

Система регистрации и обработки спектрометрической информации

# UniChrom 4.x - 5



---

Техническое описание и  
инструкция по эксплуатации

АСТ.410170.001 ТО



# Авторские права, товарные знаки и торговые марки

Исключительное право тиражирования аппаратных и программных средств системы UniChrom® и её документации принадлежит ООО “Новые аналитические системы” и охраняется законодательством Республики Беларусь и Российской Федерации, а также Всемирной Конвенцией по авторским правам и прямыми обязательствами официальных пользователей, оговорёнными в договорных соглашениях.

NAS, New Analytical Systems, НАС, Новые Аналитические Системы, UniChrom®, ЮниХром® – являются торговыми марками ООО "Новые Аналитические Системы".

Программное обеспечение UniChrom зарегистрировано в федеральном институте промышленной собственности Российской Федерации за номером 200461079 от 30.03.2004.

Товарные знаки и торговые марки, упомянутые в настоящем документе, являются собственностью соответствующих владельцев.



ООО “Новые аналитические системы”, 1993 – 2015  
пр. Независимости 70, 458, 220079 Минск, Беларусь  
Тел. (факс): +375-17-284-00-30  
E-mail: [unichrom@unichrom.com](mailto:unichrom@unichrom.com)  
Web: [www.nas.minsk.by](http://www.nas.minsk.by) , [www.unichrom.com](http://www.unichrom.com)



# Содержание

1 Общие сведения.....	11
1.1 Назначение и область применения.....	12
1.1.1 Аппаратная часть системы UniChrom.....	12
1.1.1.1 Газовые хроматографы.....	12
1.1.1.2 Жидкостные хроматографы.....	13
1.1.1.3 Системы капиллярного электрофореза.....	13
1.1.1.4 Аналого-цифровые и другие внешние преобразователи и устройства.....	13
1.1.1.5 Лабораторная сеть L-net.....	14
1.1.1.6 Измерительные каналы системы.....	14
1.1.1.7 Внешний вид ADC L-net – vxx3.....	15
1.1.2 Программный продукт системы UniChrom.....	16
1.1.2.1 Базовый пакет ПО5 и документация.....	16
1.1.2.2 Драйверы поддержки аналитического оборудования.....	17
1.1.3 Метрологическое обеспечение.....	17
1.2 Общие характеристики системы.....	18
1.3 Лицензионное соглашение и ограниченная гарантия.....	22
2 Установка и настройка.....	25
2.1 Начальные операции.....	26
2.1.1 Распаковка и проверка комплектности.....	26
2.1.2 Подготовка компьютерного оборудования.....	27
2.2 Установка и подключение оборудования.....	27
2.2.1 Общие меры предосторожности.....	27
2.2.2 Установка электронного ключа и подключение принтера.....	28
2.2.3 Установка и подключение измерительного оборудования.....	28
2.3 Установка и настройка программы.....	28
2.3.1 Установка программного обеспечения.....	28
2.3.2 Настройка на работу с аналитическим оборудованием.....	29
2.3.3 Обновление программного обеспечения UniChrom через Интернет.....	30
2.3.4 Удаление программного обеспечения UniChrom.....	31
2.3.5 Разрешение вопросов по установке и настройке программы.....	31
2.4 Редактор конфигурации системы UniChrom.....	32
2.4.1 Внешний вид.....	32
2.4.2 Установка инструмента.....	32
2.4.3 Удаление инструмента.....	32
2.4.4 Настройка параметров.....	32
2.4.4.1 Добавление параметра.....	33
2.4.4.2 Правка параметра.....	33
2.4.4.3 Удаление параметра.....	33
2.4.4.4 Описание параметров (item name) DriverName, DriverFreg, ComName.....	33
2.4.5 Общие свойства.....	34
2.4.5.1 Рабочее название.....	34
2.4.5.2 Использование устройства.....	35
2.4.6 Драйверы устройства.....	35
2.4.6.1 Файлы драйверов.....	35
2.4.6.2 Диагностика.....	35
2.4.7 Порт.....	36
2.4.7.1 Порт для подключения.....	36
2.4.7.2 Тестирование устройства при подключении.....	37
2.4.7.3 Настройка последовательного COM-порта.....	37
2.4.8 Схема PPG.....	38
2.4.8.1 Компоненты хроматографа.....	38
2.4.8.2 Список газовых регуляторов прибора.....	38
2.4.9 Поведение устройства.....	39
2.4.9.1 Режим.....	39
2.4.9.2 Время ожидания (уравновешивания).....	39
2.4.9.3 Время аварийного таймера.....	40
2.4.9.4 Магическая версия устройства.....	40
2.4.10 Экономия газа.....	41
2.4.10.1 Параметры экономии газа.....	41
2.4.11 Поджиг.....	42
2.4.11.1 Режим поджига.....	42

2.4.11.2	Параметры поджига.....	42
2.4.12	Тип РРГ.....	44
2.4.13	Детекторы.....	45
2.4.13.1	Включение / Выключение детектора.....	45
2.4.13.2	Тип детектора.....	45
2.4.13.3	Блокировки.....	46
2.4.13.4	Изменение режима контроля пламени в пламенно-ионизационном детекторе.....	46
2.4.13.5	Изменение режима контроля ВУФ лампы для фото - ионизационного детектора.....	47
2.4.13.6	Изменение режима контроля спирали детектора по теплопроводности.....	48
2.4.13.7	Инверсия сигнала ДТП.....	49
2.4.14	Сигналы.....	50
2.4.14.1	Изменение частоты измерения.....	50
2.4.14.2	Множители для сигналов.....	50
2.4.15	Насосы и датчики.....	51
2.4.16	Специальные свойства жидкостного хроматографа.....	52
2.4.16.1	Количество насосов в приборе.....	52
2.4.16.2	События на команду «Пауза».....	52
2.4.16.3	Драйвер модуля АЦП.....	52
2.4.17	Отладка.....	53
2.4.17.1	Изменение уровня отладочных сообщений драйвера.....	53
2.5	Разделяемый доступ пользователей к системе UniChrom.....	54
2.5.1	Создание базы данных пользователей.....	54
2.5.2	Окно проверки пользователя.....	54
2.5.3	Группы пользователей.....	54
2.5.4	Добавление и удаление пользователей.....	55
2.5.5	Задание пароля пользователя.....	55
2.5.6	Оболочки для пользователей.....	56
2.6	Конфигурация газохроматографического оборудования в системе UniChrom.....	57
2.6.1	Общий подход к работе с газовыми хроматографами любого типа.....	58
2.6.1.1	Систематизация регуляторов газового хроматографа.....	59
2.6.1.2	Режимы работы хроматографа.....	64
2.6.1.3	Температурные регуляторы.....	66
2.6.1.4	Газовые регуляторы.....	67
2.6.1.5	Регулятор газа-носителя.....	68
2.6.2	Установка нескольких инструментов одного типа.....	68
2.6.3	Установка драйверов и регистрация в системном реестре.....	68
2.6.4	Меню редактора конфигурации.....	69
2.6.5	Кабель RS-232.....	69
2.7	Конфигурация ВЭЖХ систем.....	70
2.7.1	Конфигурация ВЭЖХ систем из модулей в системе UniChrom.....	70
2.7.2	Программная модель жидкостного хроматографа.....	71
2.7.3	Драйверы.....	71
2.7.4	Кластерные драйверы.....	71
2.7.5	Нумерация измерительных каналов в кластере.....	72
2.7.6	Примеры конфигурации ВЭЖХ систем.....	73
2.7.6.1	Изократическая система с кондуктометрическим детектированием на базе модулей «Аквилон».....	73
2.8	Запуск программы Uwin32.exe.....	74
2.8.1	Запуск с рабочего стола Windows.....	74
2.8.2	Запуск программы через системное меню.....	74
2.8.3	Автоматический запуск при включении компьютера.....	74
2.8.4	Запуск при открытии файла данных.....	74
2.8.5	Параметры запуска программы Uwin32.exe.....	74
2.8.6	Дополнительные сведения.....	74
2.9	Опробование.....	75
2.9.1	Тестирование измерительного канала.....	75
2.9.2	Задание режима работы газового хроматографа.....	75
2.9.3	Задание режима работы жидкостного хроматографа.....	76
2.9.4	Запуск измерения.....	76
2.9.5	Разрешение вопросов по регистрации сигналов и управлению хроматографами.....	76
3	Основные операции.....	78
3.1	Кратчайший путь к цели.....	80
3.1.1	Как это сделать быстрее?.....	80
3.1.2	Попробуем это автоматизировать.....	81

4 Справочная информация.....	82
4.1 Окно UniChrom.....	84
4.1.1 Общие сведения об элементах управления окна.....	84
4.1.2 Настойка внешнего вида.....	85
4.1.3 Объекты рабочего стола программы.....	86
4.1.4 Меню программы.....	86
4.1.4.1 Стандартные методы работы с меню в Windows.....	86
4.1.4.2 Команды меню Файл.....	87
4.1.4.3 Команды меню Правка.....	87
4.1.4.4 Команды меню Инструменты.....	87
4.1.4.5 Команды меню Окна.....	88
4.1.4.6 Команды меню Помощь.....	89
4.1.5 Панели инструментов.....	89
4.2 Спектры в системе UniChrom.....	90
4.2.1 Структура спектра.....	90
4.2.2 Различные применения спектров.....	91
4.2.2.1 Метод анализа.....	91
4.2.2.2 Шаблон анализов.....	91
4.2.2.3 Хроматограмма.....	91
4.2.2.4 Библиотека пиков.....	92
4.3 Окно спектра.....	93
4.3.1 Общие сведения об элементах управления окна.....	93
4.3.2 Состояния спектра.....	94
4.3.3 Информация о спектре в заголовке окна.....	94
4.3.4 Навигатор слоёв.....	94
4.3.4.1 Команды навигатора.....	95
4.3.4.2 Особенности работы со слоями.....	95
4.3.4.3 Управление навигатором с помощью мыши и клавиатуры.....	95
4.3.5 Индикатор текущего слоя.....	95
4.3.6 Индикатор состояния спектра.....	96
4.3.7 Общие методы работы с вкладками спектра.....	96
4.4 Страница графика.....	97
4.4.1 Управление отображением (масштабом) графика.....	98
4.4.2 Маркеры.....	98
4.4.3 Дисплей данных.....	98
4.4.4 Ось Y.....	98
4.4.5 Ось X.....	99
4.4.6 Стрелки масштабирования спектра.....	99
4.4.7 «Резиновая рамка».....	99
4.4.8 Дисплей окна или область графика.....	99
4.4.9 Меню параметров отображения.....	99
4.5 Страница свойств метода.....	100
4.5.1 Свойства метода.....	100
4.5.2 Окно «Свойства».....	100
4.5.3 Селекторы значений свойств.....	105
4.5.4 Статические селекторы.....	105
4.5.5 Динамические селекторы.....	106
4.5.6 Макросы для подстановки значений.....	106
4.5.7 Конфигурация селекторов в INI-файлах.....	106
4.6 Страница пиков спектра.....	108
4.7 Страница метода спектра.....	110
4.8 Калибровка в окне спектра.....	111
4.9 Инструмент окна спектра.....	113
4.9.1 Подключение прибора к окну спектра.....	113
4.9.2 Установки ГХ прибора.....	113
4.9.2.1 Термостат.....	114
4.9.2.2 Инжекторы.....	114
4.9.2.3 Детекторы.....	114
4.9.3 Установки ЖХ прибора.....	115
4.9.4 Установки ЖХ «Милихром-5» / «Милихром А-02».....	117
4.9.5 Работа с ГХ или ЖХ прибором.....	118
4.9.5.1 Подготовка к измерению.....	118
4.9.5.2 Измерение.....	118
4.9.5.3 Завершение измерения.....	118

4.10	Таблица слоёв.....	119
4.11	Таблица образцов.....	120
4.11.1	Параметры ввода.....	120
4.11.2	Дополнительные устройства.....	120
4.12	Обработка хроматограммы.....	121
4.12.1	Окно свойств пика.....	121
4.12.1.1	Общие свойства пика.....	121
4.12.1.2	Специальные свойства пика.....	123
4.12.1.3	Дополнительные свойства пика.....	124
4.12.1.4	Библиотека спектра в окне свойств пика.....	125
4.12.1.5	Свойства библиотеки.....	126
4.12.2	Хроматографические свойства пика.....	127
4.12.2.1	Полуширина.....	127
4.12.2.2	Относительное удерживание.....	128
4.12.2.3	Разрешение пиков.....	128
4.12.2.4	Число теоретических тарелок.....	128
4.12.2.5	Число эффективных теоретических тарелок.....	128
4.12.2.6	Высота, эквивалентная эффективной теоретической тарелке.....	128
4.12.2.7	Коэффициент извлечения (коэффициент ёмкости колонки).....	128
4.12.2.8	Фактор “хвостатости” пика.....	129
4.13	Окно обработки спектра.....	130
4.13.1	Сглаживание спектра.....	131
4.13.2	Поиск пиков.....	132
4.13.2.1	Выбор параметров поиска пиков.....	133
4.13.3	Правка пиков.....	134
4.13.4	Расчёт параметров пиков.....	136
4.13.4.1	Расчёт концентрации методом внутренней нормализации.....	136
4.13.4.2	Относительные коэффициенты чувствительности.....	137
4.13.4.3	Расчёт концентрации методом внутреннего стандарта.....	137
4.13.4.4	Расчёт групповых концентраций.....	137
4.13.4.5	Расчёт концентрации методом внешнего стандарта.....	138
4.13.4.6	Расчёт концентрации токсинов.....	138
4.13.4.7	Расчёт линейных и логарифмических индексов удерживания в группе пиков.....	139
4.13.4.8	Расчёт параметров бензинов.....	139
4.13.4.9	Настройка групп углеводов для расчёта октанового числа.....	140
4.13.4.10	Давление насыщенных паров.....	140
4.13.5	Работа с библиотекой.....	140
4.13.6	Создание отчёта.....	142
4.14	Принципы автоматической обработки хроматограмм.....	143
4.14.1	Основные определения.....	143
4.14.2	Окно макроса.....	143
4.14.3	Кнопка запуска макроса на исполнение.....	144
4.15	Общие сведения по работе с окнами в Windows.....	145
4.15.1	Активизация окна.....	145
4.15.2	Свёртывание окна.....	145
4.15.3	Развёртывание окна и восстановление его исходных размеров.....	145
4.15.4	Изменение размеров окна.....	145
4.15.5	Перемещение окна по экрану.....	145
4.15.6	Закрытие окна.....	145
4.15.7	Системное меню окна.....	145
4.15.8	Дополнительные сведения.....	145
4.16	Контекстная помощь.....	147
4.16.1	Кнопка помощи Help.....	147
4.16.2	Меню “Помощь”.....	147
4.16.2.1	Меню “Содержание”.....	147
4.16.2.2	Меню “Что это?”.....	148
4.16.2.3	Меню “О системе...”.....	149
4.17	Расшифровка хроматограммы.....	150
4.18	Расчёт площади под пиком.....	153
5	Автоматическая обработка хроматограмм.....	154
5.1	Обработка хроматограммы.....	156
5.1.1	Коррекция измеренных данных.....	156
5.1.2	Разметка и интегрирование хроматограммы.....	158
5.1.3	Идентификация пиков.....	162

5.1.4 Расчёт концентраций.....	164
5.1.5 Вывод результатов измерений на печать.....	166
5.1.6 Запись макро.....	169
6 Предметный указатель.....	173



# 1 Общие сведения

## 1.1 Назначение и область применения

Аппаратно-программный комплекс (система) UniChrom<sup>1</sup> предназначен для автоматизации, управления и систематизации процессов хроматографических исследований и анализов любой сложности в лабораторных и заводских условиях.

Система UniChrom является эффективным инструментом для:

- формирования единой измерительно-информационной сети;
- управления газовыми и жидкостными хроматографами;
- регистрации, обработки и хранения хроматографических данных;
- проведения серийных и отдельных исследовательских анализов;
- построения последовательностей сбора данных и сценариев обработки хроматограмм в автоматическом режиме;
- создания протоколов измерений и отчётов;
- разработки хроматографических методик;
- доступа к локальным и удалённым специализированным базам данных;
- проведения метрологических аттестаций и поверок хроматографического оборудования.

Система UniChrom обеспечивает единый стиль работы с различными газовыми и жидкостными хроматографами, а также с дополнительными устройствами к ним (дозаторы автоматические жидкостные и газовые, переключатели газовых потоков и др.)

Прототипами системы UniChrom являются системы обработки данных, классифицируемые как "The Chromatography Data System – CDS" (OIML R83 Edition 1990).

### 1.1.1 Аппаратная часть системы UniChrom

Система UniChrom поддерживает работу следующих хроматографов и устройств:

#### 1.1.1.1 Газовые хроматографы

Прибор	Изготовитель	Степень поддержки (контроль и управление)
"Кристалл-2000М/5000"	СКБ "Хроматэк"	– Температурные зоны детекторов, инжекторов, термостата и приставки; – потоки газов (носитель, окислитель, топливный газ); – устройство автоматического ввода пробы (auto-sampler); – регистрация сигналов по четырём каналам.
"Кристаллюкс-4000"	СКБ "Мета-Хром"	– температурные зоны детекторов, инжекторов, термостата и приставки; – потоки газов (носитель, окислитель, топливный газ); – регистрация сигналов по трём каналам.
HP 4890/5890	Hewlett Packard Inc.	– температурные зоны детекторов, инжекторов и термостата; – регистрация сигналов по двум каналам.
HP 6890	Hewlett Packard Inc.	– температурные зоны детекторов, инжекторов и термостата; – потоки газов (носитель, окислитель, топливный газ); – устройство автоматического ввода пробы (auto-sampler); – регистрация сигналов по двум каналам.
GC-17A	Shimadzu Inc.	– температурные зоны детекторов, переходной камеры, инжекторов и термостата; – регистрация сигналов по двум каналам через внешний модуль ADC L-net (Unit of Lab ADC network – см. ниже).

<sup>1</sup> сокр. от англ. Universal Chromatography – универсальная хроматография

Прибор	Изготовитель	Степень поддержки (контроль и управление)
“Цвет-800”	ОАО “Цвет”	– температурные зоны детекторов, переходной камеры, инжекторов и термостата; – регистрация сигналов по двум каналам.
“Цвет-800” & ADC L-net	ОАО “Цвет” ООО “НАС”	– температурные зоны детекторов, переходной камеры, инжекторов и термостата; – регистрация сигналов по двум каналам через внешний модуль ADC L-net (Unit of Lab ADC network – см. ниже).
“Цвет-500” & TCB & ADC L-net	ОАО “Цвет” ООО “НАС”	– температурные зоны детекторов, переходной камеры, инжекторов и термостата через встроенный в БПГ-167 <sup>2</sup> модуль TCB (The Temperature Control Block); – регистрация сигналов по двум каналам через встроенный в БПГ-167 модуль ADC L-Net.

#### 1.1.1.2 Жидкостные хроматографы

Прибор	Изготовитель	Степень поддержки (контроль и управление)
“Стайер” & ADC L-net	ЗАО НПФ “Аквилон” ООО “НАС”	– 4-х градиентные насосы производительностью 10 или 100 мл/мин максимально; – регистрация сигнала через встроенный АЦП и внешний модуль ADC L-Net.
Жидкостной хроматограф с спектрофотометрическим детектором “Флюорат -02-2М”	ЗАО “Люмэкс”	– 4-х градиентные насосы производительностью 10 или 100 мл/мин максимально; – регистрация сигнала через встроенный АЦП.
Жидкостной хроматограф “Милихром-5”	НПО “Научприбор”	– мониторинг параметров прибора; – регистрация сигнала через встроенный модуль АЦП.
Жидкостной хроматограф “Милихром А-02”	ЗАО “ЭкоНова”	– мониторинг параметров прибора; – регистрация сигнала через встроенный модуль АЦП.

#### 1.1.1.3 Системы капиллярного электрофореза

Прибор	Изготовитель	Степень поддержки (контроль и управление)
Система капиллярного электрофореза “Капель-103”	ЗАО “Люмэкс”	– мониторинг параметров прибора; – регистрация сигнала через встроенный модуль АЦП.

#### 1.1.1.4 Аналого-цифровые и другие внешние преобразователи и устройства

Прибор	Изготовитель	Примечания
ADC L-net	ООО “НАС”	– 2-канальный 24-битный биполярный аналого-цифровой преобразователь на базе чипа AD 7710 фирмы Analog Devices. Позволяет измерять ток и (или) напряжение с выходов хроматографов и напрямую с детекторов; – настраиваемые параметры – конфигурация измерительных каналов, диапазоны измерений и частота сбора данных.

<sup>2</sup> блок подготовки газов

Прибор	Изготовитель	Примечания
Counter	ООО "НАС"	– 2(4)-канальная компьютерная плата счётчиков и 2(4) модуля "ГУН", преобразующих напряжения с выходов хроматографов в частоты; – настраиваемые параметры – частота сбора данных.
Sound Blaster		– любая звуковая карта, установленная в компьютер, может быть использована в качестве регистрирующего устройства, преобразующего выходной сигнал хроматографа в цифровой эквивалент.
ADC E-24	ЗАО "L-card"	– 4-канальный 24-битный аналого-цифровой преобразователь в виде выносного модуля.
AquilADC	ЗАО НПКФ "Аквилон"	– 2-канальный 24-битный аналого-цифровой преобразователь в виде выносного модуля.
МультиХром-16/24	ЗАО "Амперсенд"	– 2- или 4-канальный 16/24-битный аналого-цифровой преобразователь в виде выносного модуля.

#### 1.1.1.5 Лабораторная сеть L-net

Система UniChrom обеспечивает регистрацию аналоговых сигналов с выходов хроматографов и (или) непосредственно с детекторов через внешние 2-канальные аналого-цифровые преобразователи ADC L-Net, которые объединяются в лабораторную двухпроводную измерительную сеть (The Laboratory ADC Network – L-net). Устройства подключаются по цепочке. Связь с компьютером осуществляется по стандартной линии RS-232, которая преобразуется в линию RS-485. Максимальное число измерительных каналов лабораторной сети L-net может достигать 32, что соответствует 16 устройствам на одной линии RS-485. При наличии свободных портов в компьютере, сеть может быть расширена и дополнена оборудованием, перечисленным выше.

Лабораторная измерительная сеть L-net системы UniChrom предназначена для формирования единого для лаборатории (предприятия) формата измерений, единого формата хранения измеренной информации, единого формата отчётов, протоколов и т.д.

**Блоки преобразователей ADC L-net содержат прецизионные усилители малых токов и напряжений. Уровень приведенных шумов составляет  $1 \cdot 10^{-14}$  А и 0,3 мкВ, соответственно. Переключение диапазонов чувствительности усилителей происходит автоматически.**

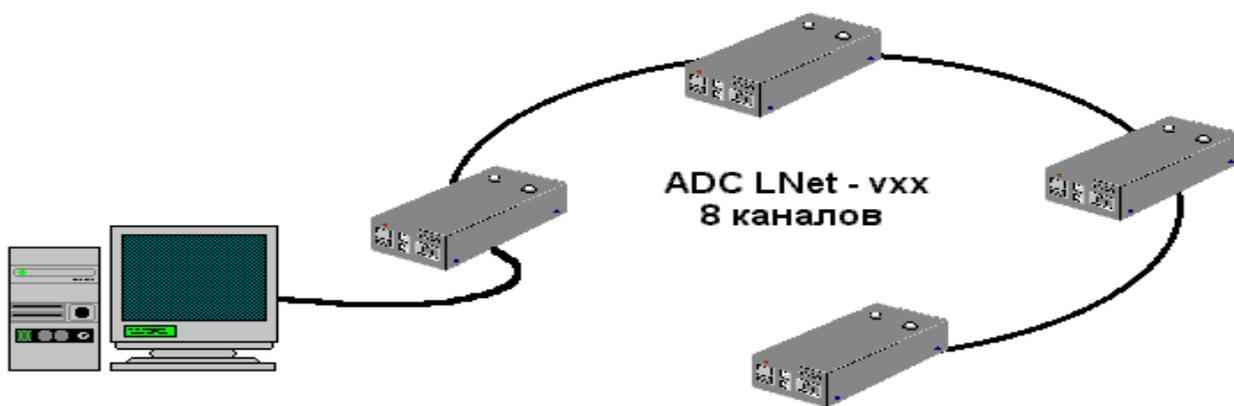
Компоненты сети L-net – аналого-цифровые преобразователи ADC L-net – предназначены для модернизации отечественных хроматографов "ЛХМ-8", "Биохром-1", "3700", "Цвет-3006", "Цвет-100", "Цвет-500", "Цвет-800", "Милихром", "Кристалл 2000М/5000", "Кристаллюкс-4000", зарубежных хроматографов Хром-5, Carlo Erba, Gilson, Waters, Beckman, Perkin-Elmer, Varian, Hewlett Packard, а также других газовых и жидкостных хроматографов, имеющих аналоговый выход напряжения в диапазоне от –3 до +3 В или аналоговый выход тока в диапазоне от –0,5 до +0,5 мкА.

#### 1.1.1.6 Измерительные каналы системы

Система UniChrom в минимальной конфигурации имеет два независимых канала измерений, которые представляют собой совокупность таких технических средств как выносной блок двухканального интерфейса связи хроматографа с компьютером и сам компьютер с соответствующим программным обеспечением. Каждый измерительный канал системы UniChrom, в соответствии с алгоритмом его функционирования, измеряет с заданной частотой входное напряжение, поступающее от источника сигнала, запоминает его для последующей математической обработки, а значение измеренного напряжения в удобном для пользователя виде отображается на экране монитора компьютера. По своим техническим и метрологическим характеристикам измерительные каналы системы эквивалентны между собой.

Возможность последовательного подключения дополнительных блоков к уже имеющимся позволяет работать одновременно с 32 измерительными каналами.

Рис. 1. Пример лабораторной сети устройств ADC L-net – vxx на восемь каналов

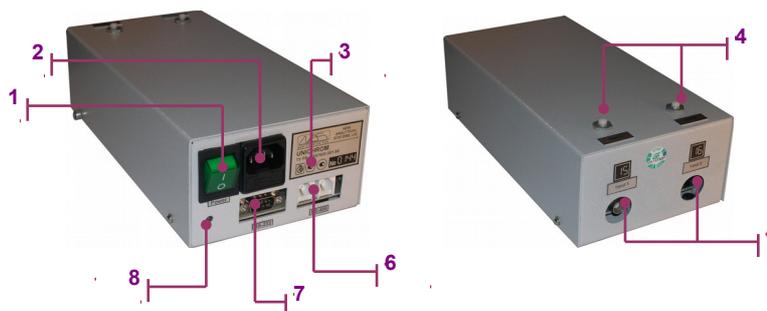


### 1.1.1.7 Внешний вид ADC L-net – vxx<sup>3</sup>

Интерфейс связи хроматографа с компьютером сегодня – это отдельный блок (ADC L-net), который принимает аналоговый сигнал от хроматографа, усиливает его с **переменным коэффициентом** усиления, зависящим от величины входного сигнала, выполняет преобразование аналогового сигнала в цифровой и отправляет полученный цифровой эквивалент входного сигнала в компьютер. Команда разработчиков, решив подчеркнуть универсальность данного устройства в рамках системы UniChrom, предложила исполнить ADC L-net в виде блока с “размерами кирпича”. Но в процессе разработки по техническим причинам пришлось добавить 5 миллиметров к высоте. Таким образом, реальные габариты блока составили 240X120X65 мм (см. 1.1.1.7). Сборка блока и всех его внутренних узлов производится винтами М3х8<sup>4</sup>.

Рис. 2. Внешний вид интерфейса связи хроматографа с компьютером (ADC L-net – vxx)

1 – тумблер “Сеть”; 2 – гнездо для подключения сетевого кабеля; 3 – серийный номер; 4 – кнопки старта измерения по каждому из двух каналов соответственно; 5 – входные гнезда для соответствующих каналов; 6 – разъёмы для подключения новых устройств в сеть L-net; 7 – разъём подключения устройства к компьютеру; 8 – индикатор работоспособности устройства.



Метка с серийным номером содержит наименование фирмы-производителя NAS, товарный знак UNICHROM, тип устройства, тип используемого АЦП, шестизначный серийный номер, месяц и год выпуска, например:

**NAS Ltd Serial № ADC.NM.7710.000007.12.98**

Рядом с серийным номером находится знак, указывающий на то, что система UniChrom сертифицирована и занесена в Реестр государственной регистрации средств измерений Республики Беларусь, Российской Федерации, Украины:

<sup>3</sup> версия устройства.

<sup>4</sup> Новые Аналитические системы не рекомендуют вскрывать блоки ADC L-net – vxx в течение гарантийного срока. Блоки с неисправностями происшедшими по вине пользователя гарантийному обслуживанию не подлежат.



ADC L-net v.03 изготавливается в корпусе блока подготовки газов БПГ-167 и представляет собой функционально идентичный комплекс. Эти блоки предназначены для автоматизации ГХ "Цвет-500" или "Цвет-560" с целью замены устройства управления БУ-125 и усилителя малых токов БИД-36 единым модулем под управлением персонального компьютера. Кроме измерительных каналов внутри корпуса находится блок управления термостатом, который обеспечивает задание температурной программы и поддержания температур пяти зон нагрева с параметрами не хуже БУ-125.

### 1.1.2 Программный продукт системы UniChrom

Программный продукт системы UniChrom выпускается на белорусском, русском, украинском, немецком, английском, французском языках и включают в себя следующие основные компоненты:

#### 1.1.2.1 Базовый пакет ПО<sup>5</sup> и документация

Состав	Примечания
1. Инсталляционные файлы	Предназначены для установки и удаления программных компонентов системы UniChrom.
2. Главный исполняемый модуль системы UniChrom	Решает общие задачи хроматографического анализа, такие как регистрация хроматограмм, обработка и хранение данных, формирование протоколов и отчётов, взаимодействие с другими программами и базами данных.
3. Драйверы устройства L-net	Набор специализированных файлов для обеспечения регистрации хроматограмм через внешние модули ADC L-net.
4. Редактор конфигурации	Инструмент для создания и конфигурирования аппаратных средств системы UniChrom.
5. Примеры хроматограмм	Файлы данных, предоставляемые для тренировки и самообучения пользователей работе с программой системы UniChrom.
6. Справочная система	Руководство пользователя и другая справочная информация в электронном виде с элементами быстрого поиска, "горячими" клавишами и "всплывающими" подсказками.
7. Паспорт	Твёрдая копия паспорта на систему UniChrom
8. Руководство пользователя	Твёрдая копия настоящего документа.
9. Методика поверки системы UniChrom	По выбору Заказчика твёрдая копия документа МП 330-97, МИ 2678-2001 (РФ), МП.МН 1036-2001 (РБ) или СТБ 1287-2001 (РБ).
10. Электронный ключ	Устройство защиты программного обеспечения системы UniChrom.

Детально базовый пакет программного обеспечения системы UniChrom описывается в последующих разделах настоящего документа.

Разработчик оставляет за собой право вносить изменения в состав программного пакета, не ухудшающие функциональности и характеристик программного обеспечения и оборудования. Некоторые функции программного обеспечения могут быть не описаны в данном документе и будут документированы в следующих выпусках руководства пользователя.

<sup>5</sup> программное обеспечение.

### 1.1.2.2 Драйверы поддержки аналитического оборудования

Оборудование	Файлы поддержки			
	*.dll	*.inf	*.vxd / *.sys	*.cal
“Кристалл 2000M”	cr2000.dll	cr2000.inf	–	–
“Кристалл 5000M”	cr5000.dll	cr5000.inf	–	–
“Crystallux-4000”	crys4000.dll	crys4000.inf	–	–
HP 4890/5890	hp5890.dll hp5890a.dll	hp5890.inf hp5890a.inf	–	–
HP 6890	hp6890.dll	hp6890.inf	–	–
GC-17A	gc17a.dll	gc17a.inf	–	–
“Цвет-800”	chrom800.dll	chrom800.inf	–	–
“Цвет-800” & ADC L-net	lnetc32.dll, lnet800.dll	lnet800.inf	lnet.vxd / lnet.sys	–
“Цвет-500” & TCB & ADC L-net	lnetc32.dll, tcb500n.dll	chrom500.inf	lnet.vxd / lnet.sys	–
“Стайер” & ADC L-net	lnetc32.dll, marathon.dll	marathon.inf	lnet.vxd / lnet.sys	–
“Milichrom-5”	milichrom.dll	milichrom.inf	lnet.vxd / lnet.sys	–
“Milichrom A-02”	Ma02.dll	Ma02.inf	lnet.vxd / lnet.sys	–
“Капель-103”	kapel32.dll	kapel.inf	–	–
“Флюорат-02-2M”	fluo02.dll	fluo02.inf	–	–
ADC L-net	lnetc32.dll	lnet.inf	lnet.vxd / lnet.sys	–
Counter	cntrc32.dll	vcntrd.inf, counter.inf	vcntrd.vxd, counter.sys	ctrw.cal
SoundBlaster	sbwin32.dll	sbwin32.inf	–	–
ADC E-24	e24.dll	e24.inf	–	–
AquilADC	aquiladc.dll	aquiladc.inf	–	–
“Мультихром-16”	mlcwin32.dll	mlcwin32.inf	–	–
“Мультихром-24”	mlc98_32.dll	mlc98_32.inf	–	–

### 1.1.3 Метрологическое обеспечение

- Система UniChrom сертифицирована в Госстандарте Республики Беларусь и занесена в Реестр государственной регистрации средств измерений Республики Беларусь под № РБ 03 09 0702 98.
- Система UniChrom сертифицирована в Госстандарте Российской Федерации и занесена в Реестр государственной регистрации средств измерений Российской Федерации под № 19675-00.
- Система UniChrom сертифицирована в Госстандарте Украины и занесена в Реестр государственной регистрации средств измерений Украины под № РБ 03 09 0702 98.
- Система UniChrom зарегистрирована в Министерстве здравоохранения Республики Беларусь. Регистрационное удостоверение изделия медицинской техники № МТ-7.685-9907.

Производство системы UniChrom осуществляется в соответствии с техническими условиями ТУ РБ 14597800.001-98.

Метрологическая поверка системы UniChrom выполняется в соответствии с Методикой поверки МП 330-97.

Поверка системы UniChrom проводится 1 раз в год.

В качестве технических средств поверки системы используются генераторы тестовых сигналов специальной формы "ГТС-1", которые выдают прецизионные гистограммы тока и напряжения определённой формы в широком динамическом диапазоне. Гистограммы имитируют реальные хроматограммы. Приборы аттестованы в Госстандарте Республики Беларусь. Свидетельство № 448-6 от 17.10.1998 г. Производитель приборов – ООО "НАС".

Поверка системы UniChrom в составе хроматографического комплекса может осуществляться по следующим нормативным документам:

- Рекомендация Госстандарта РБ МП.МН 1036-2001;
- Государственный стандарт РБ СТБ 1287-2001;
- Рекомендация Госстандарта РФ МИ 2678-2001.

## 1.2 Общие характеристики системы

Система регистрации и обработки хроматографических данных UniChrom, отличающаяся высоким научно-техническим уровнем решения проблем контроля, управления, сбора, обработки, хранения и систематизации хроматографической информации в сочетании с простым и интуитивно понятным интерфейсом пользователя, позволяет выполнять следующие основные задачи хроматографического анализа:

### 1. Полный или частичный контроль и управление каждой измерительной единицей, как в отдельной лаборатории, так и в масштабах всего предприятия

- Одновременное подключение к одному компьютеру до 12-ти хроматографических приборов и устройств различных типов, включая хроматографы "Кристалл 2000М/5000", "Кристаллюкс-4000", HP 4890 / 5890 / 6890, GC-17A (Shimadzu), "Цвет-800 / 500", "Стайер", "Миличром-5/А-02" и лабораторную сеть L-net;
- Одновременное включение в одну лабораторную сеть L-net до 32 детекторов всех видов через внешние аналого-цифровые преобразователи ADC L-net или АЦП Е-24 фирмы "L-Card";
- Подключение преобразователей к детекторам осуществляется через аналоговые выходы хроматографов и напрямую, минуя, в случае необходимости, собственную аналоговую часть хроматографов;
- Работа со всеми хроматографами в едином формате системы UniChrom, то есть контроль и управление текущими состояниями хроматографов (если эти функции заложены в самих приборах и поддерживаются программным обеспечением системы), регистрация, обработка и хранение хроматографических данных, а также формирование отчётов выполняются непосредственно из UniChrom для всех поддерживаемых типов хроматографических приборов и устройств;
- Контроль текущего состояния хроматографов и управление их газовыми потоками, температурами зон, насосами, устройствами автоматического ввода пробы и другими элементами в реальном режиме времени (если эти функции заложены в самих приборах и поддерживаются программным обеспечением системы).

### 2. Регистрация сигналов

- Система UniChrom в комплексе с указанным выше аналитическим оборудованием не ухудшает технические характеристики данного аналитического оборудования. Уровень шумов, минимальный предел детектирования, дрейф и прочие характеристики сигнала соответствуют паспорту на соответствующее оборудование;
- Система UniChrom в комплексе с аналого-цифровыми преобразователями ADC L-net производства ООО "НАС", позволяет улучшать характеристики аналитического оборудования при регистрации сигнала детектора и доводить их до уровня ADC L-net;
- Модули ADC L-net являются выносными, двухканальными, биполярными, 24-битными устройствами на базе широко распространённого sigma-delta преобразователя AD7710 фирмы Analog Devices с программируемой частотой сбора данных;
- Уровень приведенных шумов при частоте измерения 6,25 Гц составляет  $1 \cdot 10^{-14}$  А для канала "ток" и 0,3 мкВ для канала "напряжение";
- Блоки преобразователей ADC L-net содержат прецизионные усилители малых токов и напряжений, которые позволяют подключать их напрямую к детекторам;
- Переключение диапазонов чувствительности усилителей происходит автоматически под управлением микропроцессора, что обеспечивает динамический диапазон измеряемых концентраций в семь порядков без вмешательства оператора;

- Максимальное расстояние от модуля до детектора не превышает одного метра;
- Расстояние от модуля до компьютера не ограничено. Система UniChrom имеет возможность управления устройствами сети L-net через модем по телефонным линиям.

### 3. Процесс измерения

- Автоматическая настройка приборов и устройств на анализ;
- Контроль уровня нулевого сигнала перед стартом;
- Автоматический запуск хроматограммы при старте измерения и её завершение по истечении заданного времени;
- Изменение длительности анализа (при необходимости) в процессе измерения;
- Максимальная длительность анализа не ограничена алгоритмами ПО системы UniChrom;
- Одновременный запуск хроматограммы, температурной программы и программы газовых потоков при старте (если эти функции заложены в самих приборах и поддерживаются программным обеспечением системы);
- Автоматический сброс температур и расходов в начальное состояние при завершении анализа, а также по указаниям оператора и при аварии в процессе анализа;
- Полная остановка процесса измерения при необходимости;
- Постоянное отображение текущего состояния датчиков аналитического оборудования и хроматограмм;
- Параллельная и последовательная регистрация многоканальных хроматограмм;
- Масштабирование и просмотр измеряемой хроматограммы и других хроматограмм в процессе измерения;
- Обработка данных в реальном режиме времени, то есть выполнение всех элементов обработки данных (сглаживание, разметка, идентификация, коррекция и другие) для измеряемой хроматограммы и других хроматограмм в процессе измерения;
- Автоматическая медианная фильтрация шумов и выбросов сигнала, настраиваемая перед измерением (может быть как включена, так и выключена);
- Автоматическая обработка хроматограмм по заданному сценарию после завершения измерения;
- Автоматическое исполнение серии последовательных измерений;
- Групповая обработка хроматограмм в серии.

### 4. Аппроксимация измеренных данных (сглаживание)

- Устранение однократных и многократных выбросов;
- Линейная аппроксимация по 3 и 5 точкам;
- Аппроксимация по 5, 9 и 11 точкам полиномом 3 степени;
- Интерполяция сплайном;
- “Фирменное” сглаживание по произвольному числу точек с постоянным и переменным шагом;
- Применение индивидуальных алгоритмов аппроксимации для произвольного числа отдельных участков хроматограммы;
- Выполнение указанных выше методов аппроксимации измеренных данных в ручном и в автоматическом режиме.

### 5. Разметка хроматограммы

- Выявление всех пиков на хроматограмме, включая обращённые пики;
- Максимальное количество пиков не ограничено алгоритмами ПО системы UniChrom;
- Поиск и установка пиков с алгоритмами выбора базы и алгоритмами отбора по ширине, высоте и площади;
- Коррекция разметки с элементами а) добавления, удаления и расщепления перекрытых пиков; б) изменения границ пиков и с) коррекции базы;
- Аппроксимация формы пиков гауссианой (гауссовой кривой) и экспоненциально модифицированной гауссианой;
- Разбивка перекрытых пиков на экспоненциально модифицированные гауссианы с элементами интерполяции фронтов и “хвостов” пиков и их визуального отображения;
- Применение индивидуальных алгоритмов разметки для произвольного числа отдельных участков хроматограммы;
- Выполнение указанных выше методов разметки в ручном и в автоматическом режиме.

### 6. Работа с библиотеками пиков. Идентификация компонентов

- Создание “гибких” (настраиваемых, модифицируемых и корректируемых под конкретные задачи) библиотек хроматографических пиков;

- Выбор и настройка библиотек для текущего анализа;
- Подбор пиков из библиотеки по временам удержания;
- Выбор пиков из библиотеки по имени, времени удержания и площади;
- Копирование свойств хроматографических пиков из библиотеки в текущую хроматограмму;
- Установка и снятие реперов (метка пиков);
- Установка соответствия временных шкал текущей и библиотечной хроматограммы по меченым пикам, компенсация нестабильности и дрейфа параметров удерживания при идентификации;
- Расчёт линейных и логарифмических индексов удерживания;
- Идентификация компонентов с использованием “гибких” библиотек пиков;
- Алгоритмы идентификации компонентов по временам удерживания, по линейным и логарифмическим индексам удерживания;
- Применение индивидуальных алгоритмов идентификации для произвольного числа отдельных участков хроматограммы;
- Выполнение идентификации в ручном и в автоматическом режиме.

#### **7. Градуировка аналитического оборудования. Определение концентраций**

- Табличная градуировка (табличное задание абсолютных или относительных коэффициентов чувствительности);
- Абсолютная многоточечная градуировка по площади и по высоте пика;
- Линейная, квадратичная и степенная аппроксимация градуировочной зависимости;
- Расчёт СКО и R-фактора аппроксимации;
- Отображение градуировочного графика для каждого пика;
- Определение относительных коэффициентов чувствительности;
- Расчёт абсолютных и относительных концентраций компонентов по площадям и по высотам пиков;
- Расчёт концентрации методом внутренней нормализации с учётом факторов отклика и коэффициента нормировки;
- Расчёт концентрации методом внутреннего и внешнего стандарта с учётом относительных факторов отклика;
- Расчёт концентрации методом абсолютной калибровки;
- Разделение компонентов на группы и расчёт групповых концентраций;
- Расчёт концентрации по формуле, определяемой пользователем;
- Расчёт концентраций осуществляется как в ручном, так и в автоматическом режиме.

#### **8. Построение последовательностей сбора данных и сценариев обработки хроматограмм в автоматическом режиме**

- Создание макросов (сценариев) обработки хроматограмм, включающих элементы сглаживания и разметки хроматограмм, идентификации пиков и построения отчётов;
- Автоматическое и ручное исполнение макросов;
- Механизм управления ходом и событиями анализа, настраиваемый пользователем;
- Построение последовательностей сбора данных с использованием скриптов (visual basic script, java script и другие).

#### **9. Формирование протоколов измерений и отчётов**

- Постоянно открытая и изменяющаяся в реальном режиме времени таблица с информацией о пиках, включающая названия компонентов, их времена выхода, площади, высоты и концентрации, а также другие измеренные и библиотечные параметры;
- “Быстрый” отчёт (quick report) с минимальными возможностями настройки для вывода таблицы пиков и графика хроматограммы на принтер;
- Копирование таблицы пиков и её частей в электронные таблицы, базы данных и текстовые редакторы;
- Копирование картинок хроматограмм и их фрагментов в виде метафайлов (\*.wmf);
- Протоколы и отчёты в среде Microsoft Word и Microsoft Excel с широкими возможностями настройки формы, содержания и дополнительных расчётов;
- Протоколы и отчёты в формате web-страницы.

#### **10. Архивы, повторная обработка и обмен хроматографической информацией**

- Автоматическое сохранение с элементами восстановления данных анализа;
- Сохранение всех параметров регистрации и обработки хроматограмм в одном файле с измеренными данными;
- Сохранение измеренных данных в текстовом формате;

- Сохранение информации о пиках в текстовом формате;
  - Чтение файлов с целью повторной обработки и в качестве шаблонов-методов для новых анализов;
  - Импорт/экспорт хроматограмм из других программ.
- 11. Доступ к локальным и удалённым специализированным базам данных**
- Отдельные модули для доступа и управления специализированными базами данных с использованием средств ADO (ActiveX Data Objects) и ODBC (Open Database Connectivity);
  - Интеграция с информационной системой предприятия.
- 12. Дополнительные функции системы UniChrom**
- Детальное масштабирование и рассмотрение хроматограмм с помощью двух маркеров и “резиновой” рамки;
  - Наложение и совмещение хроматограмм;
  - Прокрутка фрагментов хроматограмм по времени и амплитуде;
  - Копирование и вставка хроматограмм, включая макросы для их обработки;
  - Параллельная работа с другими приложениями как при обработке, так и во время регистрации хроматограмм;
  - Автоматический запуск дополнительных программ и, в том числе, консольного окна, отображающего текущее состояние системы UniChrom (при необходимости);
  - Обмен данными с другими приложениями по каналу DDE (Dynamic Data Exchange);
  - Поддержка интерфейса OLE Automation (Object Linking and Embedding);
  - Справочная система.
- 13. Защита данных. Обеспечение надёжности получаемой информации**
- Защита информации от случайного вмешательства на уровне каждой отдельной хроматограммы осуществляется с помощью беспарольных “замков”;
  - Защита от несанкционированного доступа с помощью паролей и дифференциация уровней доступа обеспечиваются на уровне операционной системы;
- 14. Использование системы UniChrom в метрологическом обслуживании аналитического оборудования**
- Система UniChrom занесена в Реестр средств измерений Республики Беларусь, Российской Федерации и Украины;
  - Допускается использовать аппаратно-программный комплекс (систему) UniChrom при аттестации и поверке аналитического оборудования.
- 15. Соответствие международным стандартам**
- GLP (Good Laboratory Practice);
  - GALP (Good Automated Laboratory Practice);
  - ASTM E1947-98 Standard Specification for Analytical Data Interchange Protocol for Chromatographic Data.

### 1.3 Лицензионное соглашение и ограниченная гарантия

Настоящее лицензионное соглашение (далее “соглашение”) заключается между Вами (физическим или юридическим лицом) и ООО “Новые аналитические системы” (ООО “НАС”) относительно указанного выше программного продукта (далее “программа” или “программное обеспечение”), включающего в себя программное обеспечение, записанное на соответствующих носителях, любые печатные материалы и любую “встроенную” или электронную документацию. Устанавливая, копируя или иным образом используя программу, вы тем самым принимаете условия настоящего соглашения. Если вы не принимаете условий данного соглашения, то вы не имеете права использовать данную программу, и ее следует незамедлительно вернуть обратно продавцу и получить обратно уплаченные деньги.

