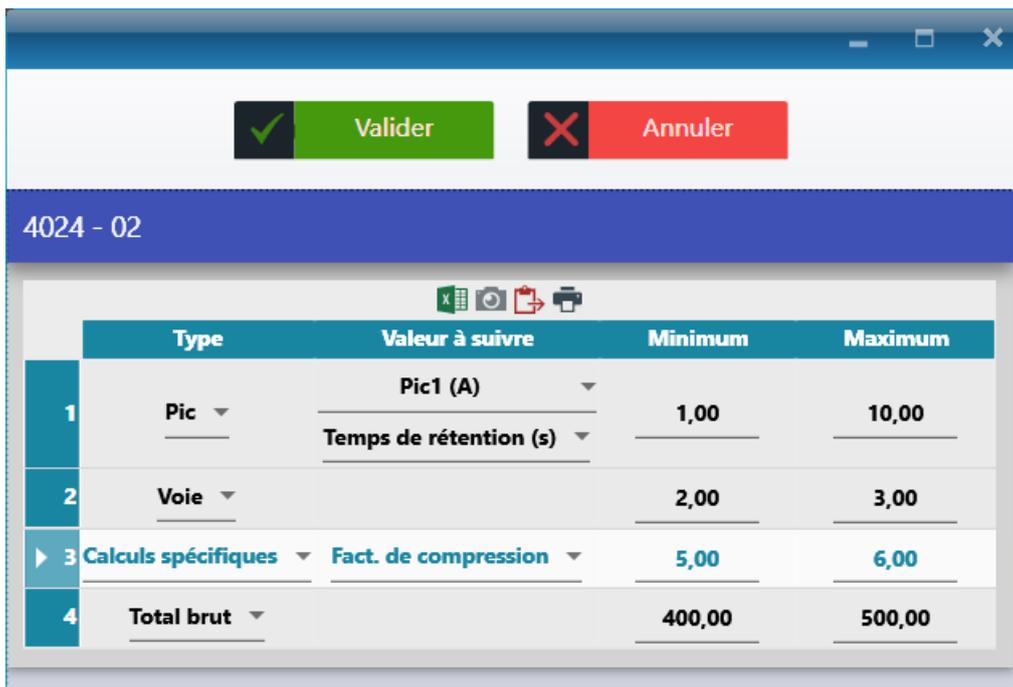
Lorsque SOPRANE II imprime le résultat d'une analyse, ou lorsque l'on veut programmer le résultat d'un calcul sur une sortie tendance ou une sortie 4-20 mA, le calcul est référencé par son nom (Colonne A).





Voici la liste des différents types de valeurs pouvant être envoyés :

- Valeur maximale (il faut sélectionner le pic suivi et le résultat à envoyer (temps de rétention, concentration, aire ...))
- Flux actuel
- Calcul spécifique (besoin de sélectionner quel type de calcul)
- Total brut



4.8.2. Modbus

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



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

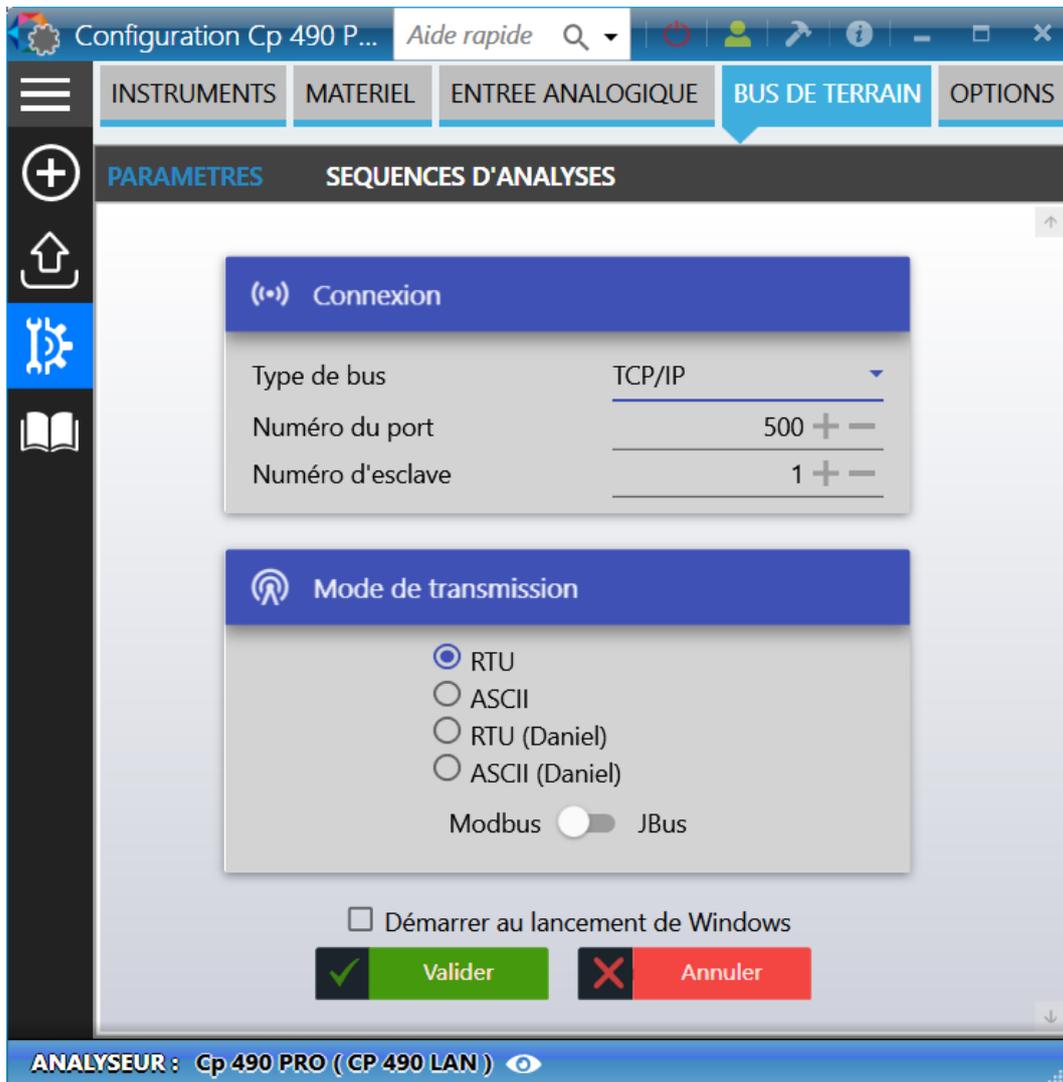
Les données susceptibles d'être échangées sont stockées dans une table d'adresses. Le protocole de transmission respecte un standard qui consiste à demander ou à transmettre une question, et en réponse la valeur de la variable se trouvant à telle ou telle adresse est transmise.

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

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

a) Configuration matériel

Le programme de configuration de Soprane II  permet de définir la configuration de cette liaison série. La fenêtre permettant la configuration Modbus n'est visualisée que si l'installation comprend une option Modbus.



Dans cette fenêtre :

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

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

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

NOTE :

Le logiciel SRA.Soprane.Modbuse est lancé automatiquement après l'initialisation de Windows. En conséquence, la prise en compte d'une modification des paramètres ne sera effective que lors du redémarrage de Windows.

b) Configuration logiciel

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

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

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



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



Register	Name	Value
Demo (1 Registres)		
30020	Bit de vie	28
test auxiliary (7 Registres)		
30011	Année	0
1	Résultats prêt	Non
30010	Pic0 (A) Concentration normalisée	0
30001	Status analyseur	En attente (0)
30002	Information GC prêt	Pas prêt (0)
30005	Durée d'analyse (s)	0
30012	Type d'analyse	Etalon (0)

Les données sont séparées en 5 niveaux :

- Les variables système de l'analyseur : "**Instrument**"
- Les variables système de l'analyse : "**Échantillons / Étalonnage**"
- Les valeurs en relation avec les composants : "**Résultats**"
- Les valeurs en relation avec le calcul : "**Calculs spécifiques**"
- Les valeurs en relation avec les entrées analogiques : "**Entrées analogiques**"

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

Ce paramétrage s'effectue directement dans le logiciel MODBUS via l'onglet "**Adresses**".

Dans un premier temps, il est préférable de tester si la communication est correcte (voir chapitre [Test Modbus](#)).

L'onglet "**Données brutes**" contient toutes les valeurs Modbus dans quatre tables différentes. Deux tables stockent des valeurs discrètes ON/OFF (bobines) et deux valeurs numériques (registres). Les bobines et les registres ont chacun une table en lecture seule et une table en lecture-écriture. Chaque table a 9999 valeurs. Chaque bobine ou contact a un bit et une adresse de données est attribuée entre 0000 et 270E. Chaque registre est de 1 mot = 16 bits = 2 octets et a une adresse de données comprise entre 0000 et 270E.

L'onglet "**Communication**" contient toutes les transmissions et réceptions Modbus.



b) 1. Variables instrument

Les variables pouvant être utilisées sont :

- **Flux sélectionné** : Dans le cas d'une application multivoies, cette valeur indique le numéro de la voie analysée correspondant aux résultats affichés.
- **Top injection** : Cette valeur est définie à 1 chaque fois qu'une analyse est démarrée.
- **Type d'analyse** : Cette valeur indique le type d'analyse effectuée (0 = blanc, 1 = échantillon, 2 = étalon).
- **Alarme** : Cette valeur indique les différentes alarmes obtenues lors de l'analyse dans le logiciel SOPRANE II. Elle peut prendre plusieurs valeurs ; ces valeurs sont obtenues selon une combinaison de bits.
 - 0 : pas d'alarme
 - 1 : chromatographe par défaut
 - 2 : cycle arrêté
 - 4 : méthode invalide ou inconnue
 - 8 : connexion défectueuse avec le chromatographe
 - 16 : incapable de traiter les résultats
 - 32 : débit d'échantillon par défaut (option)
 - 64 : par défaut avec sélecteur de flux ou vanne multi-positions (option)
- **Bite de vie** : Cette variable est utilisée pour surveiller la transmission. Sa valeur est mise à jour toutes les secondes.
- **Statut** : Cette variable est utilisée pour surveiller le cycle de Soprane II. Elle peut prendre les valeurs suivantes :
 - 0 : En attente
 - 1 : Chromatographe prêt
 - 2 : En attente de démarrage
 - 3 : En attente d'injection (échantillonnage)
 - 4 : Analyse en cours
 - 5 : Récupération des points
 - 6 : Analyse terminée
 - 7 : Régénération
 - 8 : Traitement d'erreur
- **GC Ready** : Cette variable permet de connaître l'état du chromatographe. Elle peut prendre les valeurs suivantes :
 - 0 : Pas prêt
 - 1 : Prêt
 - 2 : Défaut
- **Démarrer analyse** : Cette variable permet de lancer des analyses via SOPRANE II. Elle peut prendre plusieurs valeurs :
 - 0 : Aucune analyse demandée, ou cycle arrêté après l'analyse en cours.
 - 1 : Lancement d'analyses en mode simple analyse.
 - 2 : Lancement d'une seule séquence.
 - 3 : Lancement d'analyses en mode automatique.
 - 4 : Lancement d'analyses en mode étalonnage.
- **Temps d'analyse** : Indique à l'instant t, le temps écoulé depuis le début de l'analyse.
- **Nb analyses / N° séquence** : Cette variable est utilisée pour indiquer le nombre d'analyses demandées dans le cas d'un type de requête d'analyse 1. Pour les autres types, elle indique le



numéro de la séquence que l'on veut effectuer. Cette affectation est réalisée dans le logiciel de configuration de SOPRANE II via le menu "Modbus / Séquence d'analyses" :

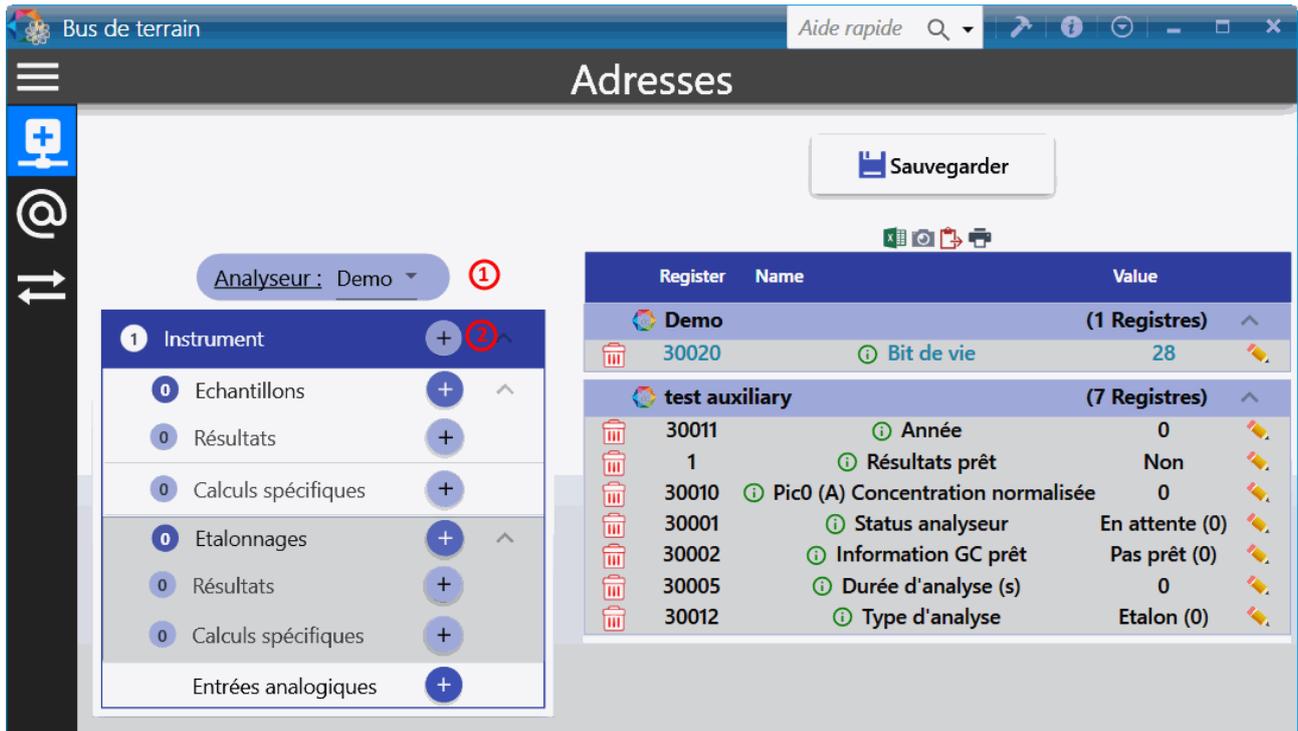


Notez que si cette variable a la valeur zéro, les analyses ne sont pas lancées ou les analyses sont arrêtées à la fin de l'analyse en cours.

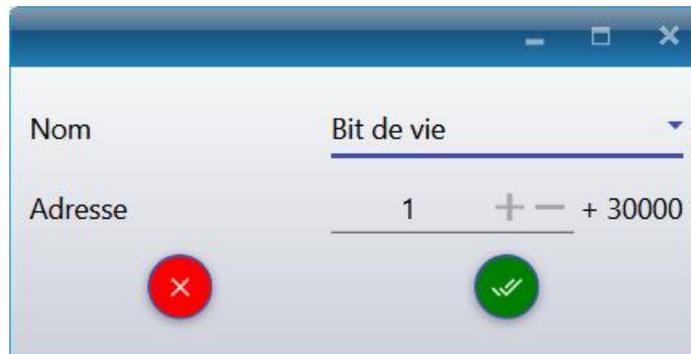
Pour ajouter ces variables :

- Sélectionnez l'analyseur
- Cliquez sur le bouton ajouter du paramètre Instrument





- Dans la fenêtre qui apparaît, sélectionnez la variable, tapez le numéro d'adresse.



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

b) 2. Variables d'échantillon/étalon

Les variables pouvant être utilisées sont :

- **L'année** de l'analyse
- **Le mois** de l'analyse
- **Le jour** de l'analyse
- **L'heure** de l'analyse
- **Les minutes** de l'analyse
- **Les secondes** de l'analyse
- **Les données prêtes** : SRAModbus utilise cette variable et la passe à 1 pour indiquer que les



résultats de l'analyse sont disponibles. C'est à l'ordinateur distant de la remettre à 0 lorsqu'il a lu ces valeurs.

