Программа сбора и обработки хроматографических данных

Цвет – Аналитик

для Windows

Версия 1.03

Руководство пользователя

(с) ОАО «Цвет» 2002

Содержание

1 Введение. 3
1.1 О программе. 3
2 Подготовка к работе....4
2.1 Общий вид и основные области программы. 4
2.1.1 Общий вид и основные области программы для версий A, E, I. 4
2.1.2 Общий вид и основные области программы для версии G....7
2.1.3 Общий вид и основные области программы для версии D....9
2.1.4 Общий вид и основные области программы для версии C. 11
2.1.5 Общий вид и основные области программы для версии J. 13
2.1.6 Настройка цвета, звуков, панели инструментов и команд. 15
3 Работа с системой. 19
3.1 Задание режимов работы хроматографа и сбор данных. 19
3.1.1 Задание режимов работы хроматографа для версий A, E, I. 19
3.1.1.1 Сохранение режима работы хроматографа. 23
3.1.1.2 Загрузка режима работы хроматографа....24
3.1.2 Задание режимов работы хроматографа для версии G. 26
3.1.3 Задание режимов работы хроматографа для версии D. 29
3.1.4 Задание режимов работы хроматографа для версии C....33
3.1.5 Задание режимов работы хроматографа для версии J....34
3.1.6 Настройка формата чисел и времени. 35
3.2 Загрузка и сохранение хроматограмм. 37
3.3 Восстановление после сбоев. 41
3.4 Масштабирование хроматограмм. 42
3.5 Редактирование и разметка хроматограмм. 46
3.6 Создание метода. 54
3.6.1 Окно Метод / Обнаружение. 54
3.6.2 Окно Метод / Шаблон. 57
3.6.3 Окно Метод / Гр. статистика....59
3.6.4 Окно Метод / Расчет. 59
3.6.4.1 Метод Нормализации. 60
3.6.4.2 Метод Абсолютной градуировки. 63
3.6.4.3 Метод Внутреннего стандарта. 71
3.6.4.4 Метод Абсолютной градуировки + Нормализация. 76
3.6.5 Окно Метод / Отчет. 76
3.6.6 Окно Метод / Автообработка. 77
3.7 Сохранение и загрузка метода. 78
3.8 Расчет хроматограмм. 79

1 Введение.

1.1 О программе.

Программное обеспечение **«Цвет - Аналитик»** решает комплекс задач по сбору и обработке хроматографических данных: аналого-цифровое преобразование, фильтрация шумов, интегрирование, качественный и количественный анализ компонентов анализируемой смеси. К одному компьютеру возможно подключение до шести хроматографов (при подключении платы расширения com-портов).

Программное обеспечение **«Цвет - Аналитик»** включает в себя ряд версий (A, E, I, D, C, J):

- версия **A** – предназначена для работы с газовым хроматографом Цвет-800 с 171 модулем управления (выпуск до 2002 года);
- версия **C** – предназначена для работы с внешним 21 разрядным 2х канальным АЦП. (для автоматизации старого парка хроматографов любых моделей);
- версия **D** – предназначена для работы с жидкостным хроматографом Цвет-4000;
- версия **E** – предназначена для работы с газовым хроматографом Цвет-800 с 179 модулем управления (выпуск с 2002 года);
- версия **I** – предназначена для работы с блоком "БУС-02" (для автоматизации старого парка хроматографов серии Цвет-500);
- версия **J** – предназначена для работы с внешним 21 разрядным 4х канальным АЦП. (для автоматизации старого парка хроматографов любых моделей).

Кроме стандартных задач, связанных с качественным и количественным расчетом анализа, система по желанию заказчика может быть доукомплектована дополнительными приложениями по решению специфических задач в области хроматографии таких, как:

- диагностика трансформаторов (анализ трансформаторного масла);
- расчет теплоты сгорания и числа Воббе для природных газов;
- расчет плотности и давления насыщенных паров сжиженных газов.

Работа над приложениями идет постоянно, и список будет расширяться.

2 Подготовка к работе.

2.1 Общий вид и основные области программы.

Этот пункт содержит краткое, но достаточное для первого ознакомления с системой, описание команд, более детальное их описание приведено ниже.

2.1.1Общий вид и основные области программы для версий A, E, I.

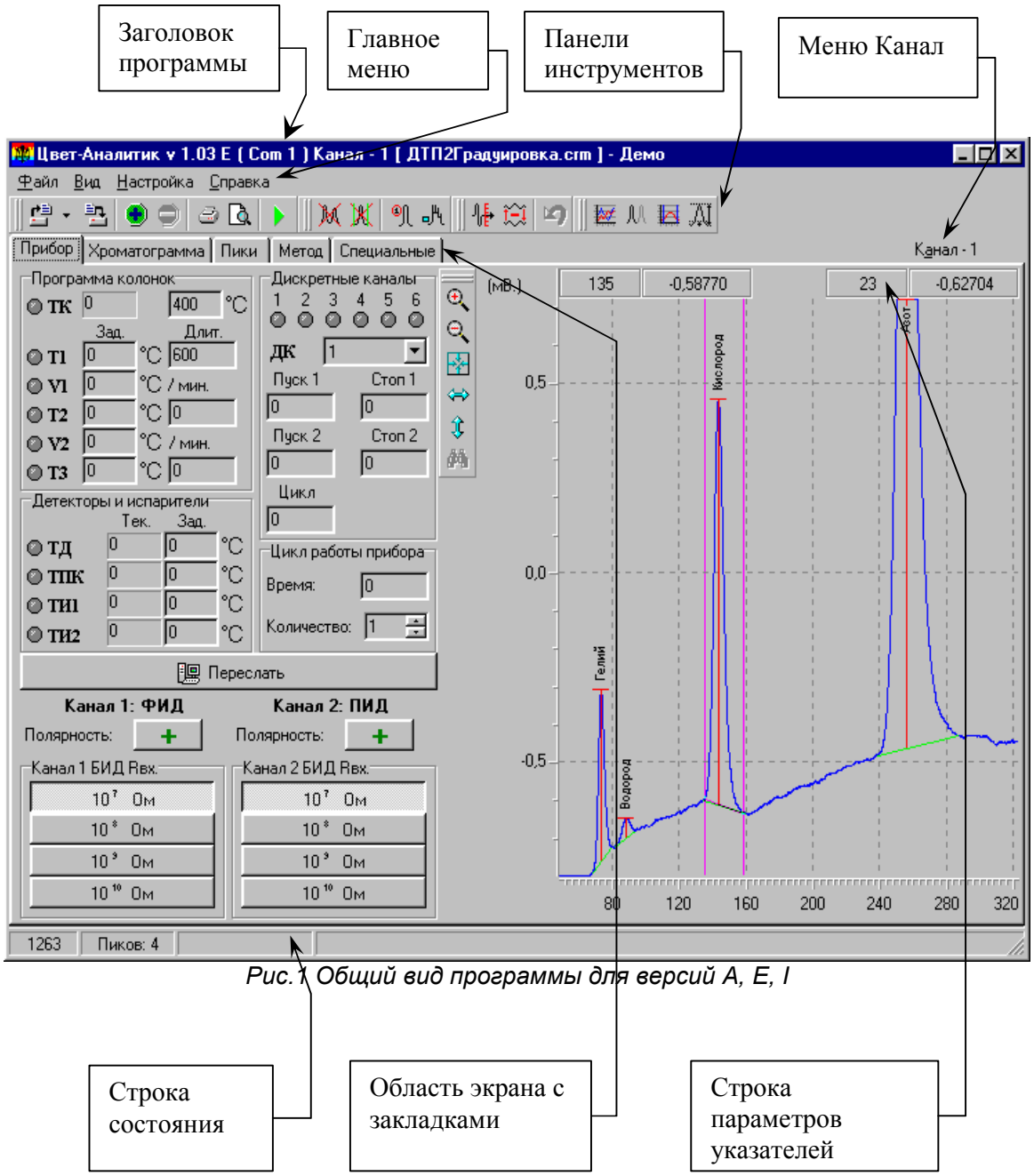


Рис.1 Общий вид программы для версий A, E, I

В области заголовка выведена следующая информация: название системы, ее программная версия, номер последовательного порта связи, к которому подключен хроматограф, номер обрабатываемого канала и имя обрабатываемой хроматограммы.

В данной программе возможна настройка последовательного порта связи, к которому должен быть подключен хроматограф. Это можно сделать в пункте меню ***Настройка / Портов*** (Рис. 1а). Номер прибора соответствует номеру com – порта.

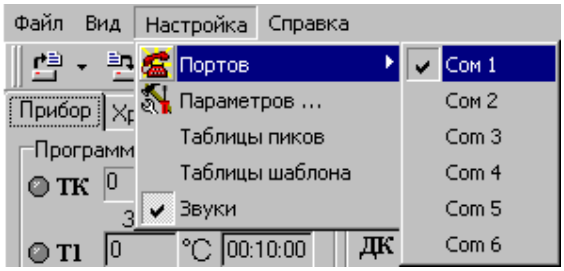


Рис.1а Настройка последовательного порта связи

В системе существует 3 независимых канала, два из которых (1-ый и 2-ой) предназначены для сбора и обработки данных, третий – для обработки сохраненных хроматограмм. Переключение между каналами осуществляется посредством выпадающего меню, которое выводится на экран щелчком левой клавиши мыши по надписи «***Канал***» на закладках ***Прибор*** и ***Хроматограмма*** (в правом верхнем углу, Рис. 1б).

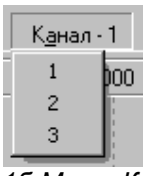


Рис.1б Меню Канал

Выбор канала 1 или 2 выводит соответствующую хроматограмму на экран. В этих каналах возможна обработка (разметка и расчет) текущей хроматограммы. Загрузку и обработку ранее сохраненных хроматограмм следует проводить в 3-м канале (если в нем не установлено снятие температур), при этом на закладке ***Пики*** выводится информация о размеченных пиках (подробнее в п. 3.4). Однако следует заметить, что при запуске нового анализа или при загрузке ранее сохраненной хроматограммы происходит сброс текущей информации из этих окон. Информация из них будет либо записана в папке ***Очередь/Прибор X*** (где ***X*** номер прибора) под соответствующим именем, только в том случае если включена очередь, либо утеряна, если очередь не включена.

Внимание: вся работа со снимаемыми хроматограммами ведется только в одном из выбраннных каналов 1 или 2. Обработка загруженных с диска хроматограмм ведется в канале 3. Снятие хроматограммы в двухканальном варианте предусматривает обработку каждого канала отдельно с переключением через меню ***Канал***.

Для 1-го и 2-го каналов существует возможность выбора типа используемого детектора. Для этого необходимо выбрать пункт меню ***Настройка/Параметров***

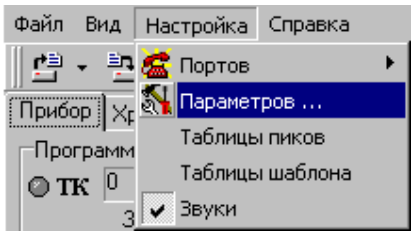


Рис.1в Меню Настройка/Параметров

А затем на закладке ***Детекторы*** выбрать соответствующий тип детектора для 1-го и/или 2-го канала или указать его отсутствие (пункт [***Нет***]).

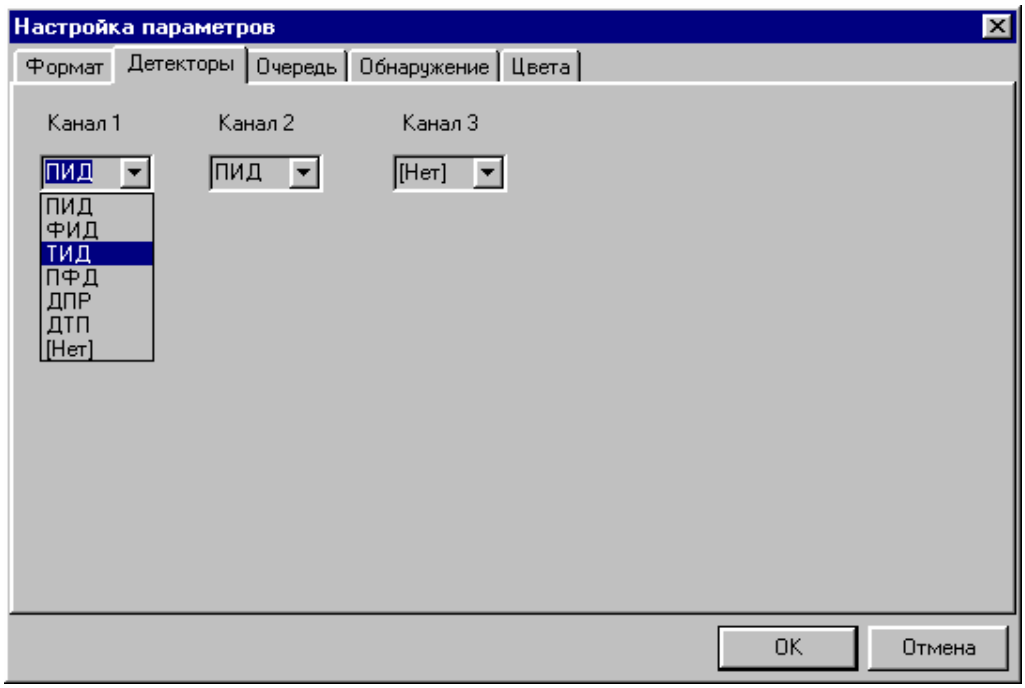


Рис.1г Настройка типа детектора

Если в 3-м канале выбран пункт [***Нет***], то он может использоваться для загрузки и обработки ранее сохраненных хроматограмм. Если выбран какой-либо другой пункт, то производиться прием температурных данных с выбранной области.

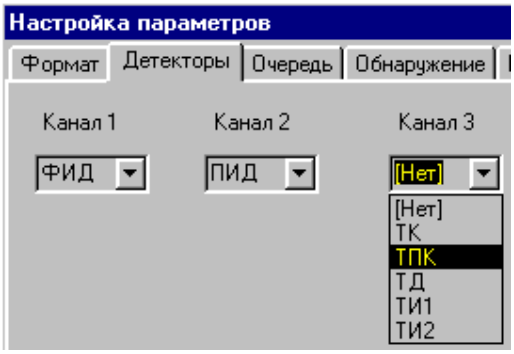


Рис.1д Настройка 3-го канала

<u>Внимание:</u> если выбран пункт «***Нет***» для одного из каналов (т.е. тип детектора не установлен или детектор отсутствует), то прием сигнала в данном канале проводится не будет.

2.1.2 Общий вид и основные области программы для версии G.

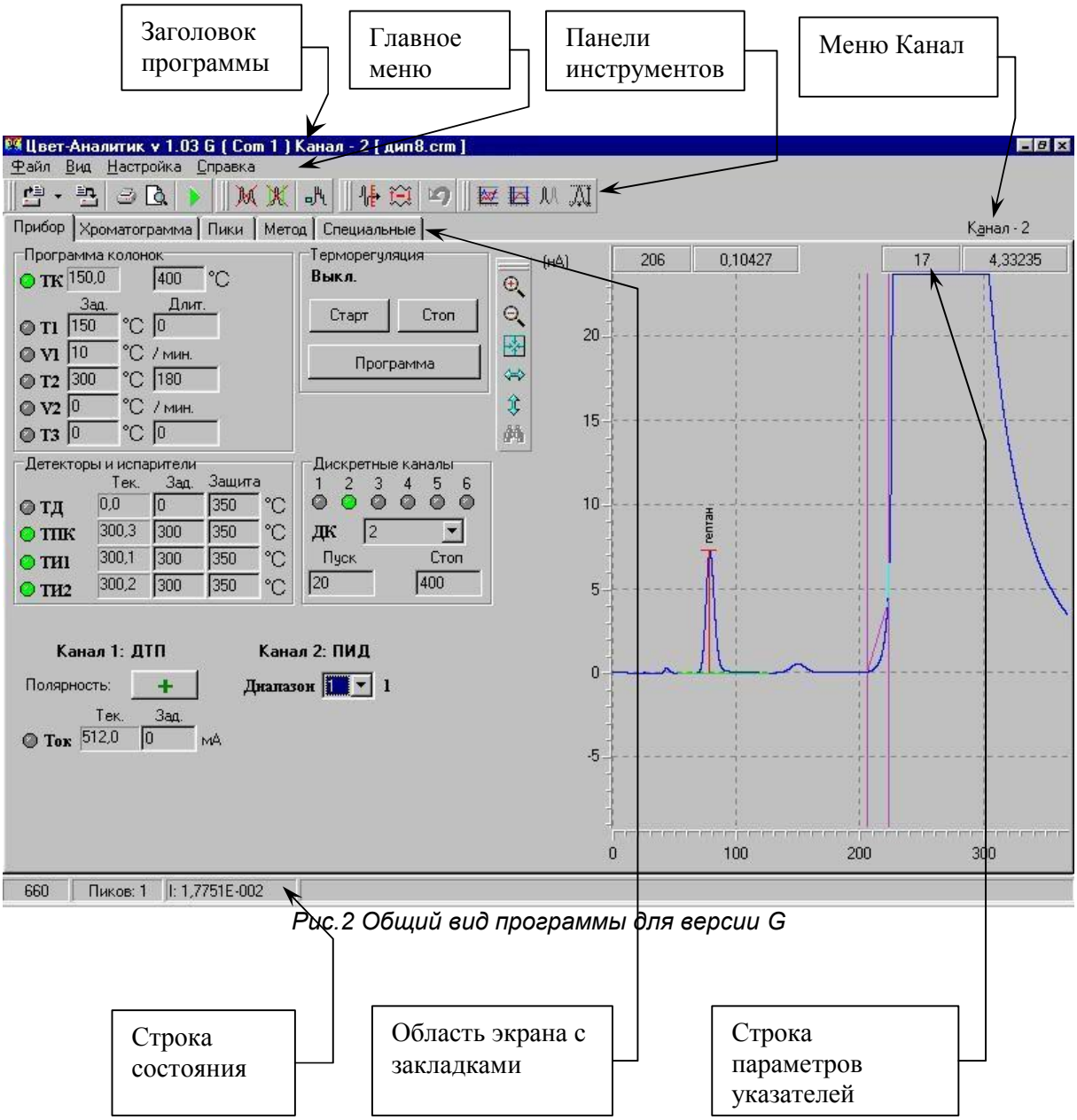


Рис.2 Общий вид программы для версии G

В области заголовка выведена следующая информация: название системы, ее программная версия, номер последовательного порта связи, к которому

подключен хроматограф, номер обрабатываемого канала и имя обрабатываемой хроматограммы.

В данной программе возможна настройка последовательного порта связи, к которому должен быть подключен хроматограф. Это можно сделать в пункте меню ***Настройка / Портов*** (Рис. 2а). Номер прибора соответствует номеру com – порта.

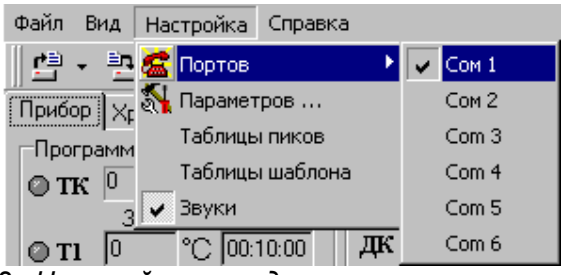


Рис.2а Настройка последовательного порта связи

В системе существует 3 независимых канала, два из которых (1-ый и 2-ой) предназначены для сбора и обработки данных, третий – для обработки сохраненных хроматограмм. Переключение между каналами осуществляется посредством выпадающего меню, которое выводится на экран щелчком левой клавиши мыши по надписи «***Канал***» на закладках ***Прибор*** и ***Хроматограмма*** (в правом верхнем углу, Рис. 2б).

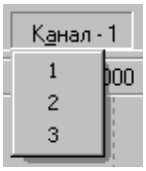


Рис.2б Меню Канал

Выбор канала 1 или 2 выводит соответствующую хроматограмму на экран. В этих каналах возможна обработка (разметка и расчет) текущей хроматограммы. Загрузку и обработку ранее сохраненных хроматограмм следует проводить в 3-м канале (если в нем не установлено снятие температур), при этом на закладке ***Пики*** выводится информация о размеченных пиках (подробнее в п. 3.4). Однако следует заметить, что при запуске нового анализа или при загрузке ранее сохраненной хроматограммы происходит сброс текущей информации из этих окон. Информация из них будет либо записана в папке ***Очередь/Прибор X*** (где ***X*** номер прибора) под соответствующим именем, только в том случае если включена очередь, либо утеряна, если очередь не включена.

Внимание: вся работа со снимаемыми хроматограммами ведется только в одном из выбраннных каналов 1 или 2. Обработка загруженных с диска хроматограмм ведется в канале 3. Снятие хроматограммы в двухканальном варианте предусматривает обработку каждого канала отдельно с переключением через меню ***Канал***.

2.1.3 Общий вид и основные области программы для версии D.

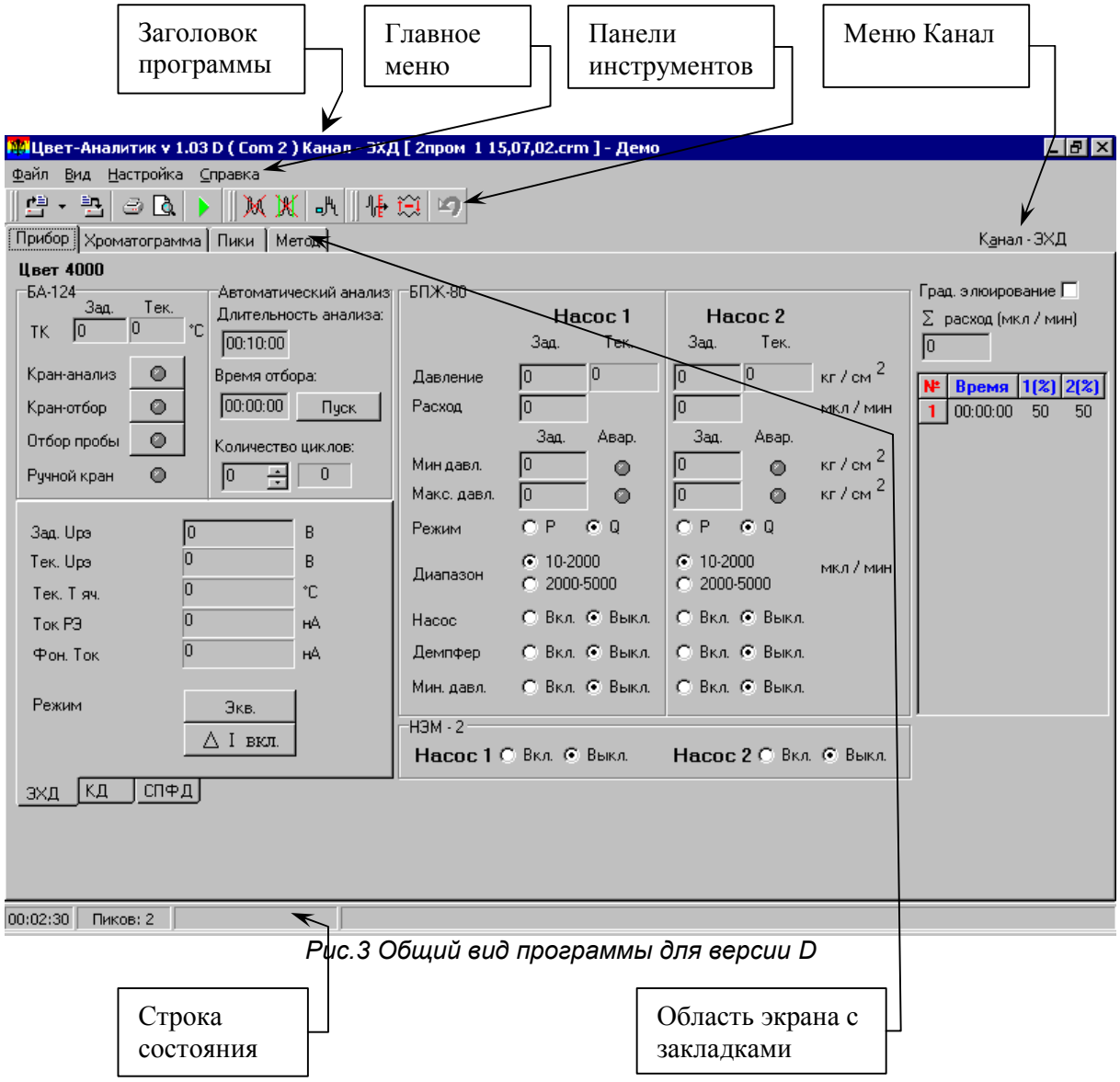


Рис.3 Общий вид программы для версии D

В области заголовка выведена следующая информация: название системы, ее программная версия, номер последовательного порта связи, к которому подключен аналитический блок БА-124, номер обрабатываемого канала и имя обрабатываемой хроматограммы.

В данной программе возможна настройка последовательного порта связи, к которому должен быть подключен аналитический блок БА-124 и порта к которому подключен соответствующий детектор. Это можно сделать в пункте меню ***Настройка / Портов*** (Рис.3а, Рис.3б). Номер прибора соответствует номеру com – порта.

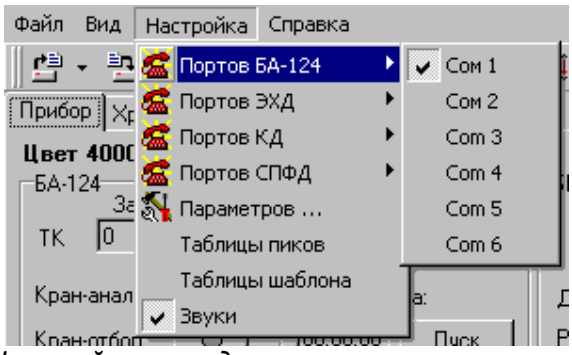


Рис.3а Настройка последовательного порта связи БА-124.

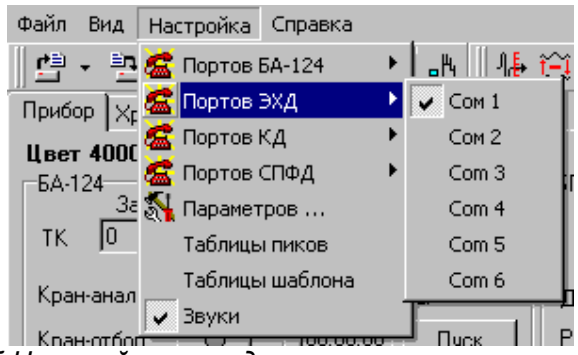


Рис.3б Настройка последовательного порта связи ЭХД.

В системе существует 4 независимых канала, три из которых (ЭХД,КД и СПФД) предназначены для сбора и обработки данных принятых с соответствующих их имени детекторов, четвертый – для обработки сохраненных хроматограмм и методов расчета. Переключение между каналами осуществляется посредством выпадающего меню, которое выводится на экран щелчком левой клавиши мыши по надписи «***Канал***» на закладках ***Прибор*** и ***Хроматограмма*** (в правом верхнем углу, Рис.3в).

Рис.3в Меню Канал

Выбор одного из каналов выводит текущую хроматограмму на соответствующем канале. В этом окне возможна обработка (разметка и расчет) текущей хроматограммы, а также загрузка и обработка ранее сохраненных хроматограмм, при этом на закладке ***Пики*** выводится информация о размеченных пиках (подробнее в п. 3.4). Однако следует заметить, что при запуске нового анализа или при загрузке ранее сохраненной хроматограммы происходит сброс текущей информации из этих окон. Информация из них будет либо записана в папке ***Очередь/Прибор X*** (где ***X*** номер прибора) под соответствующим именем, только в том случае если включена очередь, либо утеряна, если очередь не включена.

2.1.4 Общий вид и основные области программы для версии С.

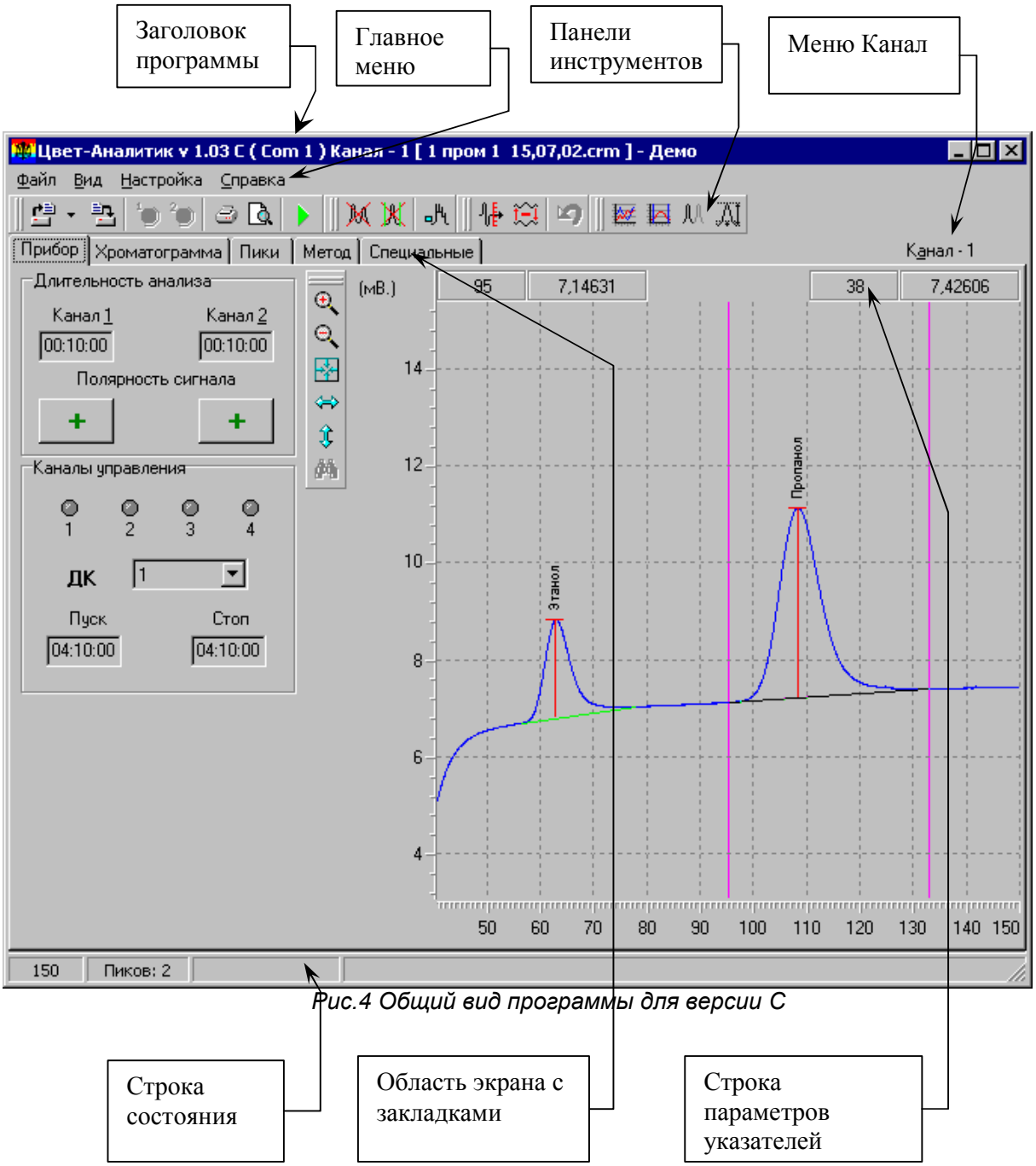


Рис.4 Общий вид программы для версии С

В области заголовка выведена следующая информация: название системы, ее программная версия, номер последовательного порта связи, к которому подключен хроматограф, номер обрабатываемого канала и имя обрабатываемой хроматограммы.