#### Лицензия на программу

Программа защищена законами и международными соглашениями об авторских правах, а также другими законами и договорами, регулирующими отношения авторского права. Программа лицензируется, а не продается.

#### 1. Объем лицензии

Настоящее соглашение дает Вам нижеследующие права:

##### 1.1. Использование программы

Разрешается установка на компьютере и использование одной копии программы или любой предыдущей версии. Основному пользователю компьютера, на котором установлена эта копия, разрешается также создание еще одной копии исключительно для своей работы на переносном компьютере.

##### 1.2. Хранение и использование в сети

Разрешается хранение, установка и запуск копии программы с общедоступного устройства хранения данных (например, сервера сети). При этом для каждого компьютера, на котором установлена или запущена с сервера сети данная программа, необходимо приобрести отдельную лицензию и электронный ключ. Лицензия на программу не допускает совместного или одновременного использования программы на разных компьютерах.

#### 2. Описание прочих прав и ограничений

##### 2.1. Использование программы для учебных заведений

Если программа обозначена как “издание для учебных заведений”, то разрешается ее использование только в учебных целях. При этом любое другое использование программы запрещается. Чтобы определить, можете ли вы использовать программу в учебных целях, обращайтесь по адресу: пр. Независимости, д.70, к.458, 220079, г. Минск, Республика Беларусь, ООО “Новые аналитические системы”, тел./факс: +375-17-284-00-30, [www.nas.minsk.by](http://www.nas.minsk.by), [www.unichrom.com](http://www.unichrom.com), e-mail: [unichrom@unichrom.com](mailto:unichrom@unichrom.com).

##### 2.2. Издание “не для продажи”

Если программа обозначена как издание “не для продажи”, то независимо от остальных условий и ограничений данного соглашения вы не имеете права продавать её или каким-либо другим способом получать выгоду от передачи её третьим лицам.

##### 2.3. Ограничения на вскрытие технологии, декомпиляцию и дизассемблирование

Не разрешается осуществлять вскрытие технологии, декомпиляцию и дизассемблирование программы, за исключением и только в той степени, в которой такие действия явно разрешены действующим законодательством, несмотря на наличие в соглашении данного ограничения.

##### 2.4. Модификация файла исполняемого модуля

Не разрешается производить модификацию файла исполняемого модуля программы.

##### 2.5. Изготовление копий электронных ключей

Не допускается изготовление и использование аналогов электронных ключей ООО “НАС” и замена их на иные устройства, позволяющие эксплуатировать программу в полном объеме.

##### 2.6. Разделение программы

Программа лицензируется как единое целое. Её нельзя разделять на составляющие части для использования на нескольких компьютерах.

##### 2.7. Прокат

Не разрешается предоставлять программу в прокат или во временное пользование;

## **2.8. Услуги по технической поддержке**

ООО «НАС» оказывает услуги по технической поддержке программных продуктов (далее «услуги по технической поддержке»). Правила обращения и работы службы технической поддержки описаны в печатной и электронной документации ООО «НАС», а также в других материалах ООО «НАС». Любые дополнительные программы и исходные тексты, переданные вам в результате оказания услуг по технической поддержке, должны рассматриваться как составная часть программы и подпадают, таким образом, под действие ограничений и условий данного соглашения. Технические данные, которые сообщаются ООО «НАС» в ходе обращения, могут быть использованы ООО «НАС» для внутренних целей, включая техническую поддержку программных продуктов и разработку программного обеспечения. ООО «НАС» не будет использовать данные сведения в форме, раскрывающей Ваши личные сведения.

## **2.9. Передача программы**

Разрешается навсегда уступить все свои права по настоящему соглашению только вместе с продажей или передачей компьютера при условии, что вы не сохраняете никаких копий, передаете всю программу (включая все составные части, носители и печатные материалы, любые обновления, настоящее соглашение и сертификаты подлинности, если таковые имеются), а получатель соглашается на условия данного соглашения. Если программа является обновлением («upgrade»), то любая передача должна включать в себя все предыдущие версии программы.

## **2.10. Прекращение действия соглашения**

Без ущерба для любых других своих прав ООО «НАС» может прекратить действие настоящего соглашения при несоблюдении условий и ограничений данного соглашения, что обяжет вас уничтожить все имеющиеся копии и составляющие части программы.

## **3. Обновление программного обеспечения**

Если программа является обновлением другого программного обеспечения, для получения обновления необходимо иметь лицензию на программу, для которой ООО «НАС» предоставляет обновление программного обеспечения. Программа, являющаяся обновлением другой программы, заменяет или дополняет обновляемую программу. Полученную в результате обновления программу разрешается использовать только в соответствии с настоящим соглашением. Если программа является обновлением составной части пакета программ, на который Вы получили лицензию как на единый продукт, то разрешается использовать и передавать её только как неотъемлемую составную часть этого единого пакета и не разрешается отделять её для использования на нескольких компьютерах.

## **4. Авторское право**

Все права собственности и авторские права на программу (в том числе любые включенные в нее управляющие программы (applets), графические изображения, фотографии, анимации, видео- и звукозаписи, музыку и текст), сопровождающие её печатные материалы и любые копии программы принадлежат ООО «НАС» и его поставщикам. Все права ООО «НАС» на программу защищены законами и международными соглашениями об авторских правах, а также другими законами и договорами, регулирующими отношения авторского права. Следовательно, с программой необходимо обращаться, как с любым другим объектом авторского права, с тем лишь исключением, что программу разрешается установить на один компьютер и сохранить оригинал при условии, что он будет использоваться только как архив или резервная копия. Копирование сопровождающих программу печатных материалов запрещено.

## **5. Различные носители программы**

Программа может поставляться на нескольких видах носителей. Независимо от их вида и ёмкости разрешается использовать только носители одного вида, который соответствует именно вашему компьютеру или серверу сети. Не разрешается производить установку с прочих носителей на другие компьютеры, предоставлять носители в прокат или во временное пользование или уступать их для использования в иных целях, за исключением случая полной передачи программного обеспечения, описанного выше.

## **6. Ограниченная гарантия**

Программное обеспечение поставляется «как есть», с отрицанием гарантий любого рода, кроме упомянутых в данном документе, насколько это допускается законодательством страны применения.

### **6.1. Гарантия отсутствия дефектов носителя информации**

При наличии дефектов фирма-поставщик обязана произвести бесплатную (за исключением ваших почтовых расходов) замену носителя.

### **6.2. Ошибки программы**

Ошибки, неадекватное поведение или непригодность программного обеспечения для решения каких-либо стоящих перед вами задач не могут являться основанием для предъявления финансовых претензий к ООО «НАС», за исключением 100% компенсации в случае возврата полного комплекта

приобретённого аппаратно-программного комплекса в месячный срок (в случае его приобретения напрямую через ООО «НАС»). Компенсация расходов по установке, наладке, командировочных и иных расходов сверх прейскурантной стоимости программы, а также индексация суммы по курсу доллара при возвращении денег не производится.

### **6.3. Отсутствие ответственности за убытки пользователя**

ООО «НАС» не несёт финансовой ответственности за убытки пользователя, которые он понёс вследствие применения (невозможности применения, неправильного применения) программы или вследствие её ошибок, включая упущенную выгоду, потерю информации и любые другие потери.

### **6.4. Санкции**

Максимальный размер финансовых претензий к ООО «НАС» не может превышать стоимости программы.

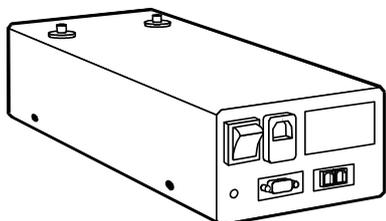
## 2 Установка и настройка

## 2.1 Начальные операции

Начальные операции по установке и настройке системы UniChrom включают:

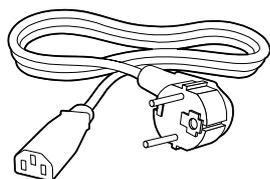
- распаковку и проверку соответствия комплектности аппаратных и программных средств системы UniChrom;
- подготовку компьютерного оборудования для установки системы UniChrom.

### 2.1.1 Распаковка и проверка комплектности



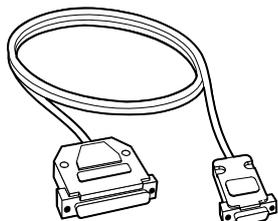
#### 1) Блок аналого-цифрового преобразователя ADC L-net

Количество блоков и их конфигурация (число и тип каналов) должны соответствовать спецификации.



#### 2) Сетевой шнур

Количество сетевых шнуров должно соответствовать числу блоков ADC-L-net. Длина шнуров не менее одного метра.



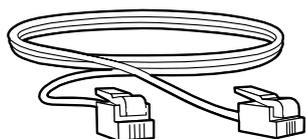
#### 3) Кабель линии RS-232

Количество, вариант исполнения и длина кабелей линии RS-232 должны соответствовать спецификации. В случае отсутствия соответствующих пунктов в спецификации при наличии в комплекте поставки блоков ADC L-net, поставляется один кабель стандартного исполнения длиной 3 метра.



#### 4) “Заглушка” линии RS-232

Предназначена для модуля, включаемого в сеть L-net и не связанного напрямую с компьютером. Количество «заглушек» должно соответствовать числу кабелей линии RS-485.



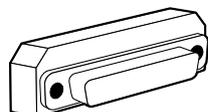
#### 5) Кабель линии RS-485

Кабель телефонного типа для подключения блока ADC L-net в лабораторную сеть L-net. Количество и длина кабелей линии RS-485 должны соответствовать спецификации. В случае отсутствия соответствующих пунктов в спецификации, поставляются кабели длиной 5 метров в количестве  $n$ , определяемом формулой:  $n = N - N_f$ , где  $N$  – общее число модулей, входящих в поставку,  $N_f$  – число модулей, подключаемых к компьютеру по линии RS-232.



#### 6) Установочные 3½" дискеты

Наличие набора дискет для установки дополнительного программного обеспечения системы UniChrom определяется спецификацией.



#### 7) Электронный ключ

Устройство защиты программного обеспечения системы UniChrom в одном экземпляре.



## 8) Комплект документации

Включает Руководство пользователя (всегда), а также Паспорт и Методику поверки системы UniChrom при наличии в комплекте поставки блоков ADC L-net.

### 2.1.2 Подготовка компьютерного оборудования

Программные модули системы UniChrom являются 32-разрядными приложениями для Windows, разработанными в среде Win32 API (application programming interface), и предназначены для работы на компьютерах с операционными системами:

- Windows 95™, Windows 98™ или
- Windows NT™, Windows 2000™, Windows XP™.

Компьютерное оборудование не входит в стандартный комплект поставки системы UniChrom и устанавливается пользователем самостоятельно. При этом пользователь обязан обеспечить:

- соответствие конфигурации компьютерного оборудования требованиям одной из перечисленных выше операционных систем;
- установку и настройку данной операционной системы на оптимальный режим работы;
- наличие Windows-совместимого принтера;
- наличие привода гибких магнитных дисков 3½" и/или CD для установки программного обеспечения системы UniChrom;
- наличие свободных последовательных портов типа RS-232 для подключения аналитического оборудования;
- установку программ Microsoft Excel, Microsoft Word, Microsoft Access и драйверов для работы с ODBC (Objects Database Connectivity) и ADO (ActiveX Data Objects).

## 2.2 Установка и подключение оборудования

### Внимание!

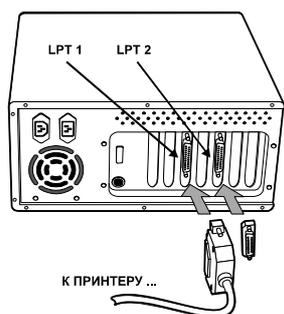
При установке, подключении и использовании оборудования выполняйте общие меры предосторожности.

### 2.2.1 Общие меры предосторожности

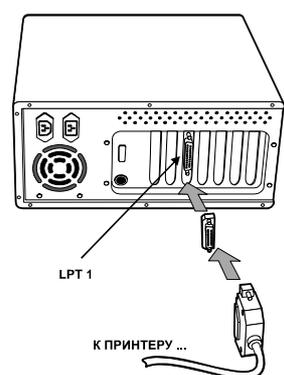
Во избежание пожара или поражения электрическим током не подвергайте установки, приборы и устройства (далее "приборы" или "оборудование") воздействию дождя или сырости. Не вскрывайте корпуса приборов. Техническое обслуживание оборудования должно производиться только специалистами.

- Убедитесь, что рабочие напряжения приборов соответствуют параметрам электросети.
- В случае попадания внутрь корпуса какого-либо прибора посторонних предметов отключите этот прибор от сети и не пользуйтесь им до тех пор, пока он не будет проверен специалистом.
- Приборы остаются не отключенными от сети до тех пор, пока их шнур питания остаётся подсоединённым к розетке, даже если сами приборы при этом выключены.
- Если предполагается не использовать приборы в течение долгого времени, отсоедините их шнуры питания от сети. При этом используйте вилку, а не провод.
- Все действия по установке и подключению выполняйте при отключенном питании всего используемого оборудования.
- Убедитесь в наличии и правильности заземления всего комплекса оборудования.
- При работе с приборами, руководствуйтесь их инструкциями по эксплуатации.

## 2.2.2 Установка электронного ключа и подключение принтера



**А.** Установите электронный ключ защиты программного обеспечения системы UniChrom в свободный принтерный порт компьютера – параллельный порт стандарта IEEE-1284 с разъёмом типа В (D25). Подключите принтер ко второму свободному порту в соответствии с инструкциями к принтеру.



**В.** Если компьютер снабжён только одним параллельным портом, подключите принтер к компьютеру через электронный ключ, используя стандартный кабель, который входит в комплект поставки принтера.

Неправильное заземление компьютерного оборудования, а также установка и отсоединение электронного ключа при включенном компьютере и (или) принтере способствует быстрому выходу из строя электронного ключа.

## 2.2.3 Установка и подключение измерительного оборудования

Установка и подключение измерительного оборудования в каждом конкретном случае носит индивидуальный характер и рассматривается отдельно в приложениях и в сопроводительной документации к соответствующим устройствам.

## 2.3 Установка и настройка программы

Программное обеспечение системы UniChrom поставляется в виде инсталляционных файлов на следующих стандартных носителях:

- гибкие магнитные диски 3½" (далее дискеты) ёмкостью 1,44 мегабайта каждый;
- компакт-диски типа CD-ROM (compact-disk – read only memory).

Программное обеспечение распространяется через Internet и доступно на Web-странице [www.unichrom.com](http://www.unichrom.com).

Программное обеспечение системы UniChrom в распакованном виде требует не более 4 мегабайт свободного пространства на жёстком диске.

Установка программного обеспечения производится как напрямую со стандартных носителей, указанных выше, так и с файлового сервера или из общей папки, куда предварительно скопированы инсталляционные файлы программы.

Программное обеспечение может удаляться и устанавливаться повторно.

Выполните установку и настройку программного обеспечения системы UniChrom в соответствии с нижеследующими инструкциями.

### 2.3.1 Установка программного обеспечения

- 1) Ознакомьтесь с содержимым файла readme.txt. Файл readme.txt обычно содержит сведения по установке и настройке программного обеспечения системы UniChrom, включая информацию о возможных последних модификациях и изменениях, внесённых в программу установки.
- 2) Запустите программу установки setup.exe и следуйте указаниям, которые будут появляться на экране.

Программа установки, в процессе своего исполнения, попросит:

- указать путь, куда будут копироваться файлы программного обеспечения системы UniChrom, предлагая по умолчанию папку "C:\UniChrom";
- вставить следующий дистрибутивный диск или указать путь к нему, если файлы инсталляции разделены на диски (Disk #1, Disk #2, и т. д.).

По завершении своего исполнения, программа установки предложит запустить редактор конфигурации системы UniChrom и выполнить настройку программного обеспечения. Вы можете отказаться и выполнить настройку позже, но обязаны выполнить её до первого измерения.

В процессе инсталляции компьютер автоматически распознаёт, распаковывает и копирует файлы программного обеспечения системы UniChrom в указанную папку, обновляет системное меню и добавляет ярлык (shortcut) **UniChrom for Windows' 95 & NT** на рабочем столе Windows следующего вида:



Используйте данный ярлык в дальнейшем для быстрого запуска программы системы UniChrom.

### 2.3.2 Настройка на работу с аналитическим оборудованием

- 1) Закройте программу **UWin32.exe**<sup>6</sup>.
- 2) Запустите программу **ce.exe** – редактор конфигурации системы UniChrom. Редактор конфигурации при установке программного обеспечения системы UniChrom ставится в ту же папку, что и главный исполняемый модуль системы UniChrom.
- 3) Перетащите значок, соответствующий вашему устройству, из области доступных устройств в область установленных (из правой панели в левую). Если данное устройство было установлено ранее и его значок уже лежит на левой панели редактора, то можно пропустить этот пункт.

Обозначения устройств в системе UniChrom следующие:

Значок устройства	Пояснение	Значок устройства	Пояснение
	Хроматограф "Кристалл 2000М"		Аналого-цифровой преобразователь фирмы "Аквилон"
	Хроматограф "Кристалл 5000.1"		Комплекс на базе хроматографа "Стайер" и аналого-цифрового преобразователя ADC L-net
	Хроматограф "Кристаллюкс-4000"		Аналого-цифровой преобразователь ADC L-net
	Хроматографы HP 4890/5890		Преобразователь типа "ГУН" с компьютерной платой счётчика импульсов
	Хроматограф HP 6890		Звуковая карта (SoundBlaster)

<sup>6</sup> UWin32.exe – главный исполняемый модуль системы UniChrom.

Значок устройства	Пояснение	Значок устройства	Пояснение
 Цвет-800 (chrom800.inf)	Хроматограф "Цвет-800"	 MLC-16 (mlcwin32.inf)	Аналого-цифровой преобразователь "МультиХром-16"
 Lnet-800 (lnet800.inf)	Комплекс на базе хроматографа "Цвет-800" и аналого-цифрового преобразователя ADC L-net	 MLC-24 (mlc98_32.inf)	Аналого-цифровой преобразователь "МультиХром-24"
 БПГ-167 LNet (chrom500.inf)	Комплекс на базе хроматографа "Цвет-500", блока управления температурами ТСВ и аналого-цифрового преобразователя ADC L-net	 E-24 (e24.inf)	Аналого-цифровой преобразователь фирмы "L-Card"
 GC-17A (gc17a.inf)	Хроматограф GC-17A	 Capel-103 (kapel.inf)	Система капиллярного электрофореза Капель-103
 Fluorat-02-2M (fluo02.inf)	Спектрофотометрический детектор для жидкостной хроматографии Флюорат-02-2М	 Milichrom-5 (milichrom.inf)	Жидкостной хроматограф Милихром-5
		 Milichrom A-02 (milichrom.inf)	Жидкостной хроматограф Милихром A-02

- 4) Дважды щелкните значок установленного устройства на левой панели и отредактируйте параметры данного устройства. Все внесённые изменения будут автоматически сохранены в редакторе при закрытии окна **Параметры устройства**.
- 5) Повторите п.п. 3 и 4 для всех устройств, с которыми будете работать.
- 6) Закройте редактор конфигурации. При закрытии редактора конфигурации автоматически будут установлены драйверы выбранного оборудования и произойдёт регистрация (или перерегистрация в случае повторной настройки) устройств в следующей ветви реестра Windows:

**HKEY\_LOCAL\_MACHINE\SOFTWARE\New Analytical Systems\UniChrom**

### 2.3.3 Обновление программного обеспечения UniChrom через Интернет

Используйте следующий Интернет-адрес для доступа к самой последней версии программного обеспечения системы UniChrom: <http://www.unichrom.com/>

Инсталляционные файлы с указанной Web-страницы поставляются в виде архива ucinst\*.zip, где символ \* обозначает первую букву названия языка дистрибутива (B – Belarusian, R – Russian, D – Deutsch, E – English, F – French, U - Ukraine).

Распакуйте архив и произведите установку и настройку программного обеспечения в соответствии с выше приведенными инструкциями.

### 2.3.4 Удаление программного обеспечения UniChrom

- 1) Нажмите кнопку **Пуск** в Windows , установите указатель на пункт **Настройка** и выберите команду **Панель управления**.
- 2) Дважды щелкните значок **Установка и удаление программ** .
- 3) Выберите пункт **UniChrom for Windows' 95 & NT** на вкладке **Установка/удаление**, а затем нажмите кнопку **Добавить/Удалить**.

### 2.3.5 Разрешение вопросов по установке и настройке программы

Если возникают вопросы или проблемы, не рассмотренные ниже, обратитесь к поставщику системы UniChrom или к ООО “Новые аналитические системы” для получения консультаций.

Симптомы	Действия по устранению
Не читается дистрибутивный диск.	<ul style="list-style-type: none"><li>• Проверьте работоспособность привода. Если причина в приводе, используйте другой дисковод;</li><li>• Если причина не в дисковом, обратитесь к поставщику для замены инсталляционных дискет.</li></ul>
Программа установки не запускается.	<ul style="list-style-type: none"><li>• Неправильно установлена операционная система, отсутствуют системные файлы поддержки инсталляции. Переустановите Windows.</li></ul>
Программа установки сообщает об отсутствии некоторых файлов.	<ul style="list-style-type: none"><li>• Инсталляционные файлы разбиты на части. Вставьте следующую инсталляционную дискету в дисковод или укажите путь к следующей части инсталляционных файлов.</li></ul>
Устройства не устанавливаются редактором конфигурации.	<ul style="list-style-type: none"><li>• Повреждены инсталляционные профили устройств (файлы с расширением *.inf). Обратитесь к поставщику для замены инсталляционных дискет.</li></ul>
В редакторе конфигурации отсутствуют некоторые значки устройств.	<ul style="list-style-type: none"><li>• Драйверы устройств поставляются в соответствии со спецификацией договора. Проверьте соответствие имеющихся драйверов устройств спецификации договора.</li></ul>

## 2.4 Редактор конфигурации системы UniChrom

Редактор конфигурации системы UniChrom (Configuration Editor) входит в состав пакета стандартного программного обеспечения системы UniChrom и поставляется в виде отдельного исполняемого модуля – **ce.exe**.

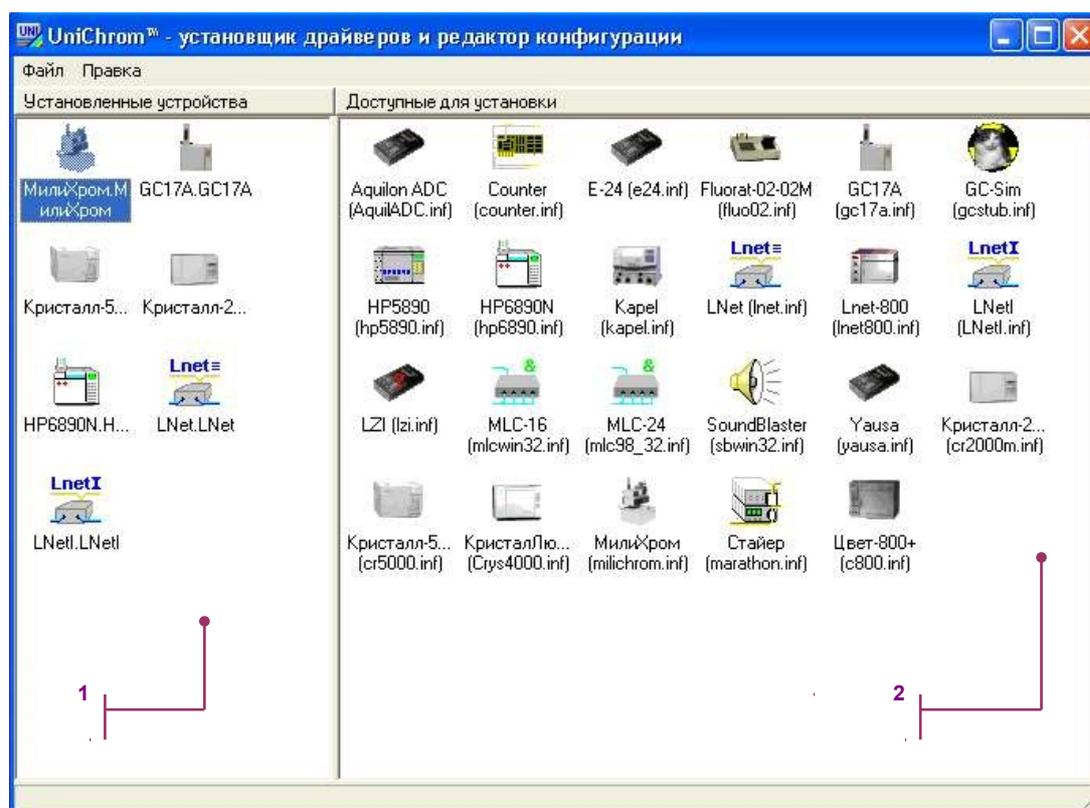
Программа предназначена для:

- установки и удаления драйверов устройств;
- настройки параметров устройств;
- регистрации устройств в системном реестре.

### 2.4.1 Внешний вид

Рис. 3. Рабочая область программы редактора конфигурации

*1 – значки, отображающие установленные устройства; 2 – список устройств, доступных для установки.*



Устройство считается установленным и готовым к работе в системе UniChrom, если установлены драйверы данного устройства и оно зарегистрировано в системном реестре.

### 2.4.2 Установка инструмента

Для установки хроматографического инструмента перетащите его значок из правой панели в левую. В левой панели должен появиться такой же значок с подписью, состоящей из названия и типа инструмента, разделённых точкой.

### 2.4.3 Удаление инструмента

Для удаления хроматографического инструмента перетащите его значок из левой панели в правую. Значок в левой панели должен исчезнуть.

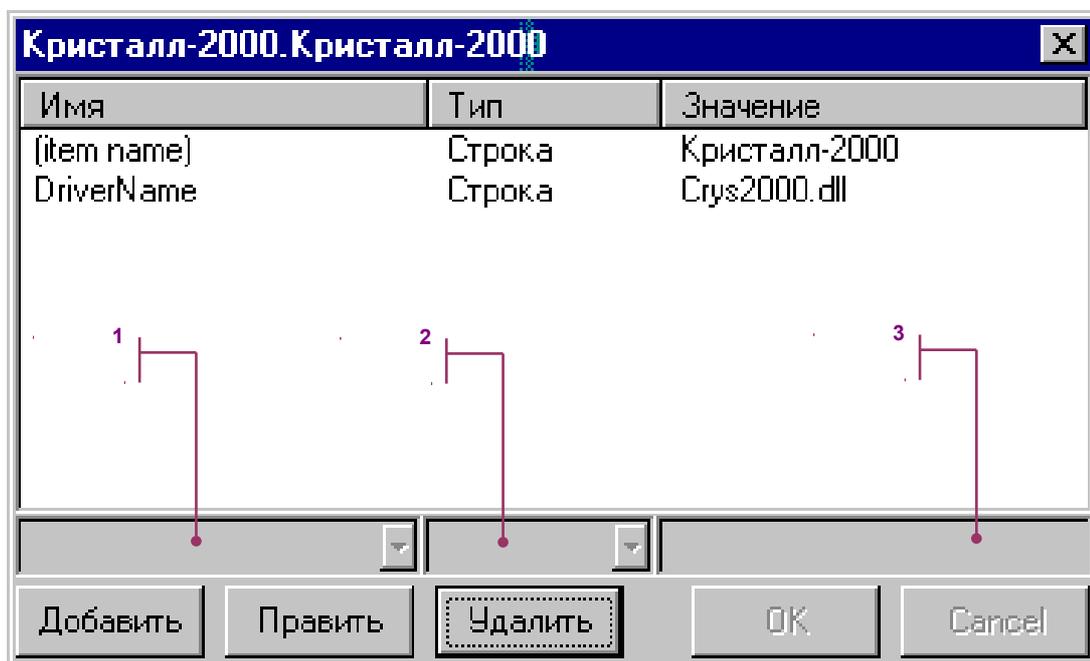
### 2.4.4 Настройка параметров

Для настройки параметров установленного инструмента дважды щёлкните на его значок в левой области редактора. Появится окно **Параметры устройства** для данного инструмента.

Используйте это диалоговое окно для добавления, удаления и правки параметров выбранного устройства (2.4.4).

Рис. 4. Внешний вид диалогового окна настройки параметров устройства

1 – ввод имени параметра; 2 – выбор типа; 3 – редактирование значения.



Примеры настроек параметров устанавливаемого оборудования приведены ниже.

#### 2.4.4.1 Добавление параметра

- 1) Нажмите кнопку **Добавить**;
- 2) Введите имя параметра в поле **ввод имени параметра** или выберите его из списка, нажав кнопку  в этом поле;
- 3) Задайте тип параметра в поле **выбор типа**;
- 4) Введите значение параметра в поле **редактирование значения**;
- 5) Нажмите кнопку **OK** для подтверждения добавления или кнопку **Cancel** для отмены добавления.

#### 2.4.4.2 Правка параметра

- 1) Выберите параметр в графе **Имя** списка параметров;
- 2) Нажмите кнопку **Править**;
- 3) Измените значение параметра в поле **редактирование значения**;
- 4) Нажмите кнопку **OK** для подтверждения изменения или кнопку **Cancel** для отмены изменения.

#### 2.4.4.3 Удаление параметра

- 1) Выберите параметр в графе **Имя** списка параметров;
- 2) Нажмите кнопку **Удалить**.

#### 2.4.4.4 Описание параметров (item name) DriverName, DriverFreg, ComName

Все устройства, поддерживаемые системой UniChrom, имеют два основных параметра: название устройства (**item name**) и имя драйвера **DriverName**. Эти параметры в редакторе защищены от удаления и их можно только модифицировать.

Название устройства (**item name**) представляет собой строковый параметр, значение которого определяется пользователем с целью присвоения устройству уникального названия. По умолчанию название устройства соответствует типу устройства. Если название задать пустой строкой, то установленное устройство будет выключено.

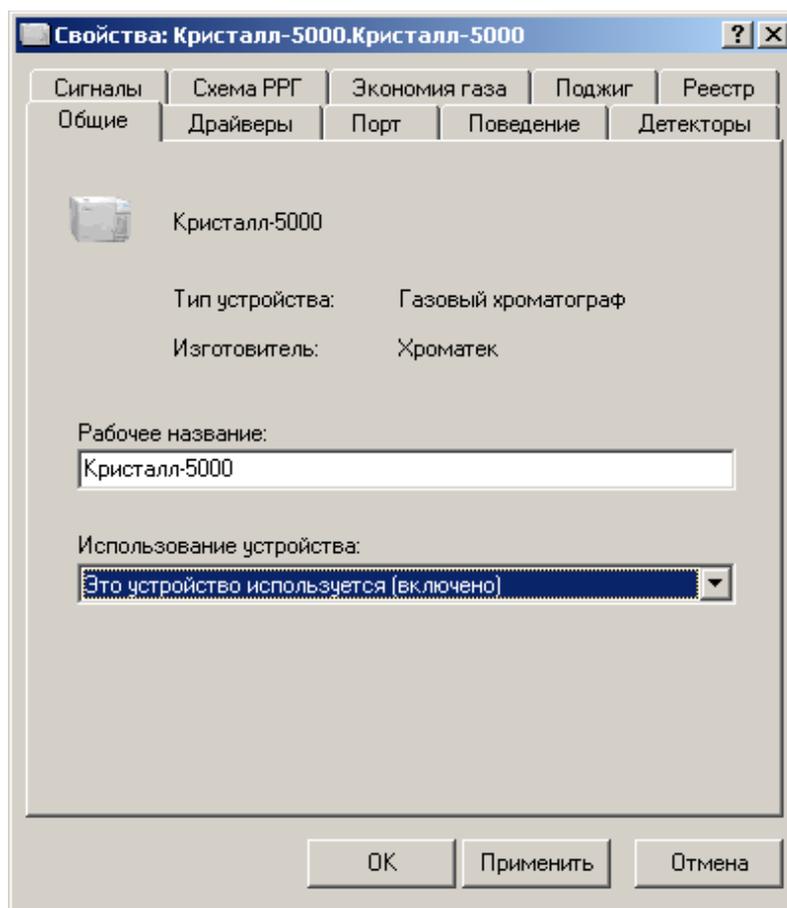
Имя драйвера **DriverName** определяет имя файла с расширением \*.dll (Dynamically Linking Library), который обеспечивает поддержку данного устройства в системе UniChrom. Файл

устанавливается в папку, определённую в установочном профиле устройства (\*.inf). Если путь к файлу изменён, то в **DriverName** необходимо указать полный путь к данному файлу.

Частота сбора данных **DriverFreq**. Данный параметр должен быть определён для каждого устройства. Это строковый параметр, значение которого устанавливается в соответствии с сопроводительной документацией к конкретному типу устройства. Если частота задаётся числом не целого типа, то в качестве десятичного разделителя необходимо использовать символ точки.

В системе UniChrom коммуникационные порты, к которым подключены устройства, распознаются автоматически. Однако если алгоритм автоматического детектирования не устраивает или используются несколько устройств одного типа, имя порта можно задать «жёстко», добавив параметр **ComName**. Это строковый параметр, имеющий стандартные значения типа "COMn", где *n* – номер порта.

## 2.4.5 Общие свойства



### 2.4.5.1 Рабочее название

Устройство может быть включено и использовано в работе, если для него установлено **рабочее название**.

Рабочее название определяется пользователем. Рабочее название может отражать номер и (или) название ГОСТ или МВИ, по которым выполняются измерения на данном приборе. Рабочее название может характеризовать объект исследования. Например, если прибор используется только для анализа содержания бензола, то можно дать рабочее название "Бензол".

По умолчанию рабочее название соответствует названию прибора.

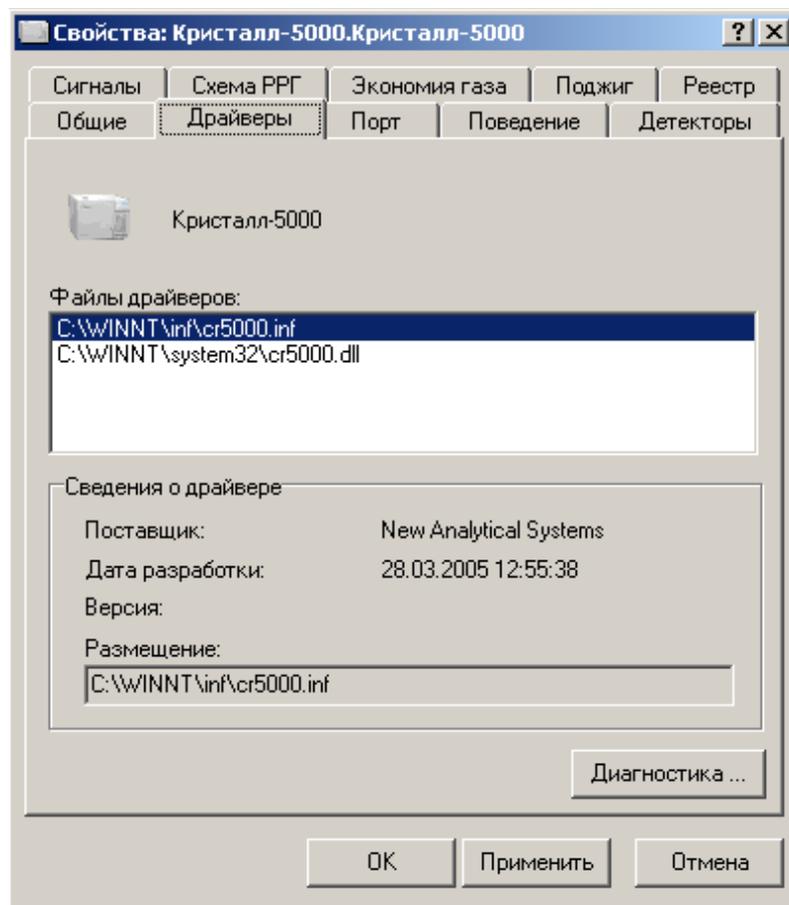
Удаление рабочего названия приведёт к выключению устройства.

Параметр реестра: <item name>.

### 2.4.5.2 Использование устройства

Устройство можно включить или выключить. Выключенное устройство отображается в Редакторе прозрачностью пиктограммы прибора. Выключение устройства означает удаление данного устройства из списка устройств доступных для подключения в программе UniChrom.  
Параметр реестра: **“Disable”**.

### 2.4.6 Драйверы устройства



#### 2.4.6.1 Файлы драйверов

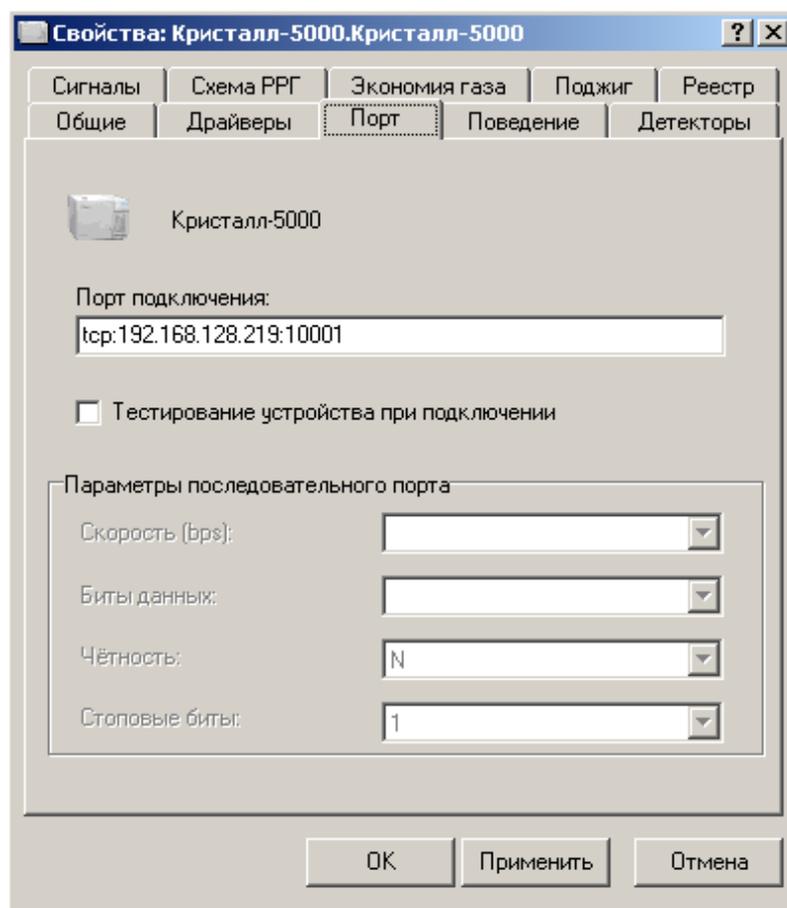
Список файлов, необходимых для нормальной работы выбранного устройства. Список файлов берётся из \*.inf файла. Если \*.inf файл отсутствует или его путь указан в реестре неверно, то список файлов не доступен.

Параметр реестра: **“InfName”**.

#### 2.4.6.2 Диагностика

Файлы, обеспечивающие работу устройства, лежат в архиве Редактора. При установке устройства файлы копируются из архива в место, определённое \*.inf файлом. Ссылки на текущее размещение файлов прописываются в реестре. Для проверки корректности ссылок в реестре, соответствия установленных и архивных файлов нажмите кнопку **“Диагностика ...”**.

## 2.4.7 Порт



### 2.4.7.1 Порт для подключения

Устройство подключается к компьютеру в соответствии со своей спецификацией (см. техническую документацию к прибору).

Укажите порт компьютера, к которому подключено устройство.

Если порт не указан, будет выполняться автоматический поиск порта, к которому подключено устройство.

Подключение может быть выполнено через любой доступный свободный порт компьютера: LPT, COM, USB, Grib, Hrib или КОП, а также по локальной сети и через глобальную сеть интернет.

При подключении устройства к параллельному или последовательному порту необходимо ввести сигнатуру и номер порта, например **LPTx** или **COMx**, где x - номер порта.

При подключении к последовательному COM порту достаточно ввести номер порта.

При подключении через не стандартный порт необходимо ввести сигнатуру Grib, Hrib или КОП и два числа через запятую, определяющих адрес порта на шине (см. соответствующую техническую документацию).

При подключении по локальной или глобальной (интернет) сети необходимо указать адрес устройства по схеме:

**tcp:[имя или IP адрес устройства]:[номер tcp порта].**

Редактирование порта подключения запрещено, если для работы с устройством не требуется порт или если порт подключения задан жёстко и не может быть изменён.

Параметры реестра: "**ComName**" или "**ComPort**" для LNet.

### 2.4.7.2 Тестирование устройства при подключении

При подключении к устройству проверяется правильность задания порта подключения. Если Вы уверены, что порт указан правильно, то данное тестирование можно отключить.

Отключение тестирования может избавить от ошибок при подключении к устройству.

Изменение параметра запрещено, если требуется обязательное тестирование.

Параметр реестра: **IgnoreDetect**.

### 2.4.7.3 Настройка последовательного COM-порта.

#### Биты данных

Изменение числа битов данных для каждого передаваемого и принимаемого символа. Устройство должно иметь такое же значение этого параметра. Большинство букв передаётся с помощью 8 битов.

Параметр игнорируется, если устройство подключено не через последовательный порт.

Внимание! Параметр устанавливается для всех COM-портов, используемых данным устройством. Например, жидкостной хроматограф "Стайер" может использовать до шести последовательных портов. Один порт для работы с АЦП, ещё один порт для управления датчиком давления и четыре порта для управления четырьмя насосами.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или данная настройка не имеет значения для прибора.

Параметр реестра: **ComWord**.

#### Чётность

Изменение способа обнаружения ошибок передачи. Устройство должно иметь такое же значение этого параметра.

**Нет** – к данным, отправляемым из порта, будет добавляться бит чётности. При этом проверка ошибок будет выключена.

**Нечёт** – бит чётности устанавливается в 1, если необходимо, чтобы сумма битов данных была нечётной. При этом проверка ошибок будет включена.

**Чёт** – бит чётности устанавливается в 1, если необходимо, чтобы сумма битов данных была чётной. При этом проверка ошибок будет включена.

Параметр игнорируется, если устройство подключено не через последовательный порт.

Внимание! Параметр устанавливается для всех COM-портов, используемых данным устройством. Например, жидкостной хроматограф "Стайер" может использовать до шести последовательных портов. Один порт для работы с АЦП, ещё один порт для управления датчиком давления и четыре порта для управления четырьмя насосами.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или данная настройка не имеет значения для прибора.

Параметр реестра: **ComParity**.

#### Стоповые биты

Изменение интервала времени между передаваемыми символами (измеряется в битах)

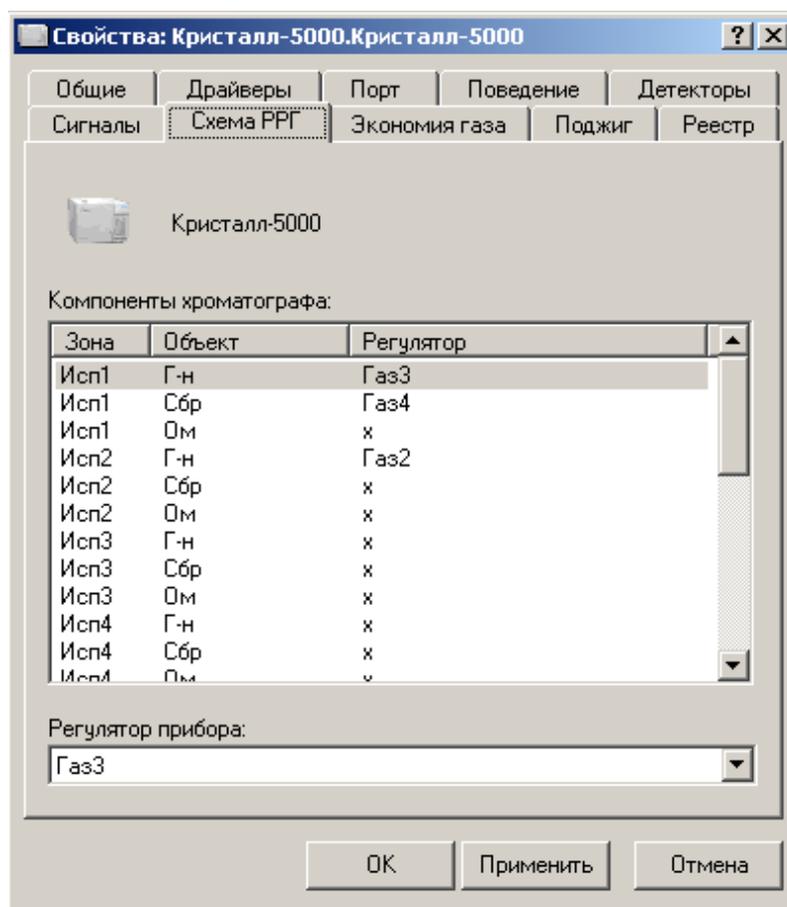
Параметр игнорируется, если устройство подключено не через последовательный порт.

Внимание! Параметр устанавливается для всех COM-портов, используемых данным устройством. Например, жидкостной хроматограф “Стайер” может использовать до шести последовательных портов. Один порт для работы с АЦП, ещё один порт для управления датчиком давления и четыре порта для управления четырьмя насосами.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или данная настройка не имеет значения для прибора.

Параметр реестра: “ComStop”.

## 2.4.8 Схема PPG



### 2.4.8.1 Компоненты хроматографа

Список отображает соответствие регуляторов виртуального хроматографа, который живёт в программе UniChrom, реальным регуляторам прибора.

Поставьте в соответствие каждому компоненту виртуального хроматографа соответствующий регулятор прибора. Для этого выберите компонент виртуального хроматографа и затем из списка регуляторов прибора выберите требуемый регулятор.

Изменение плана регуляторов запрещено, если имеется однозначное соответствие регуляторов реального и виртуального хроматографов.

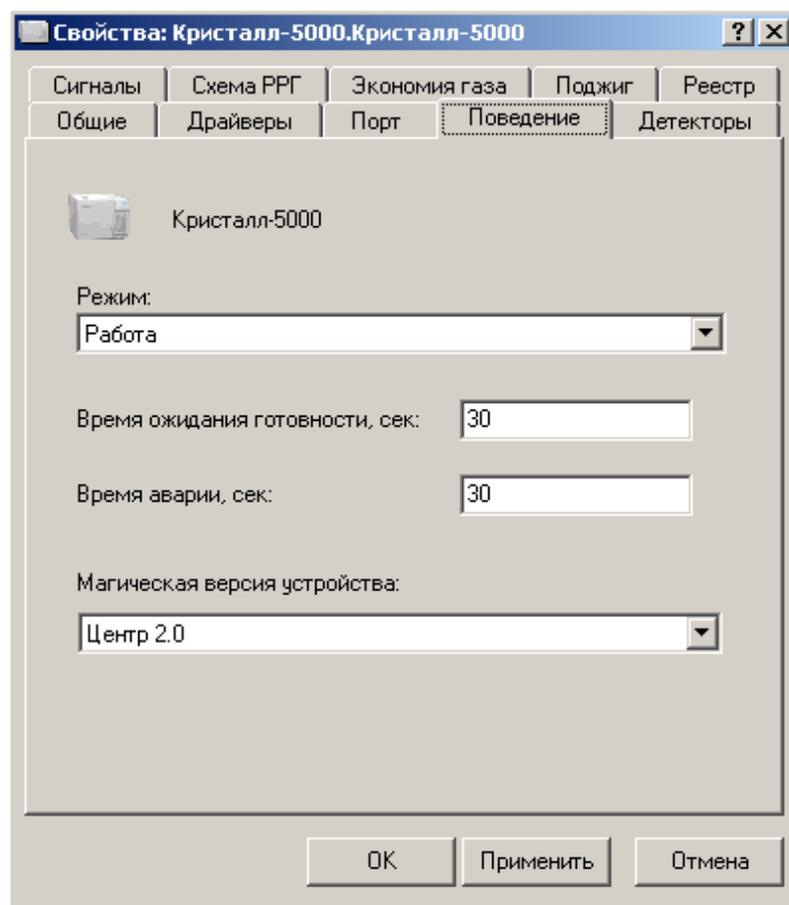
Параметры реестра: “IAFx”, “IBFx”, “ICFx”, “IDFx”, “DAFx”, “DBFx”, “DCFx”, “DDFx”, “A1Fx”, “A2Fx”, “A3Fx”, где x – номер регулятора зоны от 0 до 3 для испарителей и детекторов, 1 для дополнительных зон.

