

ICS 71.040.40
G 86



中华人民共和国国家标准

GB/T 10628—2008/ISO 6143:2001
代替 GB/T 10628—1989

GB/T 10628—2008/ISO 6143:2001

气体分析 校准混合气组成的测定和校验 比较法

Gas analysis—Comparison methods for determining and checking the
composition of calibration gas mixtures

(ISO 6143:2001, IDT)

中华人民共和国
国家标准
气体分析 校准混合气组成的测定和校验
比较法

GB/T 10628—2008/ISO 6143:2001

*

中国标准出版社出版发行
北京复兴门外三里河北街16号
邮政编码:100045

网址 www.spc.net.cn

电话:68523946 68517548

中国标准出版社秦皇岛印刷厂印刷
各地新华书店经销

*

开本 880×1230 1/16 印张 1.75 字数 46 千字

2008年8月第一版 2008年8月第一次印刷

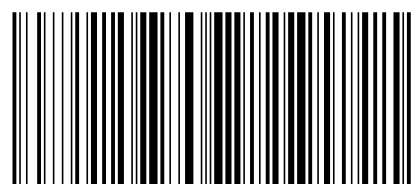
*

书号:155066·1-32465 定价 22.00 元

如有印装差错 由本社发行中心调换

版权专有 侵权必究

举报电话:(010)68533533



GB/T 10628-2008

2008-05-15 发布

2008-11-01 实施

中华人民共和国国家质量监督检验检疫总局
中国国家标准化管理委员会 发布

附录 C (资料性附录)

推荐方法的计算机程序

实施本标准描述的推荐方法的有效计算机程序,可以通过德国标准化组织 DIN 得到。咨询联系地址如下:

Normenausschu Materialprüfung (NMP),
Im DIN Deutsches Institut für Normung e. V.,
D-10772 Berlin,
Germany.

程序通常用 3.5" 双面高密度磁盘提供,但也可能有其他的形式。说明书和单册价格可以申请得到。

程序在 IBM 兼容个人计算机和 MS-DOS 操作系统下开发,在 IBM 兼容 PC 和 MS-DOS 6.22 下运行。测试表明,程序可以在向下兼容的早期的 MS-DOS 4.01 下运行,也可以在 Windows 95/98/NT 的 DOS 中运行。

程序语言为 Power BASIC,版本 2.10a。用同一版本的 Power SASIC 编译器将源代码转换为执行代码。

该程序由以下部分组成:

- 校准模块,执行本标准推荐的、从校准数据确定分析函数或校准函数的方法。
- 探测器模块,执行本标准推荐的、由测量响应数据确定适用分析函数参数的方法。
- 函数图表形象化工具和打印工具。

输入数据文件为 ASCII 码。应以明确定义的方式安排数据(见描述)。标准输出文件也是 ASCII 码。

输入数据的单位没有限制,因此,输出的数据的单位将与输入相同,或者(如有关拟合参数)为同一单位的派生单位。

程序由材料研究与测试联邦协会(BAM)1.01 部的 Wolfram Bremer 博士开发。程序技术资料咨询 E-mail 地址:wolfram.bremer@bam.de。

本程序已经过下列确认:

- 经过应用人造的和真实的两套数据进行大量的系列测试;
- 经过和蒙特卡罗(Monte-Carlo)模拟的结果的比较;
- 经过和科学出版物中报导的相似计算结果比较。

此外,本程序经过 ISO/TC 158 专家周密的测试。

使用者若对确认研究详细资料感兴趣,请与 BAM 联系(E-mail 地址同上)。

在很大程度上,程序自身就是很明白的。程序内还可以得到若干帮助。

但是,强烈推荐使用者在用本程序工作之前,研究本标准,并查阅关于程序的安装、输入/输出文件格式和程序模块的使用等全部信息的说明。这个说明包含在程序磁盘上的自述文件之中,纸质文本随磁盘一起提供。

