

SOPRANE CDS

Manuel d'utilisation pour MicroGC



Cher utilisateur,

Merci d'avoir choisi ce produit SRA Instruments.

Ce manuel présente les différentes informations nécessaires pour une bonne utilisation de votre logiciel. Si toutefois, vous avez besoin de renseignements complémentaires ou si vous rencontrez des problèmes, vous pouvez contacter notre Service Après-Vente :

Hotline: +33 (0)4 78 44 22 09
E-mail : service@sra-instruments.com

 <p>SRA INSTRUMENTS ANALYTICAL SOLUTIONS</p>	<p>SRA Instruments 210 rue des Sources 69280 Marcy l'Etoile FRANCE</p>	<p>Tel : +33 (0)4 78 44 29 47 info@sra-instruments.com www.srainstruments.com</p>
--	--	---

Table des matières

1. INTRODUCTION	7
2. UTILISATION DE SOPRANE CDS	7
2.1 Présentation de l'affichage	8
2.1.1 Menu Analyse	9
2.1.2 Lecture du statut	11
2.1.3 Menu Traitement	13
2.1.4 Menu Journaux	13
2.1.5 Affichage A propos	15
2.2 Gestion des méthodes	15
2.2.1 Les conditions opératoires	15
2.2.2 Chargement d'une méthode d'analyse	17
2.2.3 Les 4 méthodes utiles	18
2.2.4 Envoi de méthode de « Standby » automatiquement	18
2.3 Gestion des séquences d'analyse	19
2.4 Gestion des séquences d'étalonnage	20
2.5 Programmation	21
2.5.1 Régénération de la colonne	21
2.5.2 Programmation d'une séquence	23
2.5.3 Programmation d'un étalonnage	23
2.6 Gestion des analyses	24
2.6.1 Lancement en analyse	24
2.6.2 Lancement séquence	25
2.6.3 Lancement étalonnage	26
2.7 Table d'événements	27
2.8 Résultats des analyses	29
2.8.1 Série d'analyses	31
2.8.2 Résultats d'analyse	32
2.8.3 Retraitement par lot	33
2.8.4 Étalonnage par retraitement	34
2.8.5 Actions rapides	35
2.9 Traitement	36
2.9.1 Intégration	36
2.9.2 Identification	37
2.9.3 Étalonnage	38
2.10 Gestion des alarmes	42
2.11 Gestion des tendances	43
2.11.1 Description	43
2.11.2 Configuration des tendances	44
2.12 Gestion des sorties 4-20 mA	45

2.13 Lancement de programmes externes	45
2.14 Comparaison des chromatogrammes	46
2.15 Étalonnage de référence	48
3. RAPPORTS	49
3.1 Rapport d'analyse	49
3.2 Rapport personnalisé	52
3.3 Rapport d'étalonnage	58
3.4 Rapport plusieurs analyses	60
3.5 Impression automatique après analyse	62
4. CALCULS SPECIFIQUES	63
4.1 Calculs du pouvoir calorifique du gaz naturel (ISO 6976)	63
4.2 Calculs RGA (EN 15984)	66
4.3 Calculs de l'indice de méthane	66
4.4 Calculs combustion	66
4.5 Calculs GPL (ISO 8973)	68
4.6 Calculs annexes	69
4.6.1 Calcul de la pureté du gaz	70
4.6.2 Calcul de l'hélium	70
4.6.3 Concentration pour les pics inconnus	71
4.6.4 Delta temps de rétention	72
4.7 Calculs via Excel	72
5. GESTION DES FICHIERS	74
5.1 Exporter des données	74
5.2 Importer des données	75
5.3 Importation des analyses Soprane 1	76
5.3.1 Exportation des fichiers Soprane 1	76
5.3.2 Importation des analyses dans Soprane CDS	77
6. MODBUS	78
6.1 Configuration de la communication	78
6.2 Configuration du Modbus standard	79
6.2.1 Variables Instrument	81
6.2.2 Variables d'échantillon/étalon	84
6.2.3 Variables résultats	84
6.2.4 Variables calcul spécifique	85
6.2.5 Variables entrée analogique	86
6.2.6 Les variables statut de l'analyseur	86
6.2.7 Les variables Excel	86
6.2.8 Les variables codes composants	86

6.2.9 Les variables édition des alarmes	87
6.2.10 Les variables « Personnalisé »	87
6.2.11 Options Modbus	88
6.2.12 Visualisation des résultats	90
6.3 Configuration du port Modbus standard	90
6.4 Test de communication	90
6.4.1 Tests de communication	90
6.4.2 Transmission de valeurs	92
7. DROITS D'ACCES	92
7.1 Identification d'un utilisateur	92
7.2 Création d'un utilisateur	93
7.3 Suppression d'un utilisateur	93
7.4 Modification du mot de passe	94
7.5 Gestion d'un utilisateur	95
8. ANNEXE I : GRAPHIQUE	97
8.1 Zoom / Dézoom	97
8.2 Navigation	97
8.3 Palette	97
8.4 Raccourcis	98
8.5 Paramétrage des éléments à afficher	98
8.6 Exportation	98
9. ANNEXE II : PRINCIPES TRAITEMENT D'INTEGRATION	100
9.1 Intégration	100
9.1.1 Les événements agissant sur l'intégration	100
9.1.2 Correction de ligne de base	101
9.1.3 Les événements de rejet	102
9.2 Identification	102
9.2.1 Pics références	103
9.2.2 Forçages	103
9.2.3 Cas général	104
9.2.4 Optimisation du processus	104
9.3 Étalonnage	104
9.3.1 Principe de l'étalonnage	107
9.3.2 Choix d'une courbe de réponse	107
9.3.3 Rejet de l'étalonnage	108
10. ANNEXE III : GUIDE D'INTEGRATION	110
10.1 Accéder au menu d'intégration	110
10.2 Sélection de la méthode de traitement	110

10.3 Configuration de l'intégration	110
10.4 Sélection de l'analyse	110
10.5 Flux de travail d'intégration	111
10.6 Paramètres d'intégration	111
10.6.1 Temps des paramètres d'intégration	111
10.6.2 Détection des pics	111
10.6.3 Rejets minimaux de hauteur et de surface	113
10.6.4 Pentés de début et de fin de pic	114
10.6.5 Sommet	115
10.6.6 Paramètres spécifiques pour la coélution	116
10.7 Mise à jour Soprane CDS	116
11. ANNEXE IV : REGLAGE DU TEMPS DE BACKFLUSH	117
11.1 Qu'est-ce que le backflush ?	117
11.2 Comment ajuster le temps de backflush avec Soprane CDS ?	117
12. ANNEXE V : FILTRER LES DONNEES	122
12.1 Filtre automatique	122
12.2 Filtre personnalisé	122
13. ANNEXE VI : EXPORTATION DES DONNEES	125
13.1 Exportation vers Excel	125
13.2 Exportation vers Csv	125
13.3 Exportation vers Diff	126
13.4 Format STARe (compatible avec une TGA)	127
14. ANNEXE VII : PILOTER UN SOLIA DEPUIS SOPRANE CDS	128
14.1 Installation	128
14.2 Configuration des instruments	128
14.2.1 Création de l'instrument Solia dans Soprane CDS	128
14.2.2 Création de l'instrument MSD dans Agilent GCMS Configuration	128
14.3 Configuration du couplage	129
14.4 Contrôle du Solia	130
14.4.1 Création d'une méthode d'analyse	131
14.4.2 Création d'une méthode d'analyse Soprane CDS	131
14.4.3 Création d'une méthode d'analyse MassHunter	131
14.5 Traitement des résultats	134
14.5.1 Création d'une méthode de traitement Soprane CDS	134
14.5.2 Création d'une méthode de traitement MSD Chemstation Data Analysis	134

1. Introduction

Soprane CDS est un logiciel de chromatographie, plus particulièrement dédié aux MicroGC et à l'analyse en ligne. Il permet de piloter plusieurs instruments et d'effectuer un large éventail de calculs.

Voici les fonctionnalités disponibles :

- Définir une séquence d'analyses faisant appel à plusieurs flux et plusieurs méthodes d'analyse (voir chapitre [Gestion des méthodes](#)).
- Automatiser l'envoi des méthodes d'analyse aux différents modules de l'analyseur, (voir chapitre [Gestion des séquences d'analyse](#)).
- Faire l'acquisition des signaux et faire l'intégration en fin d'analyse, (voir chapitres [Gestion des analyses](#) et [Traitement](#), ainsi que [Annexe II : Principes traitement d'intégration](#))
- 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 (voir chapitre [Gestion des fichiers](#)),
- Imprimer ou les visualiser sous divers formats,
- Communiquer avec des applications (ou automates) tierces pour l'envoi de résultats de l'analyse ([Gestion des sorties 4-20 mA](#), relais, liaison [Modbus](#), ...).

Ce manuel ne décrit pas comment configurer Soprane CDS. Pour cela, reportez-vous au « Guide de configuration de Soprane CDS ».

2. Utilisation de Soprane CDS

Dans la majorité des cas, Soprane CDS est fourni installé. Dans ce cas, votre version de Soprane CDS 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 CDS a été simplement installé et paramétré, et qu'aucune analyse n'a été effectuée.

L'utilisation de Soprane CDS nécessitera un certain nombre d'étapes :

- D'abord, nous allons visualiser les différents menus et nous vérifierons la possibilité d'établir un dialogue avec l'analyseur.
- Nous créerons une méthode d'analyse (voir chapitre [Gestion des méthodes](#)),
- Nous créerons une séquence d'analyse (voir chapitre [Gestion des séquences d'analyse](#)),
- Nous effectuerons des analyses (voir chapitre [Gestion des analyses](#)),
- À partir du chromatogramme d'une analyse, et directement, nous créerons une méthode d'intégration et une table d'identification des pics (voir chapitre [Traitement](#), ainsi que [Annexe II : Principes traitement d'intégration](#)),
- Nous verrons comment étalonner l'appareil (voir chapitre [Étalonnage](#)),
- Nous programmerons des calculs post-analytiques (voir chapitre [Calculs spécifiques](#)),
- Nous les visualiserons graphiquement, en tendance (voir chapitre [Gestion des tendances](#)),
- Nous programmerons des régénérations automatiques de colonnes (voir chapitre [Programmation](#)).
- Enfin, nous nous intéresserons aux possibilités de retraitement des analyses et de comparaison de chromatogrammes (voir chapitres [Résultats des analyses](#) et [Comparaison des chromatogrammes](#)).

2.1 Présentation de l'affichage

Dans le cas d'une ouverture normale de Soprane CDS, lors du lancement via l'application logiciel s'initialise et affiche la page principale suivante :



Nom du pic	Surface	Concentration	Unité	[c] Normalisée	Equation
H2	26 mV.s	1,131	%Mol	1,154 %	22,59x
N2	2979 mV.s	1,978	%Mol	2,017 %	1505,76x
CH4	117060 mV.s	91,174	%Mol	92,976 %	1283,91x
C2H6	63870 mV.s	2,483	%Mol	2,532 %	25723,86x
H2S	2 mV.s	3,011	ppm	0,000 %	0,81x
C3H8	32447 mV.s	1,006	%Mol	1,026 %	32246,13x
C6+	585 mV.s	0,073	%Mol	0,074 %	8017,26x
mC4	805 mV.s	0,103	%Mol	0,105 %	7843,93x
mC5	82 mV.s	0,013	%Mol	0,013 %	6335,76x
iC5	451 mV.s	0,050	%Mol	0,051 %	8865,79x
nC5	459 mV.s	0,050	%Mol	0,051 %	9168,52x
Σ	218785	98,062		100,000	

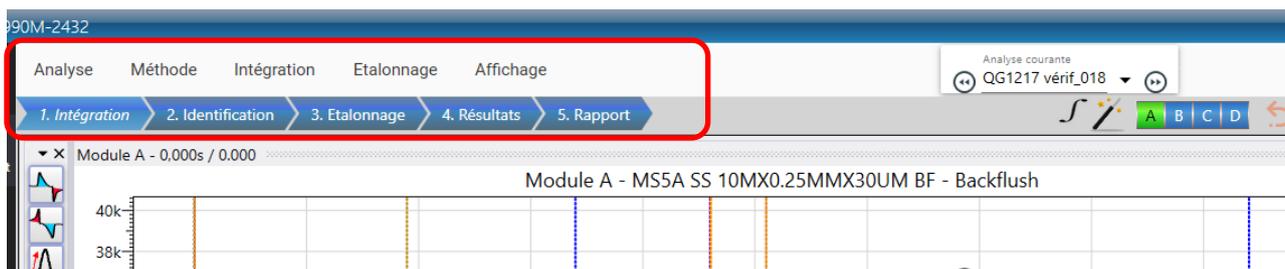
Soprane CDS est composé de trois menus principaux disponibles sur la gauche de la fenêtre :

- Analyse** : Le menu principal de Soprane CDS, utilisé au quotidien pour charger des méthodes, des séquences, démarrer des analyses et voir les résultats.
- Traitement** : Utilisé pour développer la partie traitement de la méthode ou pour traiter une analyse unique.
- Journaux** : Utilisé pour suivre les activités et les problèmes sur Soprane CDS.

Dans chaque menu principal, les fonctions les plus utiles sont accessibles dans la barre supérieure :

- Barre supérieure du menu "Analyse" :

- Barre supérieure du menu "Traitement" :

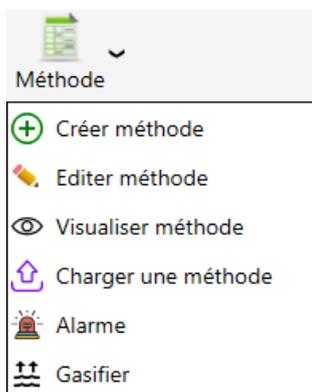


2.1.1 Menu Analyse

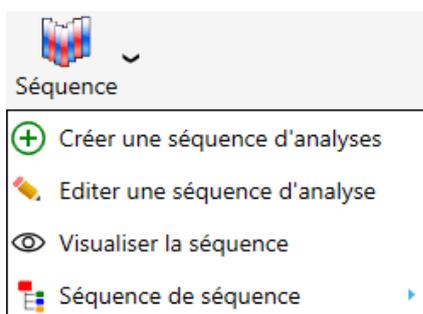


Signification des icônes :

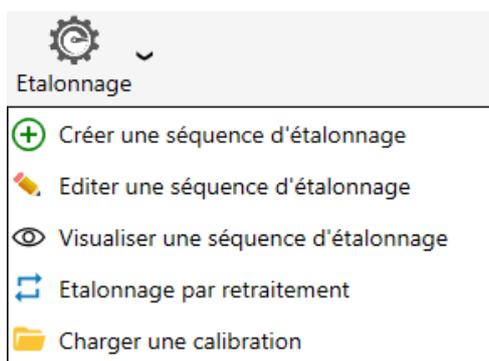
- ① Démarrage  ou arrêt  d'une analyse ou d'une séquence.
- ② Affichage du statut  ; sa couleur varie selon l'état du statut.
- ③ Affichage du temps réel  de l'analyseur en cours d'analyse.
- ④ Méthode, permet la création, l'édition, la sauvegarde ou le chargement d'une méthode, de paramétrer des alarmes pour 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.



- ⑤ Séquence, permet la création, l'édition, la sauvegarde ou la visualisation d'une séquence.



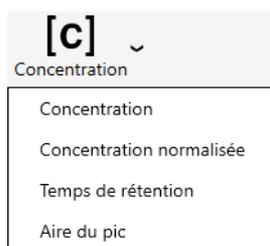
- ⑥ Etalonnage, permet la création, l'édition, la sauvegarde ou la visualisation d'une méthode de calibration.



- ⑦ Le bouton programmation  permet de planifier une séquence, un étalonnage ou une régénération de colonne automatiquement.

- ⑧ Le bouton Résultats  est utilisé pour sélectionner et afficher la fenêtre de résultats.

- ⑨ Sélection de la valeur de résultat visualisée.



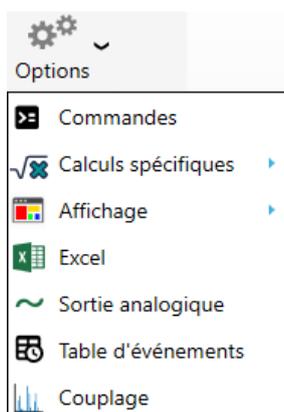
En cliquant sur le menu, la valeur des résultats et des tendances affichées sera mise à jour en fonction de la sélection.

- ⑩ Rapport  : permet d'afficher le rapport d'analyse de l'analyse sélectionnée dans le tableau des résultats.

- ⑪ Tendances  : Soprane CDS permet de visualiser l'évolution des résultats ou des valeurs calculées sur une période.

- ⑫ Compare  est utilisé pour ouvrir l'exécutable de comparaison et superposition d'analyses.

- ⑬ Options



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

- Configurer les commandes pré et post analyses et post retraitement
- Configurer un calcul spécifique (Gaz naturel, combustion, GPL...)
- Configurer l'affichage des résultats
- Sauvegarder automatiquement vos résultats dans un fichier Excel
- Envoyer les résultats vers des sorties analogiques
- Configurer une table d'événements de pré-analyse

2.1.2 Lecture du statut

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

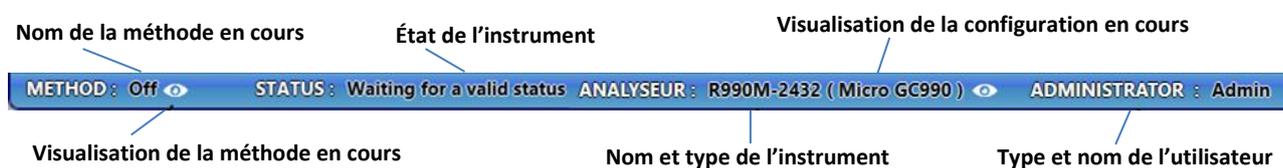
De plus, la visualisation du statut est le meilleur moyen de s'assurer de la capacité de Soprane CDS à dialoguer avec l'analyseur.

Vous pouvez trouver ces indications de statut à plusieurs endroits :

- **Barre de statut :**

Soprane CDS 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 CDS.

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.

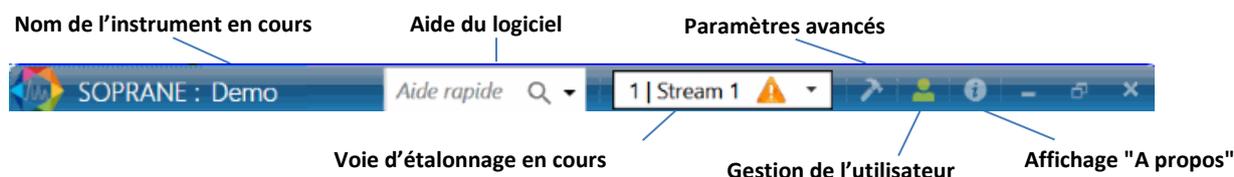
Module	A	B
Detector	TCD	TCD
Column	PLOTU	Molsieve

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

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

- **Barre de titre :**

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



- **Œil :**

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

Sa couleur change selon 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.

- Statut :

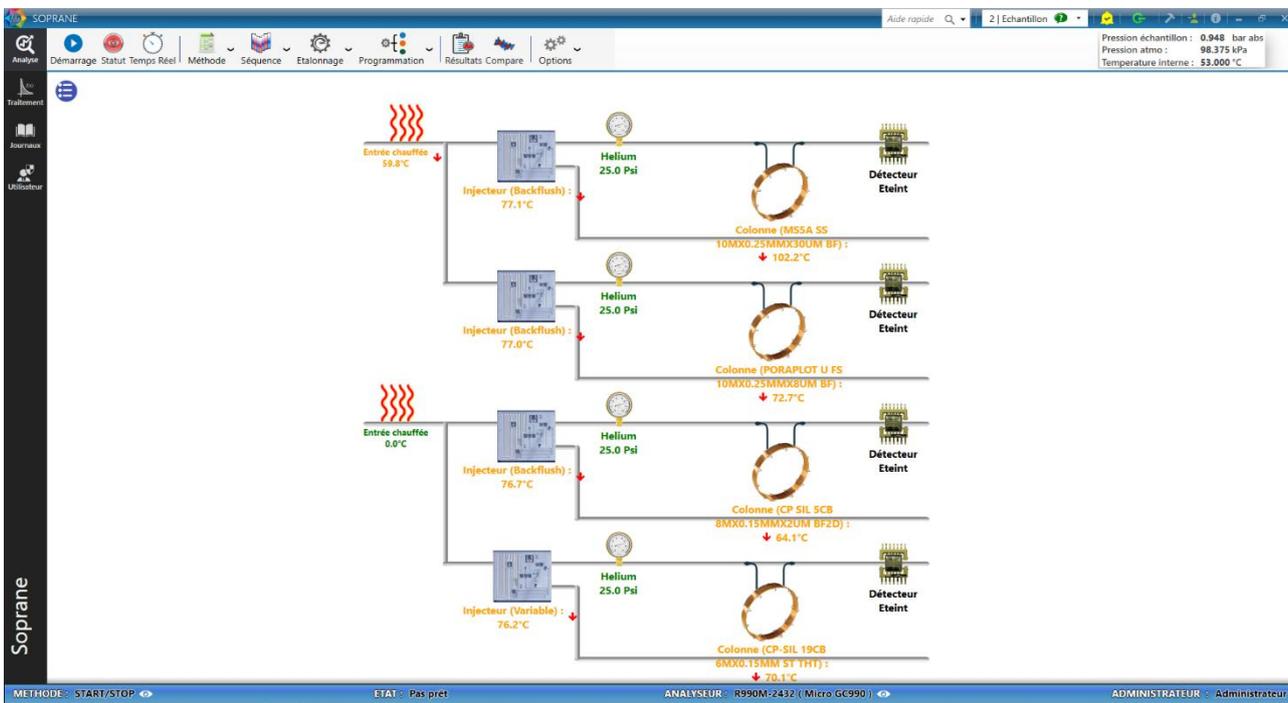
L'affichage indique tout ce qui concerne l'appareil : nombre de modules, températures, pressions, état des détecteurs. La partie supérieure de la fenêtre permet de voir immédiatement si le module est opérationnel (arrière-plan vert) ou non (arrière-plan rouge).

Module A - Column : PLOTU - Injector : Variable

: Le module est prêt.

Module B - Column : Molsieve - Injector : Variable

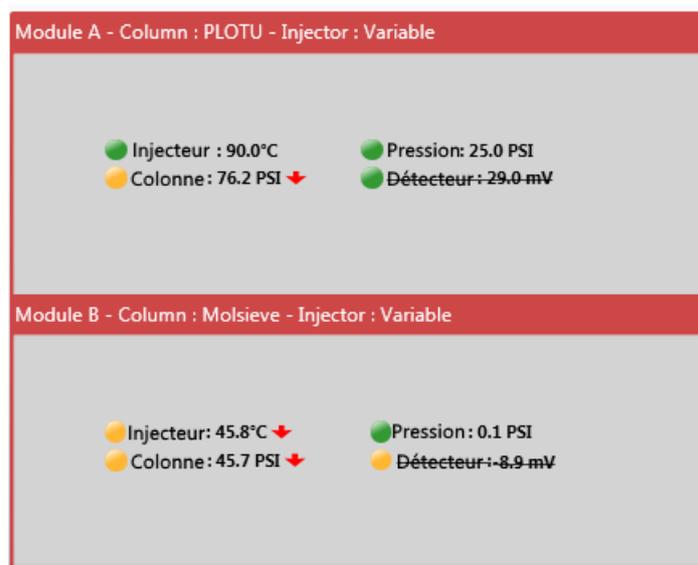
: Le module n'est pas prêt.



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

Si la consigne a été atteinte, l'écriture est en Vert (exemple Pression gaz vecteur). Dans le cas où l'élément n'est pas activé il est 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.



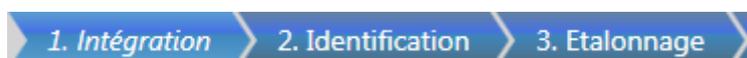
Dans les deux visualisations, lorsque le curseur de la souris passe au-dessus d'un élément dans la partie Statut ou sur la partie visuelle, des indications supplémentaires apparaissent comme l'état, la consigne ou la valeur actuelle de l'élément.

2.1.3 Menu Traitement

Après avoir réalisé des analyses et enregistré des chromatogrammes, le module Traitement est utilisé pour traiter ou retraiter des pics. Trois étapes sont nécessaires pour obtenir un résultat :

- **Intégration** : Définit à Soprane CDS comment intégrer les pics présents sur le chromatogramme en définissant la table d'intégration.
- **Identification** : Définit à Soprane CDS les molécules correspondant à chaque pic en définissant les temps de rétention dans la table d'identification.
- **Étalonnage** : L'étalonnage peut être partagé en trois étapes.
 - o La première est le renseignement de la table d'étalonnage pour définir à Soprane CDS quelle est la composition de chaque bouteille de gaz étalon.
 - o La seconde est l'analyse de chaque bouteille de gaz étalon avec la méthode à étalonner.
 - o La dernière est l'association des chromatogrammes obtenus en analysant chaque étalon, à la table d'étalonnage.

Dans le menu Traitement, les différentes étapes sont accessibles par les flèches :



2.1.4 Menu Journaux

Ce menu permet l'affichage et la gestion des journaux. La journalisation de l'application offre plusieurs types de fichiers :

- **Journal des actions** : il contient tous les événements que Soprane CDS a détectés.

Ce 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.

- **Journal des alarmes** : il contient toutes les alarmes qui ont été déclenchées.

Ce 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

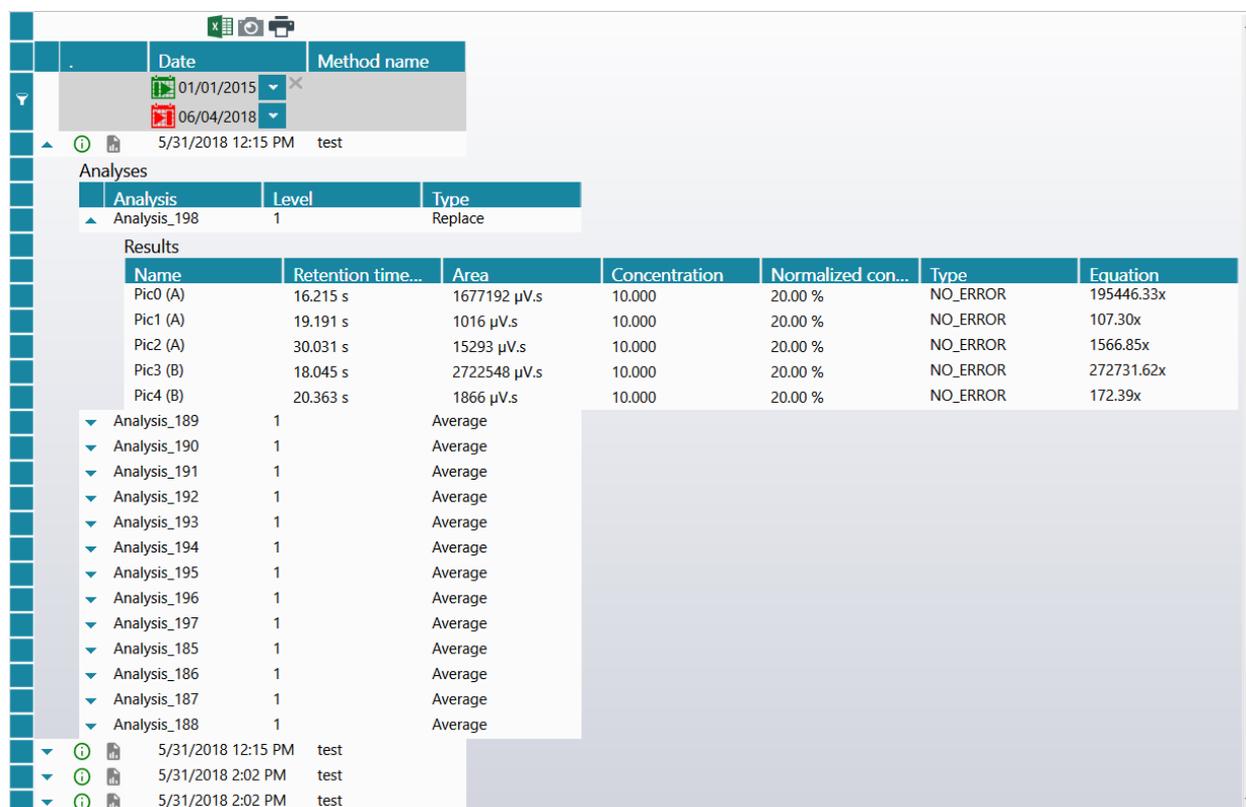
Les colonnes du tableau peuvent être triées et filtrées. Les lignes sélectionnées peuvent être supprimées (soit par la touche **suppr** soit en cliquant sur le bouton  soit par le menu contextuel).

Les événements peuvent également être archivés en cliquant sur l'icône  ; un fichier avec la date du jour sera alors créé.

- **Journal des erreurs** : il contient toutes les erreurs qui ont été détectées.

Ces informations sont destinées aux développeurs afin de localiser les erreurs lors d'un plantage.

- **L'historique d'étalonnages** : il contient tous les étalonnages réalisés avec Soprane CDS.

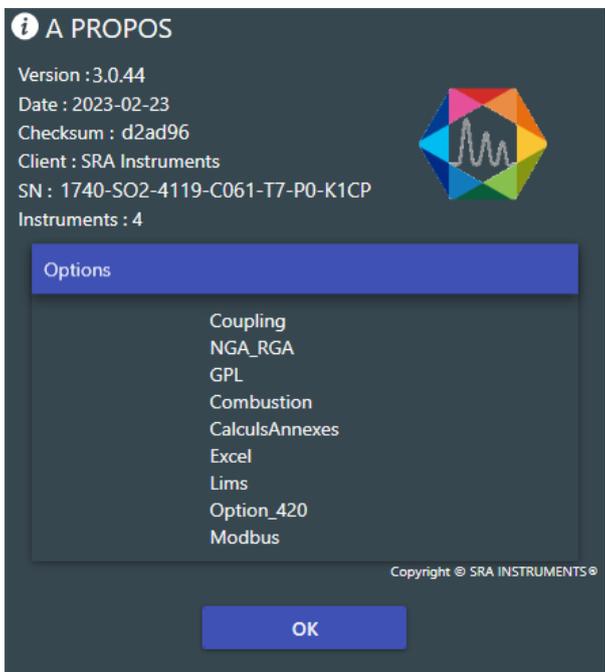


Name	Retention time...	Area	Concentration	Normalized con...	Type	Equation
Pic0 (A)	16.215 s	1677192 µV.s	10.000	20.00 %	NO_ERROR	195446.33x
Pic1 (A)	19.191 s	1016 µV.s	10.000	20.00 %	NO_ERROR	107.30x
Pic2 (A)	30.031 s	15293 µV.s	10.000	20.00 %	NO_ERROR	1566.85x
Pic3 (B)	18.045 s	2722548 µV.s	10.000	20.00 %	NO_ERROR	272731.62x
Pic4 (B)	20.363 s	1866 µV.s	10.000	20.00 %	NO_ERROR	172.39x

Remarque : Les deux petites icônes   vous permettent d'afficher les résultats d'étalonnage et le rapport d'étalonnage (voir chapitres [Étalonnage de référence](#) et [Rapport d'étalonnage](#)).

2.1.5 Affichage A propos

Dans la barre de titres, l'icône  permet notamment de visualiser la version du logiciel Soprane CDS et son checksum spécifique.



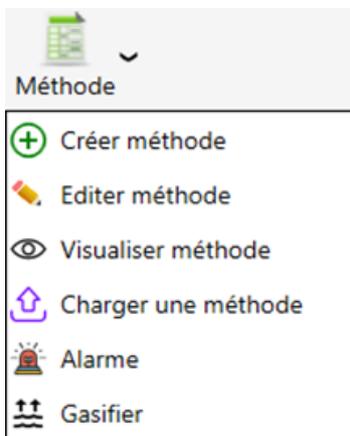
2.2 Gestion des méthodes

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

2.2.1 Les conditions opératoires

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

Pour accéder aux méthodes positionnez-vous sur l'onglet **Analyse**, cliquez sur le bouton suivant puis choisissez dans le menu déroulant ce que vous souhaitez faire :



Le programme d'installation **Configuration**



a permis de configurer Soprane CDS selon le type

d'analyseur utilisé.

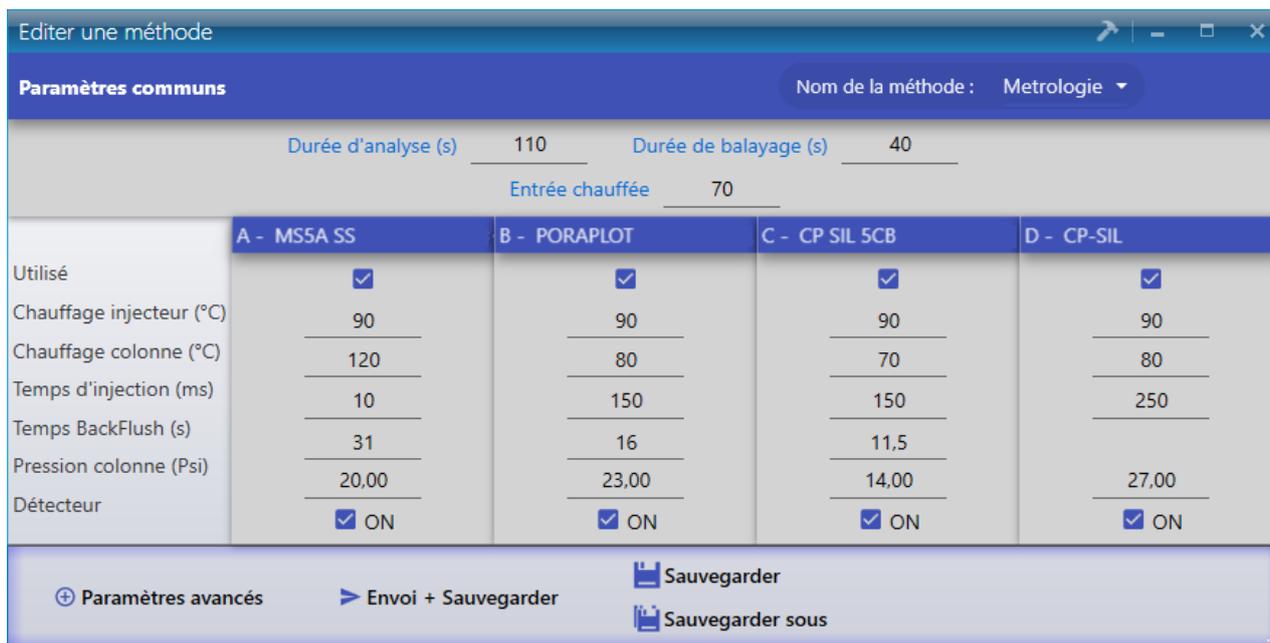
Ces appareils étant différents, les méthodes d'analyses seront elles aussi différentes.

Ci-dessous les différents paramètres accessibles dans la méthode ; 2 types de données sont à fournir :

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

Paramètres communs :

- Entrée chauffée : Température des tuyaux allant de l'entrée échantillon aux injecteurs.
- Durée d'analyse : Temps d'analyse / durée d'acquisition du chromatogramme.
- Durée de balayage : Temps de pompage de l'échantillon avant injection.
- Utilisé : Toujours laisser coché.
- Chauffage injecteur : Température de l'injecteur (5 °C au-dessus de la température de l'entrée chauffée).
- Chauffage colonne : A ajuster en fonction de la colonne et de l'application.
- Temps d'injection : Change le volume d'échantillon injecté dans la colonne. À régler entre 40 et 200 ms.
- Temps BackFlush : A ajuster en fonction de l'application. (Voir [Annexe IV : Réglage du temps de backflush](#)).
- Pression colonne : A ajuster en fonction de l'application. Généralement entre 20 et 30 PSI.
- Détecteur : État du détecteur. Cocher pour l'allumer.

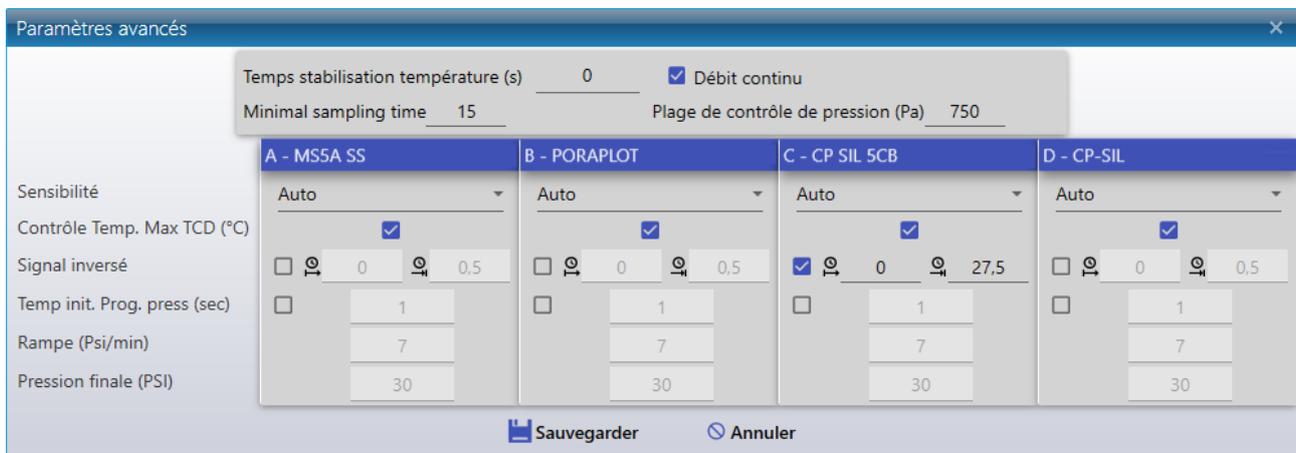


En cliquant sur " **⊕ Paramètres avancés**", une 2^e fenêtre s'ouvre, où vous pouvez renseigner les paramètres ci-dessous :

Paramètres avancés :

- Temps stabilisation température : Durée de latence avant que le MicroGC passe à l'état « prêt ».
- Plage de contrôle de pression : Sensibilité pour définir que la pression a atteint sa consigne.

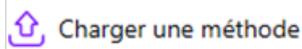
- **Débit continu** : Si cette case est cochée, la pompe est désactivée puisque l'échantillon circule "en continu" dans la boucle d'injection, on peut activer le débit continu uniquement dans la configuration de Soprane CDS.
- **Minimal sampling time** : Temps minimal d'échantillonnage.
- **Sensibilité** : Toujours mettre en "Auto".
- **Contrôle Temp. Max TCD** : Contrôle de la température du TCD ; si le TCD chauffe à la suite d'une mauvaise configuration des gaz vecteurs, par exemple, une sécurité coupe le TCD.
- **Signal inversé** : Permet d'inverser le signal lorsque l'on utilise le gaz vecteur Argon ou Azote.
- **Temp init. Prog. Press** : Permet de programmer la pression si besoin.
- **Rampe** : Indique la rampe de pression (si la rampe est utilisée).
- **Pression finale** : Indique la pression finale attendue (si la rampe est utilisée).



Cliquez sur "Sauvegarder" puis sur "Sauvegarder sous" et donnez un nom à cette méthode.

2.2.2 Chargement d'une méthode d'analyse

Le chargement d'une méthode est accessible dans l'onglet « **Analyse** », en cliquant sur « **Méthode** » puis en sélectionnant :



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

2.2.3 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, les températures sont 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 de la colonne](#)). 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 d'attendre que la température des colonnes soit en-dessous de 50 °C.