В данной программе возможна настройка последовательного порта связи, к которому должен быть подключен хроматограф. Это можно сделать в пункте меню ***Настройка / Портов*** (Рис. 4а). Номер прибора соответствует номеру com – порта.

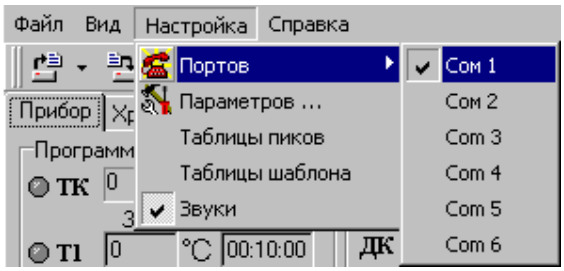


Рис.4а Настройка последовательного порта связи

В системе существует 3 независимых канала, два из которых (1-ый и 2-ой) предназначены для сбора и обработки данных, третий – для обработки сохраненных хроматограмм. Переключение между каналами осуществляется посредством выпадающего меню, которое выводится на экран щелчком левой клавиши мыши по надписи «***Канал***» на закладках ***Прибор*** и ***Хроматограмма*** (в правом верхнем углу, Рис. 4б).

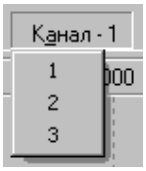


Рис.4б Меню Канал

Выбор канала 1 или 2 выводит соответствующую хроматограмму на экран. В этих каналах возможна обработка (разметка и расчет) текущей хроматограммы. Загрузку и обработку ранее сохраненных хроматограмм следует проводить в 3-м канале (если в нем не установлено снятие температур), при этом на закладке ***Пики*** выводится информация о размеченных пиках (подробнее в п. 3.4). Однако следует заметить, что при запуске нового анализа или при загрузке ранее сохраненной хроматограммы происходит сброс текущей информации из этих окон. Информация из них будет либо записана в папке ***Очередь/Прибор X*** (где ***X*** номер прибора) под соответствующим именем, только в том случае если включена очередь, либо утеряна, если очередь не включена.

Внимание: вся работа со снимаемыми хроматограммами ведется только в одном из выбраннных каналов 1 или 2. Обработка загруженных с диска хроматограмм ведется в канале 3. Снятие хроматограммы в двухканальном варианте предусматривает обработку каждого канала отдельно с переключением через меню ***Канал***.

2.1.5 Общий вид и основные области программы для версии J.

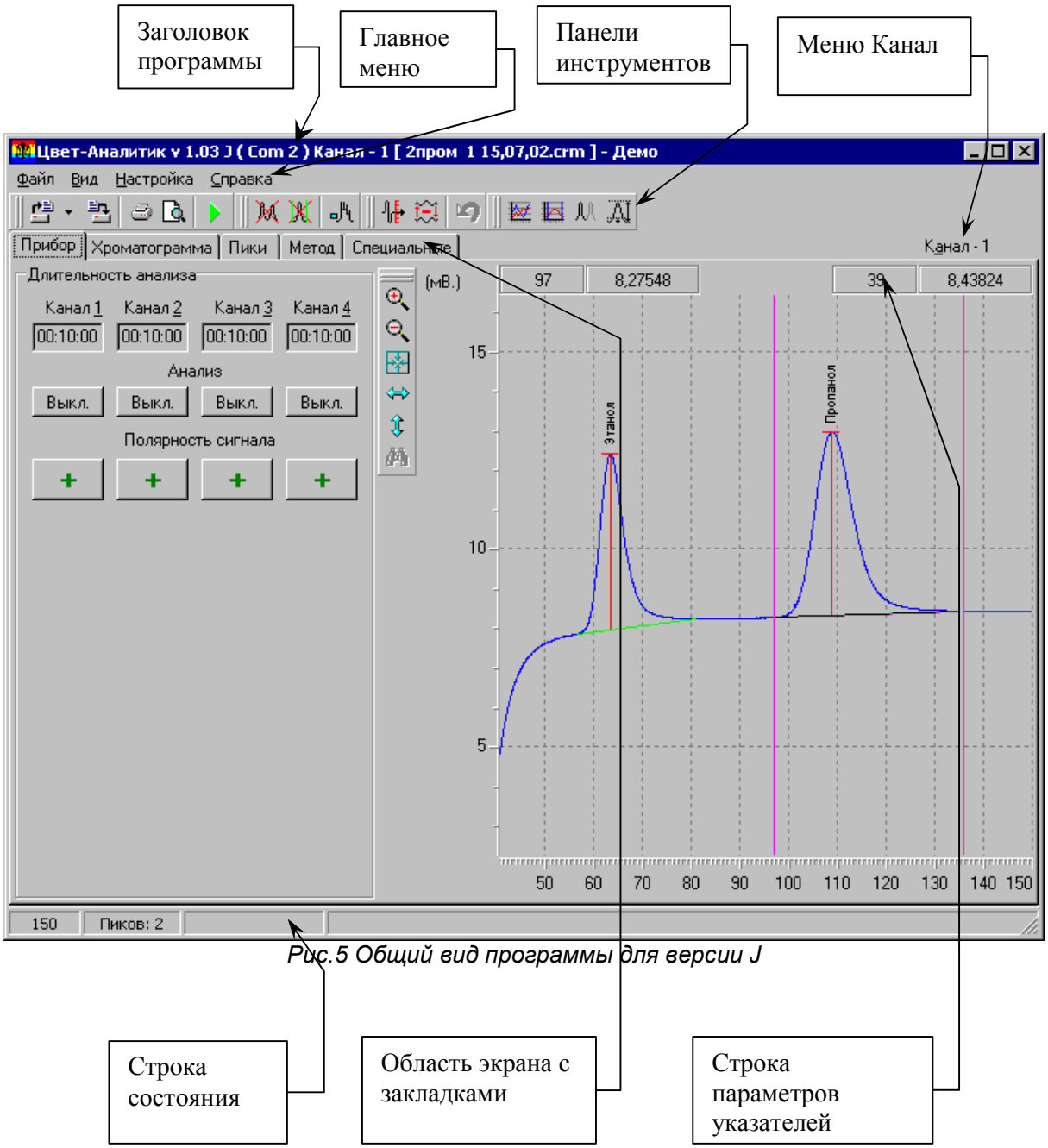


Рис.5 Общий вид программы для версии J

В области заголовка выведена следующая информация: название системы, ее программная версия, номер последовательного порта связи, к которому подключен хроматограф, номер обрабатываемого канала и имя обрабатываемой хроматограммы.

В данной программе возможна настройка последовательного порта связи, к которому должен быть подключен хроматограф. Это можно сделать в пункте

меню ***Настройка / Портов*** (Рис. 5а). Номер прибора соответствует номеру com – порта.

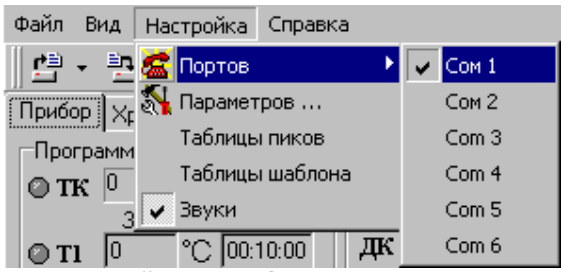


Рис.5а Настройка последовательного порта связи

В системе существует 5 независимых канала, четыре из которых (1-ый, 2-ой, 3-й и 4-й) предназначены для сбора и обработки данных, пятый – для обработки сохраненных хроматограмм. Переключение между каналами осуществляется посредством выпадающего меню, которое выводится на экран щелчком левой клавиши мыши по надписи «***Канал***» на закладках ***Прибор*** и ***Хроматограмма*** (в правом верхнем углу, Рис. 5б).

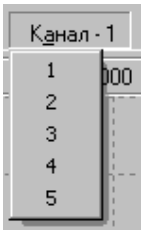


Рис.5б Меню Канал

Выбор первых четырех каналов выводит соответствующую хроматограмму на экран. В этих каналах возможна обработка (разметка и расчет) текущей хроматограммы. Загрузку и обработку ранее сохраненных хроматограмм следует проводить в 5-м канале, при этом на закладке ***Пики*** выводится информация о размеченных пиках (подробнее в п. 3.4). Однако следует заметить, что при запуске нового анализа или при загрузке ранее сохраненной хроматограммы происходит сброс текущей информации из этих окон. Информация из них будет либо записана в папке ***Очередь/Прибор X*** (где ***X*** номер прибора) под соответствующим именем, только в том случае если включена очередь, либо утеряна, если очередь не включена.

Внимание: вся работа со снимаемыми хроматограммами ведется только в одном из четырех выбраннных каналов. Обработка загруженных с диска хроматограмм ведется в канале 5. Снятие хроматограммы в двухканальном варианте предусматривает обработку каждого канала отдельно с переключением через меню ***Канал***.

2.1.6 Настройка цвета, звуков, панели инструментов и команд.

На закладке ***Цвет*** в пункте меню ***Настройка*** / ***Параметров***, внешний вид которой представлен на рис.6, осуществляется настройка цветов хроматограммы.

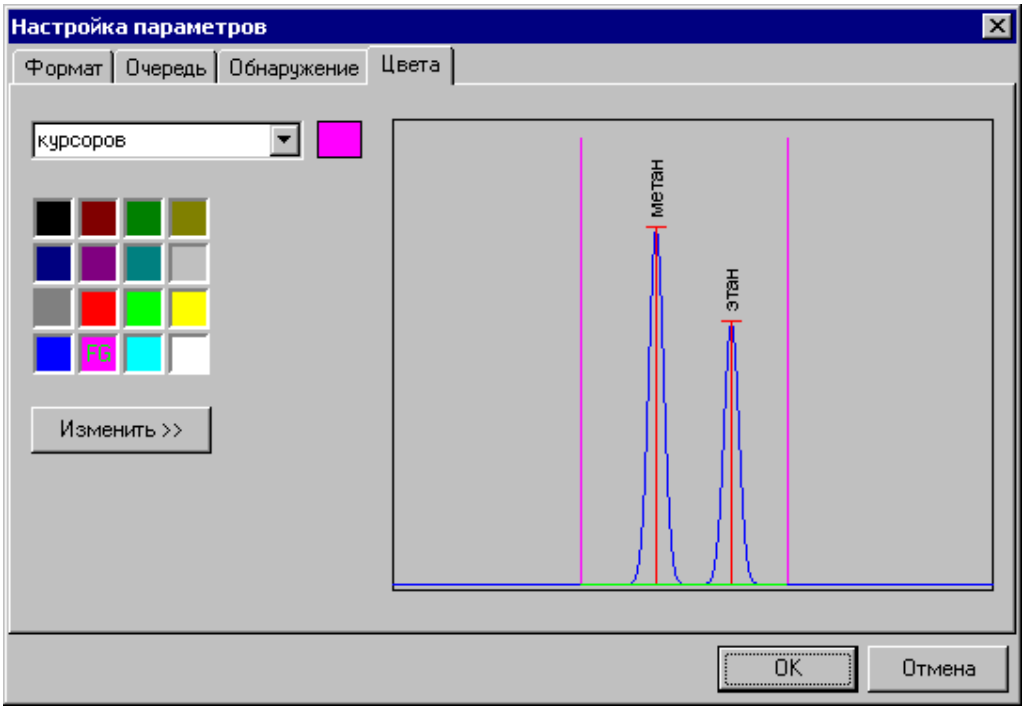


Рис.6 Закладка «Цвет» для изменения и настройки цветов хроматограммы

Данная закладка позволяет настраивать цвет курсоров, активной хроматограммы, нулевой линии, высоты пиков и фона. Выбор цвета осуществляется таблицей 16-ти цветов или же палитрой дополнительных цветов, которая вызывается при нажатии на кнопку «***Изменить***». Текущее изменение цветов отображается на рисунке изображенном справа.

При нажатии на кнопку «***OK***» все изменения цветов передаются хроматограмме.

Меню ***Настройка*** / ***Звуки*** осуществляет озвучивание команд и операций. Эту функцию пользователь может выбирать по своему желанию. Галочка ☑ на строке ***Звуки*** указывает, что звук включен, а ее отсутствие – что звук выключен.

Следующая область экрана – ***главное меню программы***. Это система меню и подменю, с помощью которой можно выполнить многочисленные действия по работе с прибором, хроматограммой, по настройке самой системы и панелей инструментов, служащих для обработки хроматограмм.

Панели инструментов включают в себя команды для работы с прибором, обработки хроматограмм, просмотра и вывода на печать отчета (подробнее см. в п. 3.3, 3.4, 3.5). Настроить панели инструментов можно через систему меню ***Вид / Панели инструментов*** (Рис. 6а)

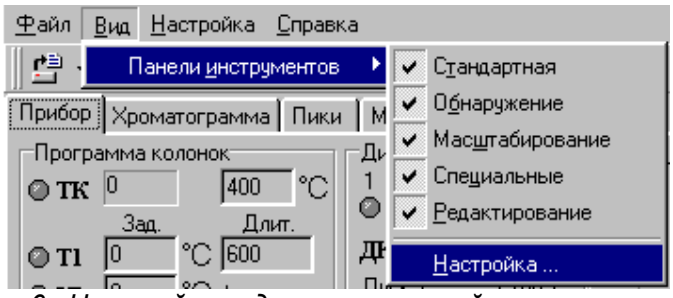


Рис.6а Настройка видимости панелей инструментов.

Для вывода панели инструментов на экран следует установить отметку слева от ее названия (для удаления панели с экрана – снять соответствующую отметку). Настройку панели инструментов можно точно так же выполнить через систему меню ***Вид / Панели инструментов / Настройка / Панели инструментов*** (Рис. 7).

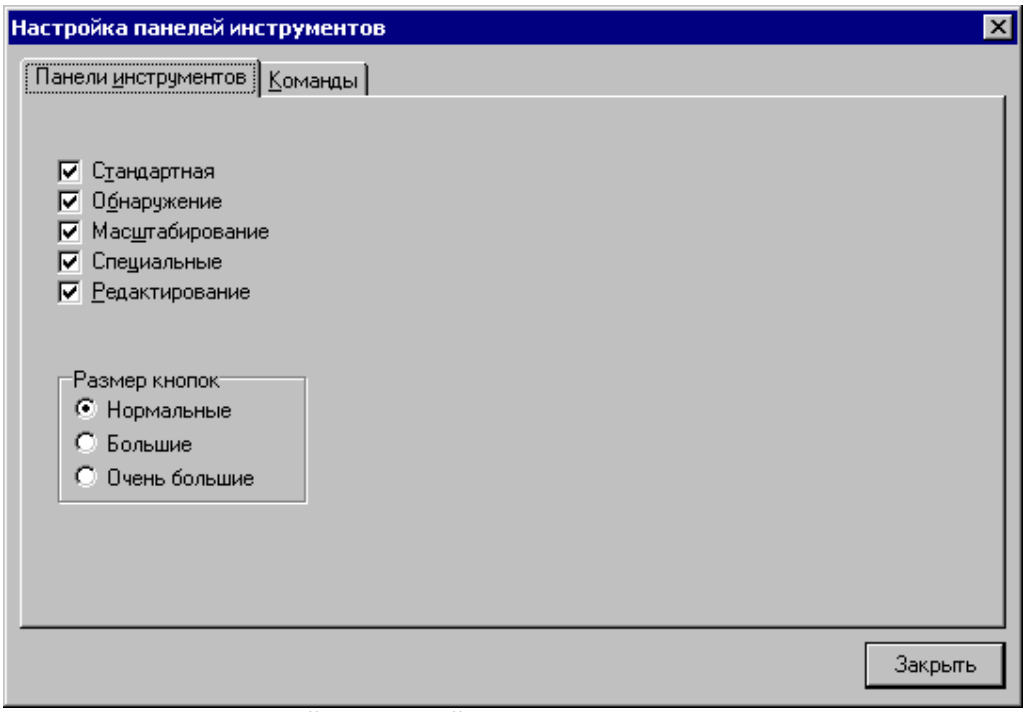


Рис.7 Настройка панелей инструментов и размера кнопок

Кроме настройки панелей инструментов пользователь может изменить и размер кнопок. Для этого необходимо щелкнуть левой кнопкой мыши рядом с нужным размером:

- Нормальные - ;
- Большие - ;
- Очень большие - .

Чтобы настроить видимость кнопок (команд) на соответствующих панелях инструментов, необходимо войти в систему меню: ***Вид / Панели инструментов / Настройка / Команды*** (Рис.8).

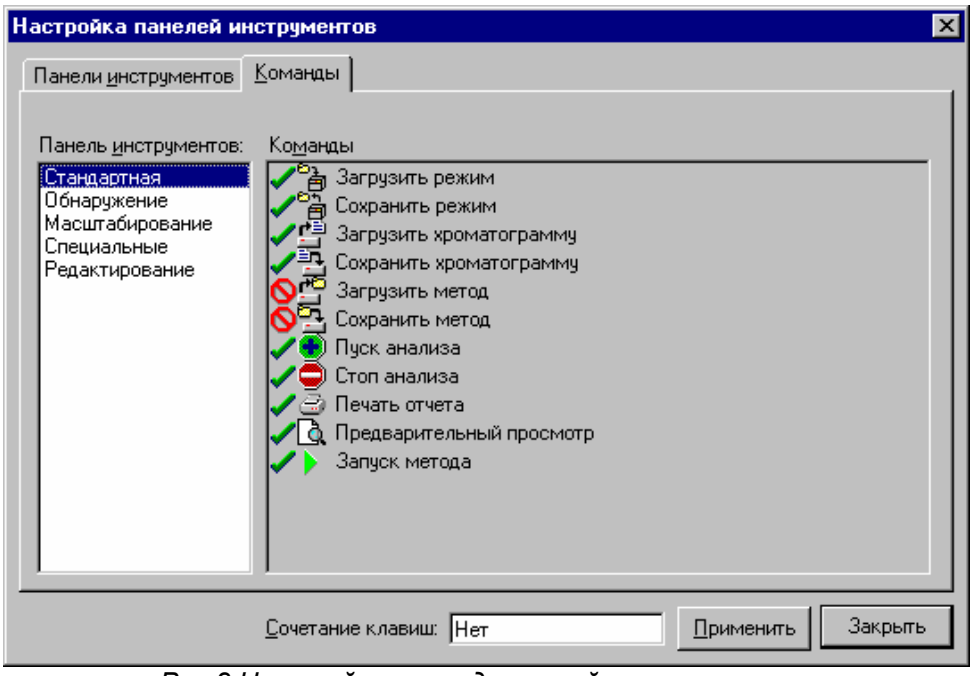


Рис.8 Настройка команд панелей инструментов.

Для того чтобы настроить видимость той или иной команды, необходимо слева в списке выбрать название панели инструментов, при этом справа появится соответствующий список команд данной панели инструментов. Зеленая галочка слева названия команды означает, что она выведена на панель инструментов; красный перечеркнутый кружок – команда на панели инструментов отсутствует. Переключение между двумя этими значениями осуществляется двойным нажатием левой кнопки мыши на названии соответствующей команды. Кроме того, можно установить для выполнения каждой команды соответствующее сочетание клавиш. Для этого необходимо:

- выделить нужную команду, щелкнув один раз левой кнопкой мыши на ее названии;
- установить курсор в поле рядом с надписью «*Сочетание клавиш*» (для этого щелкнуть в этом поле левой кнопкой мыши);
- прижать либо клавишу **Alt**, либо **Ctrl** и далее любую клавишу;
- нажать кнопку ***Применить.***

Тогда эту команду можно будет вызвать сочетанием клавиш **Alt +** выбранная клавиша, либо **Ctrl +** выбранная клавиша, соответственно. Назначение и работа каждой из команд линейки инструментов будут описаны ниже.

Строка состояния. Данная область предназначена для контроля хода выполнения анализа. В левой части этой области при запуске анализа, будет высвечиваться время, прошедшее с начала анализа, а так же количество размеченных пиков на хроматограмме, если они есть и текущий сигнал с

детектора. В правой части выводится подсказка при наведении курсора мыши на соответствующую кнопку или команду.

Строка параметров указателей. Эта область очень важна при обработке хроматограммы. В системе есть два курсора - графических указателя, которые можно перетаскивать мышью по всей хроматограмме, выделяя этими курсорами участок хроматограммы для выполнения определенной команды. Первый параметр слева – время на хроматограмме, соответствующее положению левого графического указателя, в секундах. Следующий параметр так же относится к левому графическому указателю, он показывает уровень сигнала в наноамперах или миливольтах (в зависимости от типа детектора) на хроматограмме в момент времени, равному положению левого графического указателя. Таким образом перемещая левый графический указатель, можно определить время выхода пика и его высоту в наноамперах или миливольтах (в зависимости от типа детектора). Третий параметр соответствует правому графическому указателю и показывает расстояние между двумя графическими курсорами в секундах. Четвертый параметр отражает амплитуду сигнала в положении правого графического указателя.

Область экрана с закладками. Существует несколько закладок:

- ***Прибор*** – служит для задания и контроля за параметрами анализа (подробнее см. п. 3.1.1).
- ***Хроматограмма*** – на данной закладке осуществляется просмотр, масштабирование, редактирование и разметка хроматограммы выбранного канала (подробнее см. п. 3.3).
- ***Пики*** – содержит таблицу размеченных пиков хроматограммы выбранного канала (подробнее см. п. 3.4).
- ***Метод*** – служит для задания параметров, необходимых при проведении качественного и количественного анализа исследуемых проб, а также для создания и редактирования метода обработки хроматограммы(подробнее см. п. 3.5).
- ***Специальные*** – служит для расчета СКО по группе хроматограмм и индикации шума, дрейфа и предела детектирования(подробнее см. п. 3.5, 3.7 и 3.8).

3 Работа с системой.

3.1 Задание режимов работы хроматографа и сбор данных.

Работу с системой необходимо начинать с установки номера последовательного порта связи, к которому подключен хроматограф. Это можно сделать в пункте меню ***Настройка / Портов***. Номер прибора соответствует номеру com – порта.

3.1.1 Задание режимов работы хроматографа для версий A, E, I.

Задание и контроль за параметрами анализа осуществляется на закладке ***Прибор***, внешний вид и назначение элементов которой представлено на рис.9.

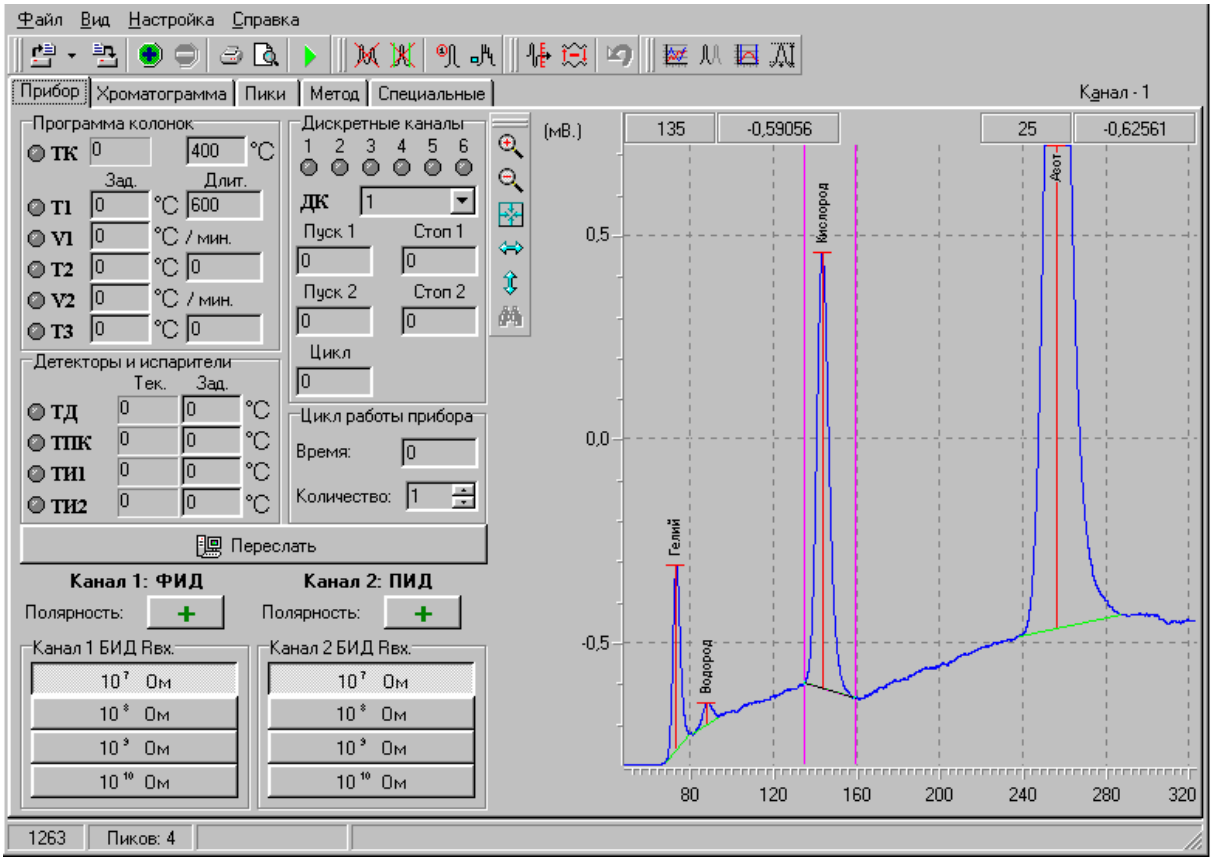


Рис.9 Закладка «Прибор» для варианта работы с хроматографом Цвет-800

В левой части данной закладки представлены поля для ввода параметров анализа и контроля за ними (подробнее смотри ниже), а в правой части закладки отображается хроматограмма (подробнее смотри закладку ***Хроматограмма*** п.3.3).

Параметр **ТК** и индикатор, который расположен рядом, служит для контроля и отображает текущую температуру термостата колонок. Если текущая температура термостата соответствует температуре, которая задана для данного этапа программы колонок, то горит зеленый индикатор. В противном случае (программа выводит температуру на заданное значение), индикатор **ТК** зеленый моргающий, а в случае перегрева, красный моргающий.

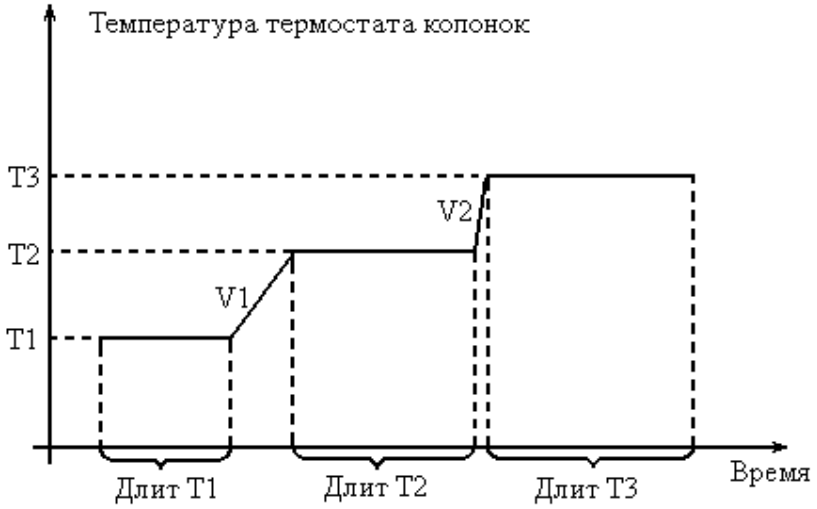


Рис.9а Температурная программа колонок

Параметры **T1**, **T2**, **T3**, **V1**, **V2** и световые индикаторы предназначены для задания температурной программы термостата колонок и контроля за тем на каком этапе данной программы находится хроматограф. При этом индикатор этапа, на котором находится программа - зеленый, а все остальные индикаторы этапов программы отключены, т.е. серые. График программы представлен на рис.9а. На графике горизонтальные участки (изотермы) соответствуют этапам **T1, T2, T3**, а наклонные – этапам нагрева термостата колонок со скоростями **V1, V2**.

<u>Замечание</u>: *При работе в изотермическом режиме необходимо задать время **Длит T1**, которое определяет длительность анализа.*

Блок индикаторов и числовых полей ***Детекторы и испарители*** служит для задания режимов и контроля за температурой детектора **– ТД**, испарителей – **ТИ1, ТИ2** и переходной камеры **ТПК**. Необходимые значения температур устанавливаются в числовых полях ***Заданное***, а контроль осуществляется по значениям полей ***Текущее***. При отсутствии заданных параметров цветовые индикаторы отключены, при разогреве – зеленые моргающие, при перегреве красные, а при соответствии текущих значений заданным – зеленые.

Индикаторы и числовые поля, расположенные в блоке ***Дискретные каналы*** предназначены для управления включением – выключением различных устройств, применяемых в комплекте с хроматографом (пример – автоматический кран – дозатор для автоматического ввода пробы). Программа позволяет поддерживать до шести сигналов управления подобными

устройствами, каждому из которых соответствует свой дискретный канал. Для каждого из дискретных каналов можно задать два включения в цикле работы дискретного канала и его периодичность повторения в течение указанного времени (параметр ***Цикл***). Время цикла работы дискретного канала не должно превышать время работы программы термостата колонок. Временная диаграмма сигнала дискретного канала при всех заданных параметрах приведена на рис.9б.