### 2.4.8.2 Список газовых регуляторов прибора.

Значение “По умолчанию” означает, что драйвер автоматически установит соответствие между виртуальными и реальными регуляторами.

Значение **“Выкл”** означает, что виртуальному регулятору не соответствует ни один регулятор прибора. Допускается один регулятор прибора назначать двум и более виртуальным регуляторам. Список регуляторов прибора определён в \*.inf файле.

## 2.4.9 Поведение устройства



### 2.4.9.1 Режим

Режим **“Работа”** является стандартным режимом работы хроматографа.

В режиме **“Тестирование”** отключаются проверки готовности устройства. Прибор всегда готов к старту анализа.

В режиме **“По умолчанию”** используются текущие настройки прибора. Программа UniChrom при подключении к инструменту не заменяет существующие настройки прибора значениями из реестра.

Изменение параметра запрещено, если установка режима работы не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

Параметр реестра: **“IsValidation”**.

### 2.4.9.2 Время ожидания (уравновешивания)

0 – Выкл, >0 – Вкл.

Время достаточное для затухания колебаний параметров (температуры, расходов газов и т.д.) при подготовке прибора к измерению и во время измерения при выполнении сложных программ регулирования.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

Параметр реестра: **“WaitTime”** или **“EquilibTime”**.

### **2.4.9.3 Время аварийного таймера**

0 – Выкл, >0 – Вкл.

Если какой-либо параметр вышел за допуск и не вернулся обратно за указанное время ожидания, включается аварийный таймер. По истечении аварийного времени отключаются все нагреватели, включая термостат колонки.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

Параметр реестра: **“AlarmTime”**.

### **2.4.9.4 Магическая версия устройства**

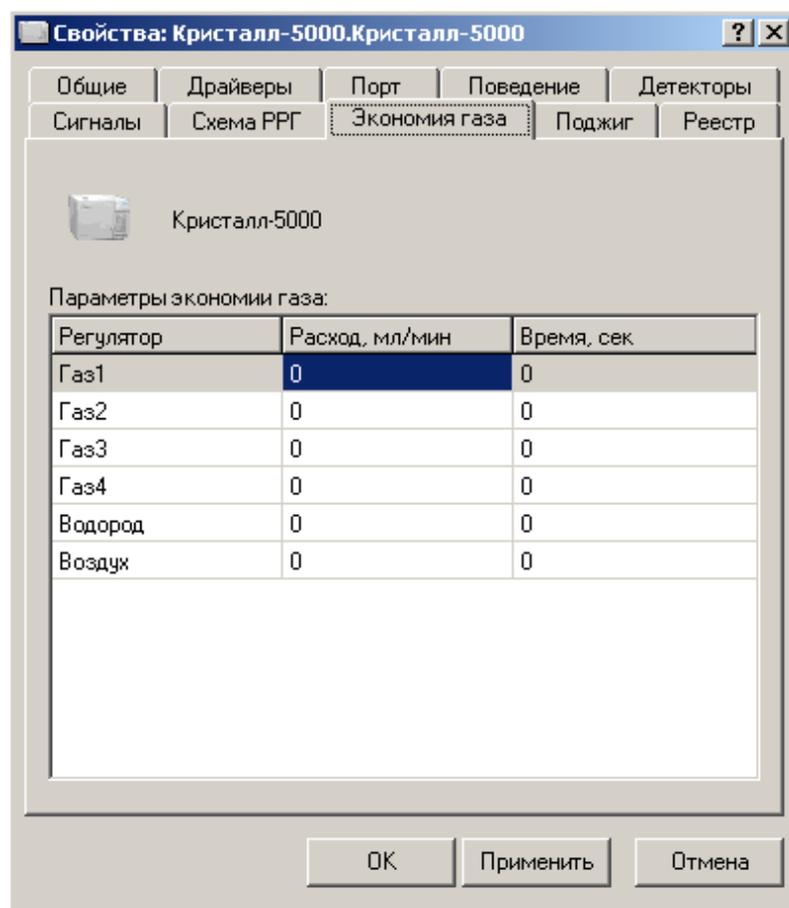
Магическая версия устройства определяет номер версии протокола обмена данными хроматографа с программой UniChrom.

Если возникли проблемы при подключении к прибору или прибор ведёт себя неадекватно, попробуйте изменить версию протокола.

Редактирование параметра запрещено, если имеется только одна версия протокола.

Список версий определён в \*.inf файле. Параметр реестра: **“MagicVersion”** или **“DeviceType”**.

## 2.4.10 Экономия газа



### 2.4.10.1 Параметры экономии газа

Настройка параметров экономии газа для каждого регулятора расхода (РРГ) или регулятора давления, работающего в режиме регулирования расхода.

Экономия газа для каждого РРГ задаётся двумя параметрами:

**Расход, мл/мин** – минимальный расход газа, который будет установлен регулятором при включении режима экономии.

**Время, сек** – время включения режима экономии после выхода прибора на готовность.  
0 – режим экономии выключен, >0 – режим экономии включен.

Для регуляторов, работающих в режиме регулирования давления, скорости газа-носителя или потока через капиллярную колонку, установленные параметры игнорируются.

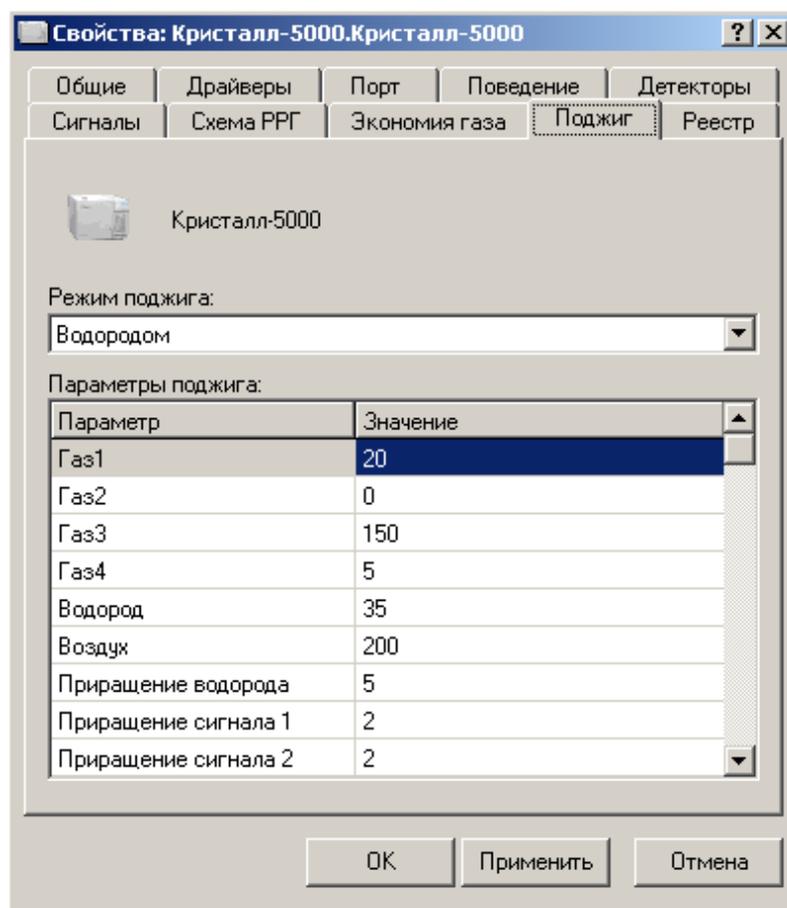
Обычно режим экономии задают для регуляторов, ответственных за сброс пробы при работе с делением потока газа-носителя.

Нежелательно включать режим экономии регулятору, задающему поток газа-носителя через колонку.

Изменение режима экономии запрещено, если параметры режима экономии не поддерживаются драйвером устройства или эти настройки не имеют значения для прибора.

Параметры реестра: **“GasSaverFlowX”** и **“GasSaverTimeX”**, где **X** – номер регулятора, или **“GasSaverFlow”** и **“GasSaverTime”** для хроматографа Кристалл-2000M.

## 2.4.11 Поджиг



### 2.4.11.1 Режим поджига

Пламя в детекторах ПИД, ТИД или ПФД можно зажигать двумя способами:

поджиг **“Водородом”** и  
поджиг **“Воздухом”**.

В первом случае при поджиге увеличивают расход водорода. Во втором случае уменьшают расход воздуха.

Изменение режима поджига недоступно, если прибор автоматически выбирает требуемый режим в соответствии со встроенным алгоритмом работы.

Параметр реестра: **“IgnitingMode”**

### 2.4.11.2 Параметры поджига

Параметры поджига для разных хроматографов различны. Имеются определённые наборы параметров поджига для каждого типа хроматографа.

Параметры поджига делятся на две группы.

К первой группе относятся параметры, непосредственно влияющие на алгоритм поджига:

**Водород**(или **Водород суммарный**, или **Водород Min**) – определяет состояние газового регулятора “Водород” в начальный момент цикла поджига. Задаёт начальный расход водорода, мл/мин, в первой попытке поджига;

**Водород Max**– задаёт конечный расход водорода, мл/мин, в последней попытке поджига;

**Воздух**– определяет состояние газового регулятора “Воздух” в цикле поджига. Задаёт расход воздуха, мл/мин, при поджиге;

**Приращение водорода**– определяет приращение расхода водорода, мл/мин, после неудачной попытки поджига пламени в пределах одного цикла поджига;

**Число попыток поджига**– количество неудачных попыток зажигания с нарастающим уровнем водорода, после которых драйвер отказывается от дальнейших попыток. Определяет число попыток поджига пламени в пределах одного цикла поджига;

**Длительность поджига**– длительность подачи напряжения на спираль зажигания. Задаётся в десятых долях секунды.

**Водород ПИД (ТИД) и Водород ПФД** – специальные параметры распределения водорода, мл/мин, для одновременного поджига пламени в детекторах ПИД (ТИД) и ПФД, установленных в модуле хроматографа Кристалл-2000М.

**Приращение сигнала**– приращение сигнала в канале пламенного детектора (ПИД, ТИД, ПФД), которое отображает наличие пламени. Перед началом процесса зажигания измеряется уровень сигнала во всех каналах с пламенным детектором. После попытки зажигания наличие увеличения сигнала, на величину большую указанной, считается признаком наличия пламени. Зажигание считается успешным, если пламя обнаружено на всех каналах с пламенным детектором.

**Приращение сигнала 1, 2, 3, ...** – приращение сигнала в канале пламенного детектора, показывающее наличие пламени в детекторе, с которым связан данный сигнал. Номер сигнала соответствует порядковому номеру детектора в приборе.

Внимание! Приращения сигналов задают в единицах напряжения – вольтах. Для хроматографа Кристалл-5000.1 – в милливольтках.

Ко второй группе относятся параметры, задающие общее состояние хроматографа в момент поджига и состояние газовых регуляторов, в частности.

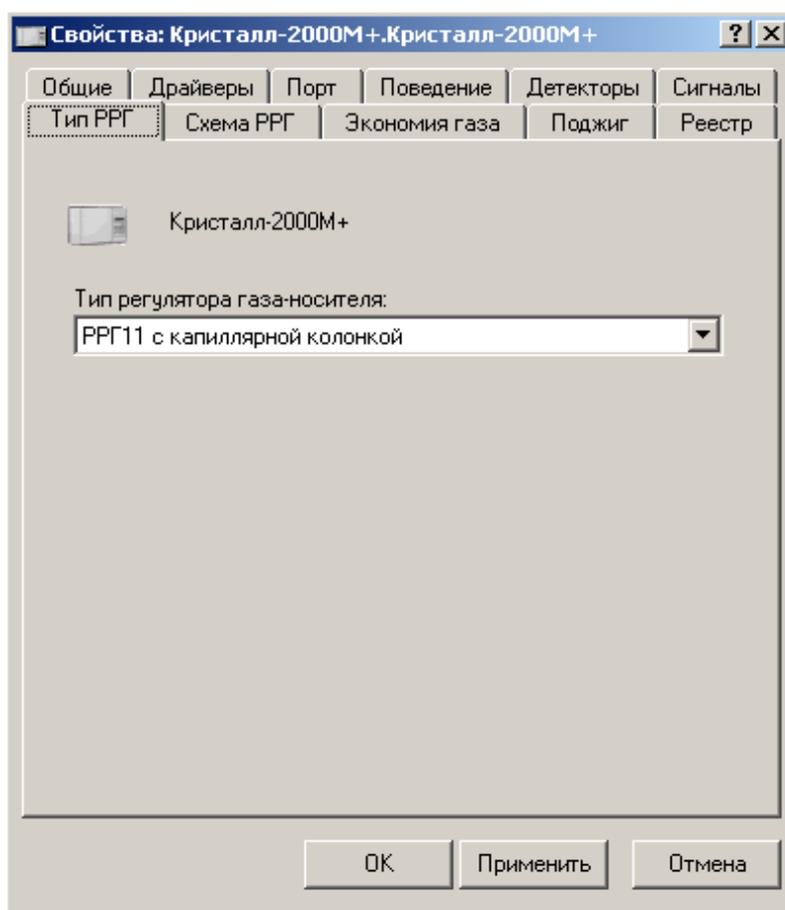
Названия параметров, отвечающих за состояние газовых регуляторов, соответствуют названиям регуляторов каждого конкретного типа хроматографа, например “Газ1, Газ2, Газ3, ...”.

Внимание! Если регулятор работает в режиме регулирования расхода, значение для соответствующего параметра должно быть указано в единицах расхода – мл/мин. Если в режиме давления, то в единицах давления – кПа, и так далее.

Изменение параметров поджига недоступно, если прибор выполняет процедуру поджига автоматически по жёстко заданному алгоритму.

Параметры реестра: “IgnitingGasX”, где X – номер газового регулятора, “IgnitingFuel”, “IgnitingFuelDelta”, “IgnitingAir”, “IgnitingFuelMass”, “IgnitingFuelFID”, “IgnitingFuelFPD”, “IgnitingTries”, “IgnitingTime”, “FlameDelta”, “FlameDeltaX”, где X – номер сигнала

## 2.4.12 Тип РРГ



Определение типа регулятора газа-носителя для хроматографа Кристалл-2000М.

Выберите тип регулятора "Газ1", соответствующий текущей конфигурации прибора:

**PPG10 с набивной колонкой.** Регулируется только расход газа-носителя, проходящего через колонку.

**PPG10 с капиллярной колонкой.** Регулируется только суммарный расход газа-носителя, проходящего через колонку и регулятор сброса пробы "Газ3".

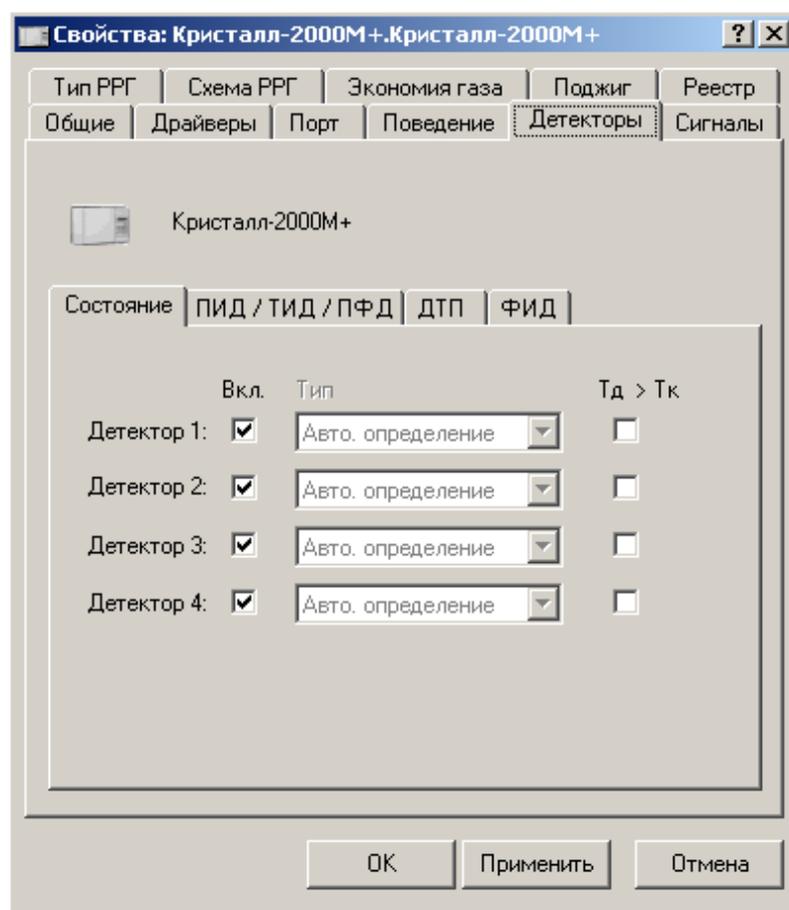
**PPG11 с набивной колонкой.** Регулируется расход газа-носителя, проходящего через колонку, и давление на входе в колонку.

**PPG11 с капиллярной колонкой.** Регулируется суммарный расход газа-носителя, проходящего через колонку и регулятор сброса пробы "Газ3", давление на входе в колонку, и линейная скорость газа-носителя.

Внимание! Возможные режимы работы РРГ11 в хроматографе Кристалл-2000М задаются переключателями на плате микроконтроллера (см. техническую документацию к прибору).

Параметр реестра: "Gas1Config"

## 2.4.13 Детекторы



### 2.4.13.1 Включение / Выключение детектора

Номер детектора соответствует порядковому номеру детектора в приборе.

Параметры детектора, физически отсутствующего в приборе, игнорируются.

Включение / Выключение детектора запрещено, если эта процедура не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

По умолчанию все детекторы включены.

Параметр реестра “**DetMask**”

### 2.4.13.2 Тип детектора

Указывается для обеспечения программного контроля пламени в пламенных детекторах, программного контроля спиралей в детекторах по теплопроводности и программного контроля ВУФ лам в фото - ионизационных детекторах.

Может принимать следующие значения:

**Нет особенностей.** Для таких детекторов не требуются специальные настройки контроля работы. Всё выполняется автоматически самим прибором.

**Пламенный.** Детекторы ПИД, ТИД или ПФД, для которых программно выполняется контроль пламени.

**ДТП 1.** Единственный в схеме ДТП или первый детектор в схеме двух ДТП, для которого программно включается ток моста и выполняется баланс.

**ДТП 2.** Единственный в схеме ДТП или второй детектор в схеме двух ДТП, для которого программно включается ток моста и выполняется баланс.

**ВУФ лампа.** Фото – ионизационные детекторы, для которых программно выполняется контроль ВУФ лампы.

**Авто. определение.** Тип детектора определяется автоматически самим прибором. Контроль состояния пламени, спиралей и ВУФ ламп выполняется аппаратно.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или устройство работает полностью в автоматическом режиме.

Параметры реестра: “DA”, “DB”, “DC” и “DD”.

### 2.4.13.3 Блокировки

Блокировка хроматографа если температура детектора меньше температуры термостата колонки или температура детектора меньше температуры, указанной в температурной программе термостата колонки.

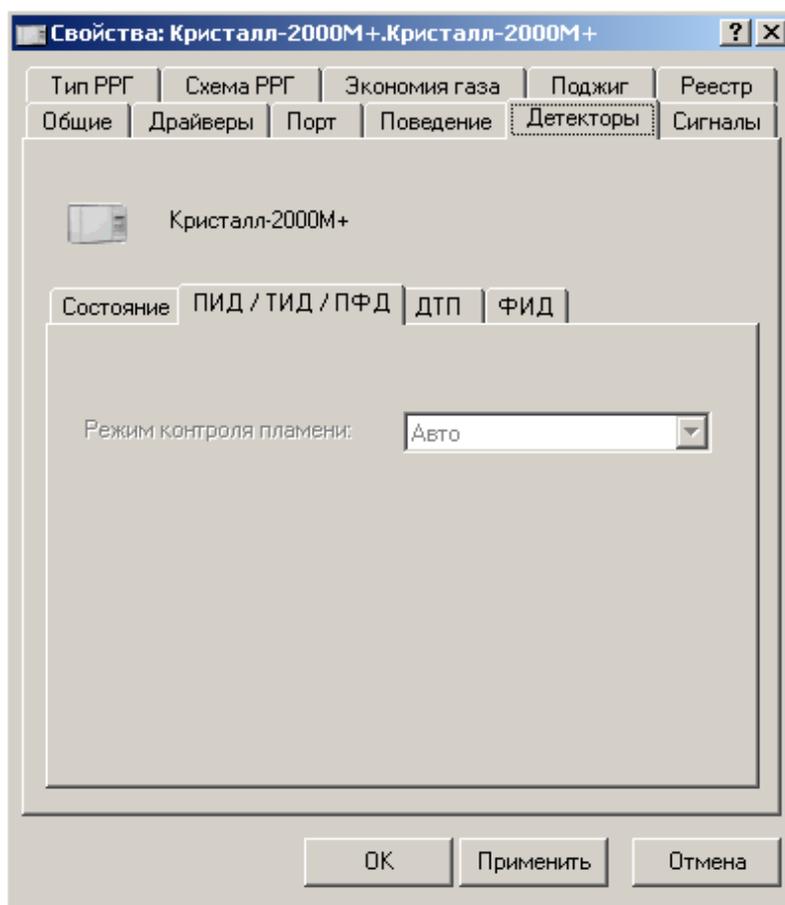
Если хроматограф заблокирован, невозможно загрузить методику и изменить любой параметр методики. Прекращается нагрев всех температурных зон. Газы не отключаются.

Метка означает наличие блокировки. Отсутствие метки означает, что блокировка снята.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

Параметры реестра: “CheckTdetOverToven”, “CheckTd1OverTO” и “CheckTd2OverTO”

### 2.4.13.4 Изменение режима контроля пламени в пламенно-ионизационном детекторе



Режим контроля пламени принимает следующие значения:

**Выключить (Off)** – не включать потоки водорода и воздуха и не зажигать пламя;

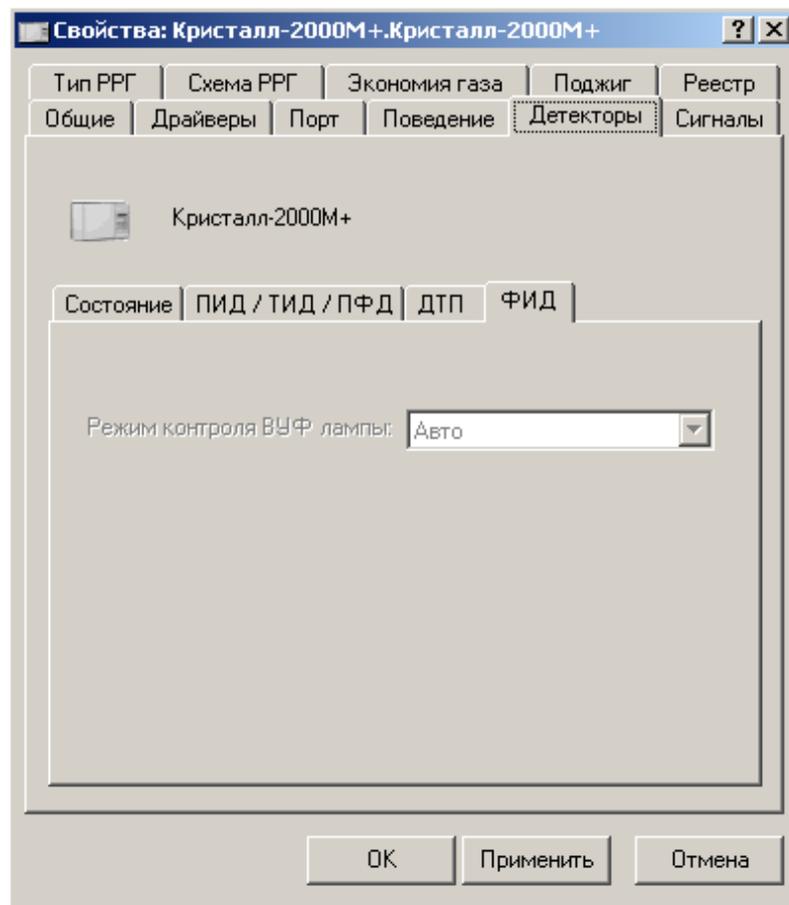
**Авто (Auto)** – зажигать пламя, если, по крайней мере, один измерительный канал настроен на пламенный детектор ПИД, ТИД или ПФД, а иначе не зажигать, или разрешить автоматический поджиг по алгоритму заложенному в самом приборе. Контролировать и индицировать пламя по каналам с пламенным детектором;

**Включить (On)** – посылать команду на поджиг независимо от наличия пламенных детекторов в схеме прибора. Не выполнять контроль пламени, но индицировать состояние пламени, если детектор пламенный.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

Параметры реестра: **“FIDFlameMode”** и **“CheckFIDFlame”**

#### 2.4.13.5 Изменение режима контроля ВУФ лампы для фото - ионизационного детектора



Режим контроля ВУФ лампы принимает следующие значения:

**Выключить (Off)** – не включать лампу;

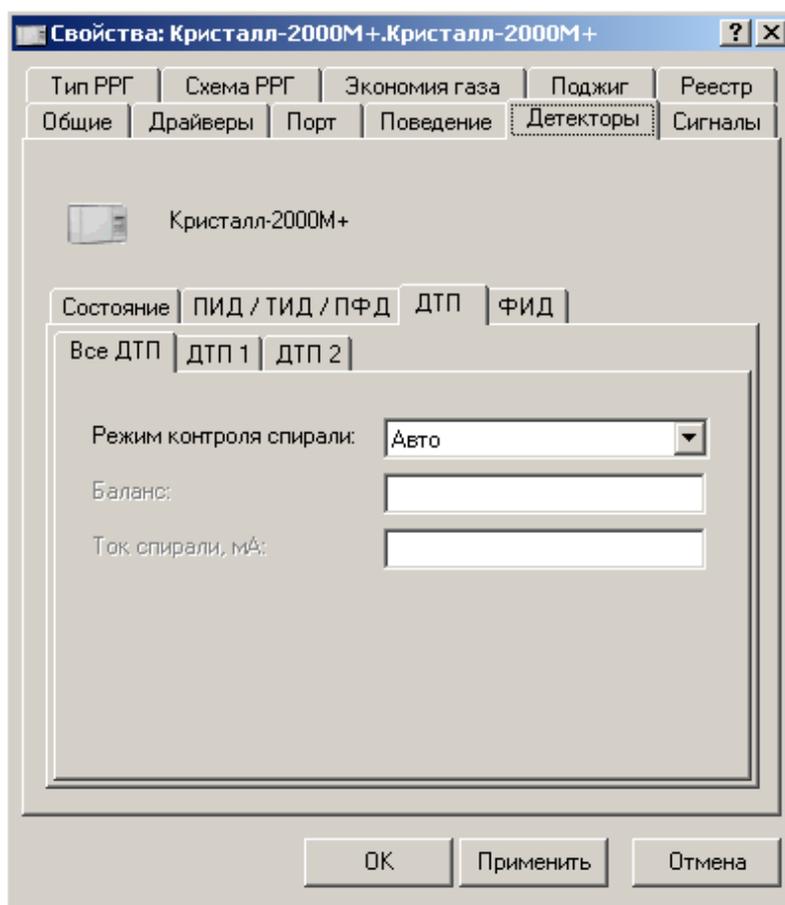
**Авто (Auto)** – включать лампу, если, по крайней мере, один измерительный канал настроен на ФИД и хроматограф переведён в состояние ожидания старта анализа (готов к измерению), а иначе - выключить, или разрешить автоматическое включение по алгоритму заложенному в самом приборе. Индицировать лампу по каналам с ФИД;

**Включить (On)** – посылать команду на включение лампы независимо от наличия ФИД в схеме прибора. Индицировать состояние лампы, если детектор фото - ионизационный.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

Параметры реестра: **“PIDLamp”** и **“CheckPIDLamp”**

#### 2.4.13.6 Изменение режима контроля спирали детектора по теплопроводности



Режим контроля спирали принимает следующие значения

**Выключить** (Off) – не включать спираль;

**Авто** (Auto) – включать спираль, если, по крайней мере, один измерительный канал настроен на ДТП, а иначе – не включать, или разрешить автоматическое включение по алгоритму заложенному в самом приборе;

**Включить** (On) – посылать команду на включение спирали независимо от наличия в схеме прибора ДТП.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

Параметры реестра: **"TCDMode"**, **"TCD1Mode"**, **"TCD2Mode"** и **"Filament"**

#### Установка тока спирали (спиралей) в миллиамперах

Для хроматографа КристалЛюкс-4000 ток спирали изменяется в диапазоне от 50 до 150 мА или устанавливается в ноль.

По умолчанию ток спирали установлен в ноль.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

Параметры реестра: **"TCDCurrent"**, **"TCD1Current"** и **"TCD2Current"**

#### Установка баланса ДТП, %

Для хроматографа КристалЛюкс-4000 баланс изменяется от 0 до 100 % (возможно до 127).

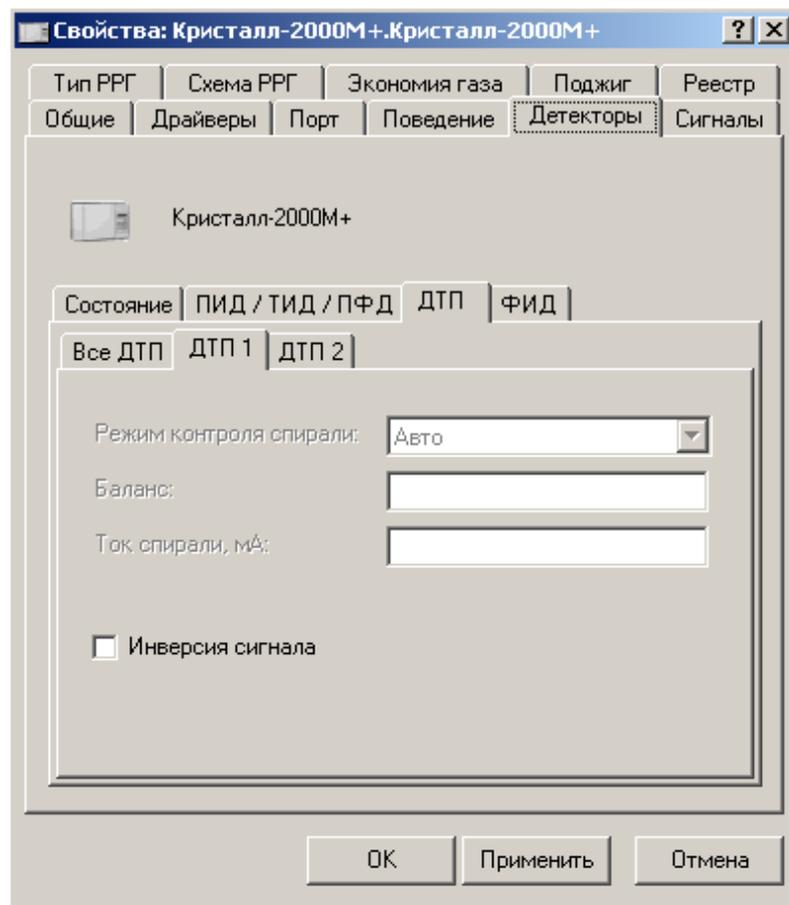
Меньшие значения баланса смещают баланс в сторону отрицательного канала ДТП и уменьшают измеряемые значения, большие значения – в сторону положительного канала ДТП.

По умолчанию баланс равен 50 %.

Изменение параметра запрещено, если этот параметр не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

Параметры реестра: “**TCDBalance**”, “**TCD1Balance**” и “**TCD2Balance**”

#### 2.4.13.7 Инверсия сигнала ДТП

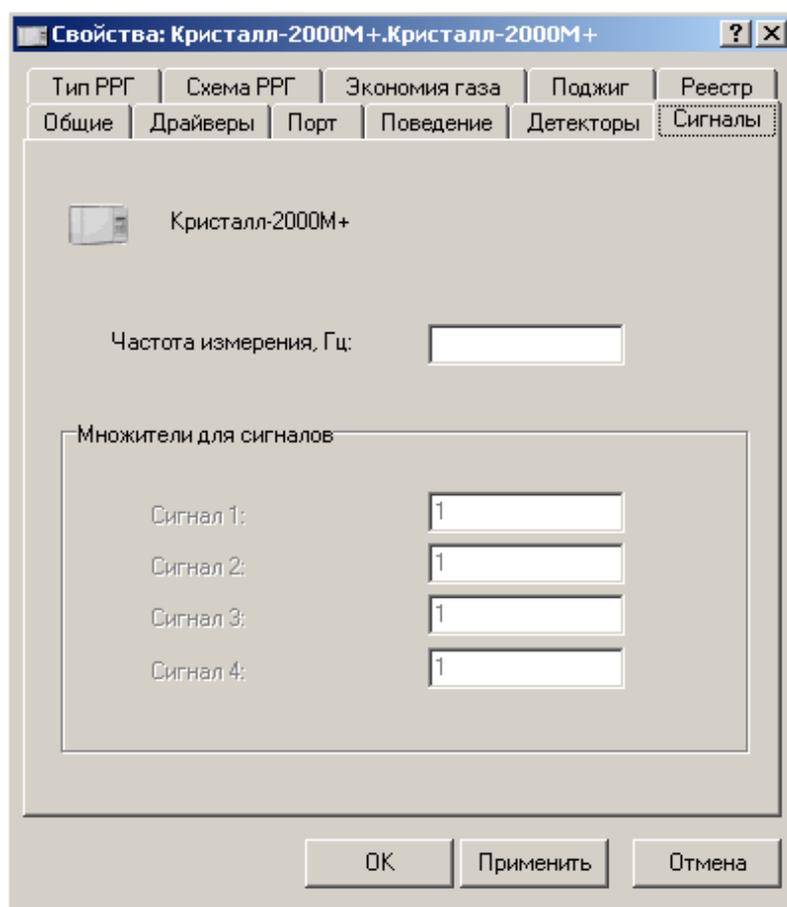


Включение / Выключение инверсии сигнала запрещено, если эта процедура не поддерживается драйвером устройства или самим прибором.

По умолчанию инверсия сигнала отключена.

Параметры реестра “**InvTCD1**” и “**InvTCD2**”

## 2.4.14 Сигналы



### 2.4.14.1 Изменение частоты измерения

Параметр реестра "**DriverFreq**"

### 2.4.14.2 Множители для сигналов

Установка множителя для сигналов, снимаемых на выходе детекторов.

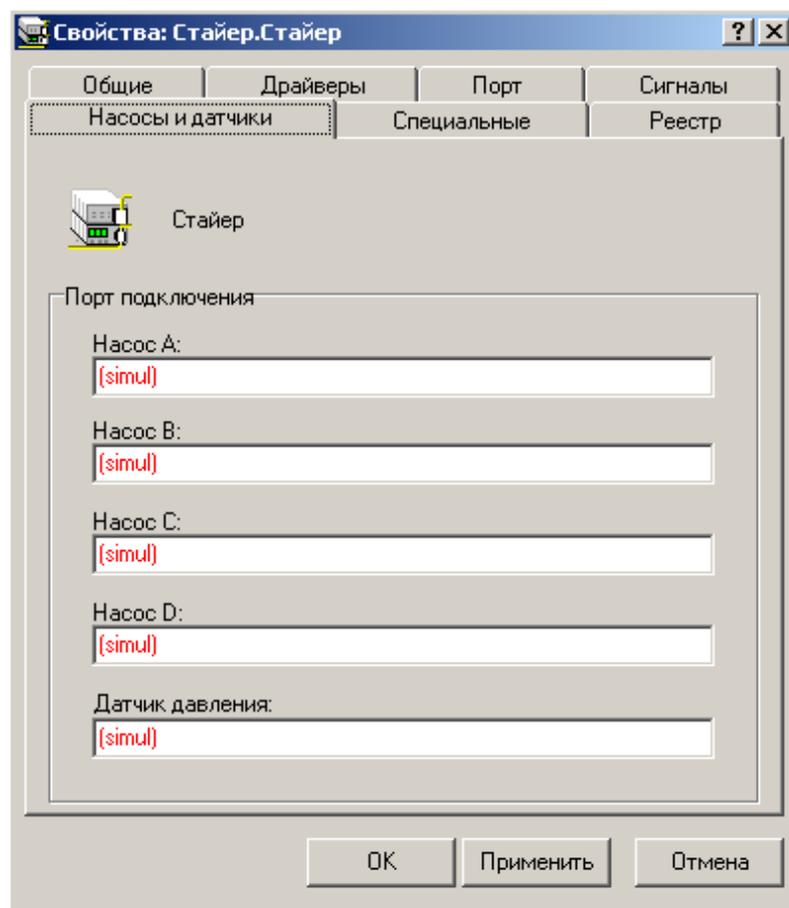
По умолчанию множитель устанавливается в единицу.

Для КристалЛюкс-4000 множитель принимает значения от 1 до 8.

Редактирование параметра запрещено, если корректировка сигнала не требуется.

Параметры реестра: "**DAMultiplier**", "**DBMultiplier**", "**DCMultiplier**" и "**DDMultiplier**"

## 2.4.15 Насосы и датчики



Укажите порт компьютера, к которому подключено устройство.

Устройство выключено или отсутствует физически, если порт не указан.

Подключение может быть выполнено через любой доступный свободный порт компьютера: LPT, COM, USB, Gpib, Hpib или КОП, а также по локальной сети и через глобальную сеть интернет.

При подключении устройства к параллельному или последовательному порту необходимо ввести сигнатуру и номер порта, например **LPTx** или **COMx**, где x - номер порта.

При подключении к последовательному COM порту достаточно ввести номер порта.

При подключении через не стандартный порт необходимо ввести сигнатуру Gpib, Hpib или КОП и два числа через запятую, определяющих адрес порта на шине (см. соответствующую техническую документацию).

При подключении по локальной или глобальной (интернет) сети необходимо указать адрес устройства по схеме:

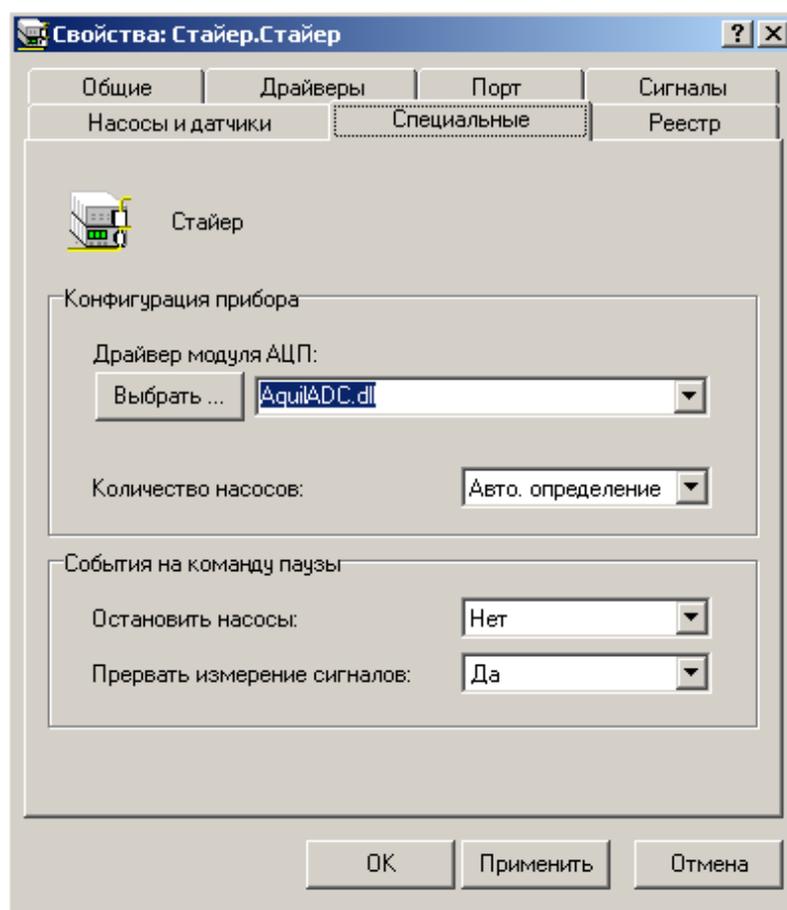
**tcp:[имя или IP адрес устройства]:[номер tcp порта].**

Для имитации работы устройства введите строку **(simul)**.

Редактирование порта подключения запрещено, если для работы с устройством не требуется порт или если порт подключения задан жёстко и не может быть изменён.

Параметры реестра: "PumpA", "PumpB", "PumpC", "PumpD" и "Press".

## 2.4.16 Специальные свойства жидкостного хроматографа



### 2.4.16.1 Количество насосов в приборе

Редактирование параметра запрещено, если выполняется только автоматическое определение количества насосов (прибор сам информирует драйвер о своей конфигурации) или если количества насосов в приборе задано жёстко и не может быть изменено.

Параметр реестра **“Pumps”**

### 2.4.16.2 События на команду «Пауза»

“Пауза” может быть выполнена как во время измерения, так и в ручном режиме работы с жидкостным хроматографом. Во время паузы может быть выполнено сканирование спектра и другие действия по обработке данных. Паузу можно выполнить с целью технического обслуживания прибора без прерывания анализа в целом и в случае аварии (при увеличении давления в системе выше нормы). Режим паузы настраивается. Можно отключать только насосы. Можно отключать только сигнал. А можно остановить и сигнал, и насосы одновременно.

Изменение параметров запрещено, если эти параметры не поддерживаются драйвером устройства или самим прибором.

Параметры реестра: **“StopPumps”** и **“StopSignals”**

### 2.4.16.3 Драйвер модуля АЦП

Изменение драйвера модуля АЦП, работающего с данным устройством.

Драйвер – файл с расширением \*.dll.

Драйвер можно выбрать из списка. Список формируется из файлов, хранящихся в архиве SE. Если выбранный драйвер модуля АЦП не был установлен ранее, потрудитесь и установите его позже.

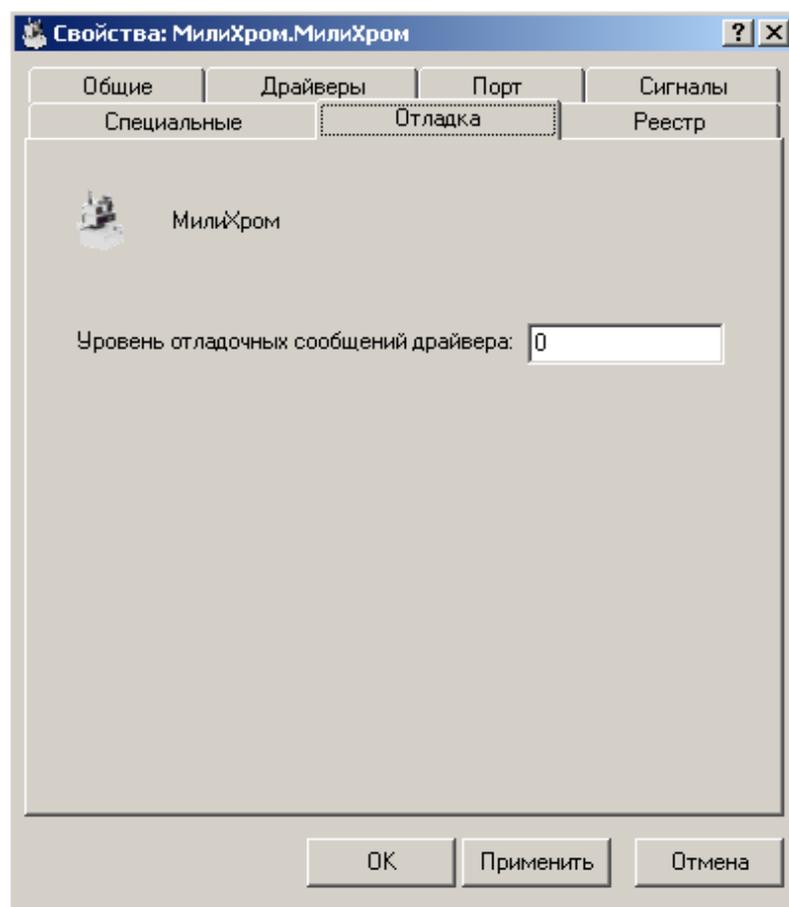
Чтобы убедиться, что проблем с драйверами нет, нажмите кнопку **“Диагностика ...”** на странице **Драйверы**.

Драйвер можно выбрать из указанного места на диске. Для этого нажмите кнопку **“Выбрать ...”**.

Редактирование параметра запрещено, если устройству не требуется внешней АЦП для регистрации сигнала или если драйвер модуля АЦП задан жёстко.

Параметр реестра **“ADCmodule”**

## 2.4.17 Отладка



### 2.4.17.1 Изменение уровня отладочных сообщений драйвера

Отладочные сообщения, включая сообщения об ошибках, выводятся на внешнюю и (или) встроенную консоль сообщений программы UniChrom.

Информация, выводимая на консоль, часто помогает выявить характер неполадок в работе устройства и программы.

Уровень отладочных сообщений задаётся целым числом от 0 и выше. По умолчанию установлен нулевой уровень, соответствующий минимуму информации.

Редактирование параметра запрещено, если уровень отладочной информации не учитывается драйвером устройства.

Параметр реестра **“DebugLevel”**

## 2.5 Разделяемый доступ пользователей к системе UniChrom

Доступ пользователей к системе UniChrom может лимитироваться в соответствии с базой данных пользователя и проверкой уровня доступа пользователя.

Имя пользователя, успешно прошедшего проверку используется журналом GLP для отметки того, какой пользователь, когда и какие изменения произвёл над измеренными данными.

В этом случае журнал GLP содержит строки, например:

```
30.08.2006 16:02:25.193 Admin@hostname : lay #11 Удалить пики в 20612,25438 stat=1, 140 msec.
```

Если проверка пароля пользователя производилась системой UniChrom (то есть имеется не пустой пароль, установленный для данного пользователя), то имя машины будет отображаться в квадратных скобках: **Admin@[hostname]**.

Если проверка пароля пользователя выполнялась только машиной, но в базе пользователей присутствует запись с таким же именем, что использовалось для входа в систему, то атрибуты пользователя применяются в соответствии с указанным в базе UniChrom.

### 2.5.1 Создание базы данных пользователей

База данных пользователей активизируется при наличии внутри директории

UniChrom\etc файла **passwd**

Файл содержит в себе информацию о пользователях, паролях и уровне доступа в зашифрованном виде. Для начала работы с базой данных пользователей необходимо:

1. Создать внутри папки UniChrom папку **etc** (если она не создана программой установки).
2. Создать пустой файл (нулевого размера) **UniChrom\etc\passwd** с помощью любых средств.