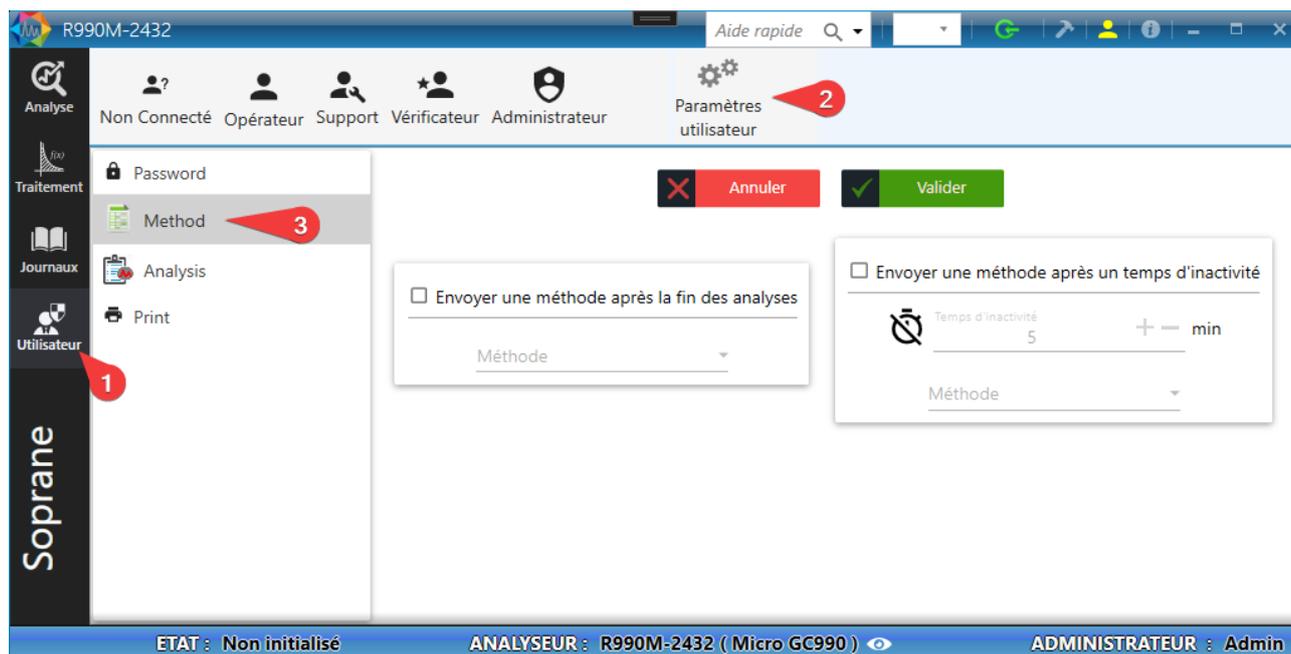
2.2.4 Envoi de méthode de « Standby » automatiquement

Un « Administrateur » peut configurer l'envoi automatique d'une méthode « Standby ».

Pour ce faire, connectez-vous en tant qu'Administrateur, sélectionnez le menu « Utilisateur », cliquez sur « Paramètres utilisateur » et sélectionnez le menu « Méthode ».

Deux choix sont possibles :

- Envoyer la méthode après la fin des analyses
- Envoyer la méthode après un temps d'inactivité à définir



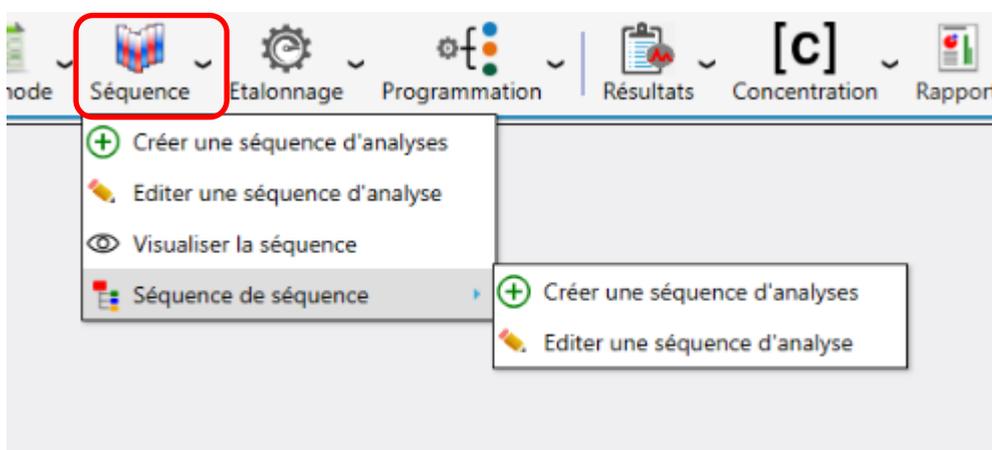
2.3 Gestion des séquences d'analyse

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

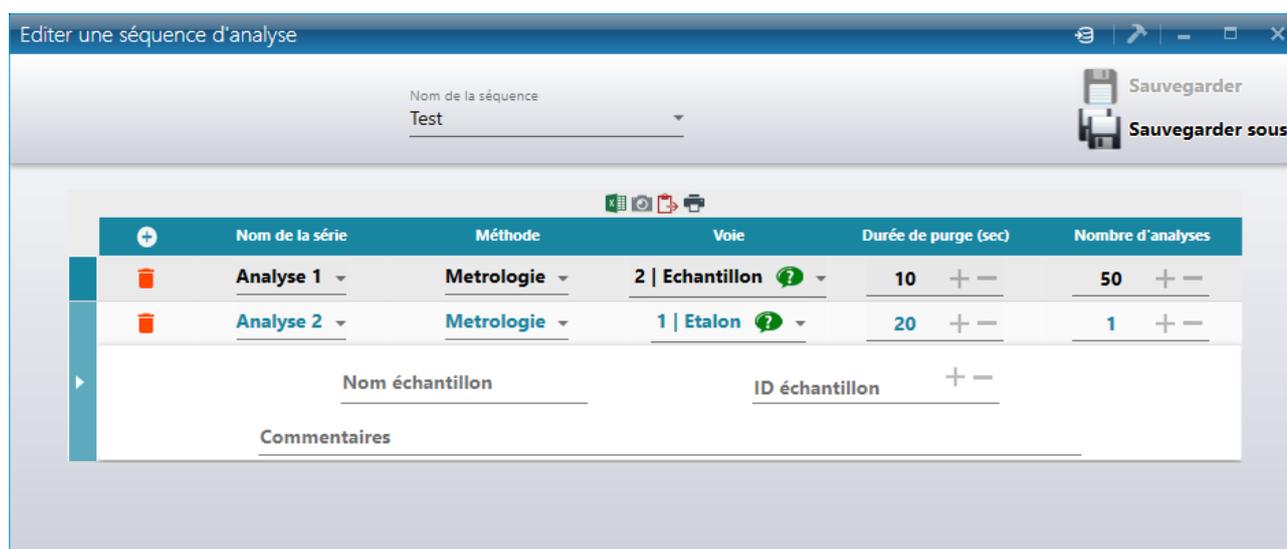
Nous souhaitons réaliser des cycles d'analyses. Il va donc être nécessaire de préciser quelle voie on souhaite analyser, quelle méthode d'analyse sera utilisée pour cela, combien de temps il faudra attendre avant les injections, ...

Supposons que le chromatographe autorise de travailler sur plusieurs voies. Ces voies peuvent être sélectionnés par campagnes (on travaille toujours sur la même voie) ou séquentiellement, toutes les voies ayant la même fréquence d'analyse, ou certaines étant considérées comme étant plus importantes que d'autres.

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



En cliquant sur « Éditer une séquence d'analyse », la fenêtre suivante apparaît :



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

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.

Qu'est-ce que la durée de purge ?

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 CDS d'anticiper l'analyse suivante et de sélectionner le flux suivant à temps pour que le balayage soit suffisant.

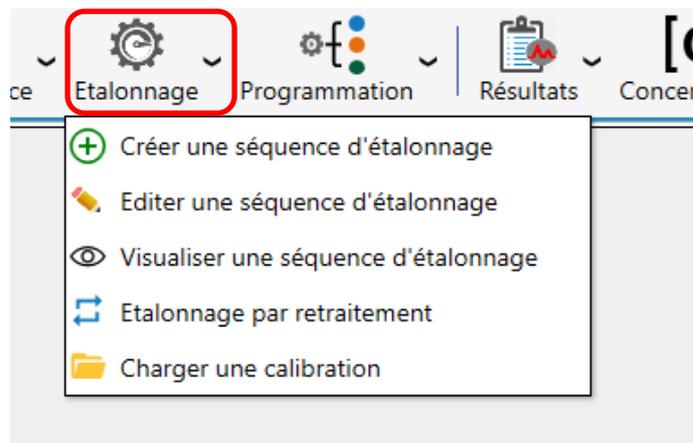
Note :

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.

2.4 Gestion des séquences d'étalonnage

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

Pour accéder à l'édition d'une séquence d'étalonnage positionnez-vous sur l'onglet **Analyse**, cliquez sur le bouton **Étalonnage** puis sélectionnez « Éditer une séquence d'étalonnage ».



La fenêtre suivante s'affiche :

Editer une séquence d'étalonnage

Nom de la séquence
Test

Sauvegarder
Sauvegarder sous

	Nom de la série	Méthode	Voie	Durée de purge (sec)	Nombre d'analyses	Niveau d'étalonnage	Type d'étalonnage
	Analyse 1	Metrologie	1 Etalon	10	1	1	Remplacer
	Analyse 1	Metrologie	1 Etalon	0	10	1	Moyenne
	Analyse 2	Metrologie	2 Echantillon	10	1	2	Remplacer
	Analyse 2	Metrologie	2 Echantillon	0	10	2	Moyenne

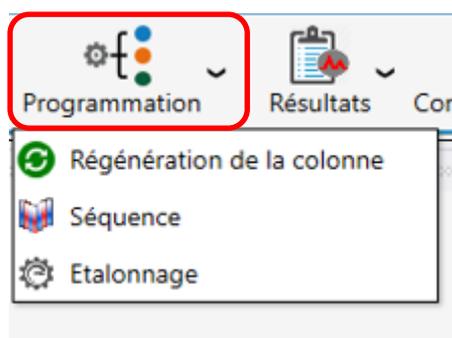
Dans cette table, il est possible de **définir les analyses en leur donnant un nom**, de **sélectionner une méthode d'analyse** (chaque case est une zone de liste visualisant toutes les méthodes), d'indiquer **quel flux est concerné** (autre zone de liste) et de préciser la **durée minimale d'échantillonnage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

Ce sont les mêmes paramètres que lors d'une édition de séquence d'analyse (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. Le sous dossier peut être indiqué, une option doit être cochée en cliquant sur le bouton de paramètres (bouton marteau en haut à droite de la fenêtre).

2.5 Programmation

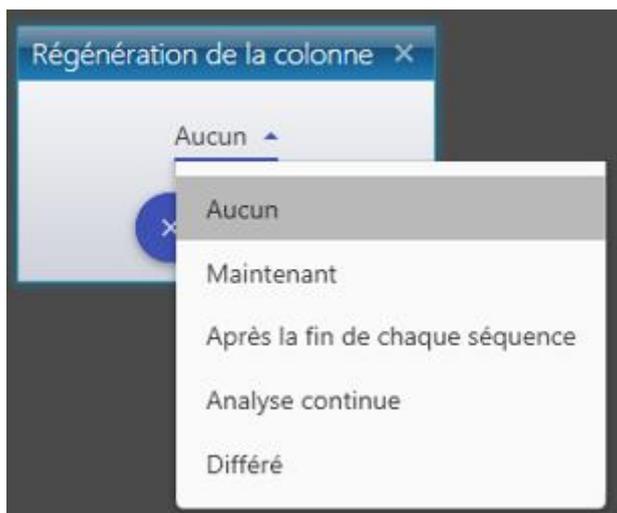
En cliquant sur le bouton le menu suivant s'affiche :



2.5.1 Régénération de la colonne

En cliquant sur « **Régénération de la colonne** », la configuration de cette régénération est possible.

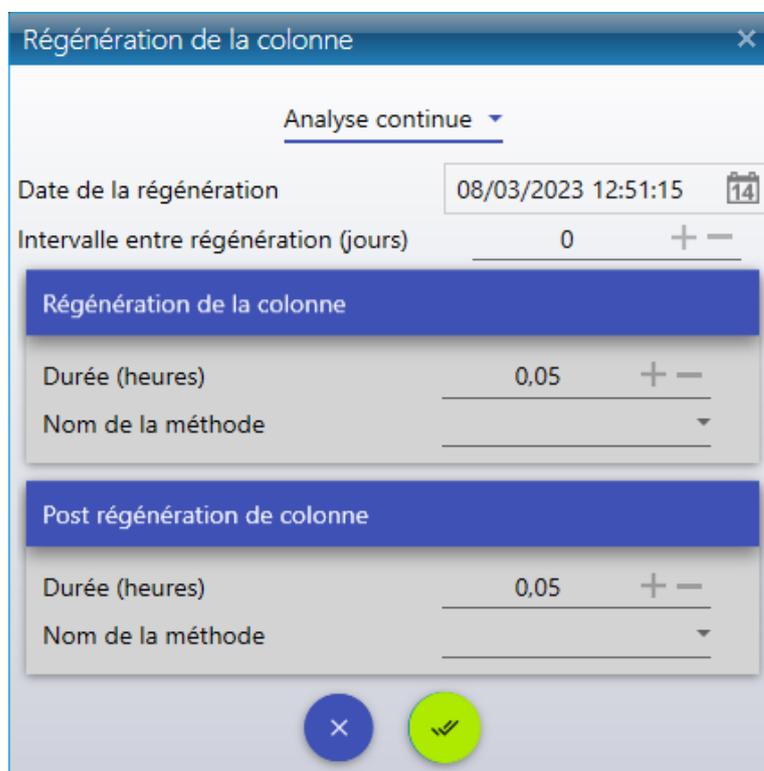
La sélection du menu déroulant offre plusieurs possibilités :



En effet, il y a plusieurs façons de procéder à la régénération :

- Maintenant : Il est possible d'arrêter les analyses et de demander une régénération immédiate en sélectionnant « **Maintenant** »
- Après la fin de chaque séquence : Programmer cette régénération pour qu'elle s'effectue un peu plus tard en sélectionnant « **Après la fin de chaque séquence** ».
- Analyse continue : Programmer cette régénération pour qu'elle s'effectue à une date définie lorsque Soprane CDS est en analyse continue.
- Différé : Programmer cette régénération pour qu'elle s'effectue à une date définie.

Ci-dessous le type de fenêtre qui apparaît :



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

La post régénération permet de diminuer la température après la régénération. Une **méthode de post régénération** doit donc être indiquée. 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 par exemple, ce qui permet à l'utilisateur d'avoir un appareil prêt à l'utilisation sans perte de temps.

En mode « Différé », une case à cocher « Continuer les analyses » est présente ; si elle est cochée et qu'une analyse était en cours, les analyses reprendront après le cycle de régénération.

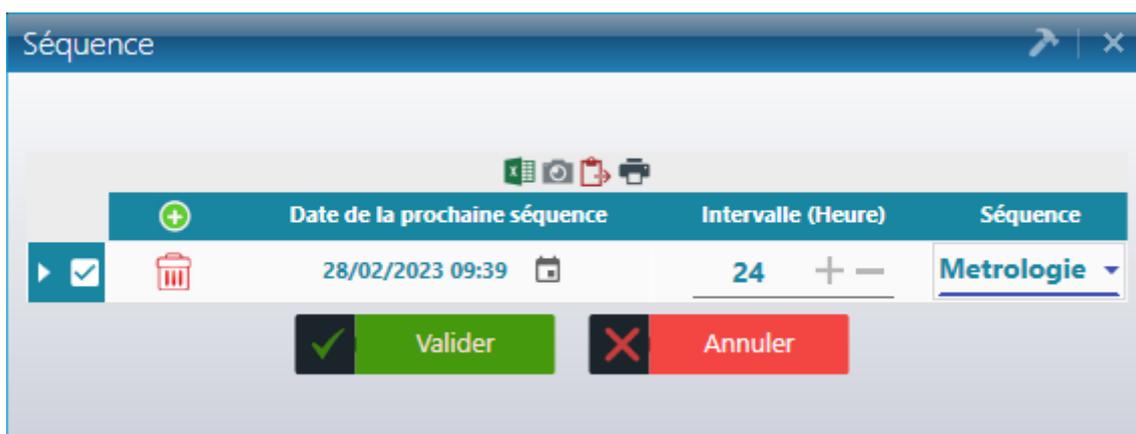
Pour les modes « Analyse continue » et « Différé » vous devez indiquer la **date et l'heure de la prochaine régénération** ainsi que le **nombre de jours devant séparer deux régénérations successives** (0 si une seule régénération doit être effectuée).

Note : 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.

2.5.2 Programmation d'une séquence

En cliquant sur « **Séquence** » dans le menu déroulant de **Programmation**, la fenêtre ci-dessous s'ouvre :



Cliquer sur  vous permet d'ajouter une séquence pour laquelle vous devez renseigner :

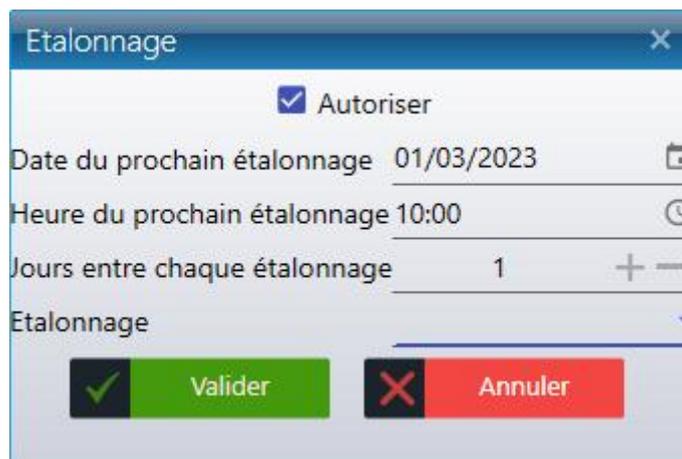
- La **date** à laquelle vous souhaitez que la séquence ait lieu
- La fréquence, déterminée par l'**intervalle en heures**, à laquelle vous souhaitez qu'elle ait lieu, le cas échéant
- Le **nom** de cette séquence

Cliquez sur « Valider » pour enregistrer la programmation.

Note : Il est possible de changer le format de l'intervalle entre « heure » et « jours » ; pour ceci, cliquez sur le bouton configuration en haut à droite de la fenêtre et changez le format.

2.5.3 Programmation d'un étalonnage

En cliquant sur « **Étalonnage** » dans le menu déroulant de **Programmation**, la fenêtre ci-dessous s'ouvre :



Pour que la programmation d'un étalonnage soit détectée, vous devez d'abord **l'activer en cochant « Autoriser »** ; s'il est désactivé l'étalonnage n'aura pas lieu.

Une fois activé, la **date**, l'**heure** et le **nom de la séquence** de l'étalonnage peuvent être renseignés.

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.

2.6 Gestion des analyses

Le bouton "**Démarrage**"  de l'onglet "**Analyse**" permet le départ des analyses/séquences.

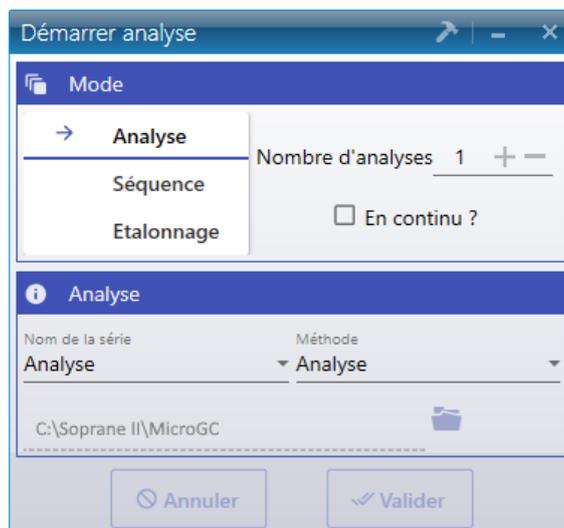
Lors d'une telle demande, Soprane CDS émet la méthode d'analyse et l'analyse démarre dès que le chromatographe est stabilisé dans les conditions opératoires requises.

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.

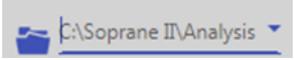
Trois modes d'analyse sont possibles :

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

2.6.1 Lancement en analyse



Sélectionnez le mode "Analyse" puis :

- Définissez le nombre d'analyses à lancer. Si la case "En continu ?" est cochée, les analyses seront lancées à l'infini jusqu'à arrêt manuel en cliquant sur le bouton "Stop".
- Définissez le nom de la série d'analyse. Ce sera le nom sous lequel seront enregistrés les résultats, incrémenté d'un numéro.
- Choisissez la méthode.
- Les fichiers de résultats d'analyse sont enregistrés par défaut dans « C :\Soprane II\Analyse\Nom de l'analyseur ». Pour créer un sous-dossier, renseignez un nom de sous-dossier dans .
- Définissez un intervalle de temps entre deux injections.
- Cliquez sur « Valider »

Notes:

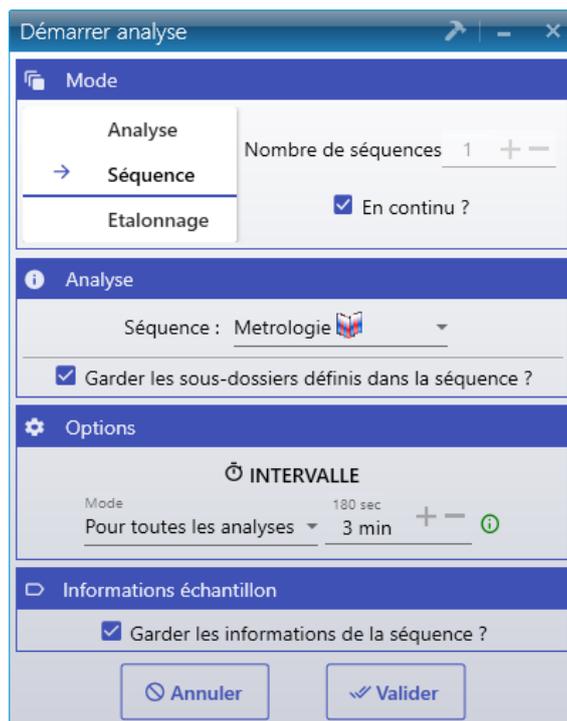
- Les "Informations échantillon" sont optionnelles.
- La case "Attente de start externe" est utilisée si le MicroGC doit attendre un start provenant d'un autre instrument pour démarrer les analyses.

Pour faire apparaître ces paramètres, cliquez sur le bouton configuration en haut à droite de la fenêtre.

2.6.2 Lancement séquence

Supposons que le chromatographe 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.



Sélectionnez le mode "Séquence" puis :

- Définissez le nombre de séquences à lancer. Si la case "En continu ?" est cochée, les séquences seront lancées à l'infini jusqu'à arrêt manuel en cliquant sur le bouton "Stop".
- Définissez le nom de la séquence.
- Les sous-dossiers peuvent être configurés directement dans la méthode, sinon ils peuvent être définis en décochant « Garder les sous-dossiers définis dans la séquence ».
- Définissez un intervalle de temps entre deux séquences.
- Cliquez sur « Valider »

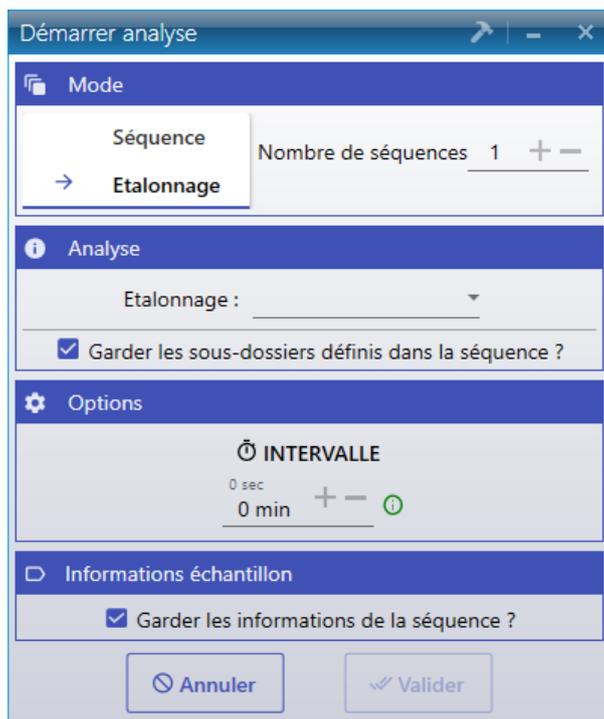
Notes:

- Les "Informations échantillon" sont optionnelles.
- La case "Attente de start externe" est utilisée si le MicroGC doit attendre un start provenant d'un autre instrument pour démarrer les analyses.

Pour faire apparaître ces paramètres, cliquez sur le bouton configuration en haut à droite de la fenêtre.

2.6.3 Lancement étalonnage

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



Sélectionnez le mode "Étalonnage" puis :

- Définissez le nombre de séquences à lancer.
- Définissez le nom de l'étalonnage.
- Les sous-dossiers peuvent être configurés directement dans la méthode, sinon ils peuvent être définis en décochant « Garder les sous-dossiers définis dans la séquence ».
- Définissez un intervalle de temps entre deux injections.
- Cliquez sur « Valider »

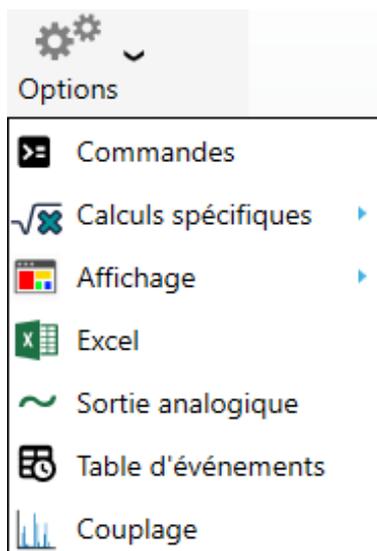
Notes:

- Les "Informations échantillon" sont optionnelles.
- La case "Attente de start externe" est utilisée si le MicroGC doit attendre un start provenant d'un autre instrument pour démarrer les analyses.

Pour faire apparaître ces paramètres, cliquez sur le bouton configuration en haut à droite de la fenêtre.

2.7 Table d'événements

Soprane CDS 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 :

- Le temps de début de l'événement
- La commande :
 - Commande auxiliaire
 - Modifier la voie
 - Sélectionner la voie par défaut
 - Message personnalisé
 - Lecture de l'entrée analogique
 - Seuil de l'entrée analogique min
 - Seuil de l'entrée analogique max
 - Injection (démarre l'analyse)
 - Démarrage externe (démarre l'analyse en attendant le signal d'un autre système)
 - Attente « Ready » (attend que les entrées logiques soient à l'état prêt)
 - Instrument (commande spéciale instrument)
- La valeur de commande (différente en fonction du type de commande)

Table d'événements

Nom
test

	+	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

Sauvegarder Sauvegarder sous

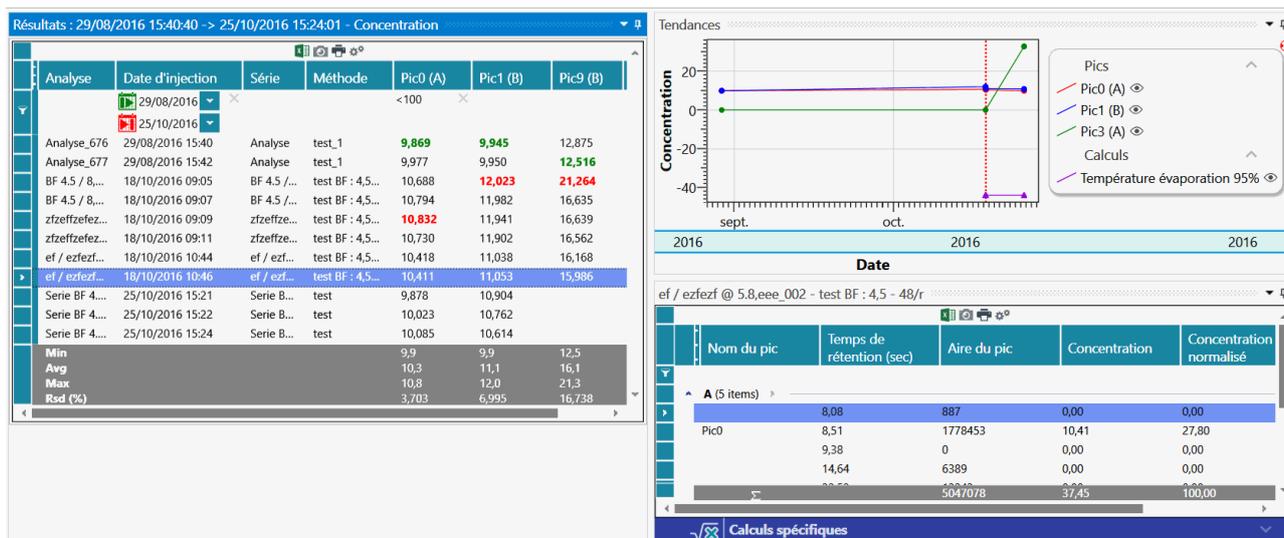
Soprane CDS lancera automatiquement l'analyse à la fin de la table d'événements.

Une fois la configuration de la table des événements terminée, enregistrez-la.

2.8 Résultats des analyses

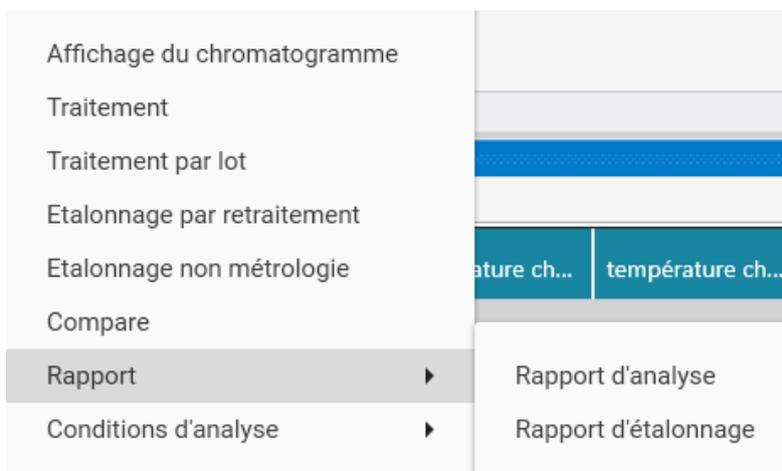
En fonctionnement normal, Soprane CDS permet la visualisation simultanée de plusieurs fenêtres relatives aux analyses.

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.



➤ **Description des menus**

Le menu "Résultats" 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](#)).



Le menu "Tendances" offre la possibilité d'ajouter de nouvelles tendances et de les configurer (Voir chapitre [Gestion des 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 CDS puisse restaurer l'affichage à chaque lancement du programme.

➤ **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.

➤ **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

2.8.1 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
zfeffzfezez...	18/10/2016 09:09	zfeffzfe...	test BF : 4,5...	10,832	11,941	16,639
zfeffzfezez...	18/10/2016 09:11	zfeffzfe...	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 [Annexe VI : Exportation des données](#) 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 Résultats) (Pour plus de détails, voir la rubrique [Actions rapides](#)).

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			yenne	852,941	10,016	0,000	1
Analyse			yenne	843,707	10,012	5,148	1
Analyse			yenne	853,351	9,972	24,852	1
Analyse			yenne	853,556	10,108	3,951	1
Analyse			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

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 [Gestion des tendances](#)) et modifiera les informations contenues dans le tableau des résultats.

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

Note : le nombre de résultats affichés dans le tableau « Résultats » est par défaut 1 mois tournant et 1000 résultats. Ces valeurs peuvent être modifiées en se connectant en tant qu'Administrateur (voir chapitre [Identification d'un utilisateur](#)), en sélectionnant le menu « Utilisateur » et en cliquant sur « Paramètres utilisateur » puis sur « Analyses ».

2.8.2 Résultats d'analyse

Le tableau suivant affiche les résultats de l'analyse sélectionnée dans le tableau série d'analyses.

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

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 %

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 [Gestion des tendances](#)).

Le haut de cette fenêtre présente plusieurs boutons . (Voir l'Annexe VI : [Exportation des données](#) pour plus de détails).

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

2.8.3 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.

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 (%)				6,639	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.

2.8.4 Étalonnage 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

Menu contextuel : 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.

Etalonnage

Nom de la méthode : Metrologie

Nom de l'analyse	Niveau d'étalonnage	Type d'étalonnage
QG1212_001	1 + -	Remplacer
QG1212_002	1 + -	Moyenne
QG1212_003	1 + -	Moyenne
▶ QG1212_005	2 + -	Remplacer
QG1212_006	2 + -	Moyenne
QG1212_004	2 + -	Moyenne

Voulez-vous écraser le tableau ?

[Sauvegarder] [Valider]

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 [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.

2.8.5 Actions rapides

Des actions rapides sont accessibles soit par le menu **Résultats**, soit 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			yenne	852,941	10,016	0,000	1
Analyse			yenne	843,707	10,012	5,148	1
Analyse			yenne	853,351	9,972	24,852	1
Analyse			yenne	853,556	10,108	3,951	1
Analyse			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

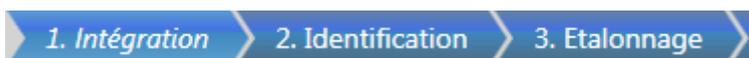
Les différentes opérations sont :

- 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) (Si plusieurs résultats sélectionnés, les chromatogrammes seront affichés côte à côte).
- Traitement : Permet de charger l'analyse sélectionnée dans la partie traitement. (Disponible que si une seule analyse est sélectionnée, voir le chapitre [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 chromatogrammes](#)).
- **Rapport** : Affiche les différents choix de rapports (Disponible que si une seule analyse est sélectionnée)
 - Rapport d'analyse : Affiche le rapport d'analyse (voir le chapitre [Rapports](#))
 - 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](#)).

2.9 Traitement

Comme évoqué au § [Menu Traitement](#), il est nécessaire de traiter les chromatogrammes une fois qu'ils ont été enregistrés. Cela s'effectue depuis le menu Traitement en 3 étapes :

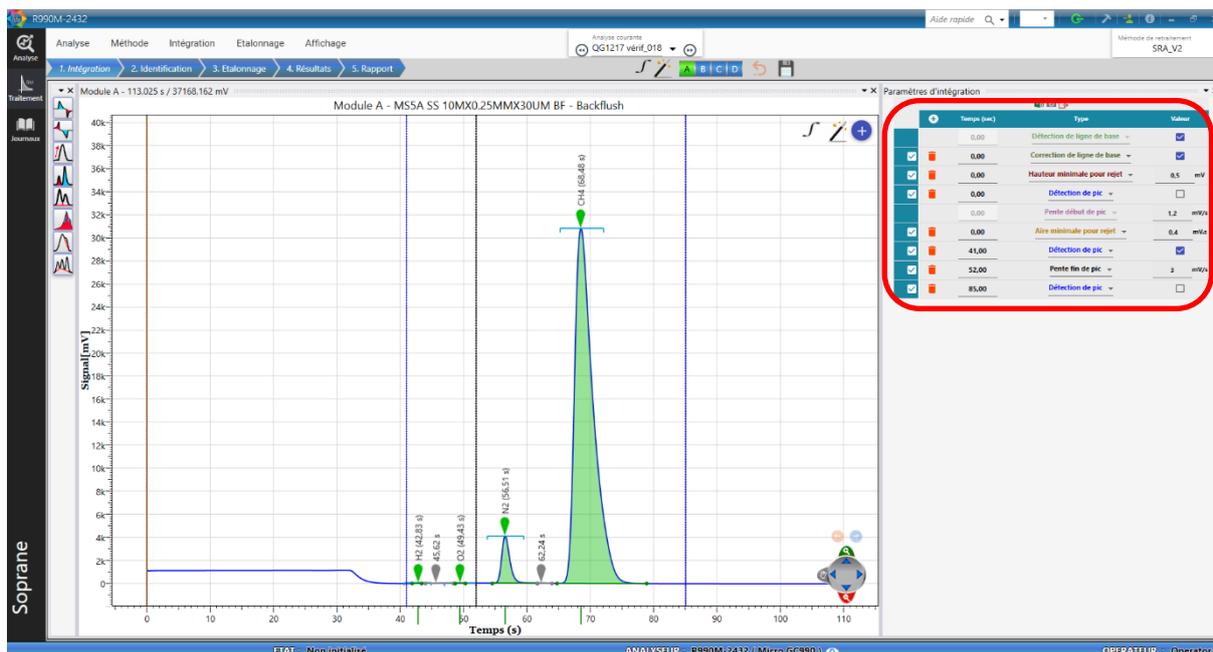


Pour bien comprendre comment effectuer un traitement correctement et les paramètres influant, les principes concernant l'intégration, l'identification et l'étalonnage sont détaillés en [Annexe II : Principes traitement d'intégration](#).

2.9.1 Intégration

L'intégration définit à Soprane CDS comment intégrer les pics présents sur le chromatogramme en définissant la table d'intégration.

Le chromatogramme de l'analyse sélectionnée apparaît. Cliquez sur la flèche "Intégration". La table "Paramètres d'intégration" apparaît :



Les "Paramètres d'intégration" sont utilisés pour définir comment les pics sur le chromatogramme doivent être intégrés.

Dans la table des "Paramètres d'intégration", une ligne correspond à un paramètre d'intégration. Pour chaque ligne, il faut définir le "Temps" à partir duquel le paramètre doit être appliqué, et ce jusqu'à la fin du chromatogramme ou la définition d'un autre paramètre similaire, le "Type" de paramètre d'intégration à appliquer et sa "Valeur".

Les paramètres d'intégration principaux sont :

- « Pente début de pic » : définit à partir de quelle pente le pic commence. Une pente supérieure à cette valeur déclenchera le début de l'intégration d'un pic.
- « Hauteur minimale pour rejet » : définit la hauteur minimale pour un pic valide, peut être utile pour éliminer des pics dus au bruit de fond.
- « Aire minimale pour rejet » : définit la surface minimale pour un pic valide, peut être utile pour éliminer des pics dus au bruit de fond.

Dans la plupart des cas, ces paramètres suffisent pour intégrer correctement tous les pics.

- Si un paramètre d'intégration est ajouté ou modifié, cliquez sur  pour appliquer la modification.
- Quand les pics d'intérêts sont correctement intégrés, enregistrez la méthode avec : 
- Si le MicroGC possède plusieurs modules, il est nécessaire de définir les paramètres d'intégration pour chaque module.
Sélectionnez le module avec : 

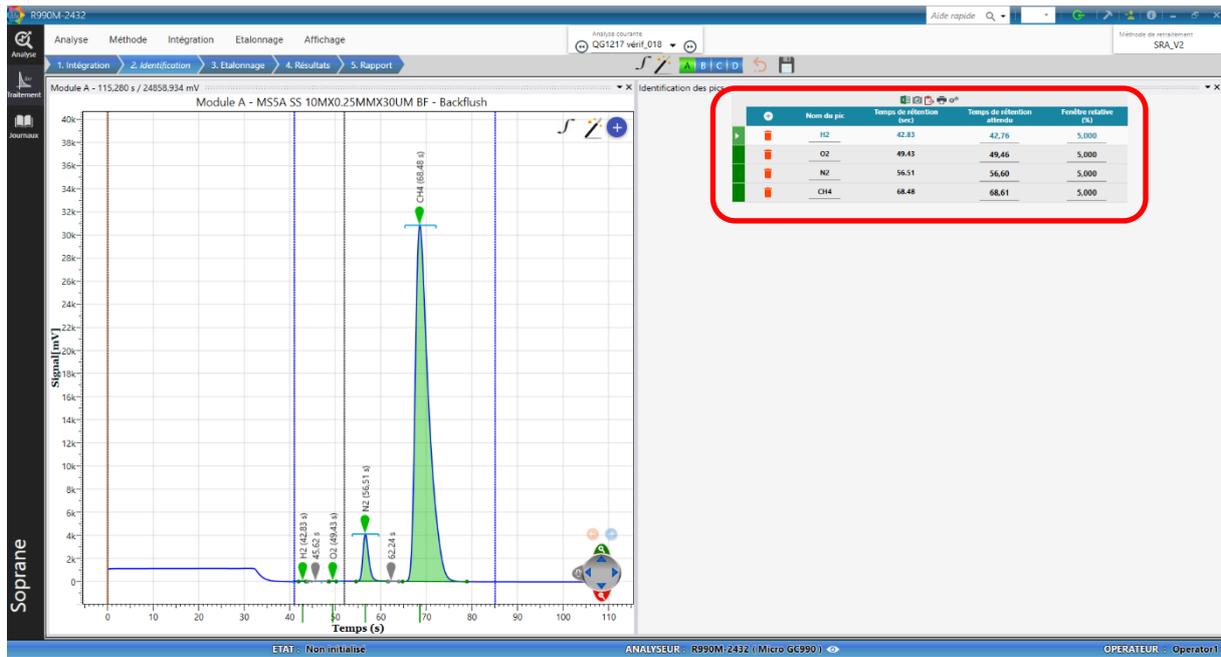
Notes :

- Une « pente début de pic » de 0,01 $\mu\text{V/s}$ et des rejets « Hauteur » et « surface » de 1 fonctionnent dans la majorité des cas.
- Deux événements "Détection de pic", le premier décoché et le second coché, permettent de définir une zone où l'intégration ne se fait pas. Cela peut être pratique pour éliminer une zone où le signal n'est pas stable et perturbe l'intégration des pics d'intérêts, en début de chromatogramme par exemple.