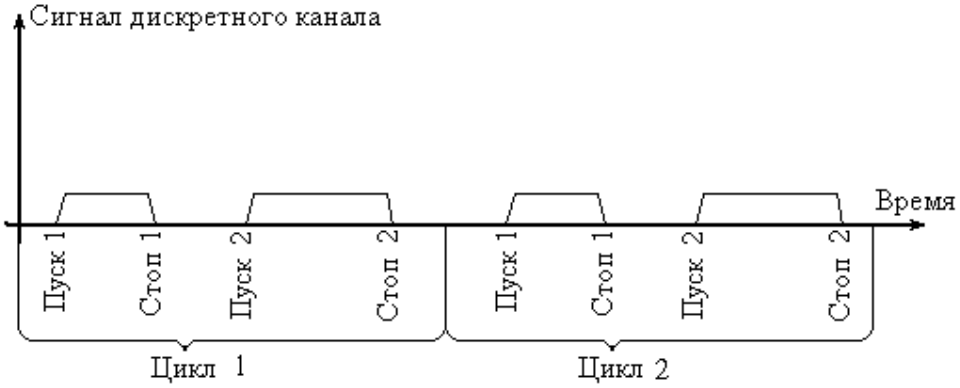


Рис.9б. Программа работы дискретных каналов

Программа задается для того дискретного канала, который выбран в выпадающем списке **ДК**. При каждом включении, какого либо дискретного канала соответствующий ему световой индикатор загорается зеленым цветом. Номер дискретных каналов для каждого устройства устанавливается в соответствии с маркировкой кабеля.

Замечание: *при работе с дополнительными устройствами использование параметра цикла работы дискретных каналов очень редко, то рекомендуется ставить его значение равным 15000 секунд (или 04:10:00).*

В зоне ***Цикл прибора*** на закладке ***Прибор*** задается количество циклов и время работы цикла прибора. Значение, устанавливаемое для цикла работы прибора в поле ***Время*** должно быть больше времени анализа на 1-2 минуты (время необходимое для автоматической обработки хроматограммы соответствующим методом). При программировании температур время работы цикла должно учитывать время анализа, время необходимое для охлаждения термостата колонок до начальной температуры и время необходимое для автоматической обработки хроматограммы соответствующим методом. Работа цикла строится по следующей схеме: после нажатия кнопки ***Пуск анализа*** (цикл работает только при запуске анализа из программы) начинается первый цикл анализа, после окончания анализа система проводит автоматическую обработку принятых хроматограмм, в соответствии с настроенным методом, и запускает следующий цикл анализа с уменьшением количества циклов. При достижении количества циклов = 1 запуск цикла автоматически прекращается. Если в поле количества циклов задано число 9999, то программа начинает работать без уменьшения количества циклов, т.е. бесконечно. Для экстренного

прерывания работы прибора в цикле нужно нажать кнопку ***Стоп анализа*** в программе.

В нижней части закладки ***Прибор*** расположены клавиши переключения полярности сигнала детектора для каналов 1 и 2.

Под ними для всех детекторов за исключением ДТП (детектор по теплопроводности) выведены клавиши, соответствующие клавишам переключения входных делителей (измерительных резисторов) на блоке детекторов (БИД).

Внимание: Для правильного расчета площадей (высот) пиков положение данных переключателей сначала выставляется на блоке детекторов (БИД), затем соответственно им выставляется положение клавиш на закладке ***Прибор***.

Все временные параметры на этой закладке вводятся и отображаются либо в секундах, либо в часах**:**минутах**:**секундах.

Для посылки заданного значения индивидуального параметра управления на хроматограф необходимо после его ввода в поле параметра нажать на клавишу **Enter** или перейти в любое другое поле. Для пересылки одновременно всех параметров в хроматограф (например, после загрузки режима с диска), необходимо нажать на кнопку **Переслать** на закладке ***Прибор***.

Замечание: *пересылка параметров в хроматограф занимает около 30 секунд.*

Следует иметь в виду, что при работе с программой термостата колонок только при перезадании температуры первой изотермы происходит сбой готовности термостата колонок, т.к. система считает, что происходит задание новой температурной программы.

Для запуска анализа достаточно нажать кнопку **Анализ** на хроматографе или кнопку ***Пуск анализа*** на панели инструментов (при этом происходит сброс хроматограмм из каналов 1 и 2). После этого хроматограф начинает отработку программы колонок, включения / выключения дискретных каналов, а программа начинает принимать данные с детекторов. В это же время в графической области экрана начинает отображаться хроматограмма, а в строке состояния отображается время, прошедшее с момента запуска анализа. Анализ закончится либо автоматически после прошествия заданного времени анализа, либо принудительно, после повторного нажатия кнопки **Анализ** на хроматографе или нажатия на панели инструментов кнопки ***Стоп анализа***.

Внимание: нажатие кнопки ***Анализ*** на хроматографе приводит либо к запуску, либо к остановке анализа, в зависимости от того находится ли прибор в состоянии анализа.

Замечание:

*Если все индикаторы на закладке **«Прибор»** неактивны, т.е. серые, это говорит о том, что нет связи компьютера с хроматографом. В*

этом случае следует проверить правильность подключения хроматографа к компьютеру в следующем порядке:

1. *Проверить кабель, соединяющий компьютер с хроматографом;*
2. *Убедиться в наличии на параллельном порте электронного ключа, поставляемого вместе с системой;*
3. *Проверить, правильно ли выбран номер последовательного порта связи (меню **Настройка / Портов**);*

3.1.1.1 Сохранение режима работы хроматографа.

Все параметры режима работы хроматографа (параметры анализа заданные на закладке ***Прибор***), можно сохранить на диске с помощью команды ***Сохранить режим***, и в следующий раз не перезадавать все параметры вручную, а загрузить их с диска. Для этого нужно выполнить команду ***Сохранить режим*** либо в системе меню ***Файл / Сохранить режим***, либо выполнить ту же команду на панели инструментов (рис.10-12).

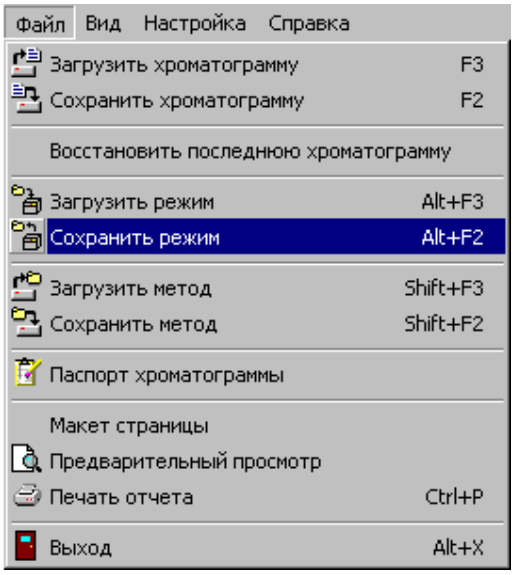


Рис.10 Команда Сохранить режим в системе меню

После выбора данной команды появится окно диалога, в котором необходимо ввести имя сохраняемого режима (Рис.11).

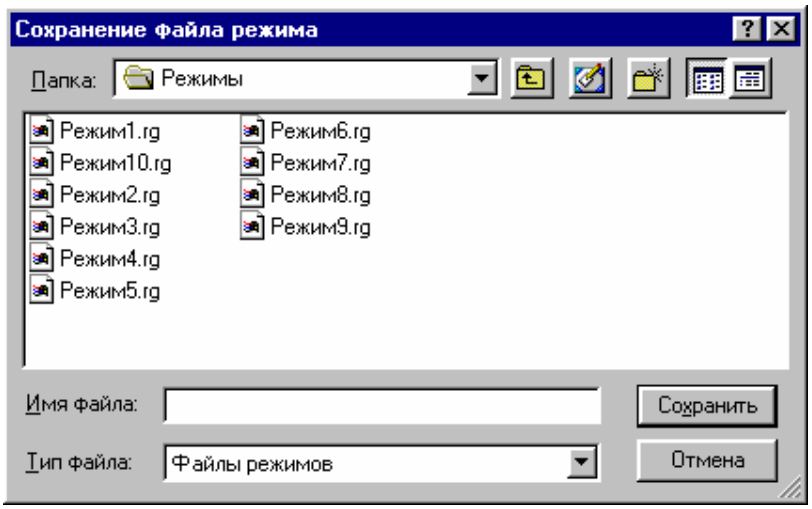


Рис.11 Окно сохранения режима

После набора имени нажмите кнопку ***Сохранить*** и режим будет сохранен.

Предусмотрен и другой вариант сохранения режима без введения его имени и открытия дополнительных окон. Для этого в системе существует 10 стандартных имен режимов Режим1…Режим10. Чтобы быстро сохранить введенный ранее на закладке Прибор режим, нужно нажать стрелочку справа от кнопки сохранения режима - выводится выпадающий список стандартных имен режима (Рис.12).

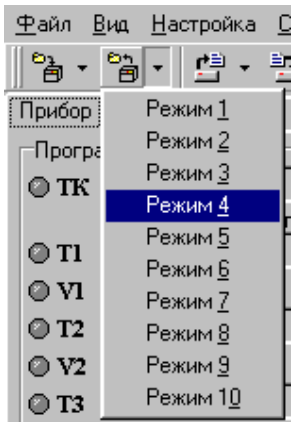


Рис.12 Быстрое сохранение режима

При таком способе сохранения следует помнить какой именно режим хранится под стандартным именем, например, под именем ***Режим1*** храниться режим для анализа трансформаторного масла.

3.1.1.2 Загрузка режима работы хроматографа.

Хранящийся на диске компьютера режим хроматографа при необходимости можно загрузить в любой из хроматографов подсоединенных к компьютеру. Загрузка осуществляется через систему меню ***Файл/загрузить режим*** либо с помощью команды ***Загрузить режим*** на панели инструментов. При этом на экран выводится окно «***Загрузка файла режима***» (Рис. 13).

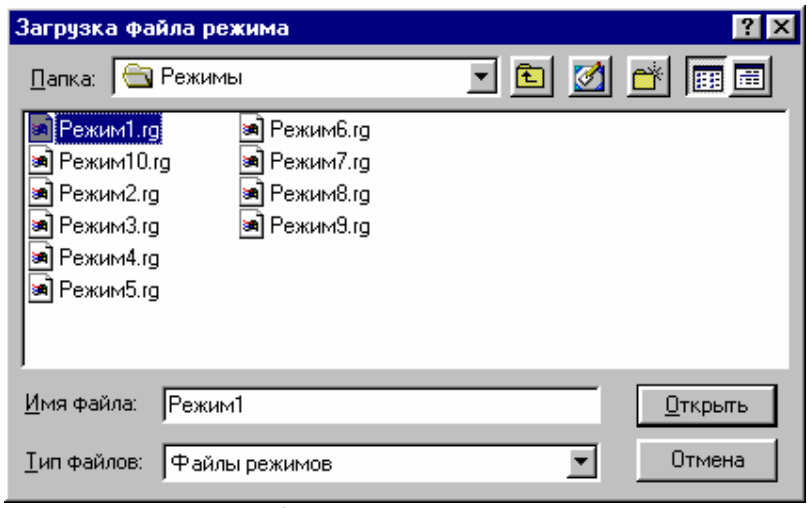


Рис.13 Окно загрузки режима

Для загрузки следует либо дважды щелкнуть левой клавишей мыши на нужном режиме, либо щелкнуть левой клавишей мыши один раз, а затем нажать кнопку ***Открыть***.

Режим, сохраненный под стандартным именем Режим1…Режим10 можно загрузить щелкнув на стрелке справа от кнопки ***Загрузить режим***, и выбрав из выпавшего списка стандартных имен нужное, щелкнуть по нему левой клавишей мыши (Рис.14).

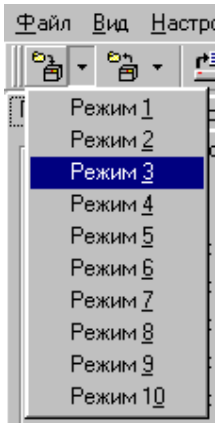


Рис.14 Быстрая загрузка режима

После загрузки параметры выбранного режима отображаются в соответствующих полях на закладке ***Прибор***.

Передача загруженного режима в хроматограф осуществляется нажатием кнопки ***Переслать*** на закладке ***Прибор*** (процедура занимает около 30 сек. Выходить из программы в течение этого времени не рекомендуется. Иначе может произойти сбой.).

Замечание: *При выключении питания аналитического блока с последующим его включением без выхода из системы обработки необходимо нажать кнопку* ***Переслать*** *на закладке* ***Прибор*** *для*

повторного перезадания температурных режимов работы хроматографа.

При выходе из программы и/или выключения питания компьютера аналитический блок сохраняет заданные параметры и после запуска программы они автоматически передаются в систему.

После пересылки всех параметров анализа и выхода прибора на режим, можно приступать к сбору хроматографических данных. Запуск анализа осуществляется либо кнопкой **Анализ** на передней панели хроматографа, либо кнопкой ***Пуск анализа*** на панели инструментов.

3.1.2 Задание режимов работы хроматографа для версии G.

Задание и контроль за параметрами анализа осуществляется на закладке ***Прибор***, внешний вид и назначение элементов которой представлено на рис.15.

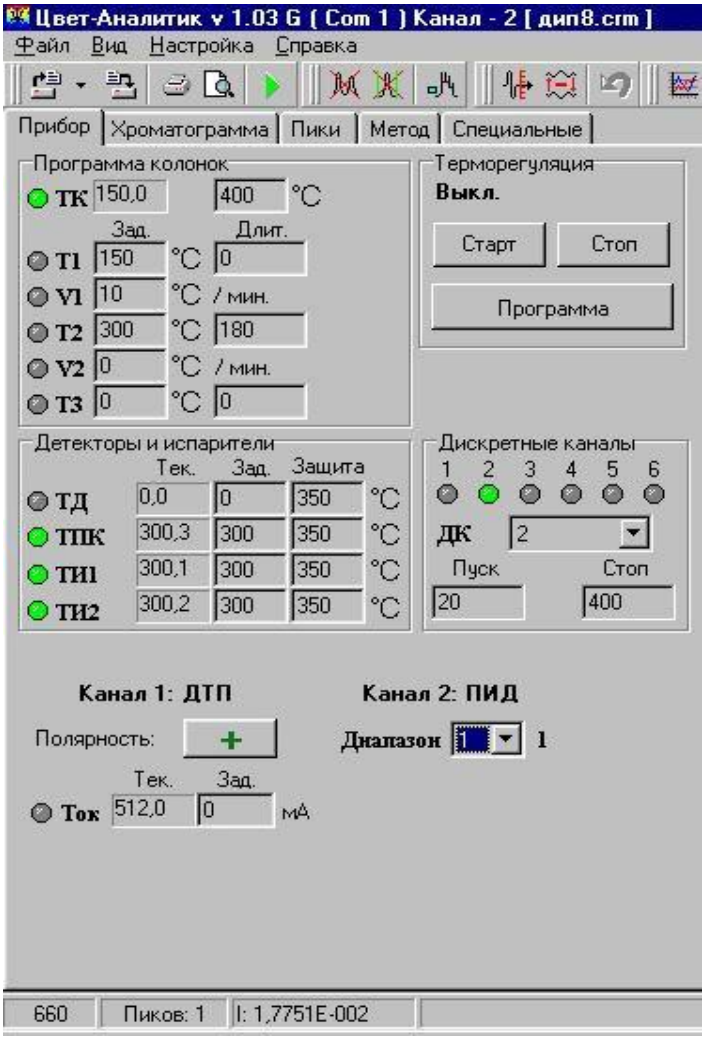


Рис.15 Закладка «Прибор» для варианта работы с БРИЗом

В левой части данной закладки представлены поля для ввода параметров анализа и контроля за ними.

Параметр **ТК** и индикатор, который расположен рядом, служит для контроля и отображает текущую температуру термостата колонок. Если текущая температура термостата соответствует температуре, которая задана для данного этапа программы колонок, то горит зеленый индикатор. В противном случае (программа выводит температуру на заданное значение), индикатор **ТК** зеленый мигающий, а в случае перегрева, красный мигающий.

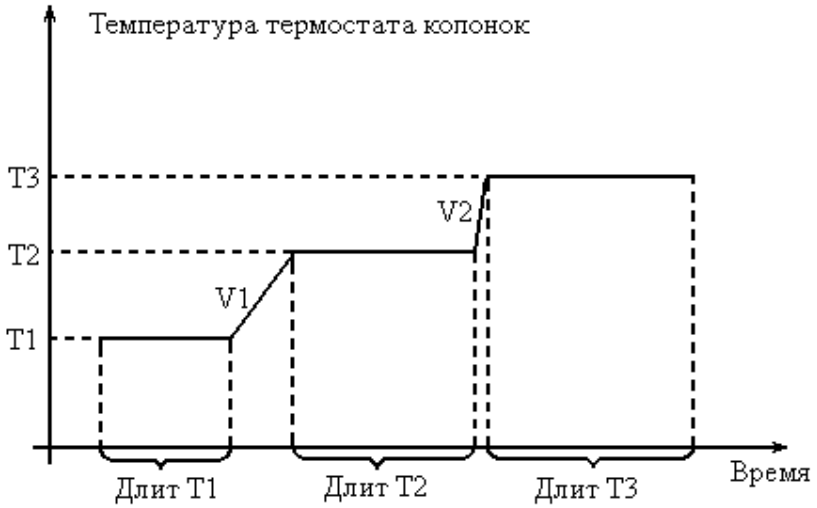


Рис.15а Температурная программа колонок

Параметры **T1**, **T2**, **T3**, **V1**, **V2** и световые индикаторы предназначены для задания температурной программы термостата колонок и контроля за тем на каком этапе данной программы находится хроматограф. При этом индикатор этапа, на котором находится программа - зеленый, а все остальные индикаторы этапов программы отключены, т.е. серые. График программы представлен на рис.15а. На графике горизонтальные участки (изотермы) соответствуют этапам **T1, T2, T3**, а наклонные – этапам нагрева термостата колонок со скоростями **V1, V2**.

Замечание: *При работе в изотермическом режиме необходимо задать время* ***Длит T1****, которое определяет длительность анализа.*

Блок индикаторов и числовых полей ***Детекторы и испарители*** служит для задания режимов и контроля за температурой детектора **– ТД**, испарителей **– ТИ1, ТИ2** и переходной камеры **ТПК**. Необходимые значения температур устанавливаются в числовых полях ***Заданное***, а контроль осуществляется по значениям полей ***Текущее***. В поле ***Защита*** устанавливается значение температуры большее чем в поле ***Заданная*** на величину не менее 50°С. При отсутствии заданных параметров цветовые индикаторы отключены, при разогреве – зеленые мигающие, при перегреве красные, а при соответствии текущих значений заданным – зеленые.

Индикаторы и числовые поля, расположенные в блоке ***Дискретные каналы*** предназначены для управления включением – выключением различных устройств, применяемых в комплекте (например – автоматический кран – дозатор для автоматического ввода пробы). Программа позволяет поддерживать до шести сигналов управления подобными устройствами, каждому из которых соответствует свой дискретный канал. Для каждого из дискретных каналов можно задать время запуска и время остановки. Время цикла работы дискретного канала не должно превышать время работы программы термостата колонок.

Программа задается для того дискретного канала, который выбран в выпадающем списке **ДК**. При каждом включении, какого либо дискретного канала соответствующий ему световой индикатор загорается зеленым цветом. Номер дискретных каналов для каждого устройства устанавливается в соответствии с маркировкой кабеля.

В поле ***Терморегуляция*** расположены кнопки Старт и Стоп для запуска и остановки терморегуляции.

Если в поле ***Терморегуляция*** нажата кнопка ***Программа***, а на БРИЗе кнопка ***Анализ1***, то снятие анализа будет проводиться по температурной программе колонок. Если кнопка ***Программа*** отжата, а на БРИЗе включена ***Анализ2***, то снятие анализа проходит в изотермическом режиме.

Примечание: при других комбинациях кнопок ***Анализ1***, ***Анализ2*** и кнопки ***Программа*** на панели управления прибором (рис.15), снятие анализа производиться не будет.

При выполнении температурной программы колонок открывание и закрывание двери происходит автоматически.

Если для изотермического процесса установлена температура менее $100^{\circ}C$, то выход на установленную температуру может осуществляться с открытой дверью.

Если для изотермического процесса задана температура свыше $100^{\circ}C$, то выход на установленную температуру осуществляется с закрытой дверью.

В полях ввода ***Канал 1*** и ***Канал 2*** автоматически отображаются используемые детекторы и их параметры: полярность, значения текущего и заданного тока для детектора **ДТП** и диапазон измерительного резистора для детектора **ПИД**.

Выбор диапазона резистора производится в специальном выпадающем меню (рис. 15б)

Рис.15б Меню изменения диапазона измерительного резистора

и включает в себя следующие значения:

1 – 10^{10} Ом;
2 – 10^{8} Ом;
3 – 10^{6} Ом.

Замечание: *При выключенном приборе в* ***Канале 1*** *и* ***Канале 2*** *нет никаких данных. Данные о детекторах и поля ввода появляются только после включения прибора.*

3.1.3 Задание режимов работы хроматографа для версии D.

Задание и контроль за параметрами анализа осуществляется на закладке ***Прибор***, внешний вид и назначение элементов которой представлено на рис.16.

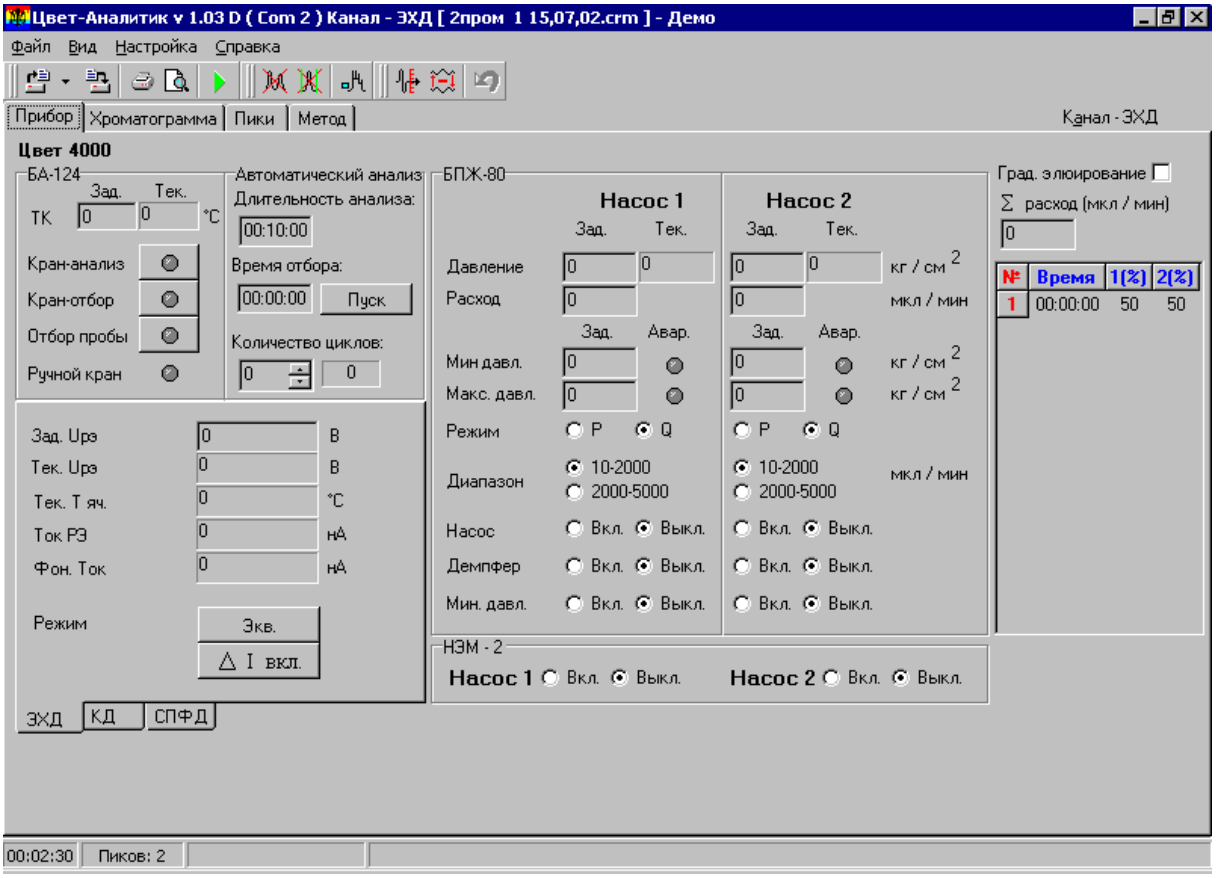


Рис.16 Закладка «Прибор» для варианта работы с хроматографом Цвет-4000

Сначала задаются режимы работы насосов. В программе реализована возможность управления работы 4-х насосов: 2-х БПЖ-80 и 2-х НЭМ-2.

Насосы БПЖ-80 служат для подачи потока элюэнта. В области управления насосом БПЖ-80 присутствуют следующие переключатели и индикаторы:

- ***Режим*** – выбор режима постоянного давления (***P***) или режима постоянного расхода (***Q***).
- ***Диапазон*** – выбор диапазона расхода: ***10-2000*** (для головки с плунжерами ∅ 3 мм) или ***2000-5000*** (для головки с плунжерами ∅ 5 мм).
- ***Мин. давл***. и ***макс. давл.*** – минимальное и максимальное давление (при выходе из диапазона соответствующие светодиоды, расположенные справа от полей ввода, окрашиваются в красный цвет).
- В полях ***Давление*** и ***Расход*** задаются соответствующие величины давления и расхода (в режиме постоянного расхода задается только расход, а в режиме постоянного давления – только давление – расход проставляется автоматически). В поле текущее давление индицируется текущее давление в системе.
- ***Насос*** – переключатель для включения/выключения насоса.
- ***Демпфер*** - переключатель для включения/выключения демпфирования (после набора давления в системе).
- ***Мин. давл.*** - переключатель для включения/выключения контроля за минимальным давлением в системе.

Аналогично задаются параметры второго насоса БПЖ-80.

В системе предусмотрено градиентное элюирование (при наличии двух насосов БПЖ-80) для смешивания в различных пропорциях двух элюэнтов. Для этого необходимо поставить галочку в поле ***Град. элюирование***, задать суммарный расход обоих насосов в поле ***Σ расход (мкл./мин.)*** и задать необходимое количество точек в таблице (добавление точек осуществляется кнопкой ***Insert***) с соответствующем временем и процентными соотношениями.

Управление насосами НЭМ-2 (насосы для подачи регенерирующих растворов) сводится к включению/выключению их соответствующими переключателями в соответствующей области управления.

В левой нижней части окна расположена область управления детекторами, состоящая из трех закладок:

1. ***ЭХД*** (электрохимический детектор). В данной области задается напряжение рабочего электрода детектора (***Зад. Uрэ***), задание режима работы измерение или эквивалент (нажатием кнопки происходит переключение между данными режимами, текущий режим указан на кнопке) а также включение и выключение режима приращения тока (кнопка ***ΔI***). Кроме того здесь можно контролировать текущие значения напряжения рабочего электрода

детектора (***Тек. Uрэ***), текущую температуру ячейки (***Тек. Т яч***.), ток рабочего электрода (***Ток РЭ***) и фоновый ток (***Фон. Ток***).

Рис.16а Пример закладки ЭХД

2. ***КД*** (кондуктометрический детектор). В данной области выбираются диапазон измерения, и режим работы (измерение или градуировка), включить или выключить компенсацию и термостат ячейки, а так же переключать полярность сигнала. Кроме того здесь можно контролировать текущую температуру ячейки.

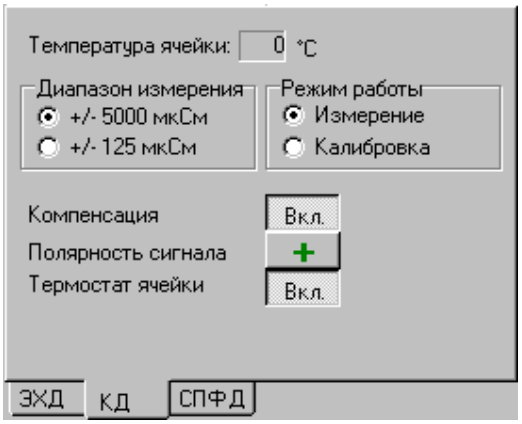


Рис.16б Пример закладки КД

3. ***СПФД*** (спектрофотометрический детектор). В данной области в соответствующих полях задаются Длинна волны в нм. и Коэффициент деления. Можно контролировать значения: ***Сигнал измерительный***, ***Сигнал сравнительный*** и ***Оптическое смещение***.

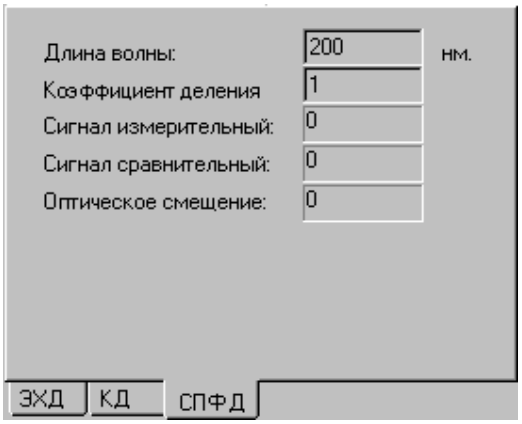


Рис.16в Пример закладки СПФД

В зоне управления аналитическим блоком БА-124 можно задать и контролировать текущую температуру термостата колонок (***ТК***). Кроме того в данной области для проведения анализа необходимо:

- Переключить кран-дозатор в режим отбора пробы, нажав кнопку ***Кран-отбор*** – загорится зеленый индикатор на данной кнопке (по умолчанию аналитический блок находится в положении анализ, о чем свидетельствует зеленый индикатор на кнопке ***Кран-анализ***).
- Задать ***Длительность анализа*** в зоне ***Цикл работы прибора***.
- Нажать кнопку ***Отбор пробы*** – загорится зеленый индикатор на ней. При этом произойдет включение перистальтического насоса, с помощью которого происходит заполнение петли крана-дозатора анализируемым раствором.
- После заполнения петли крана-дозатора анализируемым раствором отключить перистальтический насос повторным нажатием кнопки ***Отбор пробы*** – зеленый индикатор на ней погаснет.
- Запустить анализ нажатием кнопки ***Кран-анализ*** (на ней загорится зеленый индикатор).