- **L'alarme composants** : la valeur de cette variable est décomposée en 16 bits. Si une alarme de Soprane II est déclenchée, le bit correspondant à cette alarme sera actif.

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

- Sélectionnez l'analyseur
- Sélectionnez "**Échantillon**" ou "**Étalonnage**" en cliquant dessus
- Dans la barre de menus, sélectionnez "**Adresses / Ajouter**"
- Dans la fenêtre qui s'affiche, sélectionnez le nom de la variable, tapez le numéro d'adresse.

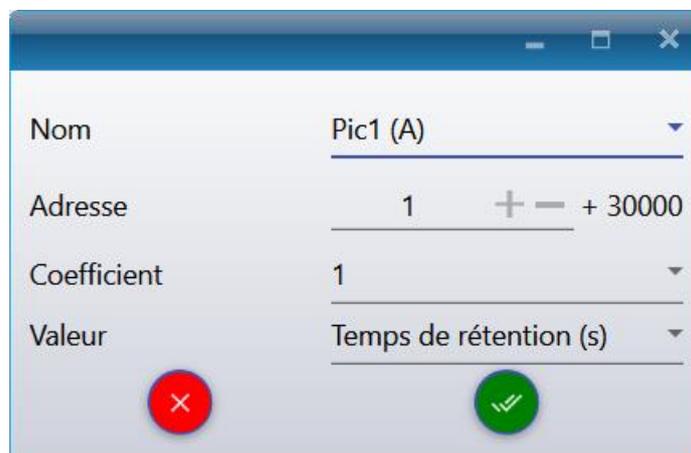
b) 3. Variables résultats

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

- Surface
- Concentration brute
- Concentration normalisée
- Temps de rétention
- Hauteur

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

- Sélectionnez l'analyseur
- Dans la barre de menus, sélectionnez "**Adresses**"
- Dans la partie **Résultats**, cliquer sur **Ajouter**.
- Dans la fenêtre qui s'affiche, sélectionnez le nom de la variable, tapez le numéro d'adresse et sélectionnez le type (entier court, entier long, réel)



Le coefficient permet de transférer les décimales de la valeur. En effet, les valeurs transmises avec ce choix de 'type' sont toujours des valeurs entières et donc les décimales sont supprimées. Par exemple, si vous voulez avoir deux chiffres après la virgule, l'astuce est de fixer le coefficient à 100. La valeur sera alors multipliée par 100 avant l'envoi et il suffira de diviser par 100 la valeur reçue pour obtenir une valeur avec deux décimales. **Attention, la valeur maximale envoyée ne peut pas dépasser 65535 avec le type 'entier court'** donc il est nécessaire de configurer correctement ce coefficient en fonction de l'unité du composant.



Cette valeur maximale peut être modifiée avec la valeur 'Plaine échelle' du menu "**Configuration**" (icône marteau en haut à droite de la fenêtre) (voir chapitre [Options Modbus](#)).

b) 4. Variable calcul spécifique

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

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

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

- Sélectionnez l'analyseur
- Dans la barre de menus, sélectionnez "**Adresses**"
- Dans la partie **Calcul spécifique**, cliquer sur **Ajouter**.
- Dans la fenêtre qui s'affiche, sélectionnez le nom de la variable, tapez le numéro d'adresse et sélectionnez le type (entier court, entier long, réel) et le coefficient.



Le coefficient permet de transférer les décimales de la valeur. En effet, les valeurs transmises avec ce choix de 'type' sont toujours des valeurs entières et donc les décimales sont supprimées. Par exemple, si vous voulez avoir deux chiffres après la virgule, l'astuce est de fixer le coefficient à 100. La valeur sera alors multipliée par 100 avant l'envoi et il suffira de diviser par 100 la valeur reçue pour obtenir une valeur avec deux décimales. **Attention, la valeur maximale envoyée ne peut pas dépasser 65535 avec le type 'entier court'** donc il est nécessaire de configurer correctement ce coefficient en fonction de l'unité du composant. Cette valeur maximale peut être modifiée avec la valeur 'Plaine échelle' du menu "**Configuration**" (icône marteau en haut à droite de la fenêtre) (voir chapitre [Options Modbus](#)).

b) 5. Variable entrée analogique

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

- Sélectionnez l'analyseur
- Dans la barre de menus, sélectionnez "**Adresses**"
- Dans la partie **Entrée analogique**, cliquer sur **Ajouter**.
- Dans la fenêtre qui apparaît, sélectionnez le nom de l'entrée analogique, le numéro de l'adresse et



le coefficient.

Le coefficient permet de transférer les décimales de la valeur. En effet, les valeurs transmises avec ce choix de 'type' sont toujours des valeurs entières et donc les décimales sont supprimées. Par exemple, si vous voulez avoir deux chiffres après la virgule, l'astuce est de fixer le coefficient à 100. La valeur sera alors multipliée par 100 avant l'envoi et il suffira de diviser par 100 la valeur reçue pour obtenir une valeur avec deux décimales. **Attention, la valeur maximale envoyée ne peut pas dépasser 65535 avec le type 'entier court'** donc il est nécessaire de configurer correctement ce coefficient en fonction de l'unité du composant. Cette valeur maximale peut être modifiée avec la valeur 'Plleine échelle' du menu "Configuration" (icône marteau en haut à droite de la fenêtre) (voir chapitre [Options Modbus](#)).

c) Test Modbus

1. Tests de communication

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

Configurez le paramètre de bit de vie à l'adresse 1 : Sélectionnez l'analyseur, puis cliquez sur le bouton ajouter.

The screenshot shows the 'Adresses' configuration window in the 'Bus de terrain' software. On the left, there is a sidebar with navigation icons. The main area features a 'Sauvegarder' (Save) button and a table of registers. The 'Analyseur' dropdown is set to 'Demo'. The table lists registers for 'Demo' and 'test auxiliary'. The 'Bit de vie' register is highlighted at address 30020 with a value of 28. Other registers include 'Année', 'Résultats prêt', 'Pic0 (A) Concentration normalisée', 'Status analyseur', 'Information GC prêt', 'Durée d'analyse (s)', and 'Type d'analyse'.

Register	Name	Value
Demo (1 Registres)		
30020	Bit de vie	28
test auxiliary (7 Registres)		
30011	Année	0
1	Résultats prêt	Non
30010	Pic0 (A) Concentration normalisée	0
30001	Status analyseur	En attente (0)
30002	Information GC prêt	Pas prêt (0)
30005	Durée d'analyse (s)	0
30012	Type d'analyse	Etalon (0)

Sélectionnez les paramètres suivants et confirmez avec le bouton de validation.





Depuis l'écran principal de Modbus, cliquez sur "**Sauvegarder**".

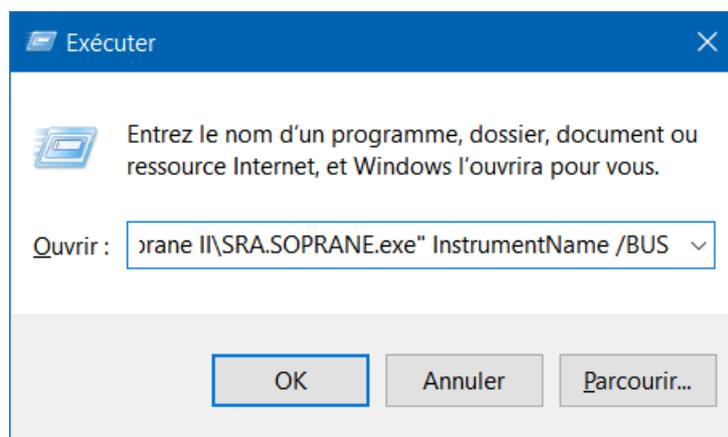
Depuis votre superviseur :

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

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

2. Transmission de valeurs

Les résultats des analyses sont envoyés à chaque fin d'analyse. Malheureusement, ceci n'est pas pratique lors des essais de communication. Il existe une possibilité d'envoyer les résultats après chaque retraitement d'analyses. Pour ceci, il est nécessaire de lancer Soprane depuis le menu Exécuter de Windows en saisissant la ligne suivante : "**C :\Soprane II\SRA.SOPRANE.exe" InstrumentName /BUS** (le chemin Soprane II entre guillemets suivi du nom de l'instrument et du paramètre / BUS)



Ensuite à partir du tableau de résultats de Soprane II, sélectionner plusieurs analyses faites un clic droit et sélectionnez "**Traitement par lot**", sélectionner la méthode puis l'analyse et valider (voir chapitre [Retraitement par lot](#)). Les résultats sont transmis.

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

d) Options Modbus

Pour accéder aux options Modbus, cliquez sur le marteau en haut à droite de la fenêtre Modbus.

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

4.9. Graphique

Le graphique est un élément très utile pour afficher un signal, il offre aussi une large panoplie de fonctionnalités comme le zoom sur un signal ou dans l'axe, le déplacement sur le graphique...

1. Zoom / Dézoom

- Roulez la molette de la souris sur le graphique pour zoomer / dézoomer
- Sélectionnez une zone du graphique

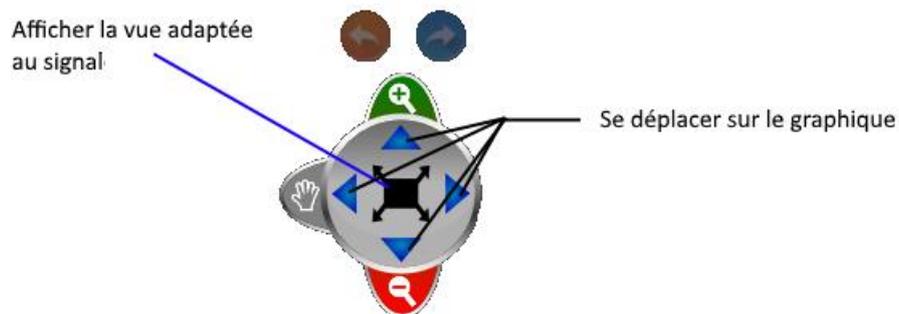
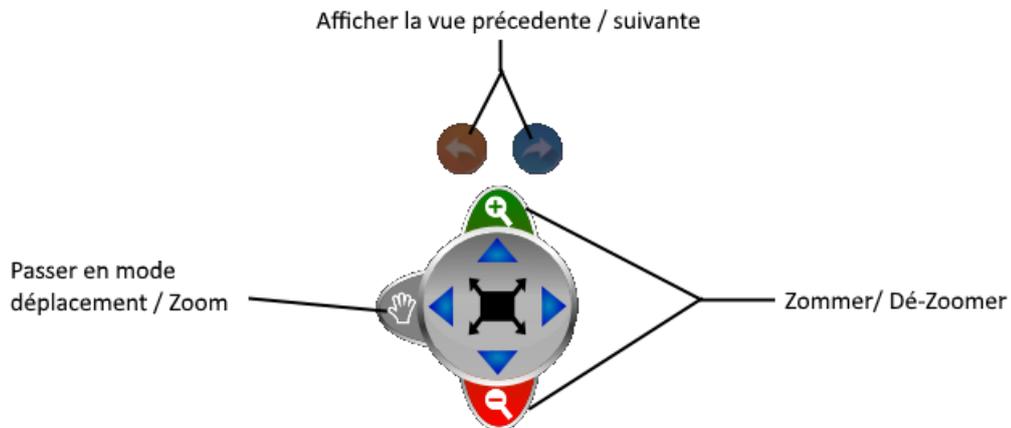


- Roulez la molette de la souris sur l'axe horizontal pour zoomer / dézoomer horizontalement
- Roulez la molette de la souris sur l'axe vertical pour zoomer / dézoomer verticalement
- Double cliquez droit sur l'axe horizontal ou vertical pour zoomer
- Double cliquez gauche sur l'axe horizontal ou vertical pour dézoomer

2. Navigation

- Glissez la souris sur l'axe horizontal ou vertical pour se déplacer sur le graphique
- Ctrl + Glissez la souris pour se déplacer sur le graphique

3. Palette



4. Raccourcis

- F11 : Copie d'écran du graphique dans le presse papier
- Ctrl + S : Sauvegarde le graphique en format image



4.10. Utilisation des tableaux de données

4.10.1. Exportation des données d'un tableau

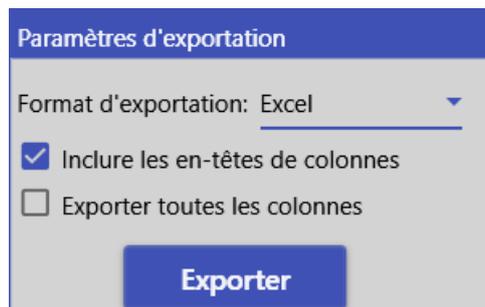
Dans la grande majorité des tableaux, les données peuvent être exportables à n'importe quel moment.

Les boutons suivants      permettent différents types d'export.

-  : Exporte les données dans un format ouvrable par Excel, CSV ou un fichier imprimable (voir les chapitres [Exportation vers Excel](#), [Exportation vers Csv](#), [Exportation vers Xps](#) et [Exportation vers Diff](#) pour plus de détails).
-  : Copie le tableau dans le presse papier en format image.
-  : Copie les valeurs du tableau dans le presse papier.
-  : Propose une visualisation d'impression et imprimera les résultats si désirés.
-  : Permet d'afficher une fenêtre de configuration du tableau correspondant.
-

a) Exportation vers Excel

En cliquant sur le bouton , une fenêtre s'ouvrira et proposera une liste de format à exporter, choisissez Excel.



Une option permet d'inclure les en-têtes des colonnes, si cette option est décochée, les colonnes n'auront pas de titre.

Voir les chapitres suivants pour plus d'options d'export :

[Exportation vers Csv](#)

[Exportation vers Xps](#)

[Exportation vers Diff](#)

b) Exportation vers Csv

En cliquant sur le bouton , une fenêtre s'ouvrira et proposera une liste de format à exporter, choisissez CSV.





Une option permet d'inclure les en-têtes des colonnes, si cette option est décochée, les colonnes n'auront pas de titre.

Le choix du séparateur de colonne propose les choix suivants :

- ; (point-virgule)
- , (virgule)
- Tabulation**

Les différents types de délimiteur de texte sont le caractère **double cote (")** ou **simple cote (')**.

Plusieurs formats de date sont proposés :

- Date courte (jour/mois/année)
- Date complète (exemple *mardi 18 octobre 2016*)
- Date complète et heure courte (exemple *mardi 18 octobre 2016 09 :05*)
- Date complète et heure longue (exemple *mardi 18 octobre 2016 09 :05 :45*)
- Date courte et heure courte (exemple *18/10/2016 09 :05*)
- Date courte et heure longue (exemple *18/10/2016 09 :05 :45*)
- Mois et jour
- Année et mois

Les différents formats numériques peuvent être de différents types :

- Général (format le plus compact)
- Virgule fixe (chiffres entiers et décimaux avec un signe négatif facultatif.)
- Scientifique (Exponentiel)
- Deux décimales
- Trois décimales

Voir les chapitres suivants pour plus d'options d'export :

[Exportation vers Excel](#)

[Exportation vers Xps](#)

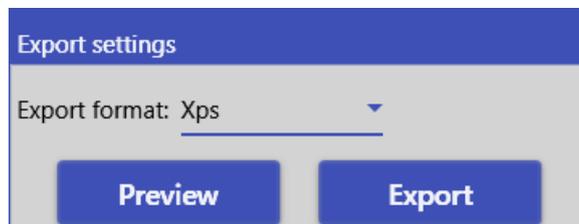
[Exportation vers Diff](#)



c) Exportation vers Xps

En cliquant sur le bouton , une fenêtre s'ouvrira et proposera une liste de format à exporter, choisissez XPS.

Un aperçu est disponible avant l'exportation.