2.9.2 Identification

L'identification définit à Soprane CDS les molécules correspondant à chaque pic en définissant les temps de rétention dans la table d'identification.

Cliquez sur la flèche "Identification". La table "Identification des pics" apparaît :



Cliquez sur le bouton :



Tous les pics intégrés sont automatiquement ajoutés à la table "Identification des pics".

Ensuite :

- Supprimez les pics inutiles avec :
- Changez le "Nom du pic".
- Faites de même pour tous les modules avec :
- Appliquez les modifications avec et sauvegardez la méthode avec :

2.9.3 Étalonnage

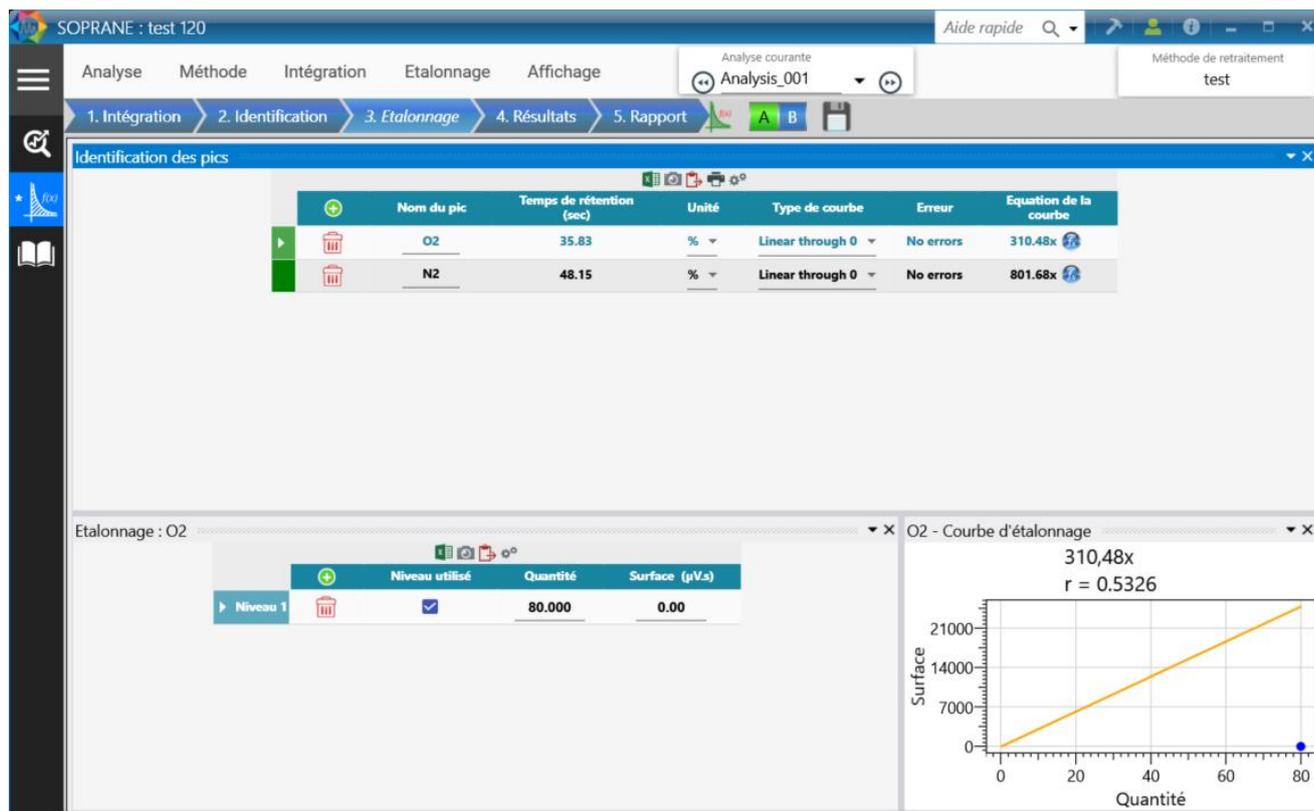
L'étalonnage peut être réalisé de différentes manières. La technique la plus générale est présentée ici, il s'agit de l'étalonnage par retraitement. L'étalonnage par retraitement peut être partagé en trois étapes :

- **Étape 1 :** Renseignement de la table d'étalonnage pour définir à Soprane CDS quelle est la composition de chaque bouteille de gaz étalon.
- **Étape 2 :** Analyse de chaque bouteille de gaz étalon avec la méthode à étalonner.
- **Étape 3 :** Association des chromatogrammes obtenus à la table d'étalonnage.

Comme l'étalonnage est une partie importante pour obtenir des résultats justes et que sa compréhension est parfois complexe, un exemple concret est traité dans cette partie.

1) Première étape

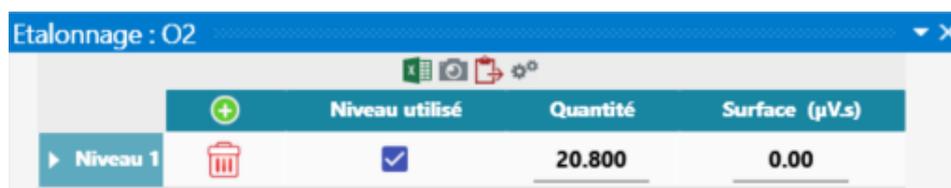
Cliquez sur la flèche "Étalonnage" :



Dans la table "Identification des pics", définissez pour chaque molécule :

- L'unité utilisée pour l'étalonnage et pour les rapports.
- Le type de courbe d'étalonnage.

Sélectionnez la première molécule dans la table "Identification des pics" (O₂ par exemple). La table "Étalonnage" de la molécule sélectionnée apparaît en dessous :



Pour ne pas faire d'erreur, on définit généralement la règle suivante :

Une bouteille de gaz étalon = Un niveau

Créez le même nombre de lignes, appelées "Niveaux", que de bouteilles de gaz étalon utilisées pour l'étalonnage, que la molécule sélectionnée soit présente ou non dans les bouteilles.

Pour chaque niveau, définissez :

- La "Quantité", ou la concentration, de la molécule dans la bouteille. Attention à respecter l'unité définie dans la table "Identification des pics".
- Si la molécule n'est pas présente dans la bouteille correspondant à ce niveau, décochez "Niveau utilisé".

Exemple :

Nous voulons analyser l'azote et le méthane sur le module A (colonne MS5A). Deux bouteilles de gaz étalon sont utilisées pour la calibration :

- Une bouteille d'air de composition : 80 % de N₂ et pas de CH₄
- Une bouteille de gaz naturel de composition : 1,60 % de N₂ et 94,43 % de CH₄

Dans la table "Identification des pics", nous définissons l'unité "%" et le type de calibration "droite par 0" :

	+	Nom du pic	Temps de rétention (sec)	Unité	Type de courbe	Erreur	Equation de la courbe
	🗑️	N2	35.90	% ▾	Droite passant par 0 ▾	Pas d'erreurs	533,90x 📄
	▶️	CH4	48.35	% ▾	Droite passant par 0 ▾	Pas d'erreurs	8032,49x 📄

Pour N₂, nous créons une table d'étalonnage avec 2 niveaux et nous cochons "Niveau utilisé" pour les deux niveaux car l'azote est présent dans les deux bouteilles. Nous renseignons les teneurs des deux bouteilles :

	+	Niveau utilisé	Quantité	Surface (µV.s)
▶️ Niveau 1	🗑️	<input checked="" type="checkbox"/>	80.000	0.00
Niveau 2	🗑️	<input checked="" type="checkbox"/>	1.600	0.00

Pour CH₄, nous créons une table d'étalonnage avec 2 niveaux et nous décochons "Niveau utilisé" pour le premier niveau car le méthane n'est présent que dans la seconde bouteille :

	+	Niveau utilisé	Quantité	Surface (µV.s)
▶️ Niveau 1	🗑️	<input type="checkbox"/>	10.000	0.00
Niveau 2	🗑️	<input checked="" type="checkbox"/>	94.430	0.00

2) Deuxième étape

Il s'agit d'analyser les différentes bouteilles de gaz étalon en utilisant la méthode à étalonner. Une bonne pratique est d'analyser plusieurs fois la même bouteille puis de vérifier que les surfaces des pics sont répétibles.

Exemple :

Nous réalisons 3 analyses de chaque bouteille de gaz étalon. Pour les analyses de la bouteille d'air, nous donnons le nom "Air lvl1" à la série d'analyses. Pour les analyses de la bouteille de gaz naturel, nous donnons le nom "Natural Gas Mixture lvl2" à la série d'analyses.

3) Troisième étape

Finalement, il faut associer les chromatogrammes obtenus dans la seconde étape, à la table d'étalonnage définie dans la première étape. Un chromatogramme correspond à une bouteille et donc à un niveau.

Revenez au menu "Analyse" et sélectionnez les analyses des bouteilles de gaz étalon dans la table "Résultats" :

Analysis	Injection date	Serie	Method	N2 (A)	Peak4 (D)	Total raw
Analysis BF A 26.1...	1/4/2018 2:10 PM	Analysis BF A 26.1 B 31.1	Analysis BF A 26.1...			3/23028.266
Analysis BF A 26.4...	1/4/2018 2:20 PM	Analysis BF A 26.4 B 31.4	Analysis BF A 26.4...			3902526.485
Analysis BF A 26 B...	1/4/2018 2:23 PM	Analysis BF A 26 B 31	Analysis BF A 26 B...			3640844.740
Analysis BF A 26.5...	1/4/2018 2:27 PM	Analysis BF A 26.5 B 31.5	Analysis BF A 26.5...			4018343.051
Analysis BF A 26.8...	1/4/2018 2:30 PM	Analysis BF A 26.8 B 31.8	Analysis BF A 26.8...			4066554.422
Analysis BF A 26.9...	1/4/2018 2:34 PM	Analysis BF A 26.9 B 31.9	Analysis BF A 26.9...			3988443.638
Analysis BF A 26.3...	1/4/2018 2:37 PM	Analysis BF A 26.3 B 31.3	Analysis BF A 26.3...			3940931.627
Analysis BF A 26.2...	1/4/2018 2:41 PM	Analysis BF A 26.2 B 31.2	Analysis BF A 26.2...			3798920.850
Analysis BF A 27 B...	1/4/2018 2:44 PM	Analysis BF A 27 B 32	Analysis BF A 27 B...			3994249.761
Analysis BF A 26.6...	1/4/2018 2:48 PM	Analysis BF A 26.6 B 31.6	Analysis BF A 26.6...			3953787.445
Natural Gas Mixtur...	1/4/2018 3:20 PM	Natural Gas Mixture	Analysis			3979711.499
Natural Gas Mixtur...	1/4/2018 3:33 PM	Natural Gas Mixture 150ms	Analysis			0.000
Natural Gas Mixtur...	1/4/2018 3:33 PM	Natural Gas Mixture 150ms	Analysis			8743401.237
Natural Gas Mixtur...	1/4/2018 3:37 PM	Natural Gas Mixture 150ms low	Analysis			8751183.253
Natural Gas Mixtur...	1/4/2018 3:45 PM	Natural Gas Mixture lvl 2	Analysis			3998450.344
Natural Gas Mixtur...	1/4/2018 3:49 PM	Natural Gas Mixture lvl 2	Analysis			4069802.213
Natural Gas Mixtur...	1/4/2018 3:52 PM	Natural Gas Mixture lvl 2	Analysis			3979159.462
Air lvl 1_001	1/4/2018 4:09 PM	Air lvl 1	Analysis	247412.618	1.883	1802726.402
Air lvl 1_002	1/4/2018 4:12 PM	Air lvl 1	Analysis	247542.115	1.209	1803606.669
Air lvl 1_003	1/4/2018 4:16 PM	Air lvl 1	Analysis	247596.750		1803177.568
Min				247412.6	1.2	0.0
Avg				247517.2	1.5	3634383.1
Max				247596.7	1.9	8751183.3
Resd (%)				0.038	30.821	42.480

Batch processing
 Calibration by reprocessing
 Compare

Faites un clic droit sur la souris et sélectionnez "Étalonnage par retraitement".

La fenêtre "Étalonnage" apparaît :

Calibration

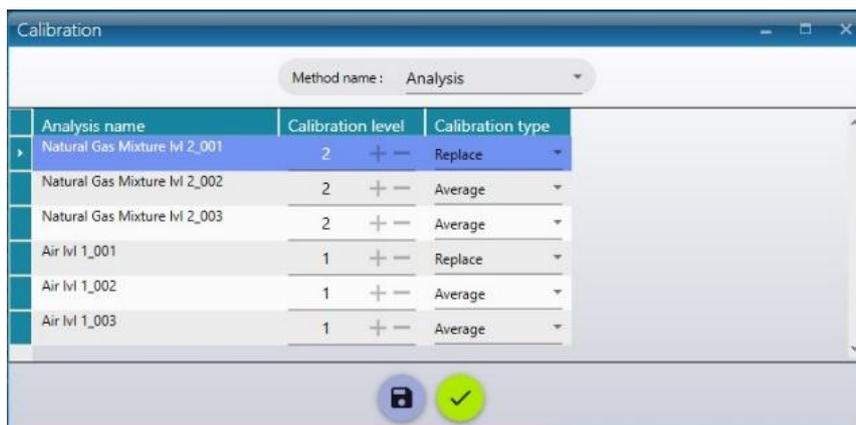
Method name: Analysis

Analysis name	Calibration level	Calibration type
Natural Gas Mixture lvl 2_001	2 + -	Replace
Natural Gas Mixture lvl 2_002	2 + -	Average
Natural Gas Mixture lvl 2_003	2 + -	Average
Air lvl 1_001	1 + -	Replace
Air lvl 1_002	1 + -	Average
Air lvl 1_003	1 + -	Average

- Sélectionnez la méthode à étalonner.
- Pour chaque analyse, définissez le niveau correspondant.
- Pour la première répétition d'un niveau, sélectionnez "Remplacer" comme "Type d'étalonnage". L'ancienne calibration de ce niveau sera effacée puis mise à jour.
- Pour les autres répétitions du même niveau, sélectionnez "Moyenne".
- Cliquez sur :

Exemple :

Nous obtenons la table suivante :



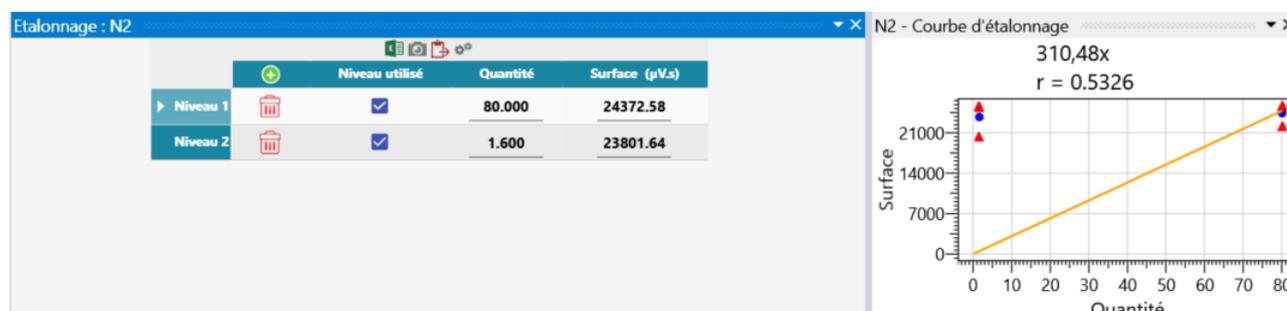
Les pics de N₂ et de CH₄ sont réintégrés pour les 3 analyses de gaz naturel. La moyenne des surfaces des pics de N₂ et CH₄ est calculée. La surface moyenne des pics de N₂ est associée à 1,6 % et la surface moyenne des pics de CH₄ est associée à 94,43 % (niveau 2).

Puis les pics de N₂ sont réintégrés pour les 3 analyses d'air. La moyenne des surfaces des pics de N₂ est calculée. La surface moyenne des pics de N₂ est associée à 80 % (niveau 1). Comme la case "Niveau utilisé" est décochée pour CH₄ dans le niveau 1, si un pic de CH₄ est intégré (pollution, effet mémoire...), l'aire du pic ne sera pas prise en compte pour tracer la droite d'étalonnage de CH₄, ce qui évite des erreurs.

Pour voir les courbes de calibration ainsi obtenues :

- Allez dans le menu "Traitement" et cliquez sur la flèche "Étalonnage".
- Sélectionnez une molécule.

La "surface" pour chaque niveau et la "Courbe d'étalonnage" ont été mises à jour.



À partir de cet instant, si une analyse est lancée avec la méthode "Analyse", le chromatogramme obtenu sera automatiquement traité avec la méthode d'intégration et la table d'identification précédemment développées et le résultat en concentration sera lié à l'étalonnage précédemment réalisé.

2.10 Gestion des alarmes

Différents types d'alarme peuvent être configurés :

- Constituants, la variable surveillée est généralement la concentration brute ou normalisée
- Résultat d'un calcul, par exemple la valeur du PCS
- Somme des composés, par exemple la somme des concentrations
- Delta du temps de rétention sur un composé
- Une valeur analogique, par exemple la pression de l'entrée échantillon

Allez dans "**Méthode / Alarme**". Pour chacune des alarmes, vous devez indiquer :

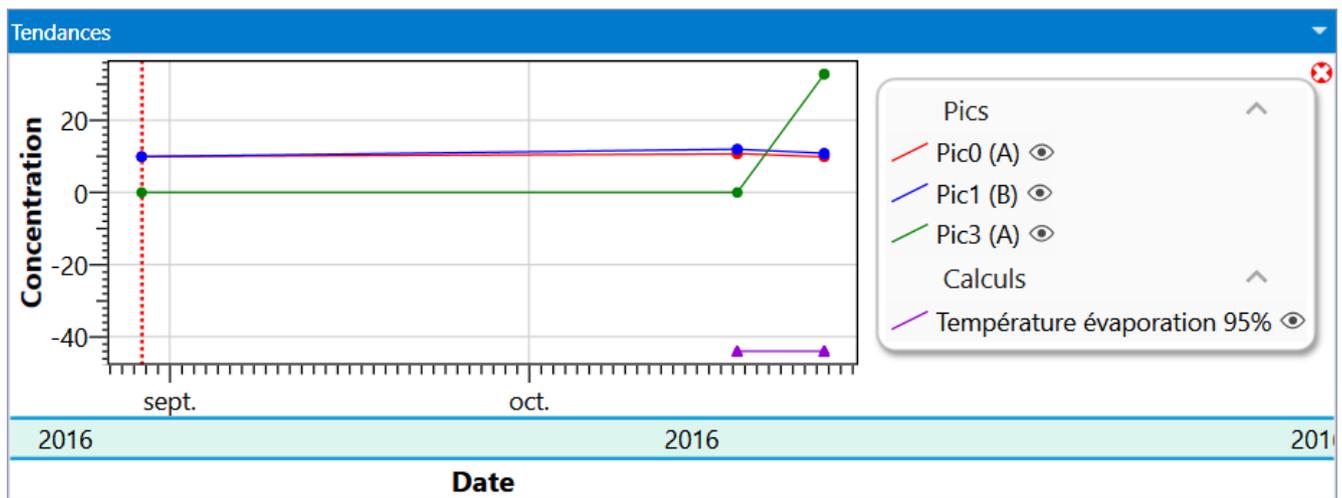
- La valeur de l'alarme (décrit ci-dessus)
- La variable utilisée pour ce défaut (concentration brute, concentration normalisée, le temps de rétention, aire du pic ou la hauteur, résultat de calcul, composé...).
- Le flux sur lequel ce constituant est surveillé.
- La valeur de seuil bas.
- La valeur de seuil haut.
- L'alarme à associer.
- L'action à exécuter si défaut (facultatif).
- Le type de notification en cas d'erreur.
- Indication si l'alarme est « métrologie ».

	Valeur	Valeur à suivre	Voie	Comparer avec l'analyse précédente	Minimum	Maximum	Alarme	Action à effectuer si défaut	Notification
0	H2 (A)	Concentration	0 Tous	<input type="checkbox"/> Dernière analyse	0 + --	10000 + --	Alarme 1	Aucun	None
Σ	Somme	Concentration	1 Calibration		0 + --	10000 + --	Alarme 1	Aucun	None
Δ	Delta temps de rétention	H2 (A)	2 Echantillon	10 % + --			Alarme 1	Aucun	None
0	0 : Pression entrée échantillon (bar abs)		2 Echantillon		0 + --	10000 + --	Alarme 1	Aucun	None
PCS	PCS massique réel	0°C - 0°C - kWh/m3	2 Echantillon		0 + --	10000 + --	Alarme 1	Aucun	None

2.11 Gestion des tendances

2.11.1 Description

En fonctionnement normal, Soprane CDS permet la visualisation simultanée de 6 fenêtres relatives aux analyses et permet ainsi de visualiser l'évolution des valeurs ou des valeurs calculées sur un laps de temps.



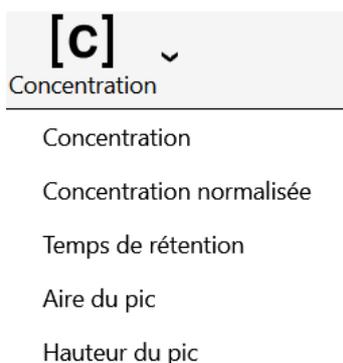
Ces fenêtres permettent la visualisation du chromatogramme, des résultats, de la séquence d'analyse en cours et des tendances. Ces fenêtres peuvent être redimensionnées, réduites ou restaurées.

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, vous intégrez un pic d'azote dont le nom est N2 et vous faites la visualisation en tendance de sa valeur de concentration.

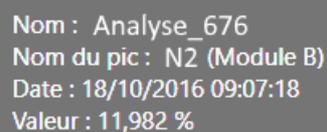
Vous changez le nom de ce pic de N2 en AZOTE dans la table des constituants. Il vous est nécessaire de réécrire la demande de visualisation en tendance sous ce nouveau nom.

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.



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 vous cliquez 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 %

2.11.2 Configuration des tendances

Le bouton  permet de paramétrer les tendances à afficher.

Plusieurs types de valeurs peuvent être visualisés :

- Composés
- Entrées analogiques
- Calculs du gaz naturel
- Calculs Combustion
- Calculs GPL

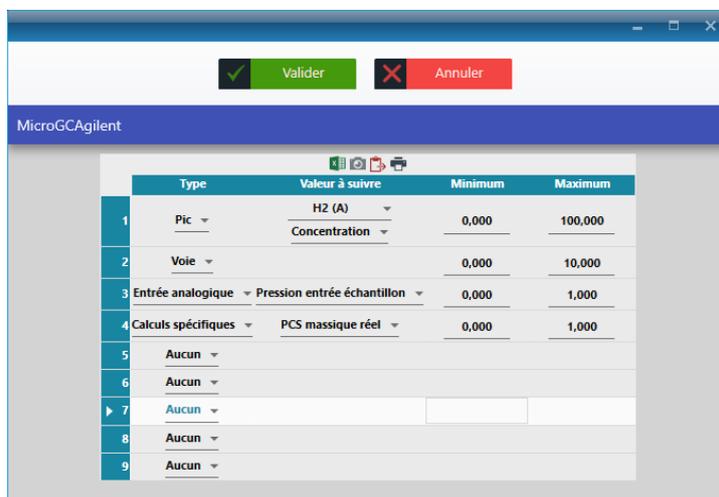
Note :

L'option "Sauvegarde des positions des fenêtres" du menu ne signifie pas que Soprane CDS 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 CDS sera de nouveau lancé les fenêtres seront automatiquement ré ouvertes et repositionnées à leur emplacement.

2.12 Gestion des sorties 4-20 mA

Le MicroGC peut être équipé de plusieurs sorties 4-20 mA.

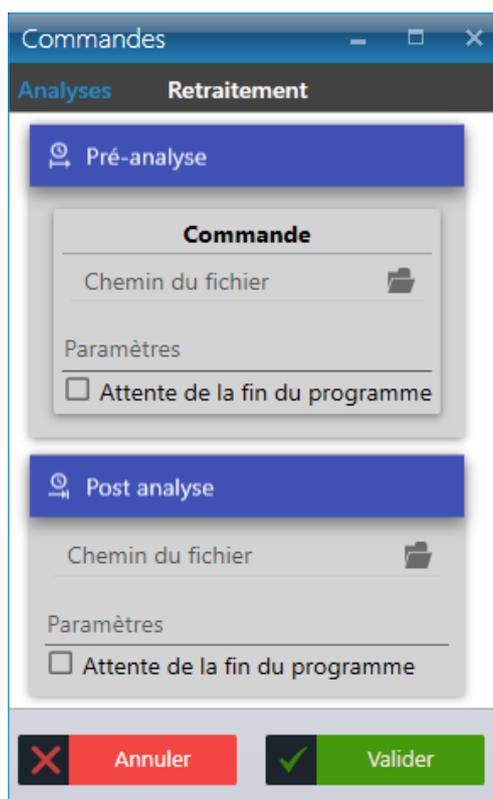
Ces sorties permettent, après mise à échelle, de transmettre une valeur liée à un constituant (il s'agit de la surface, de la concentration brute, de la concentration normalisée ou de la concentration massique) ou la valeur d'un résultat de calcul (il s'agit alors du premier set de calculs).



2.13 Lancement de programmes externes

Soprane CDS offre la possibilité de lancer un programme avant/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 de l'instrument. 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).

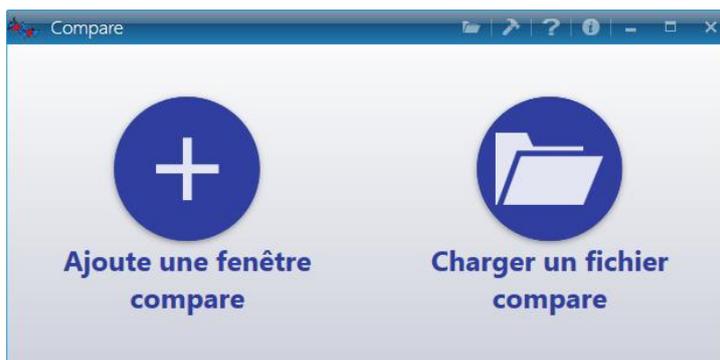


2.14 Comparaison des chromatogrammes

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.

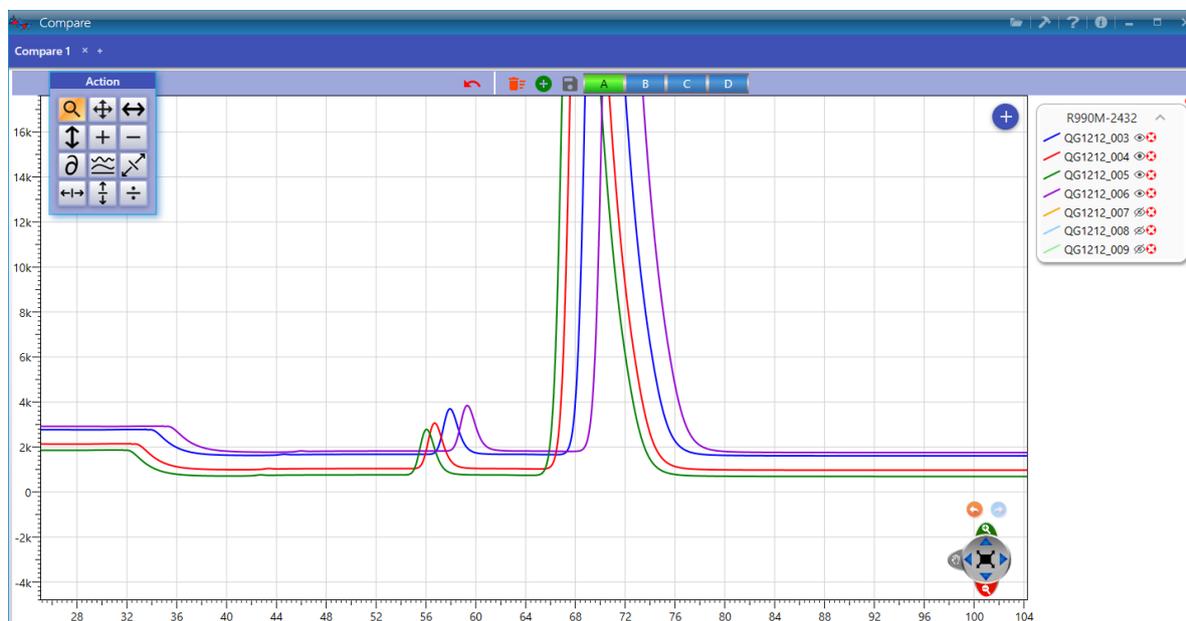
Le module de comparaison est un logiciel dans lequel on ouvre des documents, chaque document étant constitué de 2 à 64 analyses.

Lors du chargement, l'écran principal est visualisé :



Deux choix sont proposés, le premier est de partir d'une fenêtre vide et d'ajouter les analyses que l'on souhaite et le second est de charger un fichier de comparaison d'analyses sauvegardé précédemment.

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.

R990M-2432

- ✔ / R990M_2432_B07_007 👁 ✖
- ✔ / R990M_2432_B07_006 👁 ✖
- ✖ / R990M_2432_B07_005 👁 ✖
- ✔ / R990M_2432_B07_004 👁 ✖
- ✔ / R990M_2432_B07_003 👁 ✖

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.

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.

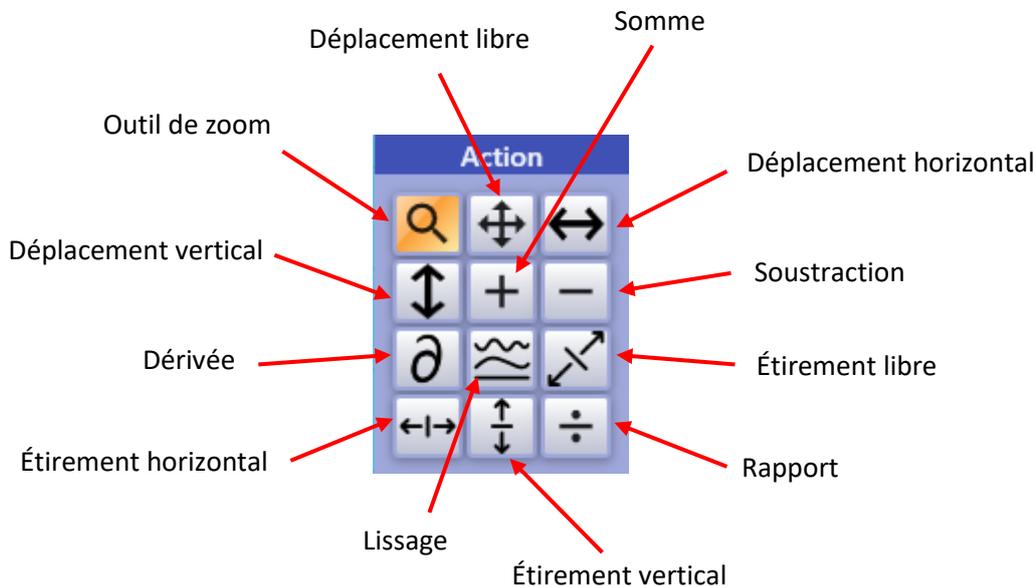
Pour ne pas afficher une analyse il suffit de cliquer sur l'icône 👁 l'analyse sera alors cachée (une analyse cachée aura l'icône suivante 👁)

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 [Annexe I : 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.

2.15 Étalonnage de référence

L'étalonnage de référence est le dernier étalonnage utilisé pour obtenir les résultats actuels. Il 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_679	Analyse	29/08/2016 16:38	Moyenne	855,945	10,030	4,203	1
Analyse_679	Analyse	29/08/2016 16:38	Moyenne	852,941	10,016	0,000	1
Analyse_679	Analyse	29/08/2016 16:38	Moyenne	843,707	10,012	5,148	1
Analyse_679	Analyse	29/08/2016 16:38	Moyenne	853,351	9,972	24,852	1
Analyse_679	Analyse	29/08/2016 16:38	Moyenne	853,556	10,108	3,951	1
Analyse_679	Analyse	29/08/2016 16:38	Moyenne	856,126	10,064	4,030	1
Min	Compare			843,7	10,0	0,0	
Avg				853,0	10,0	6,6	
Max	Rapport			856,1	10,1	24,9	
Rsd (%)				0,507	0,439	123,989	

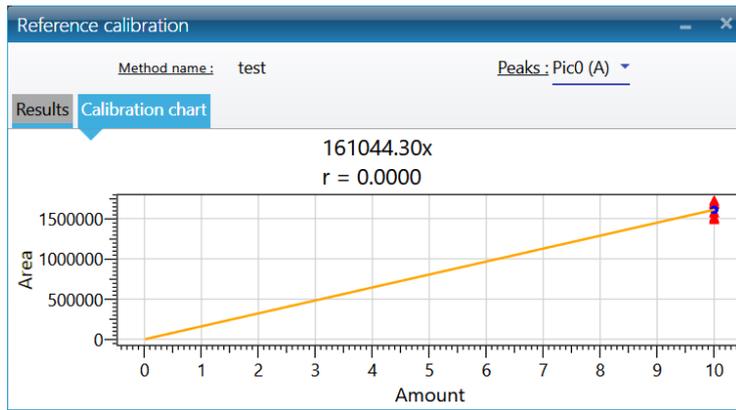
Conditions d'analyse	Visualiser méthode
	Afficher la configuration
	Étalonnage de référence

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 :

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 :



3. Rapports

3.1 Rapport d'analyse

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.

Chromatogram

Résultat

Module	Nom du pic	Temps de rétention (min)	Concentration	Concentration interne (%)	Unité	Area du pic
A	Et2	41.75	0.008	0.045	N302	48.70
A	Et3	49.48	0	0	N302	0
A	Et4	59.95	0.007	0.033	N302	107.15
A	Et5	62.34	0	0	N	4.63
A	Et6	68.73	0.073	0.346	N302	11832.74
B	CO2	10.03	0.004	0.03	N302	10932.07
B	CO3	28.46	0.04	0.207	N302	5973.47

Analogical results

Item	Unit	Minut	Unit
Pression entrée échantillon	1.52e		bar abs
Pression sortie	101.407		hPa
Température ambiante	40.000		°C
Température chambre A	40.000		°C
Température chambre B	40.000		°C
Température chambre C	40.000		°C
Température chambre D	40.000		°C

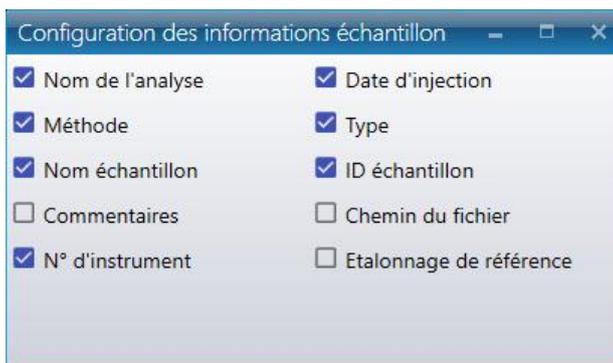
Le rapport est largement configurable ; vous pouvez paramétrer la visualisation du rapport ainsi que son contenu.

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 :

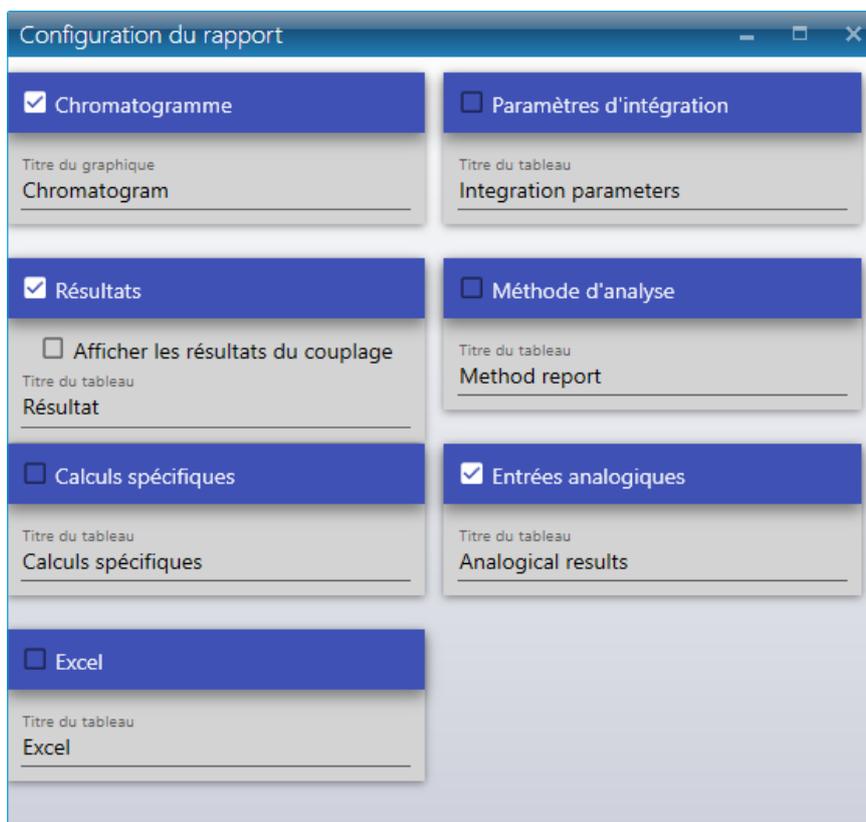
-  : Éditer les informations d'analyse



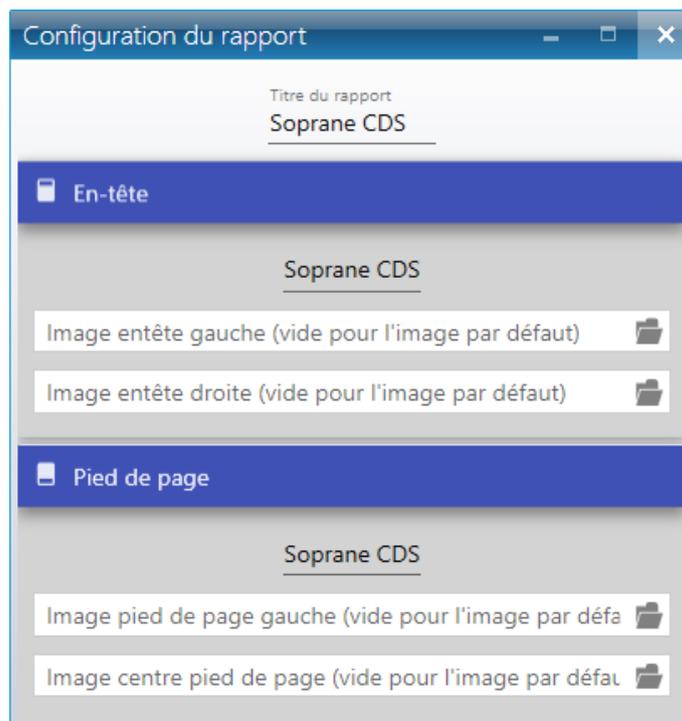
-  : Configuration du rapport

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 peut être visible ou non, et leurs titres sont modifiables.



-  : Changer les entêtes et pieds de pages



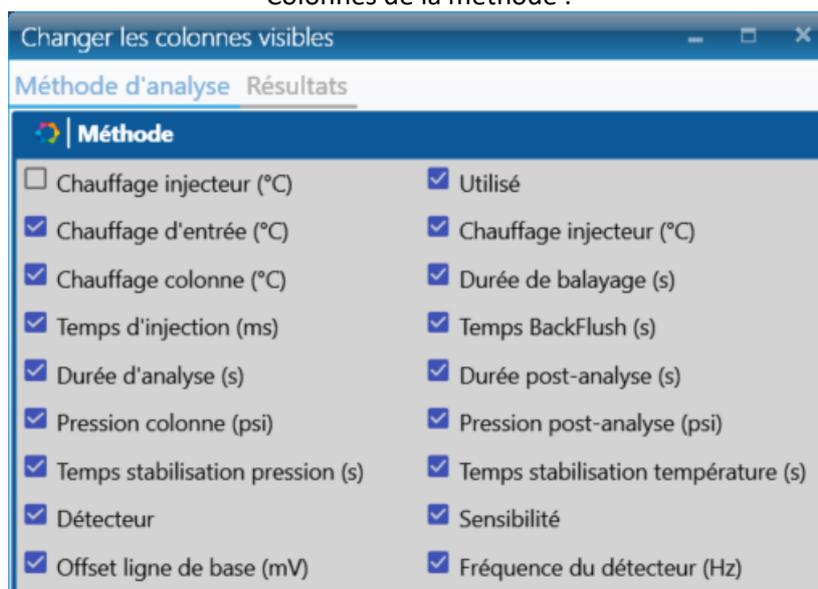
En cliquant sur l'icône  une fenêtre demande de choisir une image afin de remplacer celle déjà existante.