Например, можно использовать системную команду **copy**. В командной строке следует набрать: **copy nul c:\UniChrom\etc\passwd**.

После старта системы UniChrom потребует имя пользователя и пароль в диалоге входа в систему. Изначально после инициализации базы данных пользователей разрешён вход только одному пользователю **Admin** с пустым (ничего не вводить) паролем.

Указанный пользователь обладает привилегиями администратора и имеет право:

1. Добавлять или удалять новых пользователей и изменять их пароли и уровни привилегий.
2. Настраивать пользовательский интерфейс.

Рекомендуется изменить пароль пользователя **Admin** на любой не пустой сразу после входа в систему. Страница редактирования базы данных пользователей находится в окне настройки параметров системы (меню Инструменты\Параметры\Пользователи) и доступно только пользователям с привилегиями **Администратора** системы.

### 2.5.2 Окно проверки пользователя

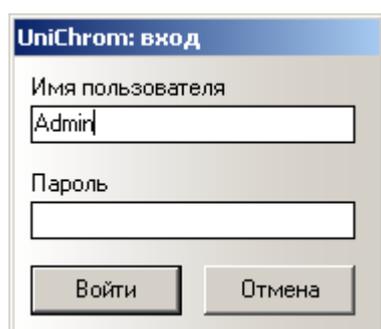


Рисунок 1  
Окно проверки имени пользователя и пароля

Нажатие кнопки «Отмена» прервёт загрузку системы. Неверный пароль или несуществующее имя пользователя приводит к сообщению об ошибке – «Неверная комбинация имя пользователя/пароль». Следует помнить – **имена пользователей и пароли чувствительны к регистру клавиатуры**, поэтому и то и другое следует набирать ТОЧНО так, как они были введены администратором системы.

### 2.5.3 Группы пользователей

Все пользователи системы UniChrom подразделяются на 3 группы:

**Администраторы**, **Управляющие** и обычные **Пользователи**

См. рисунок.

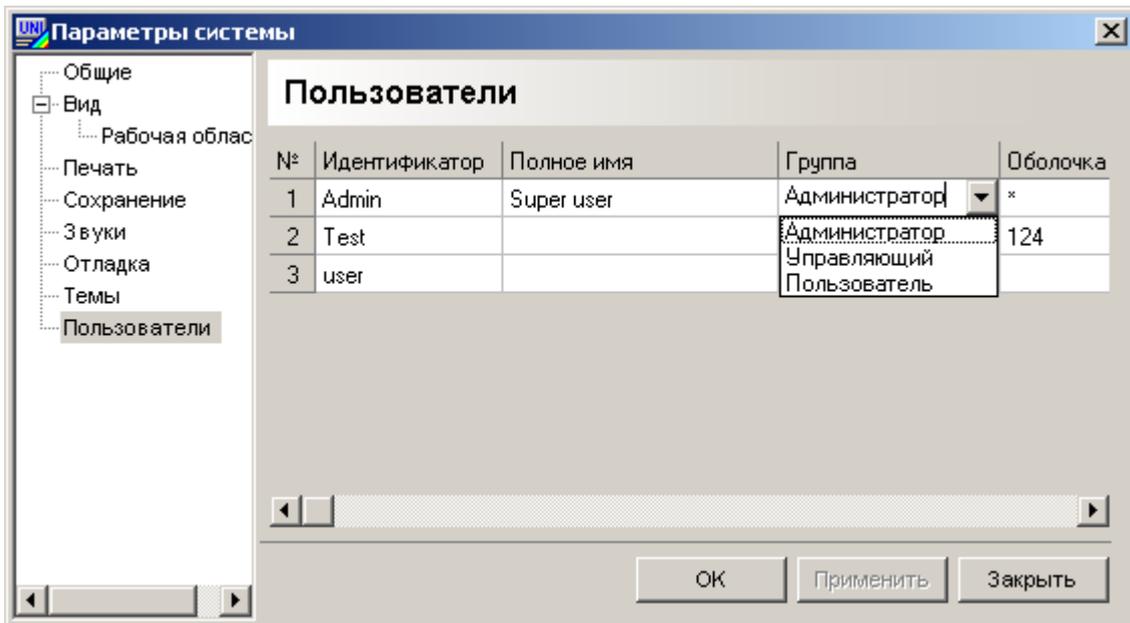


Рисунок 2. Страница редактирования базы данных пользователей со списком групп пользователей.

**Администраторы** - имеют полный контроль над функциями системы UniChrom

**Управляющие** – аналогично администраторам имеют полный контроль над функциями системы за исключением возможности создания новых и изменения существующих пользователей системы.

**Пользователи** - лишены возможности изменять конфигурацию системы, а также выполнять некоторые функции обработки.

#### 2.5.4 Добавление и удаление пользователей

Добавление нового пользователя, удаление существующего, задание пароля для пользователя осуществляется через контекстное меню на правой кнопке мыши в таблице «Пользователи».

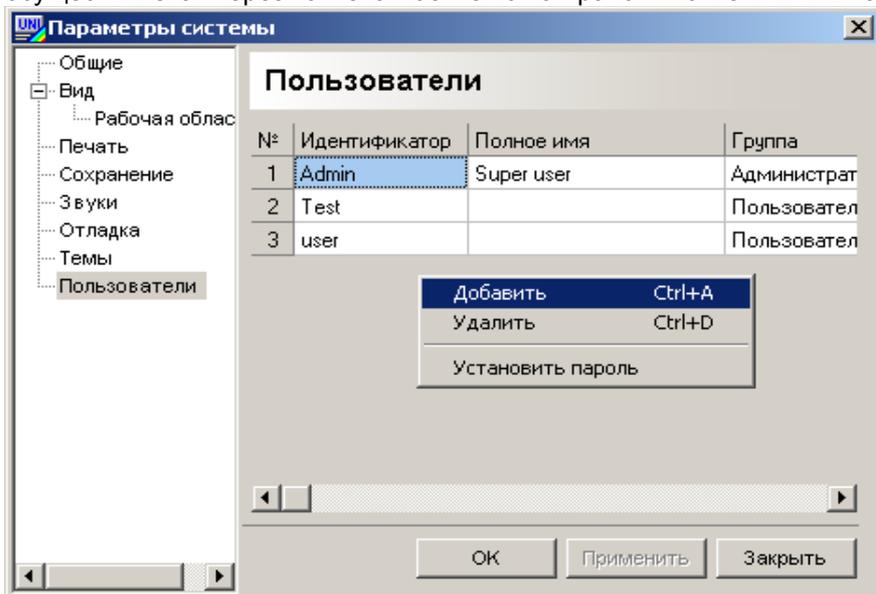


Рисунок 3

Контекстное меню в списке пользователей

#### 2.5.5 Задание пароля пользователя

Операция смены любого атрибута пользователя требует смены его пароля. Ввод пароля производится в окошке появляющемся при необходимости смены пароля, либо при вызове «Установить пароль» в контекстном меню. Операция смены пароля относится к пользователю, находящемуся в выделенной строке таблицы. Для задания пароля необходимо его ввести дважды – в верхней и нижней строке ввода. Не совпадающие пароли вызовут сообщение об ошибке – и останется активным предыдущий пароль.

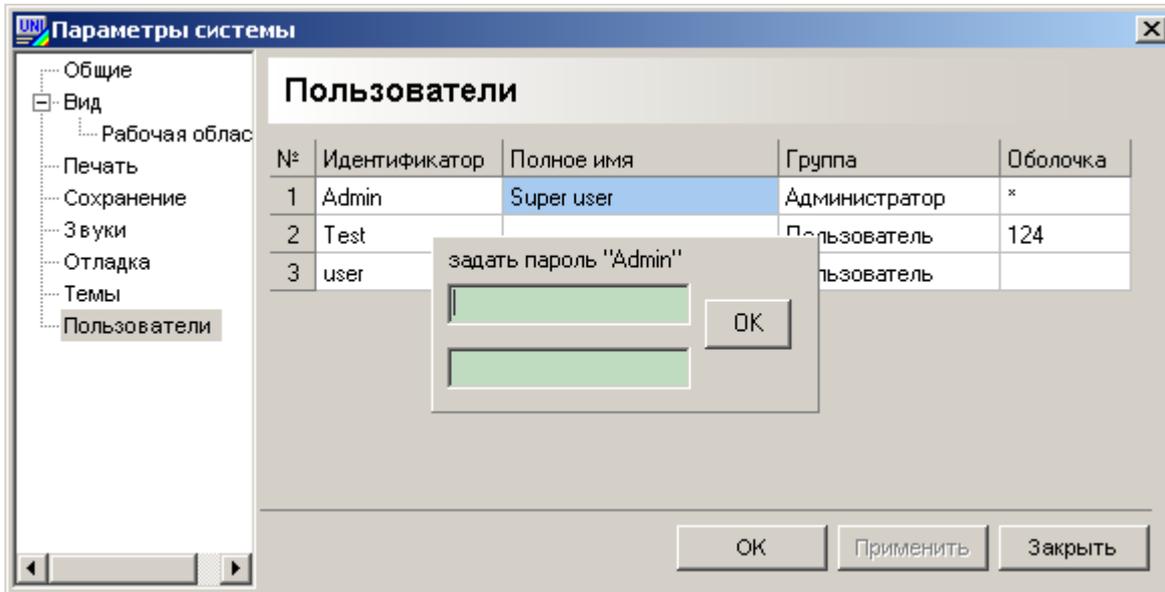


Рисунок 4

Окно задания пароля для пользователя Admin.

### 2.5.6 Оболочки для пользователей

Данный атрибут пользователя используется только **UniChrom V**, и определяет, какие виды рабочего стола (как-то «Управление прибором», «Анализ Данных», «Градуировка» и т.д.) доступны указанному пользователю. В качестве списка рабочего стола задаётся последовательность цифр – номеров рабочих областей. Номера определены в системе жёстко.

1. Метод и управление Прибором
2. Анализ Данных
3. Градуировка и Расчёты
4. Дизайн Отчёта.
5. Поверка и GLP

Перечисление номеров рабочих столов приводит к ограничению рабочей области пользователя ТОЛЬКО указанными рабочими столами.

Например если в ячейке «Оболочка» введены цифры 124, то это означает, что данному пользователю будут доступны только «Метод и управление Прибором», «Анализ Данных» и «Дизайн Отчёта». Задание \* или пустого списка означает отсутствие ограничений.

## 2.6 Конфигурация газохроматографического оборудования в системе UniChrom

Мы стремимся, чтобы наш программный продукт был универсальным средством управления для ГХ приборов. Для достижения возможности работы в едином стиле с разными приборами был разработан пользовательский интерфейс (окно управления, модель хроматографа, если хотите), который позволяет не только создать метод безотносительно к конструкции прибора, но также перемещать метод между хроматографами разных типов и марок.

В основу представления газового хроматографа в системе UniChrom положено предположение о том, что абстрактный (“идеальный”) хроматограф имеет в наличии следующие части:

Наименования части прибора	Количество таких частей
Термостат	1
Инжектор (устройство ввода пробы)	2
Детектор (устройство регистрации сигнала пробы)	2
Автоматический дозатор газовой или жидкой пробы	1

Каждая из таких частей называется “зоной регулирования<sup>7</sup>”, которая содержит один или несколько “объектов регулирования<sup>8</sup>”. Каждый из объектов регулирования может быть программируемым<sup>9</sup>, читаемым, записываемым либо все вместе и сразу. Поведение каждого из объектов регулирования зависит от конструкции прибора.

Абстрактный (“идеальный”) ГХ прибор для каждой из своих зон регулирования предоставляет следующие объекты регулирования:

Наименования зоны	Объекты регулирования
Термостат	Температура термостата
Испаритель 1	Температура испарителя 1 Расход (давление) газа носителя 1 Расход сброса <sup>10</sup> (split) газа носителя 1 Расход газа 1 для обдува перегородки (septum)
Испаритель 2	Температура испарителя 2 Расход (давление) газа носителя 2 Расход сброса (split) газа носителя 2 Расход газа 2 для обдува перегородки (septum)
Детектор 1	Температура детектора 1 Расход газа поддува (makeup) для детектора 1 Расход водорода для пламенного детектора 1 Расход воздуха для пламенного детектора 1
Детектор 2	Температура детектора 2 Расход газа поддува (makeup) для детектора 2 Расход водорода для пламенного детектора 2 Расход воздуха для пламенного детектора 2

<sup>7</sup> Зона регулирования (например – “Детектор 1” – это зона регулирования)

<sup>8</sup> Объект регулирования (например, у зоны “Детектор 1” есть три регулятора расхода газов и один регулятор температуры)

<sup>9</sup> Значение параметра, например температуры, программируемого объекта зоны регулирования может меняться по заданной непрерывной ломанной кривой во время исполнения метода. Например, у зоны “Испаритель 1” может быть программируемое давление газа носителя.

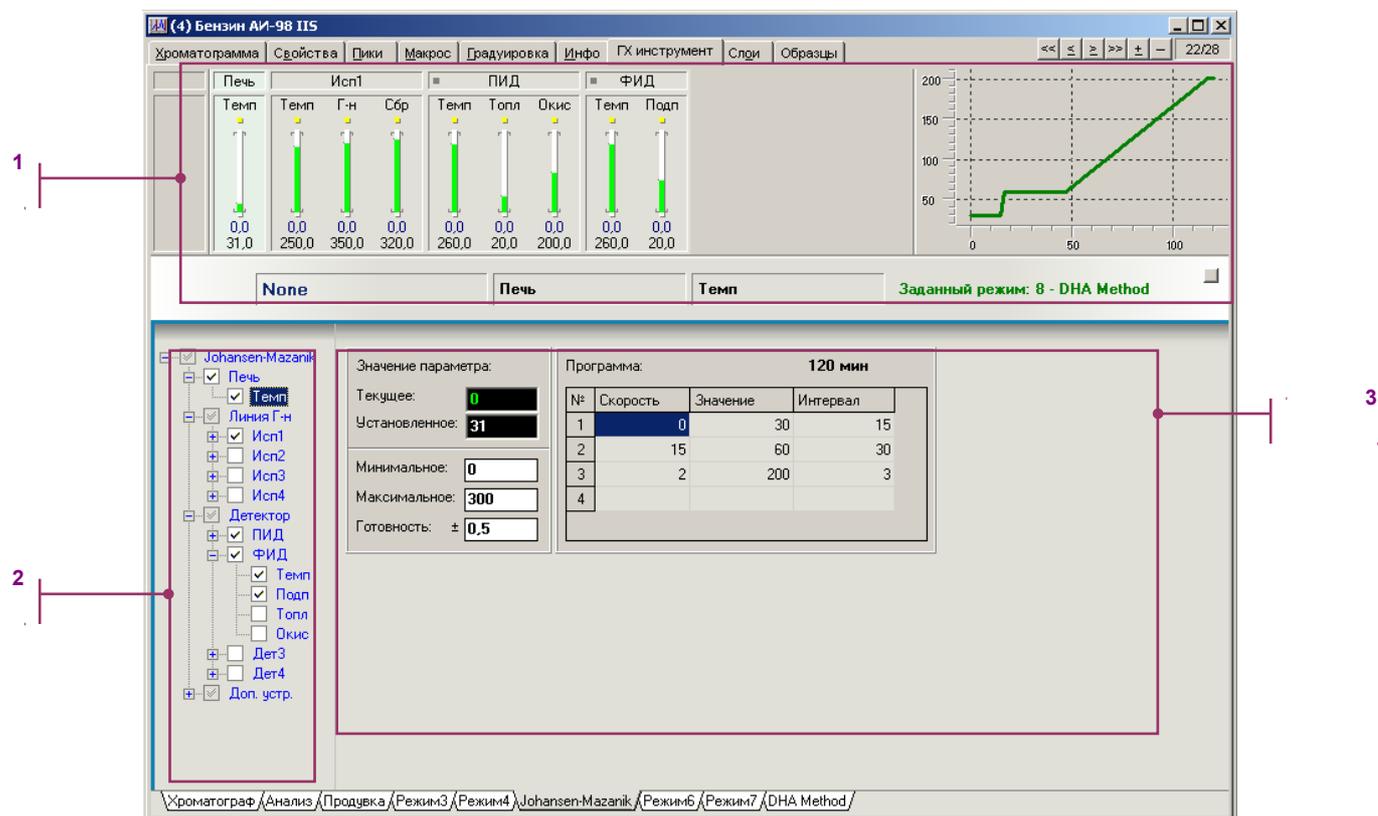
<sup>10</sup> Сброс газа носителя при работе с делением потока.

## 2.6.1 Общий подход к работе с газовыми хроматографами любого типа

Контроль и управление газовыми хроматографами в программе UniChrom осуществляется в окне документа на странице ГХ инструмент. Страницу ГХ инструмент формально можно разбить на три основных элемента:

Рис. 5. Основные элементы страницы “ГХ инструмент” в окне спектра хроматограмм программы UniChrom

1 – панель регуляторов хроматографа; 2 – Древоподобная конфигурация прибора (панель регуляторов в виде дерева); 3 – Установки для выбранного регулятора.



Панель регуляторов хроматографа компактно отображает текущее состояние всех температурных и газовых регуляторов прибора одновременно. Позволяет быстро одним щелчком мыши переходить от настроек одного регулятора к настройкам другого.

Панель регуляторов в виде дерева отображает конфигурацию прибора, его основные зоны и регуляторы. Также позволяет осуществлять переход от одного регулятора к другому.

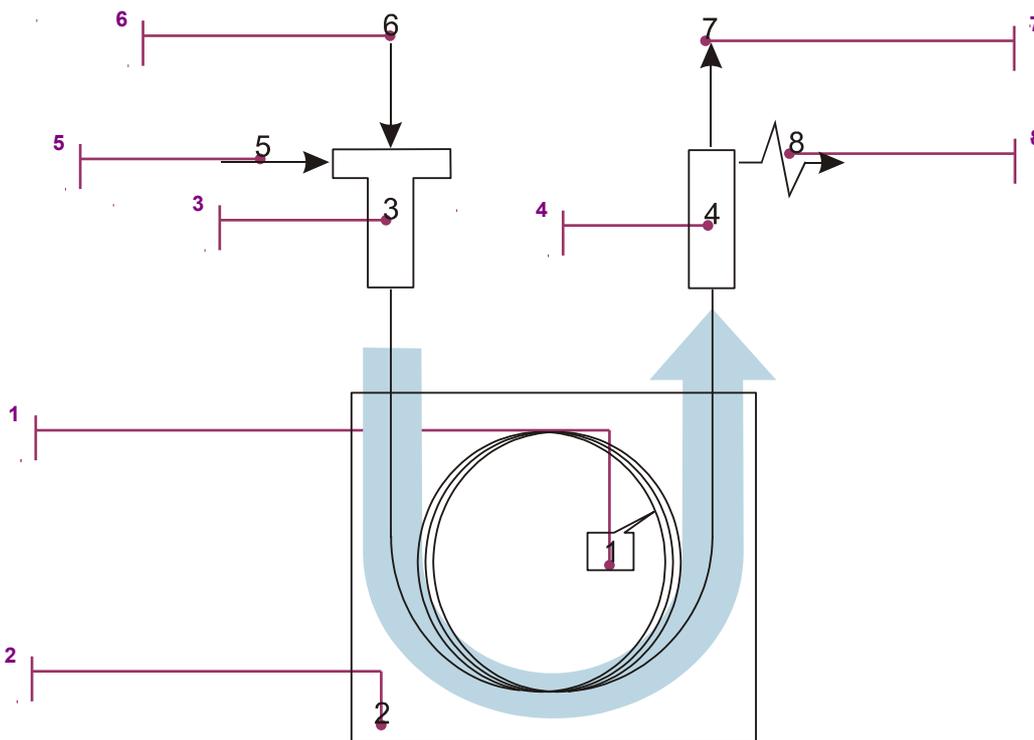
Панель установок для выбранного регулятора позволяет задавать минимальное и максимальное значение параметра (температура, расход, давление и пр.), диапазон готовности параметра, значение параметра и программа для него. Для газовых регуляторов задаётся тип газа. Если выбранный регулятор является регулятором газа-носителя, то панель позволит задать режим работы регулятора (расход, давление, скорость, поток через колонку).

### 2.6.1.1 Систематизация регуляторов газового хроматографа

Все газовые хроматографы от момента своего рождения и по сегодняшний день включают в себя обязательный набор специализированных структурных элементов. Простейшая структура газового хроматографа представлена на 2.6.1.1:

Рис. 6. Простейшая структура газового хроматографа

Основным элементом в газожидкостной хроматографии является разделительная хроматографическая колонка (1). Колонка размещается в термостате (2) хроматографа, подключается к входному каналу (3) и к детектору (4). Проба (6), движимая по колонке газом-носителем (5) разделяется на индивидуальные компоненты, которые детектируются по изменению сигнала (8). Отработанные газы (7) выходят из детектора в атмосферу.



Разделительные хроматографические колонки бывают трёх типов: набивные, макро-капиллярные и капиллярные. Набивные колонки, как правило, изготавливают из стекла или металла. Они короткие (длина варьирует от 1 до 6 м) и толстые (диаметр - от 2 до 6 мм). Набивные колонки заполняются твёрдым веществом с активной развитой поверхностью, которое называется твёрдой фазой. Макро-капиллярные колонки выполняют также из стекла или металла. Их длина может достигать 100 м при диаметре ~1 мм. Капиллярные колонки длиной до 100 м и выше и диаметром не более 0,5 мм изготавливают из кварцевого стекла и покрывают специальным жаростойким лаком для придания им прочности и гибкости в широком диапазоне температур. На внутреннюю поверхность макро-капиллярных и капиллярных колонок наносят тонкий слой (плёнку) вещества, называемую неподвижной жидкой фазой. Часто разделительные хроматографические колонки называют просто колонками. Проба по колонке переносится газом-носителем. Разделение пробы на индивидуальные компоненты осуществляется за счёт процессов адсорбции и десорбции. Разделительная способность зависит от скорости газа носителя и температуры колонки. Поэтому колонки помещают в термостат, где поддерживаются определённые температурные условия.

Входной канал (inlet) по определению представляет собой систему закачки пробы в разделительную колонку. Проба в газовой фазе переносится газом-носителем. По этой причине в трубу входного канала (injection region) вместе с пробой под давлением должен подаваться газ-носитель. Давление и расход газа-носителя устанавливаются соответствующими регуляторами давления и регуляторами расхода газа. Входной канал может обогреваться с целью предотвращения конденсации пробы на внутренней поверхности входной трубы. В случае жидких проб, входной канал должен подогреваться до температур, соответствующих температурам кипения анализируемых смесей. В этом

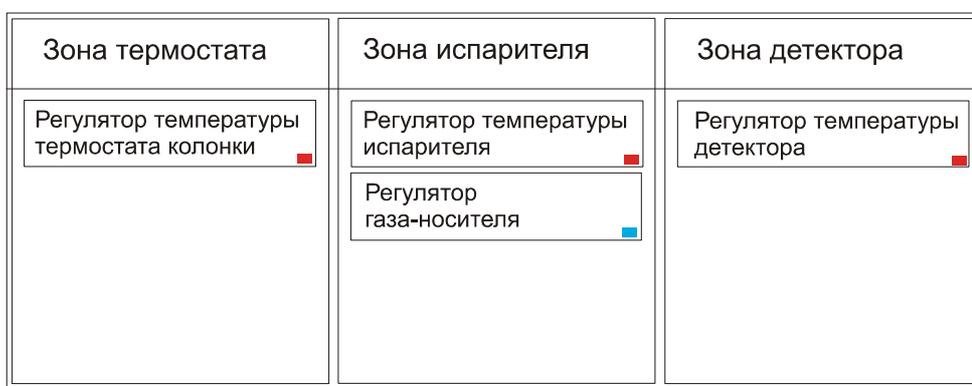
случае входной канал выполняет ещё и роль испарителя пробы. Поэтому часто его так и называют – испаритель.

Детектор в газовой хроматографии представляет собой устройство, устанавливаемое на выходе из колонки, для обнаружения компонентов пробы. Детектор формирует электрический сигнал (напряжение или ток), величина которого в общем случае не линейно зависит от концентрации компонентов анализируемой пробы. Детектор, также как и испаритель, является обогреваемым элементом газового хроматографа. Детекторы обогревают для предотвращения конденсации компонентов пробы на внутренней поверхности устройства. «Грязь» в детекторе это один из источников шума, который уменьшает предел детектирования. Обычно температура детектора должна быть на 5-10° больше температуры колонки.

Таким образом, уже в простейшей конфигурации хроматографа можно выделить три нагреваемые зоны прибора: испаритель, детектор и термостат. В каждой такой зоне находится по одному температурному регулятору.

Газовые регуляторы прибора по их назначению и другим отличительным особенностям можно отнести к определённой зоне хроматографа. Так, в нашем простейшем случае, газ-носитель движется по колонке, которая находится в термостате, но регулятор, задающий скорость газа, устанавливается перед испарителем. Он поддерживает определённое давление в испарителе на входе в колонку. Поэтому регулятор газа-носителя лучше всего отнести к зоне испарителя

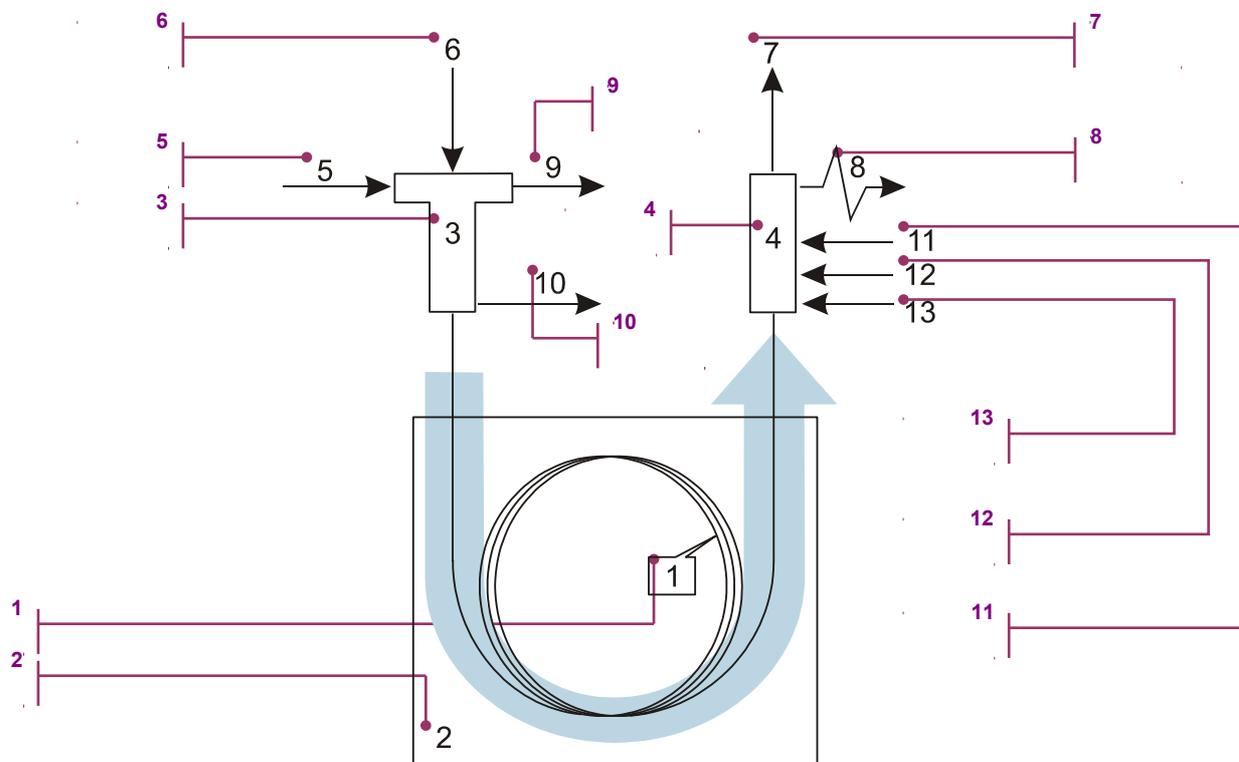
Рис. 7. Основные зоны и регуляторы хроматографа в минимальной конфигурации



Рассмотрим схему с капиллярной колонкой и пламенно-ионизационным детектором:

Рис. 8. Схема хроматографа с капиллярной колонкой и пламенно-ионизационным детектором.

1 – колонка; 2 – термостат хроматографа; 3 – испаритель; 4 – детектор; 5 – газ-носитель; 6 – проба; 7 – отработанные газы; 8 – сигнал детектора; 9 – обдув мембраны; 10 – сброс пробы (деление потока); 11 – подпитка; 12 – водород; 13 – воздух.



Здесь добавилось пять газовых регуляторов: поток сброса, поток обдува мембраны (резиновой прокладки), подпитка детектора, расход водорода и воздуха. Первых два потока отнесены к зоне испарителя, а остальные – к зоне детектора.

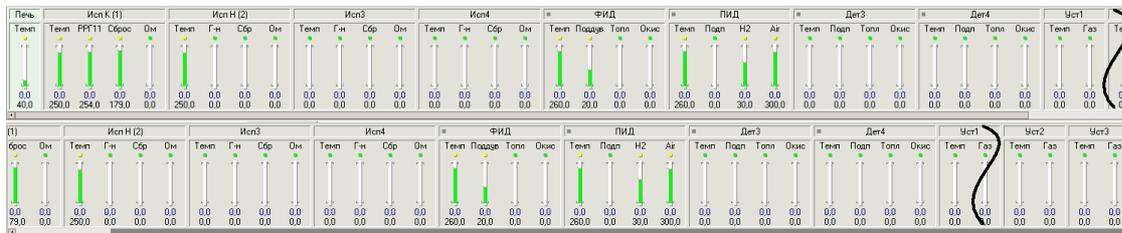
Рис. 9. Основные зоны и регуляторы хроматографа в конфигурации “Капиллярная колонка – ПИД”

Зона термостата	Зона испарителя	Зона детектора
Регулятор температуры термостата колонки	Регулятор температуры испарителя	Регулятор температуры детектора
	Регулятор газа-носителя	Регулятор подпитки детектора
	Регулятор сброса пробы	Регулятор расхода водорода
	Регулятор потока обдува мембраны	Регулятор расхода воздуха

Приведенная на 2.6.1.1 конфигурация является максимально полной. Более трёх газов на один испаритель не устанавливают. Точно также не делают более трёх газов на один детектор. Все встречающиеся на практике конфигурации хроматографов строятся из указанных выше блоков.

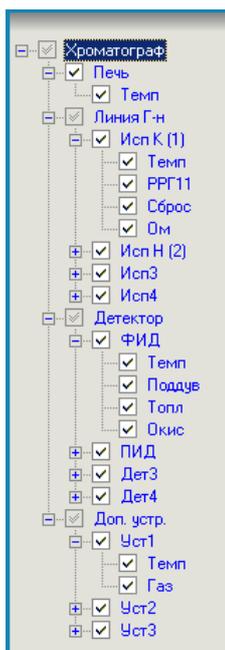
Программа UniChrom v.4.5 в общем случае поддерживает работу хроматографов с четырьмя испарителями и четырьмя комбинированными детекторами.

Рис. 10. Панель регуляторов хроматографа



Панель регуляторов хроматографа состоит из 12-ти нагреваемых зон и содержит **программные регуляторы**, которые при подключении программы UniChrom к прибору связываются с физическими регуляторами прибора, отображают их текущее состояние (установленные и измеренные значения, состояния готовности и пр.) и позволяют задавать новые установки для каждого отдельного физического регулятора.

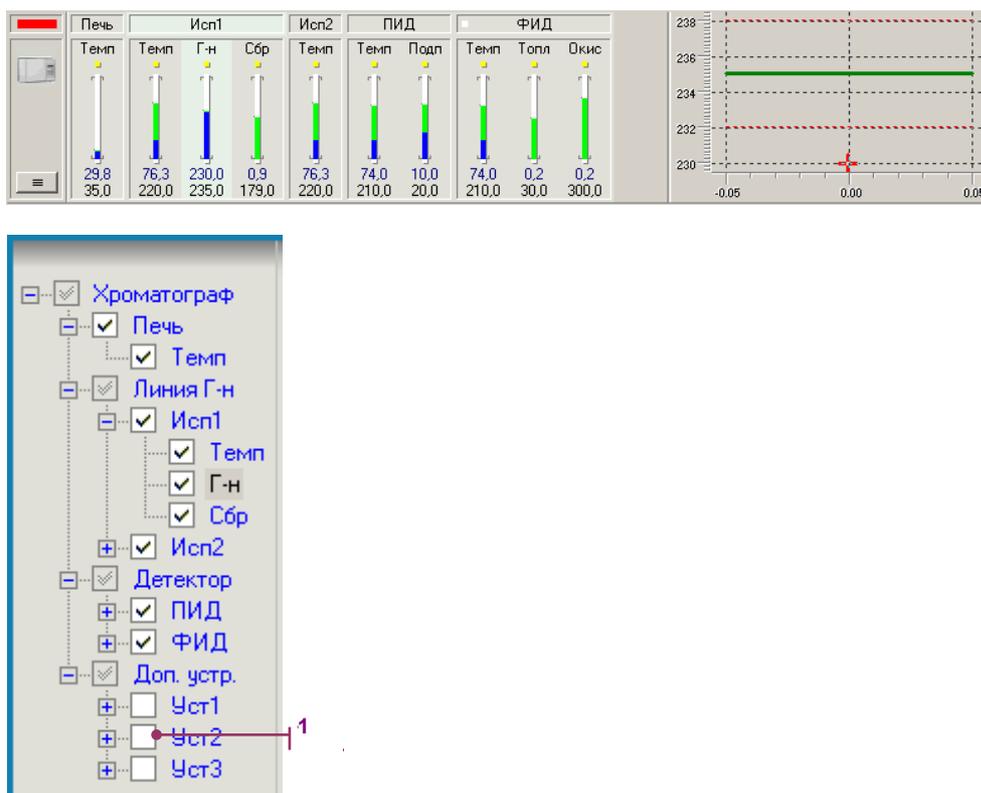
Рис. 11. Панель регуляторов в виде дерева



Существуют приборы с дополнительными (не стандартными) зонами нагрева и газовыми потоками. Для поддержки таких дополнительных устройств в UniChrom v.4.5 добавлены три вспомогательных зоны с одним температурным и одним газовым регулятором.

Рис. 12. Физические регуляторы прибора

1 – метка “Скрыть / Показать” регулятор на панели регуляторов хроматографа.

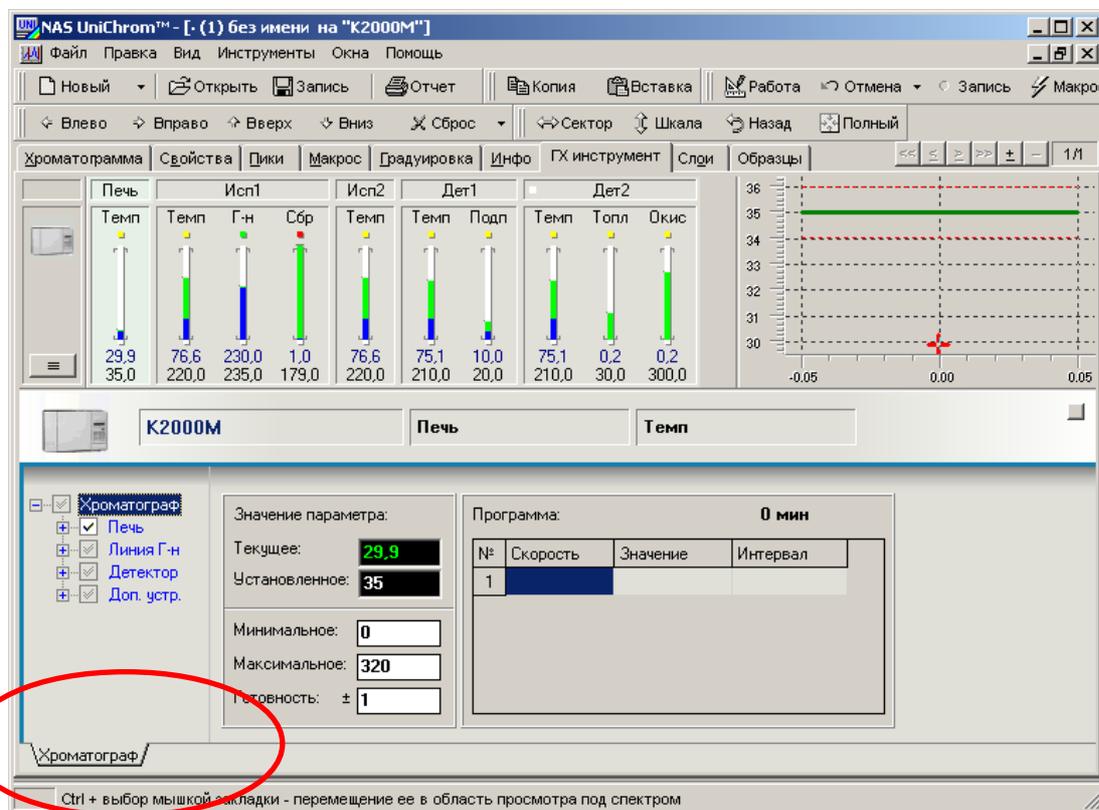


В большинстве случаев количество программных регуляторов больше чем количество физических регуляторов прибора. При подключении программы к прибору несуществующие программные регуляторы прячутся. Спрятать или показать программные регуляторы можно в любой момент времени одним щелчком левой кнопки мыши в указанную на 2.6.1.1 область панели регуляторов. Будучи скрытыми, регуляторы продолжают нормально работать, выполняя заданные пользователем установки.

## 2.6.1.2 Режимы работы хроматографа

Страница ГХ инструмент представляет собой книгу режимов работы хроматографа. Режим хроматографа это метод, по которому он работает. Режим задаёт настройки регуляторов прибора. По умолчанию, когда создаётся новое окно спектра хроматограмм (не по шаблону), книга режимов содержит только одну страницу **Хроматограф**.

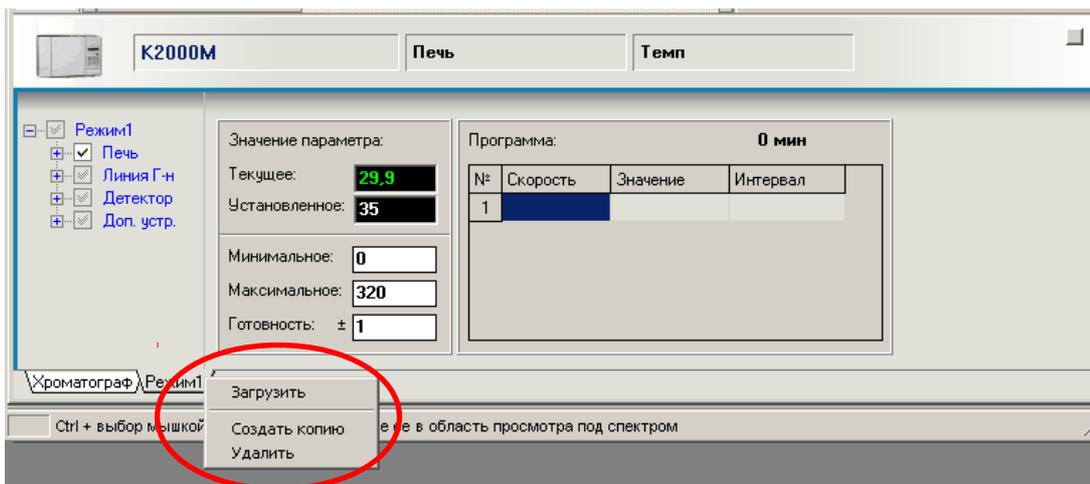
Рис. 13. Страница “Хроматограф”



На странице **Хроматограф** всегда отображается текущее состояние прибора. То есть данные через определённые промежутки времени вычитываются из прибора и отображаются на данной странице. Если на этой странице изменить какую-либо настройку, это сразу уйдёт в хроматограф.

При нажатии правой кнопкой мыши на закладку **Хроматограф**, появляется всплывающее меню с тремя пунктами: “Загрузить”, “Создать копию” и “Удалить”. Такое меню появляется при нажатии правой кнопкой мыши на любую закладку книги режимов:

Рис. 14. Загрузка, добавление и удаление режимов работы хроматографа



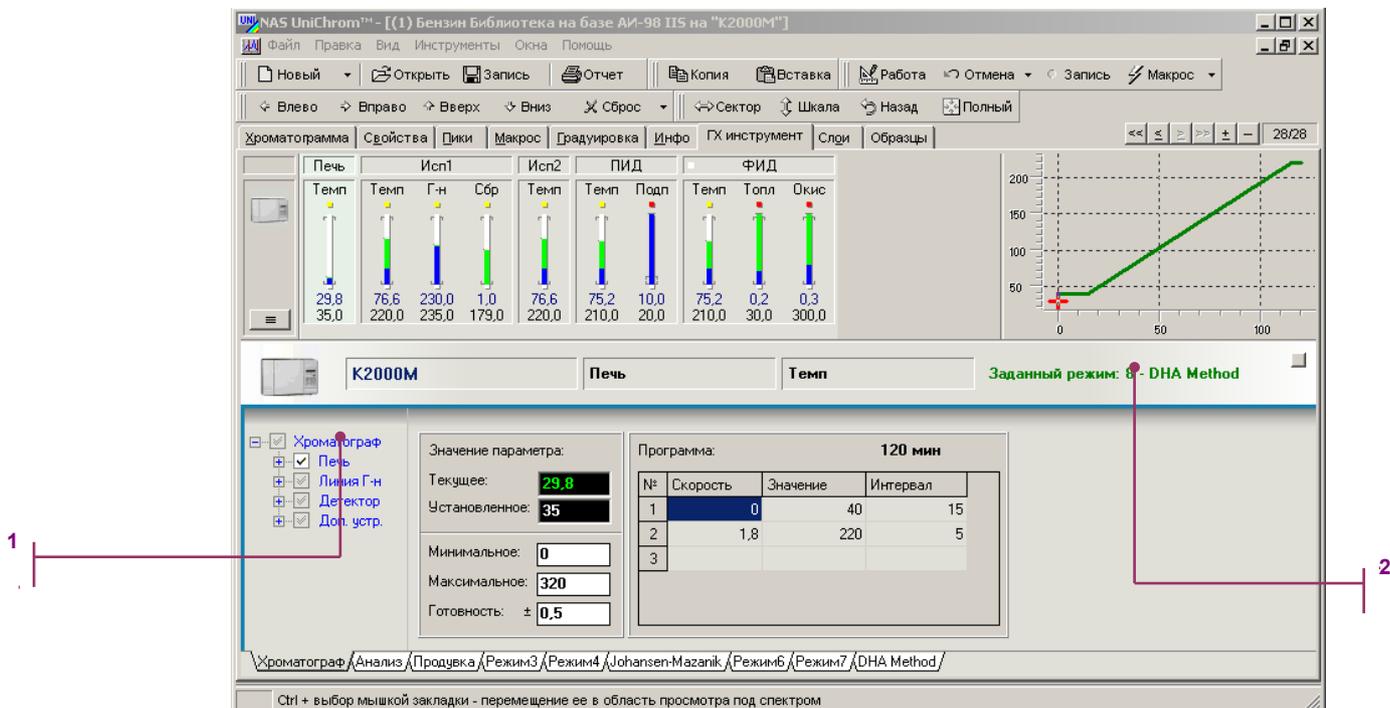
Пункт “Создать копию” добавляет новую страницу “Режим...” в книгу режимов как копию указанного метода. Это сделано с целью, чтобы не задавать заново настройки для всех регуляторов. На вновь созданной странице достаточно изменить только несколько параметров, например, программу температуры колонки или программу для газового регулятора и др.

Все операции по редактированию методов за исключением редактирования метода “Хроматограф” не посылают команд в сам прибор. То есть для всех режимов, кроме режима **Хроматограф**, можно спокойно изменять настройки и не бояться, что ошибочно введенные настройки попадут в прибор.

Загрузка выбранного метода в прибор осуществляется выбором пункта меню “Загрузить”. Об успешной загрузке метода сообщает сам прибор на своём дисплее (если, конечно, такой дисплей имеется). Загруженные данные от прибора попадают на страницу **Хроматограф**, где также можно проконтролировать загрузку метода.

Рис. 15. Информация о заданном режиме работы хроматографа

1 – для изменения названия режима можно щёлкнуть по его названию на панели конфигурации прибора; 2 – кроме этого информация о загруженном методе содержится здесь.



Все режимы хранятся вместе со спектром хроматограмм в одном файле. Режим **Хроматограф** не сохраняется, так как при открытии файла настройки регуляторов на этой странице забиваются настройками из заданного метода.

Если хроматограммы были сохранены с каким-либо заданным методом, то при открытии файла хроматограмм и подключении к прибору автоматически в хроматограф передаются сохранённые настройки заданного метода.