Voir les chapitres suivants pour plus d'options d'export :

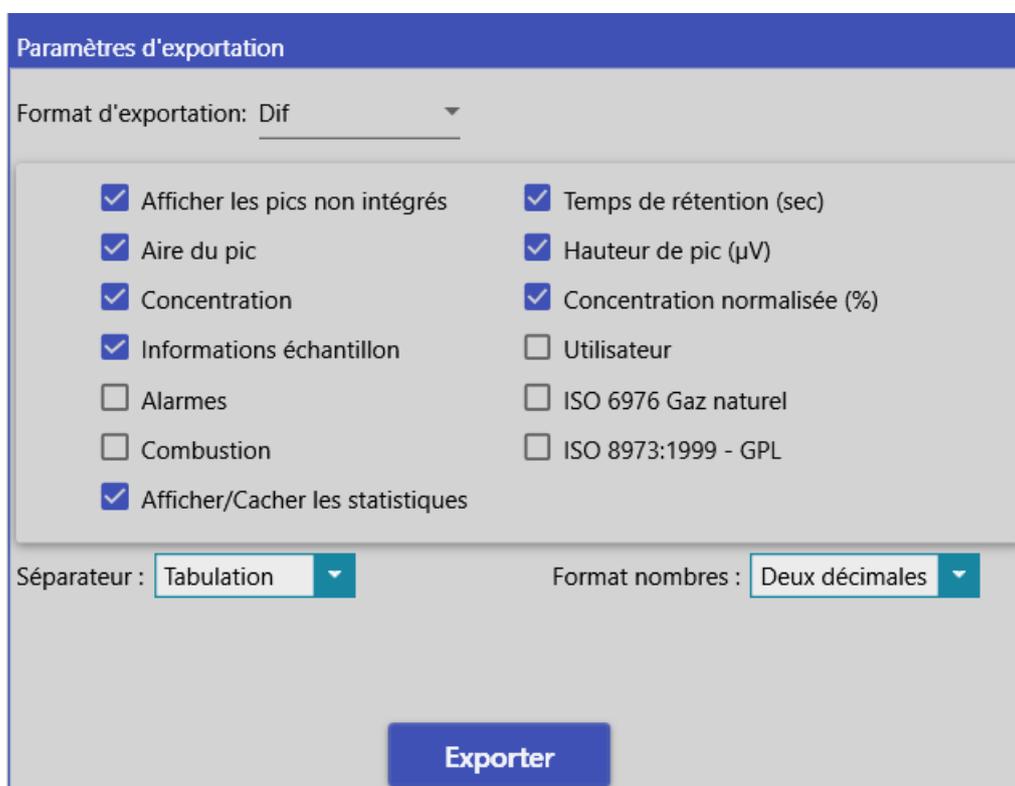
[Exportation vers Excel](#)

[Exportation vers Csv](#)

[Exportation vers Diff](#)

d) Exportation vers Diff

En cliquant sur le bouton , une fenêtre s'ouvrira et proposera une liste de format à exporter, choisissez Dif.



SOPRANE II permet de sauvegarder les résultats d'analyses dans des fichiers directement exploitables par



une feuille de calcul (extension DIF). Ces fichiers sont également visibles dans un éditeur de texte. Les champs, dont la valeur est en ASCII, sont séparés par une tabulation et les analyses par un retour de ligne.

Voir les chapitres suivants pour plus d'options d'exportation :

[Exportation vers Excel](#)

[Exportation vers Csv](#)

[Exportation vers Xps](#)

4.10.2. Filtrer les données

a) Filtrage automatique

La plupart des tableaux dans SOPRANE II possèdent la fonctionnalité de pouvoir filtrer les colonnes directement au niveau du tableau à la manière d'une feuille de calcul Excel.

Analysis	Injection date	Serie	Method	Pic0...	Pic1
	01/01/2015				
	11/17/2016				
Analyse_676	8/29/2016 3:40 PM	Analyse	<input checked="" type="checkbox"/> Analyse		
Analyse_677	8/29/2016 3:42 PM	Analyse	<input type="checkbox"/> BF 4.5 / 8,4 @f		
Serie BF 4.5_001	10/25/2016 3:21...	Serie BF 4	<input type="checkbox"/> ef / ezfezf @ 5.8,eee		
Serie BF 4.5_002	10/25/2016 3:22...	Serie BF 4	<input type="checkbox"/> eggetgttr		
Serie BF 4.5_003	10/25/2016 3:24...	Serie BF 4	<input checked="" type="checkbox"/> Serie BF 4.5		
Serie BF 4.5_004	11/3/2016 3:39 PM	Serie BF 4	<input type="checkbox"/> zfeffzefez		
Serie BF 4.5_005	11/3/2016 3:41 PM	Serie BF 4			
Serie BF 4.5_006	11/3/2016 3:57 PM	Serie BF 4			

b) Filtrage personnalisé

Le filtrage personnalisé représente une ligne dans laquelle les valeurs peuvent être saisies pour filtrer les éléments dans les colonnes correspondantes.

Lorsqu'une seule valeur est entrée dans une cellule, les éléments de la colonne correspondante sont filtrés selon le critère de filtrage.

Par exemple, dans le tableau suivant sont affichées seulement les séries d'analyses contenant le champ "Air".

Analyse	Date d'injection	Série
		Air
16020402_Air_001	2/4/2016 5:17	16020402_Air
16020402_Air_002	2/4/2016 5:19	16020402_Air
16020402_Air_003	2/4/2016 5:21	16020402_Air
16020402 Air 004	2/4/2016 5:23	16020402 Air

Le critère de filtrage peut être indiqué en faisant précéder la valeur avec l'opérateur désiré (voir le tableau ci-dessous).



- Critères de filtrage relationnel

Symbole	Description	Exemple
<>	Affiche seulement ceux qui sont différents de la valeur spécifiée.	<>Test
(précédé d'une valeur)	Affiche seulement ceux qui se terminent par la valeur spécifiée.	Test
=	Affiche seulement ceux qui sont égaux à la valeur spécifiée.	=Test
>	Affiche seulement ceux qui sont supérieurs à la valeur spécifiée.	> 50
>=	Affiche seulement ceux qui sont supérieurs ou égaux à la valeur spécifiée.	>=50
<	Affiche seulement ceux qui sont inférieurs à la valeur spécifiée.	<50
<=	Affiche seulement ceux qui sont inférieurs ou égaux à la valeur spécifiée.	<=50
*(Suivie d'une valeur)	Affiche seulement ceux qui commencent par la valeur spécifiée.	*Test

Par exemple, si **5** est spécifié comme un filtre, tous les éléments de la colonne (en supposant que la colonne contient des données numériques) seront automatiquement filtrés pour afficher uniquement ceux dont la valeur est 5. Si toutes les valeurs sont inférieures à 5, l'opérateur **inférieur** doit précéder la valeur du filtre : **<5**. En outre, pour filtrer les éléments qui commencent par une chaîne donnée, utilisez la touche ***** précédée d'une valeur (par exemple, [valeur *]) ; pour filtrer les éléments qui se terminent par cette valeur, utilisez la touche ***** suivie d'une valeur (par exemple, [* valeur]).

L'exemple suivant montre comment afficher seulement la série "16020402_Air", il suffit simplement d'ajouter "=".

Analyse	Date d'injection	Série
		=16020402_Air ✕
16020402_Air_001	2/4/2016 5:17	16020402_Air
16020402_Air_002	2/4/2016 5:19	16020402_Air
16020402_Air_003	2/4/2016 5:21	16020402_Air
16020402_Air_004	2/4/2016 5:23	16020402_Air

- Filtres conditionnels

Filtre	Description	Exemple
AND	Inclut toutes les données suivant le	[Bonjour AND tout le monde]
NOT	Exclut toutes les données suivant le	[NOT 5]
OR	Inclut toutes les données suivant le	[Bonjour OR Au revoir]



Les éléments d'une colonne peuvent être filtrés en fonction de plus d'une valeur en séparant ces valeurs avec les opérateurs conditionnels **AND** ou **OR**. Ces opérateurs, qui doivent être en majuscules, sont utilisés en conjonction avec les deux filtres relationnels et conditionnels.

Par exemple, pour filtrer les données qui comprennent à la fois les mots [Bonjour] et [tout le monde], il faudrait séparer les mots avec l'opérateur AND : [Bonjour **AND** tout le monde].

L'opérateur conditionnel **NOT** peut également être utilisé pour exclure une valeur spécifique.

Par exemple, pour exclure la valeur [5], [**NOT** 5] peut être spécifié comme critère de filtre. Si plus d'une valeur est à exclure, l'opérateur NOT doit précéder les deux valeurs.

Par exemple, [**NOT** 5 **ET** **NOT** 7] comprendra toutes les valeurs à l'exception de 5 et 7.

À l'exception des opérateurs conditionnels (à savoir, AND, NOT, OR), tout l'espace blanc supplémentaire précédant ou suivant un opérateur sera automatiquement rogné.

Autre exemple général, le tableau suivant contient deux filtres.

Le premier est au niveau de la colonne Série qui affiche seulement les séries qui contiennent le champ "Analyse" ou "BF 4.5". Le deuxième filtre est au niveau de la colonne Pic0 (A) qui affiche seulement les valeurs supérieures à 30.

Analyse	Date d'injection	Série	Méthode	Pic0 (A)	Pic1 (B)
	01/01/2015	Analyse OR BF 4.5		<30	
	26/10/2016				
Serie BF 4.5_003	25/10/2016 15:24	Serie BF 4.5	test	10,085	10,614
Serie BF 4.5_002	25/10/2016 15:22	Serie BF 4.5	test	10,023	10,762
Serie BF 4.5_001	25/10/2016 15:21	Serie BF 4.5	test	9,878	10,904
BF 4.5 / 8,4 @f_685	18/10/2016 09:07	BF 4.5 / 8,4 @f	test BF : 4,5 - 48/r	10,794	11,982
BF 4.5 / 8,4 @f_684	18/10/2016 09:05	BF 4.5 / 8,4 @f	test BF : 4,5 - 48/r	10,688	12,023
Analyse_677	29/08/2016 15:42	Analyse	test_1	9,977	9,950
Analyse_676	29/08/2016 15:40	Analyse	test_1	9,869	9,945
Min				9,9	9,9
Avg				10,2	10,9
Max				10,8	12,0
Rsd (%)				3,797	7,818

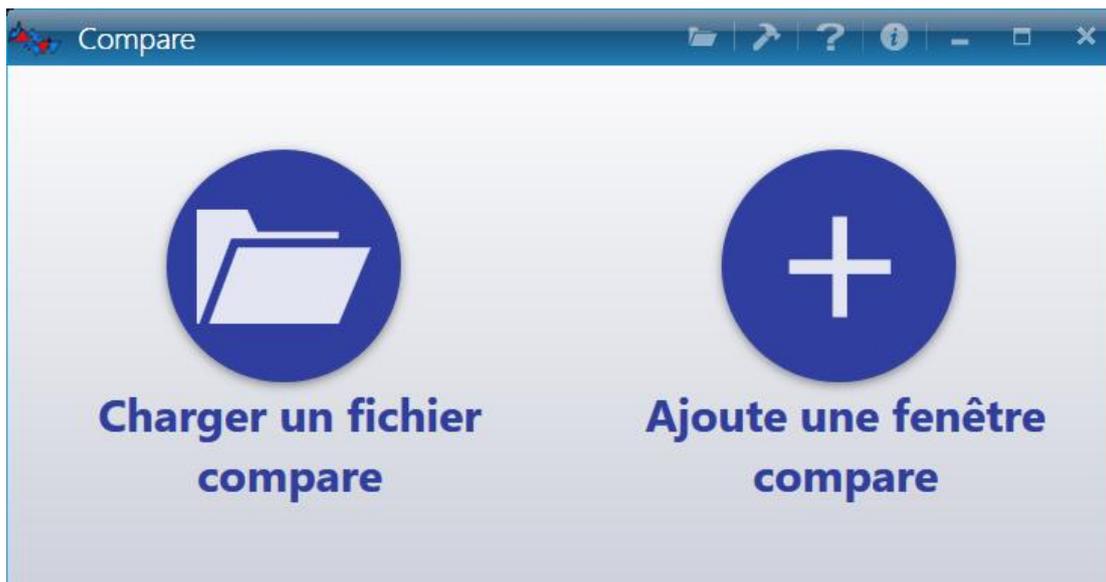
5. Comparaison des analyses

Le module de comparaison est utilisé pour visualiser et comparer plusieurs chromatogrammes, ceci permet de suivre l'évolution d'un phénomène au cours des analyses, éventuellement la dégradation des colonnes.

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

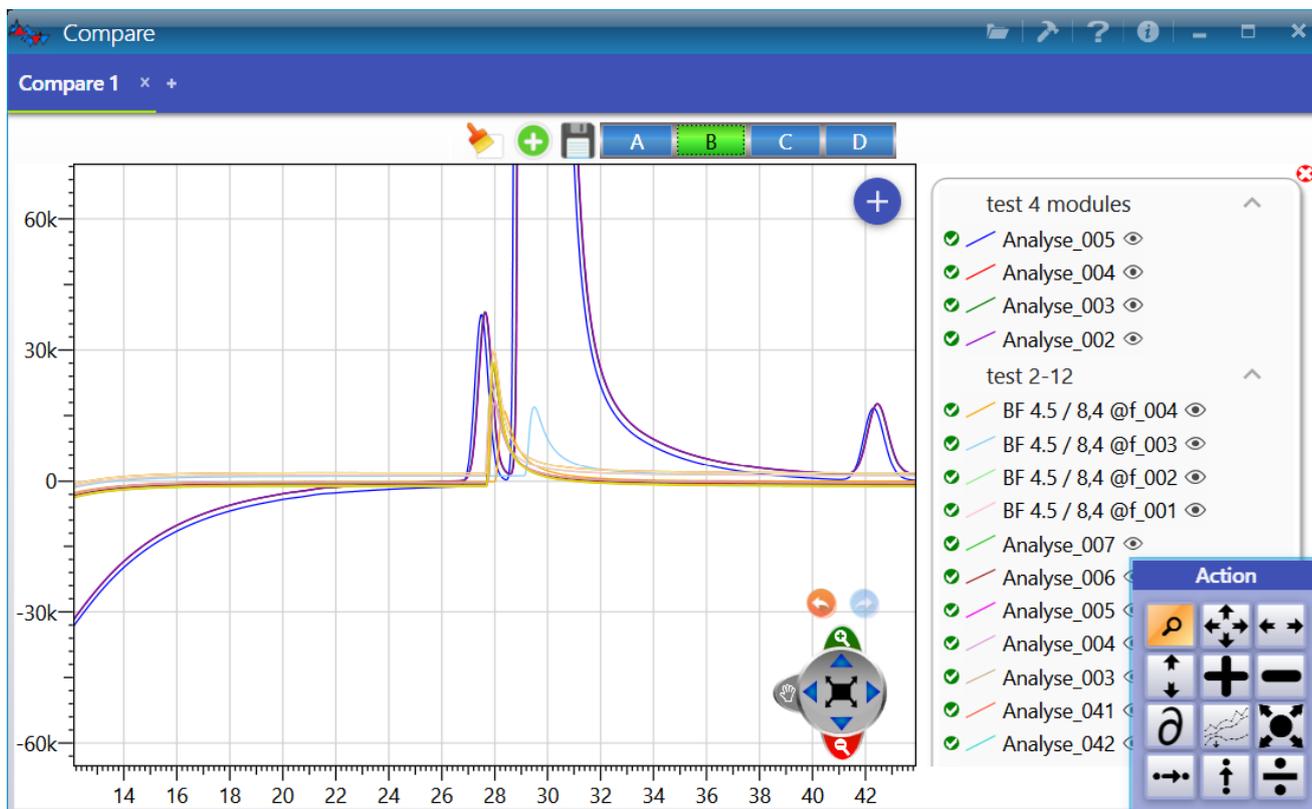
Lors du chargement, l'écran principal est visualisé :





Deux choix sont proposés, le premier est de charger un fichier de comparaison d'analyses sauvegardé précédemment et le second est de partir d'une fenêtre vide et d'ajouter les analyses que l'on souhaite.

Lorsque le chargement a été validé, tous les chromatogrammes sont visualisés simultanément sur le document affiché.



Chaque chromatogramme a sa propre couleur ce qui permet de différencier les chromatogrammes les uns des autres. Le nom de ce chromatogramme est affiché dans la légende du graphique.