Индикатор ***Ручной кран*** (если он горит зеленым цветом) сигнализирует о том, что ручной кран-дозатор находится в положении анализ.

Для циклической работы прибора необходимо в зоне ***Цикл работы прибора*** задать ***Время анализа***, ***Время отбора*** пробы, ***Длительность цикла*** и ***Количество циклов*** работы (перед заданием параметров цикла необходимо переключить кран-дозатор в режим отбора, нажав кнопку ***Кран-отбор***) . Длительность цикла должна учитывать время анализа, время отбора, время необходимое для переключения крана-дозатора и время на автоматическую обработку хроматограммы в соответствии с заданным методом (1-2 мин.). Работа цикла строится по следующей схеме: после нажатия кнопки ***Кран-анализ*** (на ней загорится зеленый индикатор) начинается первый цикл анализа, после окончания анализа система проводит автоматическую обработку принятых хроматограмм, в соответствии с настроенным методом, и запускает следующий цикл анализа с уменьшением количества циклов. При достижении количества циклов = 1 запуск цикла автоматически прекращается. Если в поле

количества циклов задано число 9999, то программа начинает работать без уменьшения количества циклов, т.е. бесконечно. Для экстренного прерывания работы прибора в цикле нужно выключить режим анализа на приборе.

<u>Замечание:</u> *Если все индикаторы на закладке **«Прибор»** неактивны, т.е. серые, это говорит о том, что нет связи компьютера с хроматографом. В этом случае следует проверить правильность подключения хроматографа к компьютеру в следующем порядке:*

1 Проверить кабели, соединяющий компьютер с приборами;
2 Убедиться в наличии на параллельном порте электронного ключа поставляемого вместе с системой;
*3 .Проверить, правильно ли выбраны номера последовательных портов связи (меню **Настройка / Портов**);*

Все параметры на этой закладке вводятся и отображаются либо в секундах, либо в часах**:**минутах**:**секундах.

3.1.4 Задание режимов работы хроматографа для версии С.

Задание и контроль за параметрами анализа осуществляется на закладке ***Прибор***, внешний вид и назначение элементов которой представлено на рис.17.

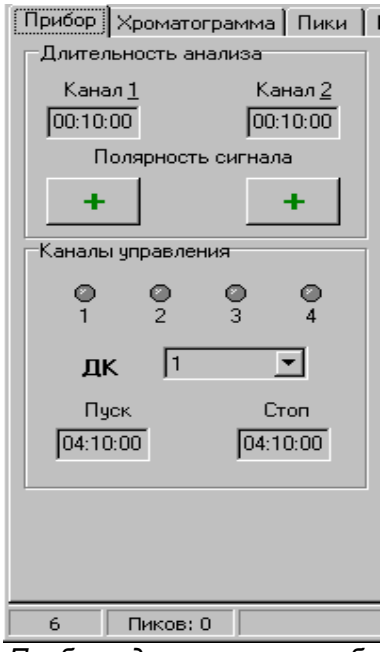


Рис.17 Закладка «Прибор» для варианта работы с блоком АЦП

В полях ввода ***Канал1*** и ***Канал2*** устанавливается время длительности анализа для каждого канала соответственно. Причем время может вводиться в различных форматах (часы**:**минуты**:**секунды или просто в секундах).

Переключение полярности сигнала для каждого канала осуществляется нажатием соответствующей кнопки:

.

В поле ***ДК*** выбирается номер дискретного канала (всего их четыре), а в полях ввода ***Пуск*** и ***Стоп*** устанавливается время начала и конца работы этого канала.

Каналы управления можно включать и выключать вручную при нажатии на кнопку с соответствующим номером:

. Если индикатор красный, то канал включен.

3.1.5 Задание режимов работы хроматографа для версии J.

Задание и контроль за параметрами анализа осуществляется на закладке ***Прибор***, внешний вид и назначение элементов которой представлено на рис.18.

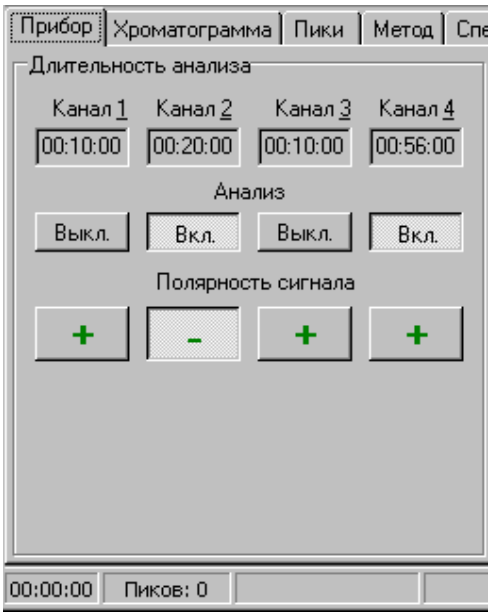


Рис.18 Закладка «Прибор» для варианта работы с версией J

В полях ввода ***Канал1–Канал4*** устанавливается время длительности анализа для каждого канала соответственно. Причем время может вводиться в различных форматах (часы**:**минуты**:**секунды или просто в секундах).

Кнопка ***Вкл./Выкл.*** показывает идет или нет анализ на данном канале.

Переключение полярности сигнала для каждого канала осуществляется нажатием соответствующей кнопки: [+].

3.1.6 Настройка формата чисел и времени.

Изменение формата времени осуществляется в пункте меню ***Настройка / Параметров / Формат / Времени***

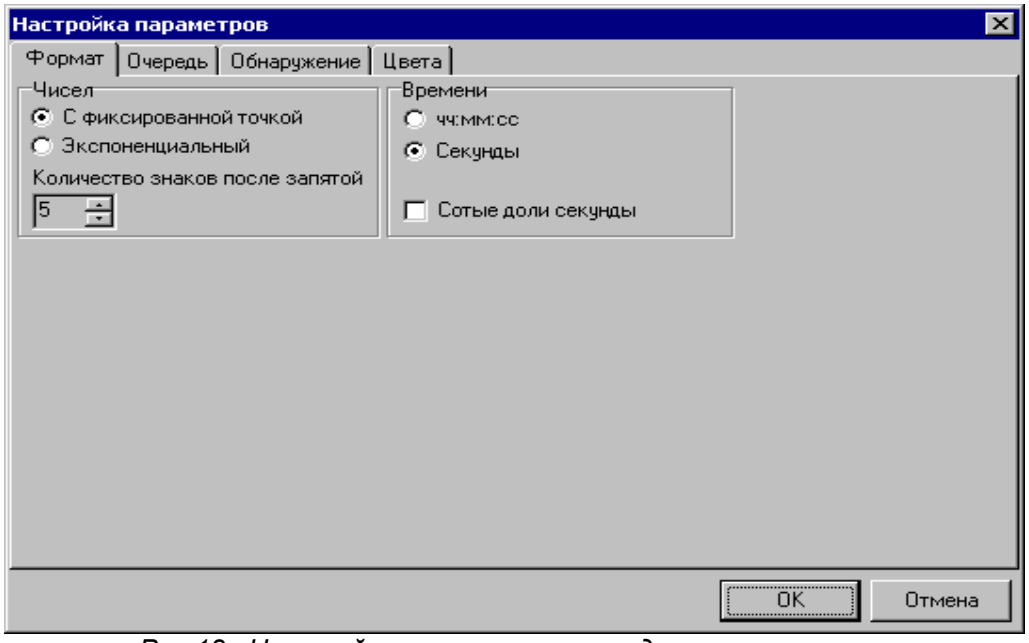


Рис.18а Настройка параметров вывода времени и чисел на закладке «Прибор»

здесь можно установить следующие временные форматы: часы**:**минуты**:**секунды или просто секунды.

Кроме того, здесь можно выбрать формат представляемых чисел: с фиксированной точкой, либо экспоненциальный (данный формат подходит либо для очень больших, либо для очень маленьких чисел) и количество знаков после запятой: для этого необходимо с помощью вспомогательных стрелочек, либо увеличить, либо уменьшить текущее число до того, какое Вам будет необходимо.

Замечание: *Если установлен формат чисел с фиксированной точкой и количество знаков после запятой мало, то значения параметров в таблицах могут отображаться как нулевые. В этом случае следует*

увеличить количество знаков после запятой или перейти к экспоненциальному формату.
Расчет не зависит от видимых в таблице значений (имеется в виду отображение нулями).

Для подтверждения введенных значений нажмите кнопку ***Ок***, для отмены введенных значений, кнопку ***Отмена***.

3.2 Загрузка и сохранение хроматограмм.

Система **Цвет-Аналитик** может автоматически сохранять хроматограмму по окончании анализа в каталоге ***Очередь / Прибор X***, где X – номер последовательного порта связи, к которому подключен прибор. Все хроматограммы имеют расширение .crm – это архивированный файл, размер которого зависит от длительности анализа и количества размеченных пиков.

Параметры автоматического сохранения хроматограмм настраиваются в системе меню: ***Настройка / Параметров / Очередь*** (Рис.19).

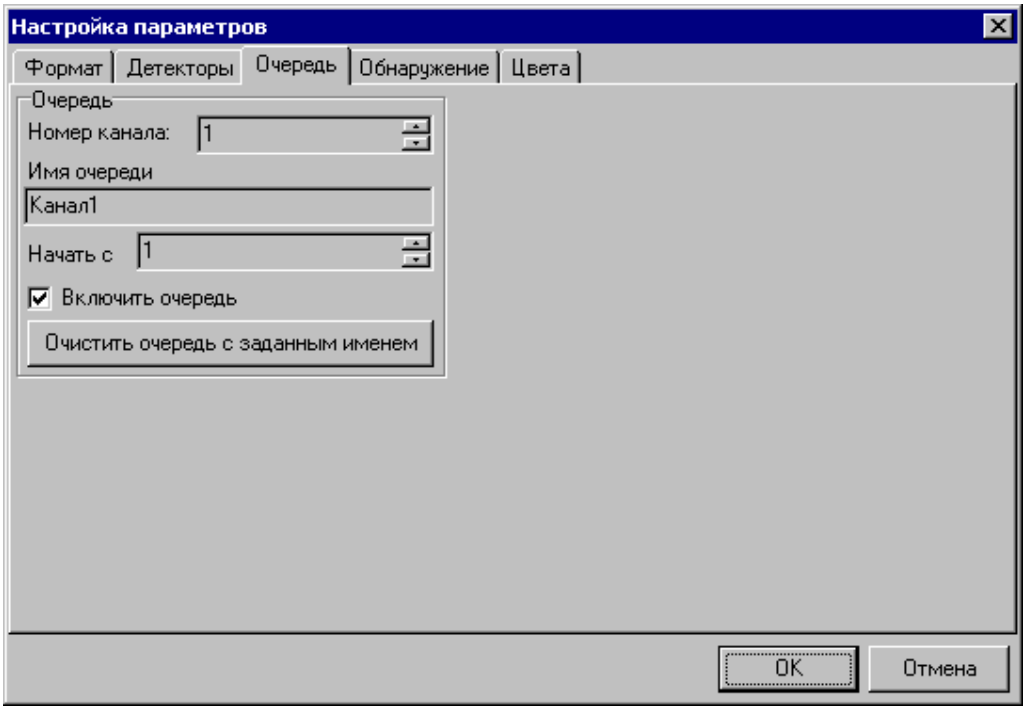


Рис.19 Настройка автоматического сохранения хроматограмм

Для включения (отключения) автоматического сохранения хроматограмм следует установить (отменить) галочку слева от надписи ***Включить очередь***.

Если очередь включена, для канала, установленного в поле ***Номер канала,*** вводятся: ***Имя очереди*** (т.е. название файлов, с которыми будет происходить автоматическое сохранение в соответствующих каталогах) и номер файла, с которого требуется начать сохранение.

Примечание: команда ***Очистить очередь с заданным именем*** при нажатии на соответствующую кнопку (рис.19) осуществляет удаление файлов хроматограмм с заданным именем очереди (см. поле ***Имя очереди*** на рис.19). При использовании автоматической обработки, в очереди сохраняется уже обработанная хроматограмма.

Рекомендации: после каждого дня работы рекомендуется обрабатывать ***ВСЕ*** файлы хроматограмм из очереди либо записывать их с другими именами вручную, а очередь очищать с помощью команды ***Очистить очередь с заданным именем***.

Замечание: *устанавливаемые параметры: имя очереди, номер первого файла в соответствующей очереди, очистка очереди с заданным именем, параметр включения автоматического сохранения устанавливаются только для выбранного канала. Т.е., для установки какого-либо параметра для двух каналов, сначала выбирается номер одного канала и устанавливается для него нужный параметр, а затем установка делается для другого канала.*

Если очередь отключена, снятую хроматограмму следует сохранять вручную.

Перед сохранением файла под своим именем рекомендуется заполнить паспорт хроматограммы в меню ***Файл / Паспорт хроматограммы***.(Рис. 19а)

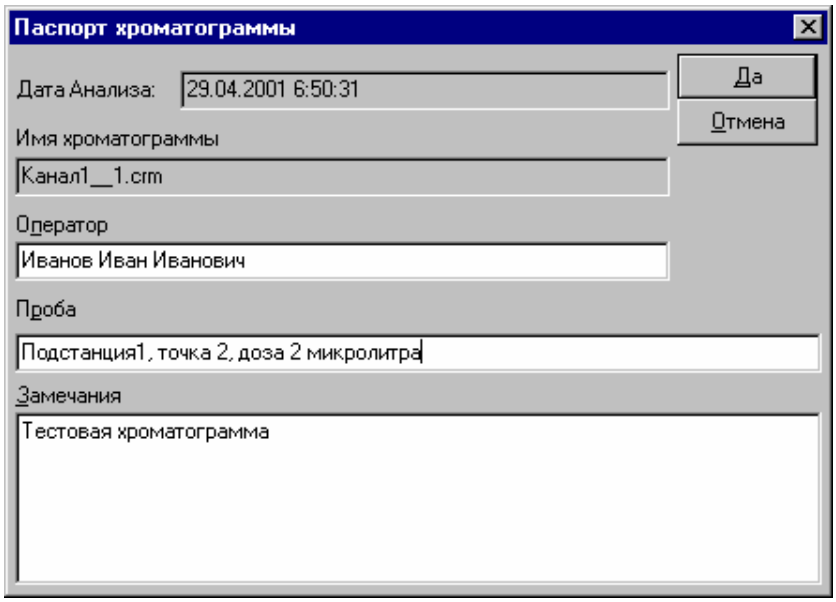


Рис.19а Паспорт хроматограммы

Заполните эти поля по необходимости: Поле ***Дата*** анализа заполняется автоматически по времени выполнения данного анализа, поле ***Имя хроматограммы*** устанавливается по ее имени в очереди хроматограмм или после присвоения ей имени в режиме сохранения вручную. Необходимо лишь заполнить поля ***Оператор***, ***Проба*** и ***Замечания***. В поле ***Замечания*** можно вводить любую текстовую информацию. После ввода каждой строки текста – обязательно нажимать ***Enter***, иначе при выводе на печать может произойти обрезка текста.

Если очередь включена, то автоматически заполняются только поля ***Дата*** и ***Имя хроматограммы***, а остальные поля остаются неизменными.

После заполнения паспорта нажимать кнопку ***Да***. Если запоминать сделанные изменения не нужно, нажать кнопку ***Отмена***.

Чтобы сохранить снятые с прибора хроматограммы под своим именем (если это необходимо), нужно выполнить команду ***Сохранить хроматограмму***

либо в системе меню ***Файл / Сохранить хроматограмму***, либо на панели инструментов (Рис.19б).

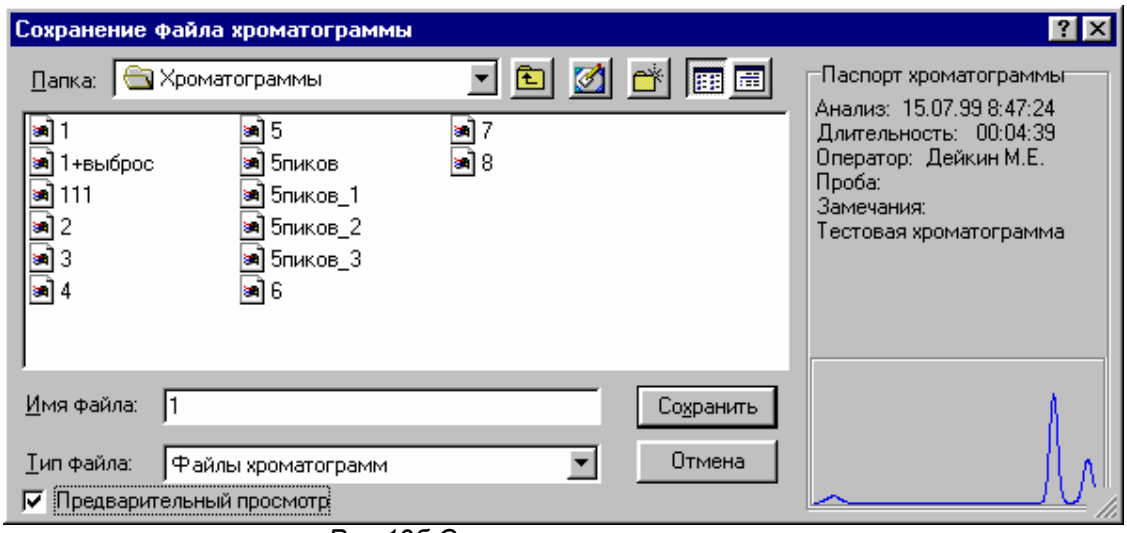


Рис.19б Сохранение хроматограмм

В данном окне необходимо ввести имя файла и нажать кнопку ***Сохранить***. Если отметить опцию ***Предварительный просмотр***, то при выделении уже сохраненных хроматограмм, в правом нижнем углу будет выводится их графическое представление. В правом углу окна (рис.19б и рис.19в) отображается паспорт хроматограммы.

Чтобы загрузить с диска в определенный канал сохраненную ранее хроматограмму, необходимо выполнить команду ***Загрузить хроматограмму***: либо в меню ***Файл / Загрузить хроматограмму***, либо воспользовавшись соответствующей кнопкой на панели инструментов. При этом на экран выводится окно «***Загрузка файла хроматограммы***»(Рис.19в).

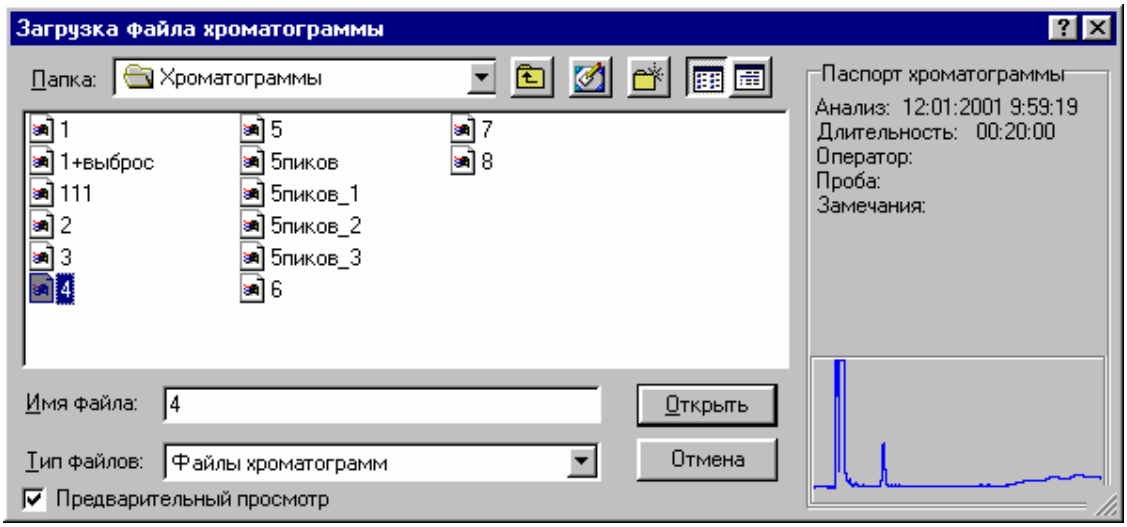


Рис.19в Загрузка хроматограмм

Чтобы загрузить хроматограмму, необходимо найти ее имя, затем либо щелкнуть по ней два раза мышкой, либо, щелкнув один раз, в области предварительного просмотра просмотреть ее паспорт, графическое

представление, и убедившись, что это именно та хроматограмма, которую необходимо загрузить, нажать кнопку **Открыть** в этом окне.

Кроме того, 10 последних загруженных с диска хроматограмм система помнит, и их можно загрузить, нажав на панели инструментов на стрелочку справа от кнопки ***Загрузка хроматограмм*** на панели инструментов - появится выпадающий список (Рис.19г).

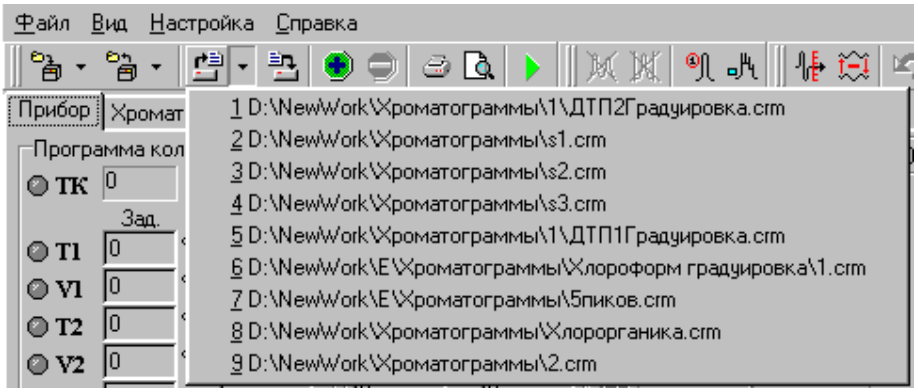


Рис.19г Загрузка последних 10 хроматограмм

Для загрузки в активный канал необходимо выбрать нужное имя файла и щелкнуть по нему мышкой.

Примечание: настоятельно не рекомендуется производить загрузку сохраненных хроматограмм для обработки в каналы 1 и 2 во время анализа.

3.3 Восстановление после сбоев.

Если во время анализа произошел сбой компьютера или программы, то уже снятую часть хроматограммы можно восстановить воспользовавшись пунктом меню ***Файл / Восстановить последнюю хроматограмму*** (см. рис.19д).

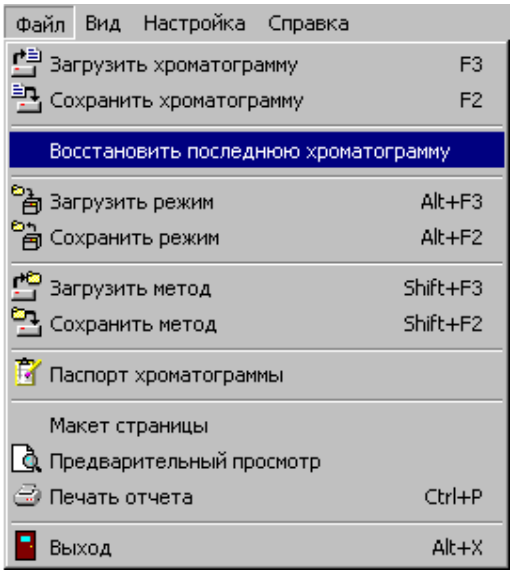


Рис.19д Команда меню
Файл / Восстановить последнюю хроматограмму

Восстановление хроматограммы происходит отдельно в каждом канале. Т.е. сначала выставляется номер канала, а затем применяется команда ***Восстановить последнюю хроматограмму***.

Примечание: Если сбой произошел во время анализа, то перед восстановлением хроматограммы необходимо отключить ***Пуск анализа*** на самом хроматографе. Иначе данные снятые ранее будут перезаписаны.

3.4 Масштабирование хроматограмм.

После снятия хроматограммы и ее сохранения, либо в процессе сбора хроматографических данных, для детального просмотра всей хроматограммы или отдельных ее участков можно использовать функции масштабирования. Эти функции доступны на закладках ***Прибор*** и ***Хроматограмма*** (Рис.20).

Примечание: действия по масштабированию хроматограммы гораздо удобнее выполнять на закладке ***Хроматограмма***.

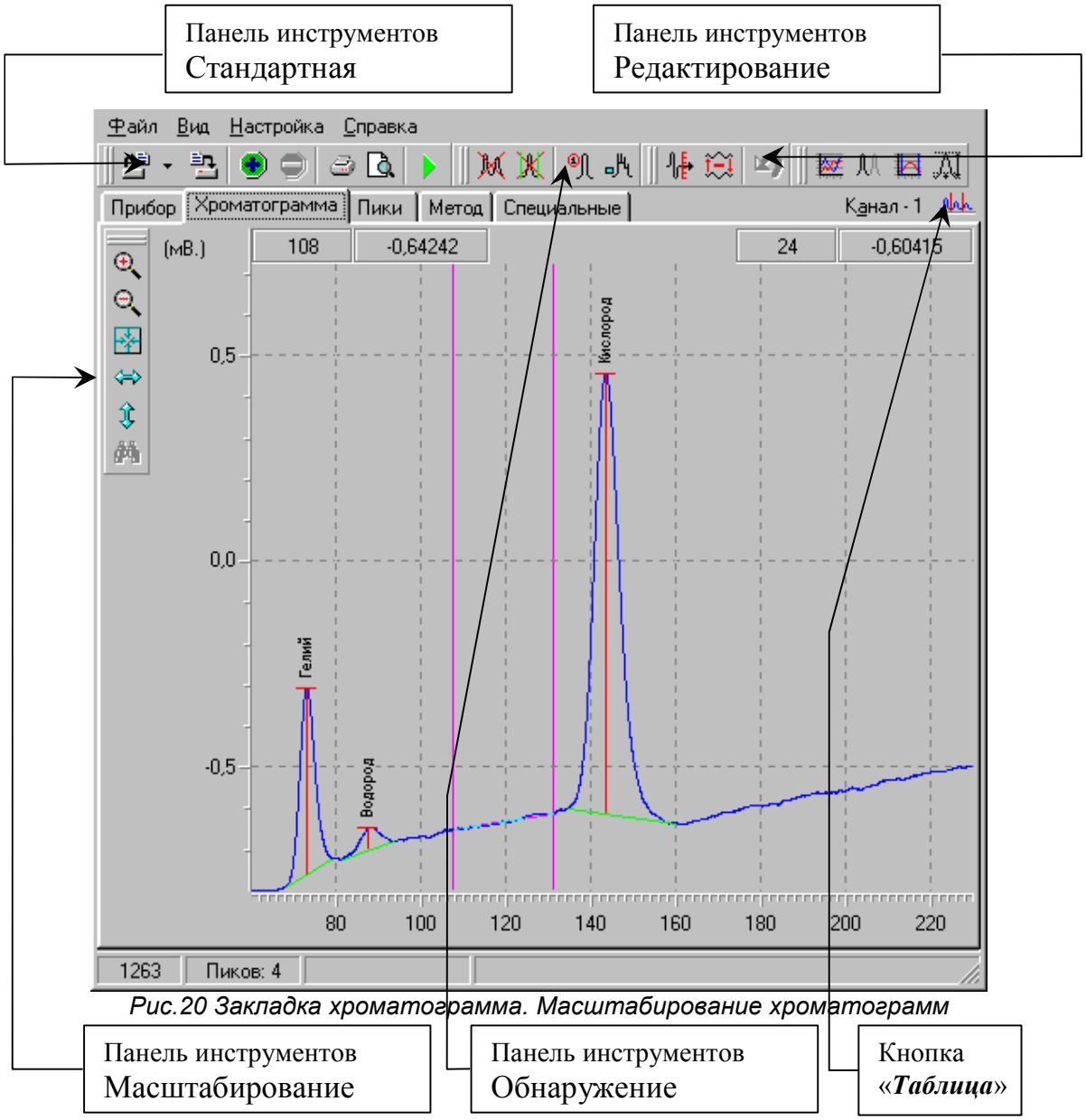


Рис.20 Закладка хроматограмма. Масштабирование хроматограмм

В окне ***Хроматограмма,*** нажав кнопку «***Таблица***», можно показать таблицу размеченных пиков (Рис 20а). При ее нажатии внизу экрана появляется таблица размеченных пиков, при повторном нажатии таблица пропадает

(Рис.20). Высота таблицы регулируется разделителем, между графическим полем и таблицей.

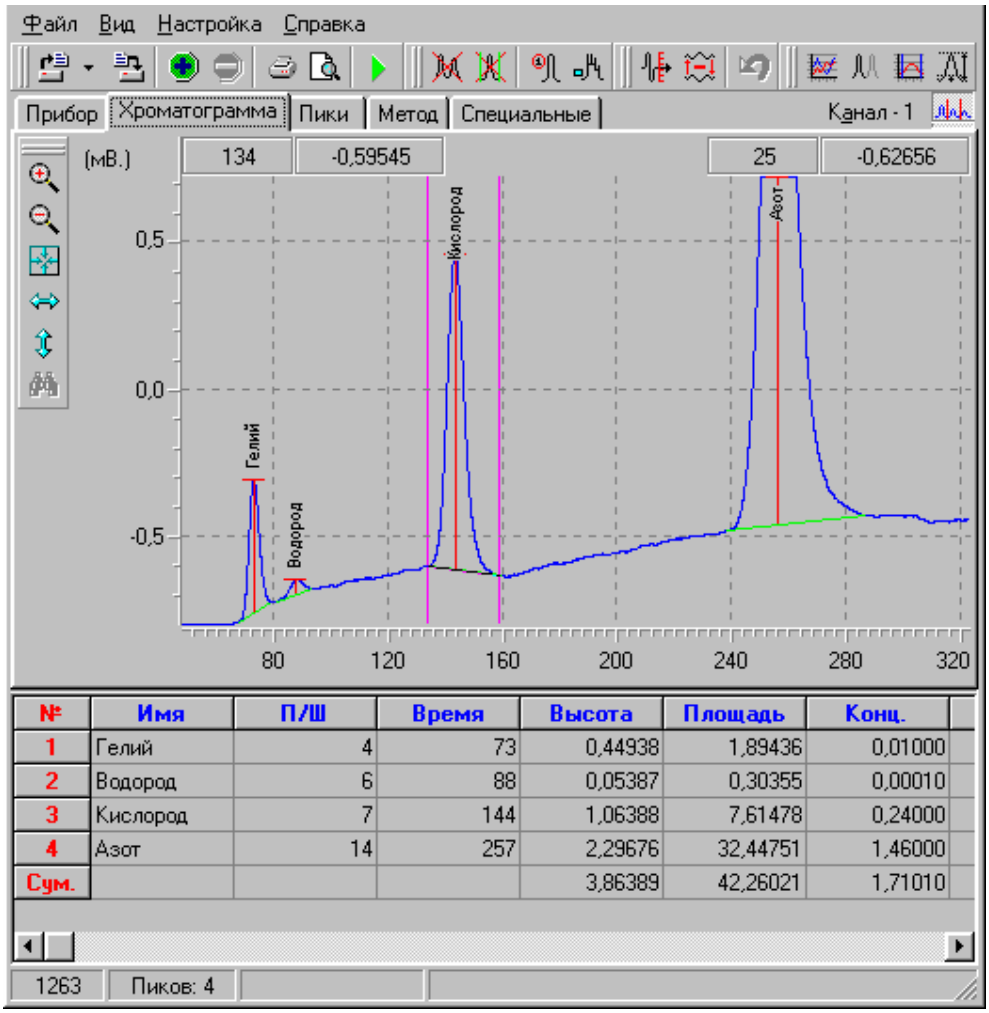


Рис.20а Закладка хроматограмма с таблицей размеченных пиков

Инструментом, служащим для обработки хроматограмм являются графические указатели, которые можно перемещать по всей графической области экрана. Для этого курсор мыши нужно установить на один из графических указателей, прижать левую кнопку мыши, и удерживая ее в прижатом состоянии перетащить указатель в нужное место на хроматограмме. Если в процессе передвижения одного графического указателя происходит пересечение с другим графическим указателем, то они меняются местами (левый графический указатель становится правым, правый – левым).