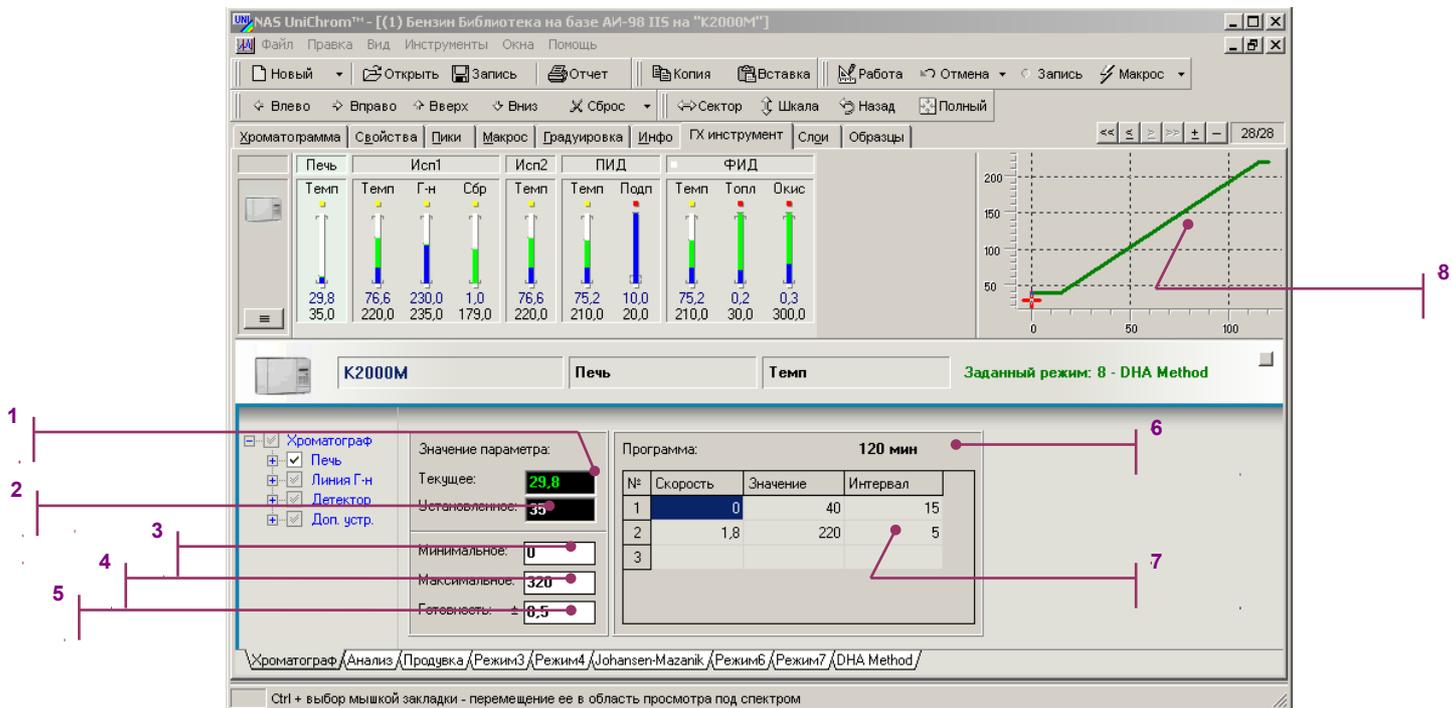
### 2.6.1.3 Температурные регуляторы

Для всех регуляторов, в том числе и температурных, в программе UniChrom v.4.5 задаются значения следующих параметров:

- **Минимальное значение.** Определяется возможностями физических регуляторов. По умолчанию минимальное значение температуры обогреваемой зоны, которую может установить прибор, принимается равным нулю. Как правило, в самих приборах такой параметр не задаётся. В UniChrom минимальное значение температуры можно использовать для отображения некритической аварии. Если, например, установить минимальное значение для температуры термостата колонок равным 50, то при остывании термостата по каким-либо причинам ниже указанной температуры, индикатор готовности изменит цвет на красный. При программировании регулятора невозможно установить значение температуры меньше минимального значения;
- **Максимальное значение.** Определяется возможностями физических регуляторов. Максимальное значение температуры термостата определяется также возможностями хроматографической колонки. При превышении температуры термостата над максимальным значением индикатор готовности регулятора изменит цвет на красный. Современные приборы позволяют задавать этот параметр с целью предотвращения критического перегрева. При программировании регулятора невозможно установить значение температуры больше максимального значения;
- **Готовность.** Большинство современных хроматографов контролируют готовность какого-либо параметра по такому критерию, чтобы модуль разности измеренного и установленного значения параметра не превышал диапазона готовности. Не все приборы принимают эту установку от компьютера. Если приборы поддерживают такие настройки (см. описание к хроматографу), то изменение готовности регулятора перепрограммирует физический регулятор прибора. Готовность в программе влияет на цвет индикатора готовности, как отдельного регулятора, так и прибора в целом. Не всегда готовность в программе соответствует готовности прибора. У хроматографа может задаваться время ожидания, которое отсчитывается после выхода на режим всех регуляторов. По истечении этого времени хроматограф приходит в готовность, а программа будет показывать готовность сразу после выхода на режим всех регуляторов;
- **Установленное значение.** Рабочее значение температуры;
- **Программа.** Задаётся в том случае, если регулятор прибора программируется, и прибор позволяет задать программу температуры для данного регулятора. UniChrom в общем случае позволяет программировать все регуляторы. При создании программы для регулятора в области панели программных регуляторов отображается динамически изменяющийся градиент. То есть оператор при наборе программы видит не только цифры, но и сам график.

Рис. 16. Общие настройки регуляторов

1 – текущее значение; 2 – установленное значение; 3 – минимальное значение; 4 – максимальное значение; 5 – готовность; 6 – длительность программы; 7 – программа; 8 – график программы.

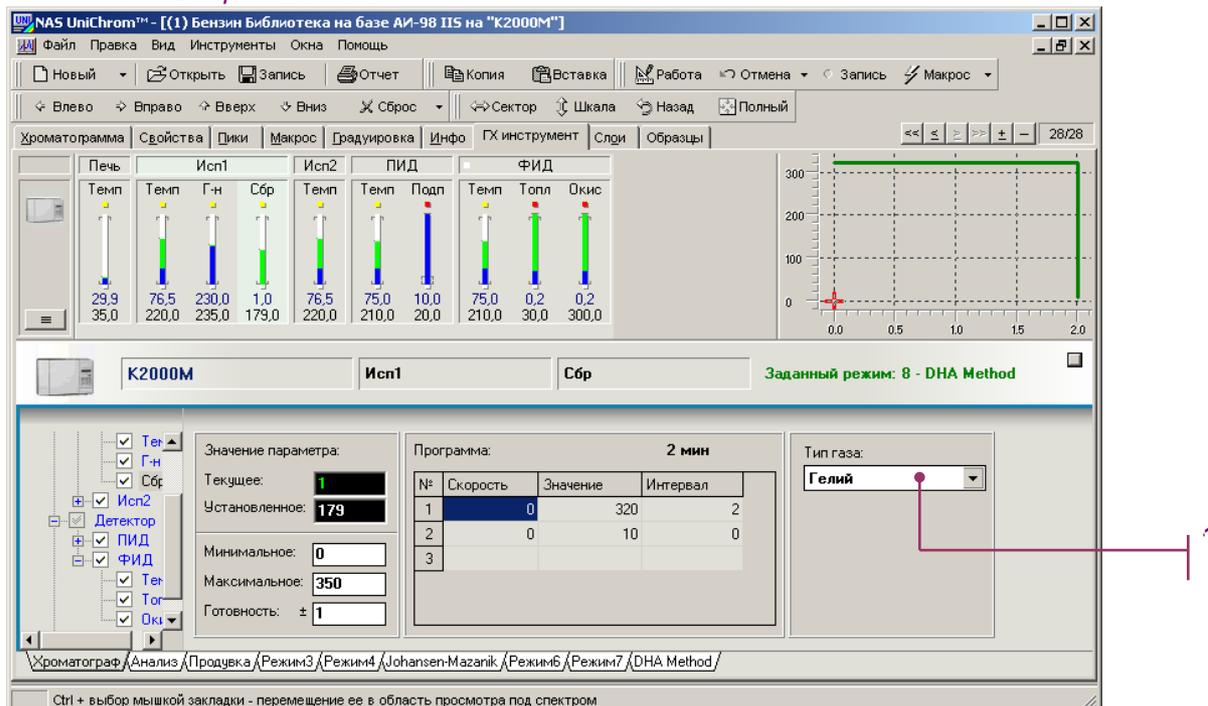


### 2.6.1.4 Газовые регуляторы

Структура газовых регуляторов и работа с ними аналогична температурным регуляторам. Отличительной особенностью является то, что появляется дополнительная газовая панель, позволяющая ввести специфические газовые настройки. В первую очередь, это тип газа.

Рис. 17. Выбор типа газа для газового регулятора

1 – выбор типа газа.

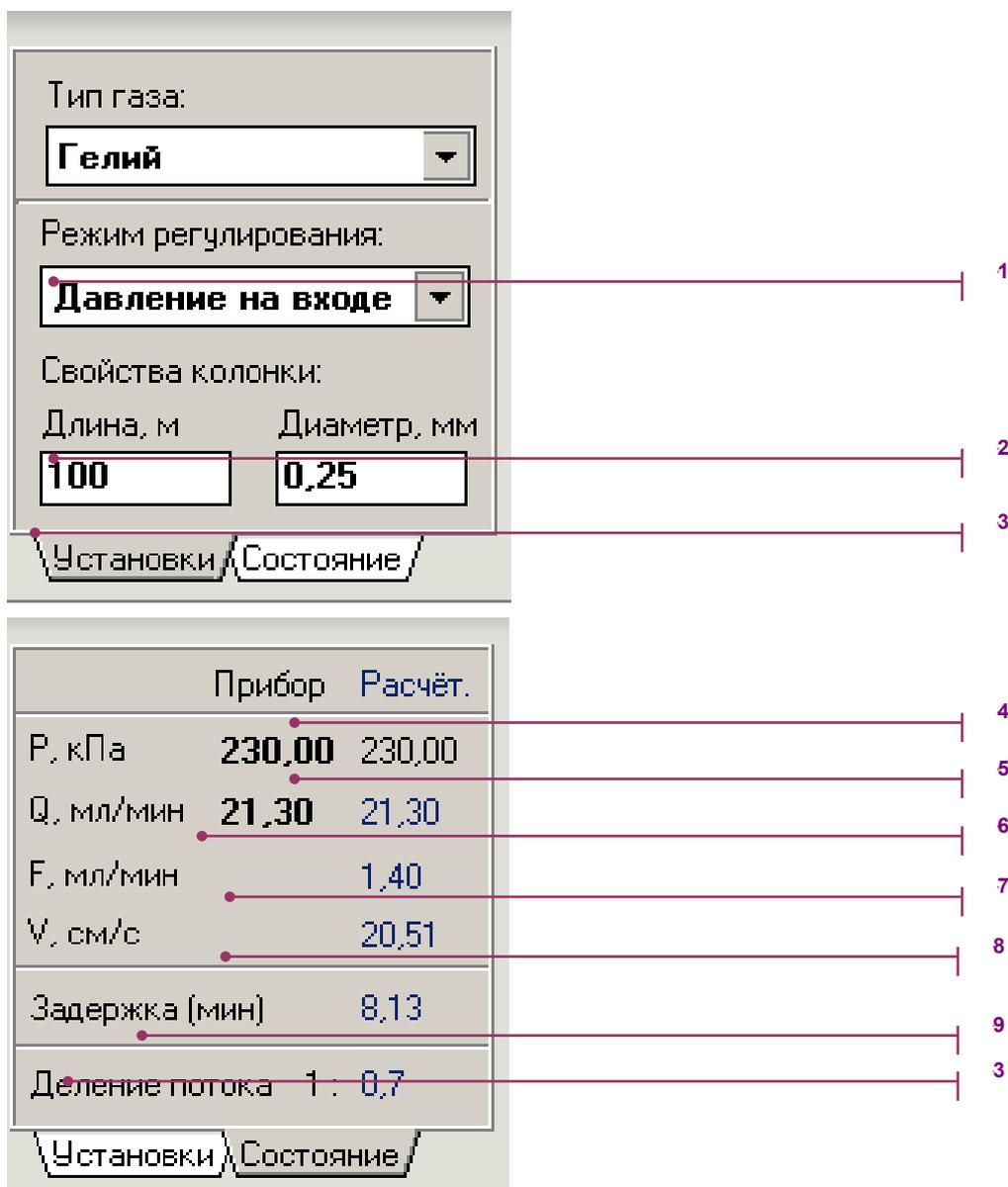


### 2.6.1.5 Регулятор газа-носителя

Для регулятора газа-носителя газовая панель выглядит так:

Рис. 18. Газовая панель для регулятора газа-носителя

1 – выбор режима (“Расход”, “Давление”, “Скорость”, “Поток”); 2 – параметры колонки; 3 – газовый калькулятор; 4 – давление на входе в колонку; 5 – суммарный расход газа-носителя; 6 – поток через колонку; 7 – средняя скорость газа-носителя; 8 – мертвое время; 9 – деление потока.



Указанные на 2.6.1.5 расчётные параметры определяются для текущей температуры термостата и нормального атмосферного давления на выходе из колонки.

### 2.6.2 Установка нескольких инструментов одного типа

Если к компьютеру подключено более одного устройства одного типа, установите каждое устройство и задайте им рабочие параметры.

Устройства одного типа обязаны отличаться коммуникационными портами, через которые они подключены, а также могут отличаться по частоте сбора данных и по другим параметрам.

### 2.6.3 Установка драйверов и регистрация в системном реестре

Операция копирования файлов и регистрация установленных устройств в системном реестре выполняются автоматически при закрытии окна редактора конфигурации.

Если устройство было удалено, то соответствующие файлы и регистрация этого устройства автоматически удаляются также при закрытии окна редактора.

## 2.6.4 Меню редактора конфигурации

В редакторе конфигурации имеется возможность выполнять выше перечисленные операции с использованием меню программы.

В командах меню дублируются основные функции редактора: добавление, удаление и настройка параметров устройств. Эти команды меню выполняются только для выбранного устройства.

Меню позволяет выполнить установку драйверов и регистрацию устройств, не дожидаясь закрытия программы редактора. Для этого необходимо щёлкнуть на пункт **Правка** и выбрать команду **Сохранить изменения**.

## 2.6.5 Кабель RS-232

Кабели последовательного интерфейса RS-232C бывают нескольких видов. Их различие в основном определяется типами оборудования находящимися на концах кабеля. Оборудование бывает двух типов:

- DTE – data terminal equipment (оборудование терминалов, например компьютер);
- DCE – data communication equipment (коммуникационное оборудование, например модем).

Обычно производится соединение оборудования DTE<->DTE и DTE<->DCE (DCE<X>DCE не соединяется друг с другом).

Кабель DTE-DTE предназначен для соединения терминального оборудования друг с другом. На обоих концах кабеля должны быть разъемы типа "F" – ("дырочки").

Такой кабель предназначен для соединения блоков АЦП L-net с ПК. Этот кабель также может быть использован для соединения ПК – HP-6890, ПК – "Кристаллюкс-4000".

Особенностью кабеля DTE-DTE является то, что сигналы RXD и TXD перекрещиваются, RXD->TXD, TXD->RXD.

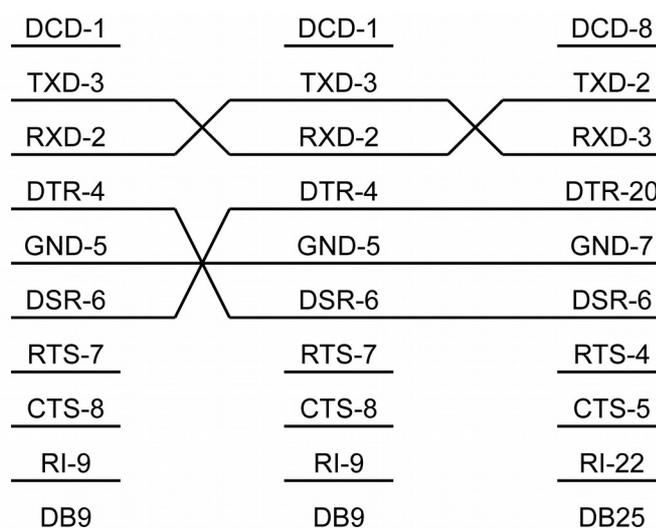
Для присоединения к ПК приборов типа HP-5890, "Кристалл-2000М" используется кабель типа DTE-DCE. Кабель DTE-DCE является стандартным кабелем для модемного оборудования. Для ПК предназначен конец кабеля с разъемом типа "F". Для оборудования – разъем типа "M" ("штырьки").

Особенностью кабеля DTE-DCE является то, что сигналы RXD и TXD не перекрещиваются, а идут прямо RXD->RXD, TXD->TXD.

Для присоединения блоков АЦП к компьютеру используется модифицированный DTE-DTE кабель. Его не рекомендуется использовать для соединения компьютеров между собой.

В зависимости от конфигурации компьютера используется кабель D9-D9 или D9-D25. К блоку АЦП подключается разъем D9, к компьютеру подключается разъем D9 или D25. При распайке кабеля необходимо использовать только правую (D9-D25) или только левую (D9-D9) часть схемы, приведенной ниже.

Рис. 20. Схема кабеля DTE-DTE RS-232 для соединения блоков АЦП с компьютером



## 2.7 Конфигурация ВЭЖХ систем

### 2.7.1 Конфигурация ВЭЖХ систем из модулей в системе UniChrom

Системы для жидкостной хроматографии состоят из чётко определённых по функциональному назначению блоков. Можно перечислить эти функциональные единицы:

- Насосы
- Термостат колонок
- Динамический смеситель (формирователь градиента)
- Детекторы

Следует отметить, что блоки различной функциональности представляют собой физически различные приборы, каждый со своим собственным способом подключения, которые, тем не менее необходимо объединить в одну систему, и обеспечить управление ею, как единым прибором.

Разнообразные подходы к конфигурации системы в той или иной мере предлагают редактор конфигурации, где каждому из блоков задаются параметры настройки, а затем при выполнении анализа передаются методические параметры. Эти аспекты являются общими для всех CDS.

Если практически идентичные системы, реализующие одну (или схожие методики анализа), обладающие одинаковой структурой, но обладающие разными типами насосов (термостатов, смесителей), то в этом случае в 95% случаев перенос файлов метода (в электронном виде) невозможен.

Проблема невозможности переноса в основном определяется тем, что производители ПО для управления хроматографической системой складывают в методических документах (файлах) специфические параметры оборудования, вместо того чтобы складировать параметры методические (не зависящие от оборудования, а только от физико-химических процессов, которыми нужно управлять при проведении анализа).

Возьмём, например, любое описание методики ВЭЖХ анализ (из фармакопеи или утверждённый стандарт, или научную статью). Описание содержит сведения о величинах потока, типах фазы колонки, способе формирования градиента (концентрации или pH), но отнюдь не содержит описание того, что «насосу 1 задали временную программу типа линейная зависимость расхода от времени со скоростью X мкл/мин/мин». Подобные мелочи возлагаются на программное обеспечение прибора, но аналитику при переносе методики с прибора на прибор приходится прибегать к исходному варианту метода, выраженного на «человеческом языке», который на самом деле является достаточно абстрактным физическим описанием методики, и которому место в методическом файле – задании для прибора.

Целью разработчиков программного обеспечения UniChrom было создание такой структуры представления методических параметров для аналитического инструмента, которая бы позволила практически «с листа» переносить описание метода в программное обеспечение, а затем переносить подготовленный абстрактный метод между разнотипными приборами, но такими, чьи характеристики позволяют проводить указанный тип анализа и обеспечивают указанные диапазоны изменения и измерения физических величин, характеризующих метод анализа.

Эта цель была выполнена посредством создания внутри ПО объектно-ориентированной модели прибора, и перевода методических параметров в область описаний в виде:

- аналитический прибор – совокупность объектов прибора (зон управления)
- объект прибора – совокупность датчиков-измерителей (управляющих устройств) физических параметров.
- датчик – измеритель и управляющее устройство для физической величины, управляющей анализом.

Система построена так, что за функциональность измерительного прибора (аналитического инструмента) отвечает драйвер – обычный динамически загружаемый модуль, удовлетворяющий спецификациям на программный интерфейс, описанным в UniChrom DDK (Device Development Kit -набор программиста для разработки драйверов устройств) .

## 2.7.2 Программная модель жидкостного хроматографа

В рамках системы UniChrom ВЭЖХ прибор имеет следующие компоненты:

Компонент системы	Зоны	Датчики
Блок насосов	Насос А, Насос В, Насос С, Насос D	Расход, Давление
Колонка	-/-	Расход, Давление, Температура
Детекторы	Детектор А - D	Температура, параметры регистрации

## 2.7.3 Драйверы

Использование драйверов позволяет вынести функциональность, специфичную для данного типа оборудования из общего кода системы в отдельный модуль, что значительно ускоряет разработку. притом что изменения в одном из модулей не влияют на все остальные. Эта концепция давно применяется в различных разработках и в этом нет ничего нового. Один драйвер отвечает за функционал одного или нескольких приборов одного типа. Начало сеанса измерения с аналитическим прибором означает выполнение CDS следующей цепочки действий:

1. Открытие устройства.
2. Определение конфигурации устройства
3. Передача устройству новой конфигурации (если необходимо)
4. Передача устройству методических параметров
5. Открытие аналитических каналов данных (для сбора данных с детекторов)
6. Регистрация, сохранение и обработка аналитических данных
7. Завершение сессии с прибором.

На всех вышеперечисленных этапах CDS взаимодействует с ВЭЖХ системой как с единым целым, монолитным прибором, каковыми являются например: Agilent 1x00, Милихром-6, Милихром-A02 и др., которые представляют собой хоть и модульную систему, но с централизованным управлением.

Как поступить с системой состоящей из нескольких разных блоков различных производителей, но которые должно объединить в один монолитный прибор с учётом особенностей управления каждым из них. Воспользовавшись особенностями программной архитектуры драйверов устройств UniChrom, была предложена и реализована концепция кластерных драйверов.

## 2.7.4 Кластерные драйверы

Кластерный драйвер – драйвер аналитического прибора, не имеющий собственной функциональности, а предоставляющий CDS функциональность входящих в него частей.

Рассмотрим в качестве примера ситуацию с модулями составляющими ВЭЖХ систему производства ЗАО «Аквилон» г. Москва. Предположим в наличии имеется 1 насос, 1 кондуктометрический детектор и 1 термостат колонок. В принципе нет никаких проблем для разработки одного драйвера, который поддерживает все этих три устройства, но что делать если к системе добавят ещё один детектор - например рефрактометр. Либо писать драйвер с поддержкой измерительных устройств на все случаи жизни, либо обеспечить возможность включения в систему произвольных устройств, удовлетворяющих определённым критериям.

Пусть программа делает одно действие, но делает его хорошо.

Драйверы системы UniChrom устроены так, что если его «спрашивают» о возможностях, которых в драйвере нет, то он и «ответит», что их там нет. Например, если у драйвера насосов «спросить» о наличии там сканирующего спектрофотометра, то он «ответит» нет и не будет.

Предположим, что у нас есть драйвер, который может опрашивать другие драйверы, причём делает он это таким образом, что проходит список драйверов, пока не получит положительный ответ на свой вопрос или пока не кончится список.

	Есть ли НАСОС 1	Есть ли датчик давления	Есть ли датчик темп. колонки	Есть ли датчик температуры детектора	Есть ли детектор типа кондуктометр
Драйвер насосов	+	+	-	-	-
Драйвер кондуктометра	-	-	-	+	+
Драйвер термостата колонок	-	-	+	-	-
Составной драйвер или «кластер»	+	+	+	+	+

Из таблицы видно, что каждый драйвер, входящий в «кластер» представляет собой «слой» или уровень. Местоположение драйверов в слое определяется конфигурацией кластера и выполняется с помощью редактора конфигурации системы UniChrom. Каждый из драйверов, входящих в составной прибор устанавливается отдельно и виден системой как отдельное устройство, что позволяет производить диагностику неисправностей по модулям. Если каждый из модулей функционирует правильно – то «кластер» должен работать.

Драйвер «кластера» также содержит в себе функциональность по передаче сигналов об изменении состояния измерительной системы между её составными частями. Например, сигнал «подготовка к измерению» будет доставлен всем уровням системы. Каждый из уровней системы оповещает об изменениях своего состояния кластер. Если, например, модуль насосов обнаруживает окончание градиентной программы, то он уведомляет кластер, тот в свою очередь уведомляет метод, а метод переводит весь кластер в состояние «окончание измерения» и анализ завершается.

В качестве драйверов, обслуживающий сбор сигналов с детектора можно использовать любые драйверы АЦП системы UniChrom, что позволяет комплектовать ВЭЖХ систему практически из того, что есть под руками.

## 2.7.5 Нумерация измерительных каналов в кластере

Нумерация каналов у каждого экземпляра прибора (даже если это одинаковые приборы) своя собственная. Например, если установлено два драйвера «Кристалл-5000» и оба настроены на разные порты, то списки каналов у каждого из них свои, и начинаются с 1.

Кластерный драйвер представляет собой «контейнер», объединение нескольких разных экземпляров разных устройств под одной «крышей». Каждый уровень кластера имеет свою нумерацию каналов, поэтому, для различия каналов каждого уровня введён сдвиг нумерации, примерно как нумерация комнат в некоторых зданиях (1-й этаж – комнаты 101 и т.д., 2-й этаж – комнаты 201....., N-й этаж – комнаты N01... ). Номер уровня определяет количество сотен в номере канала, а количество единиц – номер канала на данном уровне.

Уровень	Драйвер	Номера каналов
1	Насосы (marathon2.dll)	Измерительные каналы отсутствуют
2	Блок АЦП E-24 (e-24.dll)	101 ... 104
3	Кондуктометр CD-510 (stayercd.dll)	201 ... 204

ВЭЖХ

## 2.7.6 Примеры конфигурации ВЭЖХ систем.

Рассмотрим примеры конфигурации системы.

### 2.7.6.1 Изократическая система с кондуктометрическим детектированием на базе модулей «Аквилон».

В состав системы входит – модуль управления насосами «Марафон» серии 2, термостат колонок, кондуктометрический детектор.

Модуль управления насосами «marathon.dll» поддерживает до 4-х насосов, динамический смеситель и термостат колонок. Так как система изократическая, то требуется конфигурировать только насос «А» и термостат колонок (требуется установить порты подключения насоса и термостата). Это делается в стандартном окне редактора конфигурации на странице «Насосы» и «Термостаты».

Для настройки детектора следует установить драйвер «Стайер-КД» (настроить порт подключения детектора).

После установки и настройки можно провести проверку каждого из узлов по-отдельности.

Переходим к конфигурации «кластера» - составного устройства.

Требуется установить драйвер «HPLC Cluster».

На странице «Реестр» необходимо добавить два параметра:

Level1 = 0

Level2 = 1

Число содержащееся в параметре LevelX – это номер ветки конфигурации, где хранятся настройки драйвера соответствующего уровня. Номер ветки конфигурации можно узнать в свойствах драйвера на странице «Общие». Ветка реестра записывается в виде «I0» - английская буква «I» и номер ветки «0».

В нашем примере первым устанавливался драйвер «Марафон», значит если перед ним не устанавливались другие устройства, то номер его ветки будет – 0. Вторым устанавливался «Стайер-КД», значит номер его ветки - 1.

## 2.8 Запуск программы Uwin32.exe

Операционная система Windows предоставляет пользователю различные способы запуска программ. Наиболее простые и достаточно распространённые способы запуска программы системы UniChrom приведены ниже. Выполните любой из них.

### 2.8.1 Запуск с рабочего стола Windows

Для запуска главного исполняемого модуля системы UniChrom дважды щёлкните ярлык программы на рабочем столе Windows или, если двойной щелчок не получается, щёлкните правой кнопкой на ярлык и выберите команду **Открыть**.

### 2.8.2 Запуск программы через системное меню

- 1) Нажмите , установите указатель на пункт **Программы** и раскройте группу программ **New Analytical Systems**;
- 2) Выберите команду **UniChrom for Windows' 95 & NT**.

### 2.8.3 Автоматический запуск при включении компьютера

Операционная система Windows позволяет настроить автоматический запуск программы при включении компьютера. Для этого требуется выполнить ниже приведенные действия.

- 1) Нажмите , установите указатель на пункт **Настройка** и выберите команду **Панель задач и меню**;
- 2) На вкладке **Настройка меню** нажмите кнопку **Добавить**;
- 3) Нажмите кнопку **Обзор**;
- 4) В поле **Папка** выберите диск, на котором установлена программа системы UniChrom;
- 5) В списке папок найдите ту, в которую установлен исполняемый модуль программы;
- 6) Дважды щёлкните UWin32.exe и нажмите кнопку **Далее**;
- 7) В списке папок выберите папку **Автозагрузка** и нажмите кнопку **Далее**;
- 8) Введите имя для ярлыка, например UniChrom, и нажмите кнопку **Готово**.

Прим. Ярлыки в папке Автозагрузка и на рабочем столе Windows это две разные ссылки на исполняемый модуль системы UniChrom.

### 2.8.4 Запуск при открытии файла данных

При инсталляции программного обеспечения системы UniChrom в Windows происходит автоматическая регистрация типов файлов данных системы UniChrom и устанавливается соответствие между типами файлов и программой UWin32.exe.

Указанная особенность операционной системы позволяет автоматически запустить программу при открытии файла данных. Для этого достаточно открыть папку с файлами данных и дважды щёлкнуть файл с расширением **\*.\$\$\$** или **\*.tsp**.

### 2.8.5 Параметры запуска программы Uwin32.exe

- 1) Щёлкните правой кнопкой ярлык программы и выберите команду **Свойства**;
- 2) На вкладке **Ярлык** в поле **Объект** в конце пути к файлу программы добавьте через пробел ключ запуска:
  - Чтобы запустить программу вместе с консольным окном, в котором отображается состояние системы UniChrom, состояние оборудования и сообщения об ошибках, введите – **debugsession**;
  - Чтобы состояние системы UniChrom, состояние оборудования и сообщения об ошибках сбрасывались в текстовый файл в процессе всего сеанса работы с программой, введите – **debugsession:filename**, где **filename** – полный путь к файлу. Например, **c:\lunichrom\uclog.txt**. Если указанный файл отсутствует на диске, то он будет автоматически создан при запуске программы.
- 3) Используйте в дальнейшем данный ярлык для запуска программы с параметрами.

### 2.8.6 Дополнительные сведения

Для получения дополнительной справки по теме запуска программ, выполните следующие действия:

- 1) Нажмите  и выберите команду **Справка**.
- 2) На вкладке **Указатель** в поле строки поиска введите ключевые слова **Запуск программ**.
- 3) Выберите тему справки из списка и нажмите кнопку **Вывести**.

## 2.9 Опробование

Опробование системы UniChrom проводится с целью проверки правильности:

- подключения аналитического оборудования;
- установки и настройки программного обеспечения.

В процессе опробования должны тестироваться все измерительные каналы системы.

Выполните тестирование каждого измерительного канала в соответствии с нижеследующими инструкциями.

### 2.9.1 Тестирование измерительного канала

Шаг 1 Включите приборы и компьютер. При наличии в измерительном канале модуля ADC L-net включите сначала блок аналого-цифрового преобразователя, а затем хроматограф.

Шаг 2 Запустите программу системы UniChrom.

Шаг 3 Создайте окно спектра, соответствующее типу тестируемого устройства:

- в меню программы **Файл** выберите команду **Новый метод**;
- дважды щёлкните значок, соответствующий типу тестируемого устройства. Обозначения типов устройств в системе UniChrom следующие:

Значок типа	Устройства, соответствующие данному типу
 ГХ	“Кристалл-2000М”, “Кристалл-5000”, “Кристаллюкс-4000”, HP 4890, HP 5890, HP 6890, Shimadzu GC-17A, ”Цвет-800”, “Цвет-800” & ADC L-net, “Цвет-500” & TCB & ADC L-net
 ЖХ	Стайер & ADC L-net, Милихром-5, Милихром А-02
 АЦП	ADC L-net, Counter, SoundBlaster, E-24, ”МультиХром-16”, “МультиХром-24”

- Убедитесь в том, что окно спектра соответствует выбранному типу устройства. При выборе типа **ГХ** (газовый хроматограф) в окне спектра должна появиться вкладка **ГХ инструмент**. При выборе типа **ЖХ** (жидкостной хроматограф) в окне спектра должна появиться вкладка **ЖХ инструмент**. При выборе типа **АЦП** инструментальная вкладка в окне спектра должна отсутствовать.

Шаг 4 Выберите устройство:

- 1) Нажмите кнопку **Настройки**  на панели инструментов;
- 2) Дважды щёлкните значок тестируемого устройства;
- 3) Убедитесь в том, что значение свойства спектра с именем **Iname** (instrument name) на вкладке спектра **Свойства** соответствует названию выбранного устройства.

Шаг 5 Задайте режим работы аналитического оборудования – установите параметры работы оборудования, которые не управляются программно, средствами самого хроматографа.

### 2.9.2 Задание режима работы газового хроматографа

- 1) Перейдите на инструментальную вкладку спектра **ГХ инструмент**;
- 2) Убедитесь, что индикатор **Активность** мигает зелёным цветом. Это означает, что связь с хроматографом имеется, и все индикаторы на данной вкладке отображают текущее состояние хроматографа;
- 3) Щёлкните в поле **Термостат** и отредактируйте таблицу температурной программы;
- 4) Щёлкните в поле **Детектор**, задайте температуру детектора и расходы газов (поддув, топливо и окислитель). Хроматограф сразу реагирует на ввод новых значений параметров и начинает автоматически устанавливать их.

### 2.9.3 Задание режима работы жидкостного хроматографа

- 1) Перейдите на инструментальную вкладку спектра **ЖХ инструмент**;
- 2) Введите верхний и нижний пределы давлений в барах и нажмите кнопку **Установить**;
- 3) Заполните таблицу **Программа потоков**;
- 4) Нажмите кнопку **Включить** и убедитесь, что индикатор **Активность** замигал зелёным цветом. Это означает, что связь с хроматографом установлена, и все индикаторы на вкладке **ЖХ инструмент** отображают текущее состояние хроматографа.

Шаг 6 Укажите номер измерительного канала и длительность измерения:

- На вкладке спектра **Свойства** в графе **Значение** для параметра с именем **Channel** введите номер измерительного канала;
- На вкладке спектра **Свойства** в графе **Значение** для параметра с именем **XEnd** введите длительность измерения.

Шаг 7 Настройте диапазон измерения для ADC L-net: на вкладке спектра **Свойства** задайте значения параметров с именем **RangeMode** и **RangeScale**. Значения этих параметров приводятся в паспорте устройств сети L-net. Данный пункт можно пропустить, если в регистрации сигнала детектора не участвует измерительный модуль ADC L-net.

### 2.9.4 Запуск измерения

- 1) Нажмите кнопку **Измерение**  на панели инструментов. Убедитесь, что индикатор состояния спектра отображается красным цветом, и номер канала в области индикатора соответствует установленному значению. На дисплее спектра отображается сигнал детектора;
- 2) Дождитесь выхода данного хроматографа на заданный режим работы, ориентируясь по показаниям программных и (или) приборных индикаторов;
- 3) Нажмите кнопку **Старт** на приборе или кнопку **Измерение**  на панели инструментов. Убедитесь, что индикатор состояния спектра изменил цвет с красного на зелёный, на вкладке **Спектр** в области индикатора **Л.м. Время** изменяются цифры, указывающие текущее время измерения с момента старта, а на дисплее спектра отображается сигнал детектора.

Результат тестирования: если сигнал детектора получен, то данный измерительный канал системы UniChrom работает. Устройство подключено правильно. Программа установлена и настроена на данное устройство правильно.

### 2.9.5 Разрешение вопросов по регистрации сигналов и управлению хроматографами

Если возникают вопросы или проблемы, не рассмотренные ниже, обратитесь к поставщику системы UniChrom или к ООО “НАС” для получения консультаций.

Симптомы	Действия по устранению
Измерение прекращается на четвёртой минуте регистрации. Программа перешла в демонстрационный режим и постоянно сообщает об этом.	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Отошёл или испортился электронный ключ защиты программного обеспечения. Проверьте и переустановите электронный ключ;</li> <li>– Нет соответствия версий для модулей программы. Переустановите программное обеспечение системы UniChrom.</li> </ul>
Не запускается вторая копия программы системы UniChrom.	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Так должно быть. Допускается работа только с одной копией программы UniChrom.</li> </ul>
При подготовке к измерению, после нажатия кнопки <b>Измерение</b>  , система сообщает, что канал устройства занят или не открывается.	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Устройство не включено. Включите его;</li> <li>– Неправильно выбрано устройство для анализа. Выберите это устройство, используя команду <b>Настройки</b> ;</li> <li>– Уже идёт измерение по данному каналу в другом окне. Остановите это измерение;</li> <li>– Устройство неправильно сконфигурировано. Измените конфигурацию устройства, используя редактор конфигурации системы UniChrom.</li> </ul>

Симптомы	Действия по устранению
<p>Невозможно выбрать устройство, так как нет значка устройства в окне <b>Выбор инструмента</b> после нажатия кнопки <b>Настройки</b></p> 	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Устройства не установлены. Запустите редактор конфигурации системы UniChrom и установите необходимое оборудование;</li> <li>– Устройства установлены с пустым названием. Используйте редактор для изменения параметра (<b>item name</b>) данного устройства;</li> <li>– Неправильно указаны порты устройств. Используйте редактор для редактирования параметров <b>ComName</b> всех установленных устройств.</li> </ul>
<p>Индикатор состояния спектра показывает, что измерение идёт, но сигнала от ADC LNet не отображается и время на индикаторе <b>Л.м. Время</b> не изменяется.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Блоки ADC L-net выключены. Включите устройства регистрации сети L-net;</li> <li>– Обрыв кабеля. Проверьте исправность линии RS-232 и RS-485;</li> <li>– Выключите и включите блок, связанный с компьютером. Выключите и включите блок, от которого нет сигнала;</li> <li>– Номер канала на вкладке <b>Свойства</b> не соответствует номеру канала блока. Установите соответствующий номер канала;</li> <li>– Проверьте исправность порта компьютера.</li> </ul>
<p>Не регистрируется сигнал детектора.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Детектор подключен неправильно или произошёл обрыв сигнального кабеля. Проверьте целостность и правильность подключения сигнального кабеля к детектору.</li> </ul>
<p>Длительность измерения не соответствует указанной в свойствах спектра длительности.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Частота сбора данных для устройства, прописанная в реестре, не соответствует частоте регистрации прибора. Отредактируйте параметр <b>DriverFreq</b> для данного устройства, используя редактор конфигурации системы UniChrom.</li> </ul>
<p>Хроматограф не выходит на режим, заданный программно. Не моргает индикатор <b>Активность</b> на инструментальной вкладке спектра.</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Убедитесь в том, что эти функции заложены в самих приборах и поддерживаются программным обеспечением системы UniChrom;</li> <li>– Запустите редактор конфигураций и правильно настройте параметр <b>ComName</b> для всех подключенных устройств;</li> <li>– Проверьте целостность кабеля, соединяющего устройство с компьютером;</li> <li>– Проверьте правильность подключения к компьютеру;</li> <li>– Проверьте исправность порта компьютера;</li> <li>– Некоторые хроматографы автоматически отключают нагрев зон при отсутствии газа носителя;</li> <li>– Произошёл сбой в хроматографе. Выключите и включите хроматограф.</li> </ul>

## 3 Основные операции



## 3.1 Кратчайший путь к цели

Целью работы с любой хроматографической системой является, прежде всего, получение отчёта, то есть электронной или бумажной формы, содержащей рисунок хроматограммы, условия проведения эксперимента, таблицу пиков со временами удерживания, высотами, площадями и концентрациями соответствующих им компонентов.

### 3.1.1 Как это сделать быстрее?

Итак, начнём:

- 1) Запустим программу UniChrom;

- 2) Откроем чистое окно для нашей работы, нажав кнопку ;
- 3) У чистого окна выберем ярлычок “Свойства” (у окна есть внизу ярлычки как у телефонной книги), и в графе “Конец спектра” укажем длительность хроматограммы в минутах (например – 15), а в графе “Канал” – номер канала соответствующего выбранному детектору хроматографа. Не обязательно, но можно назвать наш анализ в графе “Имя спектра” (например – Мой первый анализ пестицидов);
- 4) Перелистаем страничку окна опять на “Спектр”. Теперь на оси времени мы видим указанное нами время;
- 5) Укажем нашему окну, что мы будем стартовать измерение кнопкой на блоке АЦП. Для этого

нажмем на кнопку  один раз. Заголовок окна изменится – например “Мой первый анализ пестицидов /2/”. Это означает, что второй канал ожидает старта. Подготовьте и введите пробу в

хроматограф и нажмите кнопку на блоке АЦП. Или нажмите  еще раз;

- 6) Анализ начался, заголовок окна изменился еще раз – “Мой первый анализ пестицидов [2]”. В

окне спектра будут меняться два параметра 

Л.м. Время, мин	Л.м. Сигнал
1	0,0000

, которые обозначают соответственно текущее время анализа в минутах и текущее измеренное значение хроматографического сигнала (в вольтах или наноамперах);

- 7) Если нам нужно прервать измерение, то нажмем кнопку  еще раз и на вопрос системы о том, стоит ли прервать измерение, ответим “Да”. Если нужно начать сначала, то возвратимся на пункт 3.1.1. Измерение завершилось. Заголовок окна возвратился в “Мой первый анализ пестицидов (2)”;
- 8) Обработка хроматограммы производится с помощью окна обработки, где собраны все функции системы UniChrom по обработке хроматограмм. Чтобы это окно появилось, нажмем кнопку



Мы увидим окно с несколькими страницами, название которых говорят сами за себя: “Сглаживание”, “Поиск пиков”, “Правка пиков”, “Расчёт”, “Отчёт”, “Библиотека”. Внизу этого окна находятся кнопки [Применить] и [Закрыть]. При выборе соответствующей закладки в окне, нужных параметров для данной операции на листке этого “блокнота” и нажатии кнопки [Применить] выбранная операция применяется либо к фрагменту, либо к спектру;

- 9) В идеальном случае мы должны выбрать “Поиск пиков” и “Применить” его ко всему спектру;
- 10) При неправильной расстановке автоматикой пиков можно изменить параметры поиска или исправить их вручную с помощью “Правки пиков”;
- 11) Назвать пики (расставить их имена) можно в окне хроматограммы на страничке “Спектр”: двойной щелчок мышью на пике вызовет окно установки параметров пика (затем параметры можно “Запомнить” или “Отменить”), либо на страничке “Пики”: первая графа таблицы пиков содержит их имена, которые можно редактировать;
- 12) Расчёт концентраций веществ произведем с помощью окна обработки, выберем закладку “Расчёт” и “Применим” например “Внутреннюю нормализацию”;

- 13) Нажмем, наконец, кнопку  в панели инструментов и получим твердую копию отчёта в нужном нам количестве копий;

- 14) Если нужно сохранить хроматограмму для последующего использования, нажмём кнопку , в открывшемся диалоге введём имя файла (например, “Мой первый анализ пестицидов. \$\$\$”), в котором мы хотим сохранить нашу хроматограмму и нажмём “Ввод”;

- 15) Закроем окно хроматограммы;

- 16) Работа окончена.

### 3.1.2 Попробуем это автоматизировать

Если полученные в предыдущем разделе результаты Вам понравились, можно автоматизировать их получение, насколько это возможно для Ваших измерений.

Для этого нажмём кнопку  и дальше будем выполнять то же, что и в предыдущем разделе, только не будем больше экспериментировать, а выполним именно те действия по измерению и обработке спектра, которые нужны для получения нашего отчёта.

- 1) Выполним пункты 1 – 8 из предыдущего раздела, только назовём наш анализ "Методика анализа пестицидов";
- 2) Далее, при выполнении обработки (пункты 9 – 13) в окне обработки (то, что появляется и

) не забудем установить, щёлкнув в него мышкой один раз, флажок с надписью "Запись макро". После этого всякое действие по обработке спектра и печати отчёта будет записываться в "Метод" – последовательность действий, которая в дальнейшем будет исполняться автоматически по окончанию измерения;

- 3) Выполните поиск пиков и дайте им имена, как делали это в пунктах 10 – 12;
- 4) Теперь выполните идентификацию пиков: в окне "Обработка", закладка "Библиотека". Выберите "Новая идентификация по времени удерживания", нажмите "Применить". Текущая расстановка пиков не должна поменяться, но действие по идентификации будет записано в метод;
- 5) Теперь можно выполнить расчёт концентраций и напечатать отчёт как в пунктах 13 – 14 предыдущего раздела. После этого не забудьте снять флажок "Запись макро". Окно обработки можно закрыть, оно нам больше в этом измерении не понадобится;
- 6) Щёлкнем мышкой на закладку "Метод" в окне спектра (не в окне обработки!) и просмотрим последовательность действий, которые будут выполняться при выполнении метода. Если в списке оказались лишние действия, их можно удалить. Также можно переставить действия местами, если есть необходимость;
- 7) Запишем файл анализа на диск под названием "Методика анализа пестицидов. \$\$\$" и закроем окно. Теперь у нас есть простая методика проведения измерения.

Чтобы выполнить измерение в соответствии с подготовленной методикой:

- 1) Нажмём кнопку  и откроем файл метода "Методика анализа пестицидов. \$\$\$";
- 2) Добавим измерительный слой к хроматограмме (кнопка );
- 3) В этом новом слое кнопкой  подготовим измерение, введём пробу и запустим измерение кнопкой на блоке АЦП;
- 4) По окончании измерения сигнала автоматически начнётся выполнение метода – последовательности действий, записанных ранее;
- 5) В случае правильного выполнения этой инструкции по окончанию мы получим отчёт, напечатанный на принтере.

## 4 Справочная информация

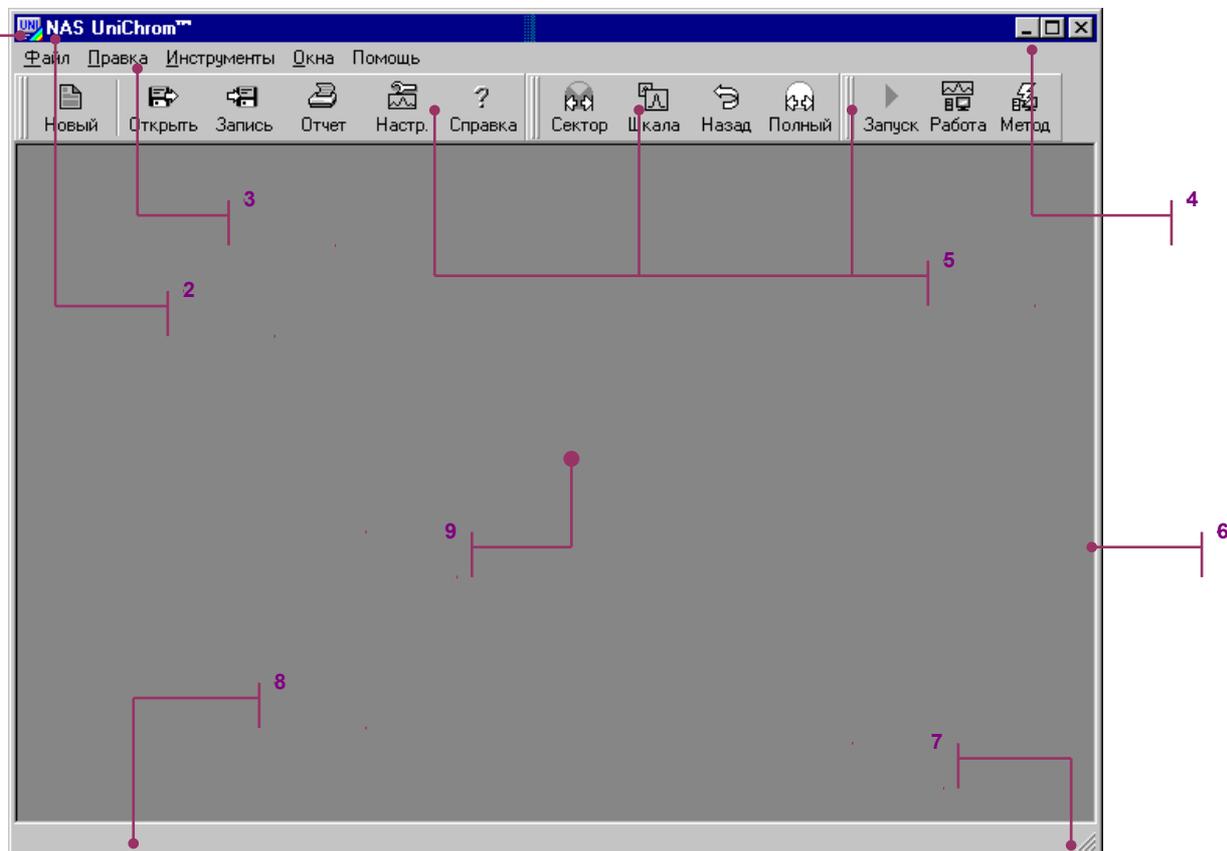


## 4.1 Окно UniChrom

В результате запуска главного исполняемого модуля системы UniChrom на экране отображается главное окно программы **UniChrom**.

Рис. 21. Внешний вид и элементы управления окна UniChrom

1 – системное меню; 2 – заголовок; 3 – меню программы; 4 – системные кнопки:  – свернуть,  – развернуть,  – восстановить,  – закрыть; 5 – панели инструментов; 6 – рамка окна; 7 – угол захвата; 8 – строка состояния; 9 – рабочий стол.



### 4.1.1 Общие сведения об элементах управления окна

Стандартные элементы окна – заголовок, системные кнопки и системное меню, а также рамка окна и угол захвата рамки – предназначены для управления состоянием, размерами и положением окна UniChrom на рабочем столе Windows.