注 1:虽然本程序及其关联的实验数据文件已成功得到很好的确认,但是在契约或其他商业活动中对它的使用并没有暗含担保,不保证它们全部无错,但是,在出版时,它们已经历过测试,而且没有包含已知的错误。

注 2:到目前为止,本标准推荐的、不同数据函数类型对数据的拟合方法的应用,在科学出版物中只有线性和多项式函数报导,因此,与已发表结果的比较仅限定在这个范围。

前 言

本标准等同采用 ISO 6143:2001(E)。

本标准代替 GB/T 10628—1989《气体分析 校准混合气组成的测定 比较法》。

本标准对 GB/T 10628—1989 的技术内容进行了全面修订,主要变化如下:

- 标准的名称修订为《气体分析 校准混合气组成的测定与检验 比较法》;
- 标准的适用范围增加了校准混合气组成的检验和比对(本标准的第 1 章)。
- 增加了术语及定义、符号及术语缩写(本标准的第 2 和第 3 章)。
- 适用分析函数和分析系统响应类型由仅限于直线和直线段类型,修改为适用于线性函数、二次多项式、三次多项式、幂函数和指数函数等多种函数类型。校准点的数量由单点、两点和多点(最少 3 点)校准修订为由分析函数类型确定:线性函数至少 3 点,二次多项式、幂函数、指数函数至少 5 点,三次多项式至少 7 点(本标准的 5.1;GB/T 10628—1989 的 3.1、3.2、3.3)。
- 分析函数参数计算由两参数、回归插值法求解(GB/T 10628—1989 的 3.1、3.2、3.3)修改为多参数(最多 4 参数),二项加权回归,非线性迭代法求解(本标准的 A.2)。增加了参数的方差、协方差的计算(本标准的 A.3)。
- 含量的不确定度由相对偏差合成(GB/T 10628—1989 的 3.1、3.2),修改为按不确定度的传递计算(本标准的 5.3)。增加了异常不确定度补充说明(本标准的 5.4.1)。
- 修改了校准混合气组成测定程序(本标准的 5.3;GB/T 10628—1989 的第 3 章)。
- 增加了气体标样相关性和协方差的计算(本标准的 5.3、5.4.2、A.4)。
- 增加了分析函数的确认程序(本标准的 5.2、A.5)。
- 增加了校准混合气组成的检验以及多个气体标样的比较程序(本标准的 6.1、6.2)。
- 增加了试验报告的内容要求(本标准的第 7 章)。
- 增加了气体标样不确定度的表示规范与转换(本标准的 A.1)。
- 修改了应用实例的内容(本标准的附录 B;GB/T 10628—1989 的附录 A)。
- 增加了资料性附录(本标准的附录 C)和参考文献等。

本标准的附录 A 是规范性附录,附录 B 和附录 C 是资料性附录。

本标准由中国石油和化学工业协会提出。

本标准由全国气体标准化技术委员会归口。

本标准起草单位:西南化工设计研究院。

本标准主要起草人:何道善、陈雅丽、张军、代高立。

本标准所代替标准的历次版本发布情况为:

- GB/T 10628—1989。

在表 B.11 中给出。

表 B.11

x_i	$u(x_i)$	y_i	$u(y_i)$
1.000 6	0.001 34	963.798 8	14
1.001 0	0.001 1	966.258 5	12.5
1.999 5	0.003 2	1 912.569 2	16.8
3.001 8	0.003 4	2 846.930 6	11.6
3.998 2	0.005 8	3 754.938 6	10.8
4.004 3	0.005 8	3 764.590 5	12.1
4.998 1	0.005 8	4 647.151 1	14.4
5.996 1	0.007 8	5 529.999 1	12.1
7.997 4	0.008 4	7 246.008 2	11.9
7.999 5	0.010	7 240.476 7	10.7
9.998 0	0.012	8 884.695 5	10.1
10.006 0	0.010 4	8 902.691 6	14.1

采用直线分析函数拟合这些数据,其残差平方和 S_{res} 高达 272.639 2,不能令人满意。而且拟合度量 Γ 为 6.835 2,超出临界值的 3.5 倍。在它们的不确定度内,数据和直线分析函数是不相容的。