Панель инструментов ***Масштабирование***

Панель инструментов ***Масштабирование*** расположена слева от графического представления хроматограммы. Масштабирование можно производить и с клавиатуры.

- ***Команда Распахнуть*** . Данная команда разворачивает на всю графическую область участок, находящийся между графическими

указателями. Для этого необходимо отметить графическими указателями границы интересующего нас участка хроматограммы и выполнить данную команду.

- ***Команда Сжать***. Действие команды обратно действию команды ***Распахнуть***.
- ***Команда Показать все.*** Эта команда представляет хроматограмму в следующем виде: находится минимальный и максимальный сигнал и вся хроматограмма отображается как по амплитуде, так и по времени. С той лишь разницей, что для отрисовки по амплитуде прибавляется по 5% с каждой стороны, а по времени нет (вид хроматограммы не изменяется, изменяется только масштаб).
- ***Команда Все по времени.*** Команда не отменяет масштабирование по амплитуде, но показывает всю хроматограмму по времени.
- ***Команда Все по амплитуде.*** Команда приводит хроматограмму к тому масштабу, в котором производился сбор хроматографических данных (+5% к минимуму и максимуму по амплитуде при отрисовке).
- **Команда Масштабирование.** Эта команда доступна только при сборе данных с хроматографа и устанавливает графическое положение снимаемой хроматограммы в центр поля по вертикальной оси.

Хроматограмму можно перемещать влево/вправо или вверх/вниз с помощью мыши. Для этого необходимо, при перемещении вправо-влево установить курсор мыши на разметку горизонтальной оси хроматограммы (временную) и после изменения вида курсора прижать левую кнопку мыши и тащить ее вправо или влево. При достижении конечной точки, левую кнопку мыши отпустить. Аналогично перемещается хроматограмма вверх-вниз, только перенос осуществляется на разметке вертикальной оси (амплитудной).

Масштабирование с использованием клавиатуры:

Для целей быстрого масштабирования хроматограмм на графическом поле были дополнительно введены следующие команды:

- *Ctrl* + → по нажатии клавиши [***Ctrl***] и клавиши [→], хроматограмма (если она распахнута) сместится на 10% шкалы времени вправо, или если хроматограмма при смещении дошла до начала шкалы, то она увеличиться по ширине на 10% вправо по времени. Если для хроматограммы была выполнена команда ***Все по времени***, то она просто увеличиться по ширине на 10% вправо по шкале времени.

- *Ctrl* + ← по нажатии клавиши [***Ctrl***] и клавиши [←], хроматограмма (если она распахнута) сместится на 10% шкалы времени влево, или если хроматограмма при смещении дошла до конца шкалы, то она увеличиться по ширине на 10% влево по времени. Если для хроматограммы была выполнена

команда ⇔ ***Все по времени***, то она просто увеличиться по ширине на 10% влево по шкале времени.

- *Ctrl* + ↓ по нажатии клавиши [***Ctrl***] и клавиши [↓], хроматограмма сместится на 10% шкалы амплитуды вниз.

- *Ctrl* + ↑ по нажатии клавиши [***Ctrl***] и клавиши [↑], хроматограмма сместится на 10% шкалы амплитуды вверх.

- *Ctrl* + ***Page Up*** по нажатии клавиши [***Ctrl***] и клавиши [***Page Up***], хроматограмма сжимается на 20% по амплитуде.

- *Ctrl* + ***Page Down*** по нажатии клавиши [***Ctrl***] и клавиши [***Page Down***], хроматограмма растягивается на 20% по амплитуде.

- *Ctrl* + *Home* по нажатии клавиши [***Ctrl***] и клавиши [***Home***], хроматограмма сжимается на 20% по времени.

- *Ctrl* + ***End*** по нажатии клавиши [***Ctrl***] и клавиши [***End***], хроматограмма растягивается на 20% по времени.

Масштабирование хроматограммы можно также производить используя одновременно мышь и клавиатуру. Для этого следует удерживая клавишу [***Shift***] прижать левую кнопку мыши и выделить нужную область хроматограммы (как во многих графических редакторах). После отпускания кнопки мыши выделенная область распахивается на весь экран.

3.5 Редактирование и разметка хроматограмм.

Полученную хроматограмму можно отредактировать в ручном режиме обработки, для этой цели существуют несколько панелей инструментов:

Панель инструментов ***Редактирование:***

- ***Команда Фильтр выбросов*** – команда, служащая для удаления кратковременных выбросов (не превышающих 0,5 сек.), которые могут помешать при разметке хроматограмм.
- ***Команда Инверсия*** – эта команда инвертирует сигнал, поступивший с хроматографа. Например, пик, который вышел не в положительной, а в отрицательной полярности. Для того чтобы «перевернуть» пик или участок хроматограммы, требуется выделить графическими курсорами область хроматограммы, которую требуется «перевернуть» или инвертировать. После чего выполнить эту команду.
- ***Команда Отрезать*** – служит для вырезания части хроматограмм. Для выполнения этой команды требуется поставить графические курсоры так, чтобы они охватывали ту часть хроматограммы, которую необходимо вырезать, и выполнить данную команду. Участок между графическими курсорами заменяется на прямую линию, соединяющую сигнал в местах установки графических курсоров.
- ***Команды К левой базе , К правой базе*** . – Команды используются для компенсации дрейфа нулевой линии (Рис.21-22).

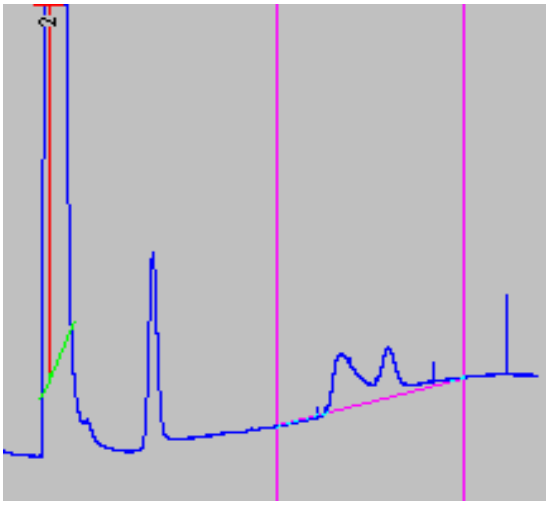
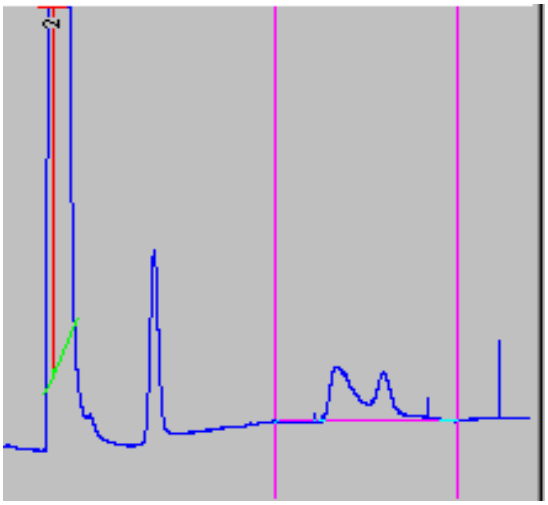


Рис.21-22. До команды К левой базе



После команды К левой базе

График хроматограммы после выполнения команды ***К левой базе*** (***К правой базе***) смешается на угол, который составляет прямая проходящая через точки пересечения графических курсоров с хроматограммой и нулевой линией.

- ***Отменить***. Кнопка становится доступной при выполнении команд редактирования. Отменяет последнее действие по редактированию хроматограммы. Количество отмен не ограничено.

  Замечание: *Во время анализа не рекомендуется использование функций редактирования в каналах сбора данных, это может привести к потере данных.*

Панель инструментов ***Обнаружение***.

- ***Удалить все пики***. Данная команда производит удаление всей разметки хроматограммы, при этом таблица пиков полностью очищается, а с хроматограммы удаляются все метки пиков.

- ***Удалить пики между курсорами*** – команда удаляет разметку пиков, находящихся между графическими указателями. При выполнении команды из таблицы удаляются все параметры этих пиков, а с хроматограммы удаляется разметка пика. После выполнения данной команды происходит перенумерация оставшихся размеченных пиков.

- ***Определить пик*** **-** разметка одного пика в ручном режиме. Для разметки одного пика необходимо увеличить на экране нужный пик с помощью команд панели инструментов линейки ***Масштабирование,*** описанных выше. Далее левый графический указатель поставить на начало пика, а правый графический указатель поставить на конец пика и выполнить данную команду. В результате этого обнаруженный пик разметится на графической части экрана, а все его параметры, такие как площадь, полуширина, высота запишутся в таблицу на закладке ***Пики***.

  Примечание: Если в ***Настройке параметров / Обнаружение*** отмечен пункт добавления параметров обнаружения в таблицу обнаружения метода, то при последующей разметке хроматограмм по созданному методу участок хроматограммы между началом и концом, указанными в данной строке, будет принудительно считаться одиночным пиком. Строка в таблице обнаружения соответствующая данной команде отличается тем, что все параметры, кроме начала и конца, должны быть нулевыми.

- ***Автообнаружение на экране*** – это команда разметки группы пиков (возможно и всей хроматограммы). Для этого следует поставить оба графических указателя на прямом участке базовой линии на расстоянии самого узкого пика, который необходимо обнаружить, и далее выполнить данную команду. В результате может обнаружиться несколько больше или меньше пиков, чем необходимо. Для избежания этого рекомендуется обнаруживать пики по участкам хроматограммы, т.е. сначала распахнуть один определенный участок с помощью команд масштабирования, разметить его, и перейти к следующему.

<u>Примечание:</u> Если в ***Настройке параметров / Обнаружение*** отмечен пункт добавления параметров обнаружения в таблицу обнаружения метода, то применение этой команды автоматически добавляет строку в таблицу обнаружения метода с текущими параметрами порога и полуширины. Подробнее о таблице обнаружения метода смотри п. 3.5.1.

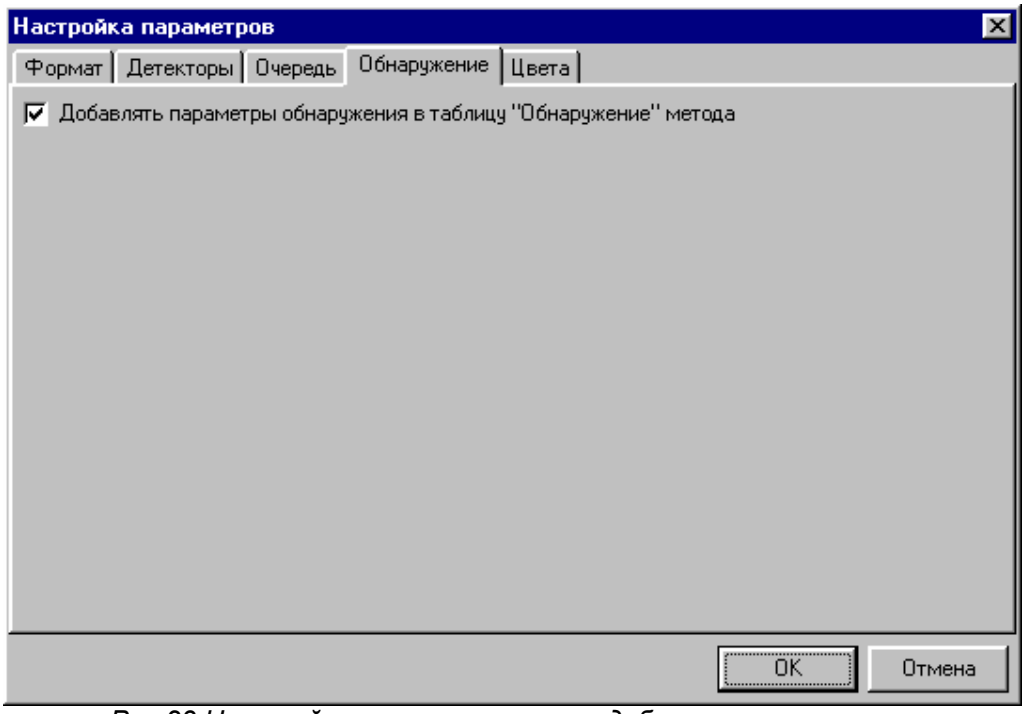
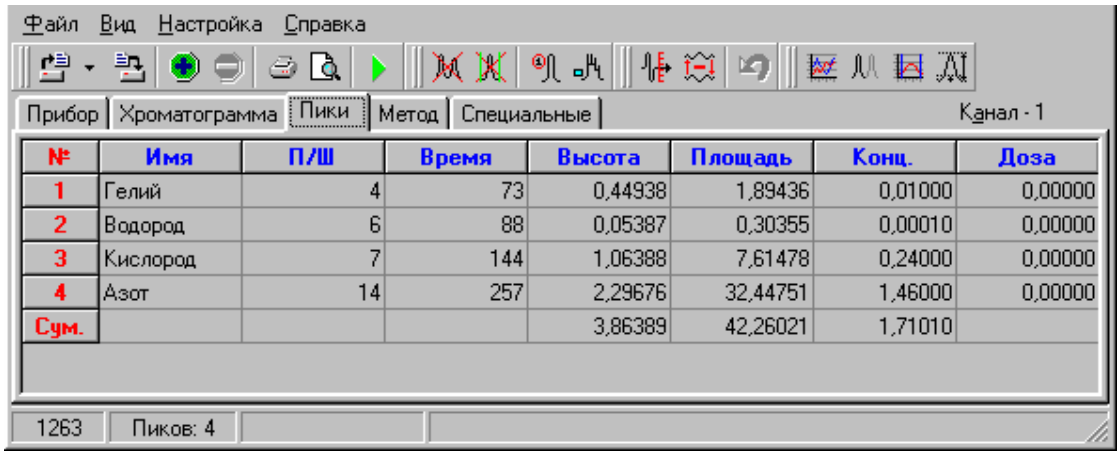


Рис.23 Настройка автоматического добавления параметра в таблицу обнаружения метода

- ***Автообнаружение по параметрам*** – обнаружение выполняется по числовым значениям, заданным на закладке ***Метод / Обнаружение***. Подробнее о таблице обнаружения метода смотри п. 3.5.1.

После разметки хроматограммы все параметры размеченных пиков, такие как: время выхода, полуширина, высота, площадь можно найти на закладке ***Пики***. (Рис. 24а)



№	Имя	П/Ш	Время	Высота	Площадь	Конц.	Доза
1	Гелий	4	73	0,44938	1,89436	0,01000	0,00000
2	Водород	6	88	0,05387	0,30355	0,00010	0,00000
3	Кислород	7	144	1,06388	7,61478	0,24000	0,00000
4	Азот	14	257	2,29676	32,44751	1,46000	0,00000
Сум.				3,86389	42,26021	1,71010	

Рис.24а Таблица размеченных пиков

Настроить видимость параметров таблицы пиков можно из меню ***Настройка / Таблицы пиков***. В этом случае появляется диалоговое окно, содержащее наименования полей таблицы (рис.24б). Соответствующие поля можно отобразить в таблице, отметив их галочкой.

Эту же настройку можно произвести иначе, сделав двойной щелчок левой кнопкой мыши на заголовках столбцов таблицы. В результате выводится окно настройки таблицы пиков (Рис. 24б). В этом окне галочкой отмечаются те параметры пиков, которые необходимо вывести на экран.

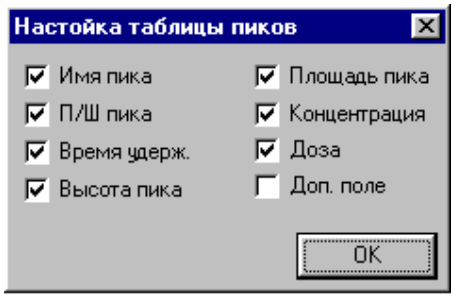


Рис.24б Окно настройки видимости параметров пиков

- ***Имя пика*** – наименование компонента пробы, соответствующего данному пику. Содержимое данного поля заполняется автоматически после запуска метода (если данный пик присутствует в шаблоне, если нет - при необходимости возможно заполнить вручную) или заполняется вручную при создании метода (подробнее о создании метода смотри п. 3.5).
- ***П/Ш пика*** – полуширина пика, измеряемая на половине высоты в сек..
- ***Время удерж. (Время)*** – время удерживания данного пика в сек..
- ***Высота пика (Высота)*** – высота пика в нА или мВ (в зависимости от типа детектора) либо в любой другой единице измерения, пересчитанной из основной с помощью коэффициента ***Вес***.
- ***Площадь пика*** – площадь данного пика в нА*с или мВ*с (в зависимости от типа детектора) либо в любой другой единице измерения, пересчитанной из основной с помощью коэффициента ***Вес***.
- ***Концентрация*** – концентрация вещества, соответствующего данному пику. Выводится в процентах для метода расчета ***Нормализация.*** Для методов расчета ***Абсолютная градуировка*** и ***Внутренний стандарт*** выводится в единицах размерности градуировки.
- ***Доза*** – объем дозируемой градуировочной смеси (для метода расчета ***Абсолютная градуировка***). Подробнее смотри п. 3.5.3.2.
- ***Доп.*** – дополнительное поле.

Панель инструментов ***Специальные.***

- ***Сложение пиков.*** - служит для расчета хроматограмм производящихся на нескольких детекторах и/или колонках. Информация о пиках из первых каналов переносится в последний, если среди них были пики с одинаковыми названиями, то параметры таких пиков складываются.

- ***Свертка*** с шаблоном . Команда применяется, для того чтобы удалить с анализируемой хроматограммы пики отсутствующие на шаблоне. Данная операция проводится на уже размеченной хроматограмме и удаляет разметку “лишних” пиков.
- ***Расчет СКО по группе загружаемых хроматограмм*** . Этой командой на экран выводится окно «***Загрузка файлов хроматограмм для расчета СКО***» (Рис. 25).

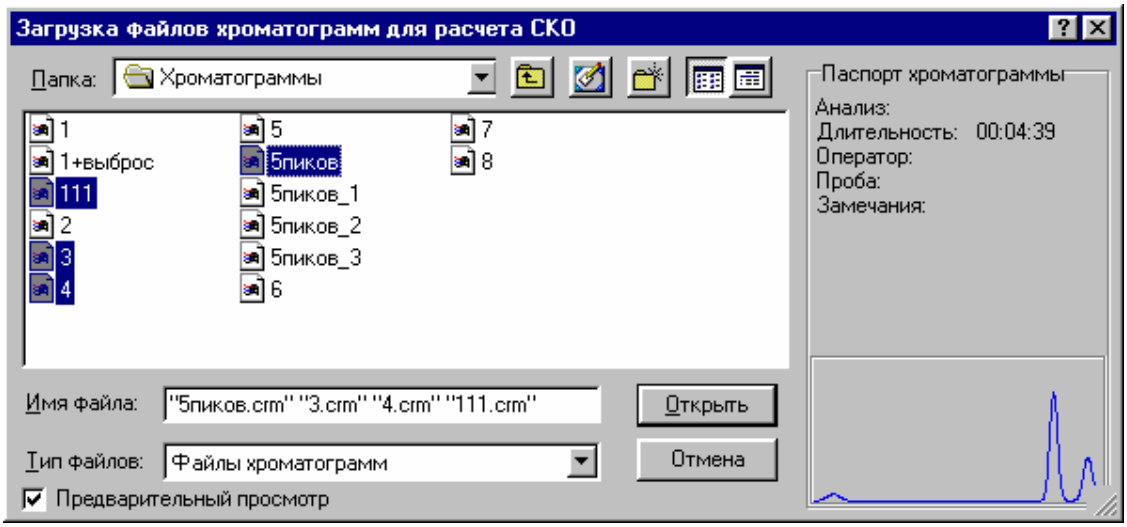


Рис.25.Загрузка файлов хроматограмм для расчета СКО

Нажав клавишу [***Ctrl***] и удерживая ее, необходимо выделить нажатием левой клавиши мыши нужные для расчета СКО файлы и нажать кнопку ***Открыть***. Количество загружаемых хроматограмм должно быть не менее 3-х. На закладке ***Специальные*** (Рис. 26а) будут выведены результаты расчета СКО для выбранной группы хроматограмм.

- ***Расчет шума на участке хроматограммы между графическими курсорами***. По данной команде система определят значения: среднего шума по амплитуде в нА или мВ (в зависимости от типа детектора), СКО шума, дрейф в нА/час или мВ/час. Результаты выводятся на закладке ***Специальные***.(Рис.26а)

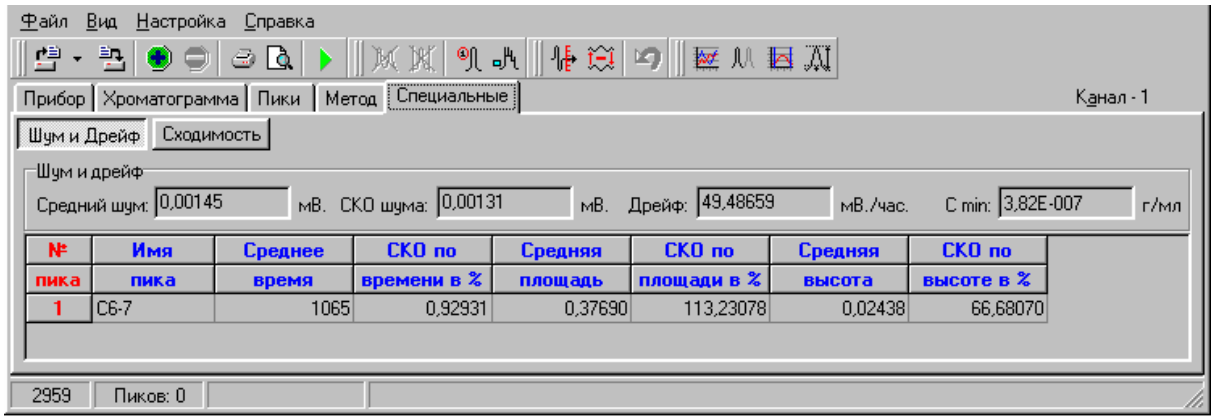


Рис.26а Поля результатов выполнения команды

Настроить видимость параметров расчета СКО, можно, сделав двойной щелчок левой кнопкой мыши на заголовках столбцов таблицы. В результате Вы увидите окно настройки видимости параметров (Рис. 26б). В этом окне галочкой отмечаются те параметры пиков, которые необходимо вывести на экран.

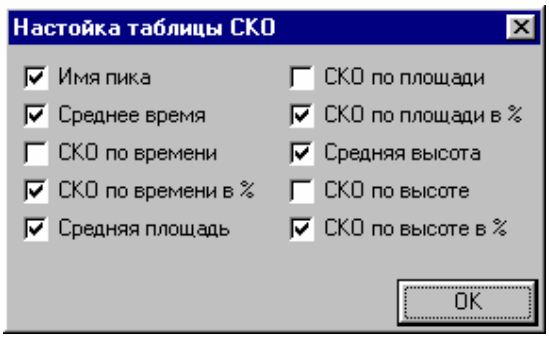


Рис.26б Окно настройки видимости параметров таблицы СКО

- ***Имя пика*** – наименование компонента пробы соответствующего данному пику. Содержимое данного поля заполняется автоматически если данный пик присутствует в шаблоне, если нет - при необходимости возможно заполнить вручную.
- ***Среднее время*** – усредненное время удерживания пика.
- ***СКО по времени*** – среднеквадратичное отклонение времени удерживания пика.
- ***СКО по времени в %*** - среднеквадратичное отклонение времени удерживания пика в процентах.
- ***Средняя площадь*** – усредненная площадь пика.
- ***СКО по площади*** - среднеквадратичное отклонение площади пика.
- ***СКО по площади в %*** - среднеквадратичное отклонение площади пика в процентах.
- ***Средняя высота*** – усредненная высота пика.
- ***СКО по высоте*** - среднеквадратичное отклонение высоты пика.
- ***СКО по высоте в %*** среднеквадратичное отклонение высоты пика в процентах.

- ***Команда Предел детектирования*** – при вызове этой команды на экран выводится окно диалога «***Расчет предела детектирования***».

Для поверки с использованием введения пробы микрошприцом служит закладка ***Жидкость*** (Рис.27а). В соответствующие поля этого окна вводятся значения уровня флуктуационных шумов (добавляется автоматически из таблицы расчета СКО), концентрации контрольного вещества, объема введенной пробы, средней площади пика (добавляется автоматически из таблицы расчета СКО), расхода газа-носителя и тип детектора.

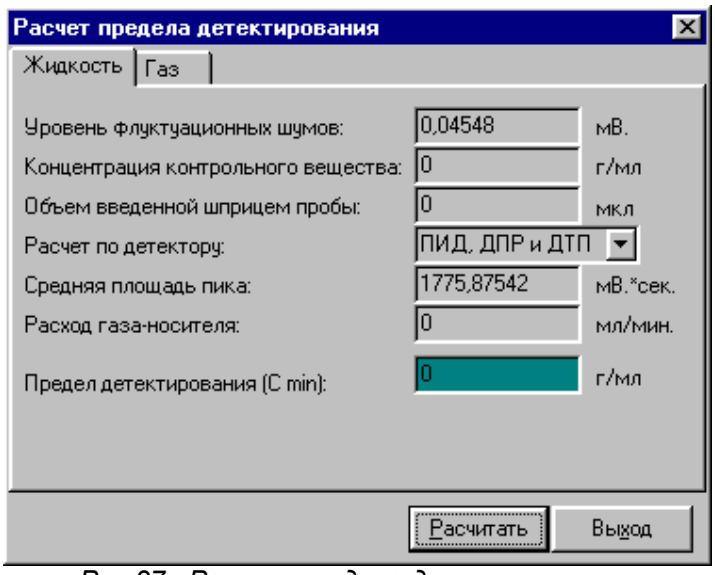


Рис.27а Расчет предела детектирования

Для поверки по газовой пробе с использованием крана - дозатора служит закладка ***Газ*** (Рис. 27 б). В соответствующие поля этого окна вводятся значения уровня флуктуационных шумов (добавляется автоматически из таблицы расчета СКО), концентрации контрольного вещества, объема дозы введенной краном - дозатором, температуры крана – дозатора, средней площади пика (добавляется автоматически из таблицы расчета СКО), расхода газа-носителя.

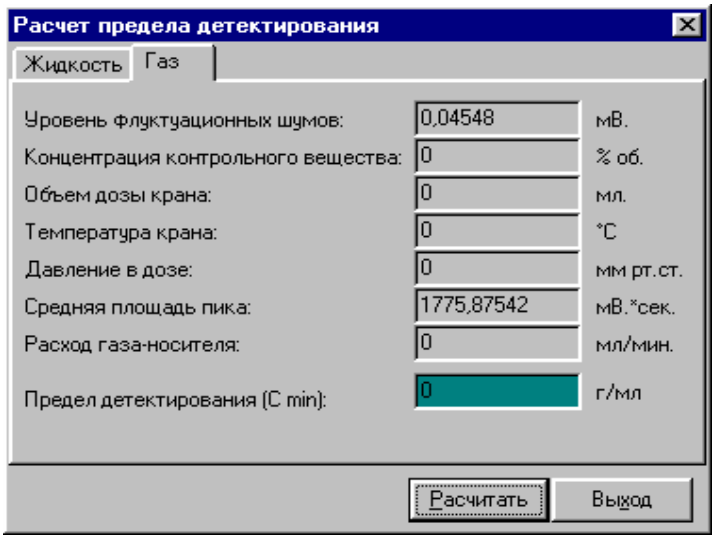


Рис.27б Расчет предела детектирования

После заполнения всех полей выполнить команду ***Рассчитать,*** в соответствующем окне появится рассчитанная величина, после чего закрыть окно нажатием кнопки выход.

- ***Команда Проверка на сходимость / воспроизводимость*** – данная команда производит проверку концентраций на сходимость (воспроизводимость) при анализе по одной смеси. При вызове этой команды на экран выводится окно «***Загрузка файлов хроматограмм для проверки на сходимость***», в котором нужно выбрать несколько файлов удерживая клавишу [**Ctrl**] (но не менее двух).