Доступ к основным функциям и командам системы UniChrom осуществляется через меню программы и панели инструментов.

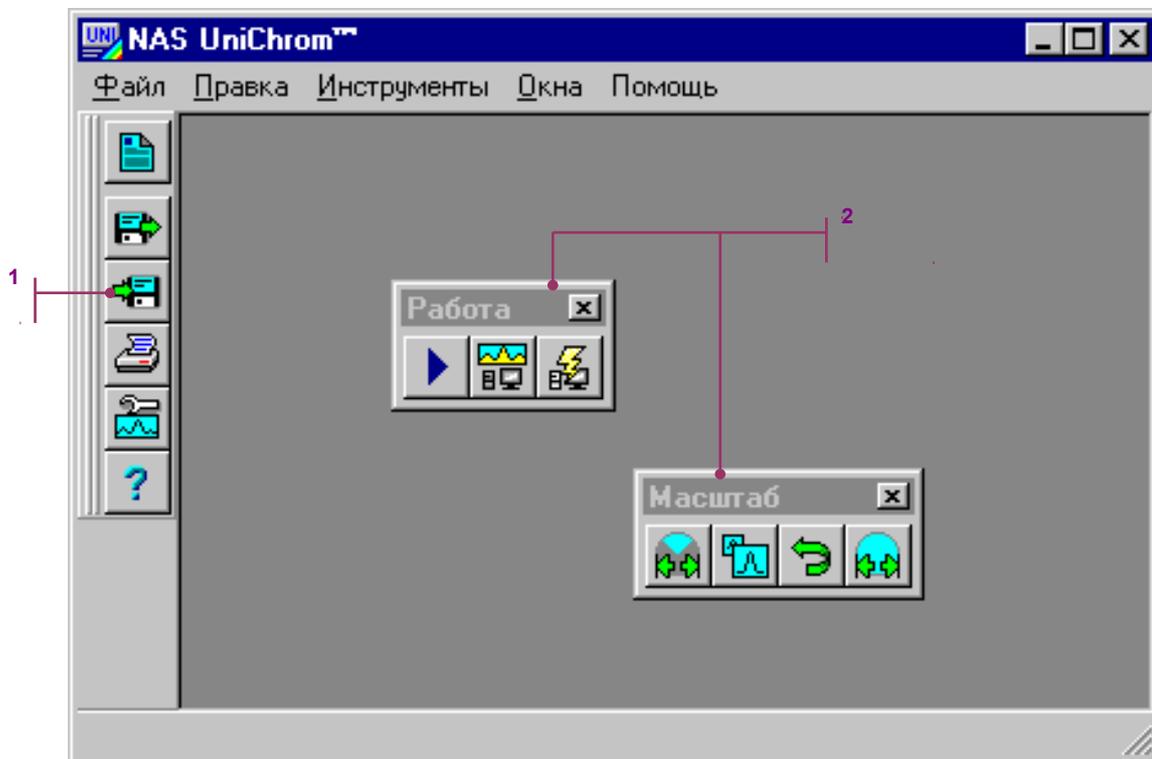
В строке состояния отображается краткая справочная информация для выделенных объектов и текущее состояние системы UniChrom.

## 4.1.2 Настойка внешнего вида

Расположение и внешний вид панелей инструментов в окне UniChrom заданы не жёстко, их можно изменять (4.1.2).

Рис. 22. Виды панелей инструментов

*1 – присоединённая слева панель; 2 – плавающие панели.*



Текущее расположение и внешний вид панелей инструментов в окне, а также размер и положение главного окна на экране автоматически сохраняются при каждом завершении сеанса работы с UniChrom и восстанавливаются при следующей загрузке программы.

Настройка панелей инструментов выполняется следующим образом:

- 1) Щёлкните правой кнопкой манипулятора в панель для выбора внешнего вида кнопок;
- 2) Дважды щёлкните границу панели инструментов для отрыва данной панели от окна;
- 3) Тяните плавающую панель к левой, правой или верхней границе рабочего стола для стыковки с окном программы. Присоединение к окну произойдёт автоматически.

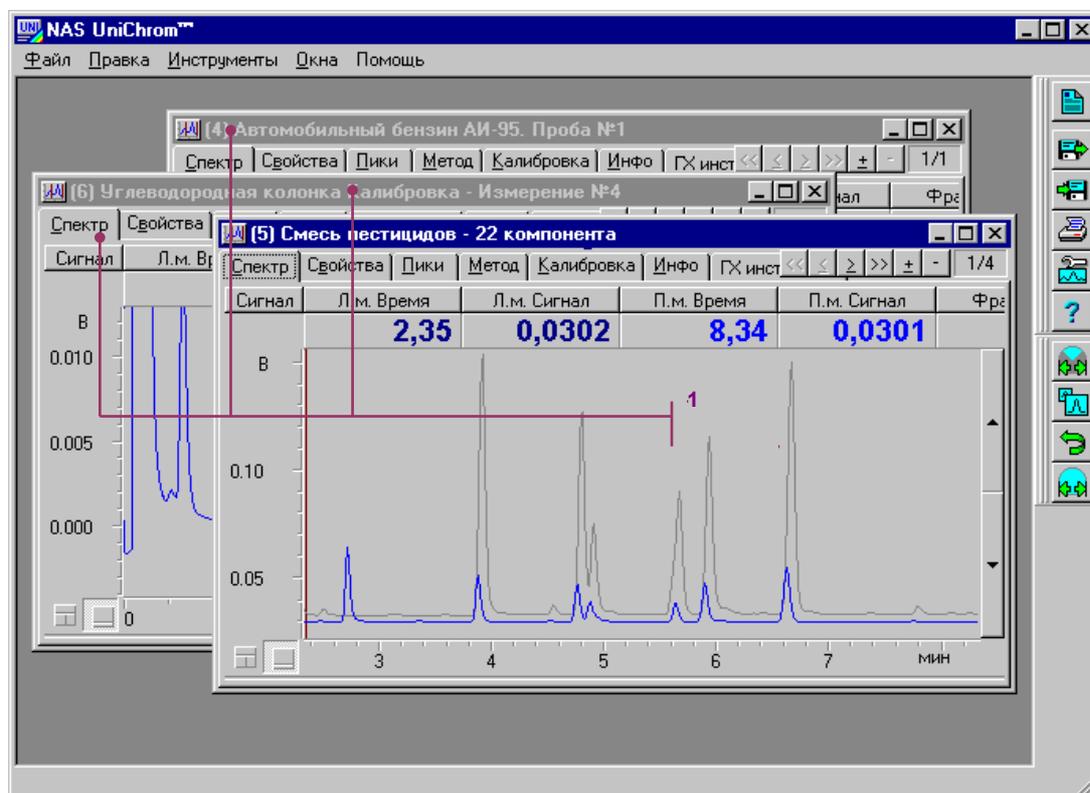
### 4.1.3 Объекты рабочего стола программы

Программа UniChrom является много-документным (Multiple Document Interface, MDI) приложением для Windows, документами которого являются **Спектры**.

Спектры отображаются в окнах на рабочем столе программы:

Рис. 23. Спектры на рабочем столе

1 – окна спектров.



Число открытых спектров и спектров, хранимых на диске, ограничивается только свободной оперативной и дисковой памятью компьютера. Размер спектра зависит от количества общих и локальных свойств спектра, от наличия макросов в спектре (методики обработки), от общего числа пиков в спектре, калибровочных данных и сопроводительной информации о спектре, а также от частоты сбора данных, длительности и количества хроматограмм в спектре.

Существует примерная формула для расчёта размера (M) спектра в байтах:

$$M \approx 120 \cdot (2 \cdot t \cdot f \cdot N + P),$$

где N – число хроматограмм в спектре, t – длительность измерения в минутах, f – частота сбора данных в герцах, P – общее число пиков в спектре.

### 4.1.4 Меню программы

Меню программы UWin32.exe предназначено для ввода команд системы UniChrom. Ввод команды осуществляется выбором соответствующего элемента меню с помощью клавиатуры или манипулятора.

#### 4.1.4.1 Стандартные методы работы с меню в Windows

Выбор команды меню манипулятором:

- 1) Установите указатель на пункт меню и нажмите левую кнопку мыши.
- 2) Установите указатель на пункт раскрывшегося подменю и опять нажмите левую кнопку мыши.
- 3) Для выхода из меню (отмены меню) щёлкните мышью в любое место экрана, свободное от меню.

Выбор команды меню клавиатурой:

- 1) Нажмите комбинацию клавиш [Alt]+ [подчёркнутая буква в строке меню];

- 2) Установите курсор меню на команду, используя навигационные клавиши [←], [↑], [↓], [→], и нажмите [Enter] или нажмите клавишу [подчёркнутая буква в подменю];
- 3) Для выхода из меню нажмите два раза клавишу [Esc].

Многие команды меню выполняются при нажатии “горячих” клавиш. Комбинации клавиш для команды обычно отображаются в подменю справа от названия команды.

#### 4.1.4.2 Команды меню Файл

Команды	Результат применения
Новый метод	Открывает модальное диалоговое окно <b>Новый метод</b> для выбора типа устройства и создания соответствующего окна нового спектра.
Открыть	Открывает модальное диалоговое окно <b>Открыть</b> для чтения спектра с диска.
Сохранить	Открывает модальное диалоговое окно <b>Сохранить как</b> для записи активного спектра на диск, если спектр ранее не сохранялся. В противном случае команда просто перезаписывает спектр в уже существующий файл спектра.
Сохранить как	Открывает модальное диалоговое окно <b>Сохранить как</b> для записи активного спектра на диск.
Печать	Открывает модальное диалоговое окно <b>Печать</b> для настройки принтера, выбора числа копий «быстрого» отчёта для активного спектра и вывода этих копий отчёта на печатающее устройство.
Параметры печати	Открывает модальное диалоговое окно <b>Печать</b> для настройки принтера и задания ориентации бумаги – книжная  или альбомная  – на время сеанса работы с системой UniChrom.

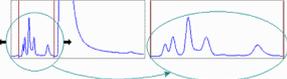
#### 4.1.4.3 Команды меню Правка

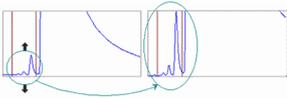
Все операции меню **Правка** применяются к активному спектру.

Команды	Результат применения
Копировать	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Копирует в буфер Clipboard выделенные ячейки таблицы с активной вкладки спектра <b>Пики</b>;</li> <li>– Копирует текущую картинку хроматограмм в формате *.wmf в буфер Clipboard с активной вкладки <b>Спектр</b>.</li> </ul>
Вставить	Вставляет текст из буфера Clipboard в выделенные ячейки таблицы активной вкладки спектра <b>Пики</b> .
Копировать слой	Создаёт невидимую для пользователя ссылку в программе системы ЮниХром на картинку и пики текущего слоя спектра. Ссылка используется в дальнейшем для выполнения команды <b>Вставить слой</b> .
Вставить слой	Вставляет в позицию текущего слоя спектра картинку и пики по ссылке, созданной командой <b>Копировать слой</b> . Все слои, включая текущий слой спектра, сдвигаются на шаг вперёд.

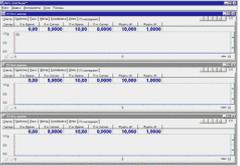
#### 4.1.4.4 Команды меню Инструменты

Все операции меню **Инструменты**, за исключением команд **Обработка** и **Панели**, применяются к активному спектру.

Команды	Результат применения
Измерение	Последовательное применение команды: <ol style="list-style-type: none"> <li>1. подготавливает спектр к измерению хроматограммы;</li> <li>2. стартует измерение;</li> <li>3. останавливает измерение.</li> </ol>
Фрагмент	Выполняет горизонтально масштабирование фрагмента хроматограммы. Фрагмент хроматограммы, заключённый между маркерами, растягивается до границ окна. 

Команды	Результат применения
<b>Приблизить</b> 	Выполняет вертикальное масштабирование фрагмента хроматограммы. Верхняя и нижняя точки фрагмента (максимум и минимум интенсивности) растягиваются к верхнему и нижнему краю окна.
<b>Восстановить</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Восстанавливает полный горизонтальный и вертикальный масштаб хроматограммы;</li> <li>– Очищает список операций <b>Отмена</b>.</li> </ul>
<b>Назад</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Последовательно восстанавливает предыдущие состояния масштаба и сглаживания хроматограммы, а также состояния пиков на хроматограмме после их автоматического поиска и удаления;</li> <li>– Уменьшает счётчик списка операций <b>Отмена</b> на единицу.</li> </ul>
<b>Маркер (L/R)</b>	Последовательно переключает активность левого (красного) и правого (сине-зелёного) маркеров в окне спектра
<b>Обработка</b>	Показывает не-модальное диалоговое окно <b>Обработка</b> для выполнения операций сглаживания хроматограммы, разметки хроматограммы на пики, идентификации компонентов, расчёта концентраций, отчёта и других
<b>Старт метода</b>	Запуск сценария обработки хроматограммы, начиная с операции помеченной красным курсором на вкладке спектра <b>Метод</b>
<b>Настройки</b>	Открывает модальное диалоговое окно <b>Выбор инструмента</b> , которое позволит выбрать текущее оборудование для анализа
<b>Панели</b>	Прячет и показывает панели инструментов программы UniChrom

#### 4.1.4.5 Команды меню Окна

Команды	Результат применения
<b>Все горизонтально</b> 	Размещает окна спектров на рабочем столе программы горизонтальной мозаикой. Заголовок активного окна подсвечивается.
<b>Все вертикально</b> 	Размещает окна спектров на рабочем столе программы вертикальной мозаикой. Заголовок активного окна подсвечивается.
<b>Каскад</b> 	Размещает окна спектров на рабочем столе программы каскадом (одно под другим). Активное окно с подсвеченным заголовком отображается на переднем плане.
<b>Иконки в порядок</b>	Упорядочивает расположение свёрнутых окон на рабочем столе программы.
<b>Заккрыть все</b>	Последовательно закрывает все открытые окна спектров. При наличии изменённых данных у какого-либо спектра появится сообщение с предложением записать изменения на диск.
<b>Список названий открытых спектров</b>	Активизирует окно спектра с соответствующим названием.

#### 4.1.4.6 Команды меню Помощь

Команды	Результат применения
Содержание	Открывает не-модальное диалоговое окно <b>Справочная система</b> для получения информации по работе с системой UniChrom.
О системе	Открывает модальное окно с электронными адресами и телефонными номерами ООО «Новые аналитические системы», с информацией о версии программы системы UniChrom и прочим.

#### 4.1.5 Панели инструментов

Наиболее часто используемые команды и операции системы UniChrom вынесены на панели инструментов в виде кнопок.

Для выполнения команды, связанной с кнопкой, необходимо установить указатель на данный объект и нажать левую кнопку мыши.

Каждая кнопка на панели инструментов имеет свой Hint (намёк или краткая информация о назначении объекта). Hint кнопки отображается под курсором манипулятора и в строке состояния программы каждый раз, когда указатель указывает на данную кнопку:

Кнопка	Команда меню	Назначение
	Новый метод	Открывает новое окно спектра. Спектр создаётся в соответствии с шаблоном <b>default.***</b> .
	Открыть	Загружает хроматограммы из файла на диске.
	Сохранить	Сохраняет содержимое окна в файле на диске.
	Печать	Печатает “быстрый” отчёт, содержащий таблицу общих свойств спектра, текущую картинку хроматограммы и простую таблицу концентраций.
	Настройки	Предлагает выбрать устройство сбора данных, настройки которого соответствуют текущему анализу.
	Содержание	Вызывает справку.
	Фрагмент	Выполняет горизонтальное масштабирование хроматограммы.
	Приблизить	Выполняет вертикальное масштабирование хроматограммы.
	Назад	Отмена последней операции масштабирования и сглаживания хроматограммы, автоматического поиска и удаления пиков.
	Восстановить	Восстанавливает исходный масштаб хроматограммы.
	Измерение	Подготавливает спектр к измерению, стартует измерение и останавливает измерение.
	Обработка	Показывает окно <b>Обработка</b> для выполнения сглаживания, разметки, идентификации и других операций с хроматограммами.
	Старт метода	Выполняет макросы обработки хроматограммы, отображаемые на вкладке спектра <b>Метод</b> .



- 4) Параметры анализа и настройки аналитического оборудования.  
В данном поле содержатся сведения о типе устройства, используемого при анализе, и параметры режима анализа. Для газовых хроматографов в общем случае определены температуры зон нагрева и, в том числе, температурная программа термостата колонки, давления и расходы газов, а также параметры автоматического ввода пробы и режима экономии газа-носителя. Для жидкостных хроматографов – параметры насосов и градиент потоков.
- 5) Комментарии к спектру.  
В дополнение к общим и локальным свойствам хроматограмм в спектре имеется информационный лист, в котором отражается общая неструктурированная текстовая информация о спектре и методе анализа, пояснения и комментарии к измеренным данным, и прочие сведения.

Таблица хроматограмм содержит набор записей, называемых слоями спектра. Каждая отдельная запись данных состоит из следующих отдельных полей:

- 1) Хроматограмма.  
Каждая хроматограмма спектра хранится в виде последовательного набора чисел (точек), представляющих собой выборку сигнала детектора через равные промежутки времени. Количество измеренных точек определяется длительностью хроматограммы и частотой измерения.
- 2) Локальные свойства хроматограммы.  
Каждая хроматограмма в спектре имеет своё индивидуальное название. В случаях, когда метод требует выполнения одновременных измерений по нескольким каналам, хроматограммы спектра будут отличаться номером измерительного канала. Допускается создавать и хранить в файле спектра другие пользовательские свойства, предназначенные для решения специальных задач.
- 3) Таблица пиков со специальными хроматографическими и общими физико-химическими свойствами компонентов.  
В общем случае содержание таблиц пиков индивидуально для каждой хроматограммы спектра. Таблицы содержат такие хроматографические поля, как название пика, время выхода, начало и конец пика, площадь, высота, концентрации объёмная, массовая, мольная, титр и молярность, коэффициент чувствительности, групповой коэффициент и индекс удерживания. Таблицы содержат также поля с физико-химическими свойствами компонентов. Это молекулярная масса, температура кипения и плотность. В таблицах отражаются такие состояния пиков, как “репер”, “точка калибровки” и другие.

## 4.2.2 Различные применения спектров

Спектры в системе UniChrom, в зависимости от их применения, рассматриваются и используются в разном качестве.

### 4.2.2.1 Метод анализа

Спектр с заполненными полями данных является готовым методом анализа.

Все перечисленные выше данные спектра хранятся в одном файле. При загрузке спектра с диска восстанавливается полная картина метода хроматографического анализа, что даёт возможность воспроизведения данного анализа повторно с получением идентичных результатов.

Для выполнения метода необходимо открыть данный спектр и выполнить указанную в описании к методу серию измерений. По окончании измерений автоматически выполняются макросы обработки хроматограмм и создаётся отчёт.

### 4.2.2.2 Шаблон анализов

Спектр как метод анализа является шаблоном для других анализов.

Все поля спектра редактируются и модифицируются. Благодаря этому любой метод анализа может быть адаптирован к другому анализу. Необязательно создавать новый спектр и заполнять его поля с нуля. Достаточно открыть готовый спектр и изменить часть его параметров.

В системе UniChrom при создании новых спектров используется по умолчанию системный шаблон с именем default.\$\$\$\$. Допускается изменение и настройка этого шаблона в соответствии с текущими задачами.

### 4.2.2.3 Хроматограмма

В простейшем случае спектр рассматривается как простая хроматограмма или пачка разных хроматограмм, для которых нет единого сценария обработки или этот сценарий не определён. Измеренные данные просматриваются и обрабатываются пользователем вручную с использованием

средств системы UniChrom.

#### **4.2.2.4 Библиотека пиков**

Спектр рассматриваться как библиотека хроматографических пиков. Библиотека пиков определена, если хотя бы одна хроматограмма в спектре проинтегрирована и для неё существует непустая таблица пиков.

Библиотеки пиков используются для идентификации компонентов однотипных хроматограмм.

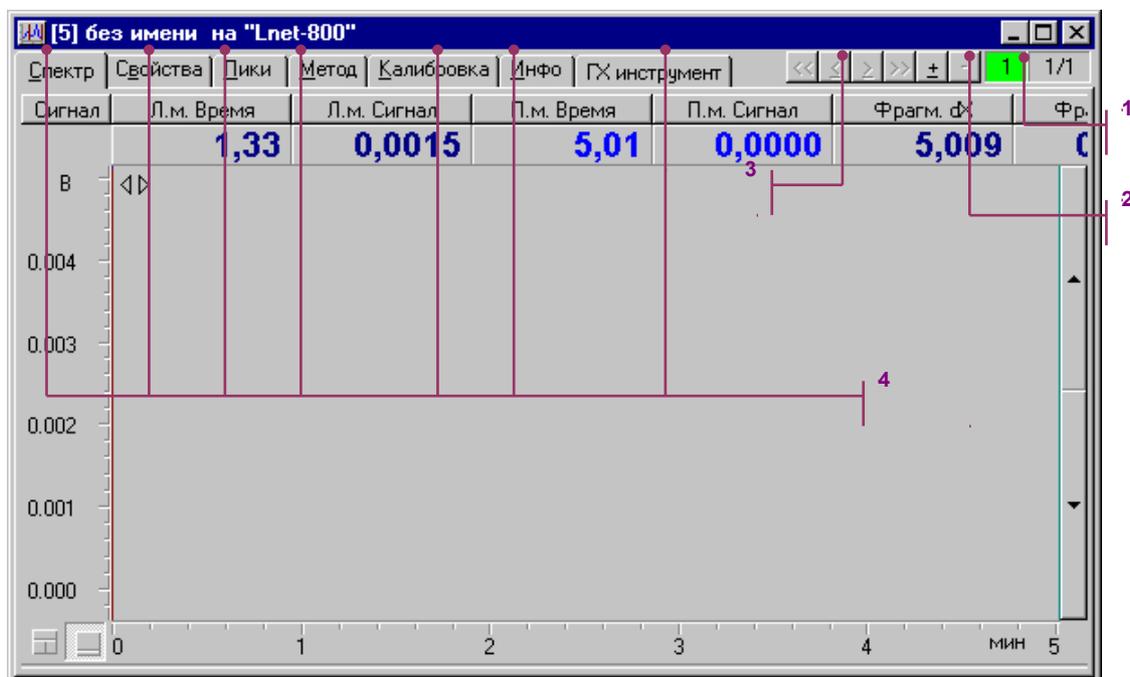
## 4.3 Окно спектра

Окно спектра появляется на рабочем столе программы при создании нового метода анализа и при загрузке метода с диска.

Ниже приводится стандартный вид окна спектра.

Рис. 25. Общий вид и элементы управления окна спектра

1 – индикатор текущего слоя; 2 – индикатор состояния спектра; 3 – навигатор слоёв; 4 – вкладки спектра: “Спектр”, “Свойства”, “Пики”, “Метод”, “Калибровка”, “Информация”, “Инструмент”, “Слой”.



### 4.3.1 Общие сведения об элементах управления окна

Стандартные элементы – заголовок, системные кнопки, системное меню и рамка – предназначены для управления состоянием, размерами и положением окна на рабочем столе программы.

Вкладки спектра (закладки, страницы или листы) отображают все данные метода анализа и содержат элементы управления этими данными.

Навигатор слоёв и индикатор текущего слоя используются для управления слоями спектра.

Индикатор состояния спектра показывает, в каких слоях спектра ожидается старт измерения или уже идёт регистрация хроматограммы.

### 4.3.2 Состояния спектра

Спектр может находиться в следующих состояниях:

ID <sup>11</sup>	Состояние спектра	Пояснение
<b>A</b>	Ожидание	Спектр готов к измерению и ожидает нажатия кнопки <b>Старт</b> на приборе.
<b>B</b>	Измерение	Нажата кнопка <b>Старт</b> на приборе. Спектр находится в режиме сбора данных.
<b>C</b>	Свободный	Спектр не ожидает старта и не измеряет.

### 4.3.3 Информация о спектре в заголовке окна

В заголовке окна спектра отображаются через пробел значения свойств спектра:

- номер измерительного канала для активного слоя спектра (Channel);
- имя спектра (Name);
- название текущего слоя (CurLayDesc).

Номер измерительного канала заключён в скобки.

Вид скобок, в которые заключён номер канала, информирует о состоянии спектра:

Вид скобок	Состояние спектра
( ) – круглые	Свободный.
// – круглые	Ожидание.
[ ] – квадратные	Измерение.

Если спектр находится в развёрнутом состоянии, то указанная выше информация помещается в заголовок окна программы.

### 4.3.4 Навигатор слоёв

Навигатор слоёв предназначен для добавления и удаления слоёв в спектре, а также для путешествия по слоям спектра.

<sup>11</sup> Идентификатор (identifier) состояния спектра

#### 4.3.4.1 Команды навигатора

Изображение и назначение кнопок навигатора следующие:

Кнопка	Команда	Назначение
	Первый слой	Выполняет переход к первому слою спектра.
	Предыдущий слой	Выполняет переход к предыдущему слою спектра.
	Следующий слой	Выполняет переход к следующему слою спектра.
	Последний слой	Выполняет переход к последнему слою спектра.
	Вставить слой	Вставляет новый слой следом за текущим и выполняет переход к созданному слою. Все слои, которые находились после текущего слоя, сдвигаются на один шаг вперёд.
	Удалить слой	Удаляет текущий слой и выполняет переход к слою, который следует за удалённым. Все слои, следующие за удалённым, сдвигаются на один шаг назад. Перед удалением появится сообщение с вопросом для подтверждения операции удаления слоя.

#### 4.3.4.2 Особенности работы со слоями

Операции добавления, удаления и переходов по слоям осуществляются независимо от текущей открытой страницы спектра и состояния спектра.

Вкладки **Спектр** и **Пики** автоматически обновляются при выполнении операций навигатора. Их содержимое всегда соответствует текущему слою. Значения локальных свойств на вкладке **Свойства** также изменяются от слоя к слою.

При удалении слоя, в котором идёт измерение хроматограммы, стандартное сообщение с призывом сохранить измеренные данные не появляется.

Восстановить удалённый слой невозможно.

По умолчанию при создании нового окна спектра число слоёв задаётся равным единице. В этот момент доступна только команда **Вставить слой**. Как только будет увеличено количество слоёв, станут доступными команды перемещения по слоям и команда **Удалить слой**.

#### 4.3.4.3 Управление навигатором с помощью мыши и клавиатуры

Управление навигатором осуществляется как манипулятором, так и клавиатурой.

Для выполнения команды манипулятором щёлкните мышью в соответствующую кнопку навигатора.

Выполнение команд с помощью клавиатуры осуществляется нажатием комбинации клавиш [Alt]+[Shift]+[подчёркнутый символ в названии кнопки] или

- 1) Клавишами [Tab], [Shift]+[Tab] или [Ctrl]+[Tab], в зависимости от того, какой объект экрана в данный момент имеет фокус, переместите фокус на кнопку навигатора слоёв. Фокус на кнопке отображается пунктиром, опоясывающим название кнопки.
- 2) Клавишами [←], [↑], [↓] и [→] установите фокус на требуемую кнопку и нажмите [Enter].

#### 4.3.5 Индикатор текущего слоя

Индикатор содержит две цифры, разделённые наклонной чертой. Первая цифра указывает номер текущего слоя. Вторая цифра показывает полное число слоёв в спектре.

### 4.3.6 Индикатор состояния спектра

Индикатор состояния спектра находится между навигатором слоёв и индикатором текущего слоя.

Внешний вид индикатора зависит от состояния спектра следующим образом:

Цвет индикатора	Состояние спектра
<b>Красный</b>	Ожидание.
<b>Зеленый</b>	Измерение.
<b>Невидимый</b>	Свободный.

Внутри индикатора через запятую отображаются номера слоёв спектра, в которых подготавливается и выполняется регистрация сигнала детектора.

### 4.3.7 Общие методы работы с вкладками спектра

Спектр содержит следующие вкладки:

Страница	Содержание
1. Спектр	Хроматограммы спектра.
2. Свойства / Паспорт	Таблицы общих и локальных свойств спектра / Паспорт хроматограмм спектра.
3. Пики	Таблицы пиков.
4. Метод	Макросы обработки хроматограмм.
5. Калибровка	Калибровочные графики и параметры.
6. Инфо	Комментарии к спектру.
7. ГХ / ЖХ инструмент	Параметры газового хроматографа / Параметры жидкостного хроматографа.
8. Слои	Параметры хроматограммы, записанной в данном слое.

Пользователь имеет доступ ко всем страницам спектра в любой момент времени для просмотра соответствующей информации и её редактирования.

Наличие и вид инструментальной вкладки в окне спектра определяются текущим для данного окна типом устройства. Если при создании спектра выбран тип устройства **АЦП**  , то инструментальная вкладка в окне спектра не отображается.

Переход к страницам спектра осуществляется щелчком мыши на соответствующие закладки спектра.

Переход к страницам без использования манипулятора осуществляется нажатием комбинации клавиш [Alt]+[подчёркнутая буква в названии страницы] или клавишами [Tab], [Shift]+[Tab], [Ctrl]+[Tab] и навигационными клавишами [←], [↑], [↓] и [→] в зависимости от того, какой объект экрана в данный момент имеет фокус.

Фокус на закладке отображается пунктиром, опоясывающим название страницы.

## 4.4 Страница графика

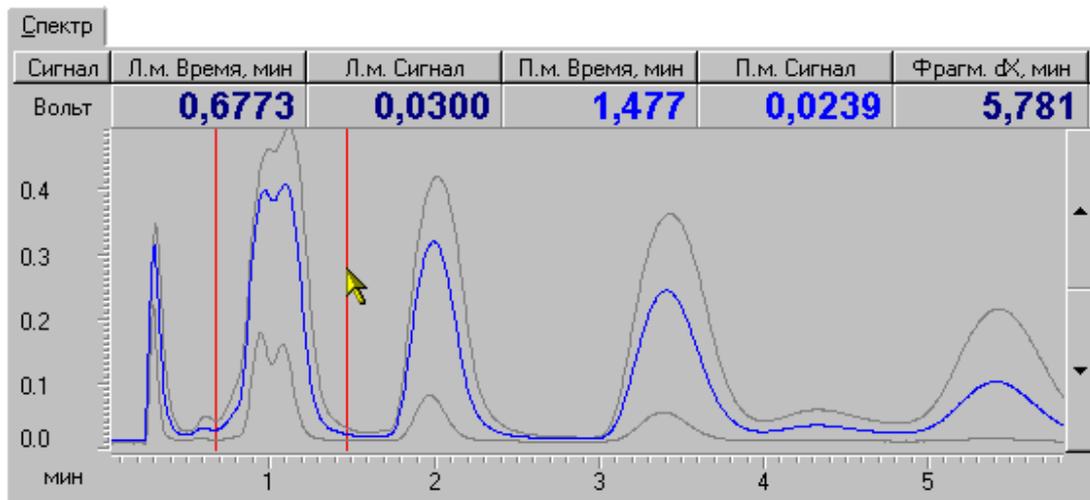
Каждый раз, когда Вы создаете новый спектр или загружаете последний из файла, в окне спектра по умолчанию устанавливается активной<sup>12</sup> страница спектра – страница, на которой отображается хроматограмма. Очевидно, что при создании нового спектра никаких измеренных данных нет. Отсутствие же каких-либо данных отображается на графике горизонтальной линией с нулевой интенсивностью. Аналогичная ситуация наблюдается и при создании нового слоя спектра.

Как только Вы запустите измерение, на графике начнут отображаться реальные измеряемые данные.

Программное обеспечение системы UniChrom позволяет контролировать процессы измерения и детально рассматривать каждую хроматограмму спектра.

Рис. 26. Страница спектра

*1 – область отображения хроматограммы (дисплей окна спектра); 2 – маркеры; 3 – кнопки изменения вертикального масштаба.*



Перемещение маркеров по графику спектра можно производить клавишами клавиатуры со стрелками или мышкой.

- [**<**], [**>**] – на один шаг влево (вправо). Шаг по времени равен периоду опроса АЦП (1/частота опроса АЦП) в единицах оси X (минутах или секундах);
- [**Ctrl**] + [**<**], [**Ctrl**] + [**>**] – (быстрое перемещение) на 1/20-ю часть видимой области спектра;
- [**Ctrl**] + [**Shift**] + [**>**], [**Ctrl**] + [**Shift**] + [**<**] – растяжение (сжатие) графика по горизонтали при неподвижной левой границе;
- [**Ctrl**] + [**T**] – переключение между маркерами, клавиатурой управляется только один маркер – активный;
- Нажатие (щелчок) левой или правой кнопки мыши в нужной точке переместит туда левый или правый маркер.

<sup>12</sup> Активная страница спектра - это видимая страница, которую Вы непосредственно наблюдаете в окне спектра.

#### 4.4.1 Управление отображением (масштабом) графика

Управлять отображением графика можно следующими способами:

- 1) Перетянуть<sup>13</sup> ось  $X$  или ось  $Y$  на нужное количество делений шкалы вправо или влево для оси  $X$ , (вверх или вниз) для оси  $Y$ .
- 2) Переместить фрагмент просмотра вправо или влево (сдвинуть видимое окошко на величину фрагмента) можно комбинациями клавиш: левый [Shift] + [←] или [→].
- 3) Выделить горизонтальный фрагмент можно кнопкой  в панели инструментов или комбинацией клавиш [Ctrl]+[F].
- 4) Отнормировать по  $Y$  (изменить масштаб так, чтобы выбранный фрагмент не уходил за верхний или нижний край окна) можно кнопкой  в панели инструментов или комбинацией клавиш [Ctrl]+[W].
- 5) Рассмотреть поближе прямоугольный регион графика нужно воспользоваться “резиновой рамкой”.
- 6) Изменить масштаб по  $Y$  с помощью *кнопок масштабирования*, либо клавишами [↑] или [↓].
- 7) Изменить параметры отображения можно с помощью всплывающего меню, которое появляется при нажатии правой кнопкой мыши на ось  $X$  или на ось  $Y$ .

Если спектр многослойный, то перемещаться по слоям можно с помощью *браузера*. Текущий слой спектра всегда изображается **синим** цветом, остальные слои (в режиме просмотра всех слоев) – **темно-серым**. Обработывается только текущий слой. Слой спектра, в котором идет измерение, отображается только до того значения оси  $X$ , которое соответствует прошедшему с момента старта промежутку времени.

#### 4.4.2 Маркеры

Маркер – вертикальная линия, изображающая позицию на графике. При изменении положения маркера изменяется соответствующее ему значение на дисплее данных. Маркеров два – левый и правый (левый и правый соответствуют кнопке мыши, используемой для управления ими, а не относительному их расположению). Обычно маркеры окрашены в красный и зеленовато-голубой цвета соответственно.

#### 4.4.3 Дисплей данных

Дисплей данных – две пары окон (соответственно для левого и правого маркеров), которые показывают положение маркера на оси  $X$  и значение сигнала в указанной точке. Кроме этого указываются еще ширина видимого фрагмента в минутах (секундах) и его высота в единицах оси  $Y$ . Кроме этих значений, в строке статуса отображаются еще два.

Если маркер мыши находится над **Фрагм. DX**, мин, то в строке статуса показано расстояние между маркерами в мин.

Если маркер мыши находится над **Фрагм. DY**, то в строке статуса показана разность высот в точках, где находятся маркеры в единицах оси  $Y$ .

Л.м. Время, мин	Л.м. Сигнал	П.м. Время, мин	П.м. Сигнал	Фрагм. dX, мин	Фрагм. dY
<b>1</b>	<b>0,0000</b>	<b>2</b>	<b>0,0000</b>	<b>10,000</b>	<b>1,0000</b>

При нажатии правой кнопкой мыши на окошки, содержащие значения интенсивности появляется контекстное меню, в котором можно выбрать количество отображаемых в этом окошке значащих цифр (количество знаков после запятой).

#### 4.4.4 Ось $Y$

В окне спектра – шкала отображаемых значений интенсивности. Принято при работе с детектором по теплопроводности (ДТП – катарометр) сигнал отображать в вольтах, а при работе с ионизационными детекторами (ПИД, ТИД, ЭЗД, ФИД и ПФД) сигнал отображать в наноамперах. Настройка отображаемых значений осуществляется в закладке **Свойства** присвоением значению переменной `UnitType` значения 0 для В и 1 для нА. При перетягивании оси левой кнопкой мыши отображаемая часть спектра сдвинется в соответствующую сторону. Нажатие правой кнопкой мыши на ось показывает меню выбора режима просмотра спектра.

<sup>13</sup> Перетянуть – это означает нажать на указанном объекте левую кнопку мыши и, не отпуская, переместить в нужную точку. Затем левую кнопку мыши надо отпустить

#### 4.4.5 Ось X

В окне спектра – шкала отображаемых значений спектральной единицы, например, времени. Настройка отображаемых значений осуществляется в закладке **Свойства** присвоением значению переменной `x UnitType` значения 0 для мин и 1 для сек. Если выбраный для просмотра фрагмент меньше чем весь диапазон спектра, то ось можно потянуть левой кнопкой мышки, и посмотреть что находится справа или слева. Нажатие правой кнопкой мышки на ось показывает меню выбора режима просмотра спектра.

#### 4.4.6 Стрелки масштабирования спектра

Стрелки масштабирования спектра предназначены для увеличения (уменьшения) масштаба для видимой части спектра. Помимо этих стрелок для изменения масштаба может использоваться кнопка  в панели инструментов, а также “резиновая рамка”.

#### 4.4.7 «Резиновая рамка»

“Резиновая рамка” – наиболее распространенный способ выделения региона спектра для просмотра. При нажатой клавише [Shift] и левой кнопке мыши внутри графика нужно растянуть “резиновую рамку” до размера того региона, который хочется рассмотреть. После отпускания кнопки мыши заданный фрагмент будет перерисован в указанном масштабе. Это же действие можно выполнить и без клавиатуры – просто держите нажатыми обе клавиши мыши одновременно.

Примечание: В последних версиях программы резиновую рамку можно активизировать и с помощью одной левой кнопки мыши.

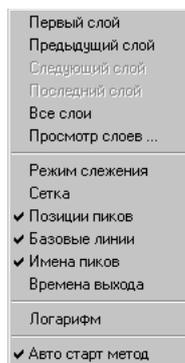
#### 4.4.8 Дисплей окна или область графика

Это область, где нарисован спектр. График данных текущего слоя спектра всегда **синего** цвета. Остальные слои, если они видны, по умолчанию **темно-серого** цвета. Цвета графиков каждого слоя можно задавать индивидуально. Слой спектра, в котором идет измерение, рисуется только до той точки, до которой “померились” данные. В области графика можно производить визуальное редактирование пиков.

- Чтобы установить пик во фрагменте (между маркерами) необходимо нажать [Ctrl] + [+].
- Чтобы удалить группу пиков во фрагменте необходимо нажать [Ctrl] + [-].
- Чтобы расщепить пик на два пика в точке, где находится активный маркер, необходимо нажать [Ctrl] + [/].
- Чтобы изменить базовую линию какого-либо пика нужно установить маркер внутри этого пика и при нажатой клавише [Alt] + [левая клавиша мыши] переместить левую или правую границу пика (в зависимости от того, за какую из них схватились) в нужную точку.
- Чтобы вызвать окно информации о пике нужно дважды щелкнуть мышкой внутри границ пика либо, подведя маркер внутрь границ пика нажать на клавиатуре [Ctrl]+[Enter].

#### 4.4.9 Меню параметров отображения

Всплывающее меню, которое появляется при нажатии правой клавишей мыши на ось X или ось Y. Содержит команды для перемещения по слоям спектра, а также переключатели, управляющие:



- Отображением элементов контура пика – позиции, базовой линии, имени пика (их можно включить либо выключить);
- Отображением нескольких слоев – можно выбрать произвольное количество слоев для просмотра.
- Отображением сетки на графике.
- Режимом слежения; Режим слежения позволяет во время измерения наблюдать текущую точку (момент времени). Масштаб по вертикали и по горизонтали будет изменяться автоматически.
- Логарифмическим отображением оси Y.

Переключатель **Авто старт метод** позволяет разрешить или запретить автоматический запуск метода по окончанию измерения.

## 4.5 Страница свойств метода

### 4.5.1 Свойства метода

Свойства применяются для задания некоторых режимов регистрации, способов хранения данных, количества данных, сохранения пользовательских данных и др. параметров метода.

Свойство — атрибут метода, имеющий:

- Имя - уникальный текстовый идентификатор, необходимый для различения свойств,
- Название - осмысленное описание свойства, например, с указанием единиц измерения величины,
- Значение (числовое или текстовое).

Название свойства, необходимо лишь для характеристики этих данных для пользователя.

Собственно данные, которые можно редактировать на странице свойств.

Уникальный идентификатор, по которому система UniChrom различает свойства и предоставляет для других программ (Word, Excel...).

Свойства хранятся в рабочей книге и могут использоваться при создании отчётов, выполнении расчётов и для хранения результатов расчётов а также пользовательской информации. Некоторые методы, в особенности, реализованные в модулях расширения UniChrom, методы расчётов возвращают результаты в виде пользовательских свойств.

Доступ к свойствам из других программ и при генерации отчёта осуществляется только по именам.

Свойства метода делятся на 2 основные категории:

- **Системные.**  
Предназначены для непосредственного управления методом. Немедленно при вводе меняют внутреннее представление данных. Например, при правке свойства «Число слоёв», («Layers»), происходит немедленное изменения числа слоёв данных в рабочей книге.
- **Пользовательские.**  
Предназначены для хранения данных, определённых пользователем.

Каждый из видов свойств может относиться либо к методу целиком (глобальное свойство), либо к отдельному слою (локальное свойство). То есть возможны все четыре комбинации:

- системное глобальное свойство (например «FileName», «Layers»)
- системное локальное свойство (например «Size» - длина слоя в точках, «Name» - имя слоя)
- пользовательское глобальное свойство (например, пользователь создал свойство, содержащее название нормативного документа, по которому создан метод. «EPAName» )
- пользовательское локальное свойство (например, по результатам работы UniChrom-DNA создаются свойства «RON», «MON» принадлежащие одному слою).

Существование локальных свойств удобно для хранения данных, но весьма неудобно для редактирования, так как при переходе к слою, где интересующее свойство не было определено, пользователь будет лишён возможности его ввести, его придётся создавать. Для устранения ненужной работы предназначены так называемые «глобально-локальные свойства». Эти свойства существуют в глобальной таблице, принадлежащей методу в целом, но предоставляют возможность правки свойств отдельного слоя посредством автоматического создания локальных свойств, как только это потребуется.

### 4.5.2 Окно «Свойства»

Для визуального представления и редактирования свойств метода, всей рабочей книги а также свойств текущего слоя, в UniChrom используется окно «Свойства». В каждой из рабочих областей оно может быть добавлено через меню Вид / Рабочая область.

Окно представляет собой таблицу из трёх колонок, третья колонка по умолчанию скрыта:

1. Название свойства (осмысленное для человека описание назначения свойства).

2. Значение, хранимое свойством, либо значение атрибута метода, доступ к которому даёт само свойство.
3. Имя свойства - уникальный идентификатор. Именование свойств подчиняется правилу на идентификаторы в языках программирования. Имя начинается с большой или малой английской буквы либо с символа «\_», затем любая комбинация символов верхнего и нижнего регистра, цифр и знаков «\_». Пробелы и иные символы недопустимы.

Рис. 27. Страница свойств спектра

1 – описание параметра; 2 – значение параметра; 3 – внутреннее наименование параметра.

Параметр	Значение	Имя
1 Название спектра	БИБЛИОТЕКА КОМПОНЕНТОВ БЕНЗИНА	Name
2 Файл	\\Nas\С\UniChrom\Мозырский НПЗ\БИБЛИОТЕКА КОМПОНЕНТОВ БЕНЗИНА.\$\$.	FileName
3 Название хроматограммы	Qualitative Reference Aklylate Standard No.4-8267	CurLayDesc
4 Количество хроматограмм в спектре	5	Layers
5 № хроматограммы	4	CurLayer
6 Длительность измерения, мин	70	Xend
7 Период измерения, мин (20 Гц)	0,000833333333	XStep
8 Инструмент	Hewlett Packard 5890 Series II	Iname
9 Тип детектора	ПИД	Dname
10 Колонка	HP-1 No.19091Z-115	ColumnID
11 Лайнер	HP No.19251-60540	LiniD
12 Температура детектора, °С	300	Td
13 Температура испарителя, °С	250	Ti
14 Программа температуры термостата колонки	HT 35 °С, ДНТ 18 мин, СКОР 5°С/мин, КТ 295°С	Tc
15 Газ носитель	Гелий	Gas
16 Давление газа носителя на входе в колонку, кПа	80	Ph
17 Расход газа носителя через колонку при 35°С, мл/мин	1,66	Sh
18 Деление потока при 35°С	100	Sp
19 Расход водорода, мл/мин	30	Sfg
20 Расход воздуха, мл/мин	330	Sai
21 Дата модификации	01.09.98	Date
22 Время модификации	15:35:49	time
23 Оператор	Гремяко Н.Н.	o

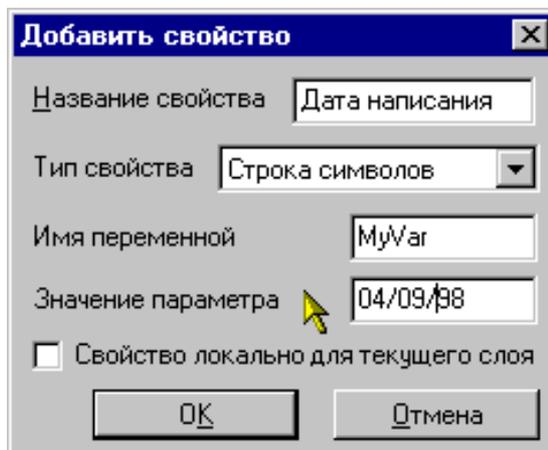
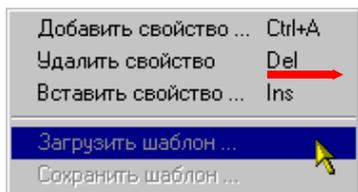
Принадлежность свойства к перечисленным в предыдущем разделе категориям отображается следующим образом:

1. Системное свойство имеет подчёркнутое имя в графе «Имя» (вне зависимости от того, локальное оно или глобальное).
2. Локальное свойство отображается **синим цветом**.
3. Глобально-локальное свойство отображается **зелёным цветом**.

Для свойств, которые уже представлены в таблице «Свойства», обеспечивается редактирование колонок «Название» и значение. Колонка «Имя» изменению не подлежит. Для создания новых и изменения существующих свойств предназначен диалог «Атрибуты свойства», который доступен в контекстном меню таблицы «Свойства». В этом диалоге можно выбрать для добавления свойства из стандартного набора, а также создать собственное свойство с указанием того, является ли оно глобальным для метода или локальным для слоя. Набор свойств можно копировать из одного метода в другой.

Порядок следования свойств в таблице значения не имеет, изменяется он перетаскиванием строки таблицы мышкой за номер свойства.

Добавление новых свойств, удаление ненужных производится через контекстное меню, которое появляется при нажатии правой клавишей мышки на таблицу свойств.



Удаление свойства приводит лишь к тому, что Вы лишаете себя возможности редактирования системного свойства или уничтожаете свои данные в пользовательском свойстве. Все эти операции происходят в оперативной памяти компьютера, поэтому изменения будут сохранены, только если Вы запишете исправленный спектр на диск.