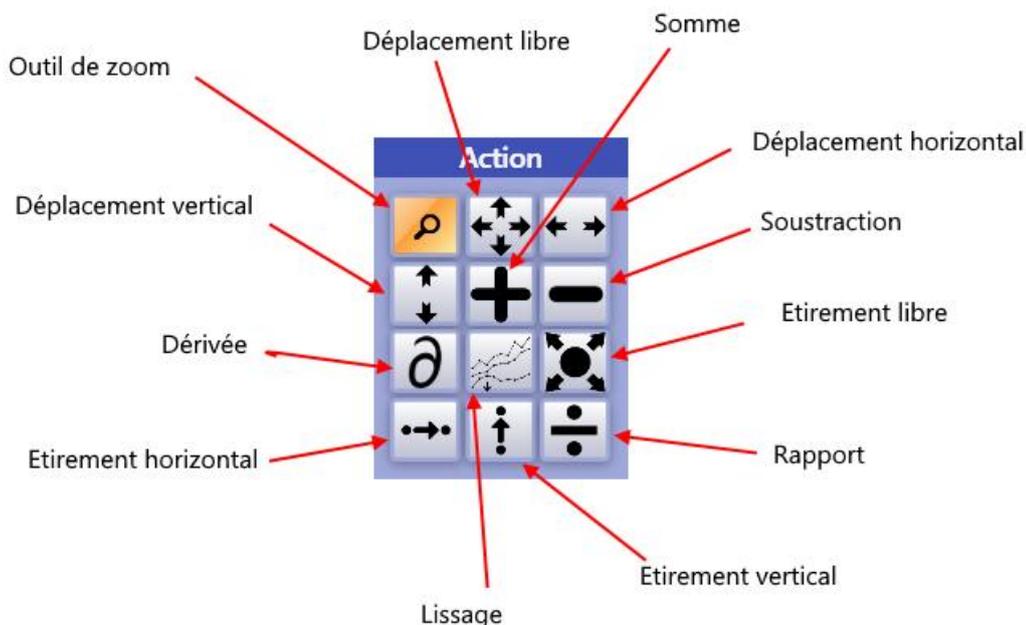
<div style="background-color: #f0f0f0; padding: 5px; border: 1px solid #ccc;"> <p>test 4 modules ^</p> <ul style="list-style-type: none"> ✓ Analyse_005 👁 ✓ Analyse_004 👁 ✓ Analyse_003 👁 ✓ Analyse_002 👁 </div>	<p>En passant le curseur au-dessus de l'une de ces analyses, la courbe sera alors mise en gras pour mieux la différencier des autres.</p> <p>Pour permettre des opérations graphiques sur certaines analyses, il faut les sélectionner. L'icône ✓ indique que l'analyse autorise ces opérations sur cette analyse tandis que l'icône ⊘ signale que toute opération sera ignorée sur cette analyse.</p> <p>Pour ne pas afficher une analyse il suffit simplement de cliquer sur l'icône 👁 l'analyse sera alors cachée (une analyse cachée aura l'icône suivante 👁/)</p>
--	--

La barre des modules permet l'affichage des chromatogrammes de chacun des modules qui équipent l'analyseur par un simple clic de souris sur la lettre A à D correspondante.

Chaque document peut être sauvegardé et ré ouvert ultérieurement.

L'outil zoom est aussi un moyen de visualiser correctement les analyses (voir le chapitre [Graphique](#) pour plus de détails).

La palette permet des opérations générales portant sur un chromatogramme ou mettant en jeu deux chromatogrammes.



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

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

Une opération portant sur 2 chromatogrammes est réalisée en 3 temps : on sélectionne d'abord les chromatogrammes dans la légende, puis on sélectionne l'outil, puis un clic sur le graphique appliquera l'opération.

6. Gestion des utilisateurs

Il existe trois niveaux d'identification. Le premier est le niveau **Opérateur**, qui est celui dont l'utilisation est la plus restreinte. Le suivant est le niveau **Service**, dont l'accès est quasi complet mais qui ne permet pas autant de droits que celui du niveau **Administrateur**, qui possède tous les accès possibles, en plus de gérer les accès des autres niveaux cités.

Par défaut lorsque SOPRANE II est lancé, le niveau est en "Opérateur".

Pour accéder à la gestion des utilisateurs, l'icône  est disponible en haut à gauche de la barre des titres.

Pour aller plus loin, voir les chapitres :

[Identification d'un utilisateur](#)

[Création d'un utilisateur](#)

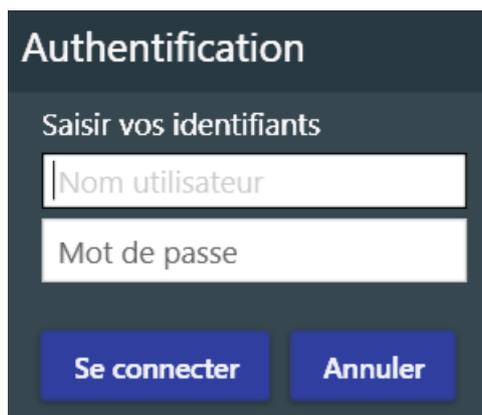
[Suppression d'un utilisateur](#)

[Modification du mot de passe](#)

[Gestion d'un utilisateur](#)

6.1. Identification d'un utilisateur

Pour s'identifier, l'icône  est disponible en haut à gauche de la barre des titres.



Deux renseignements sont nécessaires :

- Le nom utilisateur
- Le mot de passe



Une fois ces deux informations valides, l'utilisateur sera sélectionné.

Pour les chapitres suivants, l'utilisateur doit être authentifié en tant qu'**administrateur**.

Pour aller plus loin, voir les chapitres :

[Création d'un utilisateur](#)

[Suppression d'un utilisateur](#)

[Modification du mot de passe](#)

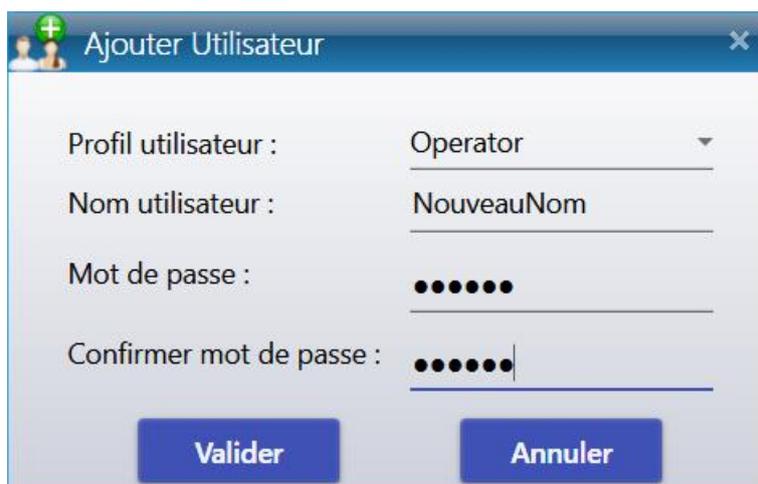
[Gestion d'un utilisateur](#)

6.2. Création d'un utilisateur

L'ajout d'un utilisateur n'est possible que si un **Administrateur** est déjà connecté (voir le chapitre [Identification d'un utilisateur](#) pour s'identifier).

Une fois l'administrateur connecté, positionnez-vous dans l'onglet **Utilisateur**  puis cliquez sur **Ajouter utilisateur** .

La page suivante s'ouvrira.



The image shows a dialog box titled "Ajouter Utilisateur" with a close button in the top right corner. It contains four input fields: "Profil utilisateur" with a dropdown menu showing "Operator", "Nom utilisateur" with the text "NouveauNom", "Mot de passe" with a masked password field of seven dots, and "Confirmer mot de passe" with a masked password field of seven dots. At the bottom, there are two buttons: "Valider" and "Annuler".

Les champs à renseigner sont :

- Le profil utilisateur
- Le nom de l'utilisateur
- Le mot de passe

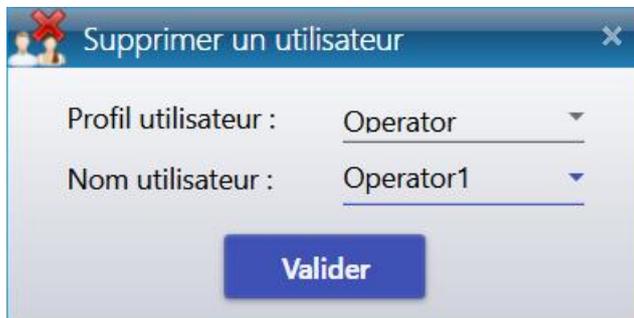
6.3. Suppression d'un utilisateur

La suppression d'un utilisateur n'est possible que si un **Administrateur** est déjà connecté (voir le chapitre [Identification d'un utilisateur](#) pour s'identifier).



Une fois l'administrateur connecté, positionnez-vous dans l'onglet **Utilisateur**  puis cliquez sur **Supprimer un utilisateur** .

La page suivante s'ouvrira en proposant de sélectionner les informations relatives à l'utilisateur à supprimer.



Les champs à indiquer sont :

- Le profil utilisateur
- Le nom de l'utilisateur

6.4. Modification du mot de passe

La modification du mot de passe d'un utilisateur n'est possible que si un **Administrateur** est déjà connecté (voir le chapitre [Identification d'un utilisateur](#) pour s'identifier).

Une fois l'administrateur connecté, positionnez-vous dans l'onglet **Utilisateur**  puis cliquez sur **Modifier le mot de passe** .

En cliquant sur « **Modifier le mot de passe** » une nouvelle fenêtre s'ouvre proposant d'indiquer les champs concernant le nouvel utilisateur :

- Le mot de passe actuel
- Le nouveau mot de passe
- Confirmation du nouveau mot de passe



6.5. Gestion d'un utilisateur

La gestion des accès des utilisateurs est autorisée seulement pour un **Administrateur** (voir le chapitre [Identification d'un utilisateur](#) pour s'identifier).

Une fois l'administrateur connecté, positionnez-vous dans l'onglet **Utilisateur**  puis cliquez sur **Opérateur**  ou **Service** .

Chaque coche représente une action de SOPRANE II. Si elle est cochée, l'utilisateur aura le droit d'effectuer l'action sinon elle lui sera verrouillée.

Configuration	Analyse	Méthode d'analyse	Séquences d'analyses	Étalonnage	Traitement	Journaux
<input checked="" type="checkbox"/> Créer un analyseur. <input checked="" type="checkbox"/> Sélectionner l'analyseur <input checked="" type="checkbox"/> Afficher la configuration <input checked="" type="checkbox"/> Lecture de la configuration <input checked="" type="checkbox"/> Configuration <input checked="" type="checkbox"/> Vanne <input checked="" type="checkbox"/> Pompe auxiliaire <input checked="" type="checkbox"/> Débit <input checked="" type="checkbox"/> Options d'analyse <input checked="" type="checkbox"/> Alarmes <input checked="" type="checkbox"/> Entrées analogiques <input checked="" type="checkbox"/> Relais <input checked="" type="checkbox"/> Configuration échantillon <input checked="" type="checkbox"/> Gestion de voies <input checked="" type="checkbox"/> Module 4-20mA <input checked="" type="checkbox"/> Bus de terrain	<input checked="" type="checkbox"/> Démarrer l'analyse <input checked="" type="checkbox"/> Afficher les résultats de l'analyse. <input checked="" type="checkbox"/> Afficher la courbe des tendances. <input checked="" type="checkbox"/> Temps Réel <input checked="" type="checkbox"/> Traitement <input checked="" type="checkbox"/> Compare	<input checked="" type="checkbox"/> Créer méthode <input checked="" type="checkbox"/> Editer une méthode <input checked="" type="checkbox"/> Charger une méthode.	<input checked="" type="checkbox"/> Créer un séquence d'analyses <input checked="" type="checkbox"/> Editer une séquence d'analyse	<input checked="" type="checkbox"/> Créer un étalonnage <input checked="" type="checkbox"/> Editer une séquence d'étalonnage <input checked="" type="checkbox"/> Programmation d'une séquence d'étalonnage	<input checked="" type="checkbox"/> Intégration <input checked="" type="checkbox"/> Etalonnage <input checked="" type="checkbox"/> Identification <input checked="" type="checkbox"/> Table des composants <input checked="" type="checkbox"/> Calculs	<input checked="" type="checkbox"/> Visualiser le journal des actions <input checked="" type="checkbox"/> Afficher le journal des erreurs. <input checked="" type="checkbox"/> Afficher le journal des alarmes .



7. Maintenance

7.1. Réglage du temps de Backflush

7.1.1. Qu'est-ce que le backflush ?

Lors du développement de la méthode, une étape importante est le réglage du temps de rétrobalayage (backflush). Le but principal du système de backflush est de protéger la colonne d'analyse. La situation la plus classique où l'on rencontre le système de backflush est lorsque l'on utilise une colonne Molsieve 5Å (MS5A). Ce sera le seul cas traité dans ce chapitre.

La colonne Molsieve 5Å est dédiée à l'analyse des gaz permanents (He, H₂, Ar/O₂, N₂, CH₄ et CO). Si des composés plus lourds sont injectés dans la colonne MS5A, la phase stationnaire perdra son efficacité et son pouvoir de séparation diminuera rapidement. Pour protéger cette colonne contre les composés lourds, en particulier CO₂, H₂O et H₂S, une pré-colonne est installée entre l'injecteur et la colonne d'analyse (MS5A).

Après l'injection, il y a deux étapes :

- Mode "foreflush" : le gaz vecteur passe à travers l'injecteur, puis la pré-colonne et enfin à travers la colonne d'analyse.
- Mode "backflush" : le gaz vecteur arrive entre la pré-colonne et la colonne d'analyse.

Pendant le mode "fore flush", les molécules de l'échantillon sont injectées dans la pré-colonne où s'effectue une première séparation. Les composés légers non retenus donc non séparés (He, H₂, Ar/O₂, CO), sortent de la pré-colonne en premier, suivis juste après par le CH₄. Ensuite seulement sortent les composés lourds.

Lorsque le mode "backflush" est activé, les composés qui ont eu le temps de sortir de la pré-colonne continuent leur chemin jusqu'au détecteur et sont séparés dans la colonne d'analyse. Les composés qui se trouvent encore dans la pré-colonne sont rétrobalayés.

Un temps de backflush bien ajusté est un temps de rétrobalayage suffisamment long pour laisser passer tous les composés d'intérêt (He, H₂, Ar/O₂, N₂, CH₄ et CO) et suffisamment court pour rétrobalayer les composés lourds qui pourraient endommager la colonne d'analyse.

7.1.2. Comment ajuster le temps de backflush avec Soprane II ?

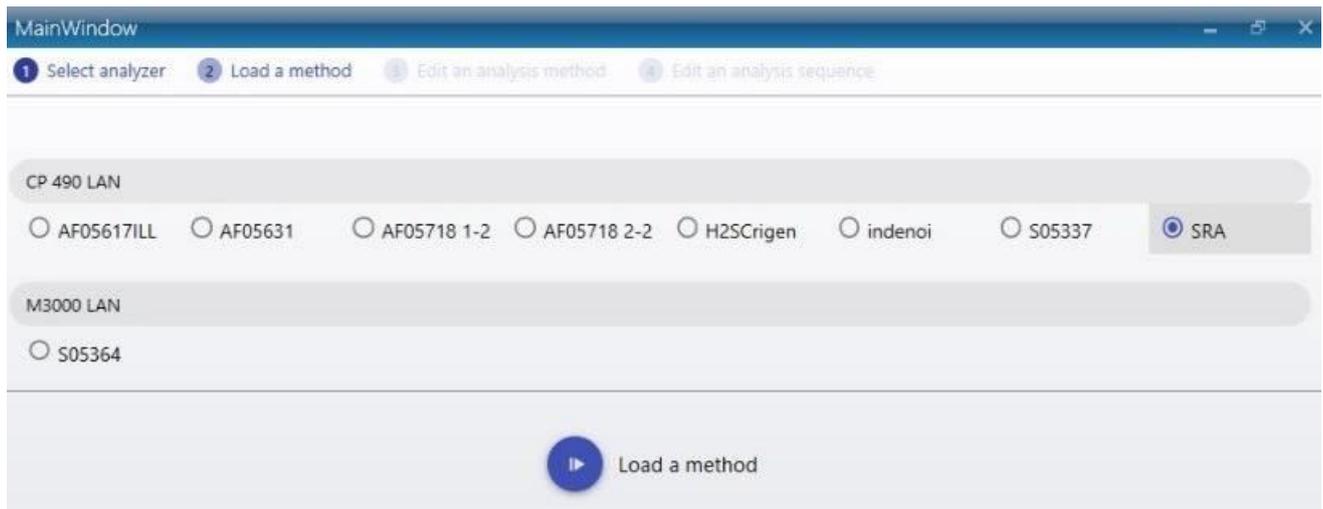
! Remarque importante :

Le temps de backflush doit être ajusté après la définition des températures, de la pression du gaz vecteur et du temps d'injection. Si l'un de ces paramètres est modifié, le temps de backflush doit être à nouveau réglé.