Si le champ est vide, les images par défaut sont ajoutées.

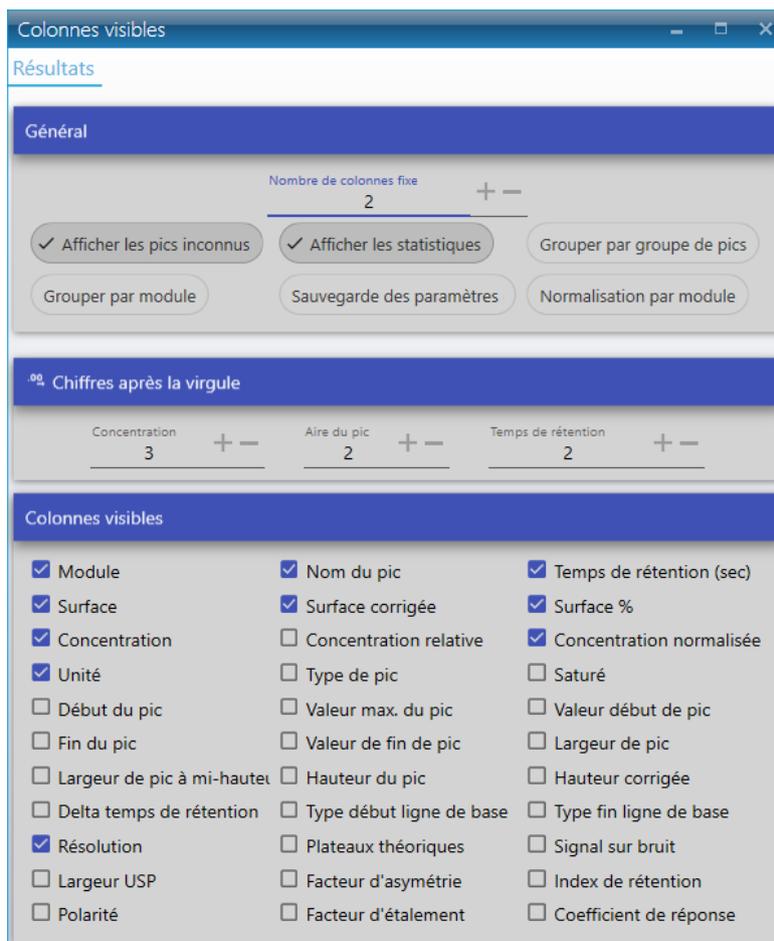
-  Changer l'orientation du rapport (Paysage ou Portrait)
-  Changer les colonnes des tableaux

Si dans la majorité des cas on se satisfait des colonnes *nom du constituant*, *temps de rétention*, *surface du pic*, *hauteur du pic*, 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".

3.2 Rapport personnalisé

Soprane CDS 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 CDS 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 Directeur et Conseil de surveillance au capital de 150.000 € RCS Lyon B 342 068 731 APE 4629B SIRET: 342 068 731 00054 Code TVA FR 40342068731	
---	---	--	--

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 CDS avec les valeurs de résultat attendues.

Voici un exemple du fichier résultat :



Bilan intervention SAV en atelier



Suite au retour de vos appareils en nos ateliers, voici le descriptif des travaux et tests réalisés :

I. 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+10mMSSA,Heated, BF	TCD
B	2	Helium	Variable	10m PPU Heated Injector	TCD

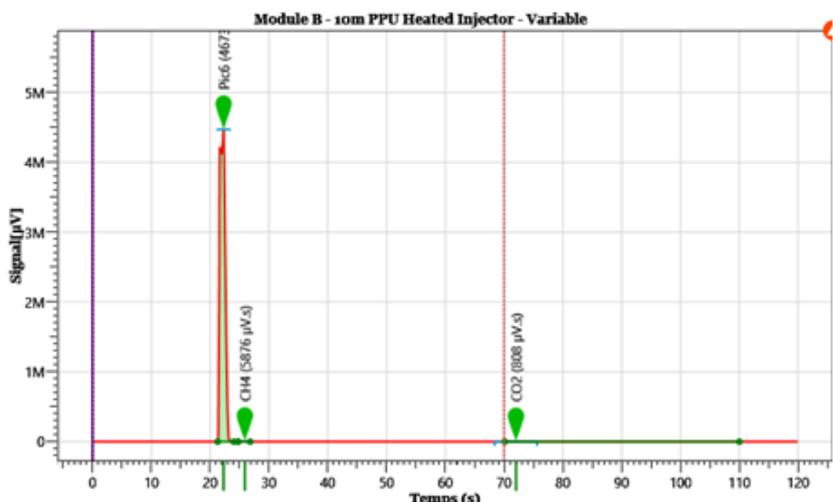
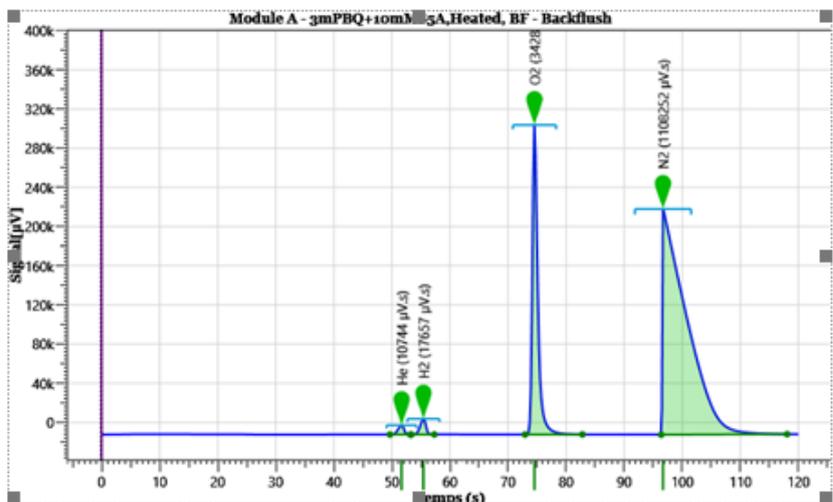
	Module A	Module B
Mod. SN	18025011	18025012
Mod. PN	35810036	492001460
Injecteur chauffé	✓	✓
Max inj. temp.	110	110
Min inj. temp.	30	30
Colonne	3mPBQ+10mMSSA,Heated, BF	10m PPU Heated Injector
Type d'injecteur	Backflush	Variable
Max col. temp.	180	180
Min col. temp.	30	30
Gaz vecteur	Argon	Helium
Type 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+10mMSSA,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

[ResultTable{LettreModule}] : Importe les résultats d'analyses en fonction du numéro de l'indicateur du module (exemple [ResultTableA] pour le module A)

[Chromatogram{LettreModule}] : Importe le chromatogramme en fonction du numéro de l'indicateur du module (exemple [ChromatogramA] 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 générales

[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

[SampleName] : Écrit le nom d'échantillon

[SampleId] : Écrit l'identifiant d'échantillon

[SampleType] : Écrit le type d'échantillon (Blanc, étalon, échantillon)

[Comment] : Écrit le commentaire de l'analyse

[CalibrationLevel] : Écrit le niveau d'étalonnage

[Stream] : Écrit la voie d'échantillonnage analysée

[UserName] : Écrit le nom de l'utilisateur

[UserType] : Écrit le profil de l'utilisateur

//Module configuration

[ModuleSN{LettreModule}] : Écrit le numéro de série du module (exemple [ModuleSNA] pour le module A)

[ModulePN{LettreModule}] : Écrit le numéro d'article du module (exemple [ModulePNA] pour le module A)

[InjectorHeated{LettreModule}] : Écrit "Oui" si l'entrée est chauffé sinon, écrit "Non" (exemple

[InjectorHeatedA] pour le module A)

[InjectorTempMin{LettreModule}] : Écrit la température minimale de l'injecteur (exemple

[InjectorTempMinA] pour le module A)

[InjectorTempMax{LettreModule}] : Écrit la température maximale de l'injecteur (exemple

[InjectorTempMaxA] pour le module A)

[ColumnType{LettreModule}] : Écrit le type de colonne (exemple [ColumnTypeA] pour le module A)

[HasBackflush{LettreModule}] : Écrit "Oui" si la colonne du module spécifié est un Backflush sinon écrit "Non" (exemple [HasBackflushA] pour le module A)

[ColumnTempMin{LettreModule}] : Écrit la température minimale de la colonne (exemple

[ColumnTempMinA] pour le module A)

[ColumnTempMax{LettreModule}] : Écrit la température maximale de la colonne (exemple

[ColumnTempMaxA] pour le module A)

[CarrierGas{LettreModule}] : Écrit le gaz vecteur utilisé pour le module (exemple spécifié [CarrierGasA] pour le module A)

[DetectorType{LettreModule}] : Écrit le type de détecteur utilisé pour le module spécifié (exemple

[DetectorTypeA] pour le module A)

[InjectorType{LettreModule}] : Écrit le type d'injecteur utilisé pour le module spécifié (exemple

[InjectorTypeA] pour le module A)

[ChannelEnabled{LettreModule}] : Écrit "Oui" si le module est utilisé, sinon écrit "Non" (exemple

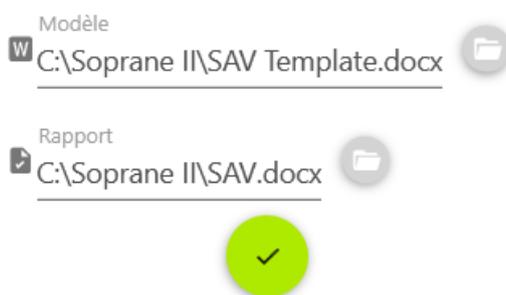
[ChannelEnabledA] pour le module A)

[InjectorTemp{LettreModule}] : Écrit la température de l'injecteur pour le module spécifié (exemple **[InjectorTempA]** pour le module A)
[ColumnTemp{LettreModule}] : Écrit pour le module spécifié (exemple **[CColumnTempA]** pour le module A)
[InjectTime{LettreModule}] : Écrit le temps d'injection pour le module spécifié (exemple **[InjectTimeA]** pour le module A)
[BackflushTime{LettreModule}] : Écrit le temps de backflush pour le module spécifié (exemple **[BackflushTimeA]** pour le module A)
[AnalysisTime{LettreModule}] : Écrit le temps d'analyse pour le module spécifié (exemple **[AnalysisTimeA]** pour le module A)
[RampRate{LettreModule}] : Écrit la valeur de la rampe de pression pour le module spécifié (exemple **[RampRateA]** pour le module A)
[Pressure{LettreModule}] : Écrit la pression en PSI pour le module spécifié (exemple **[PressureA]** pour le module A)
[TCD{LettreModule}] : Écrit "Oui" si le module est utilisé, sinon écrit "Non" (exemple **[TCDA]** pour le module A)
[Range{LettreModule}] : Écrit la valeur de sensibilité pour le module spécifié (exemple **[RangeA]** pour le module A)
[Rate{LettreModule}] : Écrit la fréquence d'acquisition pour le module spécifié (exemple **[RateA]** pour le module A)
[SampleTime{LettreModule}] : Écrit le temps d'échantillonnage pour le module spécifié (exemple **[SampleTimeA]** pour le module A)
[InletTemp{LettreModule}] : Écrit la température de l'entrée échantillon pour le module spécifié (exemple **[InletTempA]** pour le module A)
[ContinuousFlow{LettreModule}] : Écrit "Oui" si le module utilise le mode "Débit continu", sinon écrit "Non" (exemple **[ContinuousFlowA]** 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.



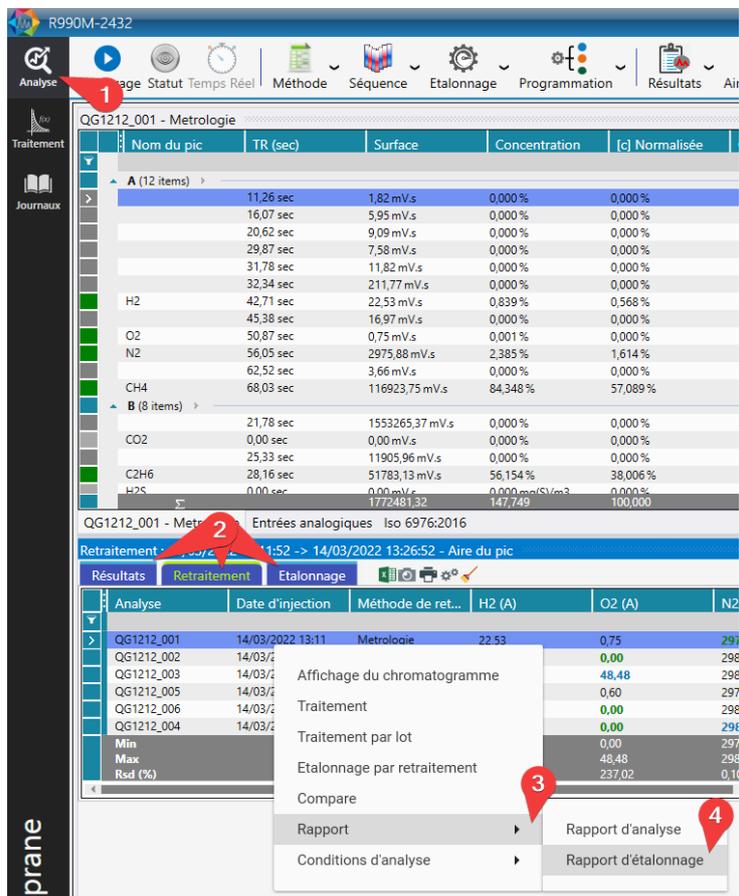
Note : Les extensions possibles pour le fichier final sont docx, doc et pdf.

3.3 Rapport d'étalonnage

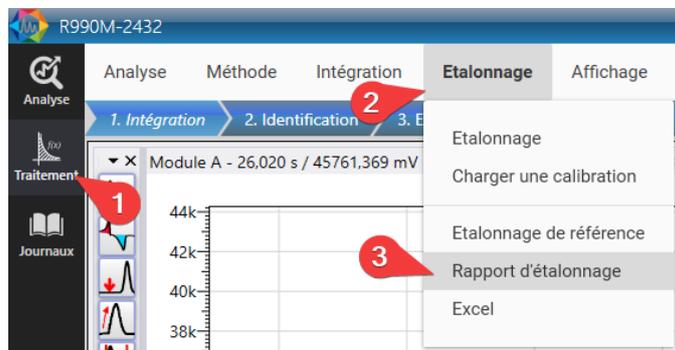
L'étalonnage est une étape importante dans la validation de la méthode d'analyse et assure que les résultats obtenus sont précis et fiables. Le rapport d'étalonnage est un document qui résume ce processus.

Il y a plusieurs façons d'afficher ce rapport :

- Depuis le tableau des résultats :
 - Sélectionnez une analyse
 - Faites un clic droit
 - Sélectionnez « Rapport > Rapport d'étalonnage »



- Depuis la partie traitement :
 - Sélectionnez une analyse
 - Cliquez sur le menu « Étalonnage »
 - Sélectionnez « Rapport d'étalonnage »



Le rapport d'étalonnage chromatographique inclut les informations suivantes :

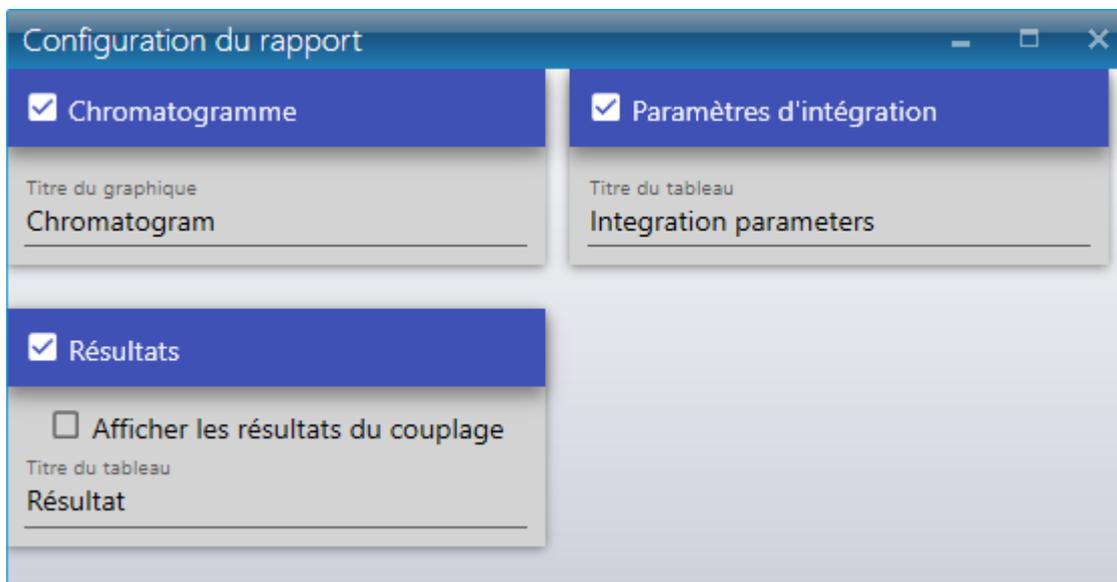
- La date de l'étalonnage
- La méthode d'étalonnage utilisée
- Les conditions de fonctionnement du chromatographe (température, pression, débit, etc.)
- Les données brutes obtenues lors de l'étalonnage, y compris les temps de rétention et les aires des pics pour chaque composant étalonné

- Les courbes d'étalonnage pour chacun des composés présents dans la méthode.

Voici un aperçu d'un rapport d'étalonnage :



Chacune de ces parties peut être visible ou non, et leurs titres sont modifiables : pour ceci, cliquez sur le bouton  pour éditer ces parties.



Le bouton  permet de changer les entêtes et pieds de pages.

3.4 Rapport plusieurs analyses

Il peut être utile d'obtenir un rapport sur une série d'analyses, d'afficher leurs résultats et de superposer les chromatogrammes. Ceci est possible en cliquant sur le bouton  depuis les tableaux « Résultats », « Retraitement » ou « Étalonnage » :

1212_001 - Metrologie

Nom du pic	TR (sec)	Surface	Concentration	[c] Norm
A (12 items)				
	11,26 sec	1,82 mV.s	0,000 %	0,000 %
	16,07 sec	5,95 mV.s	0,000 %	0,000 %
	20,62 sec	9,09 mV.s	0,000 %	0,000 %
	29,87 sec	7,58 mV.s	0,000 %	0,000 %
	31,78 sec	11,82 mV.s	0,000 %	0,000 %
	32,34 sec	211,77 mV.s	0,000 %	0,000 %
H2	42,71 sec	22,53 mV.s	0,839 %	0,568 %
	45,38 sec	16,97 mV.s	0,000 %	0,000 %
O2	50,87 sec	0,75 mV.s	0,001 %	0,000 %
N2	56,05 sec	2975,88 mV.s	2,385 %	1,614 %
	62,52 sec	3,66 mV.s	0,000 %	0,000 %
CH4	68,03 sec	116923,75 mV.s	84,348 %	57,089 %
B (8 items)				
	21,78 sec	1553265,37 mV.s	0,000 %	0,000 %
CO2	0,00 sec	0,00 mV.s	0,000 %	0,000 %
	25,33 sec	11905,96 mV.s	0,000 %	0,000 %
C2H6	28,16 sec	51783,13 mV.s	56,154 %	38,006 %
H2S	0,00 sec	0,00 mV.s	0,000 %	0,000 %
Σ		1772481,32		147,749

QG1212_001 - Metrologie Entrées analogiques Iso 6976:2016

Retraitement : 11:52 -> 14/03/2022 13:26:52 - Aire du pic

Résultats | Retraitement | Etalonnage

Analyse	Date d'injection	Méthode de	H2 (A)	O2 (A)
QG1212_001	14/03/2022 13:11	Metrologie	22,53	0,75
QG1212_002	14/03/2022 13:14	Metrologie	22,47	0,00
QG1212_003	14/03/2022 13:17	Metrologie	22,61	48,48
QG1212_005	14/03/2022 13:23	Metrologie	22,51	0,60
QG1212_006	14/03/2022 13:26	Metrologie	22,41	0,00
QG1212_004	14/03/2022 13:20	Metrologie	22,63	0,00
Min			22,41	0,00
Max			22,63	48,48
Rsd (%)			0,38	237,02

Voici un exemple de rapport sur une série d'analyses :

Soprase CDS

Module A - MSx

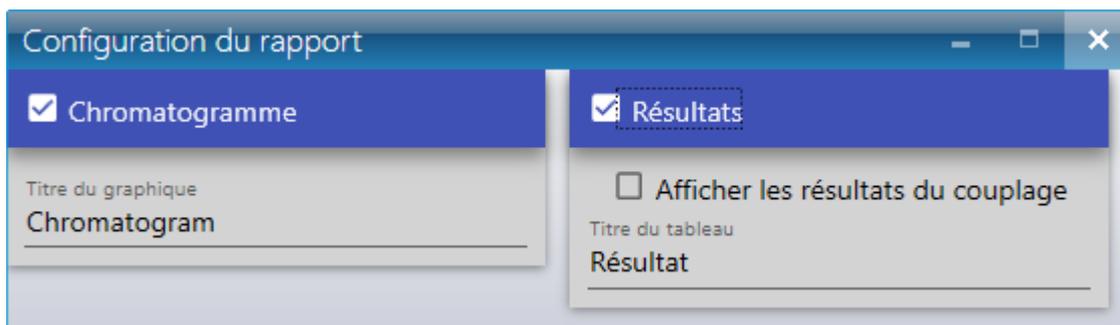
Module B - ParaPLOT

Résultats

Analyse	Date d'injection	Méthode de	H2 (A)	He (A)	CO (A)	CO2 (B)	CO2 (B)
QG1212_001	14/03/2022 13:11	Metrologie	22,53	0,00	0,00	0,00	0,00
QG1212_002	14/03/2022 13:14	Metrologie	22,47	0,00	0,00	0,00	0,00
QG1212_003	14/03/2022 13:17	Metrologie	22,61	0,00	0,00	0,00	0,00
QG1212_005	14/03/2022 13:23	Metrologie	22,51	0,00	0,00	0,00	0,00
QG1212_006	14/03/2022 13:26	Metrologie	22,41	0,00	0,00	0,00	0,00
QG1212_004	14/03/2022 13:20	Metrologie	22,63	0,00	0,00	0,00	0,00
Min			22,41	0,00	0,00	0,00	0,00
Max			22,63	0,00	0,00	0,00	0,00
Rsd (%)			0,38	0,00	0,00	0,00	0,00

Page 1 / 4

Chacune de ces parties peut être visible ou non, et leurs titres sont modifiables : pour ceci, cliquez sur le bouton pour éditer ces parties.



Le bouton  permet de changer les entêtes et pieds de pages.

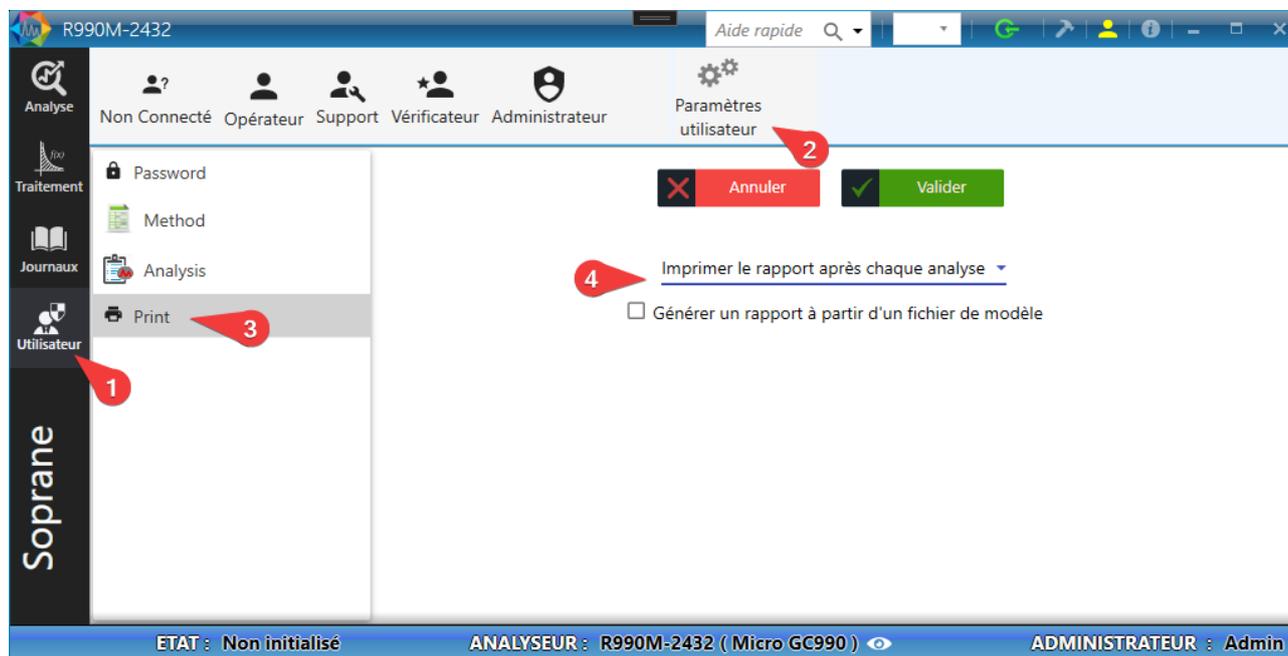
3.5 Impression automatique après analyse

Les [Rapport d'analyse](#) et Rapport personnalisé peuvent être imprimés automatiquement après les analyses. Pour cela, il faut se connecter en tant qu'Administrateur (voir chapitre [Identification d'un utilisateur](#)), puis sélectionner le menu « Utilisateur », cliquer sur « Paramètres utilisateur » et cliquer sur « Impression ».

Plusieurs modes d'impression automatique sont possibles :

- Imprimer le rapport après chaque analyse
- Imprimer le rapport après chaque analyse, pour certaines méthodes (à sélectionner)
- Imprimer le rapport après chaque analyse, pour certaines séquences (à sélectionner)

En cochant « Générer un rapport à partir d'un fichier modèle », cela imprimera le rapport personnalisé.



4. Calculs spécifiques

La méthode d'analyse, telle que décrite précédemment (voir chapitre [Gestion des méthodes](#)), suffit pour tout ce qui concerne les calculs ordinaires de la chromatographie.

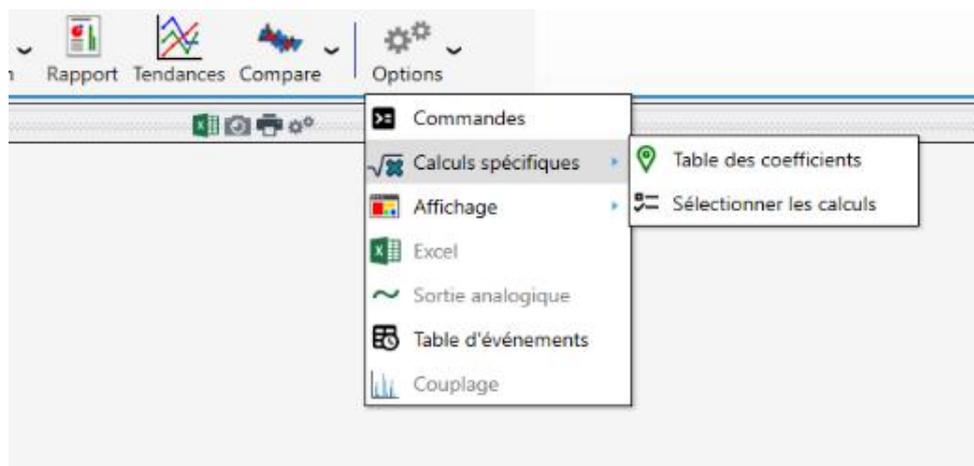
Soprane CDS offre la possibilité d'aller bien plus loin que les simples calculs de concentration et d'effectuer des calculs complémentaires. Les options de calculs spécifiques sont accessibles si elles sont activées dans la licence. (ISO 6976, GPL, Combustion, Annexes, Excel).

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 ne sont pris en compte que si le nom a une correspondance dans les tables de référence.

4.1 Calculs du pouvoir calorifique du gaz naturel (ISO 6976)

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.



Dans l'onglet **Analyse**, sélectionnez le menu **Options** puis cliquez sur **Calculs spécifiques**.

2 sous-menus sont visibles :

- 1) Sélectionner les calculs

5 rapports peuvent être définis à chaque fin d'analyse.

Pour définir les calculs "ISO 6976 Gaz naturel", cliquez sur "+" pour ajouter des calculs (maximum 5) et "-" pour réduire le nombre de rapports.

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 ISO 6976 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.

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".

2) Table des coefficients

La table des coefficients de référence de la norme ISO 6976:2016 est enregistrée dans le fichier "iso6976.coef" (dans le répertoire d'installation de Soprane CDS). Pour éditer les valeurs, sélectionnez le sous-menu « Table des coefficients ».

La table des coefficients de référence de la norme ISO 6976:2016 se trouve dans la section de l'onglet "Iso 6976 :2016".

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.

	+	Composant	Masse molaire	PCS	Facteur de sommation	Carbone
1		CH4	16,042	892,920	0,049	1
2		C2H6	30,069	1564,350	0,100	2
3		C3H8	44,096	2224,030	0,147	3
4		nC4	58,122	2883,350	0,202	4
5		iC4	58,122	2874,210	0,189	4
6		nC5	72,149	3542,910	0,259	5
7		iC5	72,149	3536,010	0,246	5
8		neoC5	72,149	3521,750	0,225	5
9		nC6	86,175	4203,240	0,332	6
10		iC6	86,175	4195,640	0,311	6
11		Methyl-3 Pentane	86,175	4198,270	0,300	6
12		neoC6	86,175	4185,860	0,253	6

Le tableau est composé des colonnes "**Composant**", "**Masse molaire**", "**PCS**" et "**Facteur 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 sommation 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 CDS 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**".

En cochant «**Nbre atomes** », une colonne intitulée **Carbone** est ajoutée, indiquant le nombre d'atomes de carbone de chaque composé.

4.2 Calculs RGA (EN 15984)

La norme EN 15984 définit une méthode d'analyse chromatographique gazeuse pour la détermination de la composition des gaz combustibles de raffineries. Les résultats obtenus permettent de calculer leur teneur en carbone ainsi que leur pouvoir calorifique inférieur.

Dans l'onglet **Analyse**, sélectionnez le menu **Options** puis cliquez sur **Calculs spécifiques**.

Pour ces calculs, il n'y a pas de coefficients de référence.

4.3 Calculs de l'indice de méthane

Les méthodes du Gas Research Institute (GRI) sont utilisées pour calculer l'indice de méthane, et l'indice d'octane moteur ; la relation linéaire permet de déterminer et de comparer la résistance au cliquetis du gaz naturel à haute teneur en méthane.

Dans l'onglet **Analyse**, sélectionnez le menu **Options** puis cliquez sur **Indice de méthane**.

- Rapport carbone hydrogène : Rapport entre nombre d'atomes de carbone et d'hydrogène.
- Indice de méthane : mesure de la résistance au cognement d'un combustible gazeux, qui est attribuée à un combustible d'essai sur la base d'un fonctionnement dans une unité d'essai de cognement à la même intensité de cognement standard.
- Indice d'octane : évaluation numérique de la résistance au cognement obtenue par comparaison de son intensité de cognement avec celle des carburants de référence primaires.

4.4 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

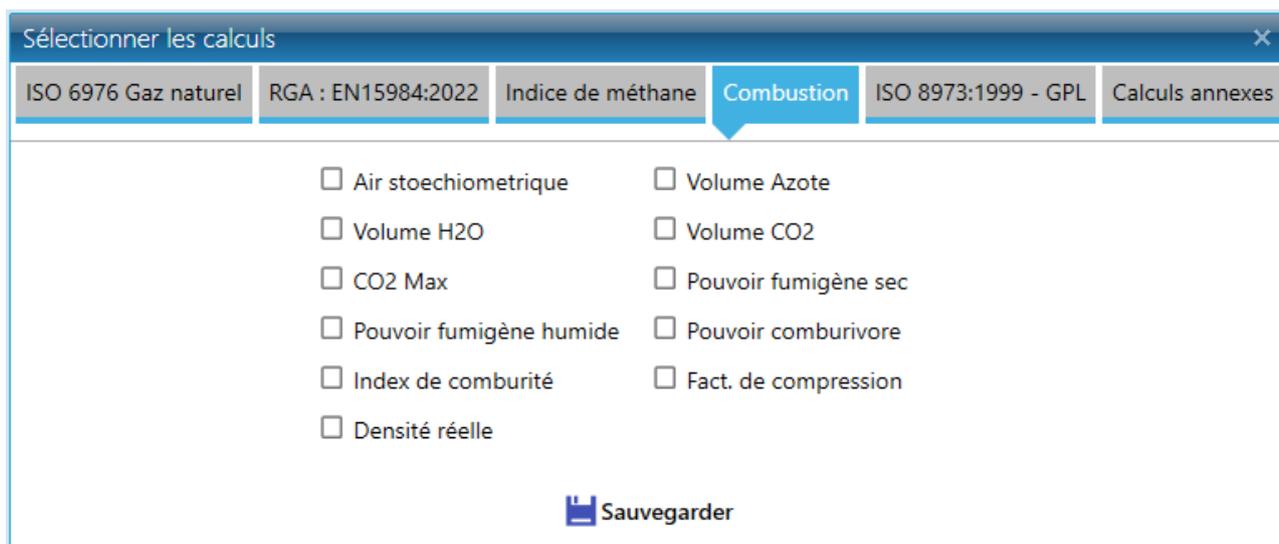
rapport entre l'air et le carburant, les produits de combustion, sont des paramètres critiques qui doivent être surveillés et contrôlés.

Soprane CDS effectue les calculs de combustion et génère un rapport en fin d'analyse. Dans l'onglet **Analyse**, sélectionnez le menu **Options** puis cliquez sur **Calculs spécifiques**.

2 sous-menus sont visibles :

1) Sélectionner les calculs

Dans la fenêtre de sélection des calculs, cliquez sur l'onglet "**Combustion**" puis cochez les calculs à effectuer.



2) Table des coefficients

	+	Composant	Masse molaire	Fact. de compression	H2O	CO2	O2	Coef. comb.
1		N2	28,014	0,9995	0	0	0	0
2		CH4	16,043	0,9976	2	1	2	9,54
3		CO2	44,01	0,9933	0	1	0	0
4		C2H6	30,07	0,99	3	2	3,5	16,84
5		C3H8	44,097	0,9789	4	3	5	24,37
6		iC4	58,123	0,958	5	4	6,5	32,41
7		nC4	58,123	0,9572	5	4	6,5	32,41
8		iC5	72,15	0,937	6	5	8	40,87
9		nC5	72,15	0,918	6	5	8	40,87

Le tableau est composé des colonnes : "Composant", "Masse molaire", "Fact. de compression", "H2O", "O2", "Coef. comb.", "Temp. critique", "Press. critique", "Coef. 2 degré", "Coef. 1 degré", "Constante".

4.5 Calculs GPL (ISO 8973)

Dans le cas d'analyses de GPL, Soprane CDS peut afficher un rapport annexe de résultats conformes 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, dans l'onglet **Analyse**, sélectionnez le menu **Options**, cliquez sur **Calculs spécifiques**, puis cliquez sur Sélectionner les calculs.

1) Sélectionner les calculs

L'onglet "ISO 8973 :1999 - 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.

Les résultats seront affichés dans une section spécifique du rapport final qui sera généré à chaque fin d'analyse.

2) Table des coefficients

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 CDS). Pour éditer les valeurs, sélectionnez le sous-menu « Table des coefficients ».

La table des coefficients de référence de la norme ISO 8973:1999 se trouve dans la section de l'onglet "ISO 8973:1999 - 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 d'un panel de commandes.

Tables des coefficients						
Iso 6976:2016		Combustion		ISO 8973:1999 - GPL		
	+	Composant	Masse molaire	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"/>
11		Trans-2-Butene	56,108	4	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

≡+ Insérer

↺ Restaurer

Mettre à jour la table d'origine?

📄 Enregistrer

Le tableau est composé des colonnes "Composant", "Masse molaire", "Nb carbone", "Somme C3", "Somme C4", "Somme C5", et "Coef. M Vol", "Press. abs. vapeur @ 37,8, @ 40, @ 50 et @ 70°C", "Oléfines" 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". 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.

4.6 Calculs annexes

D'autres calculs spécifiques peuvent être appliqués aux résultats d'analyses. Pour cela, dans l'onglet **Analyse**, sélectionnez le menu **Options**, cliquez sur **Calculs spécifiques**, sur **Sélectionner les calculs** puis cliquez sur l'onglet **Calculs annexes**. Cochez la case qui correspond au calcul à effectuer. Si vous ne souhaitez pas faire de calculs, cochez la case "Aucun".

4.6.1 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 %.

Sélectionner les calculs

ISO 6976 Gaz naturel | RGA : EN15984:2022 | Indice de méthane | Combustion | ISO 8973:1999 - GPL | **Calculs annexes**

Aucun
 Pureté gaz
 Calcul de l'Hélium
 Concentration pour les pics inconnus
 Delta temps de rétention

Nom du composant

4.6.2 Calcul de l'hélium

Sélectionner les calculs

ISO 6976 Gaz naturel | RGA : EN15984:2022 | Indice de méthane | Combustion | ISO 8973:1999 - GPL | **Calculs annexes**

Aucun
 Pureté gaz
 Calcul de l'Hélium
 Concentration pour les pics inconnus
 Delta temps de rétention

Composant de référence

Nom du composant

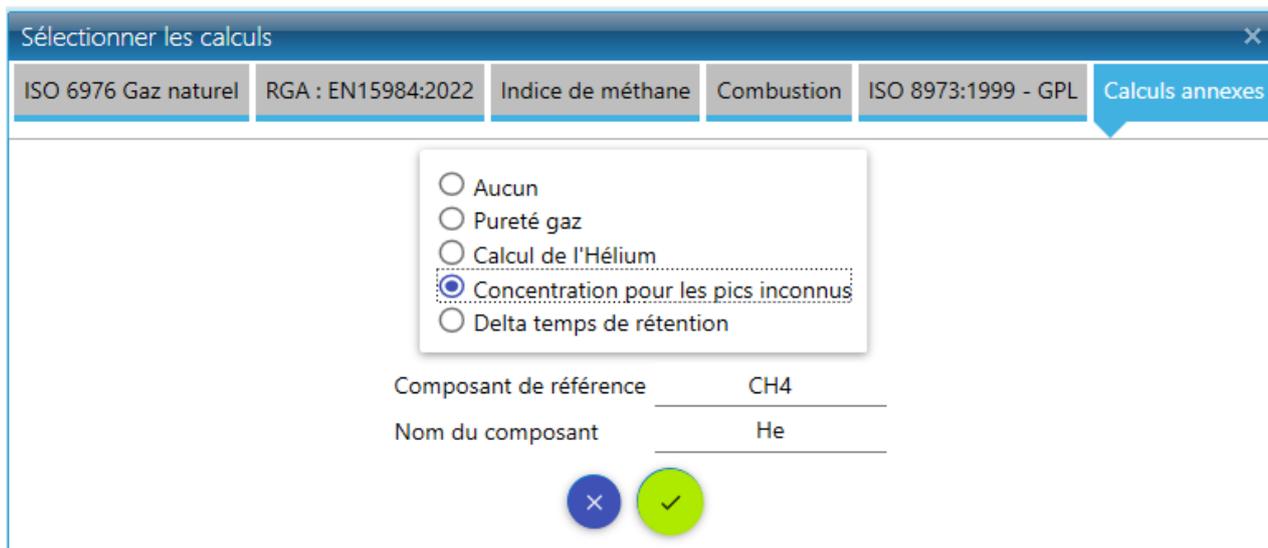
Valeur par défaut

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 comme gaz vecteur).

Cette option est utilisée pour calculer la concentration d'hélium, en l'estimant à partir de la concentration de CH₄ mesurée.

4.6.3 Concentration pour les pics inconnus



Lorsque cette option est cochée, une estimation de la concentration est calculée pour les composants inconnus en se référant à l'étalonnage d'une espèce identifiée et étalonnée dans la méthode d'analyse. Plus précisément, si les pics inconnus sont quantifiés en fonction de l'étalonnage de l'espèce X, alors les résultats de quantification pour les espèces inconnues seront obtenus en équivalent de l'espèce X et dans la même concentration que ceux de l'espèce X.