В ниже приведенной таблице представлены наиболее важные системные свойства спектра:

Название свойства	Имя переменной	Описание свойства (назначение)
Имя спектра	<u>Name</u>	Строка, содержащая имя спектра.
Название текущего слоя	<u>CurlayDesc</u>	Строка. Свойство, локальное для каждого слоя спектра – обычно название образца.
Конец спектра	<u>Xend</u>	Вещественное число, указывающее конец спектра в единицах оси X. Если Xstart=0, то это длительность хроматограммы.
Шаг спектра	<u>Xstep</u>	Вещественное число, указывающее период измерения в минутах, как правило, оно изменяется автоматически при начале измерения по выбранному каналу (может отсутствовать, так как он определяется не пользователем, а используемым измерительным устройством).
Частота измерений, Гц	<u>Freq</u>	Вещественное число. Частота измерений (количество отсчетов данных в секунду). Устанавливается автоматически при начале измерения.
Инструмент	<u>Iname</u>	Строка – название аналитического инструмента, с которым работает это окно (указывается при конфигурации инструментов). Например – « L-net ».
Канал	<u>Channel</u>	Число – номер измерительного канала выбранного инструмента для текущего слоя.
Активный слой	<u>CurrLayer</u>	Число – номер текущего слоя. Все операции выполняются только над ним.
Число слоев	<u>Layers</u>	Число. Количество одинаковых по длительности спектров, хранящихся в этом документе.
Полярность сигнала детектора	<u>Polarity</u>	Строка («+» или «-»). Полярность сигнала снимаемого с измерительного устройства. Предназначено для биполярных выходов инструментов, если нет возможности или желания переключить полярность аппаратно.
Режим фильтрации	<u>FilterMode</u>	Число (0 или 1). Включение активного (программного) фильтра во время получения данных (измерения).
Апертура фильтрации	<u>Faperture</u>	Число (от 2 до 100) последовательно расположенных точек хроматограммы, по которым происходит сглаживание.
Файл	<u>FileName</u>	Строка. Имя файла, из которого был загружен спектр.

Название свойства	Имя переменной	Описание свойства (назначение)
Тип метода	<u>MethodType</u>	Целое число. 0 – ГХ метод, 1 – ЖХ метод, 2 – АЦП метод. Это свойство может использоваться для преобразования одного метода в другой.
Единицы оси времени	<u>xUnitType</u>	Целое число. 0 – минуты, 1 – секунды.
	<u>XUnit</u>	Строковое представление единиц времени (мин – минуты, с – секунды)
Единицы амплитуды	<u>UnitType</u>	Целое число. 0 – вольты, 1 – наноамперы, 2 – отсчеты АЦП.
Единицы амплитуды	<u>yUnit</u>	Строка, передающая название единиц интенсивности сигнала. В – Вольт, nA – наноампер, ADC – отсчеты АЦП (точки).
Единицы площади	<u>UnitCap</u>	Строка, передающая размерность единиц измерения площади. Зависит от установленных единиц времени и единиц амплитуды. Например: мВ•мин, пА•с, mADC•мин, мВ•с и т. П.
Коэффициент перевода числа АЦП в единицы интенсивности	<u>Yconv</u>	Вещественное число. Коэффициент, показывающий, сколько единиц интенсивности приходится на один отсчет АЦП.
Дата изменения	<u>Date</u>	Дата последней регистрации текущего слоя спектра.
Время изменения	<u>Time</u>	Время последней регистрации текущего слоя спектра.
Режим автоматического старта метода	<u>AutoStartMethod</u>	Разрешить или запретить автоматический запуск метода по окончании измерения.
Завершение анализа по концу температурной программы	<u>StopOnProgDone</u>	0 – не завершать измерение по окончании температурной программы, 1 – завершить измерения в момент окончания температурной программы.
Разрешить автоматическое переключение диапазона	<u>RangeMode</u>	Разрешает (1) или запрещает (0) использование автоматического переключения диапазона.
Коэффициент переключения диапазона	<u>RangeScale</u>	Величина (вещественное число), указывающая отношение коэффициентов чувствительности диапазонов (если поддерживается аппаратурой).
Режим фильтрации измеренных данных	<u>FilterMode</u>	0 – медианная фильтрация выключена, 1 – включена.
Апертура фильтра	<u>Faperture</u>	3 ... 33 – апертура (окошко) медианного фильтра.
Имя сценария	<u>ScriptName</u>	Для установки имени сценария, по которому будет обрабатываться хроматограмма.

Название свойства	Имя переменной	Описание свойства (назначение)
Число измерительных каналов	<u>NacqChan</u>	Число (от 1 до 32) измерительных каналов, которые одновременно открываются для записи в соответствующие слои спектра (хроматограммы). Например, измерения ведутся одновременно по ПИД и ФИД с одного хроматографа.
Единицы концентрации	<u>ConcUnit</u>	Строка. Для задания имени применяемой единицы концентрации. Например: %, г/мл, промилле и т. Д.
Мертвое время колонки	<u>HoldUp</u>	Мертвое время колонки (время удерживания несорбирующегося компонента) в установленных единицах времени.
Длина колонки	<u>ColumnLen</u>	Длина хроматографической колонки в метрах.
Количество точек в спектре	<u>Npoints</u>	Количество точек (отсчётов) в хроматограмме.
Инструмент	<u>Iname</u>	Строка, наименование текущего хроматографического инструмента.
Инструмент	<u>LastIName</u>	Строка, наименование последнего успешно подключенного хроматографического инструмента.
Имя сценария обработки	<u>ScriptName</u>	Строка, имя сценария обработки текущего слоя. Каждый слой может обрабатываться одним из сценариев, содержащихся в методе. Если сценарий не выбран, то используется первый.
Защита слоя от редактирования	<u>Protected</u>	0 – разрешено редактирование, 1 – установлена защита от внесения изменений слоя.
Название текущего слоя	<u>CurlayDesc</u>	Строка. Свойство, локальное для каждого слоя спектра – обычно название образца.
Use calibration factors (Slope & Shift)	<u>_CalFromVars</u>	Включить использование градуировочных коэффициентов при съёме сигнала. При этом отключается внутренний пересчёт сигнала, полученного от аналитического прибора, основанный на диапазоне сигнала, возвращаемого прибором. Не требуется для обычной работы, поскольку для хроматографических измерений выполняют более общую задачу – построение градуировочной кривой, дающую зависимость между сигналом и количеством вещества (концентрацией).
Calibration factor A (Slope)	<u>_Slope</u>	Множитель (наклон) градуировочной кривой для корректировки сигнала.
Calibration factor B (Shift)	<u>_Shift</u>	Добавочный коэффициент (сдвиг) градуировочной кривой для корректировки сигнала. Для получения коэффициентов необходимо взять несколько отсчётов АЦП, померянных при разных уровнях входного сигнала и построить линейную зависимость.

### 4.5.3 Селекторы значений свойств

Некоторые системные свойства метода могут принимать только определённый набор значений (например «1- Вкл», 0 - «Выкл», либо список разрешённых текстовых строк, как, например, названия измерительных приборов). Для того, чтобы исключить путаницу при вводе параметров, лимитированных списками, предназначены списки ввода. В колонке «Значения» для свойств, имеющих только определённые допустимые значения, с правой стороны ячейки отображается кнопка, обозначающая, что для данной ячейки имеется предложенный набор значений. Нажатие на эту кнопку раскрывает список из возможных значений. Выбор элемента в списке производится мышью стрелками клавиатуры и «Enter».

В некоторых случаях пользовательские свойства требуют выбора из predetermined списка значений. Для того, чтобы указать, что для данного свойства существует список выбора в конфигурационной директории системы UniChrom (etc) создаётся файл вида:

**Имя\_Таблицы.Имя\_Колонки.Имя\_Свойства.Тип\_Селектора**

Имя таблицы свойств predetermined: **gVars**

Имя колонки «Значение» также predetermined: **Value**

Имя свойства задаются пользователем: например **DOC\_NAME**

Тип селектора определяет - будет ли возвращено одно значение или список:

- **list** — файл содержит список значений, который будет показан при нажатии на кнопку раскрытия списка (кнопка с треугольником)
- **script** — файл содержит одно значение, которое будет передано в ячейку при нажатии на кнопку выполнения (кнопка с тремя точками)

Таким образом, список докторов в директории UniChrom/etc должен называться:

**gVars.Value.DOC\_NAME.list**

Для UniChrom 5.0 допускается заполнение списка в кодировке Windows (cp1251) или UTF-8. Для UniChrom 5.1 допускается заполнение списка только в кодировке UTF-8.

Для таблицы «Свойства» возможно использование короткого варианта имени селектора:

**Имя\_Свойства.Тип\_Селектора**

то есть вместо **gVars.Value.DOC\_NAME.list** можно использовать **DOC\_NAME.list**

### 4.5.4 Статические селекторы

Статическим селектором является текстовый файл содержащий одно значение либо список значений для передачи в ячейку таблицы.

Для селекторов типа **list** разделителями списка значений является перевод строки (символ **13, 0x000d**). Если значение, переданное в ячейку должно быть много-строчным, то переводы строки обслуживаются в стиле языка «C»:

**\n** — перевод строки

**\t** — табулятор

**\\** - один обратный «слэш»

**\** - в конце строки означает продолжение её на следующей без разрыва.

Например, статический файл селектора содержит следующие данные:

A ¥

B

C\nC1\nC2\nC3\tC4

D ¥♣\

D1\

D2

E

При вызове селектора получается следующий список для выбора:

A ¥
B
C C1 C2 C3     C4
D     ¥♣D1D2
E

## 4.5.5 Динамические селекторы

Для формирования списка выбора «на лету» посредством выполнения кода предназначены селекторы этого типа. Признаком динамического селектора является наличие символа «#» в первой позиции первой строки файла селектора. Все остальные строки кроме первой игнорируются.

Поддерживаются следующие типы динамических (вызываемых селекторов):

- процесс (файл селектора начинается с символов #!)
- динамически загружаемый модуль (файл селектора начинается с символов #?)

Для селекторов типа процесс вся следующая за #! строка является командой с соответствующими параметрами, например:

```
#!/usr/bin/perl -e 'print "Item 1\n"; print "Item 2\n";'
```

или

```
#!c:\windows\system32\cscript.exe list.vbs
```

где list.vbs:

```
WScript.StdOut.WriteLine(«Item 1»);
```

```
WScript.StdOut.WriteLine(«Item 2»);
```

Для показа в виде списка собираются строки, выведенные командой в стандартный поток вывода. Строки, разделённые возвратами каретки, являются отдельными элементами списка выбора. Много-строчные элементы должны кватироваться в стиле «C»-строк (см. раздел 4.5.4 Статические селекторы)

Для селекторов типа модуль вся следующая за #? строка является списком из 3 параметров, разделённых «;» (точкой с запятой) :

**полный путь к модулю; имя точки входа; строка параметров**

предполагается, что точка входа всегда имеет следующий прототип:

```
long (const char * in_params, char * out_params); __attribute__((stdcall));
```

Целое число, возвращаемое функцией — количество байт, скопированных в out\_params

На предствление символов накладываются те же ограничения, что и для любых селекторов.

Перед вызовом любого из динамических селекторов производится макроподстановка командной строки или списка параметров модуля.

## 4.5.6 Макросы для подстановки значений

Для облегчения ввода повторяющихся параметров, даты, времени предназначены макросы. Макрос — текстовая строка, начинающаяся со знака \$ и завершающаяся знаком \$ или непечатаемым символом (пробелом или табулятором).

Пример макроса в тексте селектора:

Образец принят \$LabNum \$date\$ в \$time\$

При чтении списка выбора будет выполнена замена макроса на соответствующее значение. Макросом может быть имя свойства из таблицы свойств текущего метода, в этом случае будет произведена замена макроса на значение соответствующего свойства.

Встроенные макросы:

• **\$date\$** - возвращает текущую дату

• **\$time\$** - возвращает текущее время

• **\$prevdate\$** - вчерашняя дата

• **\$nextdate\$** - завтрашняя дата

Любые другие макросы интерпретируются как обращение к свойствам рабочей книги.

При отсутствии макроса в свойствах рабочей книги, предполагается, что это переменная окружения (environment) и выполняется соответствующая замена.

Пример - выборка списка врачей лечебного учреждения, выбранного ранее. Свойство рабочей книги **DIR\_ORG** содержит наименование организации. Файл динамического селектора содержит следующую строку:

```
#!c:\windows\system32\cscript.exe /nologo orglist.vbs 1 "$DIR_ORG"
```

или

```
#!$windir\system32\cscript.exe /nologo $UNICHROM$/Register/orglist.vbs 1 "$DIR_ORG"
```

Производится вызов скрипта **orglist.vbs** с параметрами 1 "\$DIR\_ORG"

## 4.5.7 Конфигурация селекторов в INI-файлах

Модернизированным (начиная с версии 5.0.5.980) способом конфигурации селекторов является использование INI-файла. В одном файле описывается конфигурация всех селекторов для данной таблицы. Имя файла должно соответствовать имени таблицы, заданному при разработке. Например, для таблицы «Свойства» файл конфигурации должен называться **gVars.ini** и быть расположен в UniChrom/etc. Следует использовать файлы селекторов только в кодировке UTF-8 (в Windows используйте редакторы Notepad или Far версии 2.0 и более).

Селектор, соответствующий имени свойства рабочей книги (**PROP\_name**) описывается секцией: **[PROP\_name]**

Типы селекторов определяются параметром **type** (возможные значения: **list** или **value**). По умолчанию тип селектора — список.

Селектор **list** - возвращается список значений, который доступен при нажатии на кнопку раскрытия списка (стрелка вниз). Значения списка задаются прямо в секции или являются результатом вывода другой программы.

Например - список сотрудников для заполнения свойства Maker:

```
[Maker]
Островська О.О.
Пікарська Т.А.
Олейнік А.А.
```

Явное указание типа списка:

```
[Maker]
type=list
Островська О.О.
Пікарська Т.А.
Олейнік А.А.
```

Селектор типа значение **value** — обеспечивает возврат в ячейку одного значения, даже если оно содержит переводы строк.

Для селекторов обоих типов можно использовать выполнение других программ. В этом случае секция должна содержать параметр **code** и не содержать других значений.

```
[DIR_ORG]
type=list
code=#!c:\windows\system32\cscript.exe /nologo "c:\unichrom\Register\orglist.vbs" 0
```

```
[Doctor]
type=list
code=#!c:\windows\system32\cscript.exe /nologo "c:\unichrom\Register\orglist.vbs" 1 "$DIR_ORG"
```

В случае, если для разных свойств нужно использовать одинаковые списки значений, или результат выполнения одной и той-же программы, то можно использовать ссылки на секции параметром **link**. Ссылки разрешаются до тех пор, пока не будет найдена секция без **link**.

```
[Analyze1]
link=OBJ_OBJ
```

```
[Analyze2]
link=Analyze1
```

## 4.6 Страница пиков спектра

Рис. 28. Характерный вид страницы пиков спектра

1 – реперный пик; 2 – контекстное меню, вызываемое нажатием правой кнопки мыши (служит для установки атрибутов пика: репер – для идентификации, точка калибровки – для построения калибровочной кривой данного компонента); 3 – точка калибровки; 4 – репер и точка калибровки одновременно.

№	Имя пика	Положение	Площадь, Вольт·10(-3)·мин	Высота, Вольт·10(-3)	Об. %	Масс %	Мол
2	н-бутан	4,858	0,96927	24,349	0,1014	0	0
3	изопентан	5,3933	15,008	367,42	1,57	0	0
4	н-пентан	5,6687	10,94		1,1444	0	0
5	5	6,184	2,4921		0,2607	1	0
6	6	6,7213	3,8356	86,354	0,40125	0	0
7	2-метилпентан	6,7913	17,268	370,94	1,8065	0	0
8	3-метилпентан	7,1067	13,998	290,59	1,4644	0	0
9	н-гексан	7,5147	14,876	302,47	1,5562	0	0
10	10	8,216	2,8139	54,639	0,29436	0	0
11	11	8,3193	3,1173	59,498	0,32611	0	0

На этой странице отображается таблица пиков текущего слоя (если они есть).

В этой таблице все графы доступны для редактирования за исключением:

- centre position, left and right peak border;
- площадь пика;
- высота пика.

**Имя пика** – название компонента. Калибровочные кривые для данного компонента строятся по пикам с одинаковыми именами.

**Положение** – положение центра пика на оси времени. Время удерживания в минутах.

**Площадь** – площадь пика в мВ·мин, рассчитанная системой UniChrom (см. расчёт площади).

Если площадь пика <0, то она принимается равной 0.

**Высота** – расстояние от базовой линии до вершины пика в мВ (см. расшифровка спектра).

**Концентрации** – объемная, массовая, мольная концентрация, титр, молярность компонента рассчитывается с помощью окна обработки или вносятся вручную (например, для компонентов стандарта). Формулы расчёта концентрации приведены в разделе обработка спектра.

**Коэффициент** – коэффициент чувствительности детектора к данному компоненту рассчитывается с помощью окна обработки или вносятся вручную.

**Групповой индекс** – указывает принадлежность компонента к какой-либо группе веществ. Для пиков с одинаковыми групповыми индексами считаются суммарные концентрации.

**Удерживания индекс** – используется для указания индексов удерживания реперных пиков, для остальных пиков рассчитывается в окне обработки спектра.

**Масса** – молекулярная масса компонента в а. е. м. Используется при расчёте массовой концентрации.

**T кипения** – температура кипения вещества.

**Левая граница** и **Правая граница** – положения границ пика в минутах.

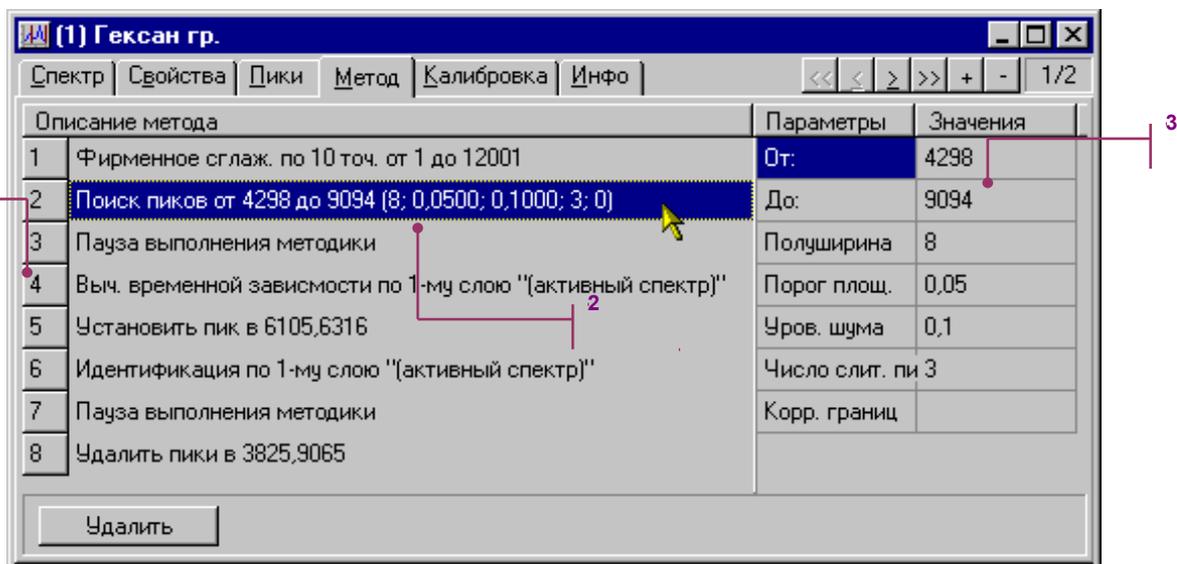
При открытой странице "Пики" с помощью меню {Правка/Копировать} всю информацию о пиках можно скопировать в буфер обмена в виде текстовых строк, разделенных табуляторами. Эта таблица может быть вставлена в Microsoft Word и с помощью следующей последовательности действий превращена вот в такую:

Бензол	6,0280	0,70870	11,07108	5,94667	6,18400
Толуол	7,2227	0,60577	7,04008	7,07467	7,36800
этилбензол	9,1853	0,58339	4,75078	9,01600	9,30000
п-ксилол	9,4107	0,52442	4,17112	9,30000	9,51867
м-ксилол	9,6133	0,55947	4,18807	9,51867	9,83600
о-ксилол	11,2400	0,51194	3,25803	11,06000	11,44267

## 4.7 Страница метода спектра

Рис. 29. Характерный вид страницы метода спектра

1 – порядок следования элементов (можно изменить, перетаскивая их мышью); 2 – список элементов методики; 3 – список свойств (параметров) выбранного элемента методики (большинство параметров доступно для редактирования).



Метод – это записанная последовательность команд обработки. Запись команд обработки происходит, если в окне обработки спектра установлен флажок **"Запись макро"**.

В действительности метод работает всегда, даже если запись команд выключена. Исполняет он только одну команду – ту, которая была введена последней. При наличии записанного метода (он отображается в виде списка действий в столбце "Описание метода") будет произведен его автоматический запуск после окончания регистрации хроматограммы. Если в методе будет находиться команда "Пауза выполнения методики" (см. рисунок), то его исполнение прекратится. Возобновить

исполнение метода или запустить его заново можно с помощью кнопки  в панели инструментов или кнопки **F9** на клавиатуре. Метод завершается автоматически по исполнению всех своих элементов.

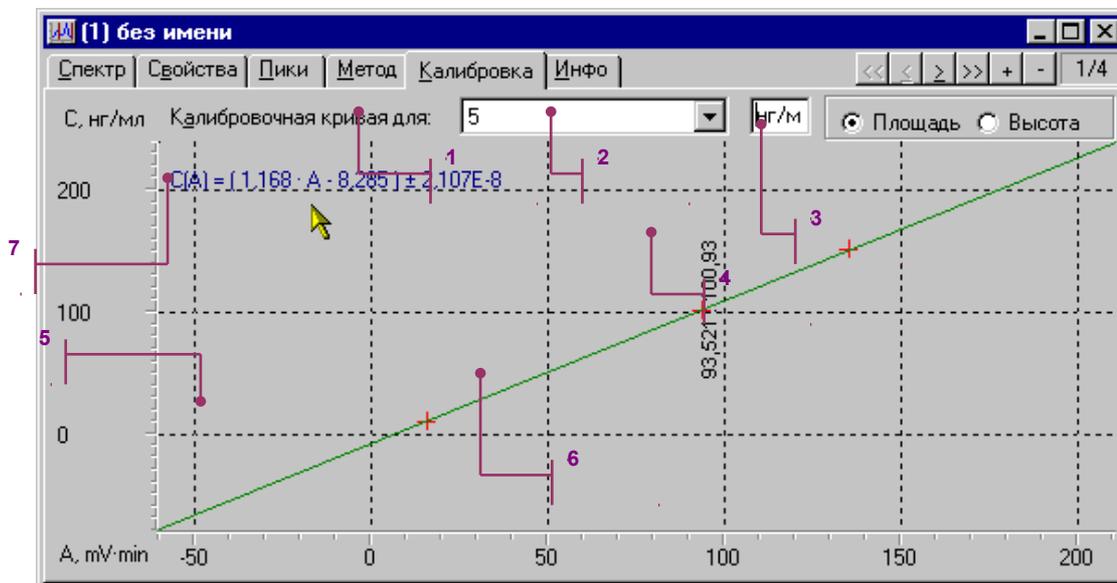
На странице метода можно удалить лишние элементы последовательности обработки, изменить порядок выполнения их (просто перетягивая мышкой "ухватившись" за порядковый номер), а также исправить параметры. Чтобы изменения сохранились и далее, спектр надо сохранить на диске.

В качестве элементов метода могут использоваться **все функции обработки** и **отчёты**, в том числе и "быстрый отчёт", который вызывается по кнопке , в панели инструментов.

## 4.8 Калибровка в окне спектра

Рис. 30. Характерный вид страницы калибровки спектра

1 – название пика, для которого построена калибровочная последовательность; 2 – единицы измерения концентрации; 3 – переключатель способа построения калибровки; 4 – калибровочная кривая; 5 – одна из точек калибровки (пик имеет имя "5" и установленный атрибут "точка калибровки"  $C=10$ ); 6 – неизвестная концентрация, найденная по кривой (в графе "концентрация" у пика "5" стоит 1); 7 – уравнение.



Последовательность создания и использования калибровочной таблицы.

Для расчёта по методу внешнего стандарта необходима калибровка, которая ставит в соответствие площади пиков и их концентрации. Сама калибровка происходит автоматически, если определить в хроматограмме стандартной смеси пики как внешние стандарты.

Вначале у известных компонентов стандартной смеси (см. расчёт концентрации методом внешнего стандарта) расставляются концентрации. Затем у выбранных пиков устанавливаются атрибуты точки. Для пиков с одинаковым именем и установленным атрибутом точки калибровки строится калибровочная кривая. Кривые для различных компонентов можно увидеть, переключая ниспадающий список вверху страницы. Если калибровочная кривая для данного компонента (указанного в ниспадающем списке) построена, то на графике видна формула калибровочной кривой вида  $C(A)=F(A)$ , где  $A$  – либо площадь либо высота,  $C$  – концентрация.

В настоящее время используются следующие типы калибровочных кривых:

- $C(A) = \alpha \cdot A \pm \Delta C$ ;
- $C(A) = \alpha \cdot A + \beta \pm \Delta C$ ;
- $C(A) = \alpha \cdot A^2 + \beta \cdot A + \gamma \pm \Delta C$ ;
- $C(A) = \alpha \cdot A^\beta \pm \Delta C$ .

Выбор типа калибровочной кривой производится в меню, при нажатии правой кнопки мыши на область калибровочного графика.

Точки калибровочной кривой отмечаются красными крестами. Величина  $\Delta C$  (среднеквадратичное отклонение), как следует из формулы, в единицах концентрации.

Указать, что пики являются внешними стандартами можно двумя способами:

- 1) При отображённом "Спектре" дважды нажать мышкой на выбранный пик. В появившемся окне свойств пика заполнить все известные параметры вещества и указать, что вещество является внешним стандартом (его количество вещества известно, следовательно, должно быть указано).
- 2) При отображённой таблице "Пики" в выбранной (подсвеченной строке) нажать правой клавишей мыши. В появившемся контекстном меню указать, что пик является "Точкой калибровки", а затем в графе концентрация указать известное значение.

Содержимое странички "Калибровка" можно скопировать в буфер обмена в виде картинки,<sup>14</sup> которую можно вставить в отчёт.

<sup>14</sup> Windows метафайл – векторный рисунок, хорошо масштабируется.

Построенную калибровку можно сохранить вместе со спектром и пользоваться до тех пор, пока позволяет совесть или GLP<sup>15</sup>.

Использовать калибровочную таблицу для расчёта концентраций можно двумя способами.

- 1) В окне обработки спектра выбрать – Расчёт/Внешний стандарт и нажать кнопку **[Применить]**. В результате у пиков, имена которых совпадают с именами калибровочных последовательностей, и которые не являются "Точкой калибровки", будет вычислена концентрация по калибровочной кривой. Смотри пример **Расчёт токсинов**.
- 2) Если необходимо увидеть, как ложится площадь пика на калибровочную кривую, то установите у исследуемого пика концентрацию, меньшую **0**, и атрибут пика – "Точка калибровки". После этой операции на калибровочной кривой появляется крестик, возле которого вертикальная надпись вида AAAA:CCCC (см. рисунок), где AAAA – площадь пика компонента, а CCCC – рассчитанная по калибровочной кривой концентрация.

---

<sup>15</sup> Good Laboratory Practice

## 4.9 Инструмент окна спектра

Для управления хроматографическим прибором предназначена специальная страница окна спектра. В зависимости от типа метода: ГХ или ЖХ, эта страница имеет различный вид.

Система UniChrom обеспечивает управление всеми хроматографическими приборами, используя универсальный интерфейс пользователя. Таким образом, управление HP-6890 отличается от "Цвет-800" только тем, что у "Цвета" управляется то, что у него реально есть. Управление приборами сходными по характеристикам не различается ни внешне, ни, по сути.

Набор установок прибора для каждого типа анализа хранится в файле метода (\*.\$\$\$), и загружается в прибор при подключении метода к прибору или при модификации установок.

### 4.9.1 Подключение прибора к окну спектра

Для того чтобы готовые установки были переданы в прибор, или ваши изменения метода автоматически передавались в прибор, прибор следует **подключить** (Online). Для этого нажмите кнопку



в панели инструментов, и в появившемся окне выберите хроматографический инструмент нужного типа. Если прибор подключился к окну, то заголовок окна меняется с "Мой метод" на "Название прибора". Где "Название прибора" – имя прибора указанное в редакторе конфигурации при установке системы. При подключении прибора, на странице управления инструментом начинает мигать зеленый индикатор "Активность".

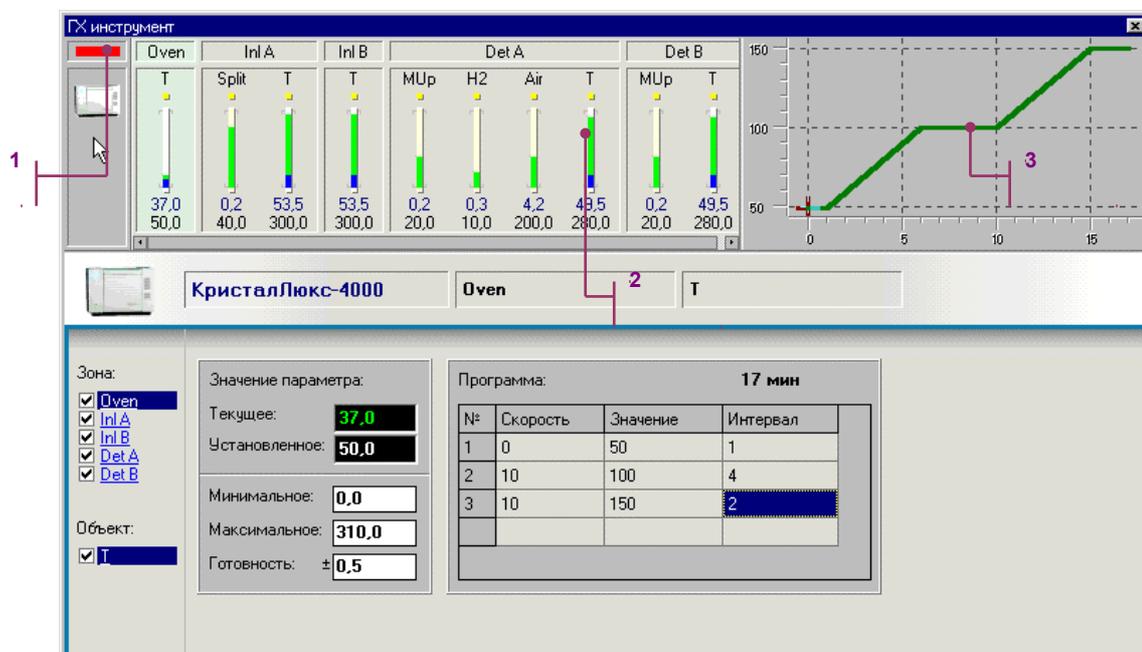
Прибор подключится автоматически, если метод использовался ранее и был записан на диск, при нажатии на кнопку .

### 4.9.2 Установки ГХ прибора

В зависимости от конструктивных особенностей и аппаратной конфигурации ГХ прибора, количество зон управления может различаться. Поэтому, по мере возможности UniChrom пытается скрыть отсутствующие или неуправляемые зоны.

Рис. 31. Внешний вид окна управления ГХ прибором

1 – индикатор; 2 – регуляторы температур, расходов и давлений; 3 – профиль программы (температуры, расхода или давления газа).



#### 4.9.2.1 Термостат

Ступенью температурной программы в системе UniChrom называется последовательность:

- линейный нагрев со скоростью  $dT/dt$  °C/мин до температуры  $T$ . При нулевой скорости нагрева этот участок исчезает;
- изотерма длительностью  $t$  мин. Длительность этого участка может устанавливаться равной 0 мин.

Установки, которые UniChrom обеспечивает для термостата колонок ГХ прибора:

Параметр	Описание
Температура изотермы	Как правило, устанавливается в диапазоне от $T_{\text{окр.среды}} + 2^{\circ}\text{C}$ до $400^{\circ}\text{C}$ через $0,1^{\circ}\text{C}$ (определяется конструкцией прибора). Количество ступенек температурной программы определяется конструкцией прибора. При достижении максимального количества, они перестают добавляться при редактировании температурной программы.
Скорость программирования температуры	Устанавливается от $0^{\circ}\text{C}/\text{мин}$ до $100^{\circ}\text{C}/\text{мин}$ через $0,1^{\circ}\text{C}$ (определяется конструкцией прибора). Количество ступенек температурной программы определяется конструкцией прибора.

#### 4.9.2.2 Инжекторы

Установки, которые UniChrom обеспечивает для инжекторов ГХ прибора:

Параметр	Описание
Температура инжектора	Как правило, устанавливается в диапазоне от $T_{\text{термостата}} + 2^{\circ}\text{C}$ до $400^{\circ}\text{C}$ через $0,1^{\circ}\text{C}$ (определяется конструкцией прибора). Некоторые приборы имеют общую температуру для обоих инжекторов.
Расход газа-носителя	Устанавливается от $0$ мл/мин до максимального паспортного значения.

#### 4.9.2.3 Детекторы

Установки, которые UniChrom обеспечивает для детекторов ГХ прибора:

Параметр	Описание
Температура детектора	Как правило, устанавливается в диапазоне от $T_{\text{термостата}} + 2^{\circ}\text{C}$ до $400^{\circ}\text{C}$ через $0,1^{\circ}\text{C}$ (определяется конструкцией прибора). Некоторые приборы имеют общую температуру для обоих детекторов.
Расход газа поддува	Устанавливается от $0$ мл/мин до максимального паспортного значения.
Расход водорода для пламенных детекторов	– // – Выбирается с учетом конкретной задачи и устойчивости горения.
Расход воздуха для пламенных детекторов	– // –

### 4.9.3 Установки ЖХ прибора

Система UniChrom обеспечивает управление жидкостными хроматографами, имеющими до 4 насосов. Работу можно производить как в изократическом, так и в градиентном режиме.

Установки насосов ЖХ хроматографа:

Параметр	Описание
Расход элюента	Устанавливается от 0 мл/мин до максимального паспортного значения. В режиме градиента устанавливается в % от суммарного расхода. В режиме ручного управления устанавливается в мл/мин.
Давление на выходе смесителя (на входе в колонку)	Устанавливаются минимальный и максимальный предел давления в Бар. Превышение верхнего предела - аварийное состояние – выполнение программы потоков прекращается, и насосы выключаются. Падение давления ниже минимального предела по длительности большее 60 сек - аварийное состояние.

Рис. 32. Внешний вид окна управления ЖХ прибором

1 – индикаторы: времени, программы, потоков ABCD, давления на входе колонки; 2 – управление насосами и программой; 3 – установка пределов давления на входе колонки; 4 – профиль градиента; 5 – таблица редактирования программы потоков (при перемещении на пустую строку новый элемент добавиться автоматически); 6 – опция выключения насосов по окончании анализа; 7 – кнопки добавления и удаления элементов градиента; 8 – ручная установка потоков; 9 – таблица изменения потоков в ручном режиме (для установки потоков необходимо нажать кнопку).

**Инструмент ЖХ - "Стайер-LNet"**

0,09 0,98 0,02 0,00 0,00 7,30

Время Поток А Поток В Поток С Поток D Давление

0.0 Поток

1.0

0.0 0.2 0.6 Время

Пределы давления: Верхний 210 Нижний 0 Уст.

Новая Включить Старт Активность Стайер-LNet

Программа потоков Ручное управление

Шаг	Время, мин	Длит., мин	A, %	B, %	C, %	D, %	Поток, мл/мин
1	0	0,2	98	2	0	0	1
2	0,2	0,3	70	30	0	0	1
3	0,5	0,02	98	2	0	0	1
4	0,52	0,2	98	2	0	0	1
	0,72						

Добавить Удалить  Выключить насосы в конце

Программа потоков (вкл.)

Программа потоков Ручное управление

	Поток А	Поток В	Поток С	Поток D	Поток, мл/мин
%	98	2	0	0	1
мл/мин	0,98	0,02	0	0	

Установить

#### 4.9.4 Установки ЖХ “Милихром-5” / “Милихром А-02”

Рис. 33. Задание параметров конфигурации жидкостным хроматографом “Милихром-5” / “Милихром А-02” на странице **ЖХ-инструмент**. Автоматический режим.

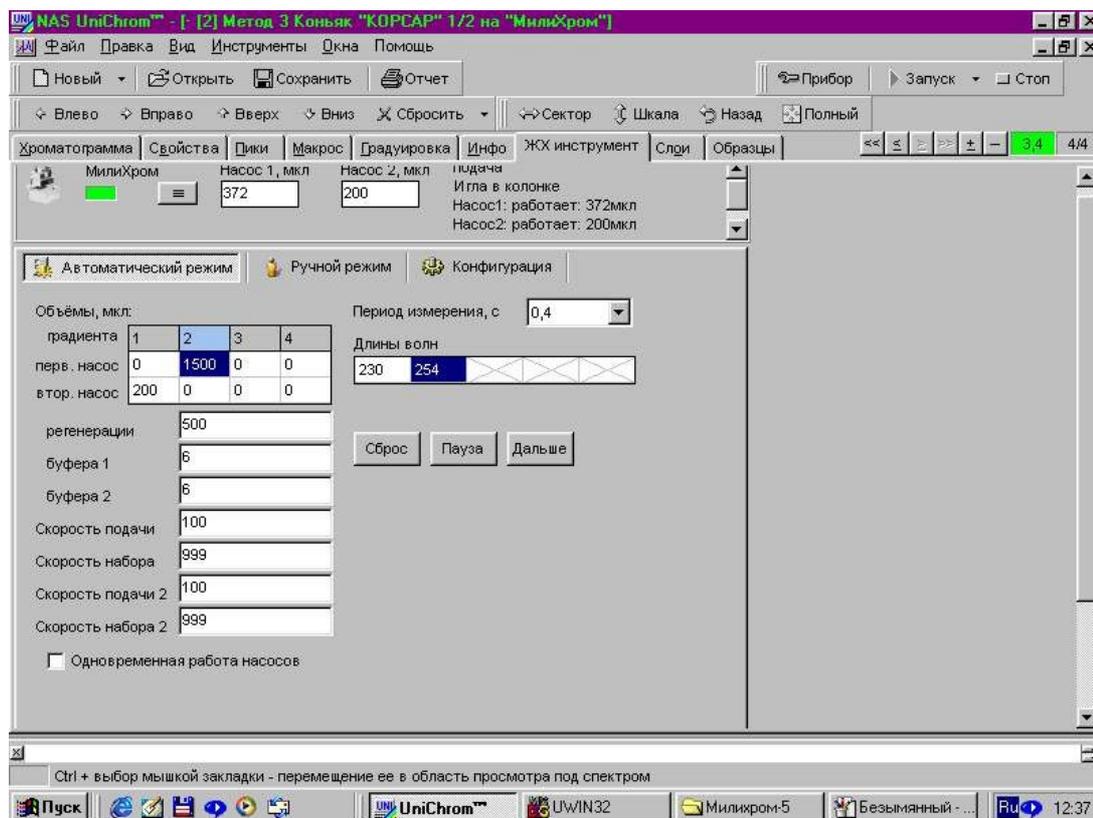


Рис. 34. Задание параметров конфигурации жидкостным хроматографом “Милихром-5” / “Милихром А-02” на странице **ЖХ-инструмент**. Ручной режим.

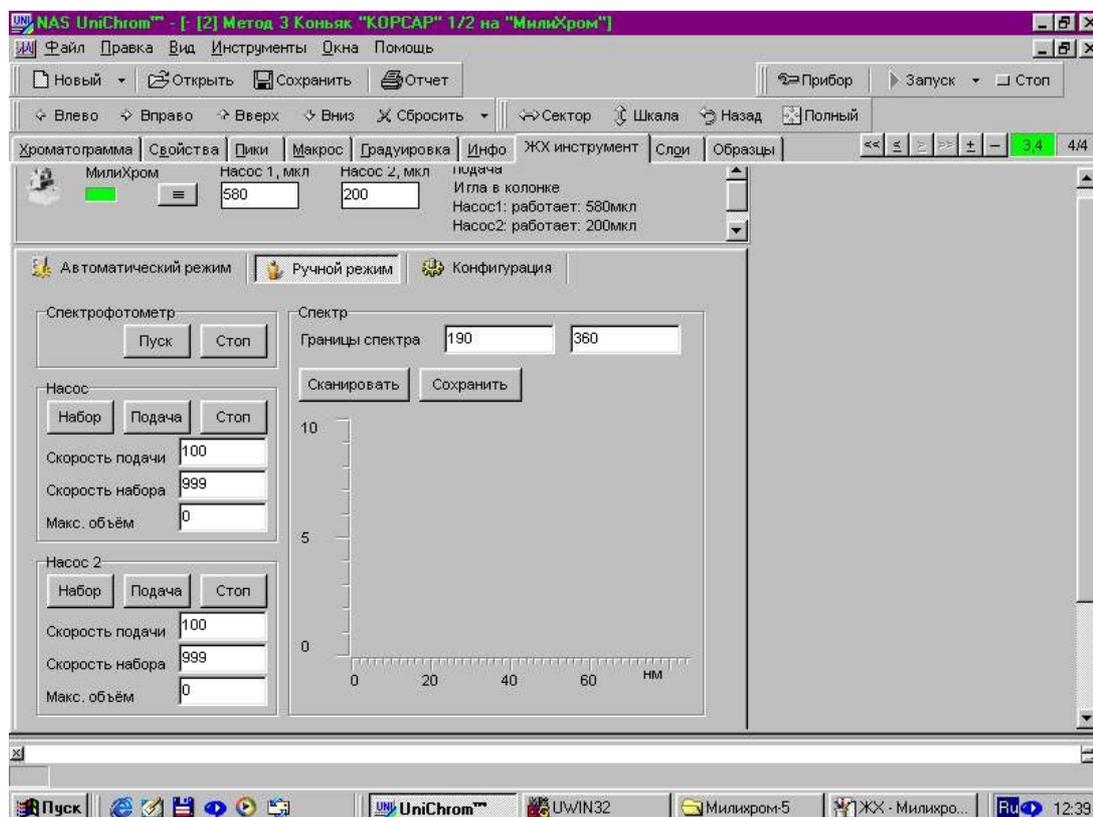
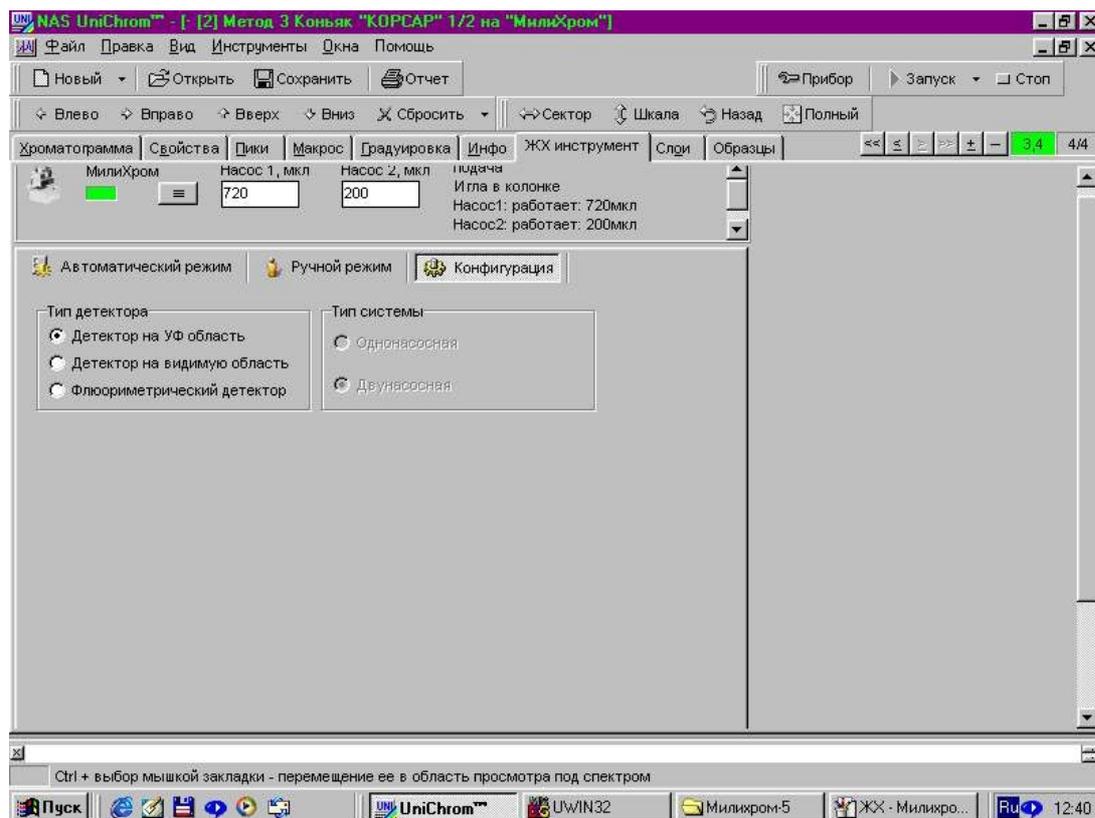


Рис. 35. Задание параметров конфигурации жидкостным хроматографом “Милихром-5” на странице ЖХ-инструмент.



## 4.9.5 Работа с ГХ или ЖХ прибором

### 4.9.5.1 Подготовка к измерению

Если все установки всех необходимых зон находятся в пределах в установленных пределах (нет красных указателей превышения значения), то метод можно перевести в состояние подготовки к измерению (PreRun).

### 4.9.5.2 Измерение

Переход к началу анализа отображается:

- В окне спектра индикатор номера измеряющего слоя становится зеленым, звучит сигнал начала измерения, и регистрация данных начинается с 0,0 мин.;
- ГХ прибор отображает состояние анализа своими индикаторами в соответствии с конструктивными особенностями.

Во время анализа изменение установок прибора запрещено.

При регистрации хроматограммы по графику температурной программы перемещается красный крестик **+**, указывающий текущее время от начала анализа – **t** и текущую температуру – **T**.

### 4.9.5.3 Завершение измерения

Выполнение метода завершается по истечении времени регистрации. Сразу по окончании звучит сигнал, и выполняется сценарий автоматической обработки. Также происходит автоматическое сохранение данных.

## 4.10 Таблица слоёв

Эта таблица является ещё одним представлением того пакета данных, который вы уже накопили. Каждая хроматограмма (массив данных) имеет ряд атрибутов, которые видны в этой сводной таблице одновременно для всех.

Наиболее значимые атрибуты:

- Канал регистрации – канал, по которому произведено или будет производиться измерение. Канал регистрации также показывает строковое наименование сигнала, который был или будет записываться;
- Дата модификации – время, когда была начата регистрация этих данных;
- Полярность сигнала детектора;
- Цвет графика для отображения сигнала;
- Защита слоя – признак того, что данные не могут быть модифицированы. Установка и отключение защиты производится через свойства спектра;
- Сценарий – наименование сценария обработки данного слоя. Можно выбрать из ниспадающего списка один из написанных ранее на странице “Макрос” сценариев;
- Видимость – виден или нет данный слой в режиме многослойного просмотра;
- Образец – ссылка на образец, результатом ввода которого является данная хроматограмма. Не редактируется;
- Режим – ссылка на режим прибора, использованный при записи хроматограммы. Не редактируется;
- Название – текстовое название данной хроматограммы. Создаётся автоматически при обработке таблицы образцов из имени текущего образца. Название может быть изменено в любой момент.