Un outil dédié a été développé pour aider le client à ajuster le temps de backflush.

1. Ouvrez "SRA.Soprane.BackflushMethodGenerator.exe" dans "C : \Soprane II".
2. Sélectionnez l'analyseur et cliquez sur "Charger méthode" :



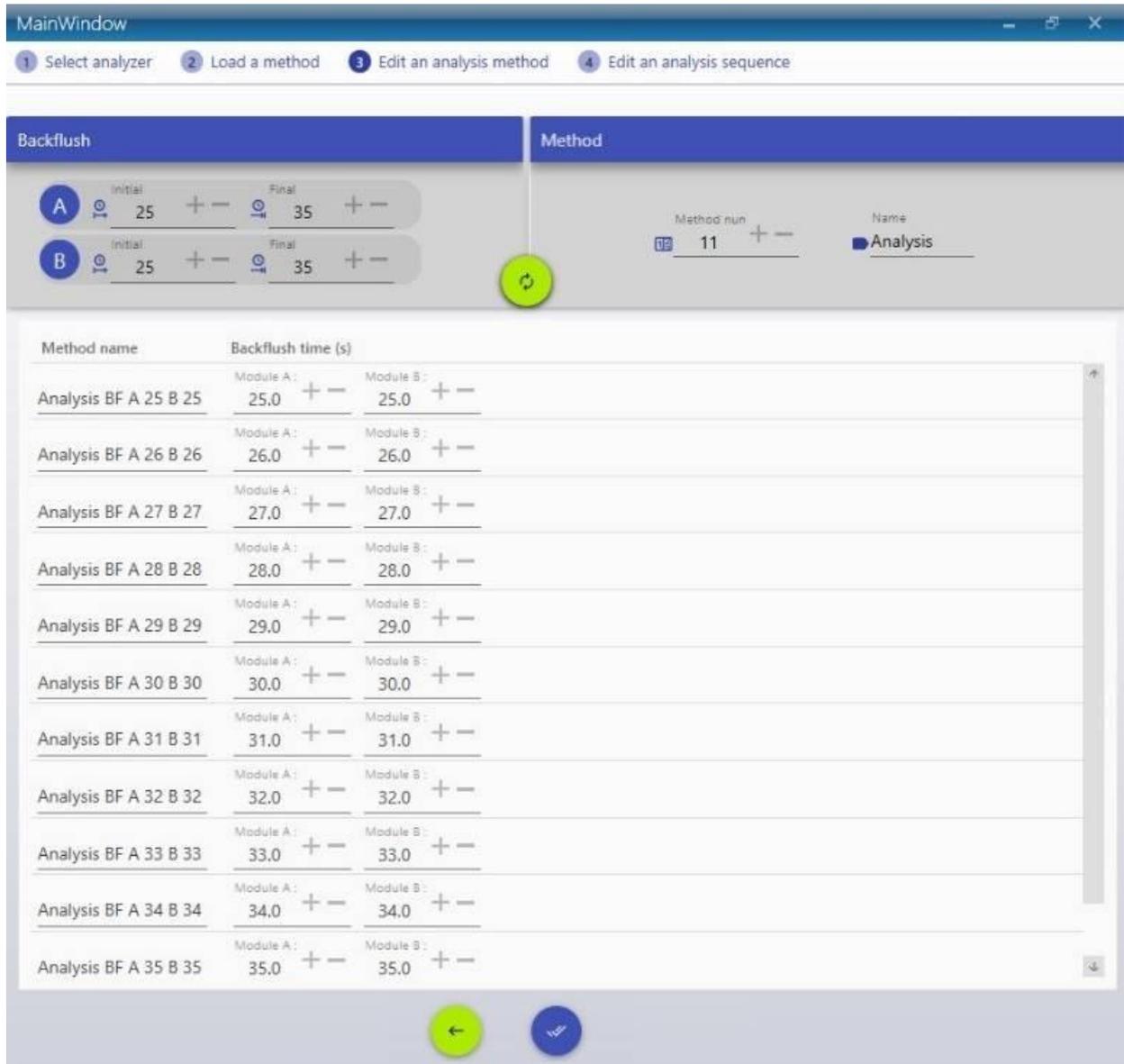


3. Sélectionnez la méthode analytique à développer :

Name	Inlet	Injector				Column				Pressure				Injection				Detector			
		Mod. A	Mod. B	Mod. C	Mod. D	Mod. A	Mod. B	Mod. C	Mod. D	Mod. A	Mod. B	Mod. C	Mod. D	Mod. A	Mod. B	Mod. C	Mod. D	Mod. A	Mod. B	Mod. C	Mod. D
Start Stop	50.0 °C	50.0 °C	50.0 °C	50.0 °C	50.0 °C	50.0 °C	50.0 °C	50.0 °C	50.0 °C	7.0 PSI	7.0 PSI	7.0 PSI	7.0 PSI	0 ms	0 ms	50 ms	50 ms	OFF	OFF	OFF	OFF
Regeneration	90.0 °C	95.0 °C	95.0 °C	95.0 °C	95.0 °C	160.0 °C	160.0 °C	180.0 °C	180.0 °C	35.0 PSI	35.0 PSI	35.0 PSI	35.0 PSI	0 ms	0 ms	50 ms	50 ms	OFF	OFF	OFF	OFF
Standby	90.0 °C	95.0 °C	95.0 °C	95.0 °C	95.0 °C	110.0 °C	110.0 °C	75.0 °C	75.0 °C	28.0 PSI	28.0 PSI	28.0 PSI	28.0 PSI	0 ms	0 ms	50 ms	50 ms	OFF	OFF	OFF	OFF
Analysis	90.0 °C	95.0 °C	95.0 °C	95.0 °C	95.0 °C	110.0 °C	110.0 °C	75.0 °C	75.0 °C	28.0 PSI	28.0 PSI	28.0 PSI	28.0 PSI	50 ms	50 ms	50 ms	50 ms	ON	ON	ON	ON

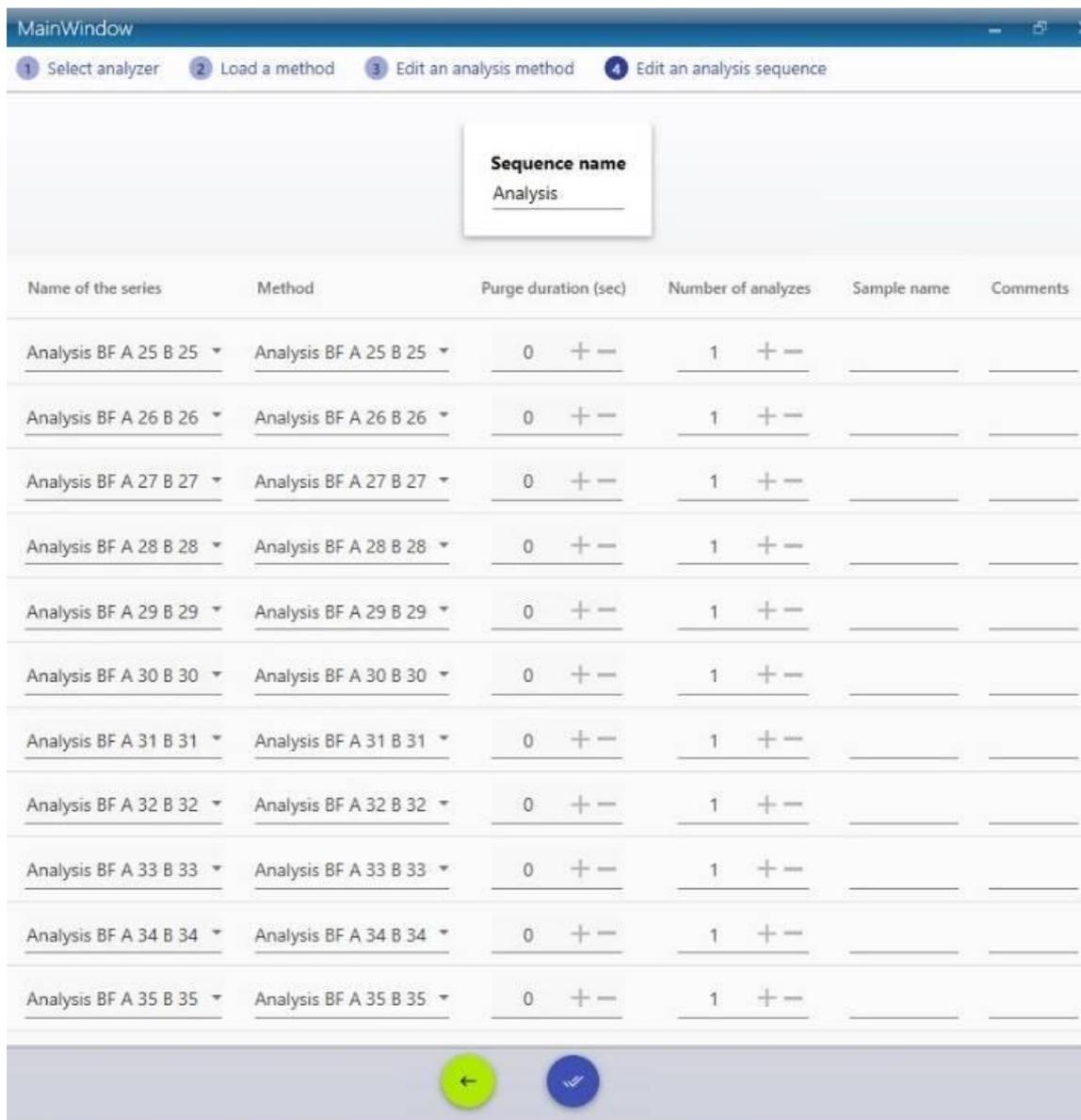
4. Sélectionnez un temps de backflush initial et un temps de backflush final pour les voies équipées d'un système de rétrobalayage.
5. Sélectionnez le nombre d'exécutions de la méthode. Pour une première estimation, essayez d'avoir un pas de 1 seconde entre deux temps de backflush (par exemple : temps de backflush initial = 5 secondes, temps de backflush final = 10 secondes, nombre d'exécutions de la méthode= 6).
6. Définissez un nom pour la série d'analyses.
7. Cliquez sur  pour générer automatiquement des méthodes avec différentes durées de backflush.





8. Cliquez sur  pour créer automatiquement une séquence d'analyse avec une analyse pour chaque méthode précédemment générée.
9. Donnez un nom à cette séquence et cliquez sur 



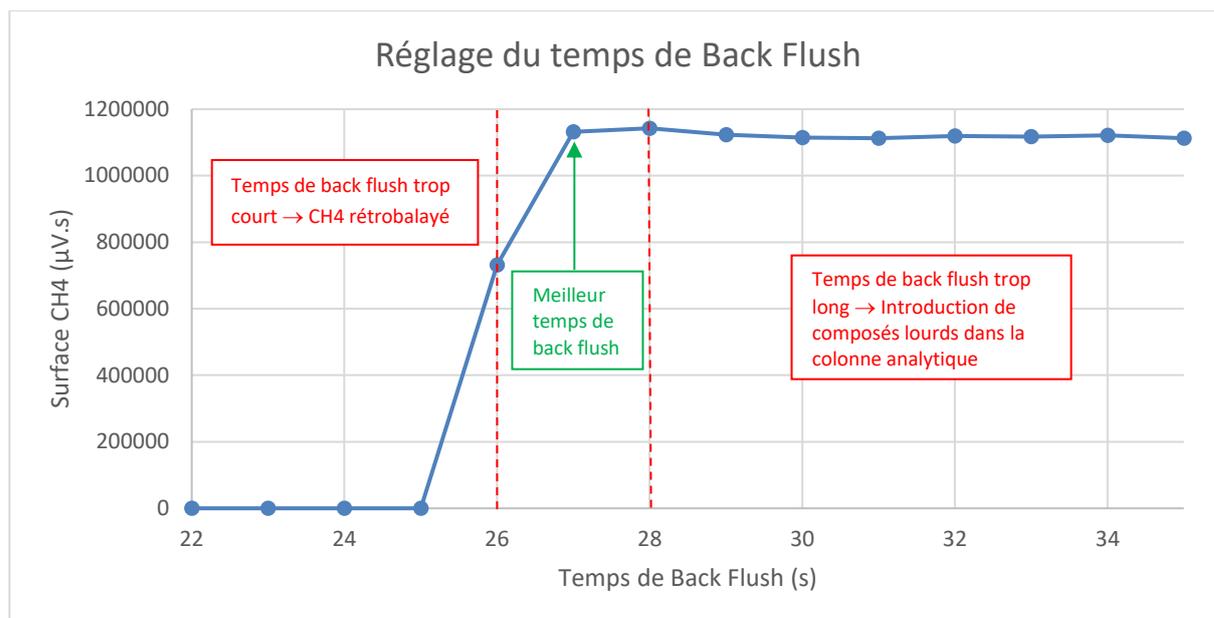


10. Connectez un étalon contenant CH₄ au micro GC, ouvrez Soprane II, cliquez sur "Démarrer" et lancez la séquence précédemment générée (Voir chapitre [Lancement séquence](#)):

Après quelques minutes, vous obtiendrez des chromatogrammes avec différents temps de backflush :

11. Ouvrez-les un par un dans Traitement, placez votre souris sur le pic de CH₄ et relevez sa surface.
12. Dans un fichier Excel, enregistrez la surface du pic de CH₄ en fonction du temps de backflush et tracez la courbe correspondante :





13. Réglez le temps de backflush avec précision à plus ou moins 0,1 seconde.
14. Appliquez la même méthode que précédemment mais créez une séquence avec un pas à 0,1 seconde. Pour l'exemple précédent, commencez à 26 secondes et finissez à 28 secondes avec un pas à 0,1 seconde.

7.2. Gestionnaire de fichiers

Lorsqu'il s'agit d'échanger des données entre deux ordinateurs (généralement depuis l'ordinateur de l'utilisateur vers un ordinateur de SRA Instruments lors d'une demande d'aide pour résoudre un problème analytique ou d'intégration) : quels sont les fichiers associés aux analyses ou aux méthodes nécessaires pour le fonctionnement de l'ensemble ?

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

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

Pour exporter et importer des données, le meilleur moyen consiste à utiliser l'utilitaire **File Manager**  spécialement conçu à cet effet.

Il permet à l'utilisateur de copier, effacer, déplacer des fichiers, de les exporter ou de les importer.

L'outil File Manager se trouve dans le dossier d'installation de SOPRANE II.

Voir les rubriques suivantes pour aller plus loin :

[Exporter des données](#)

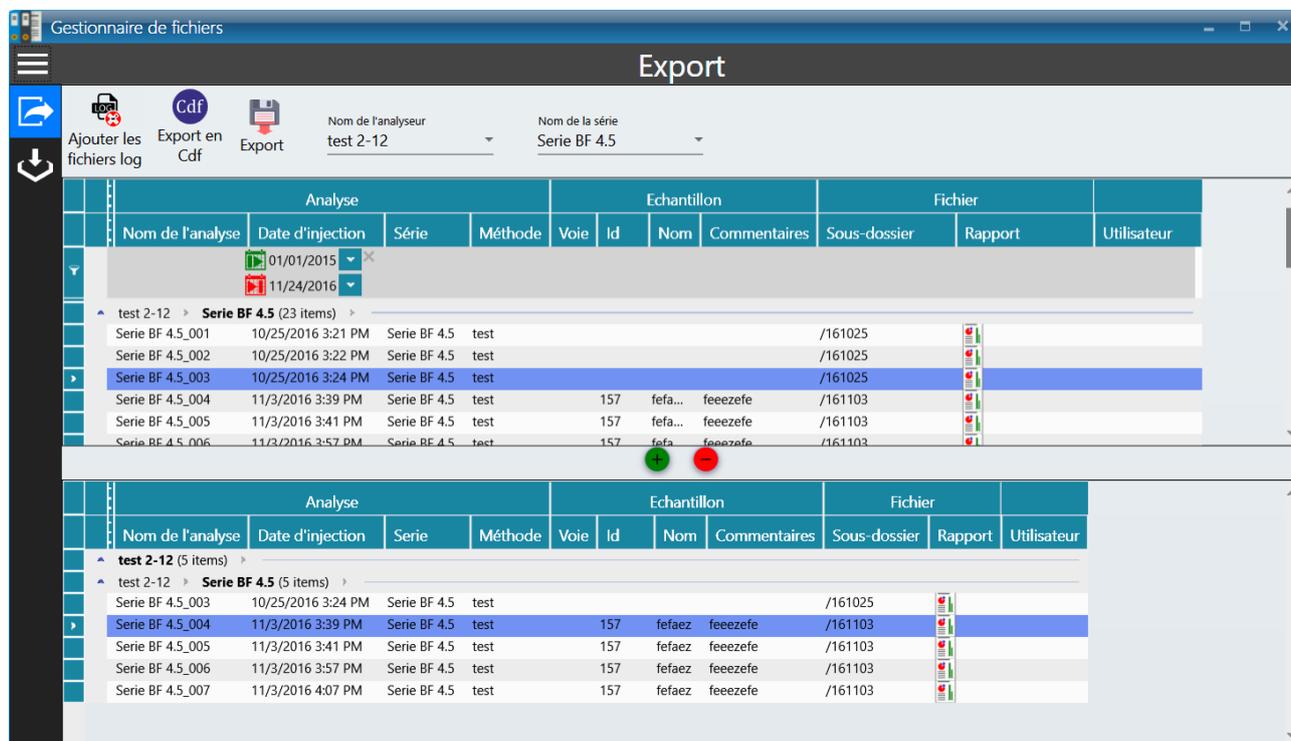
[Importer des données](#)



7.2.1. Exporter des données

Il peut être parfois utile d'envoyer certaines données telles que des analyses, des méthodes ; c'est pour cela que l'outil **File Manager**  est très utile.