Cet outil permet de travailler de deux façons différentes :

- Soprane CDS peut donner un résultat de quantification par pic inconnu en équivalent X.
- Soprane CDS peut également sommer les aires de l'ensemble des pics inconnus et donner un résultat de quantification global pour toutes les espèces inconnues, toujours en équivalent X.

Le champ « Composant de référence » correspond au nom du composé à suivre : les concentrations des inconnus seront calculées en fonction de son équation.

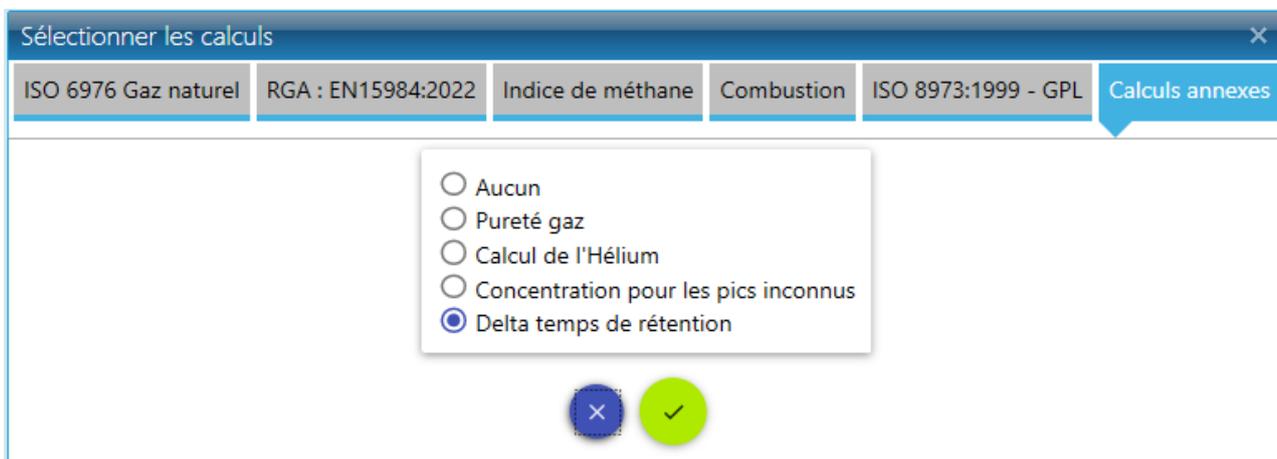
En ajoutant un « Nom du composant », un nouveau pic sera ajouté aux résultats avec le nom indiqué. Les valeurs de concentration, de surface, de hauteur seront égales à la somme des composés inconnus du module contenant le composant de référence. Les concentrations normalisées seront mises à jour.

Module	Nom du pic	Temps de rétention (min)	Aire du pic	Concentration	Unité	Concentration normalisée (%)	Largeur de pic (min)	Résolution	Plateaux théoriques	Signal sur bruit	Largeur USP (min)
C	Inconnus (eq Cymene)	NaN	57,73 µV.s	11,405604 ppm Vol	ppm Vol	0,001308	NaN	0,000	0,000	0,000	0,00
C	Acetone	0,75	0,00 µV.s	0,000000 ppm Vol	ppm Vol	0,000000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,00
C	n-Hexane	0,81	9,66 µV.s	1,273068 ppm Vol	ppm Vol	0,000146	0,026	0,000	28232,167	0,013	0,02
C	Butanone	0,85	5,19 µV.s	1,293614 ppm Vol	ppm Vol	0,000148	0,027	1,629	28463,232	0,006	0,02
C		0,88	3,05 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,027	1,246	32321,479	0,004	0,02
C		0,91	2,15 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,038	1,533	12471,140	0,002	0,02
C		0,95	4,99 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,029	1,704	31298,535	0,122	0,02
C		0,98	0,94 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,021	1,236	89947,465	0,765	0,01
C		1,00	0,48 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,018	1,409	64623,225	0,410	0,02
C		1,03	0,84 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,025	1,148	67244,319	0,353	0,02
C		1,08	3,81 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,032	2,374	45473,787	2,124	0,02
C		1,28	12,26 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,034	8,063	45030,877	11,909	0,02
C		1,76	16,48 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,057	16,344	55158,160	15,192	0,03
C	alpha pinene	2,27	11,57 µV.s	1,527567 ppm Vol	ppm Vol	0,000175	0,189	6,553	4986,346	0,940	0,13
C	beta pinene	2,88	2,59 µV.s	0,350893 ppm Vol	ppm Vol	0,000040	0,042	7,452	109213,390	2,452	0,03
C	2-carene	3,06	0,00 µV.s	0,000000 ppm Vol	ppm Vol	0,000000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,00
C		3,44	0,43 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,033	14,911	199399,890	0,064	0,03
C	Limonene	3,56	5,88 µV.s	1,211808 ppm Vol	ppm Vol	0,000139	0,088	3,035	39298,633	0,869	0,07
C	Cymene	3,61	114,61 µV.s	22,642748 ppm Vol	ppm Vol	0,002596	0,098	1,054	64651,203	65,963	0,06
C		3,83	4,96 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,078	3,195	250855,576	0,447	0,03
C		3,92	7,36 µV.s	0,000000 %	%	0,000000	0,150	0,730	82492,558	0,246	0,05
Σ			264,98	0,003971		0,004553					

Si aucune valeur n'est ajoutée au champ « Nom du composant », les concentrations et concentrations normalisées des inconnus du module du composé référence seront mises à jour.

Module	Nom du pic	Temps de rétention (min)	Aire du pic	Concentration	Unité	Concentration normalisée (%)	Largeur de pic (min)	Résolution	Plateaux théoriques	Signal sur bruit	Largeur USP (min)
C	Acetone	0,75	0,00 µV.s	0,000000 ppm Vol	ppm Vol	0,000000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,00
C	n-Hexane	0,81	9,68 µV.s	1,273068 ppm Vol	ppm Vol	0,000146	0,026	0,000	28232,167	0,013	0,02
C	Butanone	0,85	5,19 µV.s	1,293614 ppm Vol	ppm Vol	0,000148	0,027	1,629	28463,232	0,006	0,02
C		0,88	3,05 µV.s	0,601678 ppm Vol	ppm Vol	0,000069	0,027	1,246	32321,479	0,004	0,02
C		0,91	2,15 µV.s	0,424346 ppm Vol	ppm Vol	0,000049	0,038	1,533	12471,140	0,002	0,03
C		0,95	4,99 µV.s	0,985445 ppm Vol	ppm Vol	0,000113	0,029	1,704	31298,535	0,122	0,02
C		0,98	0,94 µV.s	0,184771 ppm Vol	ppm Vol	0,000021	0,021	1,236	89947,465	0,765	0,01
C		1,00	0,48 µV.s	0,094415 ppm Vol	ppm Vol	0,000011	0,018	1,409	64623,225	0,410	0,02
C		1,03	0,84 µV.s	0,165716 ppm Vol	ppm Vol	0,000019	0,025	1,148	67244,319	0,353	0,02
C		1,08	3,81 µV.s	0,752083 ppm Vol	ppm Vol	0,000086	0,032	2,374	45473,787	2,124	0,02
C		1,28	12,26 µV.s	2,422835 ppm Vol	ppm Vol	0,000278	0,034	8,063	45030,877	11,909	0,02
C		1,76	16,48 µV.s	3,255030 ppm Vol	ppm Vol	0,000373	0,057	16,344	55158,160	15,192	0,03
C	alpha pinene	2,27	11,57 µV.s	1,527567 ppm Vol	ppm Vol	0,000175	0,189	6,553	4986,346	0,940	0,13
C	beta pinene	2,88	2,59 µV.s	0,350893 ppm Vol	ppm Vol	0,000040	0,042	7,452	109213,390	2,452	0,03
C	2-carene	3,06	0,00 µV.s	0,000000 ppm Vol	ppm Vol	0,000000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,00
C		3,44	0,43 µV.s	0,084913 ppm Vol	ppm Vol	0,000010	0,033	14,911	199399,890	0,064	0,03
C	Limonene	3,56	5,88 µV.s	1,211808 ppm Vol	ppm Vol	0,000139	0,088	3,035	39298,633	0,869	0,07
C	Cymene	3,61	114,61 µV.s	22,642748 ppm Vol	ppm Vol	0,002596	0,098	1,054	64651,203	65,963	0,06
C		3,83	4,96 µV.s	0,980861 ppm Vol	ppm Vol	0,000112	0,078	3,195	250855,576	0,447	0,03
C		3,92	7,36 µV.s	1,453511 ppm Vol	ppm Vol	0,000167	0,150	0,730	82492,558	0,246	0,05
Σ			207,24	0,003971		0,004553					

4.6.4 Delta temps de rétention



Lorsque cette option est cochée, le delta de temps de rétention est calculé entre le temps de rétention attendu et le temps de rétention.

4.7 Calculs via Excel

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

Si l'option est activée, cliquez sur le menu "Options > Excel", l'écran suivant s'affiche :

Les champs à renseigner sont :

- Modèle : chemin complet du modèle du fichier Excel
- Fichier résultat : chemin complet du fichier Excel final
- Nom de la feuille : Correspond au nom de la feuille Excel dans laquelle Soprane CDS ira écrire et lire les données.
- Nom de la cellule composants
- Nom de la cellule résultats
- Nom de la cellule d'entrée analogique
- Informations échantillon

Des points de repère sont nécessaires et se trouvent dans la colonne A ; ils correspondent aux noms des cellules (dans l'exemple plus bas : "Coumpounds", "Calculations"...))

A l'exécution, Soprane CDS cherche dans la colonne A la cellule des composés. Les lignes suivantes correspondent obligatoirement au nom des constituants, tels qu'ils sont connus de Soprane CDS (programmation de la table d'identification). Ceci permet à Soprane CDS 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 et ainsi de suite pour les autres valeurs.

Soprane CDS vient ensuite rechercher en colonne A une cellule correspondant aux calculs (dans l'exemple plus bas : "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 même procédé est répété pour les entrées analogiques et les informations échantillon.

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

A	B	C	D	E	F	G
Compounds	Raw Conc.	Norm. Conc	Retention Time	Area		
Pic0	15	23,07692308	23,07692308	23,07692308		
Pic1	50	76,92307692	76,92307692	76,92307692		
Pic2						
Calculations	Description	Result	Unit	NbDecimal		
Difference	Difference = A(raw) - B(raw)	53,84615385	ppmV	1		
Sum	Sim = A(raw) + B(raw)	100	ppmV	2		
Relative Conc	Special = A(norm)/(A(norm)+B(norm))*100	#REF!	%	0		
Analog inputs						
AI 0	2,011672996					
AI 1	2,009384173					
Sample info						
[AnalysisName]						
[AnalysisDate]						
[Comments]						



5. Gestion des fichiers

Soprane CDS 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 entraîner des conséquences fâcheuses.

Pour exporter et importer des données, le meilleur moyen consiste à utiliser l'utilitaire **File Manager**  spécialement conçu à cet effet.

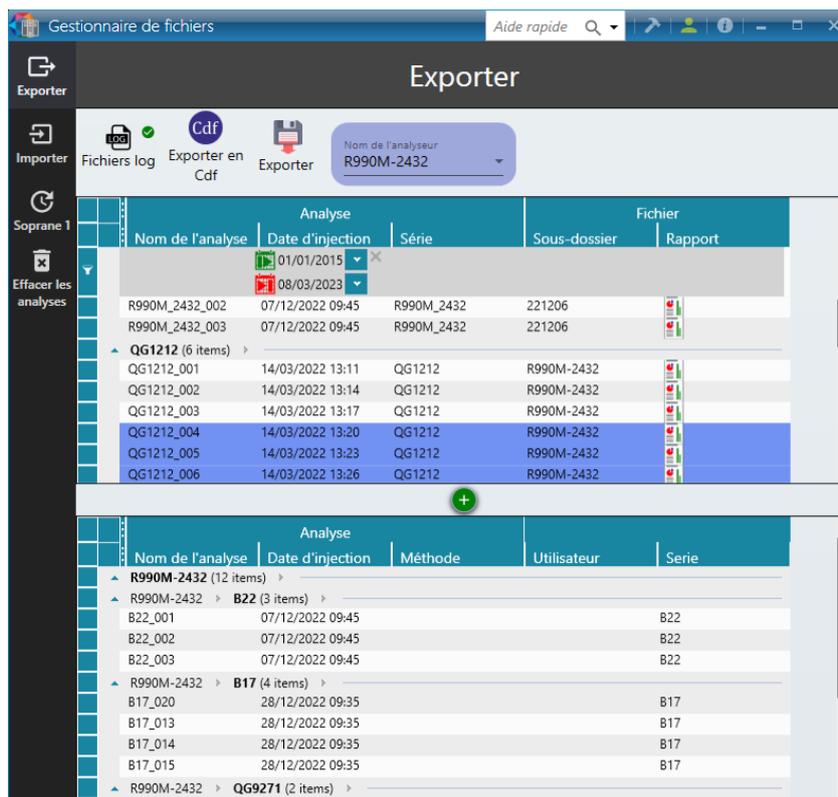
Il permet à l'utilisateur de copier, effacer, déplacer des fichiers, de les exporter ou de les importer.

L'outil File Manager se trouve dans le dossier d'installation de Soprane CDS.

5.1 Exporter des données

Il peut être parfois intéressant 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 **Exporter** 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 .

Pour compresser les données, cliquez sur le bouton **Exporter**. Sélectionnez ensuite l'emplacement des données.

À noter :

Pour faciliter la recherche d'analyses à exporter, les deux tableaux présents dans cet affichage peuvent être filtrés et triés.

5.2 Importer des données

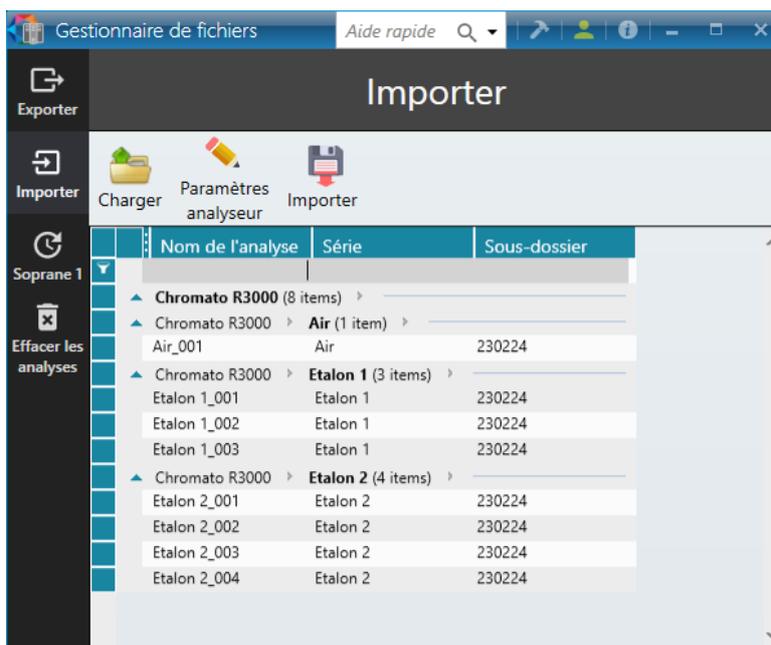
L'importation permet de créer un nouvel analyseur avec toutes les analyses et méthodes correspondantes. Pour cela il ne s'agit cette fois que de localiser et ouvrir le fichier avec l'extension **.zip** en cliquant sur le bouton charger .

NOTE IMPORTANTE :

Lors de l'importation, Soprane CDS recopie le fichier configuration et donc efface celui qui était utilisé. Ceci n'entraîne 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 apparaît :



Toutes les analyses du fichier chargé sont 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 et les emplacements des fichiers résultats ; 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 **Importer**. Une fois l'import réussi, un nouvel analyseur sera créé ainsi que son raccourci sur le bureau.

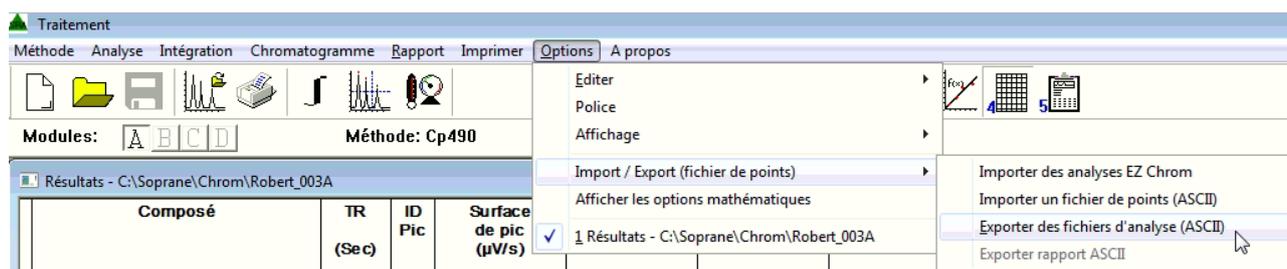
5.3 Importation des analyses Soprane 1

5.3.1 Exportation des fichiers Soprane 1

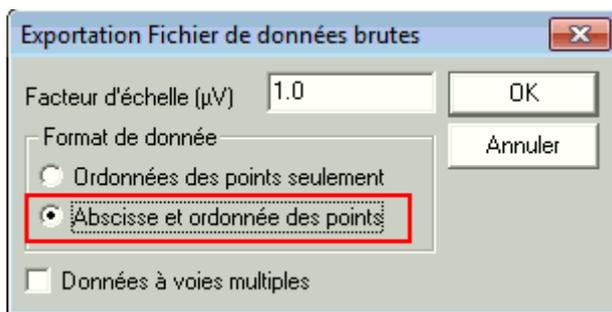
La 1^{ère} étape consiste à exporter les analyses Soprane 1 dans le format « axy ».

Pour ce faire, ouvrez Soprane 1, puis cliquez sur « Traitement » 

Ensuite cliquez sur le menu « Options », « Import / Export (fichier de points) » et « Exporter des fichiers d'analyse (ASCII) » .



Cochez « Abscisse et ordonnée des points » et cliquez sur « OK » pour exporter dans le dossier « Chrom » de Soprane (par défaut C:\Soprane\Chrom)

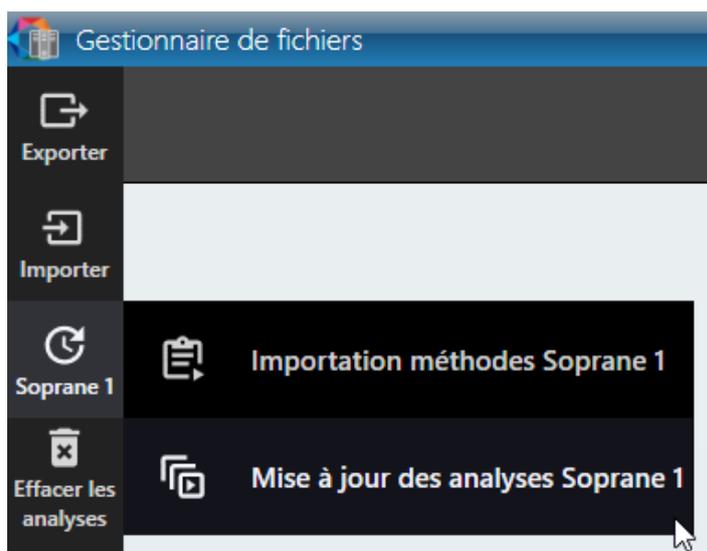


5.3.2 Importation des analyses dans Soprane CDS

La 2^e étape consiste à importer les fichiers « axy » dans le logiciel Soprane CDS.

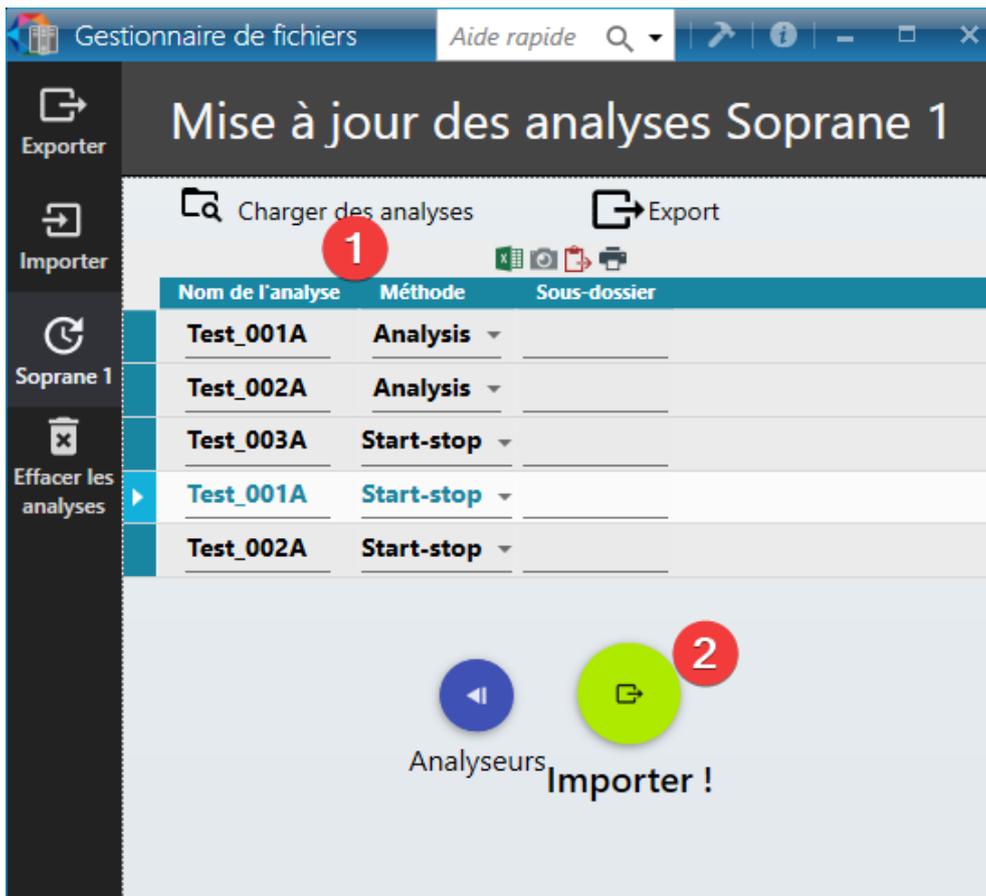
Pour ce faire, ouvrez l'application « File Manager » de Soprane CDS.

Sélectionnez le menu « Soprane 1 » puis « Mise à jour des analyses Soprane 1 »



Sélectionnez l'instrument pour lequel importer les analyses Soprane 1, puis sélectionnez la méthode pour chaque analyse.

Cliquez sur « Importer » pour les ajouter dans Soprane CDS.



6. Modbus

Un logiciel spécifique, dont le nom est SRA.Soprane.Modbus, permet l'échange de données entre le logiciel Soprane CDS 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.

Il est donc nécessaire de définir une table d'échange précisant les variables que l'on souhaite lire, leur adresse et leur format.

Ensuite, il est nécessaire de définir la configuration hardware et de déterminer l'adresse d'écriture de chacune des informations.

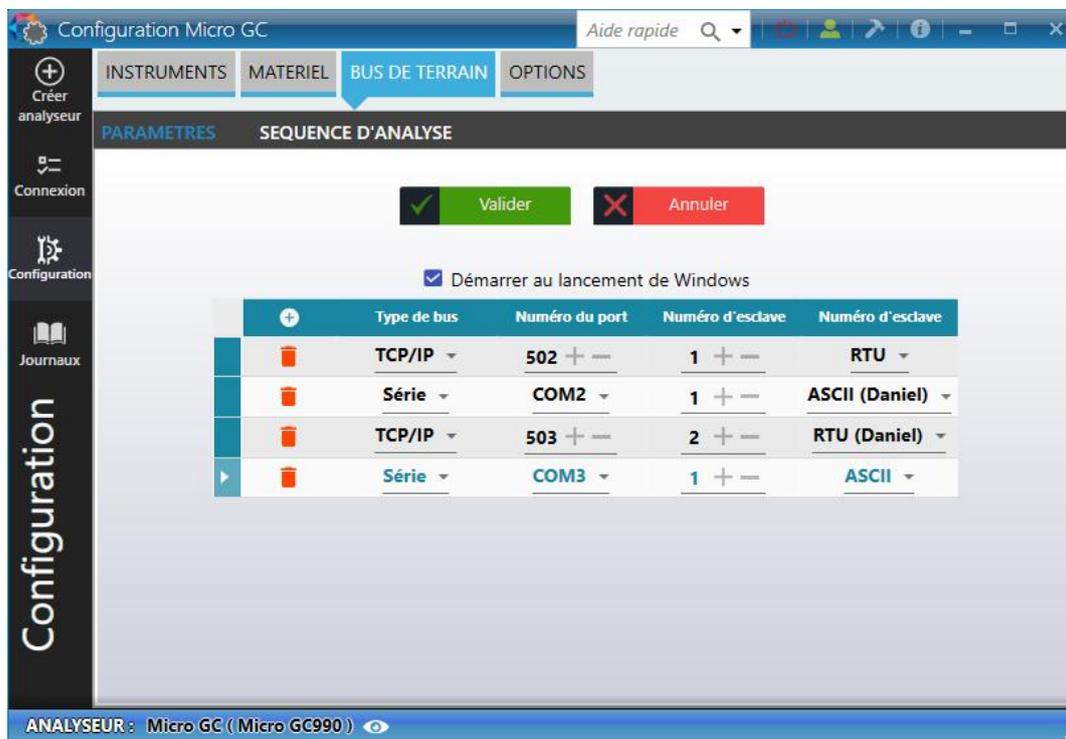
La liaison Modbus standard peut dialoguer selon un port Ethernet, un port COM série RS232 (si câble inférieur à 10 mètres) ou RS485. Dans le cas d'une liaison série RS232 ou RS485, reportez-vous à la documentation de la carte utilisée. Le protocole de communication doit être en accord avec le superviseur.

6.1 Configuration de la communication

Le programme de configuration de Soprane CDS  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.

Cliquez sur , puis sélectionnez l'onglet **Bus de terrain**.



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 CDS.
- Sélectionnez un mode de transmission.

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

Note :

Le logiciel SRA.Soprane.Modbus 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.

6.2 Configuration du Modbus standard

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

Le logiciel MODBUS 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 MODBUS 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 :



Les données sont séparées en plusieurs sections :

- 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 alarmes : "**Alarmes**"
- Les valeurs en relation avec le statut de l'analyseur : "**Statut**"
- Les valeurs en relation avec les entrées analogiques : "**Entrées analogiques**"
- Les valeurs en relation avec les valeurs du fichier Excel : "**Excel**"
- Les valeurs en relation avec les codes composants : "**Index**"
- Les valeurs en relation avec les valeurs d'édition des alarmes : "**Modification d'alarmes**"
- Les valeurs en booléenne : "**Personnalisé**"

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 [Test de communication](#)).

L'onglet "**Données brutes**" contient toutes les valeurs Modbus dans quatre tables différentes. Deux tables

stockent des valeurs discrètes ON/OFF (bobines) et deux des 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.

6.2.1 Variables Instrument

Les variables pouvant être utilisées sont :

- **Voie sélectionnée** : Dans le cas d'une application multivoies, cette valeur indique le numéro de la voie actuellement sélectionnée.
- **Voie analysée** : Dans le cas d'une application multivoies, cette valeur indique le numéro de la voie analysée correspondant aux résultats affichés.
- **Prochaine voie d'échantillonnage** : Dans le cas d'une application multivoies, cette valeur indique le numéro de la voie prochainement analysée.
- **Changer de voie** : Dans le cas d'une application multivoies, cette valeur permet de changer le numéro de la voie sélectionnée.
- **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 CDS. 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 : Défaut gaz vecteur
 - 64 : par défaut avec sélecteur de flux ou vanne multi-positions (option)
 - 128 : Défaut composant

Exemple :

- Si défaut chromatographe + Défaut composant = 129
- Si cycle arrêté + Défaut gaz vecteur = 34
- **Bit de vie** : Cette variable est utilisée pour surveiller la transmission. Sa valeur est mise à jour toutes les secondes.
- **Temps d'analyse** : Cette variable permet de connaître le temps d'analyse
- **Temps d'analyse actuel** : Cette variable permet de connaître le temps d'analyse écoulé
- **Temps d'échantillonnage** : Cette variable permet de connaître le temps d'échantillonnage
- **Temps d'échantillonnage actuel** : Cette variable permet de connaître le temps d'échantillonnage écoulé
- **Temps de cycle** : Cette variable permet de connaître le temps de cycle (intervalle entre injections)
- **Temps de cycle actuel** : Cette variable permet de connaître le temps de cycle écoulé
- **Index analyse** : Cette variable permet de connaître le nombre d'analyses effectué
- **Méthode** : Cette variable permet de connaître la méthode chargée (le numéro correspond à la position de la méthode dans la liste des méthodes triées par ordre alphabétique)
- **Changer méthode** : Cette variable permet de changer la méthode (le numéro correspond à la position de la méthode dans la liste des méthodes triées par ordre alphabétique)
- **Validité de l'étalonnage** : Cette variable est passée à 1 lorsque la validité de l'étalonnage a expiré.
- **Aucun** : Registre sans effet
- **Numéro instrument** : Indique le numéro de série de l'instrument
- **L'année en cours**
- **Le mois en cours**

- **Le jour** en cours
- **L'heure** en cours
- **Les minutes** en cours
- **Les secondes** en cours
- **Statut** : Cette variable est utilisée pour surveiller le cycle de Soprane CDS. 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
- **Statut module** : Décomposition des différents éléments des modules.
Chaque module est constitué de différents éléments :
Entrée chauffée, Injecteur chauffé, Colonne chauffée, Gaz vecteur, Détecteur.
Chaque élément peut avoir différents états : Off => 0 (en binaire 0), Non Prêt => 1 (en binaire 1), Prêt => 2 (en binaire 10)

Exemple : Si le détecteur est Off, la pression est bonne, la température de la colonne en chauffe, l'injecteur off et l'entrée chauffée prête, on aura

Entrée 2 => 10

Injecteur 0 => 00

Colonne 1 => 01

Gaz vecteur 2 => 10

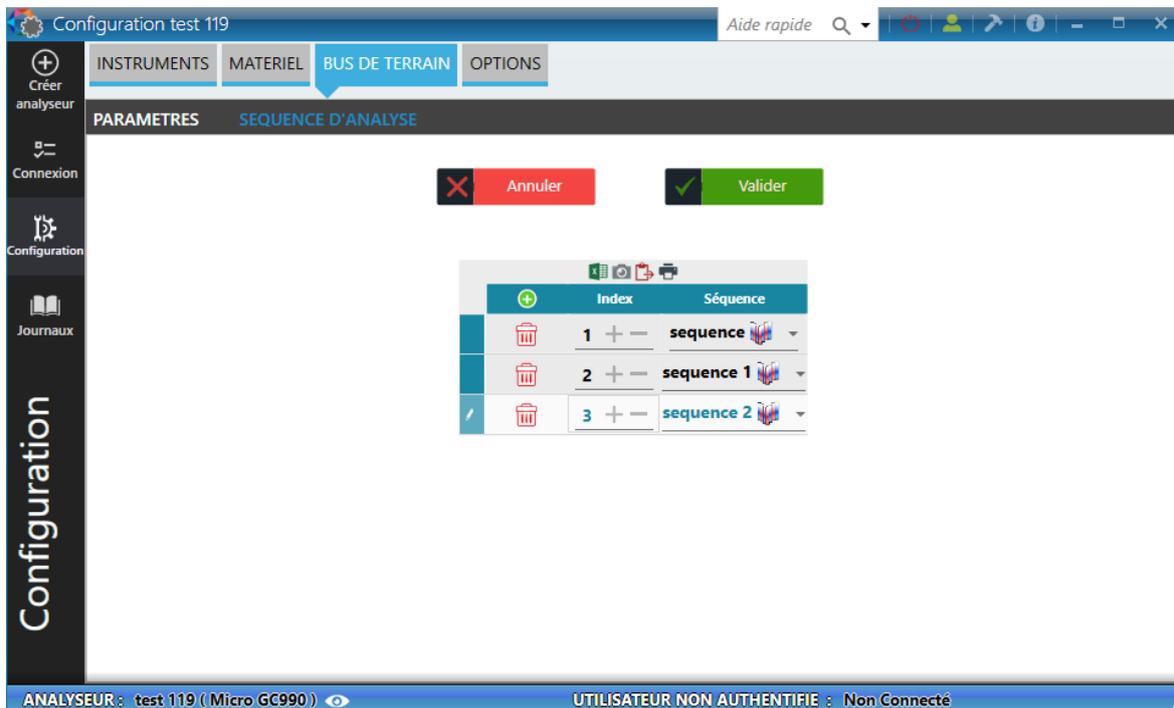
Détecteur 0 => 00

Soit 0010010010 ce qui donne en décimal 146

Si le registre n'est pas à 682 en décimal (001010101010 en binaire), le module n'est pas prêt.

- **GC Ready** : Cette variable permet de connaître l'état du chromatographe. Elle peut prendre les valeurs suivantes :
 - 0 : Pas prêt
 - 1 : Prêt
 - 2 : Défaut
- **Redémarrage** : cette commande passée à 1 lancera un redémarrage du MicroGC
- **Acquittement de la commande Redémarrage** : cette variable est passée à 1 lorsqu'une demande de redémarrage par Modbus a été prise en compte (elle est remise à 0 dix secondes plus tard). Une option supplémentaire à cocher permet de redémarrer l'ordinateur.
- **Acquittement de la commande** : cette variable est passée à 1 lorsqu'une demande d'analyse ou séquence par Modbus a été prise en compte (elle est remise à 0 dix secondes plus tard)
- **Démarrer analyse** : Cette variable permet de lancer des analyses via Soprane CDS. 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.
- **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

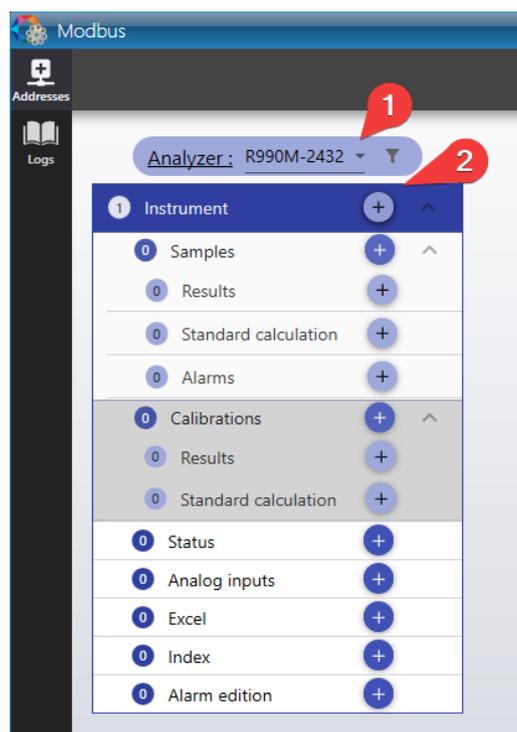
de la séquence que l'on veut effectuer. Cette affectation est réalisée dans le logiciel de configuration de Soprane CDS via le menu "Bus de terrain / Séquence d'analyses" :



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.



6.2.2 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** : Modbus 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 CDS est déclenchée, le bit correspondant à cette alarme sera actif.
- **Total concentration** : Affiche la somme des concentrations de l'analyse
- **Total concentration normalisée** : Affiche la somme des concentrations normalisées de l'analyse
- **Total surface** : Affiche la somme des surfaces de l'analyse
- **Total surface des pics inconnus** : Affiche la somme des surfaces des pics inconnus de l'analyse
- **Nb Pics** : Affiche le nombre de pics détectés dans l'analyse
- **Nb Pics inconnus** : Affiche le nombre de pics inconnus détectés dans l'analyse

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.

6.2.3 Variables résultats

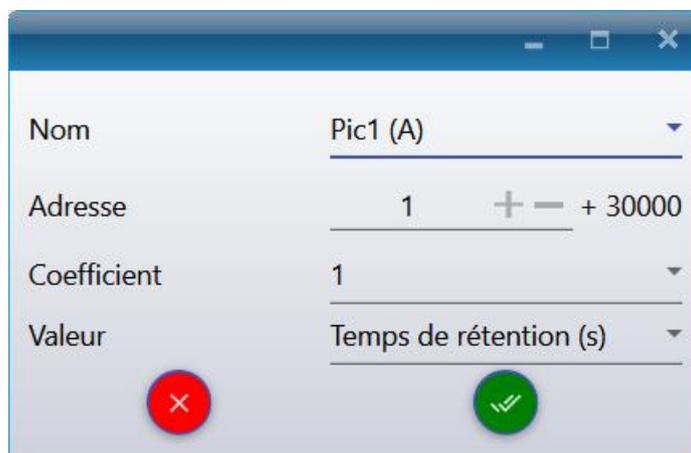
MODBUS offre la possibilité de choisir parmi un éventail de valeurs :

- Surface
- Concentration brute
- Concentration normalisée
- Temps de rétention
- Hauteur
- Delta de temps de rétention
- Mise à jour Temps de rétention

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**, cliquez 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 'Pleine échelle' du menu "**Configuration**" (icône marteau en haut à droite de la fenêtre) (voir paragraphe [Options Modbus](#))

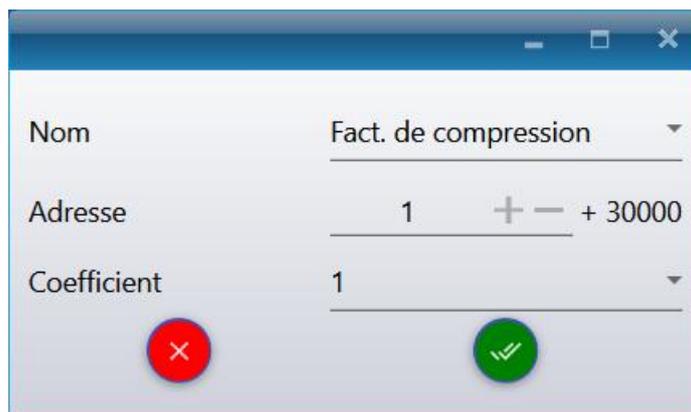
6.2.4 Variables calcul spécifique

Soprane CDS 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 différentes.

Si la valeur correspond à un calcul effectué dans Soprane CDS, 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**, cliquez 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.



6.2.5 Variables 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**, cliquez sur **Ajouter**.
- Dans la fenêtre qui apparaît, sélectionnez le nom de l'entrée analogique, le numéro de l'adresse et le coefficient.

6.2.6 Les variables statut de l'analyseur

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

- Sélectionnez l'analyseur
- Dans la barre de menus, sélectionnez "**Adresses**"
- Dans la partie **Statut**, cliquez sur **Ajouter**.
- Dans la fenêtre qui apparaît, sélectionnez la valeur à surveiller, le numéro de l'adresse et l'index du module (exemple module A = 0, Module B = 1...).

Les variables pouvant être utilisées sont :

- La pression d'un module
- La température d'une colonne
- La température d'un injecteur
- La température d'une entrée
- Si le module est prêt

6.2.7 Les variables Excel

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

- Sélectionnez l'analyseur
- Dans la barre de menus, sélectionnez "**Adresses**"
- Dans la partie **Excel**, cliquez sur **Ajouter**.
- Dans la fenêtre qui apparaît, sélectionnez la valeur à surveiller, le numéro de l'adresse et le coefficient.

6.2.8 Les variables codes composants

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

- Sélectionnez l'analyseur
- Dans la barre de menus, sélectionnez "**Adresses**"
- Dans la partie **Index**, cliquez sur **Ajouter**.
- Dans la fenêtre qui apparaît, sélectionnez la valeur à surveiller, le numéro de l'adresse et l'index du composé.

6.2.9 Les variables édition des alarmes

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

- Sélectionnez l'analyseur
- Dans la barre de menus, sélectionnez "**Adresses**"
- Dans la partie **Modification d'alarme**, cliquez sur **Ajouter**.
- Dans la fenêtre qui apparaît, sélectionnez l'alarme, le numéro de l'adresse et s'il faut modifier la valeur minimale ou maximale.

6.2.10 Les variables « Personnalisé »

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

- Sélectionnez l'analyseur
- Dans la barre de menus, sélectionnez "**Adresses**"
- Dans la partie **Personnalisé**, cliquez sur **Ajouter**.
- Dans la fenêtre qui apparaît, sélectionnez le numéro de l'adresse et définissez pour chaque bit la valeur à suivre.