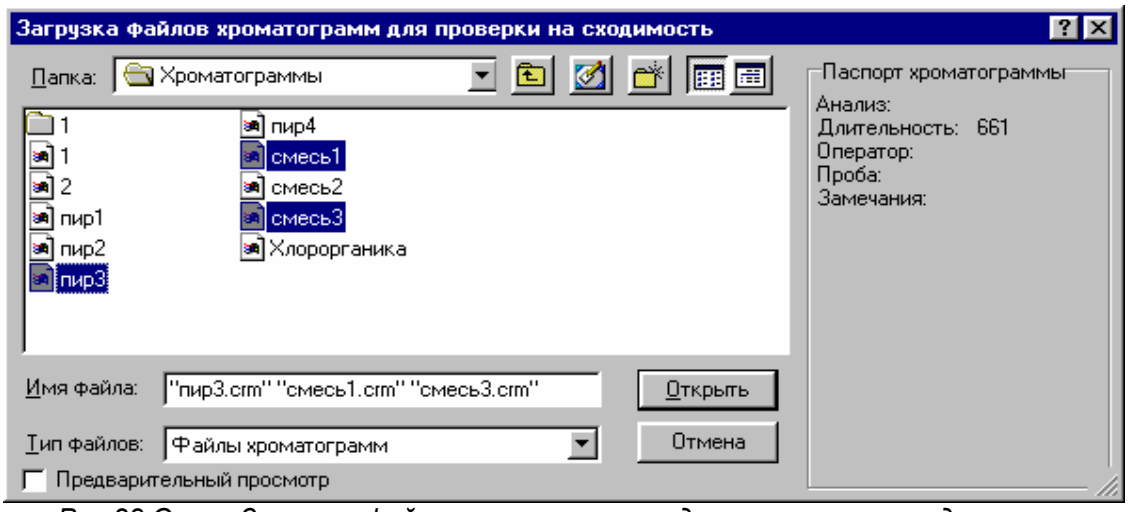
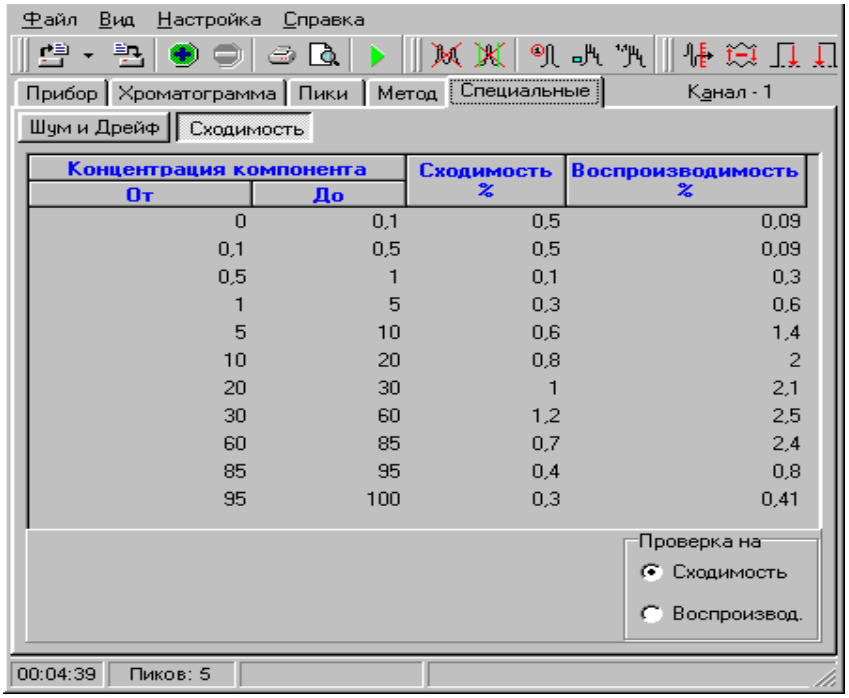


Рис.28 Окно «Загрузка файлов хроматограмм для проверки на сходимость»

На закладке ***Специальные*** / ***Сходимость*** в таблице (рис.28а) задаются значения ***Концентрации компонента***, ***Сходимости*** и ***Воспроизводимости.***



Концентрация компонента		Сходимость %	Воспроизводимость %
От	До		
0	0,1	0,5	0,09
0,1	0,5	0,5	0,09
0,5	1	0,1	0,3
1	5	0,3	0,6
5	10	0,6	1,4
10	20	0,8	2
20	30	1	2,1
30	60	1,2	2,5
60	85	0,7	2,4
85	95	0,4	0,8
95	100	0,3	0,41

Рис.28а Таблица сходимости / воспроизводимости

Если после выполнения команды «***Проверка на сходимость / воспроизводимость***» компоненты не соответствуют установленным значениям, то программа выдает список таких компонент.

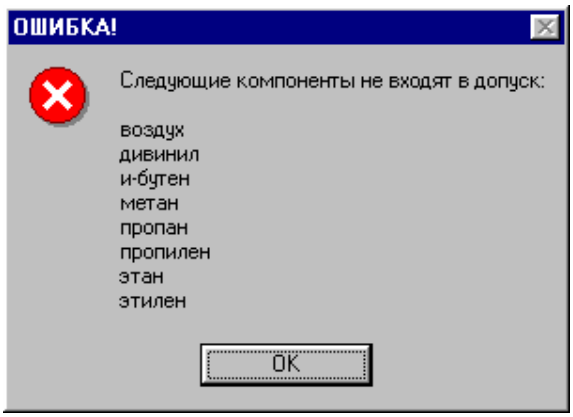


Рис.29 Список компонент не вошедших в допуск

Если же компоненты отвечают заданным условиям, то значения площади, высоты и концентрации усредняются.

Замечание: *проверка на воспроизводимость осуществляется аналогично.*

3.6 Создание метода.

Для задания параметров, необходимых при проведении качественного и количественного анализа исследуемых проб, служит закладка ***Метод***. Закладка включает в себя следующие страницы:

- ***Обнаружение***
- ***Шаблон***
- ***Расчет***
- ***Отчет***
- ***Автообработка***

Переключение осуществляется соответствующими клавишами.

3.6.1 Окно Метод / Обнаружение.

Метод создается на основании типичной хроматограммы исследуемой смеси.

Первым этапом создания метода является выбор параметров обнаружения пиков на закладке ***Обнаружение*** (Рис. 30):

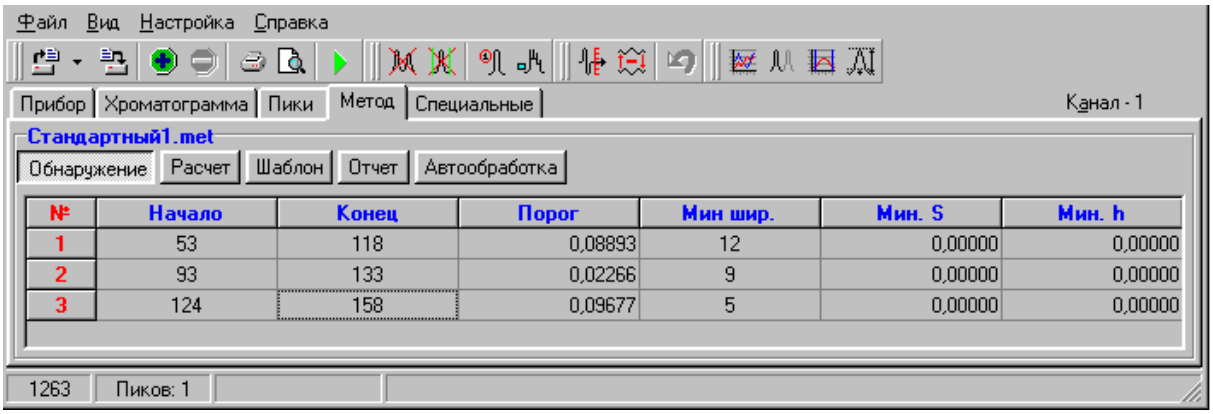


Рис.30. Закладка Метод / Обнаружение

- Начало и конец участка обнаружения;
- Порог (нА или мВ, в зависимости от типа детектора или в любой другой единице измерения);
- Ширина минимального определяемого пика на данном участке обнаружения, сек.;
- Минимальная площадь;
- Минимальная высота;

Параметры обнаружения можно внести в таблицу пиков автоматически, размечая хроматограмму с помощью панели инструментов ***Обнаружение*** или вручную.

Для автоматического заполнения таблицы Обнаружение в меню ***Настройка / Настройка параметров / Обнаружение*** (Рис. 31) следует включить функцию ***Добавлять параметры в таблицу Обнаружение метода***, установив галочку и нажав кнопку ***Ок***.

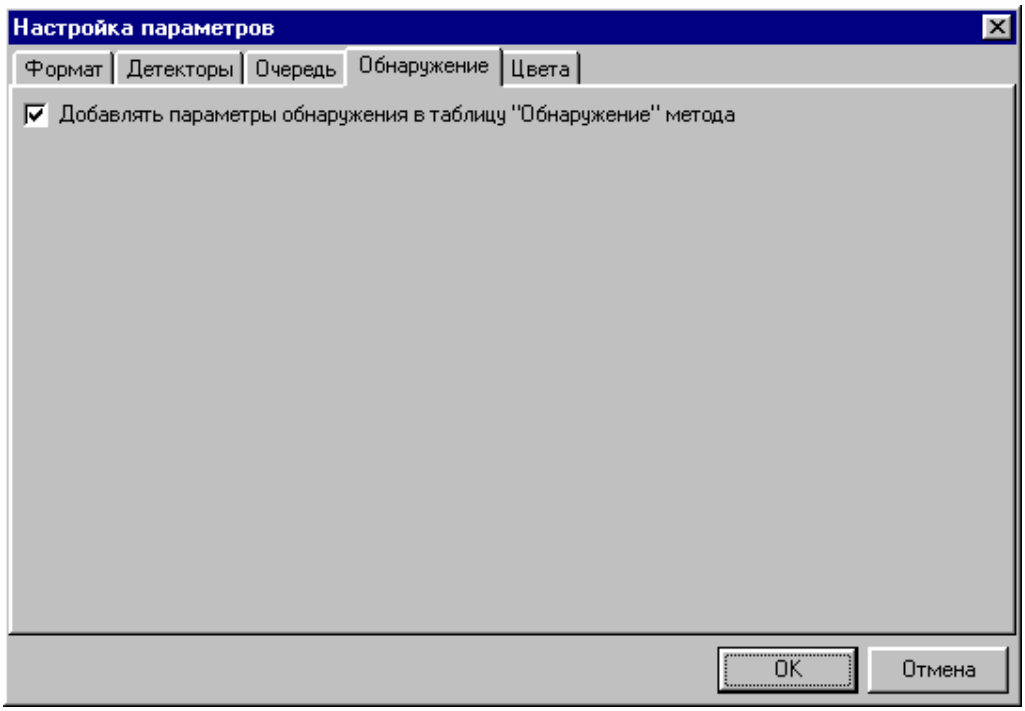


Рис.31. Меню Настройка / Настройка параметров / Обнаружение

Параметры обнаружения будут заносится в таблицу по мере разметки хроматограммы на закладке ***Хроматограмма*** (все действия, связанные с созданием метода рекомендуется проводить в 3-м канале). Нужно отметить, что один и тот же пик может записаться в таблицу ***Обнаружение*** неоднократно.

Разметка осуществляется при помощи команд ***Автообнаружение на экране*** и ***Определить пик***.

Команда ***Автообнаружение на экране*** позволяет разметить либо всю хроматограмму сразу, либо по отдельным участкам. Для разметки всей хроматограммы графическими указателями на базовой линии задается ширина самого узкого пика. Место установки графических указателей на базовой линии выбирается с учетом того, что значение параметра ***Порог*** определяется по разнице амплитуды сигнала между левым и правым курсором. Разметка всей хроматограммы с помощью данной команды может привести к появлению «лишних» пиков, если порог чувствительности установлен слишком низким или к потере малых пиков при высоком значении величины порога. Избежать этого можно выполнив разметку хроматограммы по отдельным участкам. Для этого:

- Выделить нужный участок графическими указателями;
- Распахнуть его с помощью соответствующей команды панели ***Масштабирование*** или увеличить его сочетанием клавиш (см. п. 3.3);
- Графическими указателями задать ширину самого узкого пика для выбранного участка и значение порога чувствительности;
- Выполнить команду ***Автообнаружение на экране***.

Применение этой команды автоматически добавляет еще одну строку в таблицу ***Обнаружение*** метода (количество строк в таблице обнаружения должно соответствовать количеству участков, на которые разбита хроматограмма при разметке). Если необходимо, возможно редактирование автоматически заносимых параметров в таблице ***Обнаружение*** метода. Параметры S_{min} и H_{min} задаются вручную (пики с площадью меньшей S_{min} и высотой меньшей H_{min} не обнаруживаются-считаются шумом). Одновременно с занесением параметров в таблицу ***Обнаружение*** в таблице ***Пики*** выводится информация о параметрах пиков, обнаруженных на различных участках хроматограммы.

Команда ***Определить пик*** используется при необходимости определения пиков, выходящих на хвосте основного компонента (растворителя), если нет возможности определить их другими методами. Для разметки таких пиков следует:

- Графическими указателями выделить зону поиска пика на хроматограмме;
- Распахнуть пик с помощью соответствующей команды панели ***Масштабирование*** или увеличить его сочетанием клавиш (см. п. 3.3);
- Выполнить команду ***Определить пик***.

Площадь, высота, полуширина и время удерживания обнаруженного пика будут занесены в таблицу ***Пики***, а в таблице метода ***Обнаружение*** появится строка, соответствующая этому пику. Все параметры обнаружения кроме

начала и конца пика в этой строке должны быть нулевыми. Следует отметить, что при разметке хроматограмм по созданному методу в дальнейшем, участок хроматограммы между началом и концом, указанными в данной строке таблицы, будет принудительно считаться единичным пиком.

Параметры обнаружения можно ввести в таблицу метода ***Обнаружение*** вручную, определив с помощью графических указателей время начала и конца участков хроматограммы, ширину самых узких пиков, пороги обнаружения и минимально определяемые площади (высоты) для соответствующих участков. Для введения параметров обнаружения необходимо:

- Щелкнуть на таблице правой кнопкой мыши;
- Выбрать из выпадающего меню команду ***Добавить строку***;
- Появится строка с номером и нулевыми параметрами;
- Ввести нужные параметры, подтвердив ввод каждого параметра нажатием клавиши [***Enter***].

Внимание: если таблица пустая и содержит незаполненную строку без номера, то прежде чем вводить данные необходимо выполнить команду ***Добавить строку*** (см. выше), иначе введенные данные просто не будут использоваться программой.

Завершив заполнение таблицы ***Обнаружение*** выполнить команду ***Автообнаружение по параметрам*** - хроматограмма будет размечена в соответствии с заданными параметрами. Параметры размеченных пиков (время удерживания, полуширина, высота, площадь) будут занесены в таблицу пиков.

3.6.2 Окно Метод / Шаблон.

По окончании разметки хроматограммы следует заполнить таблицу метода ***Шаблон*** (Рис. 32).

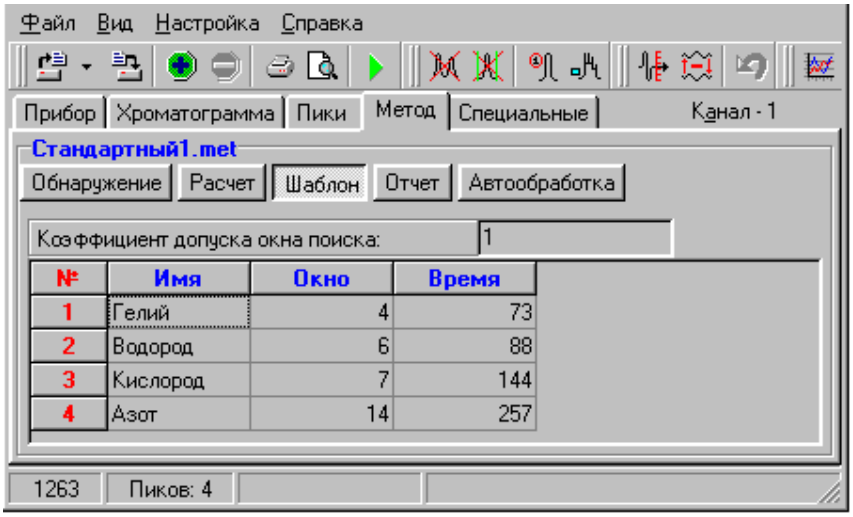


Рис.32 Закладка Метод / Шаблон

Настроить видимость параметров таблицы шаблона можно из меню ***Настройка / Таблицы шаблона***. В этом случае появляется диалоговое окно, содержащее наименования полей таблицы (рис.32а). Соответствующие поля можно отобразить в таблице, отметив их галочкой.

Эту же настройку можно произвести иначе, сделав двойной щелчок левой кнопкой мыши на заголовках столбцов таблицы. В результате выводится окно настройки таблицы шаблона (Рис. 32а). В этом окне галочкой отмечаются те параметры, которые необходимо вывести на экран.

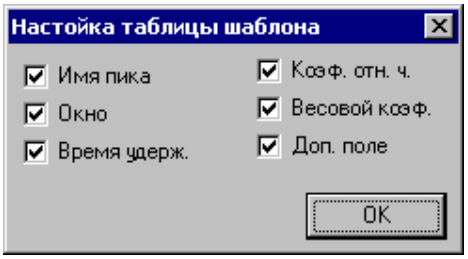


Рис.32а Окно настройки видимости параметров таблицы шаблона

Параметры, содержащиеся в данной таблице используются для идентификации (качественного анализа) компонентов анализируемой пробы, и для расчета калибровочных коэффициентов. Для заполнения таблицы метода ***Шаблон*** следует:

- Открыть закладку ***Пики***;
- Ввести имена пиков и концентраций исследуемых примесей в градуировочной смеси в том случае, если анализ будет проводиться методом абсолютной градуировки, и, дополнительно, концентрацию внутреннего стандарта, если определение компонентов происходит по методу внутреннего стандарта;
- Щелкнуть на таблице правой кнопкой мыши;
- Выбрать в выпадающем меню команду ***Добавить все шаблон***.

Если на хроматограмме рассчитывается только часть пиков, в шаблон вносятся только те пики, по которым производится расчет. Заполнение таблицы ***Шаблон*** отдельными пиками производится следующим образом:

- на закладке ***Пики*** установить курсор на строке пика, который нужно переслать в таблицу ***Шаблон***.
- Нажать правую кнопку мыши и в выпадающем меню выбрать команду ***Добавить пик в шаблон*** или нажать на клавиатуре сочетание клавиш [***Alt***] + [***Insert***].

Кроме параметров, заносимых в таблицу, на закладке ***Шаблон*** задается ***Коэф. допуска окна поиска*** (по умолчанию устанавливается равным единице). Этот параметр влияет на поиск пиков на размеченной хроматограмме относительно шаблона. Дело в том, что времена пиков со временем могут «уходить» от шаблонных. Поиск пиков производится по формуле Время выхода ± полуширина * ***Коэф. допуска окна поиска***. При допуске равном единице поиск производится по формуле: Время выхода ± полуширина. Варьируя этим

коэффициентом, можно, как расширять область поиска пика, так и сужать, если пики находятся очень близко друг от друга и есть большая вероятность, что за необходимый пик примется другой. При необходимости можно откорректировать область поиска для каждого пика на хроматограмме.

3.6.3 Окно Метод / Гр. статистика.

Данное окно появляется только когда на закладке ***Метод*** страницы ***Расчет*** установлена ***Многоточечная градуировка***. Подробнее градуировка по нескольким точкам описана в п.3.6.4.2 и п.3.6.4.3.

3.6.4 Окно Метод / Расчет.

Страница ***Расчет*** (Рис. 33) закладки ***Метод*** служит для:

- Выбора градуировки;
- Выбора метода расчета концентраций;
- Установки параметра расчета концентрации (площадь или высота)
- Введения в расчет коэффициента относительной чувствительности детектора (непосредственно для каждого пика в таблице шаблона).

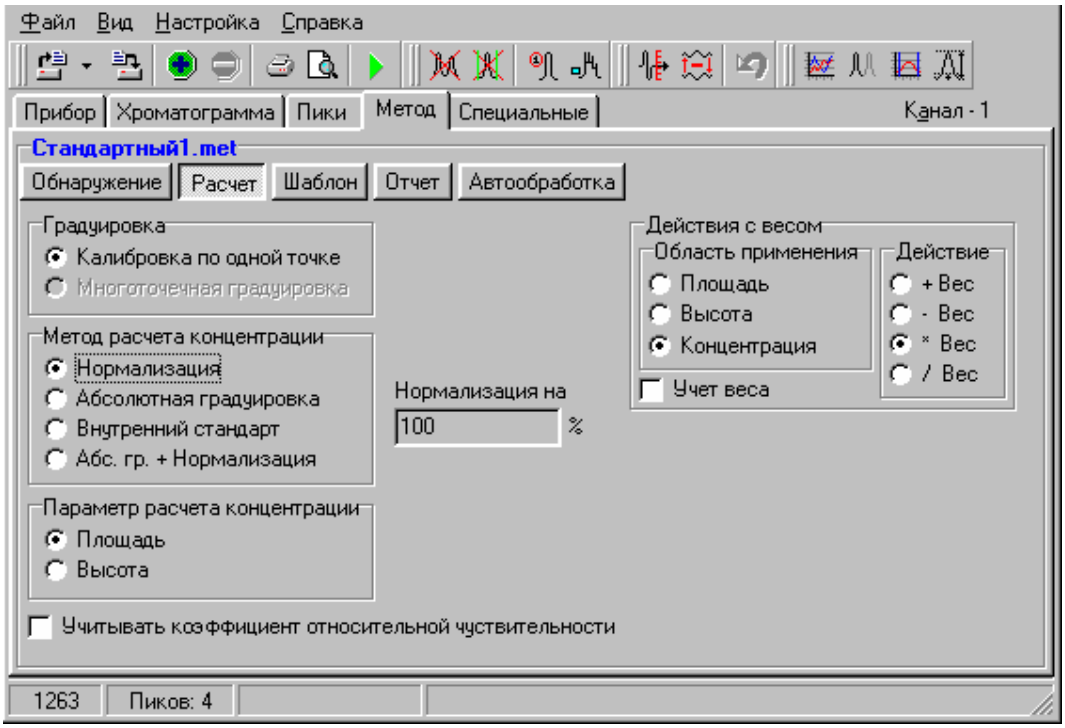


Рис.33. Закладка Метод/Расчет

Кроме того, в окне ***Расчет*** можно задать параметры для встроенного калькулятора и установить выполняемое действие. Принцип действия этого калькулятора заключается в том, что в поле ***Вес*** таблицы шаблона для каждого

пика можно задать любое числовое значение, а затем умножить, разделить, сложить, либо вычесть его из следующих параметров размеченного пика: площадь, высота, или концентрация.

Выбрать режим работы данного калькулятора можно в части экрана ***Действие с весом / Область применения***, задав параметр, к которому будет применяться определенное действие, а в поле ***Действие*** – указать тип действия, который необходимо провести. И, наконец, отметив параметр, ***Учет веса*** можно включить данный калькулятор с введенными параметрами. Тогда при введении в поле ***Вес*** таблицы ***Шаблон*** нужных значений и после запуска метода, в таблице ***Пики*** выбранный нами на калькуляторе параметр примет значение, полученное в результате действия, установленного в поле ***Действия с весом***.

Метод и параметры расчета концентраций выбираются в соответствии с методикой анализа. Программное обеспечение **Цвет-Аналитик** позволяет производить расчеты

- Методом нормализации;
- Методом абсолютной градуировки;
- Методом внутреннего стандарта;
- Методом абсолютной градуировки + нормализация.

3.6.4.1 Метод Нормализации.

Расчет методом ***Нормализации*** заключается в том, что производиться расчет площади (высоты) каждого отдельного пика относительно их суммарной площади (высоты). Результаты данного расчета выводятся в процентах.

Существует два способа использования данного метода: *процентная нормализация* и *внутренняя нормализация*.

- ***Процентная нормализация*** – суммарная площадь всех пиков на хроматограмме принимается за 100% (установлено по умолчанию). Содержание индивидуальных компонентов определяется как процент от общей площади.
- ***Внутренняя нормализация*** – суммарная площадь *идентифицированных* пиков на хроматограмме принимается за 100%.

Если смесь исследуется на нескольких хроматографах (детекторах) и часть компонентов пробы уже известна, то следует задать процент нормализации. Например, для расчета хроматограммы смеси органических соединений содержащих 10% воды (уже определили), следует задать процент нормализации равный 90%.

Создание метода Внутренней нормализации:

После разметки и идентификации пиков переходим на закладку ***Метод*** / ***Расчет*** и выбираем метод ***Нормализации*** для расчета концентраций, как

показано на рис. 34. Причем для пиков можно учесть коэффициент относительной чувствительности.

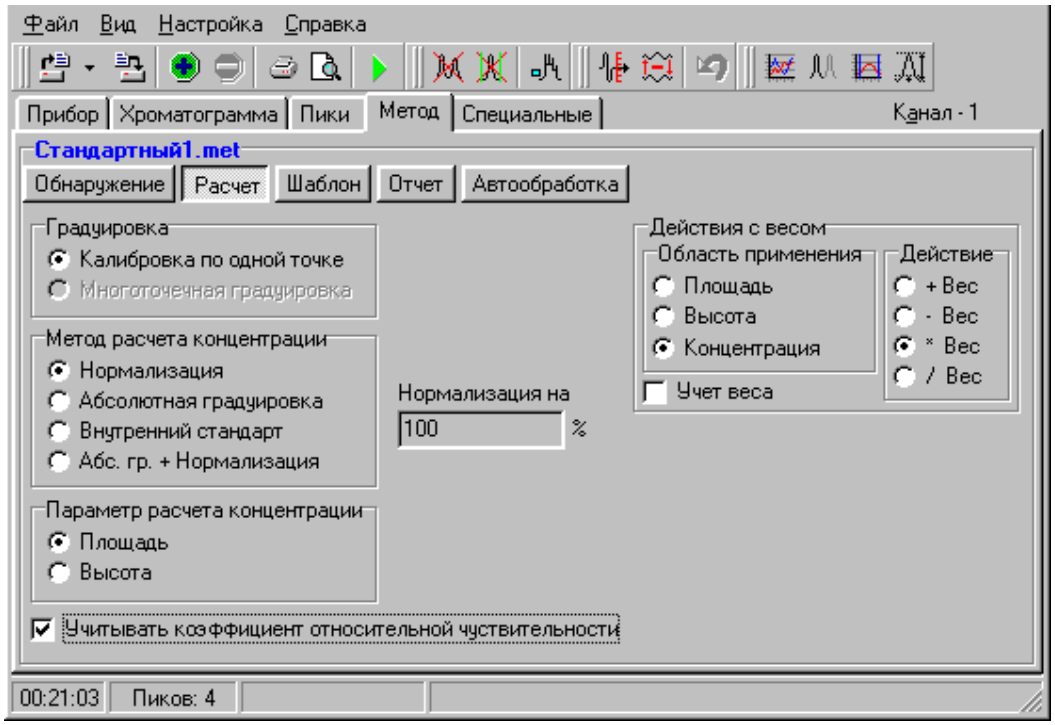


Рис.34 Выбор метода Нормализации на закладке Метод / Расчет

Далее заносим все идентифицированные пики в шаблон, а на закладке ***Метод*** / ***Автообработка*** выбираем действие ***Свертка с шаблоном***.

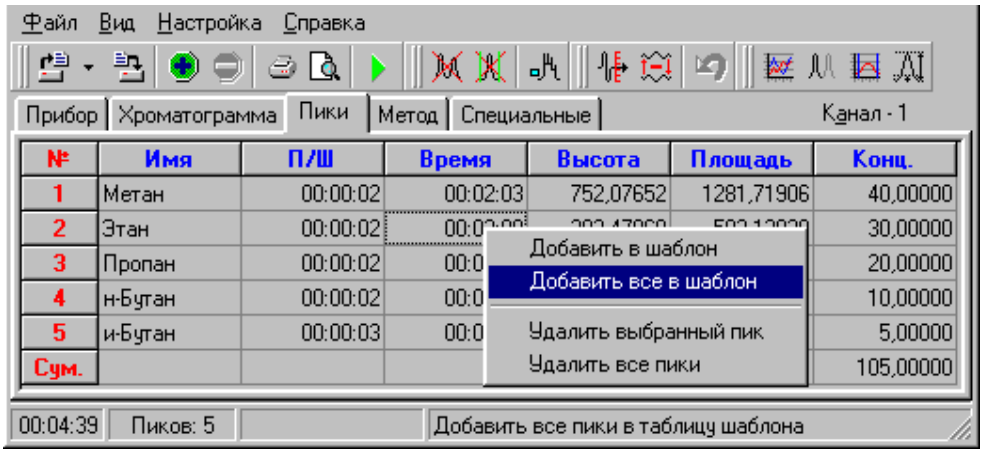


Рис.35 Добавление всех пиков в шаблон

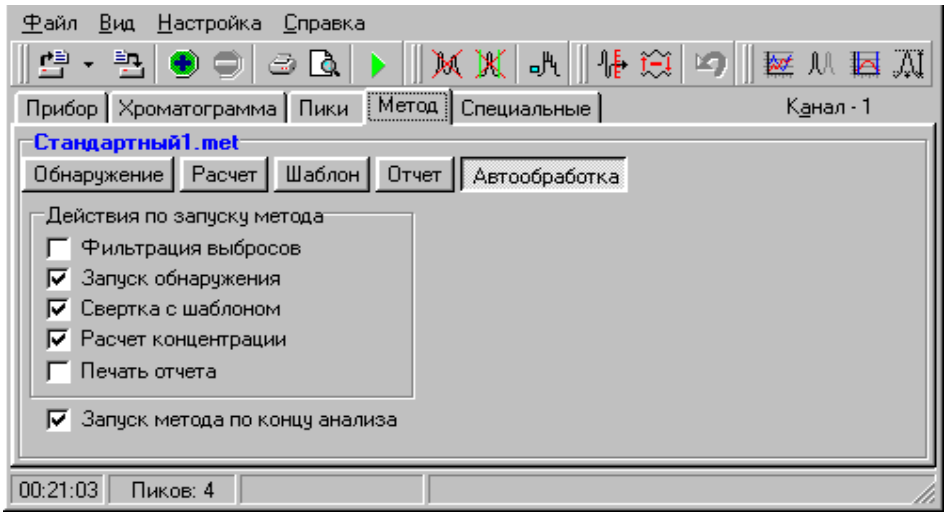
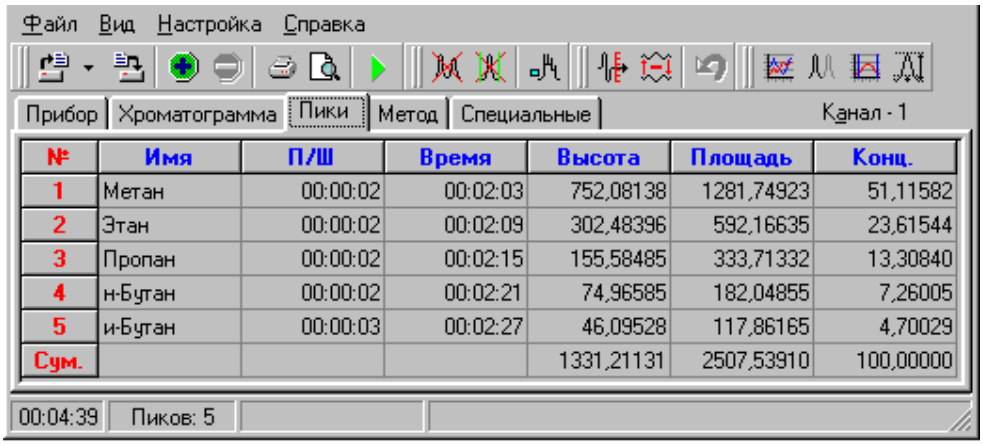


Рис.36 Выбор действия Свертка с шаблоном

Созданный метод нужно сохранить (подробнее смотри п. 3.6).