Lors du chargement, l'écran principal est visualisé :



Par défaut le mode **export** est activé, le premier tableau de données contient toutes les analyses correspondant à l'analyseur et à la série sélectionnés.

Ces analyses peuvent être ajoutées en les sélectionnant et en cliquant sur le bouton . Une fois ajoutées, les analyses seront affichées dans le deuxième tableau en dessous contenant toutes les analyses qui seront à exporter. Pour enlever une ou plusieurs analyses, il suffit de cliquer sur le bouton .

Les fichiers de journalisation peuvent être ajoutés à l'export en cliquant sur le bouton .

L'option exportation en Cdf (ou Aia)  permet de convertir les analyses sélectionnées en ce format lisible par d'autres logiciels de chromatographie.

Pour compresser les données, cliquez sur le bouton **Export**. Sélectionnez ensuite l'emplacement des données.



A noter :

Pour faciliter la recherche d'analyses à exporter, les deux tableaux présents dans cet affichage peuvent être filtrés et triés (pour plus d'informations, voir le chapitre [Utilisation des tableaux de données](#)).

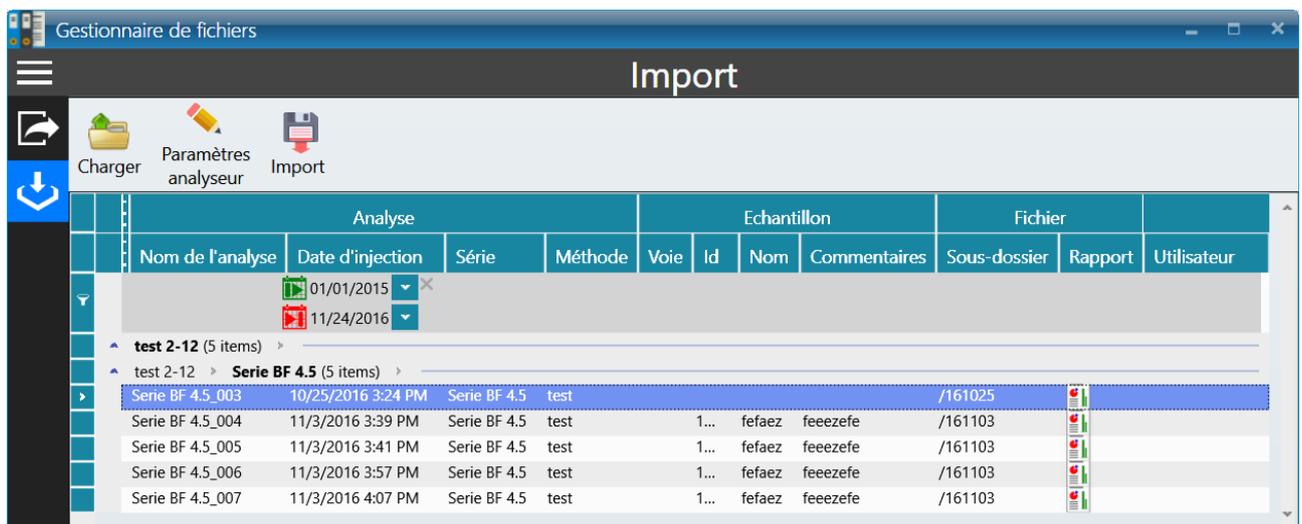
7.2.2. Importer des données

L'importation permet de créer un nouvel analyseur avec toutes les analyses et méthodes correspondantes. Pour cela il ne s'agit cette fois que de localiser et ouvrir le fichier avec l'extension **.gzip** en cliquant sur le bouton charger .

NOTE IMPORTANTE :

Lors de l'import, SOPRANE II recopie le fichier configuration et donc efface celui qui était utilisé. Ceci n'a aucune conséquence lors d'un échange avec SRA Instruments puisque le fichier configuration importé (si SRA Instruments vous renvoie des fichiers corrigés) est une copie de votre propre fichier configuration. Si vous exportez des données sur un ordinateur travaillant avec un autre analyseur, son fichier de configuration sera détruit.

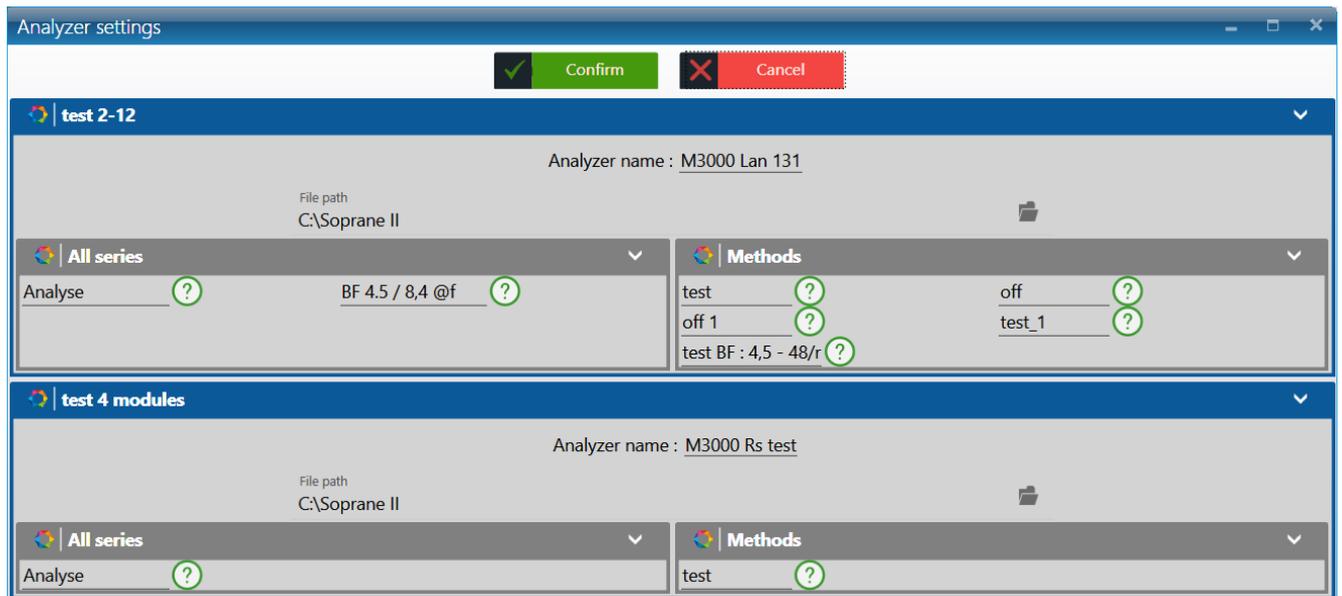
L'affichage suivant sera alors affiché :



Toutes les analyses du fichier chargé seront alors énumérées dans le tableau de l'affichage précédent. Ce sont les analyses à importer.

La fenêtre suivante propose d'éditer les noms d'analyseurs, d'analyses ou de méthodes ; pour cela il faut cliquer sur le bouton .





Une fois validées les informations du tableau seront mises à jour.

L'import sera effectué en cliquant sur **Import**. Une fois l'import réussi, un nouvel analyseur sera créé ainsi que son raccourci sur le bureau.

7.3. Gestion des fichiers log

La journalisation de l'application offre trois types de journaux :

- [Journal des actions](#), permettant d'indiquer toutes les principales actions effectuées par l'utilisateur.
- [Journal des alarmes](#), permettant d'indiquer toutes les alarmes ayant été déclenchées.
- [Journal des erreurs](#), destiné à localiser les erreurs lors d'un plantage (plutôt destiné au développeur).
- [Le fichier des événements](#) destiné à localiser les causes d'un plantage du logiciel (plutôt destiné au développeur).
- [Historique d'étalonnages](#) référence tous les étalonnages effectués.

7.3.1. Le fichier des actions

La table d'événements Journal des actions est disponible dans l'onglet « **Journaux** » et contient tous les événements que SOPRANE II a détectés.

Le tableau contient les informations suivantes :

- Date : La date de l'événement.
- Profil : Profil de l'utilisateur (Administrateur, Service ou opérateur)
- Utilisateur : Nom de l'utilisateur
- Action : Action effectuée



Les colonnes du tableau peuvent être triées et filtrées. Les lignes sélectionnées peuvent être supprimées (soit par la touche **suppr** soit en cliquant sur le bouton  soit par le menu contextuel).

Les événements peuvent également être archivés en cliquant sur l'icône  ; un fichier avec la date du jour sera alors créé.

7.3.2. Le fichier des alarmes

La table d'événements Journal des alarmes est disponible dans l'onglet « **Journaux** » et contient toutes les alarmes qui ont été déclenchées.

Le tableau contient les informations suivantes :

- Date : la date du déclenchement de l'alarme.
- Nom du pic : le nom du pic correspondant à l'alarme.
- Minimum : l'échelle minimale avant le déclenchement de l'alarme.
- Maximum : l'échelle maximale avant le déclenchement de l'alarme.
- Valeur : la valeur lors du déclenchement de l'alarme.
- Périphérique : le nom du périphérique attribué à l'alarme.

Les colonnes du tableau peuvent être triées et filtrées. Les lignes sélectionnées peuvent être supprimées (soit par la touche **suppr** soit en cliquant sur le bouton  soit par le menu contextuel).

Les événements peuvent également être archivés en cliquant sur l'icône  ; un fichier avec la date du jour sera alors créé.

7.3.3. Le fichier des erreurs

La table d'événements Journal des erreurs est disponible dans l'onglet « **Journaux** » et contient toutes les erreurs qui ont été détectées.

Ces informations sont destinées aux développeurs.

7.3.4. Le fichier des événements

La table des événements est disponible dans l'onglet "**Journaux**" et contient toutes les informations sur les plantages de Soprane II.

Ces informations sont destinées aux développeurs.

7.3.5. Historique d'étalonnages

Le tableau d'historique des étalonnages est disponible dans l'onglet "**Journaux**" et contient tous les étalonnages réalisés avec Soprane II.



The screenshot shows the Soprane II software interface. At the top, there are filters for 'Date' (01/01/2015, 06/04/2018) and 'Method name'. Below this, a tree view shows a selected analysis at '5/31/2018 12:15 PM test'. The 'Analyses' section lists 'Analysis_198' with Level 1 and Type 'Replace'. The 'Results' section contains a table with the following data:

Name	Retention time...	Area	Concentration	Normalized con...	Type	Equation
Pic0 (A)	16.215 s	1677192 µV.s	10.000	20.00 %	NO_ERROR	195446.33x
Pic1 (A)	19.191 s	1016 µV.s	10.000	20.00 %	NO_ERROR	107.30x
Pic2 (A)	30.031 s	15293 µV.s	10.000	20.00 %	NO_ERROR	1566.85x
Pic3 (B)	18.045 s	2722548 µV.s	10.000	20.00 %	NO_ERROR	272731.62x
Pic4 (B)	20.363 s	1866 µV.s	10.000	20.00 %	NO_ERROR	172.39x

Below the results table, a list of other analyses (Analysis_189 to Analysis_188) is shown, all with Level 1 and Type 'Average'. At the bottom, three analysis entries are listed with their dates and times: '5/31/2018 12:15 PM test', '5/31/2018 2:02 PM test', and '5/31/2018 2:02 PM test'. Two small icons (a green circle with a white 'i' and a document icon) are positioned above the first entry in this list.

Remarque : Les deux petites icônes   vous permettent d'afficher les résultats d'étalonnage et le rapport d'étalonnage (voir chapitre [Etalonnage de référence](#) et [Rapport d'étalonnage](#)).



8. Annexe : Piloter un Solia depuis Soprane II

Soprane II, lorsqu'il est associé à MassHunter GC-MS Acquisition et Chemstation Data Analysis, permet de piloter le couplage MicroGC/MS SOLIA.

8.1. Installation

La communication entre Soprane II, MassHunter et Chemstation Data Analysis s'effectue par l'intermédiaire de macros informatiques. Ces macros sont déployées automatiquement dans l'arborescence de MassHunter et de Chemstation Data Analysis, lors de l'installation de Soprane II. Il est donc nécessaire d'installer les logiciels Agilent avant de procéder à l'installation de Soprane II.

Installer Chemstation Data Analysis puis Soprane II en tant qu'administrateur et en suivant les paramètres recommandés.

8.2. Configuration des instruments

8.2.1. Création de l'instrument Solia dans Soprane II

The screenshot shows the 'Instruments' configuration window in Soprane II. The window title is 'Instruments' and it displays a dropdown menu for 'CP 490 LAN'. Below this is a 'Connection' section with the following fields:

Analyzer	10 . 1 . 1 . 101
Adam modules	_____
Valve	_____
Solia	490 - 2
Keller	_____

A green 'Confirm' button is located at the bottom of the window.

Depuis Soprane Configurateur, créer un nouvel analyseur en cliquant sur l'icône « + ». Renseigner ensuite l'adresse IP de l'instrument. Sélectionner « 490 – 2 » pour la catégorie Solia (comme sur l'image ci-dessus).