Les variables pouvant être utilisées sont :

- **Statut analyseur** : met à 1 le registre si le statut de l'analyseur correspond à celui sélectionné
- **Statut des modules** : Il est possible de surveiller l'état de plusieurs éléments (voir ci-dessous), le registre sera mis à 1 lorsque le statut de l'élément sélectionné sera prêt.
 - Prêt : Surveille l'état (prêt ou non) du module sélectionné
 - Chauffage entrée : Surveille l'état (prêt ou non) de l'entrée du module sélectionné
 - Chauffage injecteur : Surveille l'état (prêt ou non) de l'injecteur du module sélectionné
 - Pression : Surveille l'état (prêt ou non) de la pression du module sélectionné
 - Température colonne : Surveille l'état (prêt ou non) de la colonne du module sélectionné
- **Défaut alarme** :
 - Défaut alarme : Met le bit à 1 lorsqu'il y a une alarme déclenchée
 - Défaut alarme non-métrologie : Met le bit à 1 lorsqu'il y a une alarme non-métrologie déclenchée
 - Défaut alarme métrologie : Met le bit à 1 lorsqu'il y a une alarme métrologie déclenchée
- **Alarme spécifique** : Met le bit à 1 si l'alarme sélectionné est en défaut
- **Commande** : Ce bit est en lecture/écriture, il permet de lancer des commandes
 - Arrêter l'analyse : Lorsque le bit est mis à 1, une demande d'arrêt de l'analyse sera effectuée
 - Démarrer une séquence : Lorsque le bit est mis à 1, une demande de démarrage de la séquence sélectionnée sera effectuée
 - Redémarrage : Lorsque le bit est mis à 1, une demande de redémarrage de l'instrument sera effectuée
 - Séquence en cours ? : Lorsque le bit est mis à 1, indique que la séquence sélectionnée est en cours d'analyse, sinon il est mis à 0
 - Acquittement de la commande stop : cette variable est passée à 1 lorsqu'une demande d'arrêt d'analyse par Modbus a été prise en compte (elle est remise à 0 dix secondes plus tard).
 - Acquittement de la commande démarrage séquence : cette variable est passée à 1 lorsqu'une demande de démarrage de la séquence sélectionnée par Modbus a été prise en compte (elle est remise à 0 dix secondes plus tard).
 - Acquittement de la commande redémarrage : cette variable est passée à 1 lorsqu'une demande de redémarrage par Modbus a été prise en compte (elle est remise à 0 dix secondes plus tard). Une option supplémentaire à cocher permet de redémarrer l'ordinateur.

R990M-2325 - Custom		
Adresse		1 + - + 40000
	Valeur	Valeur à suivre
Bit 0	Statut analyseur ▾	Non initialisé ▾
Bit 1	Statut analyseur ▾	Pas prêt ▾
Bit 2	Statut analyseur ▾	Prêt ▾
Bit 3	Statut des modules ▾	Module index 0 + - Pression ▾
Bit 4	Statut des modules ▾	Module index 0 + - Température de la colonne (°C) ▾
Bit 5	Statut des modules ▾	Module index 1 + - Pression ▾
Bit 6	Statut des modules ▾	Module index 1 + - Température de la colonne (°C) ▾
Bit 7	Défaut alarme ▾	Défaut alarme non métrologie ▾
Bit 8	Défaut alarme ▾	Défaut alarme métrologie ▾
Bit 9	Alarme spécifique ▾	H2 (A) - Concentration normalisée (Metrologie) ▾
Bit 10	Alarme spécifique ▾	O2 (A) - Concentration normalisée (Metrologie) ▾
Bit 11	Alarme spécifique ▾	N2 (A) - Concentration normalisée (Metrologie) ▾
Bit 12	Alarme spécifique ▾	CH4 (A) - Concentration normalisée (Metrologie) ▾
Bit 13	Alarme spécifique ▾	Σ NormalizedConcentration (Metrologie) ▾
Bit 14	Alarme spécifique ▾	0 : Pression échantillon (bar abs) (Metrologie) ▾
Bit 15	Alarme spécifique ▾	PCS volumétrique réel (Metrologie) ▾

6.2.11 Options Modbus

Pour accéder aux options Modbus, cliquez sur le marteau en haut à droite de la fenêtre Modbus.

La fenêtre suivante apparaît :

Langue

Français ▼

Bus de terrain

	1 (TCP/IP)	2 (TCP/IP)
Numéro d'esclave	30 + -	30 + -
Délai pour effacement données prêtes	30 + -	30 + -
Pleine échelle	65535 + -	65535 + -
Délai avant de déclencher une alarme	15 + -	15 + -
Permuter les octets des flottants	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Ecrire tous les registres en tant que holding register	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Ne pas prendre en compte la commande si même valeur	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
Envoyer "adresse non valide" sur les adresses non configurées	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

Chiffres après la virgule

Concentration	3	+ -	
Aire du pic	0	+ -	
Temps de rétention	2	+ -	

Aide : ?
 A propos i

Fermer

- **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.
- **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.
- **Délai pour rafraîchissement avant alarme** : si les valeurs ne sont pas rafraîchies au bout de ce délai, SRAMODBUS remonte une alarme de non-rafraîchissement.
- **Permuter les octets des flottants** : si l'option est cochée, le poids faible et le poids fort des valeurs transmises sous le format réel sont inversées.
- **Ne pas prendre en compte la commande si même valeur** : si l'option est cochée, qu'un maître Modbus envoie une commande (par exemple démarrage d'analyse) et que le registre possède déjà la même valeur, Soprane CDS ne recevra pas la commande étant donné qu'elle a déjà été prise en compte.
- **Envoyer l'erreur « Adresse invalide » sur les adresses non configurées** : si l'option est cochée, qu'un maître Modbus demande la lecture sur un registre qui n'est pas configuré dans Soprane CDS, alors Soprane CDS enverra une erreur Modbus « Adresse invalide ».

6.2.12 Visualisation des résultats

Pour visualiser les valeurs envoyées par la liaison Modbus, il est nécessaire de cliquer sur l'onglet « Adresses », les valeurs des registres sont affichées dans la partie droite de la fenêtre.



6.3 Configuration du port Modbus standard

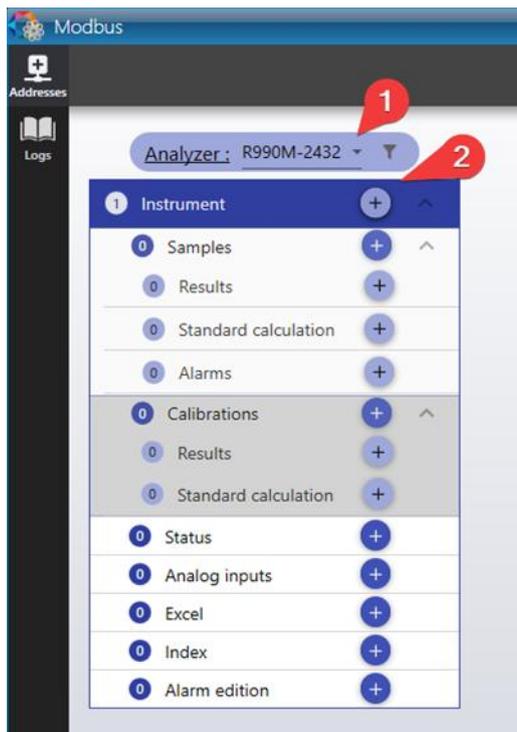
Configuration hardware	
Port série	Port utilisable : MODBUS
Type de port	RS485 2 fils ou 4 fils
Esclave	1 à 255
Mode transmission	RTU, ASCII 16 bit, ASCII 32 bit
Protocole	Modbus (défaut) / Jbus
Vitesse transmission	1200, 2400, 4800, 9600, 19200
Data	8 bits ou configurable par windows
Parité	Sans ou configurable par Windows
Stop bit	1 ou configurable par windows
Signaux de contrôle	Sans ou configurable par Windows

6.4 Test de communication

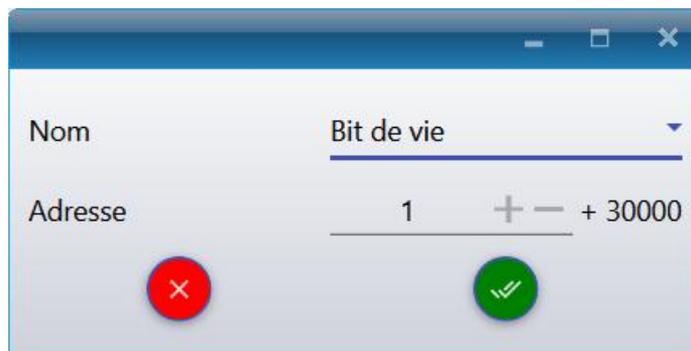
6.4.1 Tests de communication

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.



Sélectionnez les paramètres suivants et confirmez avec le bouton de validation.



Depuis l'écran principal de Modbus, cliquez sur "**Sauvegarder**".

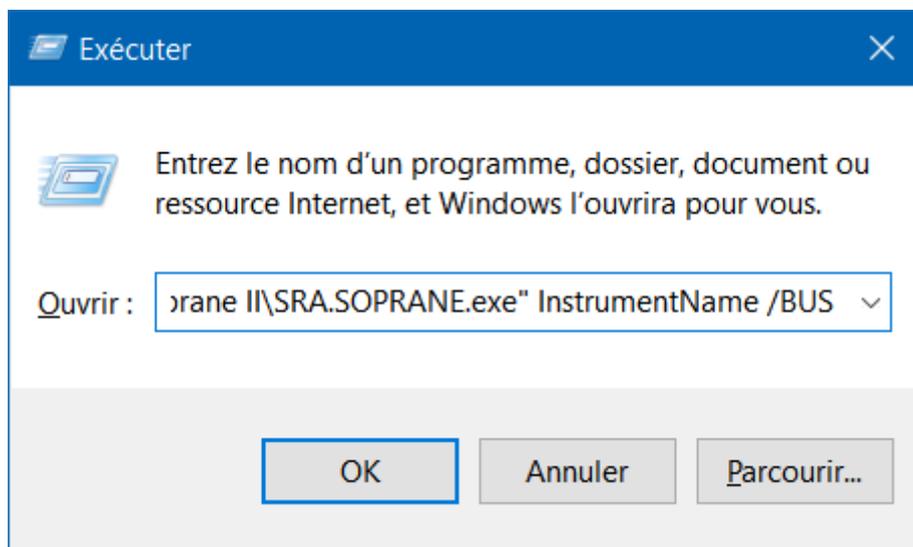
Depuis votre superviseur :

- Vérifiez que la configuration correspond à la configuration définie dans Soprane CDS : 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.

6.4.2 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 CDS, sélectionnez plusieurs analyses faites un clic droit et sélectionnez "Traitement par lot", sélectionnez la méthode puis l'analyse et validez (voir chapitre [Retraitement par lot](#)). Les résultats sont transmis.

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

7. Droits d'accès

Il existe plusieurs niveaux d'identification : Opérateur, Support, Vérificateur et Administrateur.

Par défaut lorsque Soprane CDS est lancé, le niveau est en "Non connecté".

Pour accéder à la gestion des utilisateurs, l'icône  est disponible en haut à gauche de la barre des titres.



7.1 Identification d'un utilisateur

Pour s'identifier, utilisez l'icône .

Deux renseignements sont nécessaires :

- Le nom utilisateur
- Le mot de passe

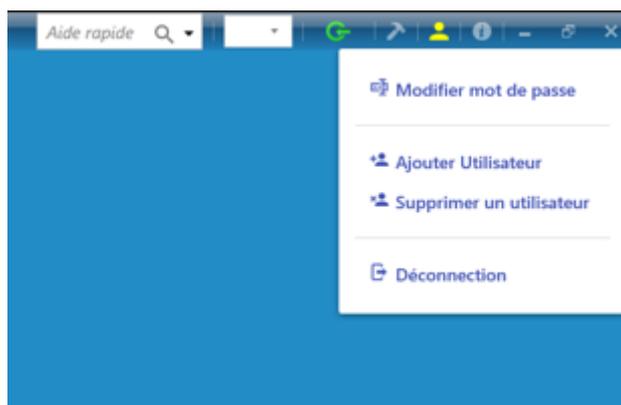
Une fois ces deux informations valides, l'utilisateur sera sélectionné.

(Pour les chapitres suivants, l'utilisateur doit être authentifié en tant qu'**administrateur**.)

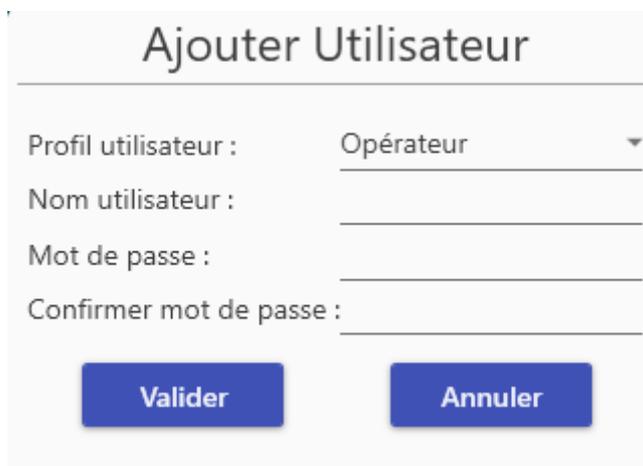
7.2 Création d'un utilisateur

L'ajout d'un utilisateur n'est possible que si un **Administrateur** est déjà connecté (voir paragraphe précédent).

Une fois l'administrateur connecté, cliquez sur  et le menu suivant apparaît :



Cliquez sur « **Ajouter Utilisateur** », l'écran suivant apparaît :

A screenshot of a form titled 'Ajouter Utilisateur'. The form has a light gray background and contains the following fields: 'Profil utilisateur : Opérateur' (with a dropdown arrow), 'Nom utilisateur :', 'Mot de passe :', and 'Confirmer mot de passe :'. At the bottom of the form, there are two blue buttons: 'Valider' and 'Annuler'.

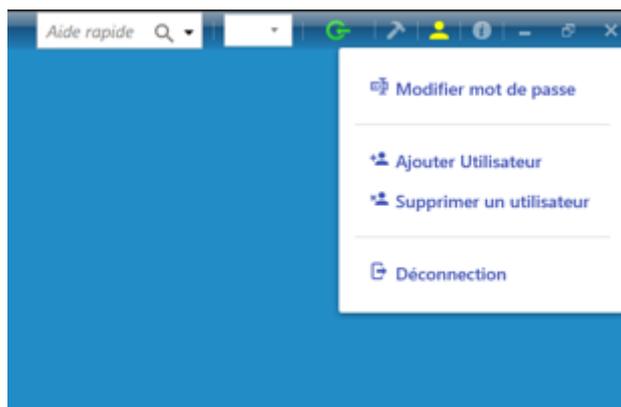
Les champs à renseigner sont :

- Le profil utilisateur
- Le nom de l'utilisateur
- Le mot de passe

7.3 Suppression d'un utilisateur

La suppression d'un utilisateur n'est possible que si un **Administrateur** est déjà connecté (voir paragraphe Identification d'un utilisateur).

Une fois l'administrateur connecté, cliquez sur  et le menu suivant apparaît :



Cliquez sur « **Supprimer un utilisateur** », l'écran suivant apparaît :

Les champs à indiquer sont :

- Le profil utilisateur
- Le nom de l'utilisateur

7.4 Modification du mot de passe

La modification du mot de passe d'un utilisateur n'est possible que si un **Utilisateur** est déjà connecté (voir paragraphe Identification d'un utilisateur).

Cliquez sur  puis cliquez sur « **Modifier 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

Modifier mot de passe

Entrez votre mot de passe _____

Entrez le nouveau mot de passe _____

Confirmer le mot de passe _____

Longueur minimale = 6

Longueur minimale = 6

Valider
Annuler

7.5 Gestion d'un utilisateur

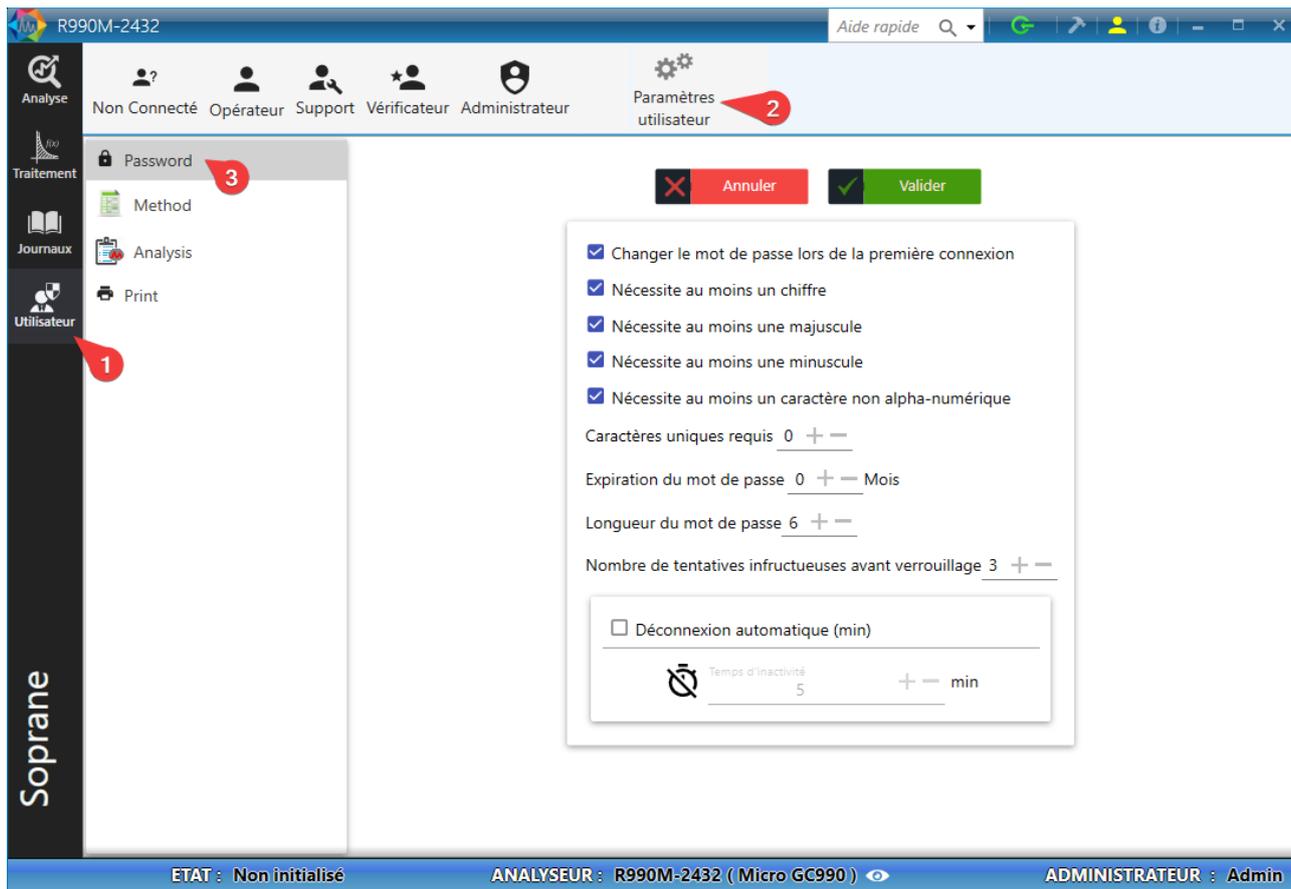
La gestion des accès des utilisateurs est autorisée seulement pour un **Administrateur** (voir paragraphe Identification d'un utilisateur).

Une fois l'administrateur connecté, positionnez-vous dans l'onglet **Utilisateur**  puis cliquez sur le profil utilisateur « Non connecté », « Opérateur », « Support », « Vérificateur » ou « Administrateur ».

Chaque coche représente une action de Soprane CDS. Si elle est cochée, l'utilisateur aura le droit d'effectuer l'action sinon elle lui sera verrouillée.

Configuration	Analyse	Résultats	Méthode d'analyse	Séquence d'analyse	Etalonnage	Traitement	Options
<input checked="" type="checkbox"/> Créer un analyseur	<input checked="" type="checkbox"/> Démarrer analyse	<input checked="" type="checkbox"/> Afficher la courbe des tendances	<input checked="" type="checkbox"/> Créer méthode	<input checked="" type="checkbox"/> Créer une séquence d'analyses	<input checked="" type="checkbox"/> Créer une séquence d'étalonnage	<input checked="" type="checkbox"/> Intégration	<input checked="" type="checkbox"/> Calculs spécifiques
<input checked="" type="checkbox"/> Sélectionner l'analyseur	<input checked="" type="checkbox"/> Afficher les résultats de l'analyse	<input checked="" type="checkbox"/> Afficher les statistiques	<input checked="" type="checkbox"/> Editer une méthode	<input checked="" type="checkbox"/> Editer une séquence d'analyse	<input checked="" type="checkbox"/> Editer une séquence d'étalonnage	<input checked="" type="checkbox"/> Etalonnage	<input checked="" type="checkbox"/> Table d'événements
<input checked="" type="checkbox"/> Afficher la configuration	<input checked="" type="checkbox"/> Temps Réel	<input checked="" type="checkbox"/> Envoyer les résultats vers Modbus	<input checked="" type="checkbox"/> Charger une méthode		<input checked="" type="checkbox"/> Programmation d'une séquence d'étalonnage	<input checked="" type="checkbox"/> Identification	<input checked="" type="checkbox"/> Couplage
<input checked="" type="checkbox"/> Lecture de la configuration	<input checked="" type="checkbox"/> Traitement				<input checked="" type="checkbox"/> Etalonnage non métrologie	<input checked="" type="checkbox"/> Table des composants	<input checked="" type="checkbox"/> Excel
<input checked="" type="checkbox"/> Configuration	<input checked="" type="checkbox"/> Compare					<input checked="" type="checkbox"/> Calculs	<input checked="" type="checkbox"/> Commandes
<input checked="" type="checkbox"/> Vanne	<input checked="" type="checkbox"/> Démarrer une séquence						<input checked="" type="checkbox"/> Sortie analogique
<input checked="" type="checkbox"/> Pompe auxiliaire	<input checked="" type="checkbox"/> Sélectionner une séquence						
<input checked="" type="checkbox"/> Débit	<input checked="" type="checkbox"/> Démarrer un étalonnage						
<input checked="" type="checkbox"/> Options d'analyse	<input checked="" type="checkbox"/> Sélectionner un étalonnage						
<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"/> Bus de terrain							

Pour gérer la complexité des mots de passe, un « Administrateur » peut le faire en sélectionnant le menu « Utilisateur » et en cliquant sur « Paramètres utilisateur » puis « Mot de passe »



8. Annexe I : 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...

Pour obtenir de l'aide sur la navigation sur un chromatogramme, cliquez sur le bouton  ce qui affiche la série d'icônes ci-dessous puis cliquez sur 



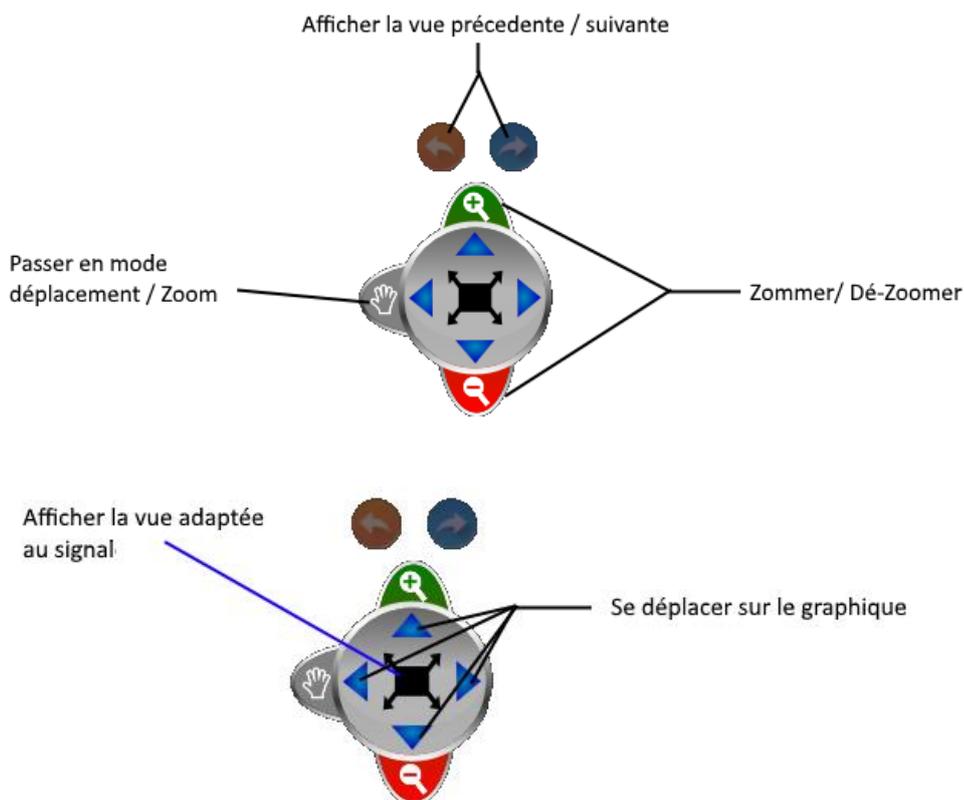
8.1 Zoom / Dézoom

- 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

8.2 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

8.3 Palette

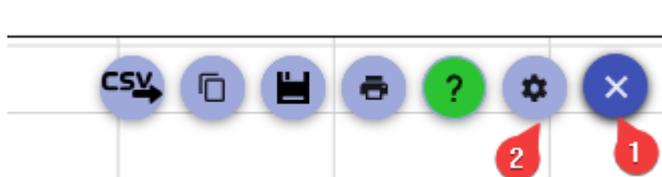


8.4 Raccourcis

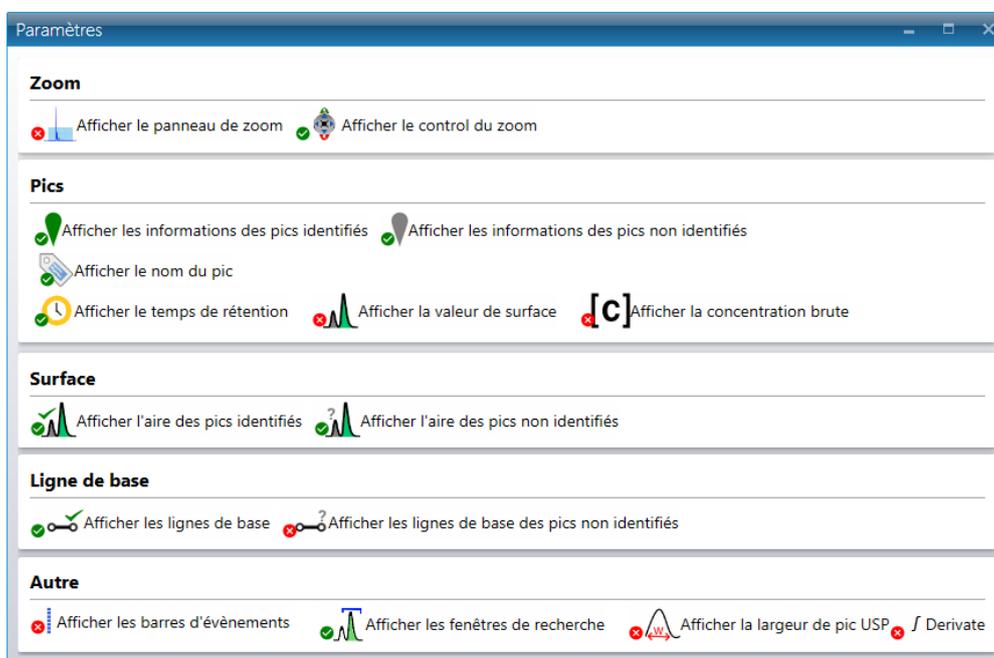
- F11 : Copie d'écran du graphique dans le presse-papier
- Ctrl + S : Sauvegarde le graphique en format image

8.5 Paramétrage des éléments à afficher

Plusieurs indicateurs d'intégration ou d'affichage peuvent être ajoutés au chromatogramme. Pour cela, cliquez sur le bouton  puis sur 



Voici les éléments disponibles :

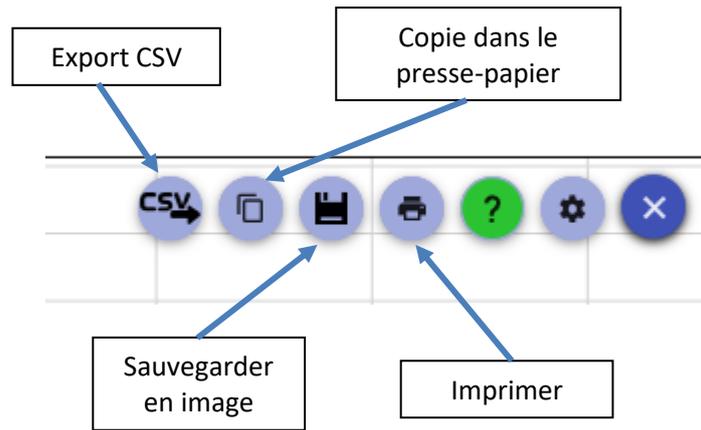


8.6 Exportation

Plusieurs types d'exportation sont disponibles :

- Dans un format CSV
- Dans le presse-papier
- Dans un format image
- Dans un format imprimable

Pour exporter un chromatogramme, cliquez sur le bouton  ; la série d'icônes ci-dessous s'affiche :



9. Annexe II : Principes traitement d'intégration

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



9.1 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 lissé pour enlever au maximum le bruit et améliorer la détection des composés.
- Ensuite, le signal lissé est analysé pour détecter les variations sur le signal afin de trouver le début d'un pic, d'un sommet et la fin. À 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.

9.1.1 Les événements agissant sur 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 négatifs 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.

Pente début de pic

Cet événement correspond à la pente en début de pic exprimée en $\mu\text{V/s}$ et permet de fixer le seuil de détection des éléments significatifs.

Par défaut, le logiciel utilise une valeur de 0,001 $\mu\text{V/S}$.

Pente fin de pic

Cet événement correspond à la pente en fin de pic exprimée en $\mu\text{V/s}$ et permet de fixer le seuil de détection des éléments significatifs.

Par défaut, le logiciel utilise une valeur de 0 $\mu\text{V/S}$.

Pente détection apex

Cet événement correspond à la pente au sommet de pic exprimée en $\mu\text{V/s}$ et permet de fixer le seuil de détection des éléments significatifs.

Par défaut, le logiciel utilise une valeur de 0,001 $\mu\text{V/S}$.

9.1.2 Correction de ligne de base

Détection de ligne de base

Cet événement possède 2 états ON et OFF.

L'utilisation de cet événement permet de corriger un retour à la ligne de base trop tôt ou trop tard, ce qui entraîne un croisement de la ligne de base.

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

Forçage de ligne de base à toutes les vallées

Ce 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'événement est inactif par défaut.

Ligne de base tangentielle

Sépare les petits pics du pic majoritaire, le pic majoritaire est intégré du début du « groupe » de pics à la fin.

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.

9.1.3 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.

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 2.

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 2147483647.

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 2.

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 2147483647.

Concentration minimale pour rejet

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

La valeur par défaut est de 0.

9.2 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.

9.2.1 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.

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.

9.2.2 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 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.

9.2.3 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.

9.2.4 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.

9.3 Étalonnage

Soprane CDS 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. Étalonnage manuel

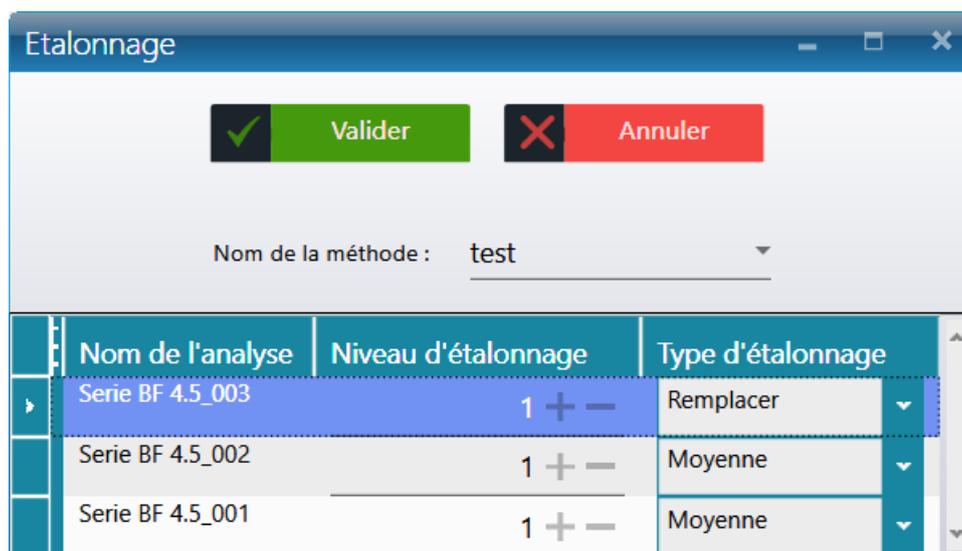
L'étalonnage manuel consiste à modifier directement les coefficients de réponse de la méthode par le module de traitement. Il suffit donc de lancer l'interface de traitement, de charger une analyse réalisée sur le gaz étalon et de charger la méthode associée à cette analyse, de sélectionner le module analytique, de sélectionner l'affichage dans le mode Calibration (voir chapitre [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 des analyses](#)).

2. Étalonnage 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 CDS 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. Étalonnage 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.

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

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. Étalonnage 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 [Menu Journaux](#)).

9.3.1 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.

9.3.2 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 CDS 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 souhaitée 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 CDS 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 concentrations 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 CDS 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.

9.3.3 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 CDS 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 CDS 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'on 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 CDS 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 CDS 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 CDS rejette l'étalonnage. Le rejet est signalé et Soprane CDS 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 CDS 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.

Voir aussi les chapitres [Étalonnage de référence](#) et [Rapport d'étalonnage](#).

10. Annexe III : Guide d'intégration

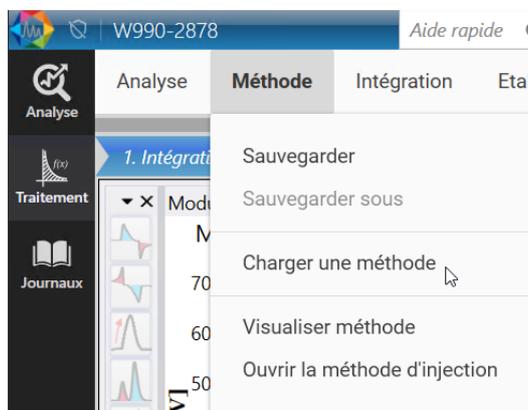
Cette annexe décrit un flux de travail standardisé pour l'intégration des chromatogrammes dans Soprane CDS.

10.1 Accéder au menu d'intégration

Pour accéder au menu d'intégration, cliquez sur l'onglet Traitement situé dans le menu à gauche dans Soprane CDS.

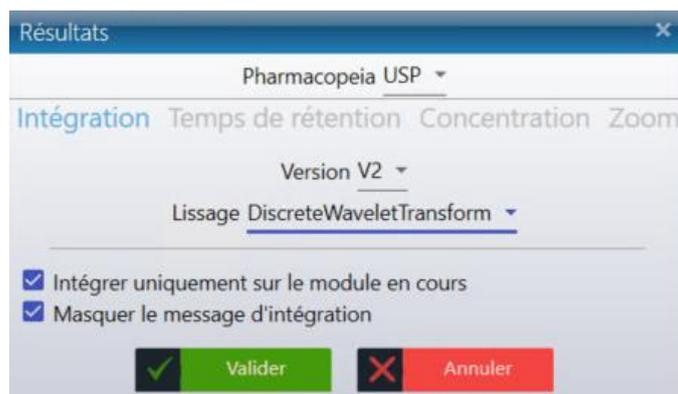
10.2 Sélection de la méthode de traitement

Cliquez sur Méthode > Charger une méthode. Sélectionnez ensuite la méthode appropriée.



10.3 Configuration de l'intégration

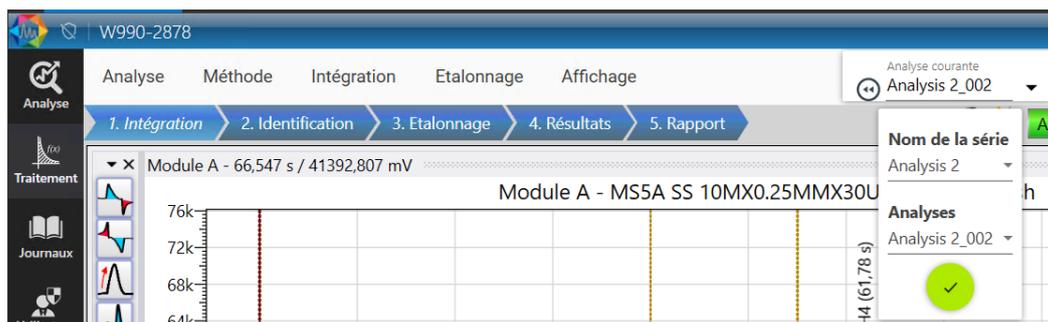
Dans le menu Configuration de l'intégration > du traitement, assurez-vous que la version utilisée est V2 avec le lissage DiscreteWaveletTransform



10.4 Sélection de l'analyse

Les analyses utilisées pour définir les paramètres d'intégration doivent être représentatives des analyses futures traitées avec cette méthode (échantillon similaire, analytes similaires).

Dans le menu supérieur du milieu, choisissez d'abord la série, puis le numéro d'analyse. Validez.



10.5 Flux de travail d'intégration

1. Détection des pics – définissez les régions d'intérêt dans le chromatogramme
2. Rejets de hauteur et de surface minimaux – supprimez les pics petits et non pertinents
3. Pente de début et d'arrêt des pics – ajustez l'intégration des pics
4. Pour les pics coelués :
 - a. Détection tangentielle
 - b. Détection de ligne de base pour toutes les vallées

10.6 Paramètres d'intégration

10.6.1 Temps des paramètres d'intégration

Chaque paramètre d'intégration est effectif après avoir été défini dans la table des paramètres. Il est actif jusqu'à la fin du chromatogramme ou lorsque le même paramètre d'intégration est réutilisé ultérieurement.

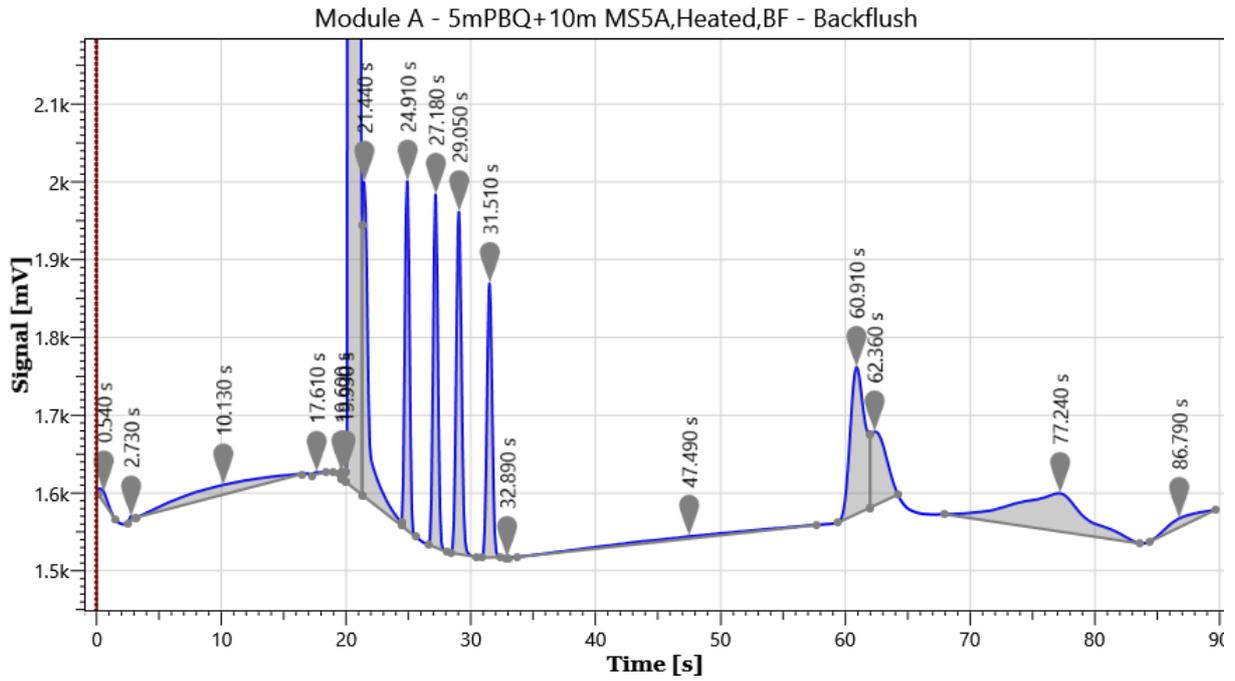
10.6.2 Détection des pics

Ce paramètre définit les régions à prendre en compte pour l'intégration.