为此,检验了两个非线性函数类型:幂函数和指数函数。指数函数给出了对数据的极好拟合。参数及其标准不确定度的为:

系数	数值	不确定度
b_0	$-4.801\ 9 \times 10$	$7.965\ 4 \times 10^{-2}$
b_1	$4.802\ 4 \times 10$	$7.252\ 5 \times 10^{-2}$
b_2	$2.126\ 1 \times 10^{-5}$	$3.621\ 0 \times 10^{-11}$

系数之间的协方差为:

协方差(b_0, b_1): $-5.767\ 9 \times 10^{-3}$

协方差(b_0, b_2): $5.026\ 4 \times 10^{-15}$

协方差(b_1, b_2): $-4.821\ 6 \times 10^{-15}$

残差平方和 S_{res} 为 0.658 1,相应测量的拟合度为 0.355 2,标志兼容性极好。

数据与合身的分析函数间的兼容性,用指数函数同样也能达到,此时参数和它们的标准不确定度为:

系数	数值	不确定度
b_0	$-1.212\ 8 \times 10^{-1}$	$1.782\ 1 \times 10^{-2}$
b_1	$5.121\ 3 \times 10^{-4}$	$2.369\ 3 \times 10^{-5}$
b_2	$8.498\ 6 \times 10^{-2}$	$4.974\ 5 \times 10^{-3}$

系数之间的协方差为:

协方差(b_0, b_1): $-3.826\ 5 \times 10^{-7}$

协方差(b_0, b_2): $7.932\ 6 \times 10^{-5}$

协方差(b_1, b_2): $-1.178\ 0 \times 10^{-7}$

残差平方和 S_{res} 为 8.380,相应测量的拟合度 Γ 为 1.159 4,后者的数值低于临界值,标志满意的兼容性。

假定对这些数据,两个函数类型都可以用作分析函数,对所选混合气,获得的结果在表 B.12 中给出。

气体分析 校准混合气组成的测定和校验 比较法

1 范围

本标准规定了:

- 用与参考混合气比较的方法,测定校准混合气的组成;
- 由比较用参考混合气组成的已知不确定度,计算校准混合气组成的不确定度;
- 用与参考混合气比较的方法,检验校准混合气的组成;
- 多个校准混合气组成的比较,例如不同方法制备的混合气的比较,或接近相关组成的混合气之间的一致性检验。

注:原则上,本文描述的方法,也(广泛地)用于预期可以作为校准混合气的未知试样(即打算作为校准混合气应用的混合气)的分析。不过,这种应用需要适当的关注和考虑其他的不确定组分,例如,有关校准用参考气和分析样品之间母体差异的影响。

2 术语及定义

本标准使用以下术语及其定义:

2.1

组成 composition

由每一指定混合气组分(被分析物)的种类、含量和补充气体(基体)给定的混合气体的特性。

注:在本标准中,被分析物含量规定用摩尔分数表示。摩尔分数具有与混合气体的压力和温度完全无关的优点,所以被推荐使用。但是,对于特定的测量系统,用其他的组成量度单位(例如质量浓度)可能更为恰当,但它们的应用需要充分关注对压力和温度的依赖性。

2.2

比较法 comparison method

由测量仪器的响应确定指定混合气体组分(被分析物)含量的方法。

2.3

校准 calibration

在规定条件下,为确定测量系统或测量仪器的示值、或实物量具或参考物质的标示值与对应标准值之间的关系的一组操作。

2.4

响应函数 response function

仪器响应和被分析物含量之间的函数关系。

注1:依据因变量和自变量的选择,可以用校准函数或分析函数两种不同的方法表示响应函数。

注2:响应函数为概念性的,不能精确地确定,而是通过校准近似地确定。

2.4.1

校准函数 calibration function

仪器响应以被分析物含量表示的函数。

2.4.2

分析函数 analysis function

被分析物含量以仪器响应表示的函数。