8.2.2. Création de l'instrument MSD dans Agilent GCMS Configuration

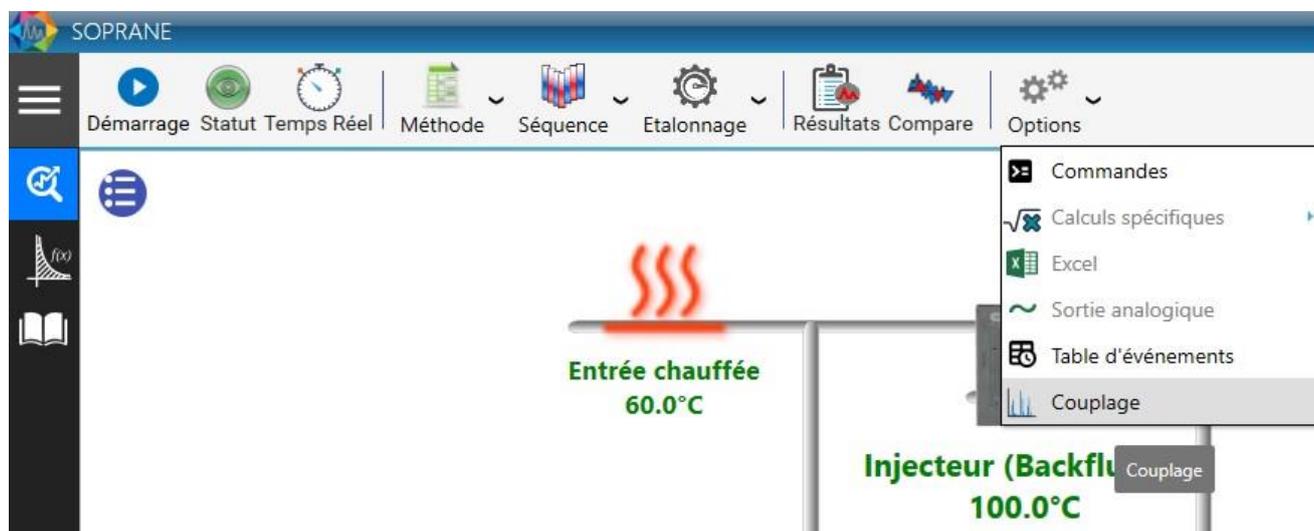
- Démarrer Agilent GCMS Configuration en tant qu'administrateur
- Sélectionner le numéro d'instrument à configurer (par défaut « 1 »)
- Renseigner le nom de l'instrument (« MSD » par exemple) et l'identité (ID) du laboratoire (facultatif)
- Sélectionner le modèle de MSD



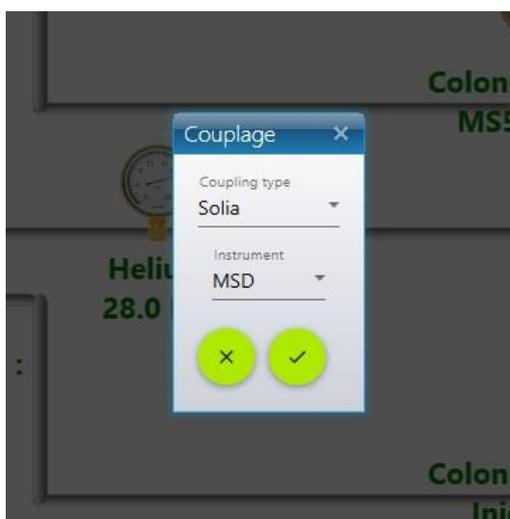
- ❑ Renseigner l'adresse IP du MSD. L'adresse IP de l'instrument s'affiche sur l'écran à l'intérieur du capot supérieur du MSD.
- ❑ Spécifier la polarité du quadripôle dans « DC Polarity ». Cette information se trouve à l'intérieur du capot supérieur (« Pos » ou « Neg »)
- ❑ Sélectionner « None » pour le modèle du GC
- ❑ Sélectionner « Workflow mode : Enhanced »

8.3. Configuration du couplage

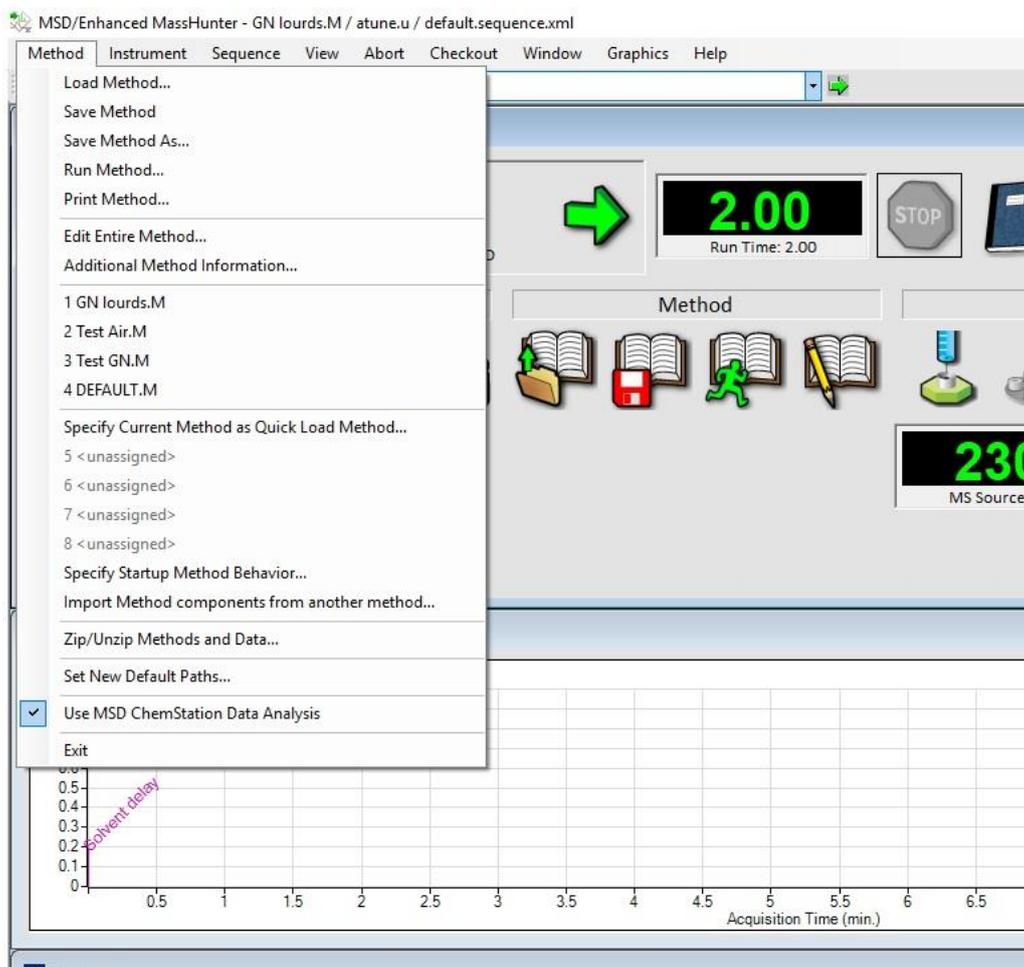
Afin de piloter le couplage, il est nécessaire de paramétrer le couplage dans chacun des logiciels. Dans Soprane II, l'activation du couplage s'effectue depuis l'onglet « option » puis « couplage ».



Une fenêtre s'ouvre ensuite. Sélectionner « Solia » puis le nom de l'instrument MS créé dans le configurateur GCMS Agilent, comme ci-dessous :



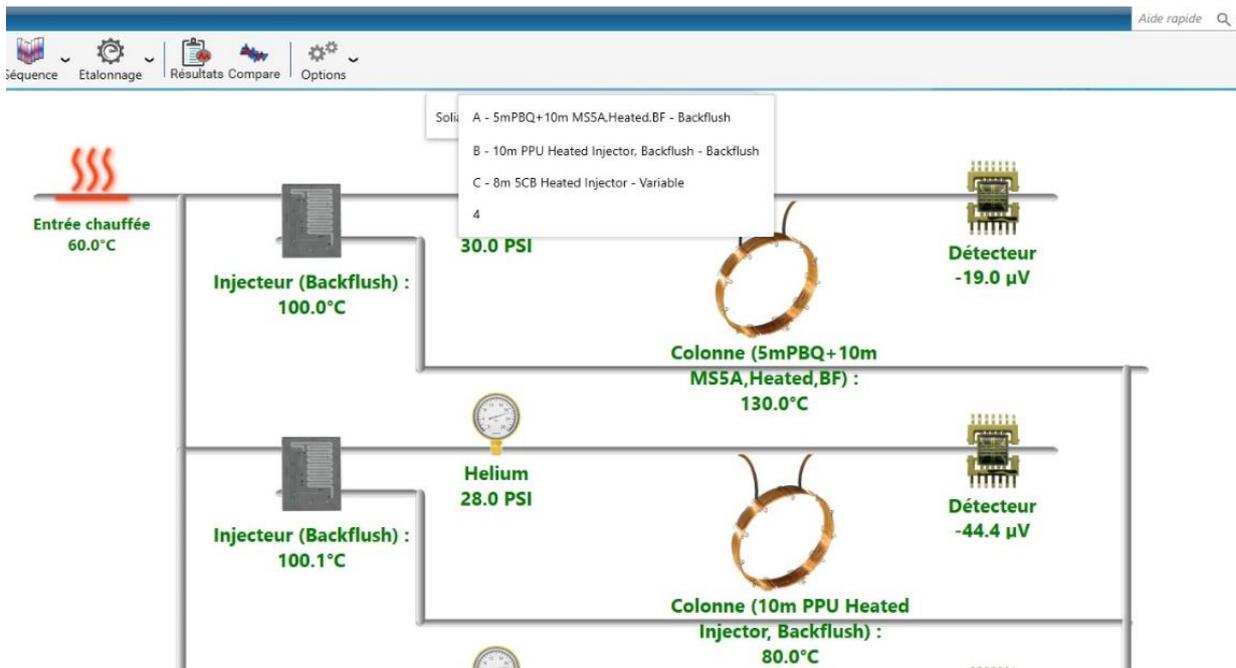
Dans MassHunter, cocher la ligne « Use MSD ChemStation Data Analysis » dans le menu « Method ».



8.4. Contrôle du Solia

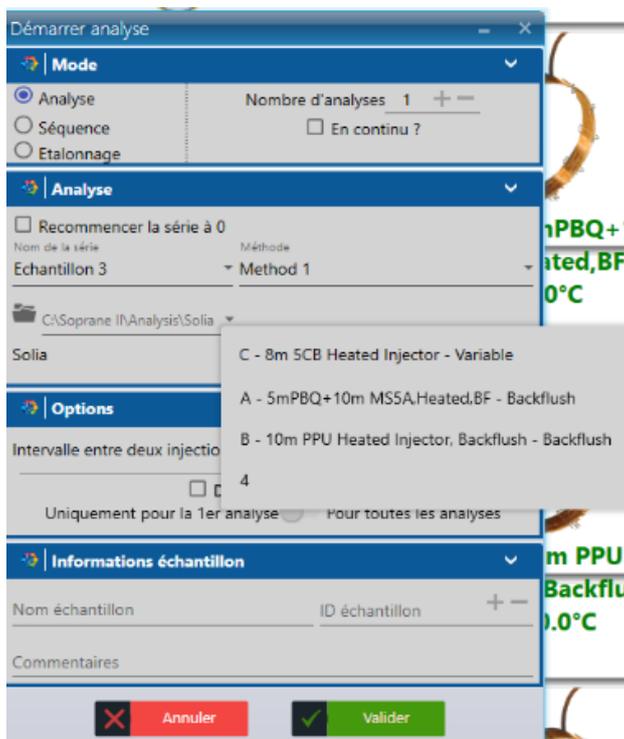
Une fois ces prérequis de configuration effectués, il est possible de contrôler la vanne de sélection de voie entre les modules μ GC et le détecteur MS. Il existe plusieurs moyens de modifier la position de cette vanne. Depuis l'onglet « Statut », en cliquant sur la barre située au-dessus du schéma :





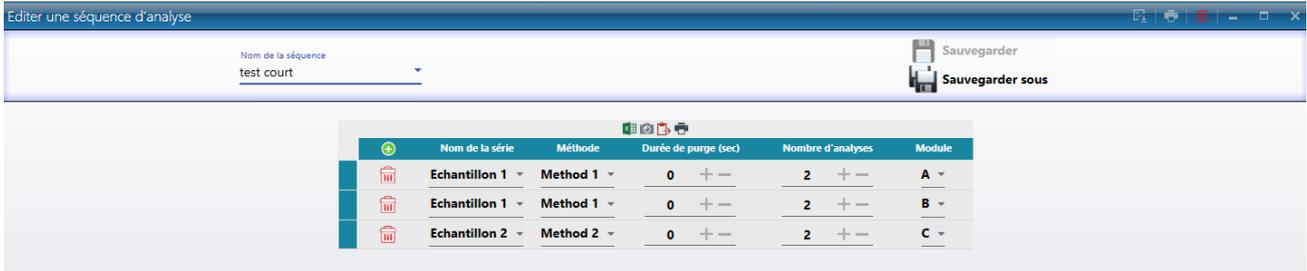
Les noms des différents modules s’affichent à l’écran. Cliquer sur le module à coupler au détecteur MS.

Lors du lancement d’analyses, dans l’onglet « Démarrage » :



Lors de l’écriture d’une séquence d’analyses : la position de la vanne changera entre les analyses et au cours de la séquence, afin de coupler le module µGC souhaité au détecteur MS pour chaque analyse :





8.4.1. Création d'une méthode d'analyse

Une méthode d'analyse Solia comprend une méthode d'analyse Soprane et une méthode d'analyse MassHunter.

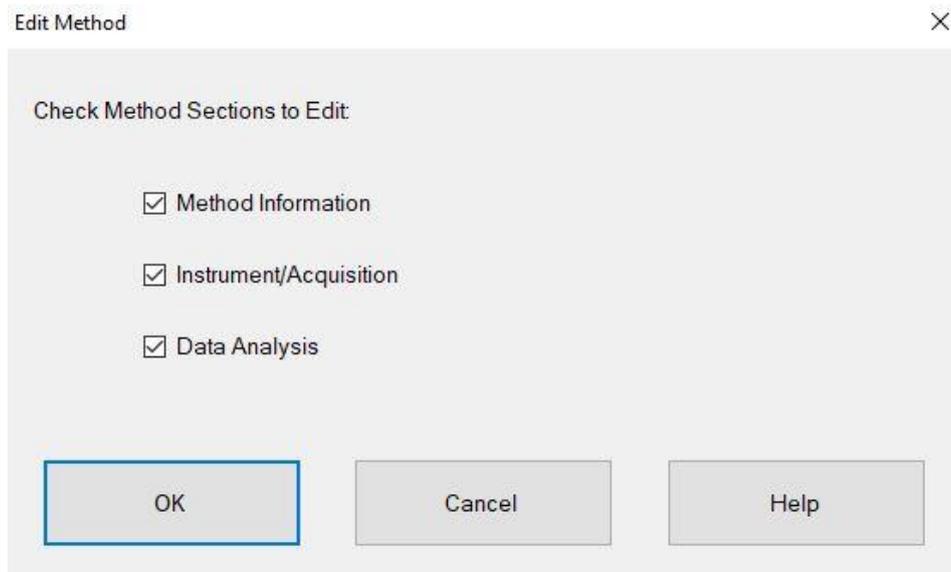
8.4.2. Création d'une méthode d'analyse Soprane II

Se référer au chapitre 4.3.1.

8.4.3. Création d'une méthode d'analyse MassHunter

Depuis l'onglet « File », sauvegarder la méthode sous le nom souhaité. Editer ensuite la méthode.

Cocher les trois cases :



Cocher « Data Acquisition » et « Data Analysis » :

Method Information

Method Comments:

Save Copy of Method With Data

Method Sections to Run

Pre-Run Macros/Commands

Instrument Control: Browse...

Data Analysis: Browse...

Data Acquisition

Data Analysis

Post-Run Macros/Commands

Instrument Control: Browse...

Data Analysis: Browse...

OK Cancel Help

Sélectionner « Sample Inlet : Other/None » et « Injection Source : External Device »

Inlet and Injection Parameters

Sample Inlet: Other/None

Injection Source: External Device

Use MS

Inlet Location: Front Rear

MS Connected to: Front Rear

OK Cancel Help



Définir les paramètres MS :

SRA recommande les paramètres ci-dessus par défaut, à modifier en fonction de l'application. Le « Run Time » doit être égal ou plus grand que la durée d'analyse Soprane II.

Cocher « Quant Report » (essentiel pour la transmission des résultats vers Soprane II) puis sauvegarder la méthode.

Select Reports



8.5. Traitement des résultats

Soprane II offre la possibilité de réunir l'ensemble des résultats μ GC (détection TCD) et MS dans un même tableau, comme ci-dessous.