- Si la détection de pic n'est pas cochée, aucun pic ne sera intégré après le temps défini pour le paramètre.
- Si la détection des pics est cochée, le moteur d'intégration recherchera les pics après l'heure définie.

Exemple :

Dans le chromatogramme ci-dessous, le pic de la matrice élué à 20 secondes. Après 67 secondes, le backflush provoque une fluctuation des lignes de base.

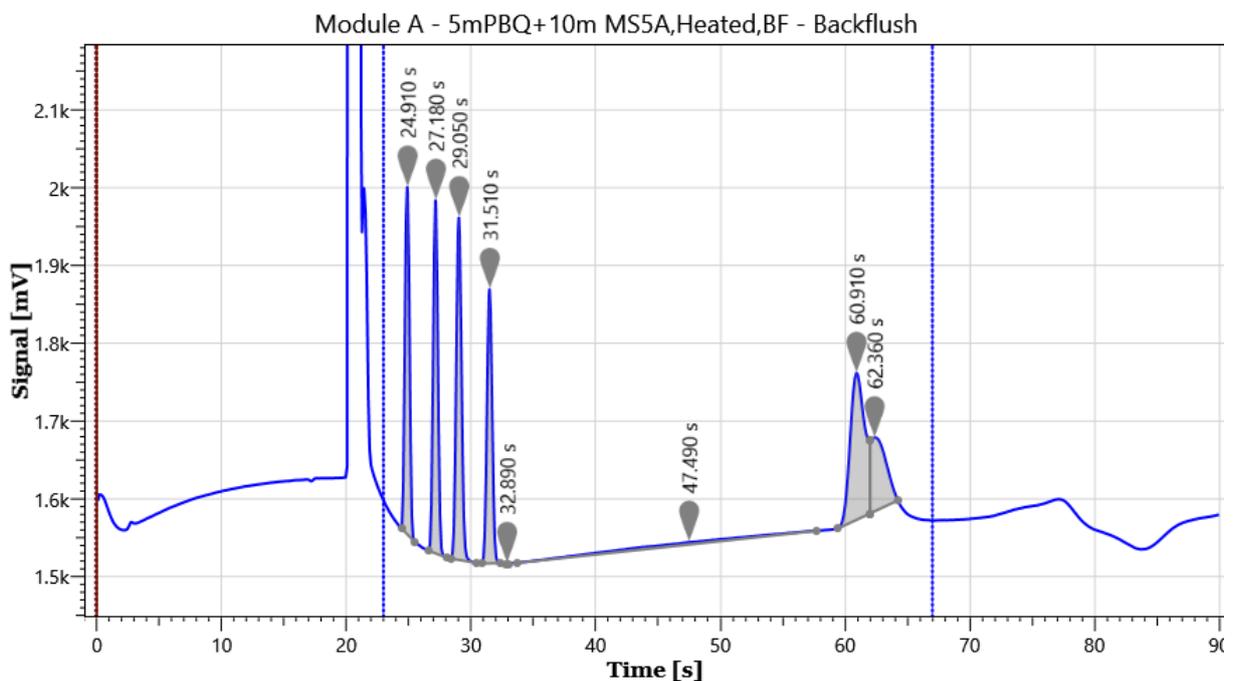


Étant donné que le pic de matrice ne nécessite pas d'intégration et qu'il n'y a pas de coélution de pic dans l'interférence de backflush, nous pouvons exclure ces régions de l'intégration.

Paramètres d'intégration :

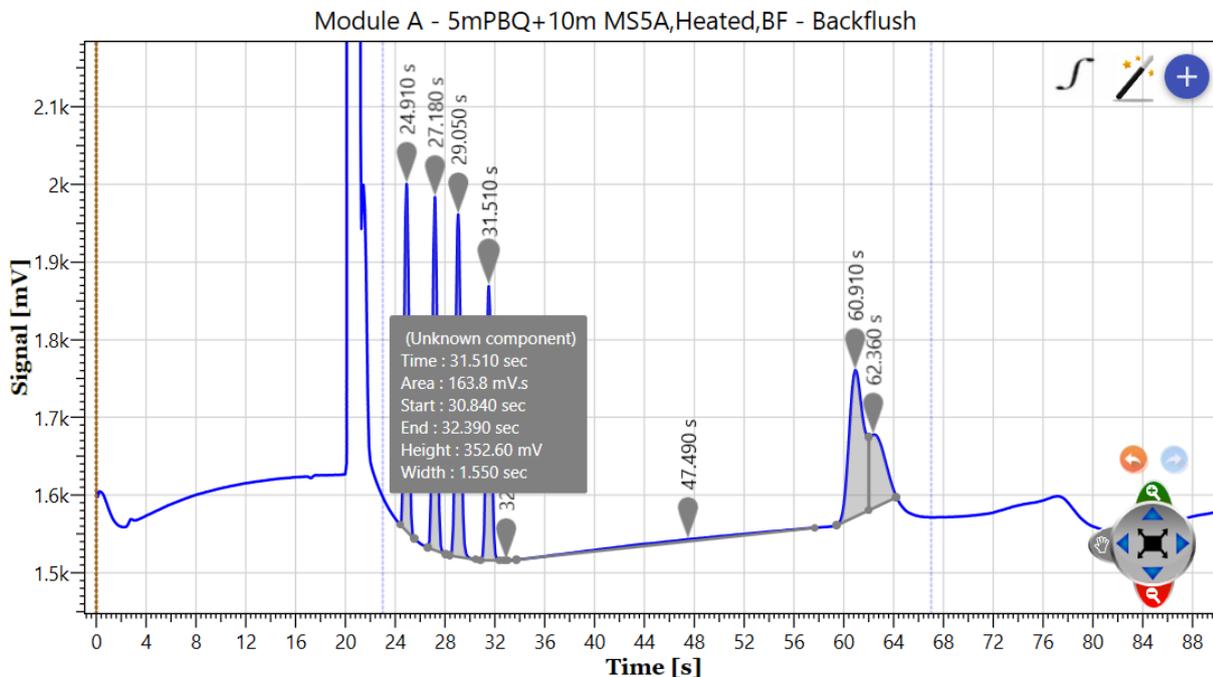
0.00	Détection de pic	<input type="checkbox"/>	Pas d'intégration après 0 seconde
23.00	Détection de pic	<input checked="" type="checkbox"/>	Intégration des pics possible après 23 secondes
67.00	Détection de pic	<input type="checkbox"/>	Pas d'intégration après 67 secondes

Chromatogramme résultant :



10.6.3 Rejets minimaux de hauteur et de surface

Les paramètres de rejet de hauteur minimale et de surface suppriment les pics plus petits en surface ou en hauteur selon les critères définis avec les paramètres. Placer le curseur de la souris sur un pic affichera sa hauteur et sa surface (voir ci-dessous). La comparaison des surfaces et des hauteurs des pics réels avec des pics faussement positifs est généralement utilisée pour définir la hauteur minimale et les rejets de surface.



Remarques importantes :

- Il est important de ne pas être trop restrictif lors de la définition de rejets minimaux. Les analyses futures pourraient inclure des composés à des concentrations plus faibles que l'analyse utilisée pour définir des zones et des hauteurs minimales.
- En cas d'interférences intégrées importantes, il est préférable d'utiliser la hauteur plutôt que le rejet de surface.

Exemple :

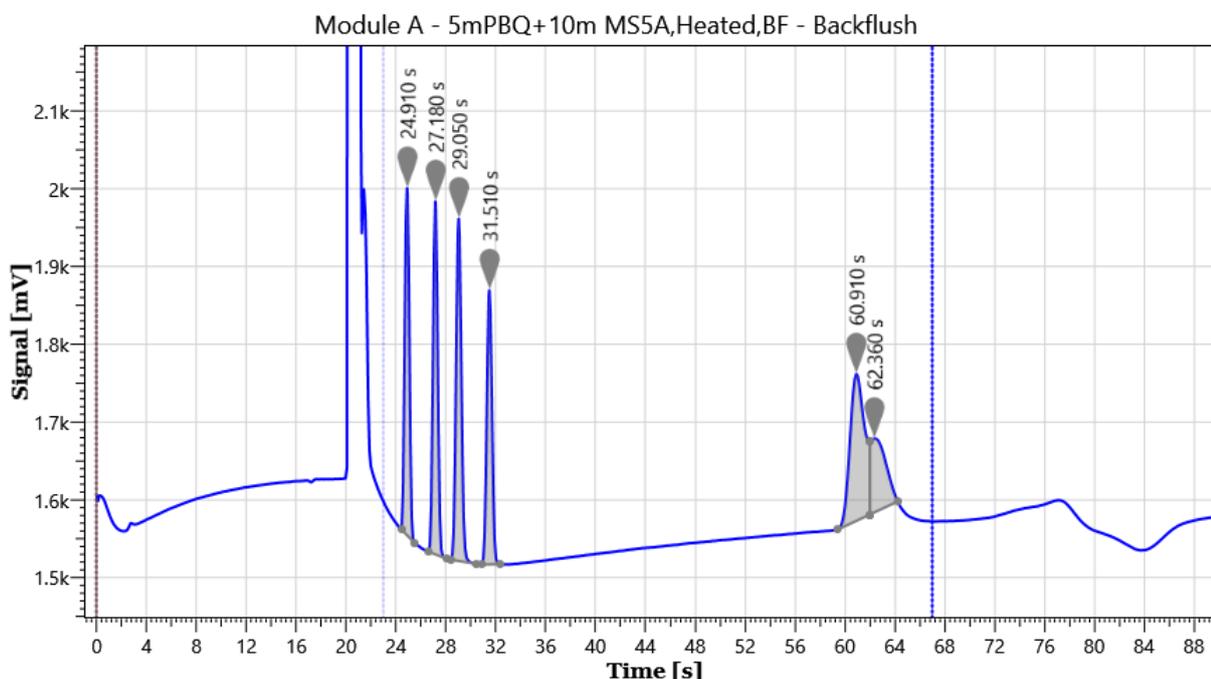
Dans le chromatogramme ci-dessus, deux faux positifs sont intégrés avec des pics réels.

Durée de rétention (s)	Pic ou interférence	Superficie mV.s	Hauteur mV
31,51	Pic	163,8	352,6
32,89	Interférence	0,0	0,23
47,49	Interférence	42,4	3,07
60,91	Pic avec coélution	256,3	188,5

Paramètres d'intégration :

0.00	Hauteur minimale pour rejet	5 mV	Tous les pics inférieurs à 5 mV sont supprimés
0.00	Aire minimale pour rejet	10 mV.s	Tous les pics inférieurs à 10 mV.s sont supprimés

Chromatogramme résultant :



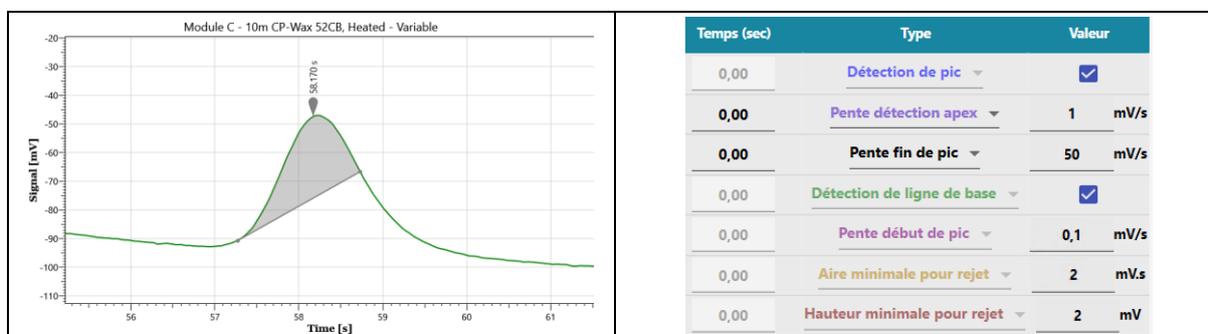
10.6.4 Pentés de début et de fin de pic

Dans des situations occasionnelles, l'intégration de pic peut démarrer/s'arrêter trop tôt ou trop tard. La pente début de pic et la pente fin de pic sont utilisées pour l'ajuster.

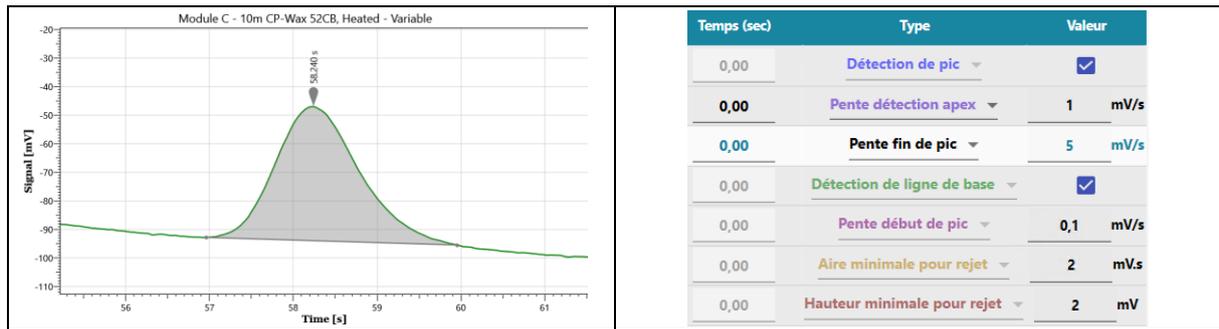
Cinq situations possibles :

1	Pic est bien intégré	Laisser les pentes de début et de fin de pic telles quelles
2	L'intégration des pics commence trop tôt	Augmenter la valeur de la pente de début de pic
3	L'intégration des pics commence trop tard	Diminuer la valeur de la pente de début de pic
4	L'intégration des pics s'arrête trop tôt	Augmenter la valeur de la pente de fin de pic
5	L'intégration des pics s'arrête trop tard	Diminuer la valeur de la pente de fin de pic

Exemples :



En ajustant la pente fin de pic de 50 à 1 mV/s, l'intégration de crête est améliorée.

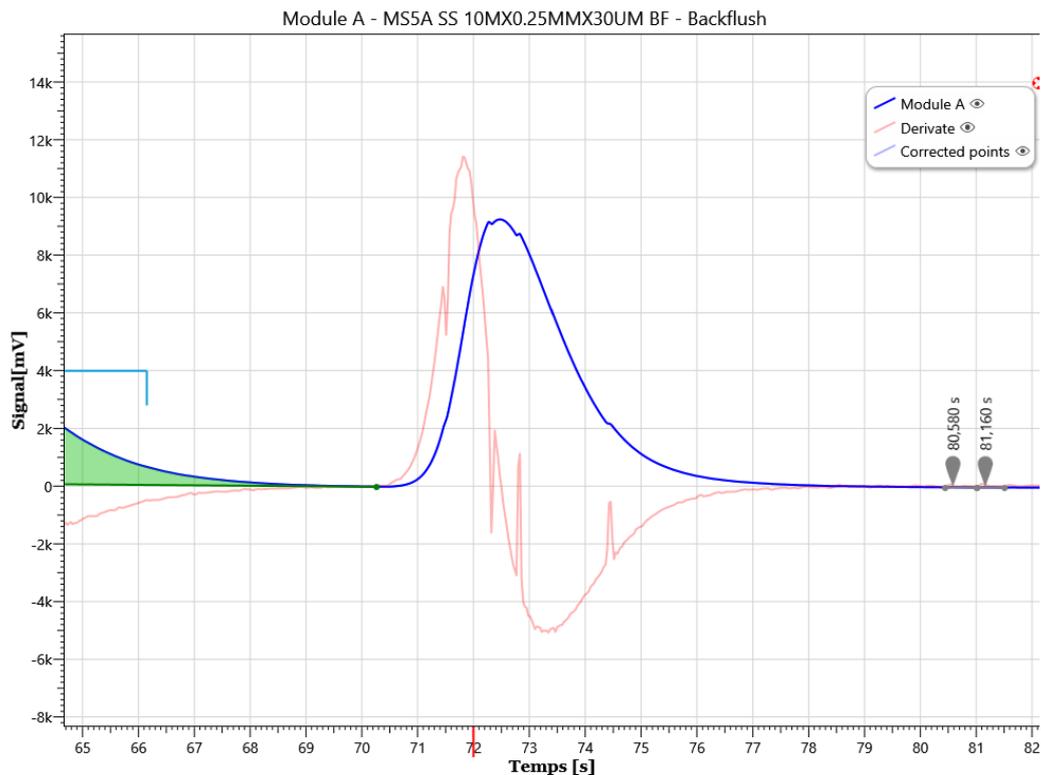


Remarques importantes : Les mêmes valeurs de pente de début de pic et de pente de fin de pic peuvent ne pas fonctionner pour tous les pics du chromatogramme. Ces paramètres peuvent être utilisés plusieurs fois avec des temps de réglage différents, de sorte que chaque pic est intégré avec les paramètres appropriés.

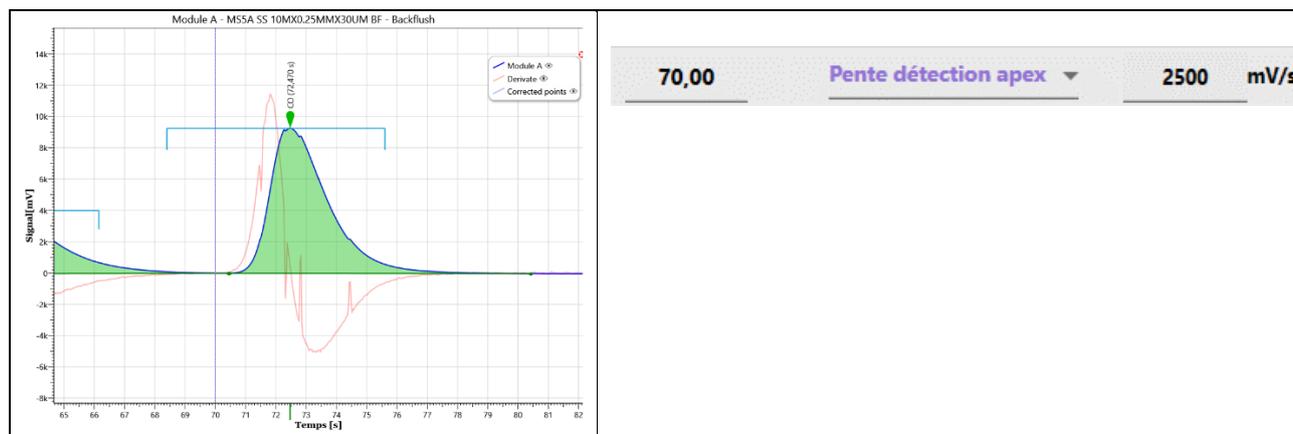
10.6.5 Sommet

Nous avons eu un signal avec de petites fluctuations au sommet du pic.

- Le signal dérivé (en rouge) croise 0.
- Aucun pic détecté....

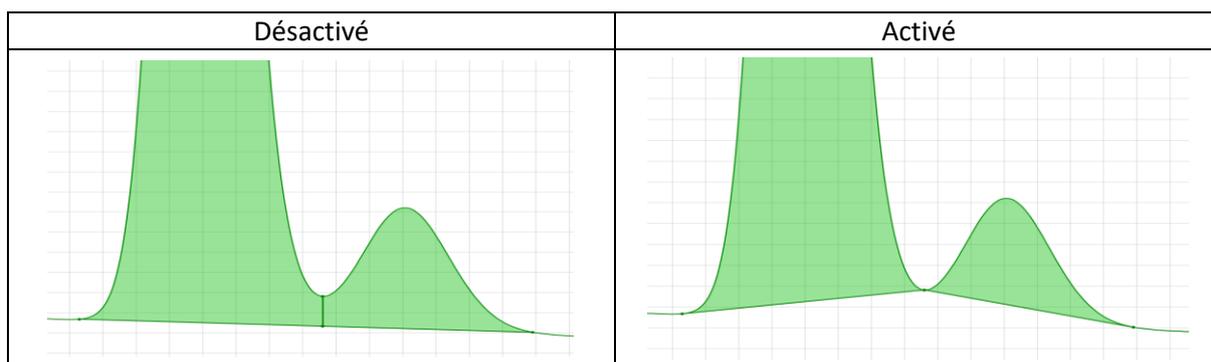


En fixant une valeur apex au-dessus des fluctuations de la dérivée (2500), le pic est correctement intégré :

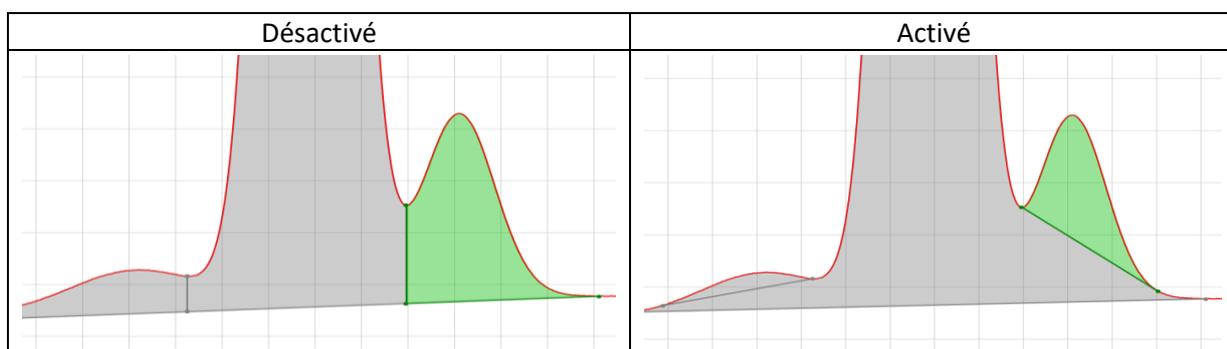


10.6.6 Paramètres spécifiques pour la coélution

a) Forcer la détection de ligne de base pour toutes les vallées



b) Détection tangentielle



10.7 Mise à jour Soprane CDS

Ce guide a été rédigé avec la version 3.0.353 de Soprane CDS. Si vous utilisez une version plus ancienne, vous pouvez télécharger la version mise à jour sur notre site Web.

<https://www.srainstruments.fr/p/soprane-ii/>

11. Annexe IV : Réglage du temps de backflush

11.1 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.

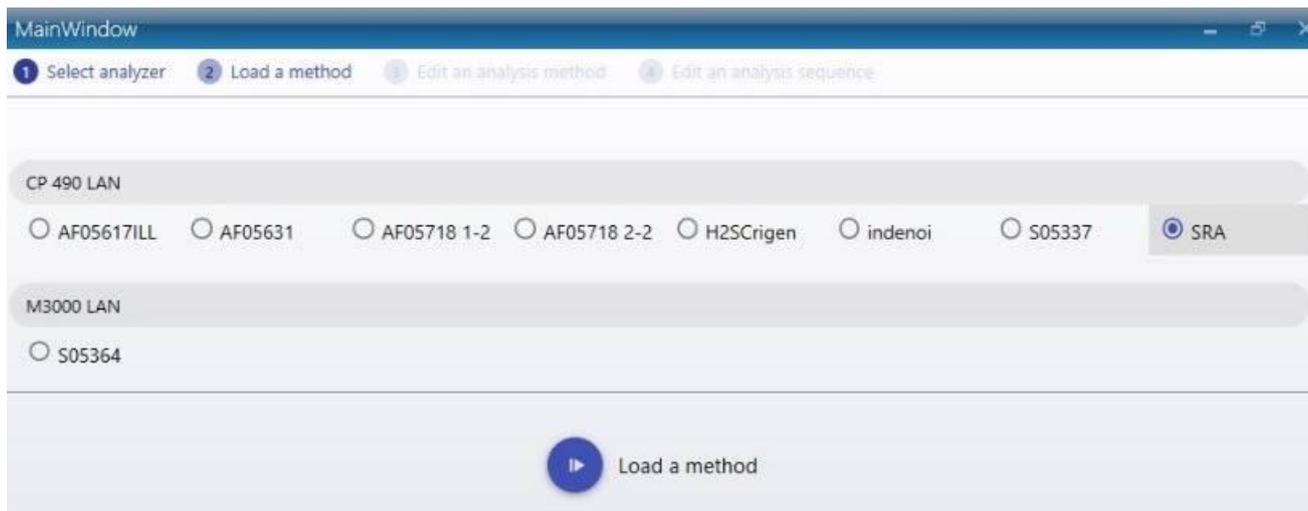
11.2 Comment ajuster le temps de backflush avec Soprane CDS ?

! 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.

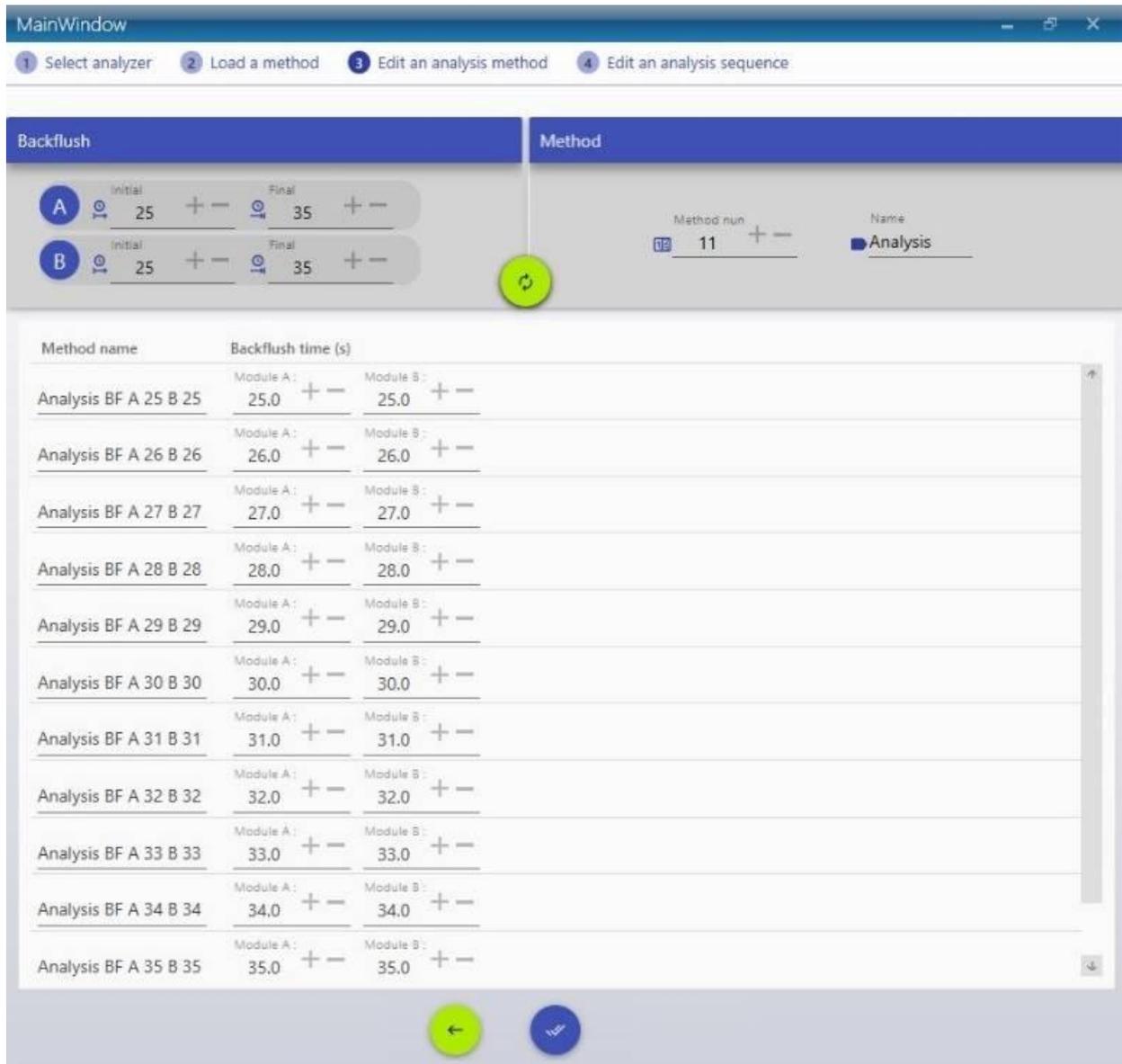
1. Ouvrez "SRA.Soprane.BackflushMethodGenerator.exe" dans "C : \Soprane II".
2. Sélectionnez l'analyseur et cliquez sur "Charger méthode" :



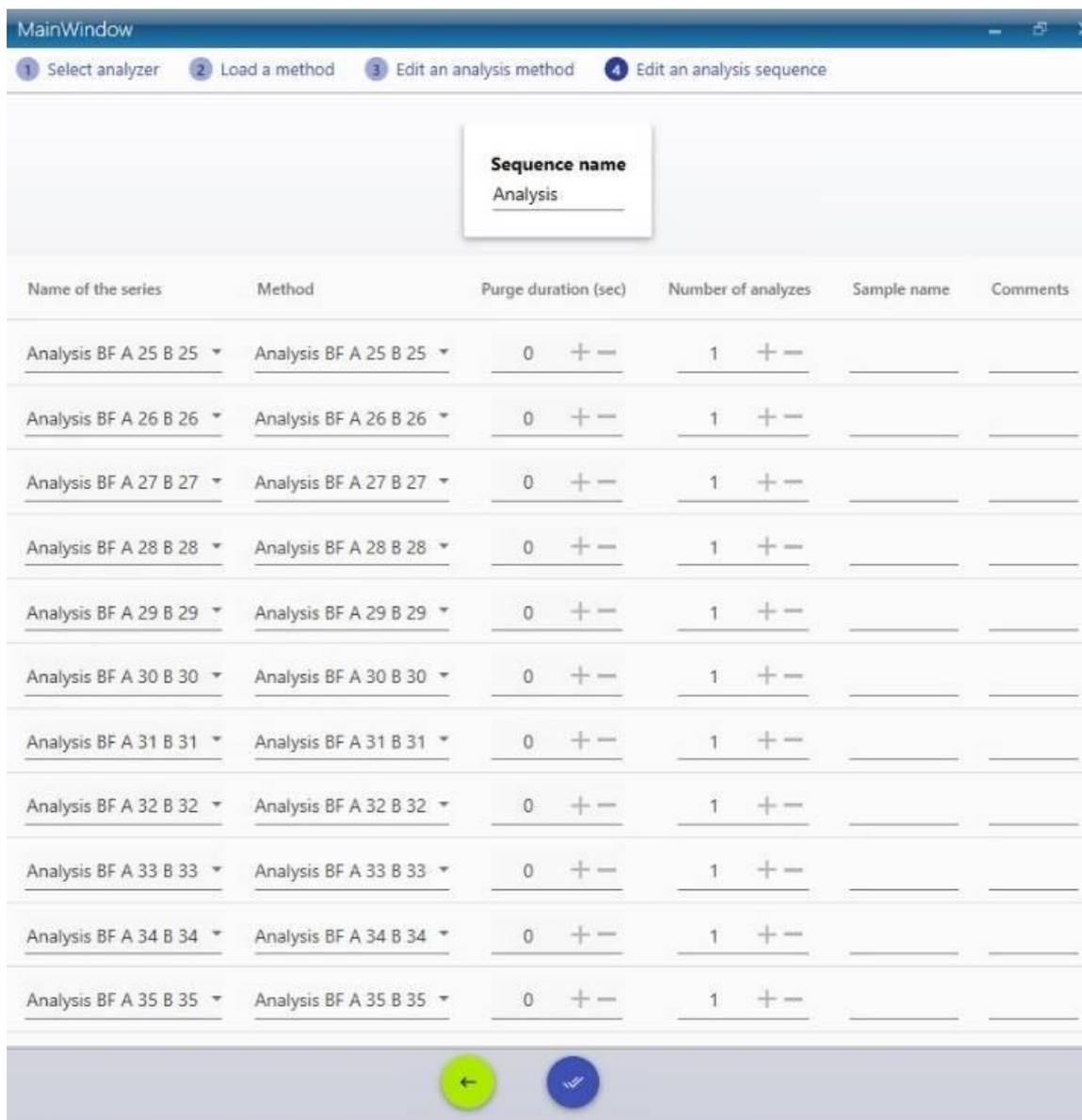
3. Sélectionnez la méthode analytique à développer :

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.



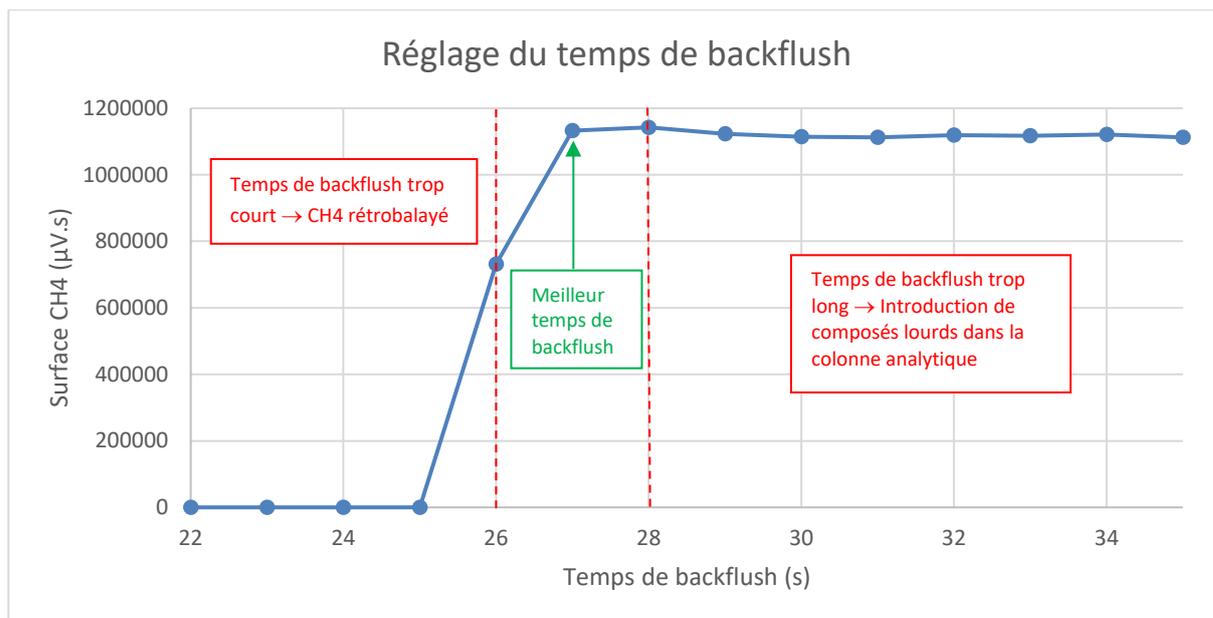
8. Cliquez sur  pour créer automatiquement une séquence d'analyse avec une analyse pour chaque méthode précédemment générée.
9. Donnez un nom à cette séquence et cliquez sur .



10. Connectez un étalon contenant CH₄ au MicroGC, ouvrez Soprane CDS, 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 :



- Réglez le temps de backflush avec précision à plus ou moins 0,1 seconde.
- 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.

12. Annexe V : Filtrer les données

12.1 Filtre automatique

La plupart des tableaux dans Soprane CDS 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	Analyse		
Analyse_677	8/29/2016 3:42 PM	Analyse			
Serie BF 4.5_001	10/25/2016 3:21...	Serie BF 4	BF 4.5 / 8,4 @f		
Serie BF 4.5_002	10/25/2016 3:22...	Serie BF 4	ef / ezfezf @ 5.8,eee		
Serie BF 4.5_003	10/25/2016 3:24...	Serie BF 4	eggetgttr		
Serie BF 4.5_004	11/3/2016 3:39 PM	Serie BF 4	Serie BF 4.5		
Serie BF 4.5_005	11/3/2016 3:41 PM	Serie BF 4	zfeffzfez		
Serie BF 4.5_006	11/3/2016 3:57 PM	Serie BF 4			

12.2 Filtre 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 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 5:22	16020402_Air

- Filtres conditionnels

Filtre	Description	Exemple
AND	Inclut toutes les données suivant le AND	[Bonjour AND tout le monde]
NOT	Exclut toutes les données suivant le NOT	[NOT 5]
OR	Inclut toutes les données suivant le OR	[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.

Note : 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 inférieures 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

13. Annexe VI : Exportation des données

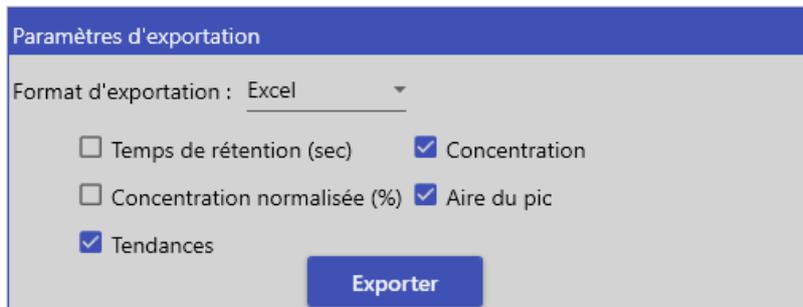
Dans la grande majorité des tableaux, les données peuvent être exportables à n'importe quel moment.

Les boutons suivants      permettent différents types d'exportation.

-  : Exporte les données dans un format ouvrable par Excel, CSV ou un fichier imprimable
-  : 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.

13.1 Exportation vers Excel

En cliquant sur le bouton  , une fenêtre s'ouvre et propose une liste de format à exporter, choisissez Excel.



13.2 Exportation vers Csv

En cliquant sur le bouton  , une fenêtre s'ouvre et propose 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 :

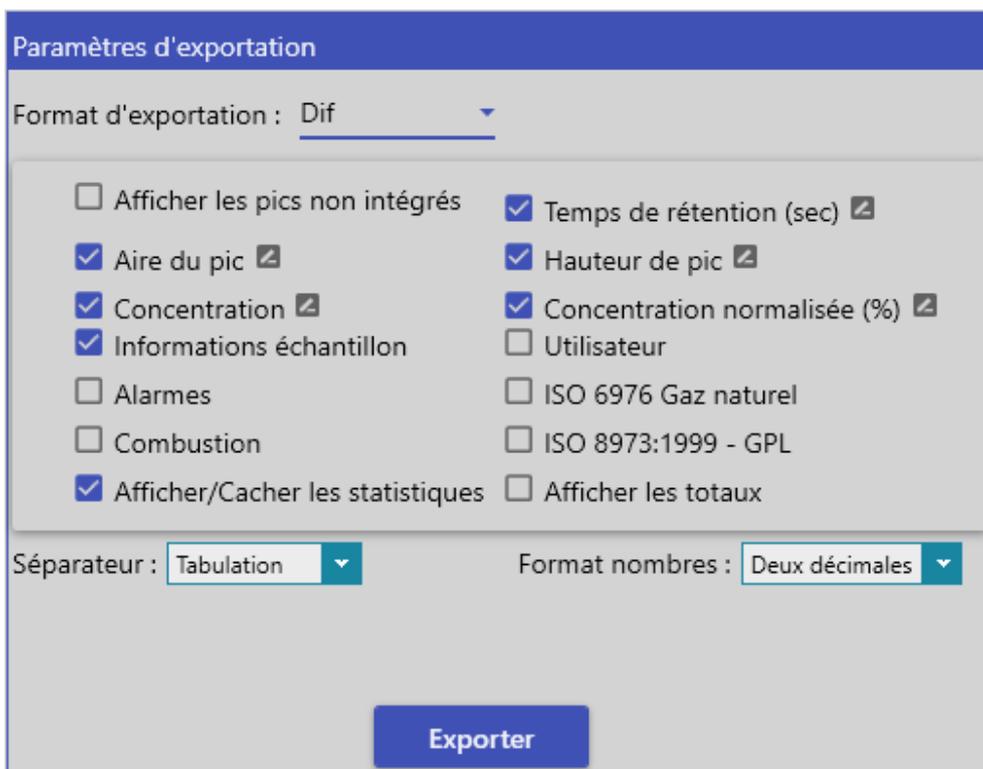
- Date courte (jour/mois/année)
- Date complète (exemple *mardi 18 octobre 2016*)
- Date complète et heure courte (exemple *mardi 18 octobre 2016 09 :05*)
- Date complète et heure longue (exemple *mardi 18 octobre 2016 09 :05 :45*)
- Date courte et heure courte (exemple *18/10/2016 09 :05*)
- Date courte et heure longue (exemple *18/10/2016 09 :05 :45*)
- Mois et jour
- Année et mois

Les 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

13.3 Exportation vers Dif

En cliquant sur le bouton , une fenêtre s'ouvre et propose une liste de format à exporter, choisissez Dif.