При нажатии на производится запуск метода расчета концентрации. По завершении расчета в таблице пиков закладки ***Пики*** значения концентраций компонентов пересчитываются относительно заданного процента нормализации (100%).



№	Имя	П/Ш	Время	Высота	Площадь	Конц.
1	Метан	00:00:02	00:02:03	752,08138	1281,74923	51,11582
2	Этан	00:00:02	00:02:09	302,48396	592,16635	23,61544
3	Пропан	00:00:02	00:02:15	155,58485	333,71332	13,30840
4	н-Бутан	00:00:02	00:02:21	74,96585	182,04855	7,26005
5	и-Бутан	00:00:03	00:02:27	46,09528	117,86165	4,70029
Сум.				1331,21131	2507,53910	100,00000

Рис.37 Значения концентраций компонентов после запуска метода Нормализации (используется внутренняя нормализация)

Создание метода Процентной нормализации:

После разметки и идентификации пиков переходим на закладку ***Метод*** / ***Расчет*** и выбираем метод ***Нормализации*** для расчета концентраций, как показано на рис. 34. Далее заносим все размеченные пики в шаблон (рис.35), сохраняем созданный метод (п. 3.6).И запускаем метод нажатием клавиши для обработки снятых хроматограмм.

Внимание: на закладке ***Метод*** / ***Автообработка*** действие ***Свертка с шаблоном*** должно быть выключено.

Отличие двух способов использования метода нормализации заключается в том, что при расчете процентной нормализацией учитываются пики не присутствующие в шаблоне.

Файл Вид Настройка Справка

Прибор | Хроматограмма | Пики | Метод | Специальные | Канал - 1

№	Имя	П/Ш	Время	Высота	Площадь	Конц.
1		00:00:56	00:01:46	0,01017	0,57477	0,02292
2		00:00:03	00:01:54	0,01526	0,04323	0,00172
3	Метан	00:00:02	00:02:03	752,08138	1281,74923	51,10234
4	Этан	00:00:02	00:02:09	302,48396	592,16635	23,60921
5	Пропан	00:00:02	00:02:15	155,58485	333,71332	13,30489
6	н-Бутан	00:00:02	00:02:21	74,96585	182,04855	7,25813
7	и-Бутан	00:00:03	00:02:27	46,09528	117,86165	4,69905
8		00:00:02	00:02:38	0,00711	0,01419	0,00057
9		00:00:01	00:02:43	0,00668	0,00878	0,00035
10		00:00:02	00:02:48	0,00119	0,00260	0,00010
11		00:00:03	00:02:50	0,00609	0,01816	0,00072
Сум.				1331,25781	2508,20083	100,00000

00:04:39 | Пиков: 11

Рис.38 *Значения концентраций компонентов после запуска метода Нормализации (используется процентная нормализация)*

Формулы для расчета методом нормализации:

1. Без использования коэффициентов относительной чувствительности детектора:

$$C_i = \frac{S_i}{\sum_i S_i} * 100;$$

2. При использовании коэффициентов относительной чувствительности детектора:

$$C_i = \frac{S_i * K_{отн.ч.i}}{\sum_i (S_i * K_{отн.ч.i})} * 100;$$

где:

C_i - концентрация $i^{го}$ компонента;

S_i - площадь (или высота) $i^{го}$ компонента;

$K_{отн.ч.i}$ - коэффициент относительной чувствительности детектора к данному компоненту смеси.

3.6.4.2 Метод Абсолютной градуировки.

Метод ***Абсолютной градуировки*** основан на построении зависимости величины сигнала детектора от количества введенного вещества. Абсолютная градуировка проводится по градуировочным смесям, содержащим известные количества исследуемых соединений.

Для метода абсолютной градуировки может использоваться как ***Калибровка по одной точке***, так и ***Многоточечная градуировка***.

Создание метода Абсолютной градуировки (калибровка по одной точке):

После разметки и идентификации пиков переходим на закладку ***Метод / Расчет*** и выбираем: метод абсолютной градуировки и калибровку по одной точке, а также параметр расчета концентрации (площадь/высота). Справа от поля выбора градуировки появляется окно ***Доза***. При расчете градуировочных коэффициентов и последующем расчете концентраций в это поле необходимо ввести объем дозируемой пробы.

Примечание: ***Доза*** влияет на результат в том случае, если в ходе различных анализов происходит изменение объемов вводимой пробы. Если величина вводимой пробы неизменна, дозу можно задать любой величиной (например –2). Размерность ***Дозы*** не имеет значения, т.к. это не влияет на результат (при расчете, исходя из формулы, размерность сокращается).

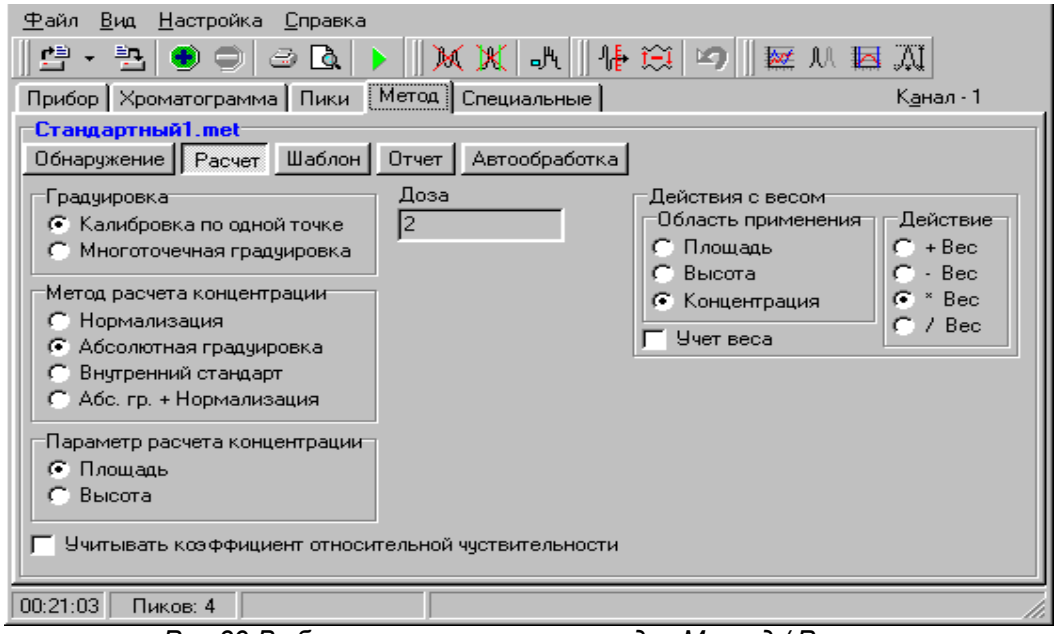


Рис.39 Выбор параметров на закладке Метод / Расчет

Далее заносим все идентифицированные пики в таблицу шаблона (рис. 40). Для этого нужно щелкнуть правой кнопкой мыши по таблице пиков и из контекстного меню выбрать команду ***Добавить все в шаблон***.

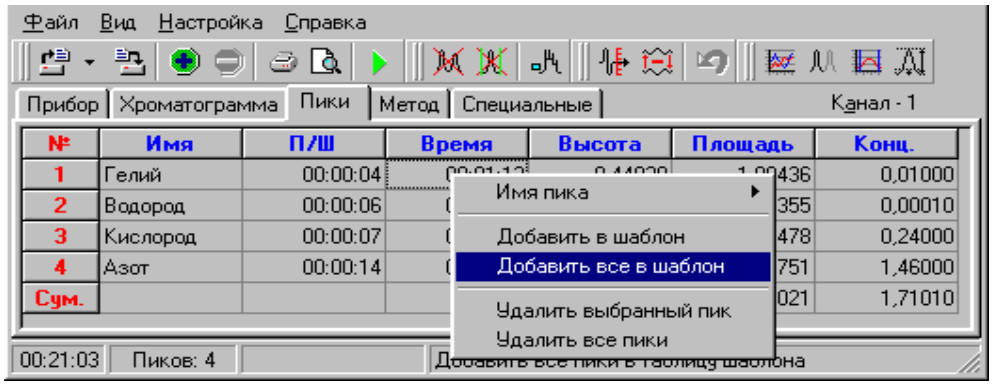


Рис.40 Добавление всех пиков в таблицу шаблона

Затем в окне ***Метод*** / ***Шаблон*** нужно нажать клавишу ***Расчет градуировочного коэффициента*** для определения этого коэффициента (поле ***a*** в таблице шаблона).

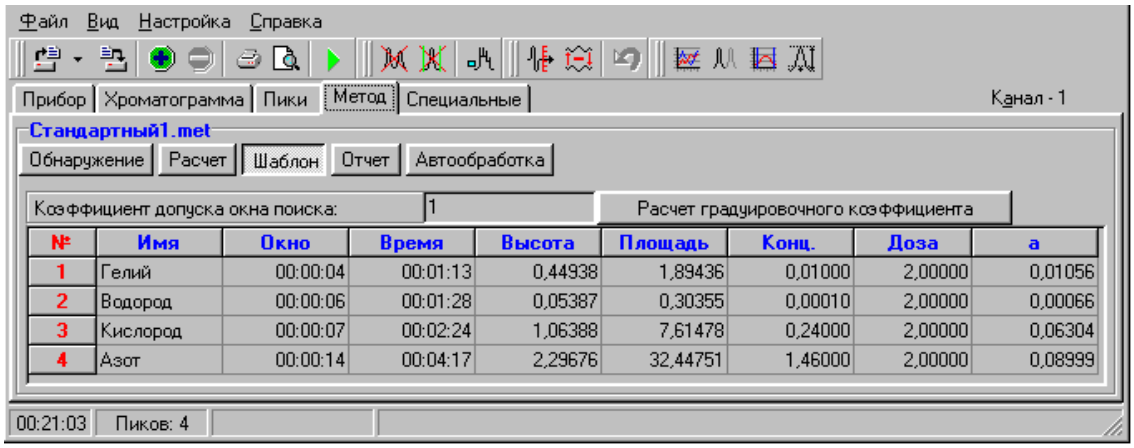


Рис.41 Расчет градуировочного коэффициента

Созданный метод необходимо сохранить (см. п. 3.6).

Затем загружаем (или получаем с хроматографа) другую хроматограмму с неизвестными концентрациями. Запускаем метод и получаем рассчитанные концентрации компонентов в таблице пиков закладки ***Пики***.

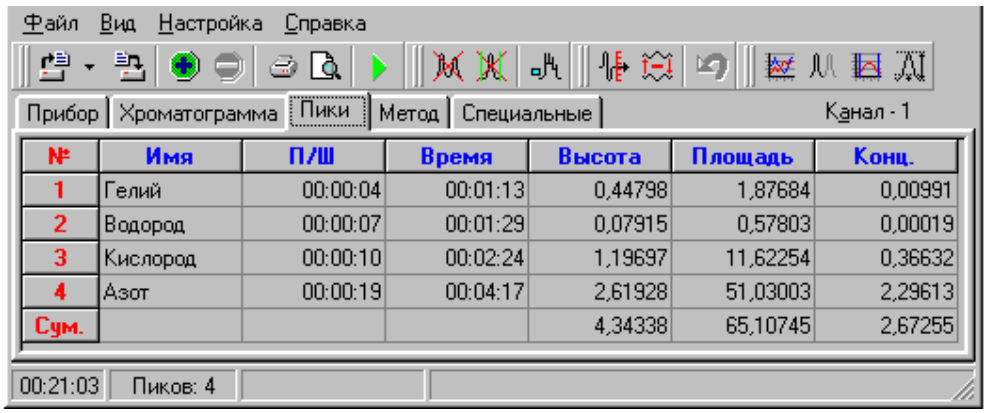


Рис.42 Концентрация, рассчитанная методом Абсолютной градуировки (калибровка по одной точке)

Формулы для расчета методом абсолютной градуировки (калибровка по одной точке):

1. Градуировочный коэффициент:
   $$a = \frac{C_i * Доза}{S_i};$$
2. Расчет концентраций без использования коэффициентов относительной чувствительности детектора:
   $$C_i = \frac{S_i * a}{Доза};$$
3. Расчет концентраций при использовании коэффициентов относительной чувствительности детектора:
   $$C_i = \frac{S_i * a}{Доза} * K_{отн.ч.i}$$

где:

C_i - концентрация i^{го} компонента;

S_i - площадь (или высота) i^{го} компонента;

a - градуировочный коэффициент i^{го} компонента;

$K_{отн.ч.i}$ - коэффициент относительной чувствительности детектора к данному компоненту смеси.

Доза – Объем дозируемой пробы (оно может быть разным для градуировки и измерения)

Создание метода Абсолютной градуировки (многоточечная градуировка):

При данной градуировке вычисление коэффициентов производится методом наименьших квадратов. Этот метод применяется для обработки экспериментальных данных, когда заведомо известно, что измеряемое значение отличается от истинного на некоторую *погрешность*. Поэтому градуировочный график не проходит точно через заданные точки, а проводится так, чтобы минимизировать сумму квадратов этих погрешностей для всех точек.

После разметки и идентификации пиков переходим на закладку ***Метод*** / ***Расчет*** и выбираем: метод абсолютной градуировки и многоточечную градуировку, а также параметр расчета концентрации (площадь/высота). Справа от поля выбора градуировки появляется окно ***Доза***. При расчете концентраций в это поле необходимо ввести величину дозируемой пробы.

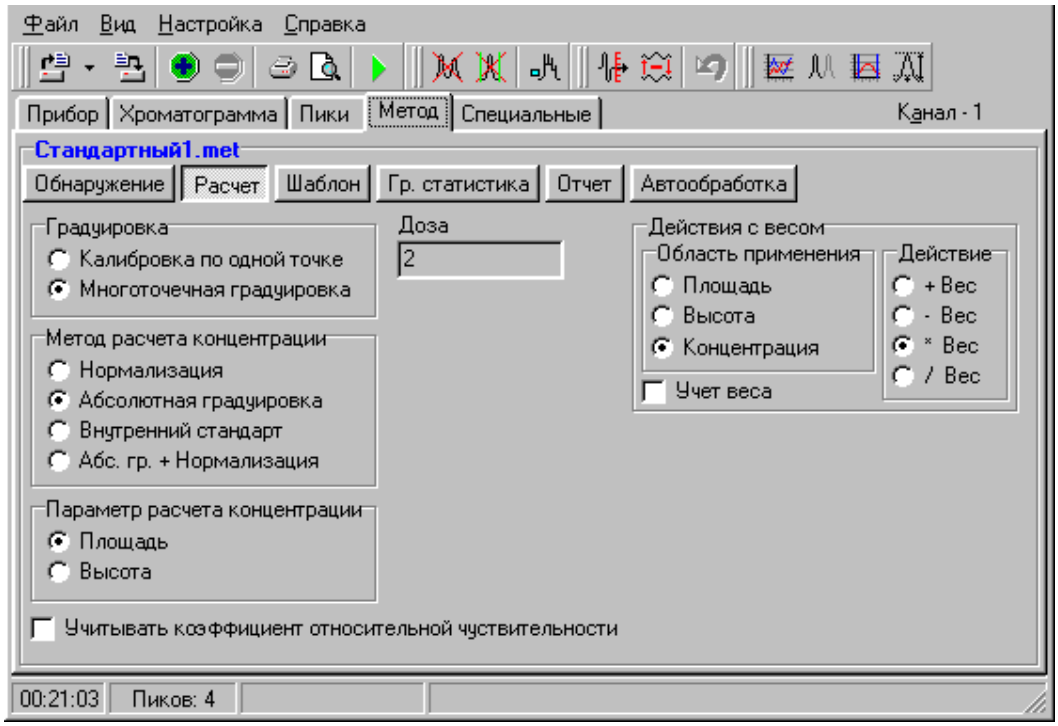


Рис.43 Выбор параметров на закладке Метод / Расчет

Затем, на закладке ***Пики*** (или на закладке ***Хроматограмма***) нужно щелкнуть правой кнопкой мыши по таблице пиков и из появившегося контекстного меню выбрать по очереди команды ***Добавить все в шаблон*** и ***Учесть в гр. статистике***.

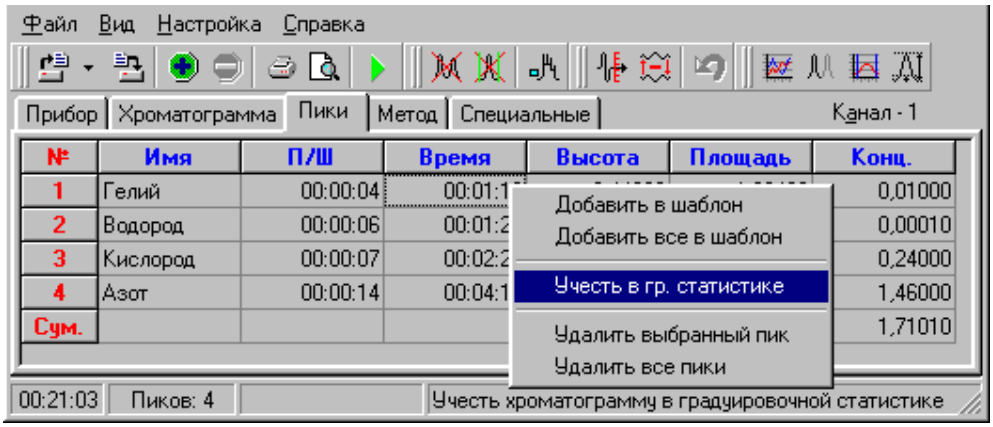


Рис.44 Контекстное меню на закладке «Пики»

Примечание: при первичной градуировке таблицы шаблона и статистики должны быть пустыми. Если в них присутствуют данные с помощью правой клавиши мыши нужно щелкнуть по таблице и из появившегося контекстного меню выбрать команду ***Удалить все пики*** (таблица шаблона) и ***Удалить уровень*** (таблица статистики).

В таблице шаблона и в таблице статистики после передачи данных автоматически будут рассчитаны градуировочные коэффициенты (**a**, **b**, и **c**). А также указан тип градуировочной кривой (см. таблицу шаблона поле ***Гр. кривая***), который можно менять при вызове контекстного меню правой кнопки

мыши (по умолчанию выставляется прямая из нуля) как показано на рис.46 или непосредственно на графике градуировочной кривой (рис.46а), который можно увидеть нажав на кнопку .

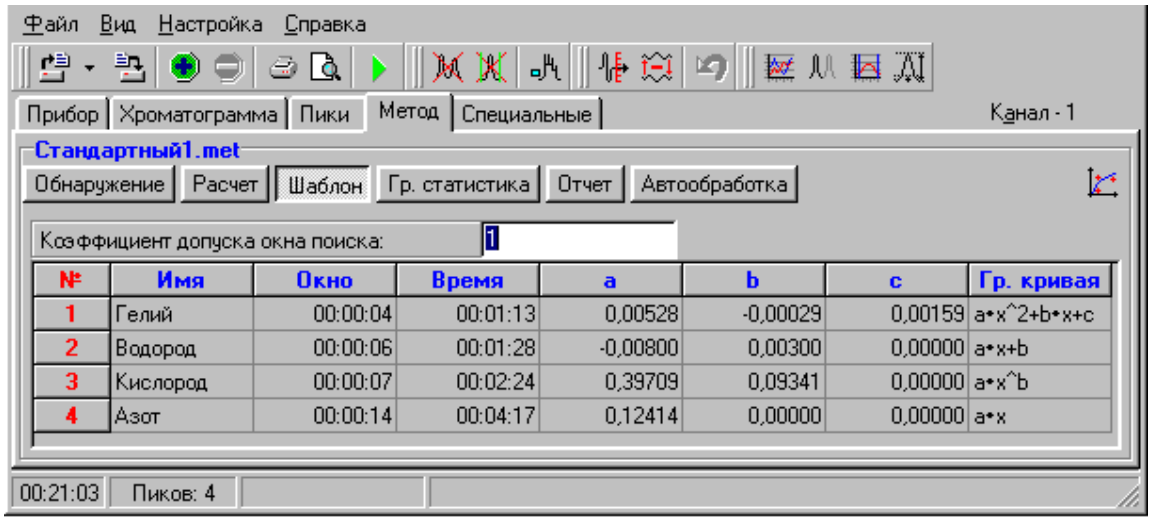


Рис.45 Пример таблицы шаблона

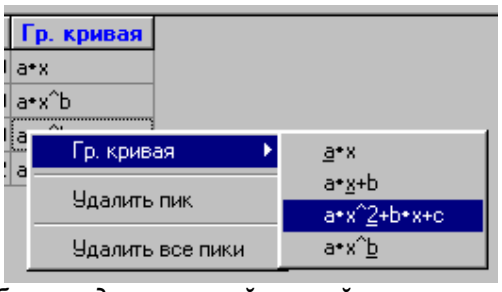


Рис.46 Выбор градуировочной кривой в контекстном меню

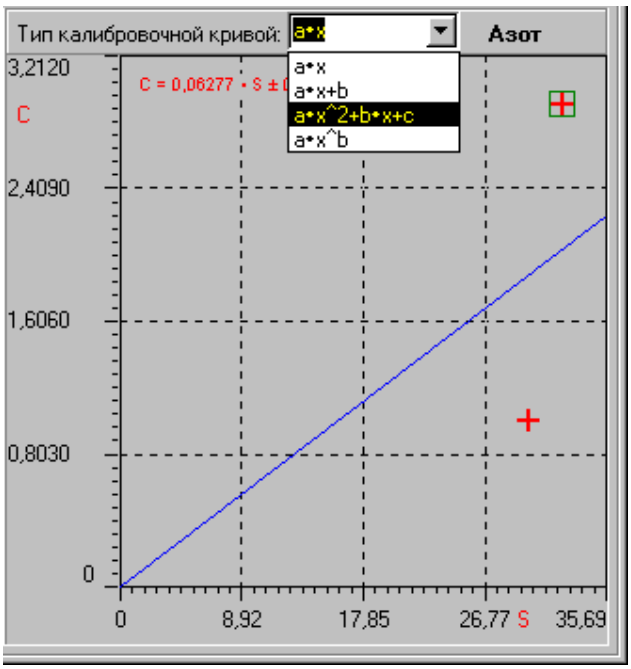


Рис.46а Выбор градуировочной кривой на графике

На графике (рис.46а) по вертикальной оси откладывается концентрация умноженная на количество введенной пробы (C), а по горизонтальной оси площадь (S) или высота (h) в зависимости от выбора параметра расчета концентрации.

<u>Примечание:</u> Тип градуировочной кривой выбирается в зависимости от методики анализа. Ниже на рисунках приведены различные градуировочные графики при одних и тех же значениях концентрации и дозы.

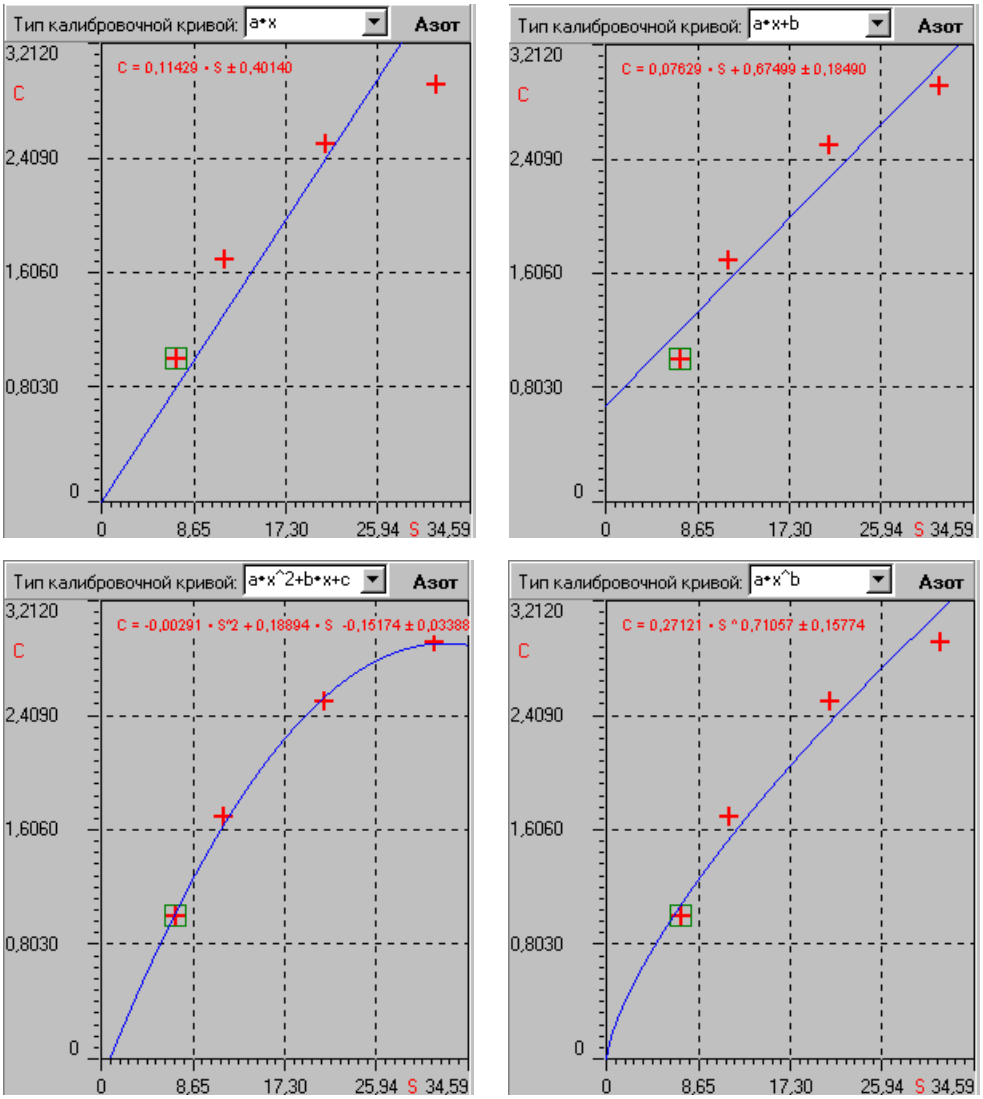


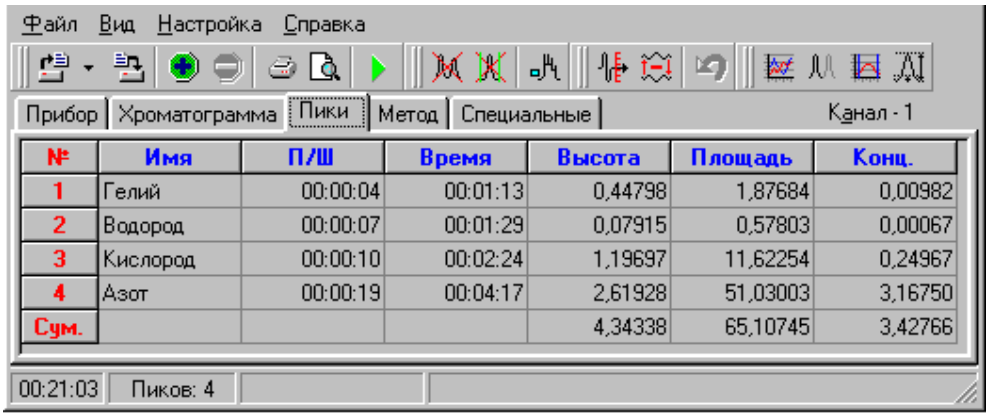
Рис.47 Различные типы градуировочных кривых при одинаковых значениях дозы и концентрации

Легко заметить к какой ошибке может привести неправильно выбранная градуировочная зависимость на различных участках.

В некоторых случаях требуется рассчитать концентрацию с учетом коэффициента относительной чувствительности. Для этого необходимо установить галочку напротив соответствующей строки на закладке ***Метод*** / ***Расчет*** и в окне ***Метод*** / ***Шаблон*** ввести коэффициенты чувствительности.

Созданный метод необходимо сохранить (см. п. 3.6) для дальнейшего его использования.

Потом загружаем (или получаем с хроматографа) другую хроматограмму с неизвестными концентрациями. Запускаем метод и в таблице пиков закладки ***Пики*** получаем рассчитанные концентрации компонентов.



№	Имя	П/Ш	Время	Высота	Площадь	Конц.
1	Гелий	00:00:04	00:01:13	0,44798	1,87684	0,00982
2	Водород	00:00:07	00:01:29	0,07915	0,57803	0,00067
3	Кислород	00:00:10	00:02:24	1,19697	11,62254	0,24967
4	Азот	00:00:19	00:04:17	2,61928	51,03003	3,16750
Сум.				4,34338	65,10745	3,42766

Рис.48 Концентрация, рассчитанная методом Абсолютной градуировки (многоточечная градуировка)

Примечание: на закладке ***Метод*** / ***Автообнаружение*** действие ***Свертка с шаблоном*** выбирается по желанию пользователя. Если это действие не выбрать, то при расчете будет определена концентрация как размеченных, так и неразмеченных пиков.

Формулы для расчета методом абсолютной градуировки (многоточечная градуировка):

Для приближения методом наименьших квадратов использовались различные типы кривых: прямая линия из нуля, прямая линия, парабола и степенная функция.