	Analyse	Date d'injection	Série	Méthode...	Résultats μ GC							Résultats MSD				SOLIA Mo...	
					C1 (A)	C2 (B)	C3 (B)	iC4 (C)	nC4 (C)	iC5 (C)	nC5 (C)	Total brut	C5 (MSD)	2methylC5 (MSD)	nC4 (MSD)		iC4 (MSD)
	Gaz_002	19/10/2018 11:53	Gaz	Test BF	10,012	1,002	1,001	1,031	1,036	1,034	1,040	16,157	1,389	1,385	1,403	1,385	C - 8m 5CB...
	Gaz_003	19/10/2018 11:56	Gaz	Test BF	10,021	1,002	1,003	1,031	1,037	1,035	1,040	16,169	1,395	1,397	1,421	1,403	C - 8m 5CB...
	Gaz_004	19/10/2018 11:58	Gaz	Test BF	10,014	1,002	1,003	1,030	1,035	1,033	1,038	16,156	1,408	1,409	1,431	1,412	C - 8m 5CB...
	Gaz_005	19/10/2018 12:01	Gaz	Test BF	10,035	1,003	1,003	1,030	1,035	1,033	1,038	16,175	1,418	1,422	1,439	1,419	C - 8m 5CB...
	Gaz_006	19/10/2018 12:04	Gaz	Test BF	10,041	1,003	1,003	1,031	1,037	1,035	1,039	16,188	1,429	1,430	1,448	1,427	C - 8m 5CB...
	Gaz_007	19/10/2018 12:07	Gaz	Test BF	10,044	1,003	1,003	1,031	1,037	1,036	1,038	16,191	1,434	1,435	1,455	1,434	C - 8m 5CB...
	Gaz_008	19/10/2018 12:09	Gaz	Test BF	10,021	1,002	1,002	1,031	1,038	1,035	1,041	16,171	1,447	1,442	1,455	1,442	C - 8m 5CB...
	Gaz_009	19/10/2018 12:12	Gaz	Test BF	10,022	1,003	1,003	1,030	1,037	1,035	1,038	16,169	1,448	1,447	1,463	1,444	C - 8m 5CB...
	Gaz_010	19/10/2018 12:17	Gaz	Test BF	10,024	1,002	1,002	1,030	1,036	1,034	1,038	16,165	1,454	1,447	1,470	1,449	C - 8m 5CB...
	Min				10,012	1,002	1,001	1,030	1,035	1,033	1,038	16,156	1,389	1,385	1,403	1,385	
	Avg				10,026	1,002	1,003	1,031	1,036	1,035	1,039	16,171	1,425	1,424	1,424	1,424	
	Max				10,044	1,003	1,003	1,031	1,038	1,036	1,041	16,191	1,454	1,447	1,470	1,449	
	Rsd (%)				0,114	0,036	0,070	0,059	0,084	0,091	0,110	0,075	1,641	1,575	1,496	1,480	

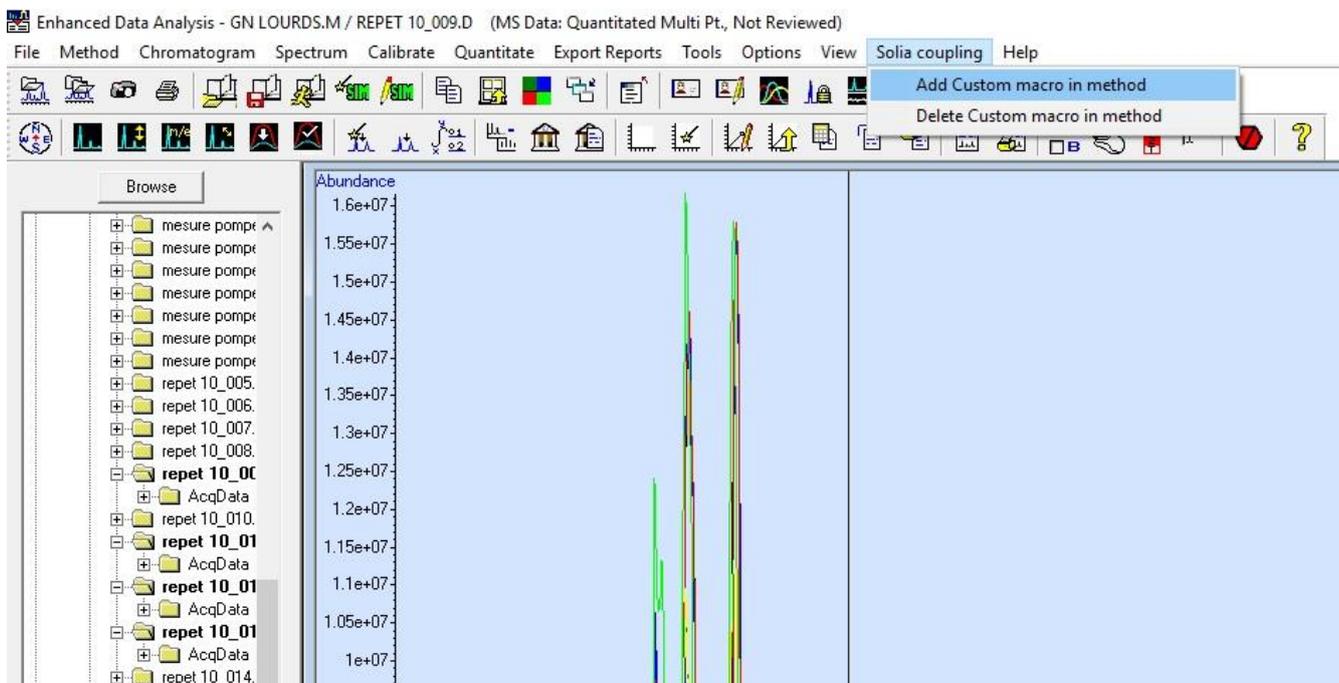
Le tableau ci-dessus réunit les résultats TCD des modules μ GC (indiqués par les lettres (A), (B) et (C)), ainsi que les résultats MSD.

8.5.1. Création d'une méthode de traitement Soprane II

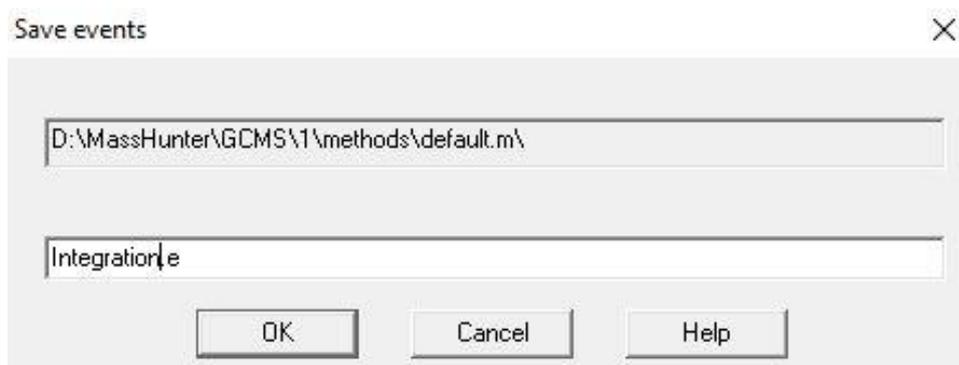
Se référer au chapitre 4.5.

8.5.2. Création d'une méthode de traitement Chemstation Data Analysis

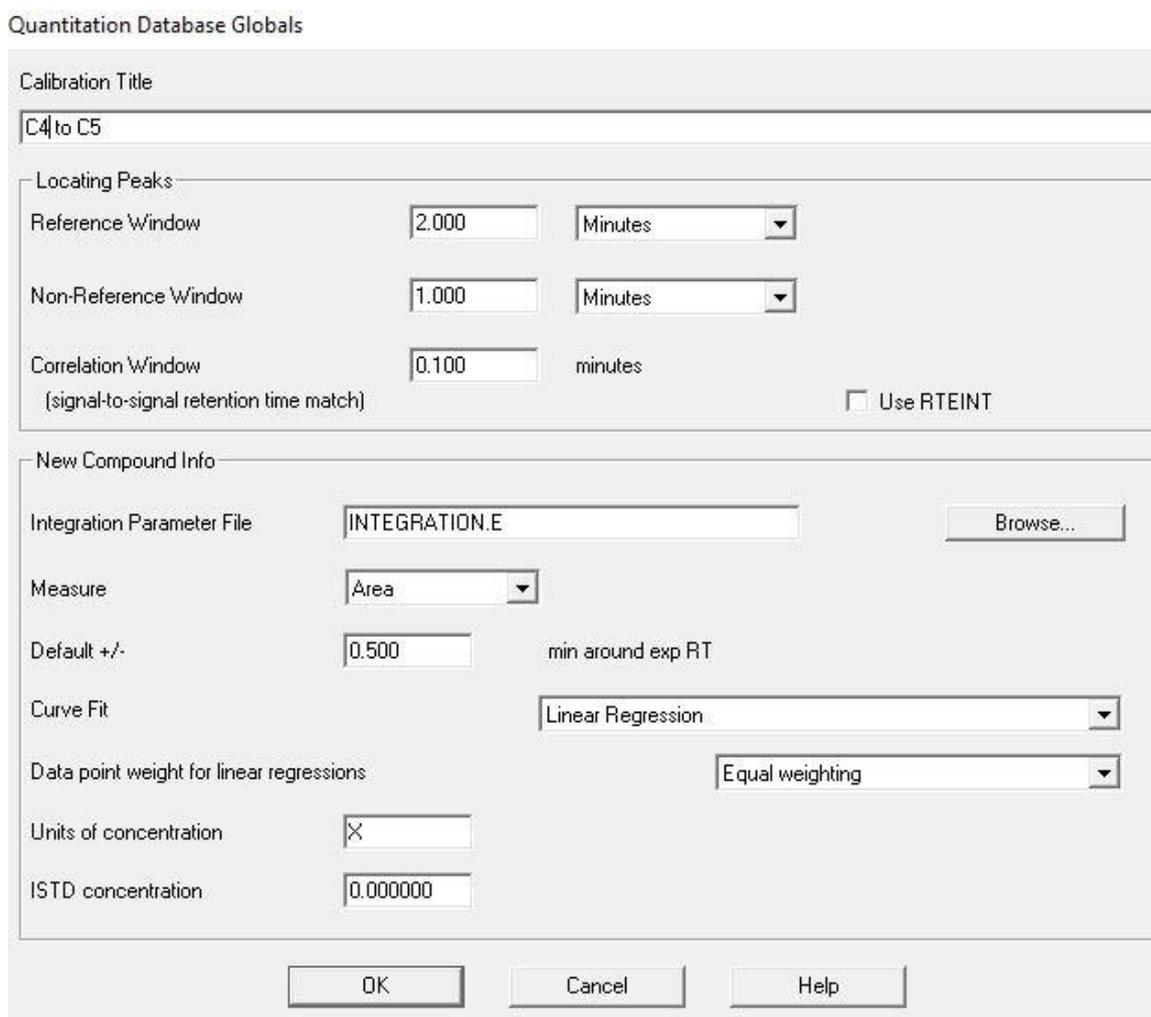
Ouvrir Chemstation Data Analysis et charger la méthode d'acquisition utilisée. La méthode de traitement doit être la même que celle d'acquisition pour que la transmission des résultats vers Soprane II puisse se faire. Dans l'onglet « Solia Coupling » de Chemstation Data Analysis, cliquer sur « Add Custom macro in method ».



Depuis l'onglet « Chromatogram », cliquer sur « AutoIntegrate » puis modifier les paramètres d'intégration dans « MS Signal Integration parameters » si nécessaire. Sauvegarder ensuite les paramètres d'intégration sous le nom souhaité :

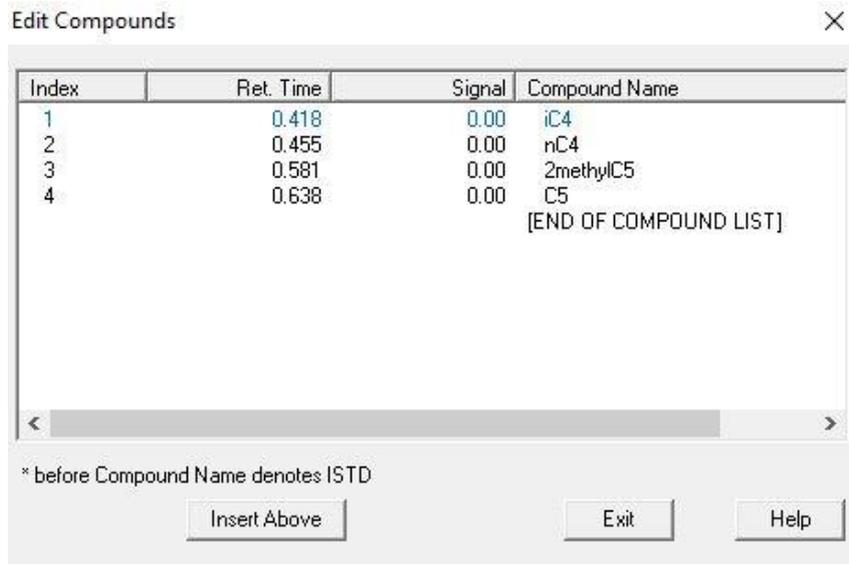


Depuis l'onglet Calibration, cliquer sur « Set Up Quantitation »

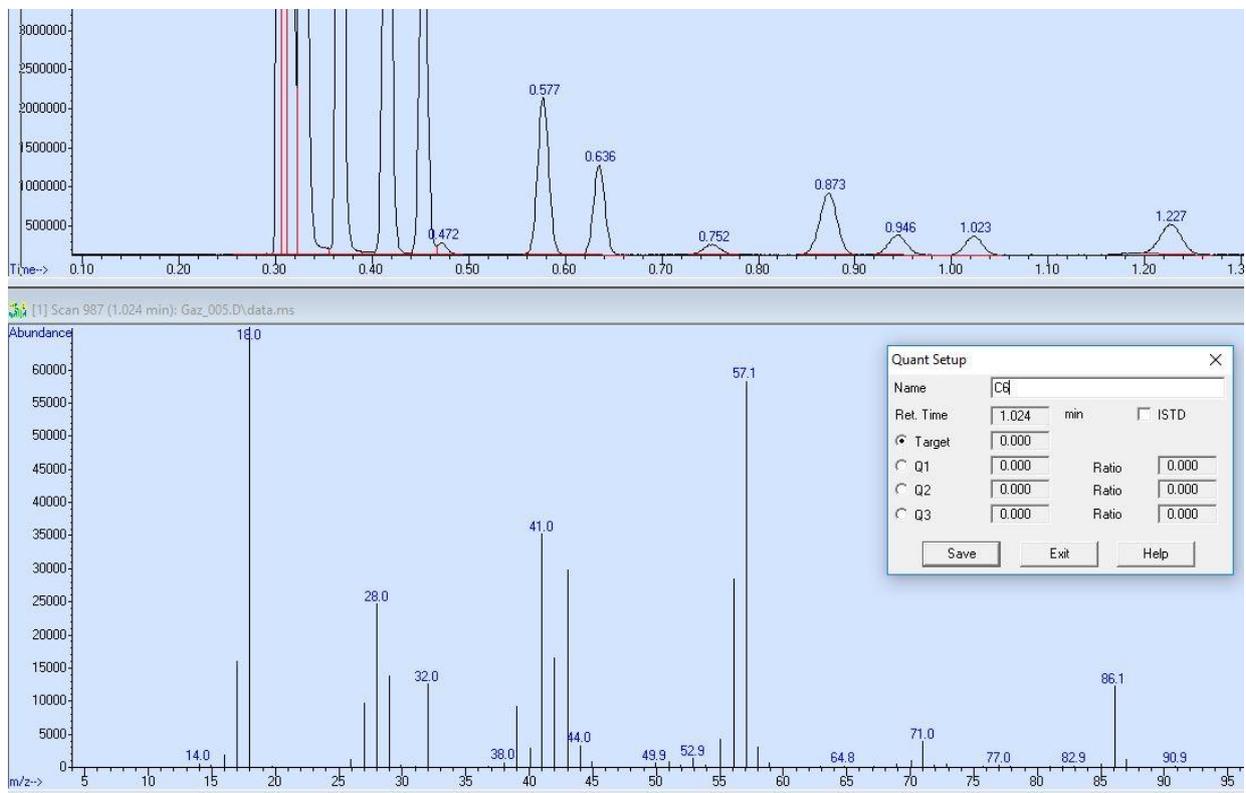


Renseigner les champs « Calibration Title », « Integration Parameter File » (cliquer sur browse et charger le fichier d'intégration précédemment sauvegardé) et « Units of concentration ». Décocher « Use RTEINT » puis cliquer sur OK.

La fenêtre suivante permet d'ajouter les composés souhaités à la table d'étalonnage. Cliquer sur « Insert Above »



Effectuer un double clic droit sur le sommet du pic chromatographique à ajouter afin de définir son temps de rétention dans l'étalonnage. Définir le nom du composé.



A ce stade, il est également possible de sélectionner des ions target utilisés pour la quantification. Pour ce faire, cliquer simultanément sur clic gauche et clic droit sur le pic m/z du spectre de masse à prendre en compte.

Cliquer sur « Save » pour passer au composé suivant, et sur « Exit » lorsque tous les composés ont été ajoutés à la table.

Renseigner les champs « Compound concentration » et « New Level ID »

Update Calibration

Calibration Data File (Selection ignored by Sequence)
C:\Soprane II\Analysis\Solia\181019\Gaz_005.D

Add Level (supply new Calibration Level ID)

Compound Concentration:

ISTD Concentration:

Update Level (select existing Calibration Level ID)

Responses Average Replace

Retention Times Average Replace

Replace Qualifier Ion Relative Responses

Update Mass Assignments

Delete Level (select existing Calibration Level ID)

Level IDs

New Level ID

Existing Level ID
1

Do Update Cancel Help