Paramètres d'exportation

Format d'exportation : Dif

<input type="checkbox"/> Afficher les pics non intégrés	<input checked="" type="checkbox"/> Temps de rétention (sec)
<input checked="" type="checkbox"/> Aire du pic	<input checked="" type="checkbox"/> Hauteur de pic
<input checked="" type="checkbox"/> Concentration	<input checked="" type="checkbox"/> Concentration normalisée (%)
<input checked="" type="checkbox"/> Informations échantillon	<input type="checkbox"/> Utilisateur
<input type="checkbox"/> Alarmes	<input type="checkbox"/> ISO 6976 Gaz naturel
<input type="checkbox"/> Combustion	<input type="checkbox"/> ISO 8973:1999 - GPL
<input checked="" type="checkbox"/> Afficher/Cacher les statistiques	<input type="checkbox"/> Afficher les totaux

Séparateur : Tabulation Format nombres : Deux décimales

Exporter

Soprane CDS 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.

Si besoin, ce fichier peut être généré automatiquement après chaque analyse. Pour ce faire, cliquez sur le bouton de configuration, puis cochez la case « Création de fichier Dif »



13.4 Format STARE (compatible avec une TGA)

Ce format permet de créer un fichier export de Soprane CDS des courbes d'émission afin de l'importer directement dans le logiciel STARE. Ce fichier txt a besoin d'un certain format.

La première colonne est le temps. Ce temps est l'axe des abscisses. Ensuite viennent les différents composés de la méthode Soprane CDS. La dernière ligne est "\$Columns" qui correspond au nombre de colonnes et dont les valeurs numériques seront importées dans STARE.

Voici un exemple d'export :

```

$Sample Name: QG1212
$Experiment Name: QG1212
$1: Time[s]
$2: H2[]
$3: O2[]
$4: N2[]
$5: CH4[]
$6: CO2[]
$7: C2H6[]
$8: H2S[]
$9: COS[]
$10: C3H8[]
$11: C6+[]
$12: iC4[]
$13: nC4[]
$14: neoC5[]
$15: iC5[]
$16: nC5[]
$17: THT[]
$Columns: 17
0 22,53 0,75 2975,88 116923,75 0,00 51783,13 0,00 0,00 0,00 560,37 795,92 782,59 62,85 450,72 460,04 0,00
180 22,47 0,00 2980,13 117067,81 0,00 51793,42 0,00 0,00 0,00 559,93 794,12 782,06 62,76 450,71 459,31 0,00
360 22,61 48,48 2980,92 117070,83 0,00 51783,87 0,00 0,00 0,00 558,68 794,16 781,40 62,41 450,93 459,43 0,00
720 22,51 0,60 2979,22 117110,49 0,00 51789,41 0,00 0,00 0,00 558,53 792,49 781,90 62,45 450,29 459,22 0,00
900 22,41 0,00 2980,98 117102,84 0,00 51804,73 0,00 0,00 0,00 558,88 792,05 781,48 62,74 450,61 459,58 0,00
540 22,63 0,00 2985,18 117101,90 0,00 51789,59 0,00 0,00 0,00 559,00 793,06 781,45 62,53 450,49 459,33 0,00
    
```

Concernant le temps, il faut convertir la date d'injection en temps TGA qui commence à zéro.

14. Annexe VII : Piloter un Solia depuis Soprane CDS

Soprane CDS, lorsqu'il est associé à MassHunter GC-MS Acquisition et MSD Chemstation Data Analysis, permet de piloter le couplage MicroGC/MS SOLIA.

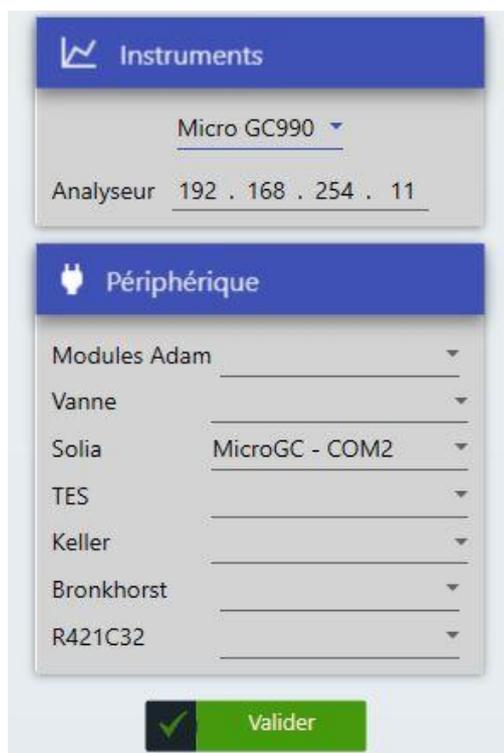
14.1 Installation

La communication entre Soprane CDS, MassHunter et MSD Chemstation Data Analysis s'effectue par l'intermédiaire de macros informatiques. Ces macros sont déployées automatiquement dans l'arborescence de MassHunter et de MSD Chemstation Data Analysis, lors de l'installation de Soprane CDS. Il est donc nécessaire d'installer les logiciels Agilent avant de procéder à l'installation de Soprane CDS.

Installer dans cet ordre : MassHunter GC-MS Acquisition, MSD Chemstation Data Analysis (version MassHunter) puis Soprane CDS en tant qu'administrateur et en suivant les paramètres recommandés.

14.2 Configuration des instruments

14.2.1 Création de l'instrument Solia dans Soprane CDS



The screenshot shows the configuration interface for creating a new instrument. It is divided into two main sections: 'Instruments' and 'Périphérique'.
In the 'Instruments' section, a dropdown menu is set to 'Micro GC990'. Below it, the IP address is entered as '192 . 168 . 254 . 11'.
In the 'Périphérique' section, there are several dropdown menus for different components: 'Modules Adam', 'Vanne', 'Solia', 'TES', 'Keller', 'Bronkhorst', and 'R421C32'. The 'Solia' dropdown is currently set to 'MicroGC - COM2'.
At the bottom of the interface, there is a green button with a checkmark icon and the text 'Valider'.

Depuis Soprane Configurateur, créer un nouvel analyseur en cliquant sur l'icône « + ». Renseigner ensuite l'adresse IP de l'instrument. Sélectionner « COM2 » pour la catégorie Solia (comme sur l'image ci-dessus).

14.2.2 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

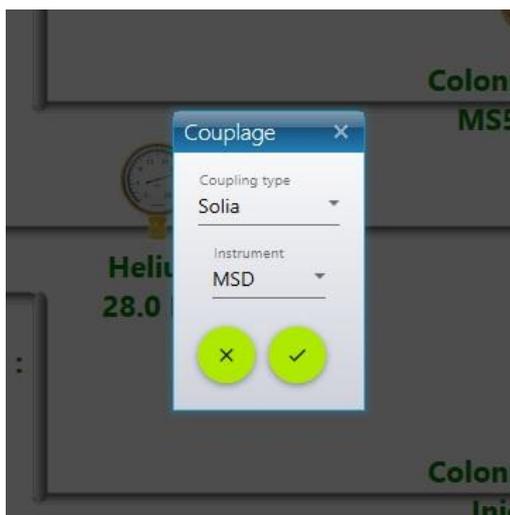
- Renseigner l'adresse IP du MSD. L'adresse IP de l'instrument s'affiche sur l'écran à l'intérieur du capot supérieur du MSD.
- Spécifier la polarité du quadripôle dans « DC Polarity ». Cette information se trouve à l'intérieur du capot supérieur (« Pos » ou « Neg »)
- Sélectionner « None » pour le modèle du GC
- Sélectionner « Workflow mode : Enhanced »

14.3 Configuration du couplage

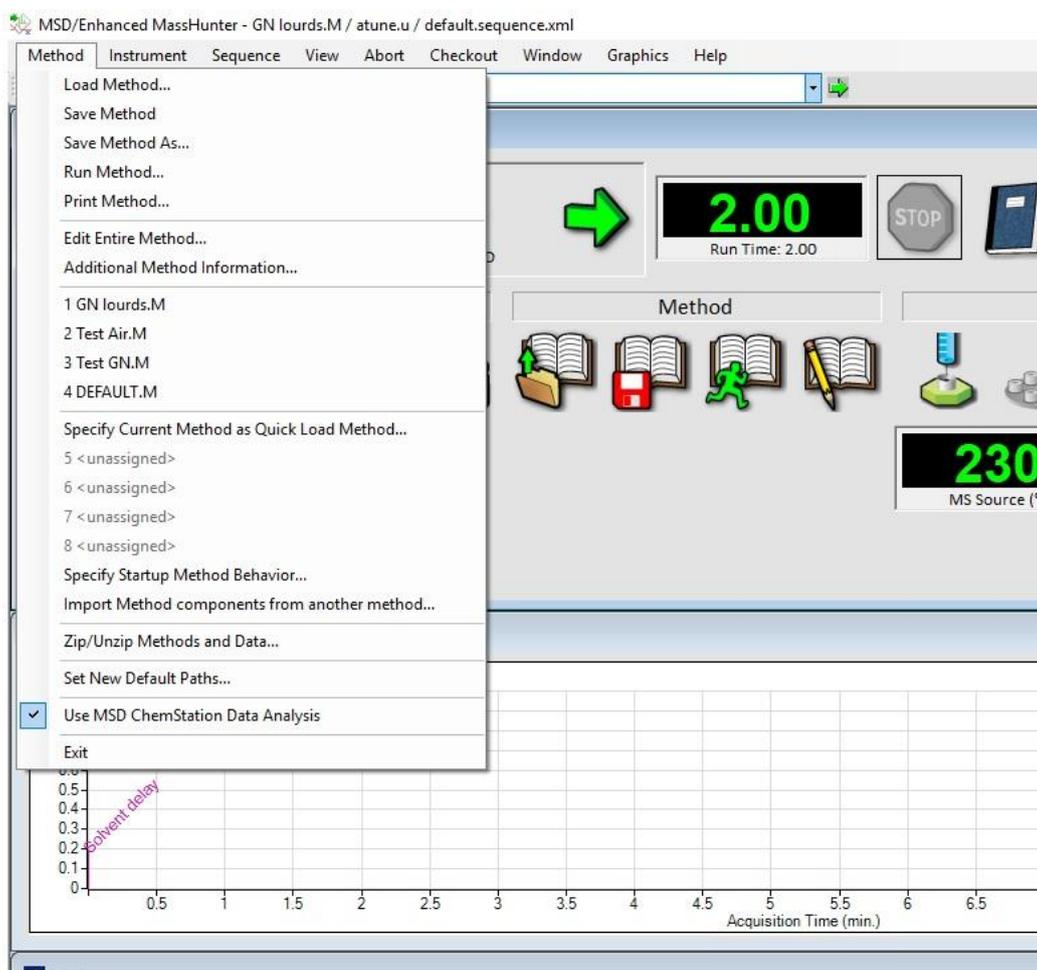
Afin de piloter le couplage, il est nécessaire de paramétrer le couplage dans chacun des logiciels. Dans Soprane CDS, l'activation du couplage s'effectue depuis l'onglet « Options » puis « Couplage ».



Une fenêtre s'ouvre ensuite. Sélectionner « Solia » puis le nom de l'instrument MS créé dans le configurateur GCMS Agilent, comme ci-dessous :

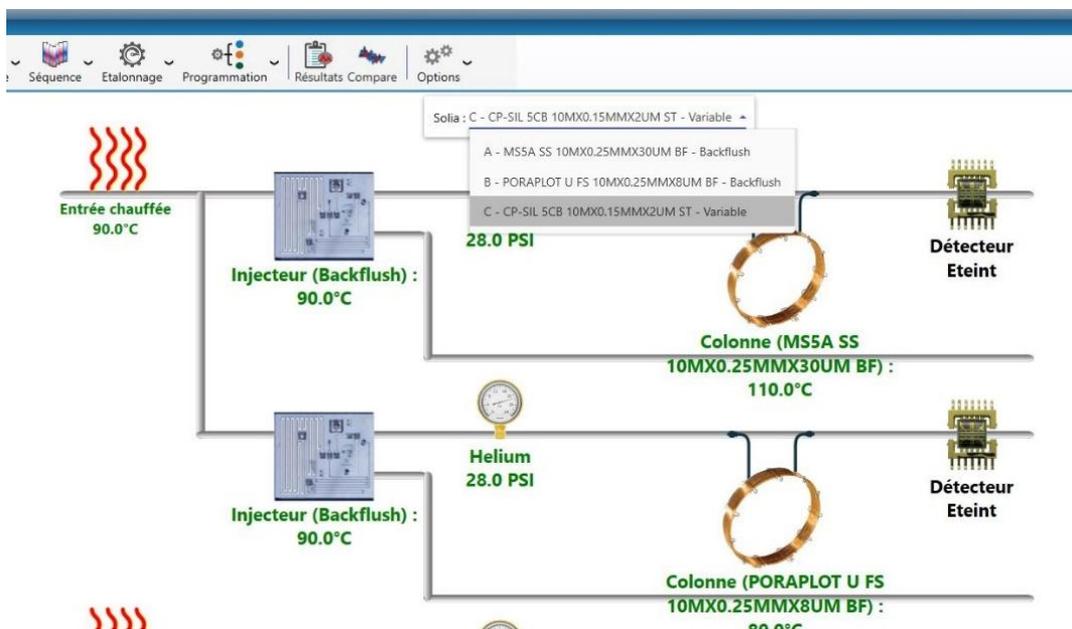


Dans MassHunter, cocher la ligne « Use MSD ChemStation Data Analysis » dans le menu « Method ».



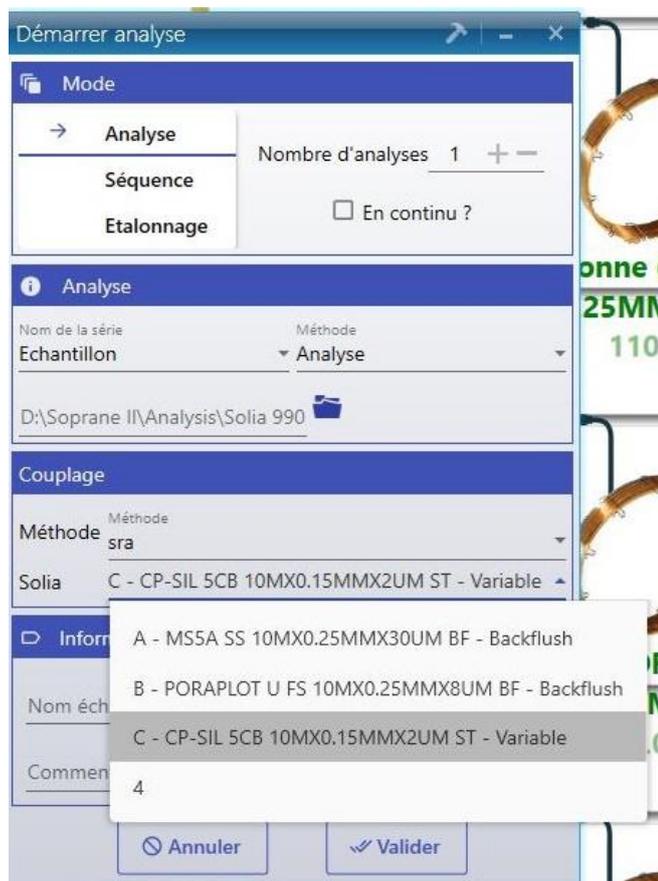
14.4 Contrôle du Solia

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 :

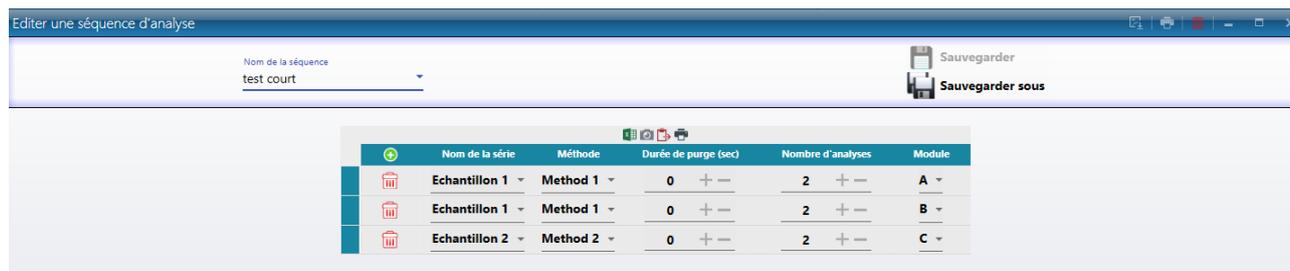


Les noms des différents modules s'affichent à l'écran. Cliquer sur le module à coupler au détecteur MS.

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 μ GC souhaité au détecteur MS pour chaque analyse :



14.4.1 Création d'une méthode d'analyse

Une méthode d'analyse Solia comprend une méthode d'analyse Soprane et une méthode d'analyse MassHunter.

14.4.2 Création d'une méthode d'analyse Soprane CDS

Se référer au chapitre [Gestion des méthodes](#) Erreur ! Source du renvoi introuvable.

14.4.3 Création d'une méthode d'analyse MassHunter

Depuis l'onglet « File », sauvegarder la méthode sous le nom souhaité. Éditer ensuite la méthode.

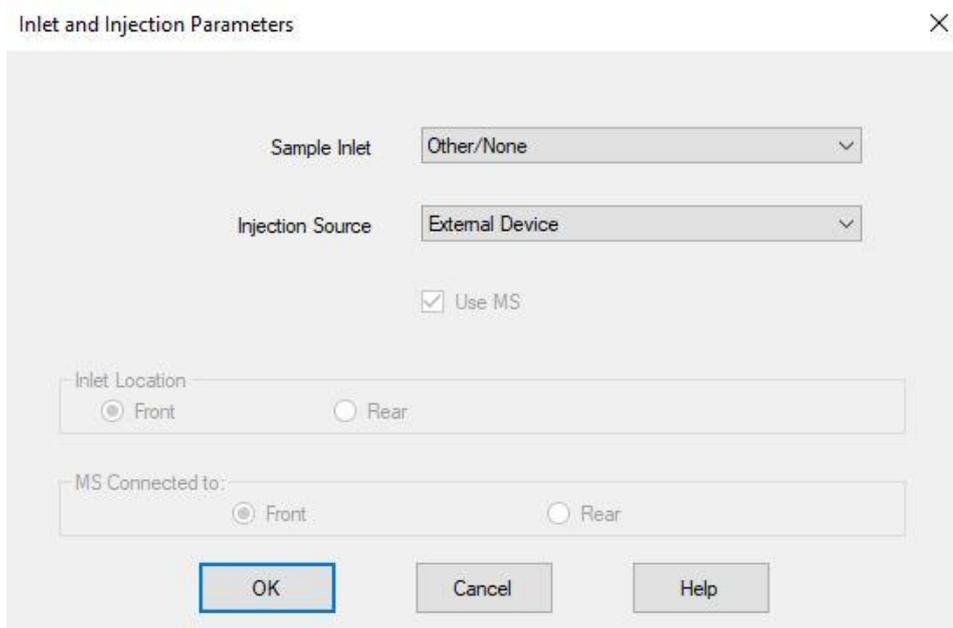
Cocher les trois cases :

Dialog box titled "Edit Method" with a close button (X) in the top right corner. The main area is titled "Check Method Sections to Edit" and contains three checked checkboxes: "Method Information", "Instrument/Acquisition", and "Data Analysis". At the bottom, there are three buttons: "OK" (highlighted with a blue border), "Cancel", and "Help".

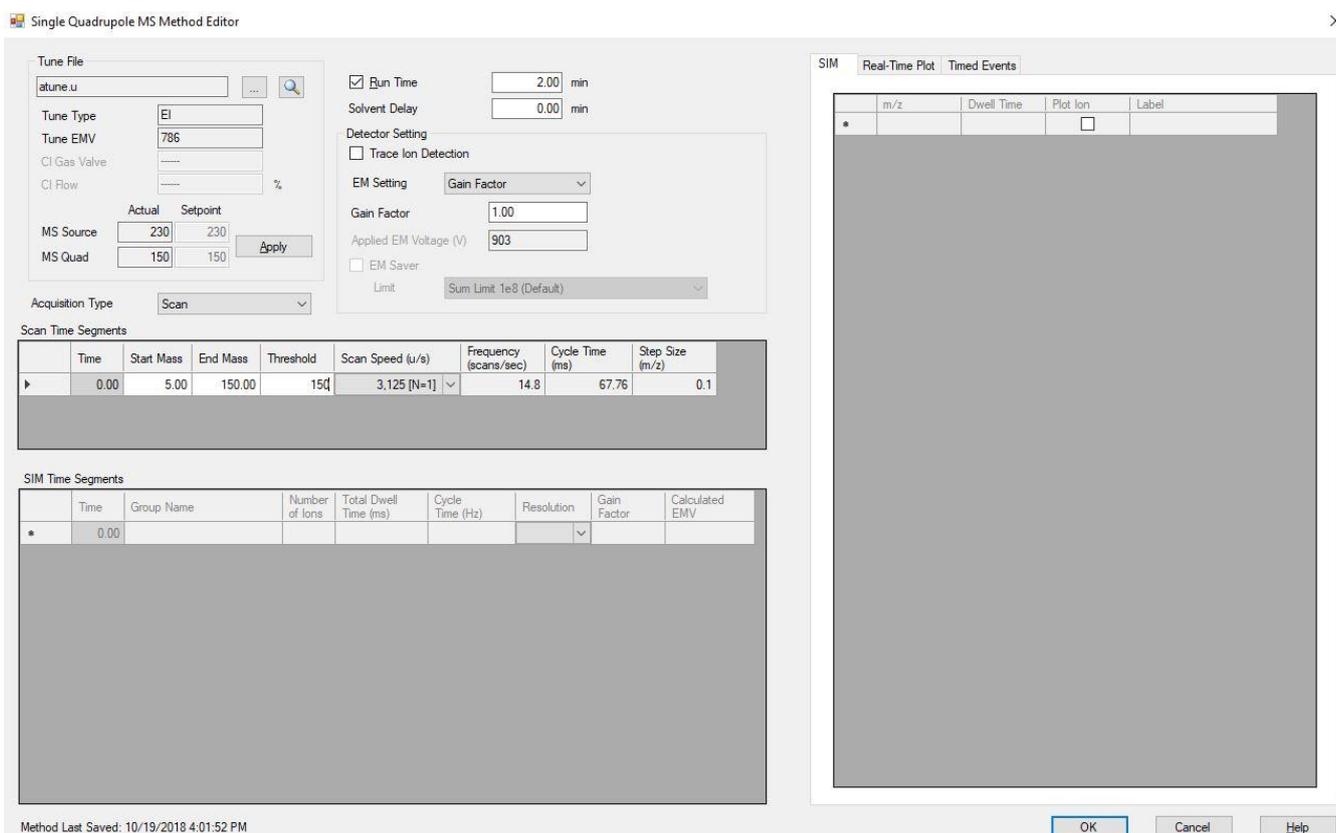
Cocher « Data Acquisition » et « Data Analysis » :

Dialog box titled "Method Information" with a close button (X) in the top right corner. The main area is titled "Method Comments:" and contains a large empty text box. Below this is a checkbox "Save Copy of Method With Data" which is unchecked. The "Method Sections to Run" section contains three checkboxes: "Pre-Run Macros/Commands" (unchecked), "Data Acquisition" (checked), and "Post-Run Macros/Commands" (unchecked). Under "Pre-Run Macros/Commands" and "Post-Run Macros/Commands", there are two rows of controls: "Instrument Control" with a text box and a "Browse..." button, and "Data Analysis" with a text box and a "Browse..." button. At the bottom, there are three buttons: "OK" (highlighted with a blue border), "Cancel", and "Help".

Sélectionner « Sample Inlet : Other/None » et « Injection Source : External Device »

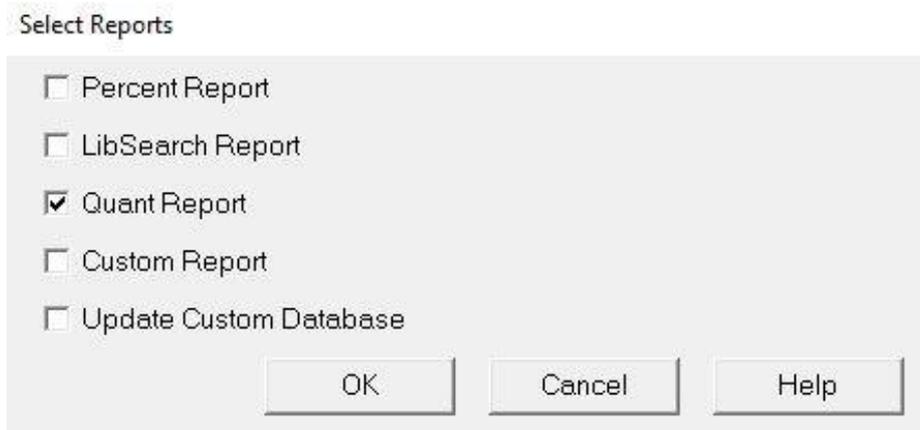


Définir les paramètres MS :



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 CDS.

Cocher « Quant Report » (essentiel pour la transmission des résultats vers Soprane CDS) puis sauvegarder la méthode.



14.5 Traitement des résultats

Soprane CDS offre la possibilité de réunir l'ensemble des résultats μ GC (détection TCD) et MS dans un même tableau, comme ci-dessous.

Résultats μ GC												Résultats MSD				
Analyse	Date d'injection	Séne	Méthode...	C1 (A)	C2 (B)	C3 (B)	iC4 (C)	nC4 (C)	iC5 (C)	nC5 (C)	Total brut	C5 (MSD)	2methylC5 (MSD)	nC4 (MSD)	iC4 (MSD)	SOLIA Mo...
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	1,443	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	
Std (%)				0,114	0,036	0,070	0,058	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.

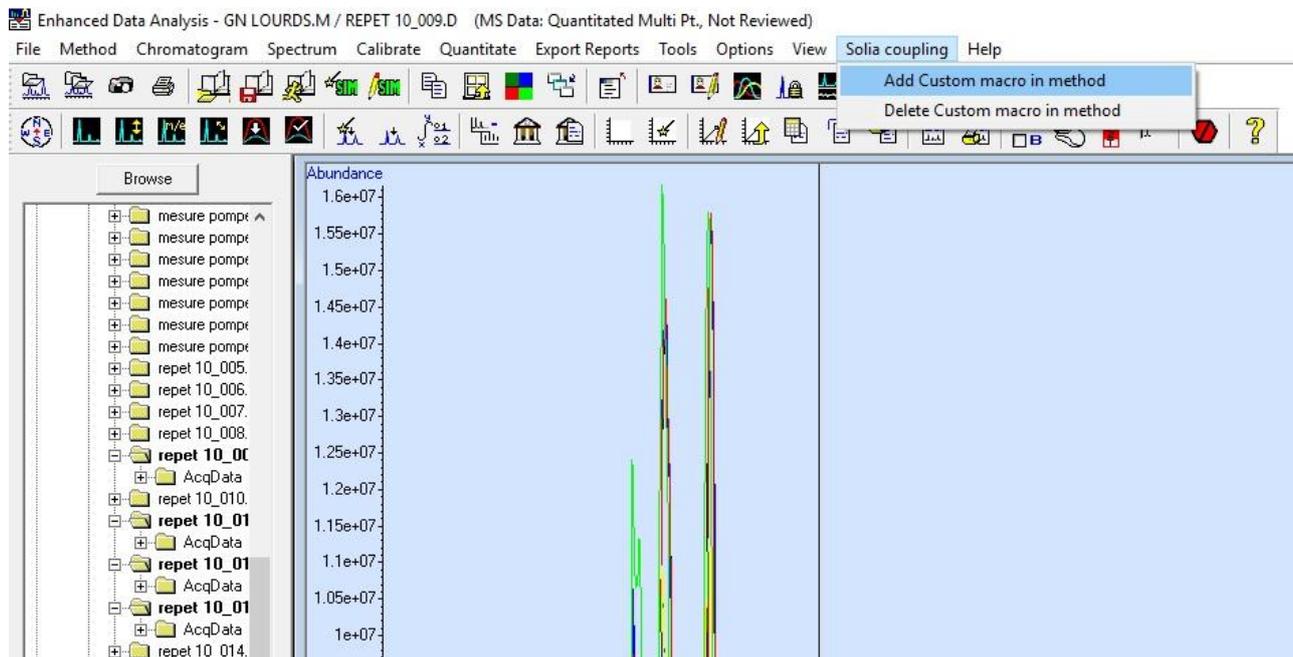
14.5.1 Création d'une méthode de traitement Soprane CDS

Se référer au chapitre [Traitement](#)

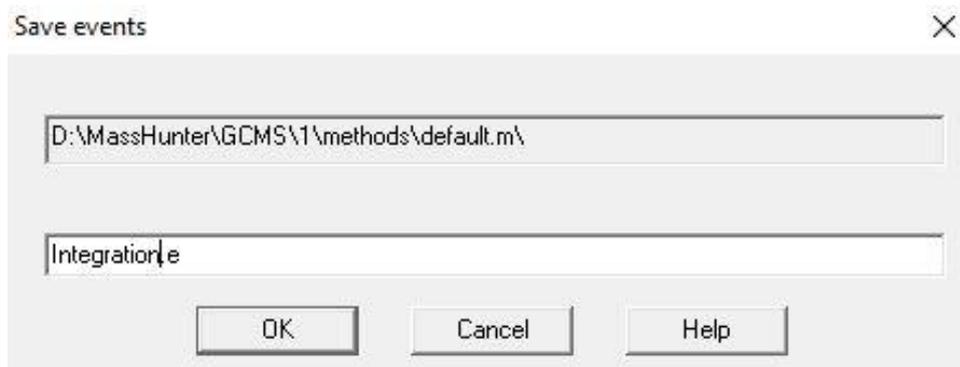
14.5.2 Création d'une méthode de traitement MSD Chemstation Data Analysis

Ouvrir MSD 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 CDS puisse se faire.

Dans l'onglet « Solia Coupling » de MSD 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 »

Quantitation Database Globals

Calibration Title

Locating Peaks

Reference Window

Non-Reference Window

Correlation Window minutes Use RTEINT

New Compound Info

Integration Parameter File

Measure

Default +/- min around exp RT

Curve Fit

Data point weight for linear regressions

Units of concentration

ISTD concentration

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.

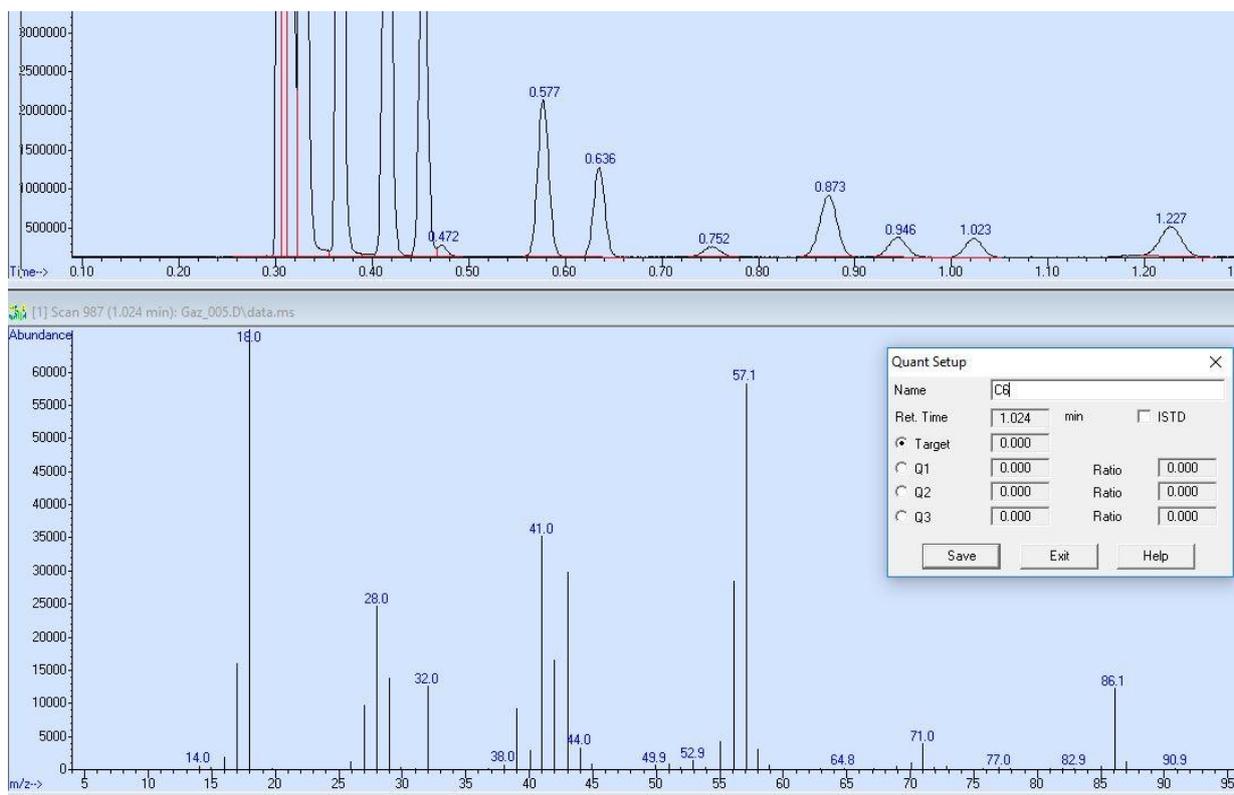
La fenêtre suivante permet d'ajouter les composés souhaités à la table d'étalonnage. Cliquer sur « Insert Above »

Edit Compounds ✕

Index	Ret. Time	Signal	Compound Name
1	0.418	0.00	iC4
2	0.455	0.00	nC4
3	0.581	0.00	2methylC5
4	0.638	0.00	C5
[END OF COMPOUND LIST]			

* before Compound Name denotes ISTD

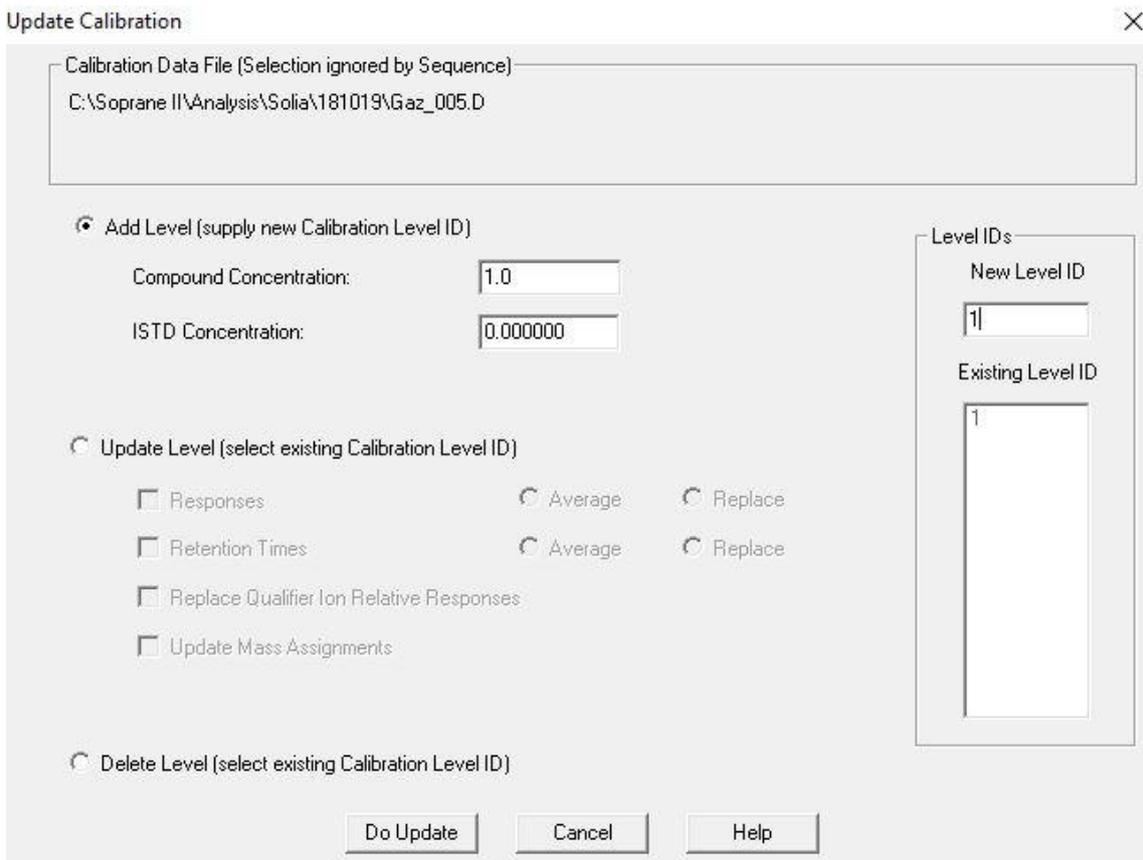
Effectuer un double clic droit sur le sommet du pic chromatographique à ajouter afin de définir son temps de rétention dans l'étalonnage. Définir le nom du composé.



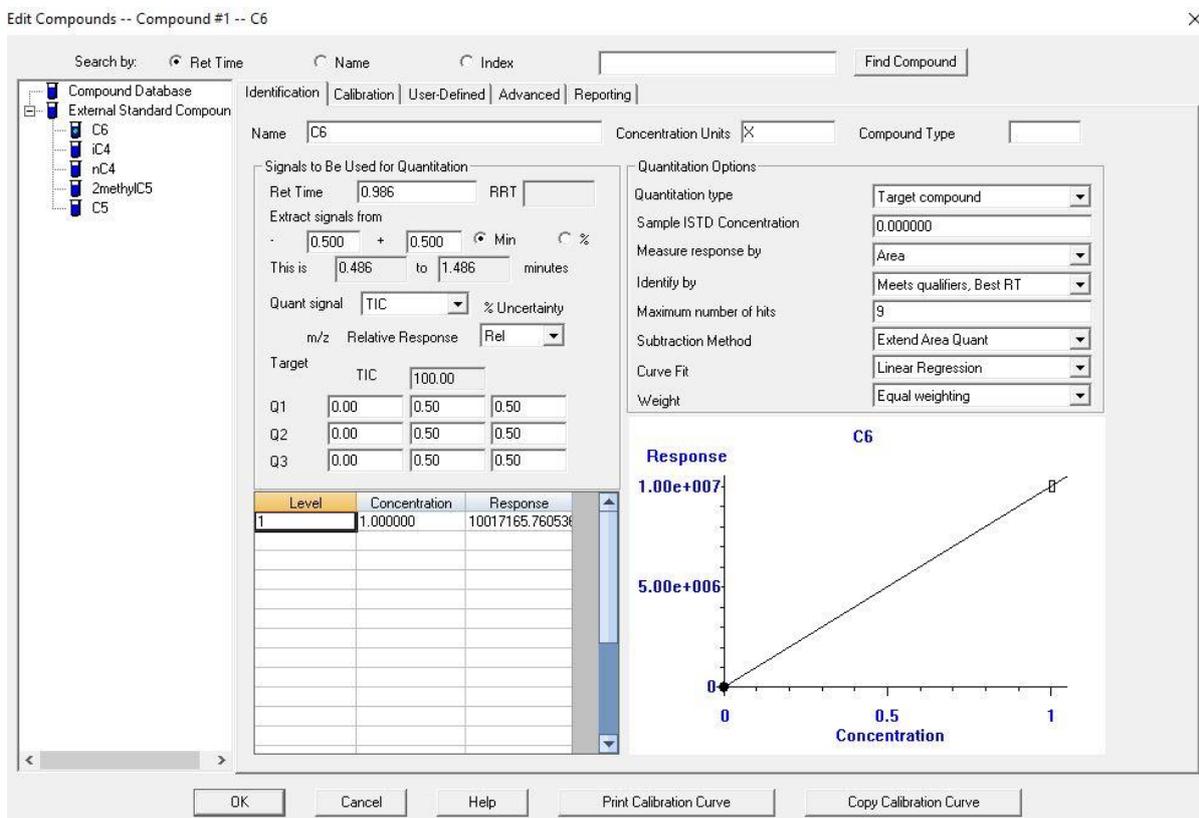
A ce stade, il est également possible de sélectionner des ions target utilisés pour la quantification. Pour ce faire, cliquer simultanément sur clic gauche et clic droit sur le pic m/z du spectre de masse à prendre en compte.

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 »



La fenêtre ci-dessous s’ouvre ensuite, résumant l’ensemble des paramètres d’étalonnage par composé. La concentration de chaque composé peut être modifiée par niveau depuis l’onglet « Calibration ».



Cliquer sur « OK » et sauvegarder la méthode depuis l’onglet « Method ».