1. Расчет концентраций без использования коэффициентов относительной чувствительности детектора:

$$C_i = \frac{a * S_i}{Доза}$$ прямая линия из нуля;

$$C_i = \frac{a * S_i + b}{Доза}$$ прямая линия не из нуля;

$$C_i = \frac{a * S_i^2 + b * S_i + c}{Доза}$$ парабола;

$$C_i = \frac{a * S_i^b}{Доза}$$ степенная функция;

2. Расчет концентраций при использовании коэффициентов относительной чувствительности детектора:

$$C_i = \frac{a * S_i}{Доза} * K_{отн.ч.i}$$ прямая линия из нуля;

$$C_i = \frac{a * S_i + b}{Доза} * K_{отн.ч.i}$$ прямая линия не из нуля;

$$C_i = \frac{a * S_i^2 + b * S_i + c}{Доза} * K_{отн.ч.i}$$ парабола**;**

$$C_i = \frac{a * S_i^b}{Доза} * K_{отн.ч.i}$$ степенная функция**;**

где:

C_i - концентрация i^го^ компонента;

S_i - площадь (или высота) i^го^ компонента;

a, b, c - градуировочные коэффициенты i^го^ компонента;

$K_{отн.ч.i}$ - коэффициент относительной чувствительности детектора к данному компоненту смеси.

Доза – объем дозируемой пробы (оно может быть разным для градуировки и измерения)

3.6.4.3 Метод Внутреннего стандарта.

Метод основан на введении в градуировочную смесь вещества (внутреннего стандарта), относительно которого рассчитываются градуировочные коэффициенты компонентов пробы. Метод позволяет исключить зависимость результата анализа от объема вводимой пробы.

При выборе метода ***Внутреннего стандарта*** справа от области выбора метода появляется окно ***Количество стандарта***, в которое вводится концентрация внутреннего стандарта. Кроме того пик внутреннего стандарта следует указать в таблице ***Шаблон*** на закладке ***Метод***. Для этого необходимо дважды щелкнуть левой клавишей мыши на столбце номер пика в строке пика внутреннего стандарта. Строка таблицы соответствующая пику внутреннего стандарта выделится зеленым цветом. Повторный двойной щелчок отменяет выделение.

Для метода внутреннего стандарта возможно использование как ***Калибровки по одной точке***, так и ***Многоточечной градуировки***.

Создание метода Внутреннего стандарта (калибровка по одной точке):

В окне ***Метод*** / ***Расчет*** выбираются соответствующие параметры для расчета концентрации (см. рис.49).

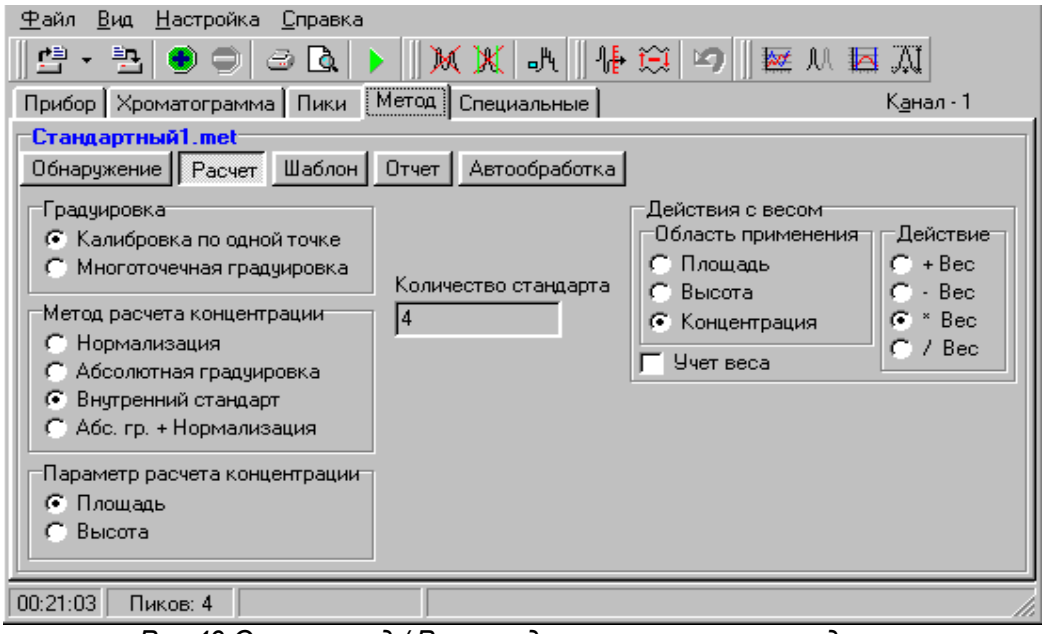


Рис.49 Окно метод / Расчет для внутреннего стандарта (калибровка по одной точке)

Далее выделяем пик внутреннего стандарта в таблице пиков на закладке ***Пики*** (для этого нужно на соответствующем номере пика щелкнуть два раза левой кнопкой мыши и строка выделится зеленым цветом). Затем, щелкнув правой кнопкой мыши по таблице пиков, вызываем контекстное меню и выбрав команду ***Добавить все в шаблон*** отправляем все данные в таблицу шаблона (рис. 50).

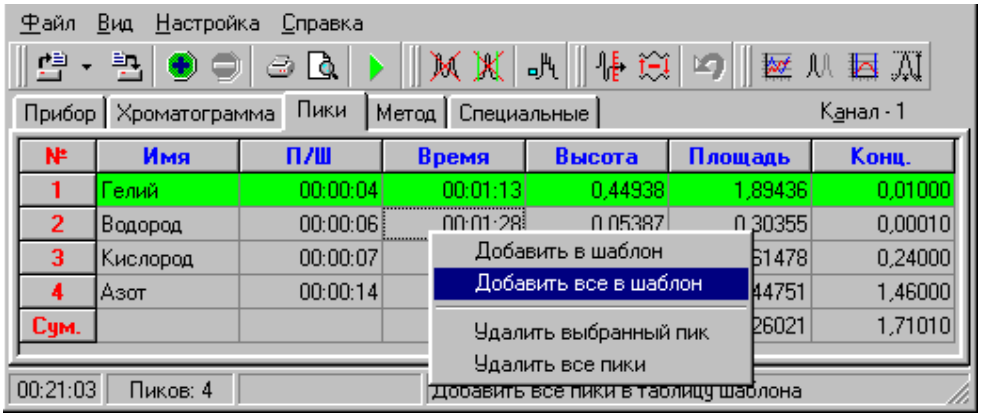
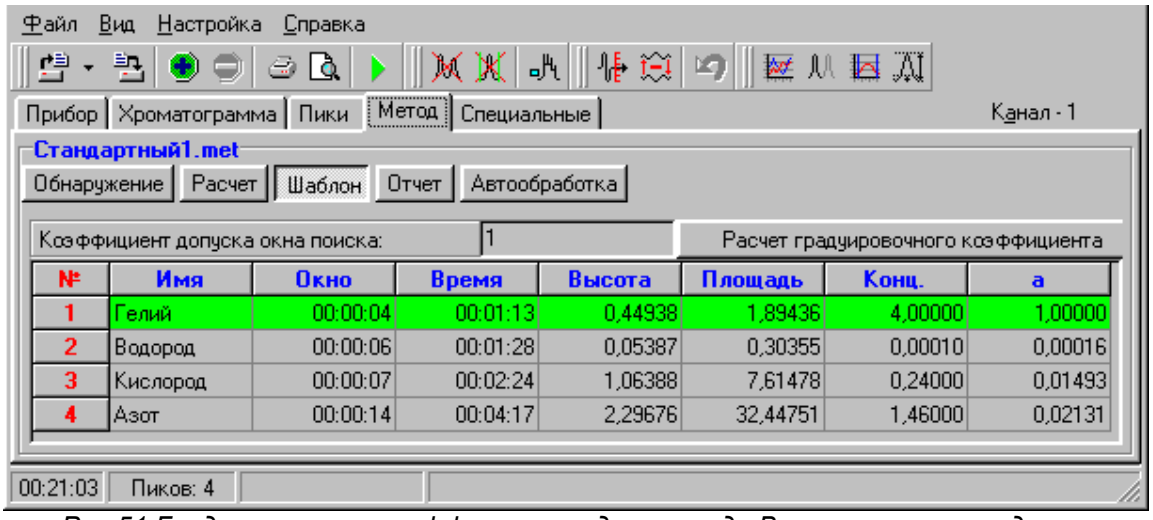


Рис.50 Контекстное меню таблицы пиков, где «Гелий» пик внутреннего стандарта

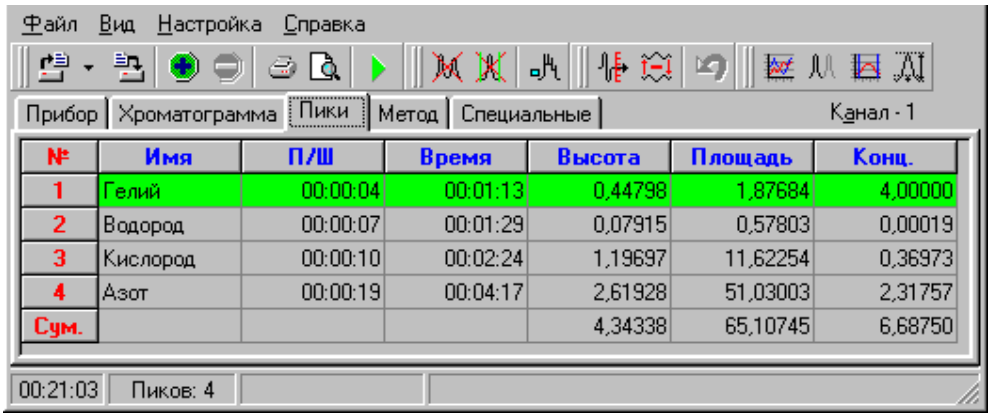
В окне ***Метод*** / ***Шаблон*** для расчета градуировочного коэффициента необходимо нажать соответствующую клавишу. При этом градуировочный коэффициент для пика внутреннего стандарта будет равен единице, т.к. по нему производится градуировка.



№	Имя	Окно	Время	Высота	Площадь	Конц.	a
1	Гелий	00:00:04	00:01:13	0,44938	1,89436	4,00000	1,00000
2	Водород	00:00:06	00:01:28	0,05387	0,30355	0,00010	0,00016
3	Кислород	00:00:07	00:02:24	1,06388	7,61478	0,24000	0,01493
4	Азот	00:00:14	00:04:17	2,29676	32,44751	1,46000	0,02131

Рис.51 Градуировочные коэффициенты для метода Внутреннего стандарта

После создания метода его сохраняют (см. п. 3.6). И при загрузке новой хроматограммы (или полученной с хроматографа) с неизвестными концентрациями компонентов, нужно запустить сохраненный метод и в таблице пиков закладки ***Пики*** будут отображены рассчитанные концентрации.



№	Имя	П/Ш	Время	Высота	Площадь	Конц.
1	Гелий	00:00:04	00:01:13	0,44798	1,87684	4,00000
2	Водород	00:00:07	00:01:29	0,07915	0,57803	0,00019
3	Кислород	00:00:10	00:02:24	1,19697	11,62254	0,36973
4	Азот	00:00:19	00:04:17	2,61928	51,03003	2,31757
Сум.				4,34338	65,10745	6,68750

Рис.52 Концентрации компонентов рассчитанные методом Внутреннего стандарта (использовалась калибровка по одной точке)

Создание метода Внутреннего стандарта (многоточечная градуировка):

При данной градуировке вычисление коэффициентов производится методом наименьших квадратов. Этот метод применяется для обработки экспериментальных данных, когда заведомо известно, что измеряемое значение отличается от истинного на некоторую *погрешность*. Поэтому градуировочный график не проходит точно через заданные точки, а проводится так, чтобы минимизировать сумму квадратов этих погрешностей для всех точек.

В окне ***Метод*** / ***Расчет*** выбираются соответствующие параметры для расчета концентрации (см. рис.53).

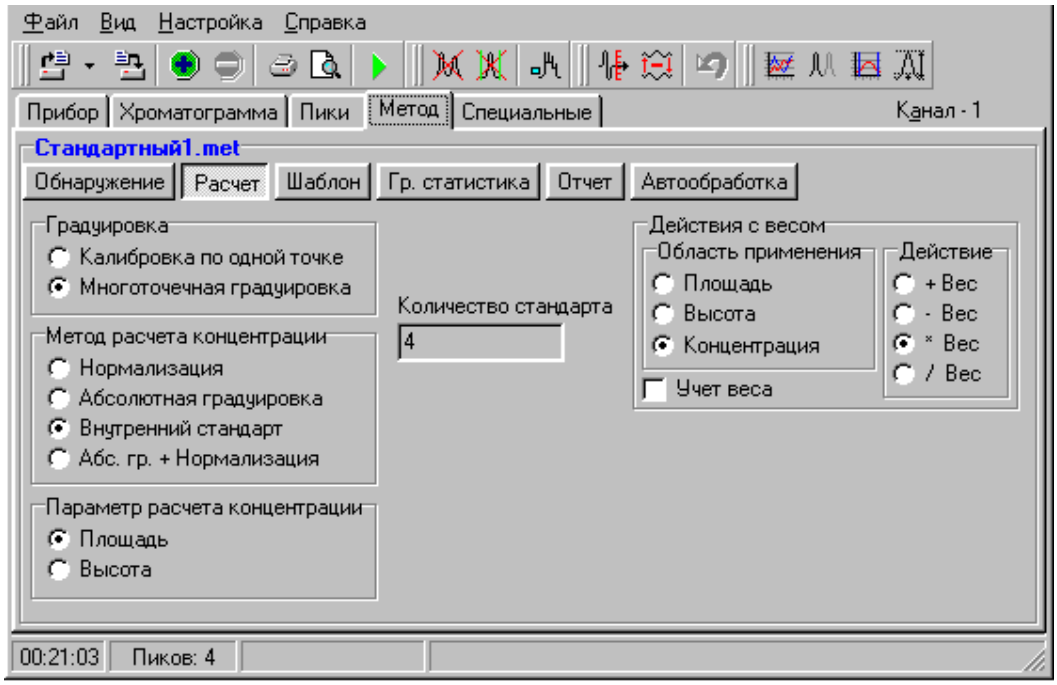


Рис.53 Окно метод / Расчет для внутреннего стандарта (многоточечная градуировка)

После этого в таблице пиков закладки ***Пики*** необходимо выделить пик внутреннего стандарта (для этого на соответствующем номере пика щелкнуть два раза левой кнопкой мыши и строка выделится зеленым цветом). Затем, щелкнув правой кнопкой мыши по таблице пиков, вызвать контекстное меню и выбрать по очереди команды ***Добавить все в шаблон*** и ***Учесть в гр. статистике*** (рис. 54).

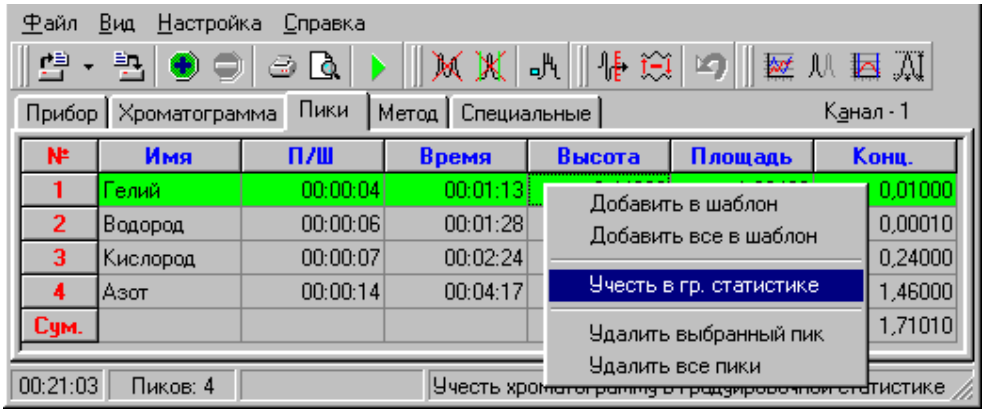


Рис.54 Контекстное меню таблицы пиков, где «Гелий» пик внутреннего стандарта

При перенесении данных, в таблицу шаблона пик внутреннего стандарта переносится автоматически. А в таблице статистики этот же самый пик надо указать вручную. Для этого дважды щелкнуть левой кнопкой мыши на номере соответствующего пика, и строка выделиться зеленым цветом. И только после этого будут рассчитаны градуировочные коэффициенты.

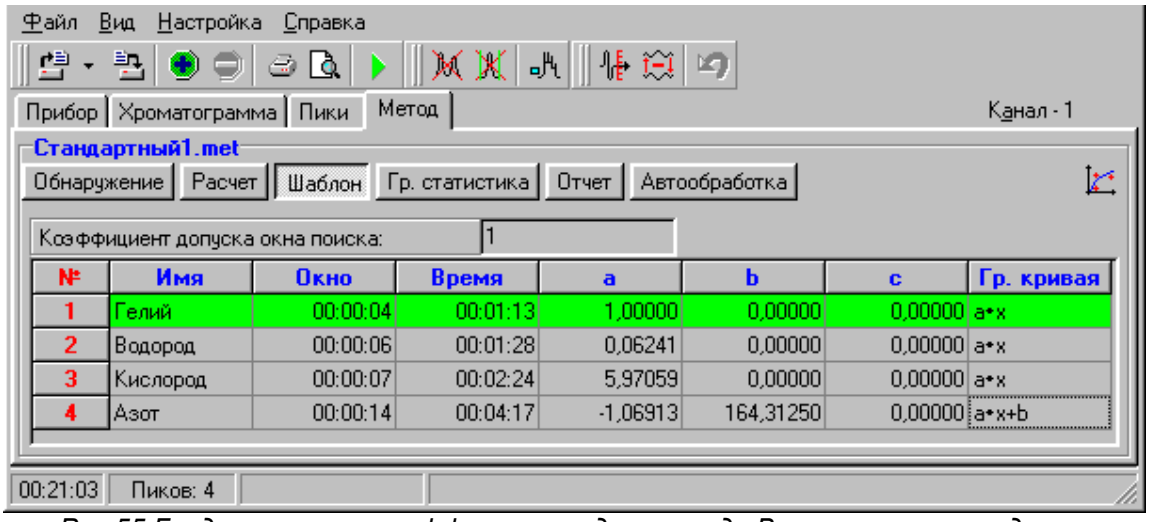


Рис.55 Градуировочные коэффициенты для метода Внутреннего стандарта

Тип градуировочной кривой можно менять так же, как и в методе абсолютной градуировки (подробнее п.3.6.4.2). Но в данном случае на графике по вертикальной оси откладывается относительная концентрация, т.е. отношение концентрации компонента к концентрации стандарта (C), а по горизонтальной оси относительная площадь, т.е. отношение площади компонента к площади стандарта (S) или относительная высота (h) в зависимости от выбора параметра расчета концентрации.

Созданный метод необходимо сохранить (подробнее в п. 3.6). И при загрузке новой хроматограммы (или полученной с хроматографа) с неизвестными концентрациями компонентов, нужно запустить сохраненный метод и в таблице пиков закладки ***Пики*** будут отображены рассчитанные концентрации.

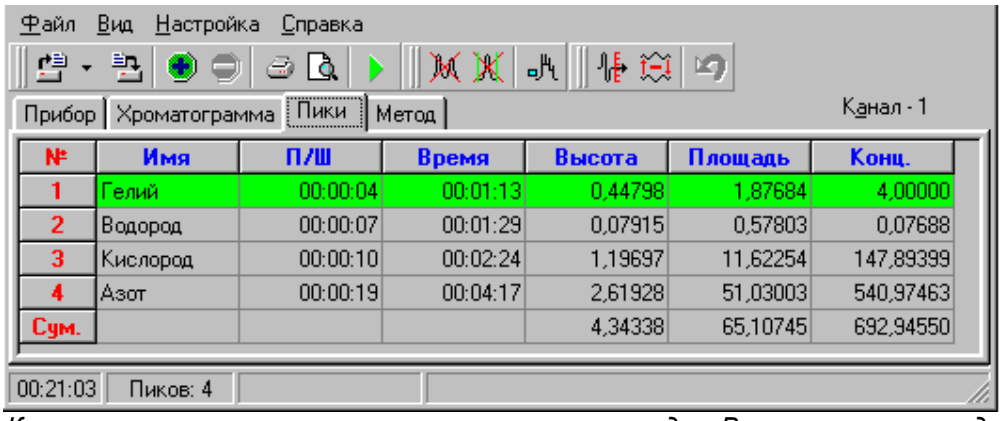


Рис.56 Концентрации компонентов рассчитанные методом Внутреннего стандарта (использовалась многоточечная градуировка)

Формулы для расчета методом внутреннего стандарта:

1. Градуировочный коэффициент:

$$a = \frac{S_{cm} * C_i}{S_i * C_{cm}};$$

2. Расчет концентраций:

$$C_i = a * \frac{S_i * C_{cm}}{S_{cm}}$$

где:

C_i - концентрация i^го компонента;

S_i - площадь (или высота) i^го компонента;

C_{cm} - концентрация стандарта;

S_{cm} - площадь (или высота) стандарта;

a - градуировочный коэффициент i^го компонента.

3.6.4.4 Метод Абсолютной градуировки + Нормализация.

Данный метод заключается в следующем: градуировочные коэффициенты рассчитываются по методу абсолютной градуировки, а концентрации компонентов вычисляются как в методе нормализации. Т.е. вся сумма пиков берется за 100% процентов и из нее вычитается процент известнох компонентов. И, в отличие от метода нормализации, к нему применима как калибровка по одной точке, так и многоточечная градуировка.

3.6.5 Окно Метод / Отчет.

На странице ***Отчет*** (Рис. 57) закладки ***Метод*** производится выбор - параметров расчета хроматограмм, которые необходимо вывести впоследствии на печать.

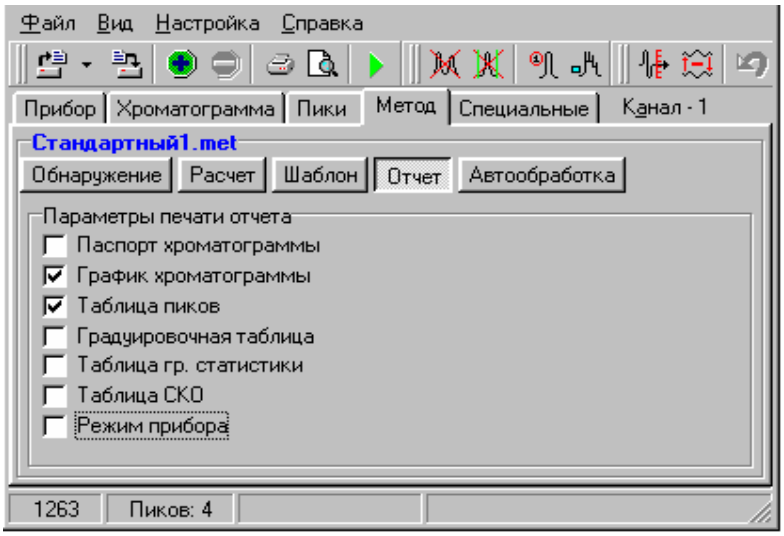


Рис.57. Закладка Метод / Отчет

Предварительный просмотр отчета осуществляется нажатием кнопки ***Предварительный просмотр*** на панели инструментов ***Стандартная***. Вывод отчета на печать – кнопки ***Печать отчета*** на панели инструментов ***Стандартная***.

3.6.6 Окно Метод / Автообработка.

Страница ***Автообработка*** служит для установки команд, выполняющихся при автоматической обработке хроматограмм:

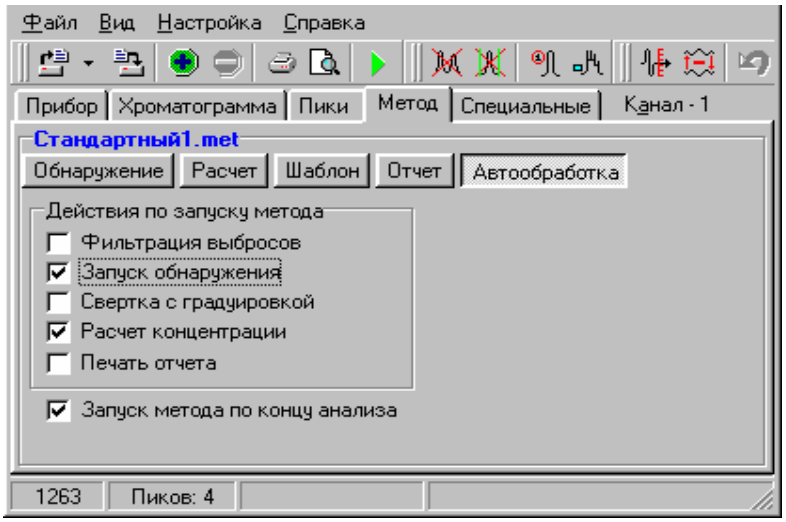


Рис.58. Закладка Метод / Автообработка

- Фильтр выбросов – фильтрует сигнал от импульсных помех;
- Запуск обнаружения – размечает хроматограмму в соответствии с заданными параметрами обнаружения;
- Свертка с шаблоном – выполнение этой функции убирает в соответствии с шаблоном все «ненужные пики»;
- Расчет концентрации – будет производиться с выбранными параметрами;
- Печать отчета – после расчета хроматограмм будет осуществляться печать отчета на принтере в соответствии с параметрами, заданными на странице ***Отчет***;
- Запуск метода после конца анализа – полностью автоматизирует обсчет хроматограмм. При выполнении данной функции запуск метода будет осуществляться автоматически после конца анализа.

Если на странице ***Автообработка*** не включена команда ***Запуск метода после конца анализа*** (отсутствует галочка в соответствующем окне слева от названия команды), то активный (загруженный) метод обработки можно запустить нажав команду ***Запуск метода*** на панели инструментов.

3.7 Сохранение и загрузка метода.

Для сохранения метода:

- Выбрать пункт главного меню ***Файл / Сохранить метод*** или соответствующей команды ***Сохранить метод*** на панели инструментов;
- В окне диалога (Рис. 59) ввести имя метода в поле ***Имя файла*** и выполнить команду ***Сохранить***.

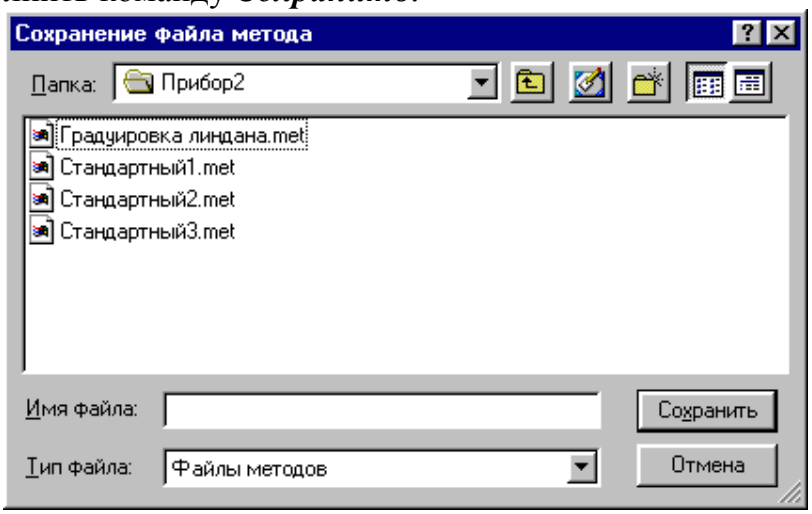


Рис.59 Окно сохранения метода в файл

По умолчанию метод сохраняется в папке ***Методы / Прибор X***, где ***X*** – номер соответствующего прибора.

При использовании ранее созданного метода для проведении анализа его следует активировать (загрузить). Для этого:

- Выбрать команду главного меню ***Файл / Загрузить метод*** или соответствующую команду ***Загрузить метод*** панели инструментов.
- Найти нужный файл в папке ***Методы*** окна диалога (Рис.60) и активировать его либо дважды щелкнув на нем левой клавишей мыши, либо выделив одним щелчком и выбрав команду ***Открыть***.

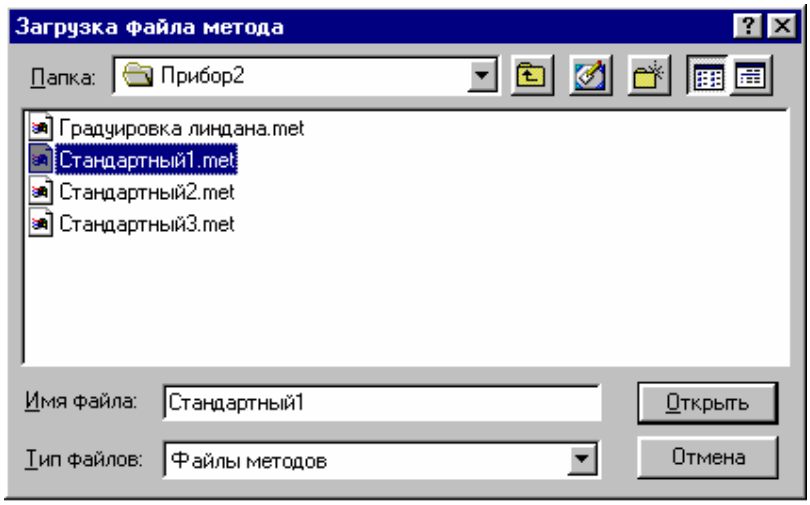


Рис.60 Окно загрузки Метода из файла

Следует отметить, что каждому каналу соответствует свой метод. Если запись хроматограммы идет параллельно по 1 и 2-му каналам, для получения исчерпывающей информации о составе пробы необходимо создать (активировать) методы для каждого из каналов отдельно.

Замечание: *для каждого прибора (папка* ***Метод / Прибор1..6****) есть три стандартных метода, которые загружаются автоматически при запуске программы: Стандартный1 – для 1 канала, Стандартный2 – для 2 канала и Стандартный3 – для 3 канала. Если при сохранении метода указать один из них, то при следующей загрузке программы сохраненный метод загрузится автоматически для соответствующего канала.*

3.8 Расчет хроматограмм.

Расчет хроматограмм выполняется автоматически по концу анализа, если на странице ***Автообработка*** закладки ***Метод*** установлена соответствующая команда. Если нет – для расчета хроматограммы следует выполнить команду ***Запуск метода*** на панели инструментов. Результаты расчета будут выведены в таблице пиков (закладка ***Пики***).

Результаты анализа распечатываются в отчете в соответствии с установками на странице ***Отчет*** закладки ***Метод***.

Разработчики будут благодарны пользователям за все замечания и предложения по работе программы и описанию программного обеспечения.