Таблица позволяет менять порядок следования слоёв перетаскиванием слоя в колонке, содержащей его номер. Таблица позволяет быстро удалять группы слоёв, идущие подряд, через контекстное меню на правой клавише мышки.

Таблица позволяет скрыть или показать скрытые ранее столбцы через контекстное меню на правой клавише мыши.

## 4.11 Таблица образцов

Данная таблица содержит описание и последовательность ввода образцов. Последовательность ввода обрабатывается и системой UniChrom, и драйвером прибора (если поддерживается), и, следовательно, может работать как при наличии дозирующего устройства, так и при его отсутствии. Переход к следующему образцу происходит при успешном завершении анализа предыдущего образца.

В таблице образцов задаются:

- **Позиция** – номер ячейки дозирующего устройства. Не используется при ручном вводе;
- **Башня** – номер машины для ввода пробы (если их несколько). Не используется при ручном вводе;
- **Объём** – ввод объёма пробы, для набора и ввода автодозатором (в мкл);
- **Вводов** – планируемое количество вводов данного образца;
- **Введено** – количество успешно выполненных вводов данного образца. При достижении количества **Вводов** = **Введено** система переходит к следующему образцу;
- **Наименование** – название образца. Автоматическое именование слоёв использует название образца для генерации имени хроматограммы в стиле: “Имя образца N/M”. Где N – порядковый номер текущего ввода данного образца, а M – общее количество вводов предназначенных образцу.

Последовательность образцов можно выполнять не только сначала, но и с любого места. Для этого в режиме “Подготовки” (PRERUN) в контекстном меню таблицы образцов выбирается пункт – “Начать с текущего образца”. После этого в ниспадающем списке кнопки “Запуск” главной панели инструментов выбирают – “Образцы с текущей позиции”. Загрузка последовательности образцов в прибор будет произведена с выбранной позиции. Удаление образцов производится через контекстное меню, или нажатием клавиши “Del”.

### 4.11.1 Параметры ввода

Перед началом анализа обязательно следует выбрать источник ввода образцов:

- Вручную;
- Жидкость;
- Газ.

Ручной ввод предполагает обработку последовательности оператором, и список образцов не загружается в прибор, даже если прибор поддерживает автодозатор.

Жидкость вводится автоматическим жидкостным дозатором. Если при переходе в режим подготовки измерения появляется сообщение о невозможности выбора данного источника ввода, то это означает, что данный тип ввода пробы не поддерживается прибором или произошла ошибка дозирующей системы.

Газ вводится с помощью системы кранов дозаторов или кранов переключателей. Система должна поддерживать такой режим ввода или появится сообщение об ошибке.

Параметры дозирующей системы зависят от конкретного прибора. Список этих параметров появляется при подключении к прибору. Диапазоны доступных значений и смысл параметров дозирующей системы описаны в руководстве к дозатору.

### 4.11.2 Дополнительные устройства

Во время анализа иногда требуется, чтобы некоторые исполнительные устройства прибора меняли своё состояние. В частности это относится к клапанам переключателей, клапанам криосистемы и т.п. Таблица изменения состояния периферийных устройств состоит из трёх столбцов:

- **Время** – время от начала анализа, когда будет произведено изменение состояния объекта;
- **Кран** – порядковый номер объекта (крана), который должен изменить состояние в заданный момент времени;
- **Состояние** – целое число, характеризующее состояние объекта. Если объект – обычный клапан, то его состояния: 0 – выключено, 1 – включено. Если объект – многопозиционный переключатель, то это значение определяет номер позиции в которую объект перейдёт.

Добавление и удаление событий производится через контекстное меню на правой клавише мыши.

## 4.12 Обработка хроматограммы

### 4.12.1 Окно свойств пика

При работе в окне спектра часто необходимо просмотреть или изменить некоторые свойства пиков. Чтобы не перелистывать постоянно закладки "Спектр" и "Пики" введено окно свойств пика.

Это окно появляется при двойном щелчке мышкой на пике между его границ, либо при нажатии **[Ctrl]+[J/Enter]** если маркер был установлен внутри границ пика. Окно свойств пика разделено на несколько страниц, каждая из которых позволяет редактировать свойства пика, объединенные по назначению. По каждому из элементов редактирования окна (строки ввода, переключатели, кнопки) можно получить контекстную подсказку, если при нажатой кнопке  выбрать мышкой интересующий элемент.

#### 4.12.1.1 Общие свойства пика

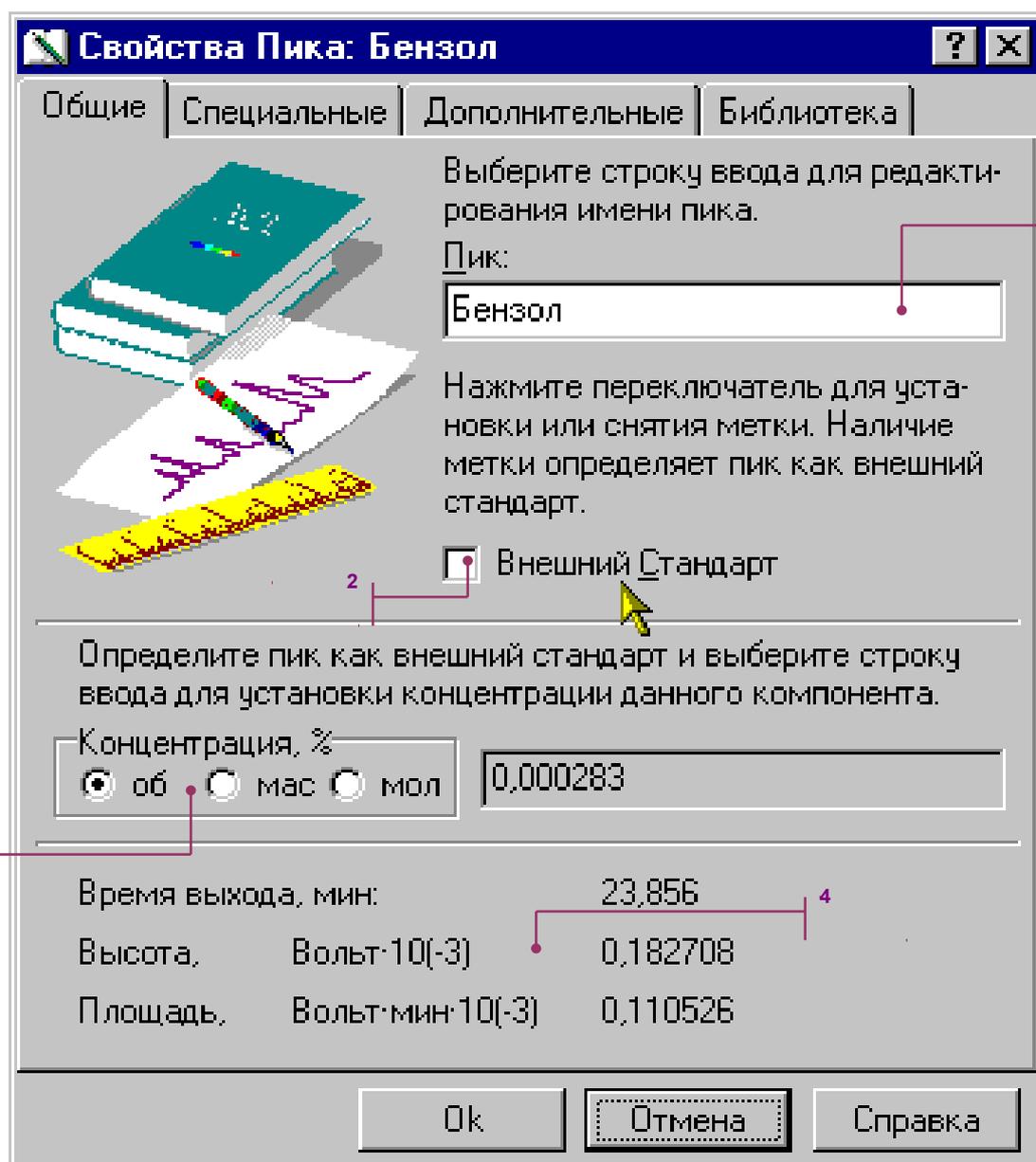
В общих свойствах пика устанавливается имя компонента. Имя является тем атрибутом, по которому в системе UniChrom различаются калибровочные последовательности. При идентификации компонентов по библиотеке имена их изменяются в соответствии с данными библиотечного спектра.

Если пик является внешним стандартом (служит для построения калибровочной кривой), то здесь следует указать его концентрацию, а так же отметить птичкой, что компонент добавляется в калибровочную последовательность.

Если пик не является внешним стандартом, то можно посмотреть его концентрации (объемную, массовую и мольную). В этой странице также указаны основные параметры пика – положение, площадь и высота.

Рис. 36. Характерный вид диалогового окна общих свойств пика

1 – имя пика; 2 – метка, указывающая, что пик – внешний стандарт; 3 – концентрация соединения (можно изменить, если пик является внешним стандартом); 4 – общие свойства пика.



#### 4.12.1.2 Специальные свойства пика

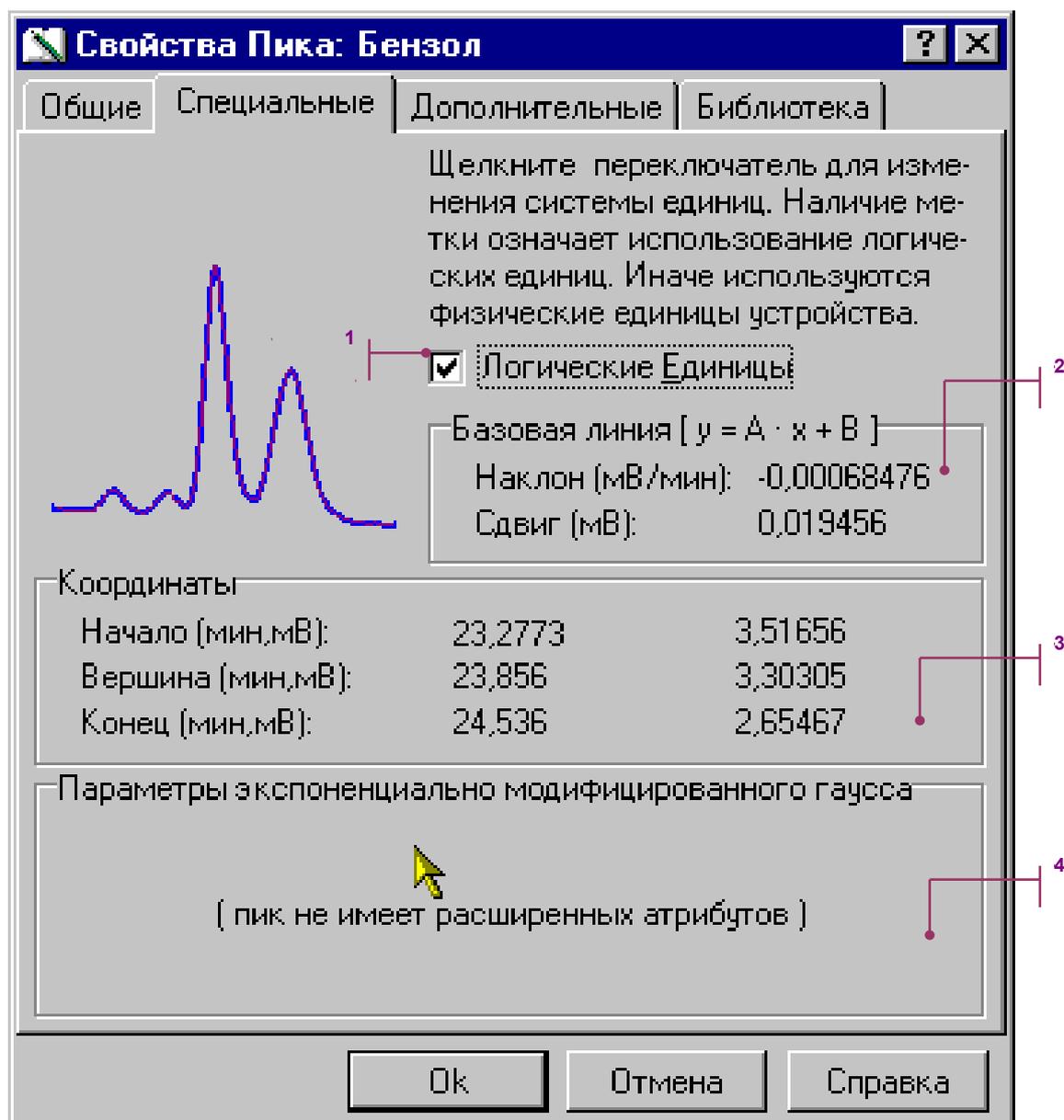
В специальных свойствах пика отображается уравнение базовой линии пика, координаты начала, центра и конца.

- логические единицы – минуты, мВ;
- физические единицы (внутренние единицы системы) – № точек спектра и отсчеты АЦП.

Если в пик вписана Гауссова или экспоненциально-модифицированная Гауссова кривая, то расширенные атрибуты отображают полуширину  $\sigma$  и  $\tau$  параметров вписанного контура (см. обработка спектра – правка пиков).

Рис. 37. Характерный вид диалогового окна специальных свойств пика

1 – переключатель между физическими (устройства) и логическими (human) единицами измерения; 2 – параметры базовой линии; 3 – координаты пика; 4 – расширенные атрибуты пика.



### 4.12.1.3 Дополнительные свойства пика

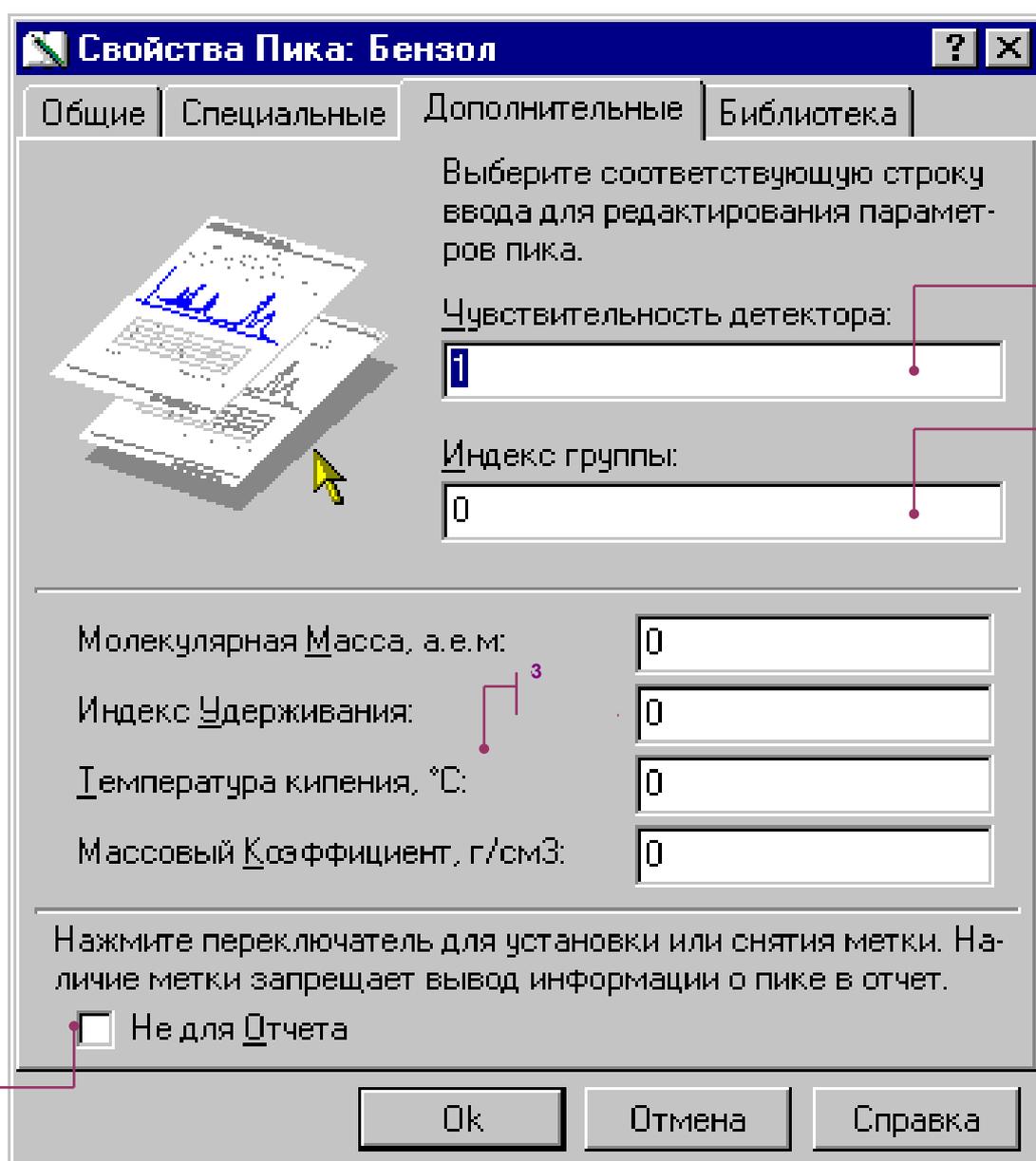
Чувствительность детектора или фактор отклика используется как весовой множитель при расчёте концентрации (см. обработка спектра – расчёт). Индекс группы определяет принадлежность пика к определенной группе веществ. Для пиков с одинаковым групповым индексом считается суммарная концентрация, которая добавляется в таблицу пиков как фиктивный пик.

Молекулярная масса используется при расчётах массовых концентраций. Индекс удерживания используется при идентификации компонентов по библиотеке. Массовый коэффициент (плотность) используется при расчёте концентраций.

Атрибут пика "не для отчёта" указывает, что информация об этом пике не передается в отчёты, но этот пик используется в расчётах.

Рис. 38. Характерный вид диалогового окна дополнительных свойств пика

1 – коэффициент чувствительности; 2 – групповой индекс пика для расчёта групповой концентрации; 3 – общие параметры соединения; 4 – метка, указывающая, что пик не включается в отчёт.



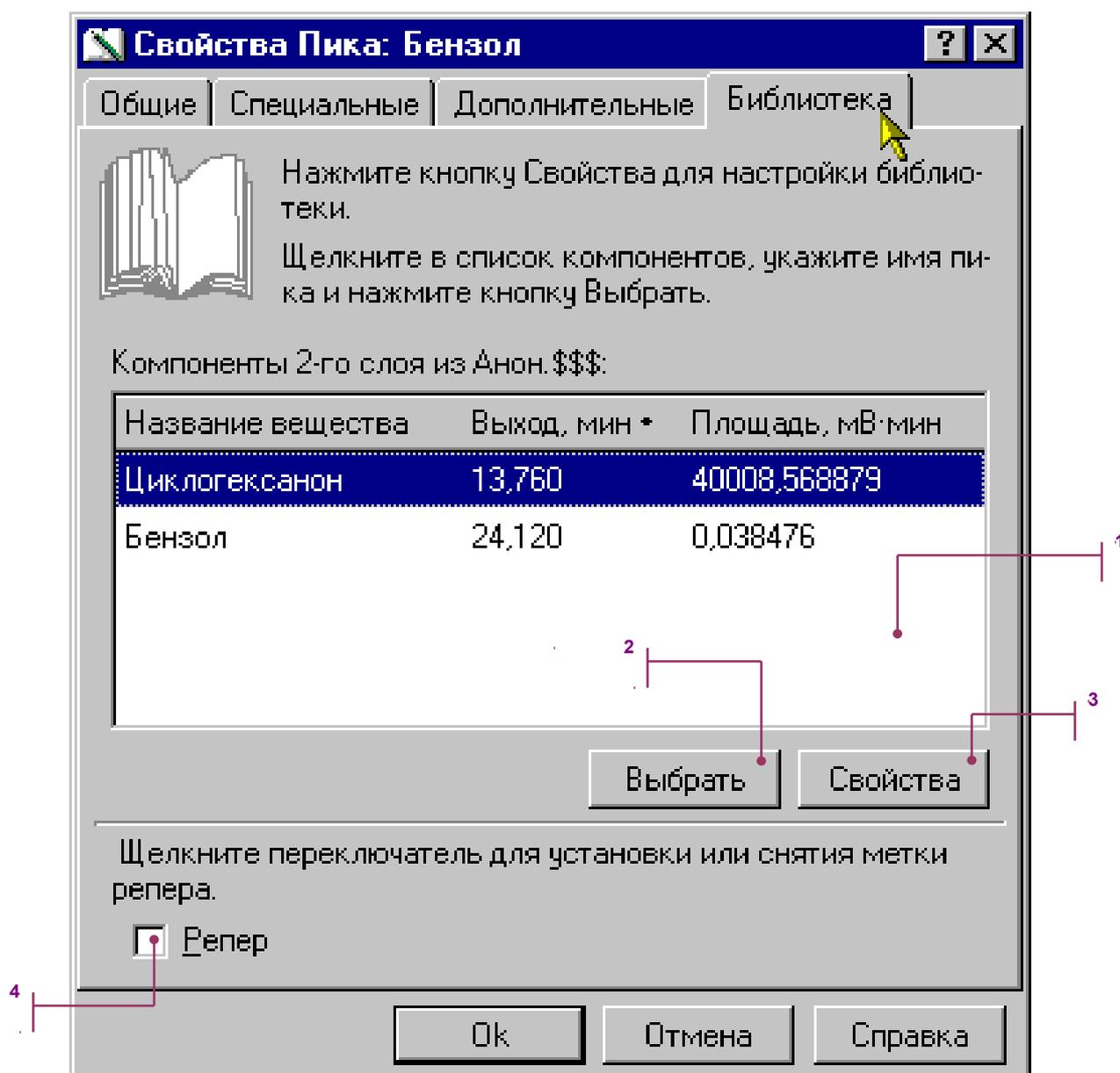
#### 4.12.1.4 Библиотека спектра в окне свойств пика

На странице библиотеки можно произвести идентификацию компонента. Библиотекой является слой текущего либо другого спектра, выбранный в окне свойств библиотеки кнопкой [Свойства]. По умолчанию библиотечный слой выбирается автоматически в текущем спектре. Библиотечным считается слой, содержащий максимальное количество пиков, чьи имена не являются числами. Наиболее подходящие кандидаты идентификации отображаются в списке. Количество кандидатов также определяется в окне свойств библиотеки.

Компоненты в списке кандидатов могут быть отсортированы по названию, времени или площади. Сортировка производится после нажатия мышкой на соответствующий заголовок таблицы.

Рис. 39. Характерный вид диалогового окна библиотеки пика

1 – библиотечный список пиков, наиболее подходящих для идентификации; 2 – выбор пика из списка; 3 – выбор библиотеки и настройка её параметров; 4 – метка, указывающая, что пик является репером.



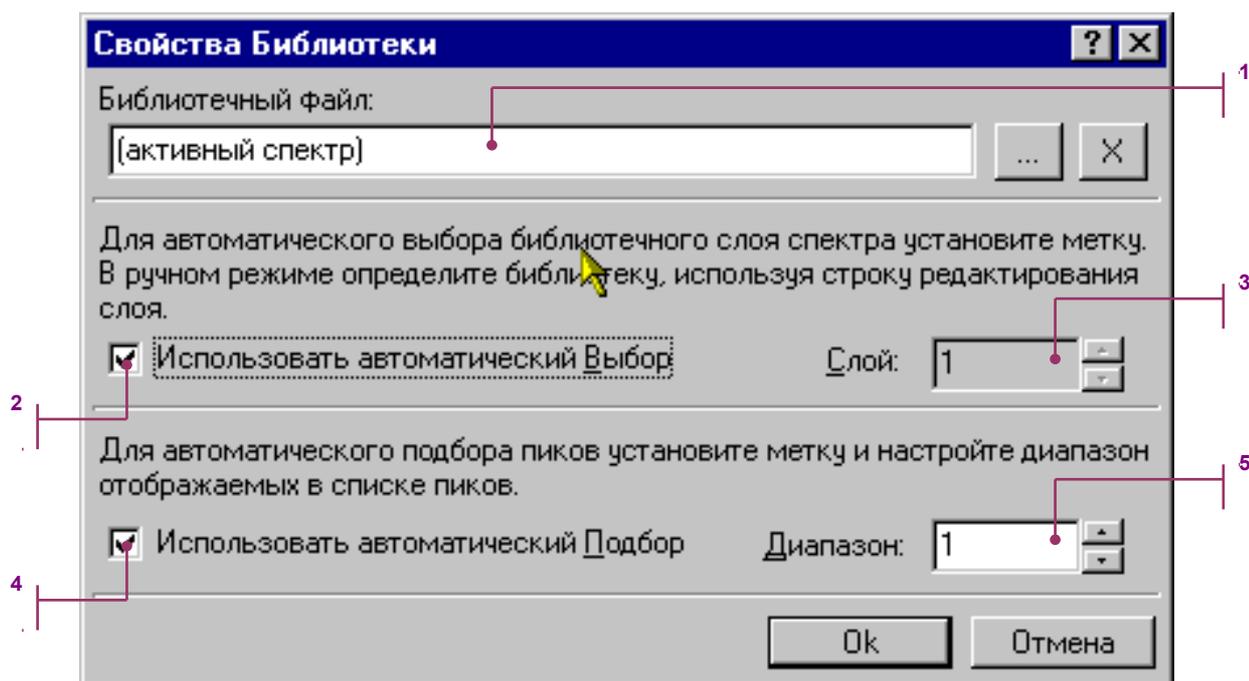
#### 4.12.1.5 Свойства библиотеки

В окне свойств библиотеки можно выбрать в качестве библиотеки любой другой файл UniChrom, можно разрешить или запретить автоматический выбора библиотечного слоя. Подбор кандидатов на идентификацию также запрещается или разрешается здесь.

Важно, что библиотека у каждого окна спектра своя, а, следовательно, подобные настройки независимы для разных окон. При отключенном автоматическом подборе в странице библиотеки показывается полный список пиков библиотеки.

Рис. 40. Характерный вид диалогового окна свойств библиотеки пика

1 – имя файла, содержащего библиотеку, активный спектр означает, что библиотекой является текущий спектр; 2 – метка, позволяющая автоматически выбрать слой библиотеки; 3 – номер слоя, используемого как библиотека; 4 – метка автоматического подбора наиболее близких для идентификации пиков, иначе отображается весь список библиотеки; 5 – число наиболее подходящих пиков.

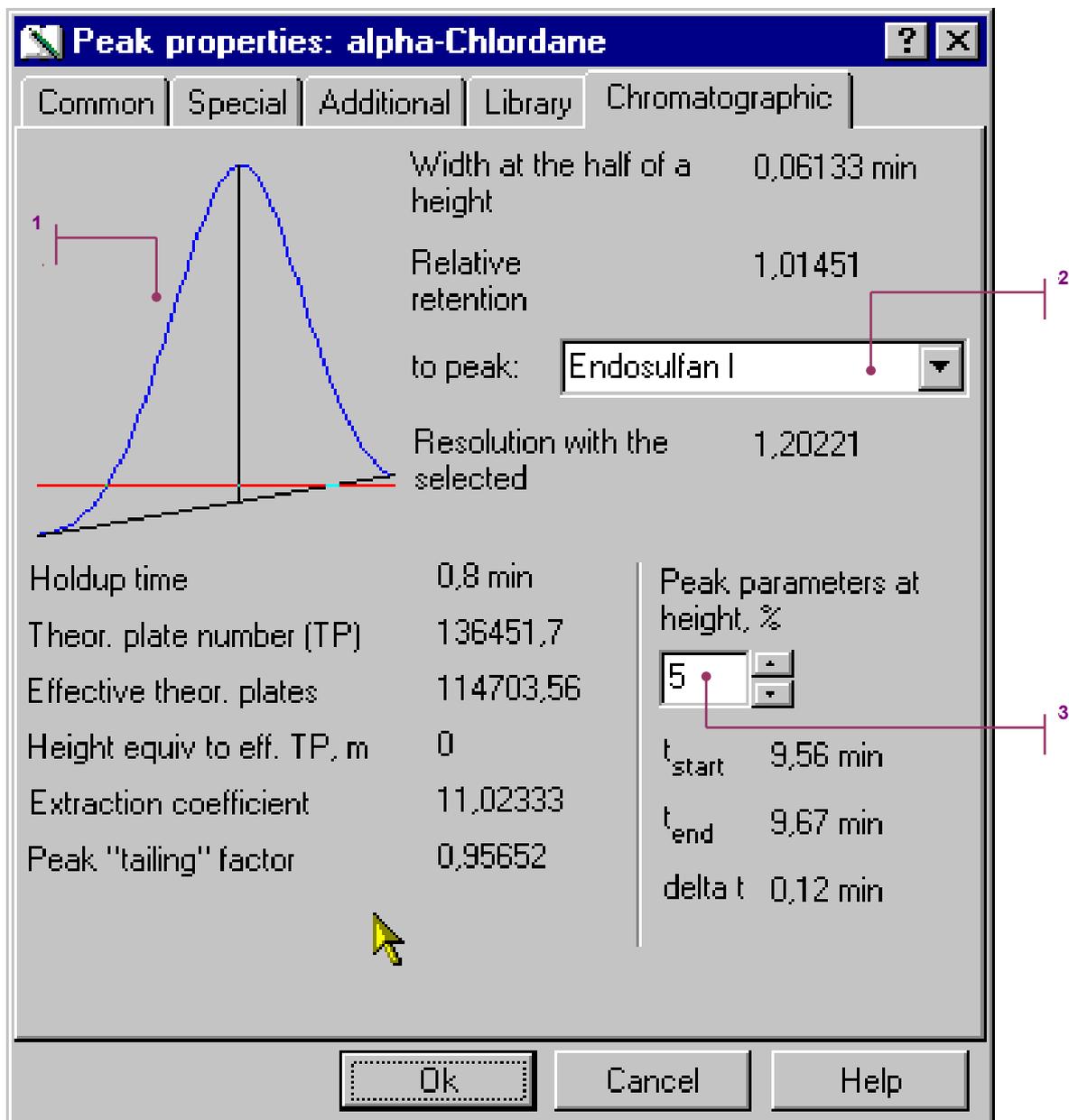


## 4.12.2 Хроматографические свойства пика

На этой странице отображаются расчётные параметры выбранного пика:

Рис. 41. Внешний вид окна свойств пика

1 – контур текущего пика (красная линия показывает текущую высоту, используемую при расчёте параметров); 2 – пик, относительно которого рассчитываются параметры (такие, как относительное время выхода); 3 – процент высоты пика, используемый при расчёте параметров.



В расчётах используется мертвое время колонки. По умолчанию в выбранном спектре мертвое время колонки равно 0 мин, чтобы его изменить, в свойствах спектра необходимо добавить вещественный параметр **HoldUp**. Изменение мертвого времени в свойствах спектра приводит к перерасчёту хроматографических параметров пика. Литература: Пецев Н., Коцев Н. Справочник по газовой хроматографии: Пер. с болг. – М.: Мир, 1987.

### 4.12.2.1 Полуширина

Полуширина – ширина пика на половине его высоты (от базовой линии).

#### 4.12.2.2 Относительное удерживание

$$\alpha = \frac{t_2 - t_0}{t_1 - t_0}$$

$t_2$ ,  $t_1$  – соответственно времена удерживания двух пиков.  $t_0$  – время удерживания несорбируемого компонента (мертвое время колонки).

#### 4.12.2.3 Разрешение пиков

$$R_s = \frac{K}{0,8495} = \frac{\Delta l_R}{(a_{0,5(1)} + a_{0,5(2)}) \cdot 0,8495}$$

$R_s = K / 0.8495$ , смотри ASTM 5134;

$R_s$  – величина разрешения;

$K$  – расчётная величина разрешения;

$\Delta l_R$  – расстояние между максимумами двух пиков;

$a_{0,5(1)}$  и  $a_{0,5(2)}$  – ширины первого и второго пиков на половине их высоты.

#### 4.12.2.4 Число теоретических тарелок

$$N = 5,54 \cdot \left[ \frac{l_R}{a_{0,5}} \right]^2$$

$l_R$  – абсолютное время удерживания компонента;

$A_{0,5}$  – ширина пика на половине его высоты.

#### 4.12.2.5 Число эффективных теоретических тарелок

$$N' = 5,54 \cdot \left[ \frac{l'_R}{a_{0,5}} \right]^2$$

$l'_R$  – исправленное время удерживания (абсолютное время удерживания вычесть мертвое время колонки);

$a_{0,5}$  – ширина пика на половине его высоты.

#### 4.12.2.6 Высота, эквивалентная эффективной теоретической тарелке

$$BЭТТ = L/N'$$

$L$  – длина колонки задается в свойствах спектра вещественным параметром **ColumnLen**.

$N'$  – число эффективных теоретических тарелок.

#### 4.12.2.7 Коэффициент извлечения (коэффициент ёмкости колонки)

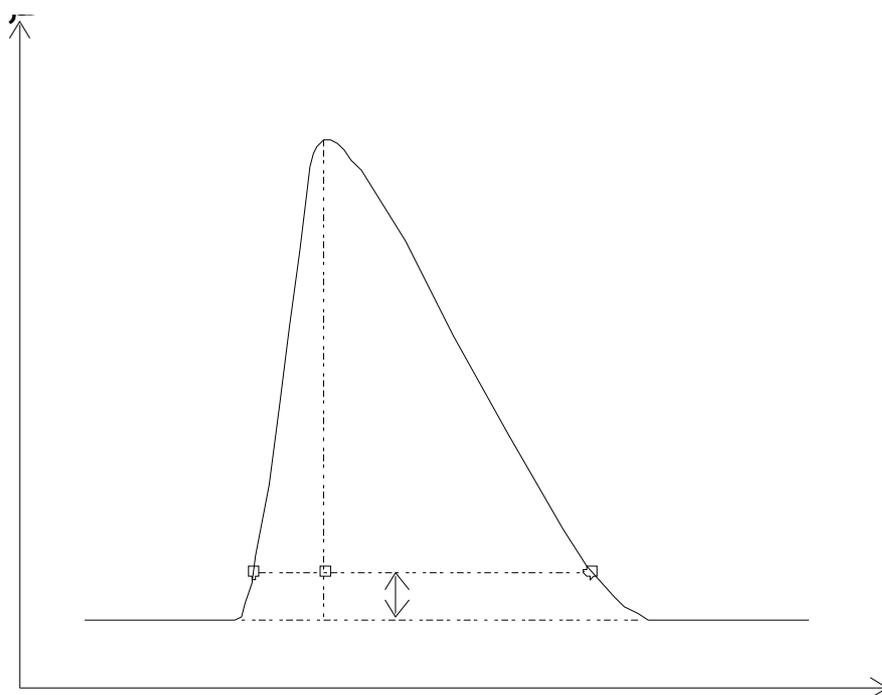
$$k' = t'_R / t_0$$

$k'$  – отношение общего содержания соединения в неподвижной фазе к его содержанию в газовой фазе;

$t'_R = (t - t_0)$  – исправленное время удерживания;

$t_0$  – мертвое время колонки.

#### 4.12.2.8 Фактор "хвостатости" пика



$$T = \frac{W_{0,05}}{2 \cdot f}$$

$T$  – фактор "хвостатости";  
 $W_{0,05}$  – ширина пика на высоте 0,05 от базовой линии (**AC**);  
 $f$  – расстояние от фронта пика до центра (**AB**).

## 4.13 Окно обработки спектра

Это окно является "ящиком с инструментами" системы UniChrom. Здесь собраны все функции по обработке спектра в целом и конкретных пиков в частности. Окно обработки спектра появляется на рабочем столе программы при выборе меню **{Инструменты/Обработка}** или нажатии кнопки  в панели инструментов. Это окно всегда находится над окнами спектров. С помощью закладок Вы выбираете, какой вид обработки будет производиться над спектром, и нажимаете кнопку **[Применить]**.

Окно обработки можно не убирать с рабочего стола программы, так как единственное, в чем оно может мешать – это загораживать окна спектров (да и то только если разрешение экрана меньше чем 1024x768 точек).

В заголовке окна указывается имя спектра, который будет "подвержен" обработке. Вы заметите, что при переходе от одного окна спектра к другому, и возврате после этого в окно обработки заголовок его покажет имя последнего активного окна спектра.

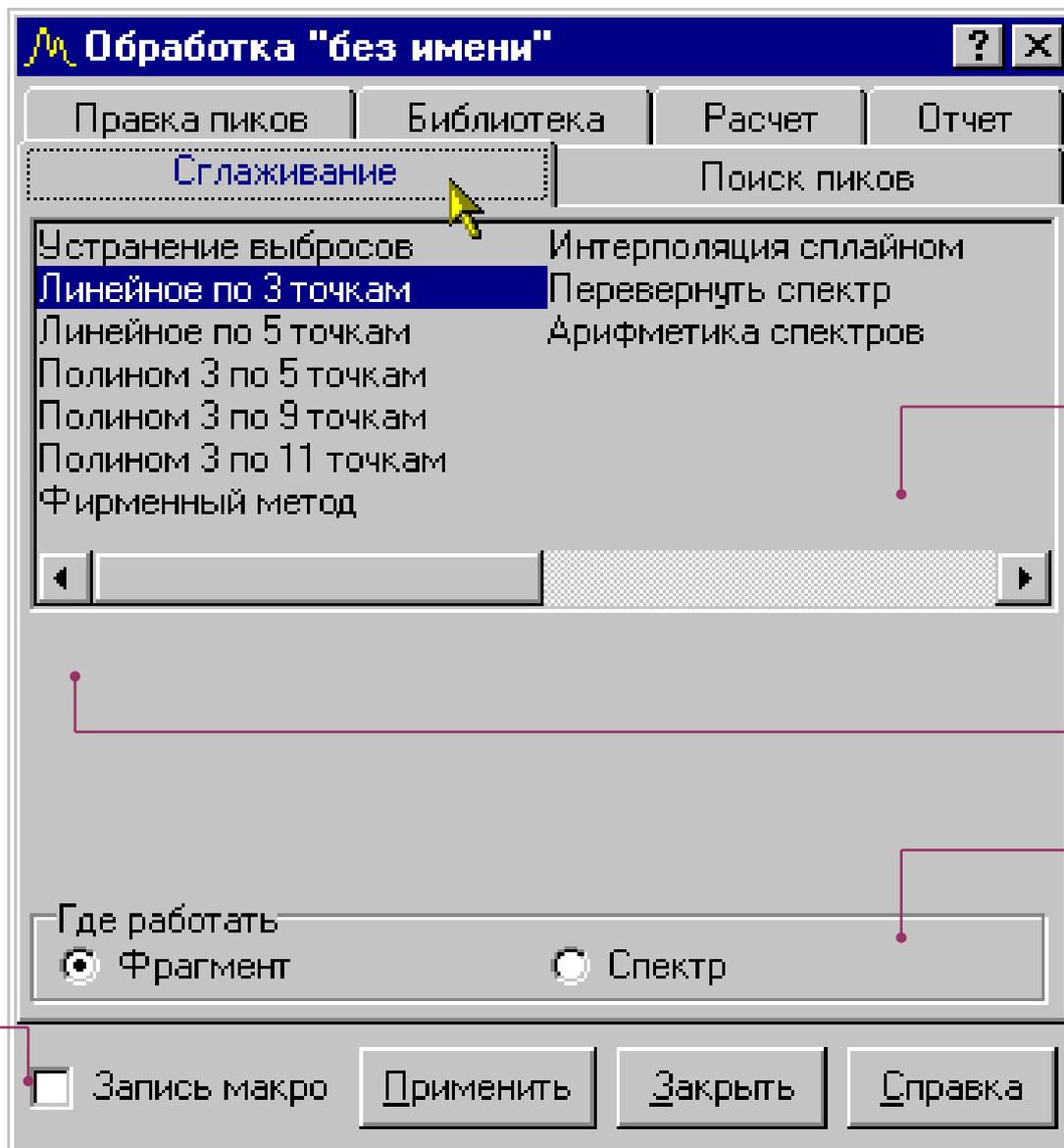
Любое количество команд обработки спектра, находящихся в этом окне можно запомнить и впоследствии выполнить сразу все нажатием одной кнопки. Последовательность команд, которые сохраняются вместе со спектром, называется методом или сценарием обработки. Для включения записи метода (сценария, макроса) обработки следует установить "птичку" напротив надписи **"Запись макро"**. Последовательность команд (сценарий), записанная в ходе обработки, может быть исправлена в окне спектра на странице "Метод". Выполнение команд макроса начинается сразу после окончания измерения, если разрешен автоматический запуск метода на исполнение (по умолчанию он разрешен). Разрешить или запретить автоматическое исполнение метода для выбранного окна спектра можно с помощью меню параметров отображения, которое появляется при нажатии правой кнопки мыши на любой из осей на графике спектра

### 4.13.1 Сглаживание спектра

На этой странице окна обработки выбираются методы сглаживания спектра.

Рис. 42. Характерный вид страницы сглаживания окна обработки спектра

1 – список доступных методов сглаживания и коррекции измеренных данных; 2 – область параметров выбранного метода; 3 – определение фрагмента, в котором выполняется операция; 4 – запись операции в макрокоманду.



Укажите мышкой тот метод сглаживания, который Вы будете использовать, затем укажите, где этот метод будет применяться (во фрагменте либо во всем спектре), а затем нажмите кнопку **[Применить]**. После нажатия кнопки сглаженный спектр будет перерисован. Если результаты сглаживания Вас не удовлетворяют, то их можно отменить, используя кнопку  в панели инструментов.

**Устранение выбросов** – уничтожение односточечных выбросов в данных;

**Линейное 3,5 точек** – линейные методы сглаживания по соответствующему количеству точек спектра.

**Полином 5,9,11** – сглаживание полиномом 3-й степени с весом.

**Интерполяция** – метод вписывания кубических сплайнов по указанному количеству узлов, пробегая по фрагменту спектра с указанным шагом.

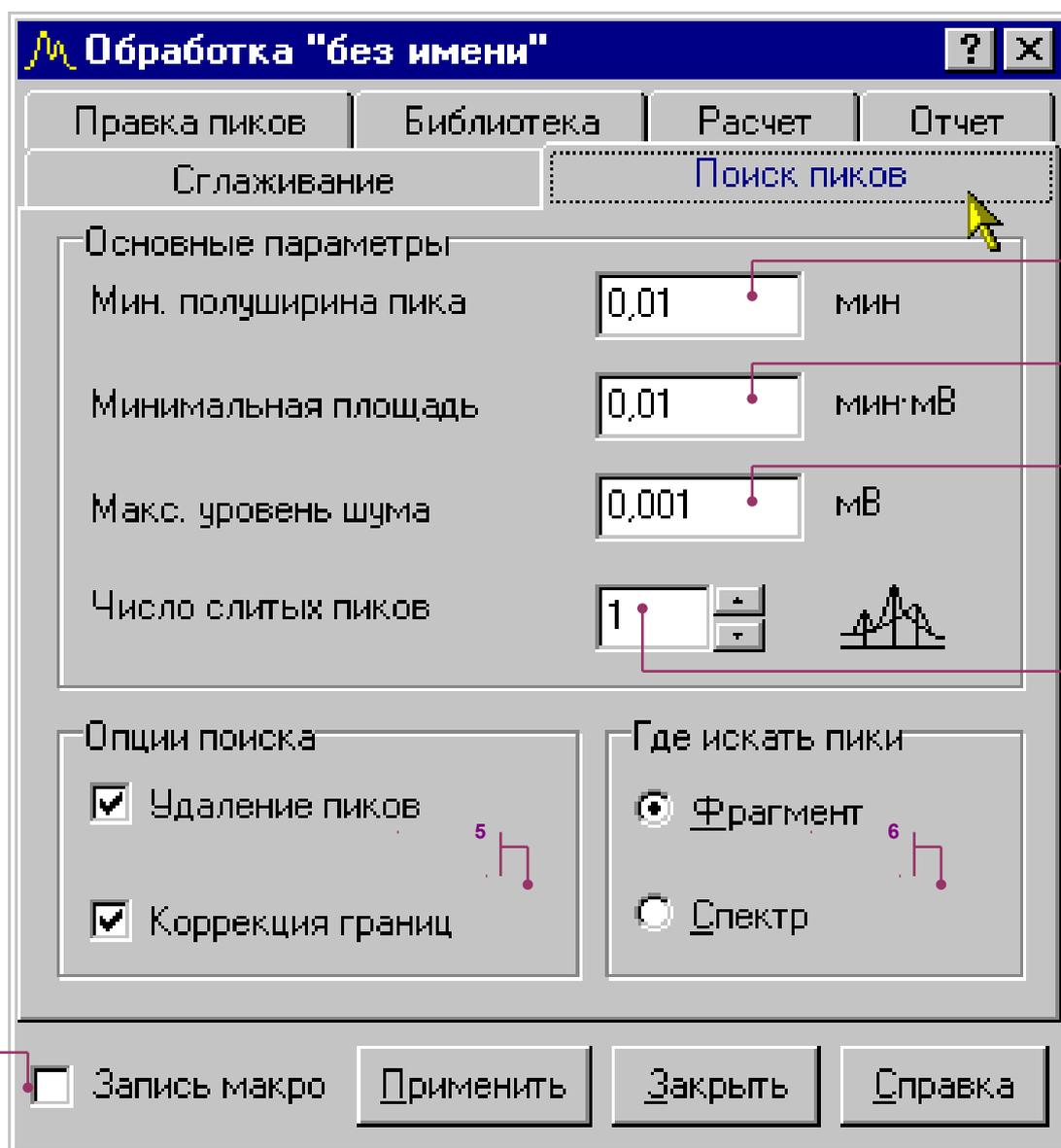
**Фирменный** – собственный метод линейного сглаживания, используется с постоянным, либо линейно растущим шагом.

**Внимание!** Правильно выбирайте, где должно производиться сглаживание: /Во фрагменте/ – между маркерами; /В спектре/ – по всему спектру.

### 4.13.2 Поиск пиков

Рис. 43. Характерный вид страницы поиска пиков окна обработки спектра

1 – установка полуширины пика; 2 – установка минимальной площади для отсеивания мелких пиков; 3 – установка уровня шума, для отсеивания шумовых пиков; 4 – определение типа базовой линии (долина – долина или опускание перпендикуляра); 5 – опции поиска; 6 – определение фрагмента для поиска пиков; 7 – запись макрокоманды.



**Минимальная полуширина пика** – ширина на половине высоты самого узкого пика на спектре. Параметр можно определить, установив два маркера на половине высоты этого пика и, подведя мышь к окошку **Фрагмент dX** на дисплее окна спектра, в строке статуса увидите значение полуширины пика в минутах.

**Нижний порог площади** – пики с площадью меньшей данного значения игнорируются.

**Максимальный уровень шума** – характеризует, насколько зашумлен спектр, пики с амплитудой, близкой к уровню шума, игнорируются, а базовая линия пиков, не отброшенных после поиска, поднимается на эту величину.

**Число слитых пиков** – характеризует максимальное количество точек минимума в группе слитых пиков (см. раздел "расшифровка хроматограммы").

**Фрагмент** или **спектр** – поиск пиков в выделенном фрагменте или во всем спектре.

**Корректировать границы** – использование специального метода уточнения границ пика, который описан в разделе "расшифровка хроматограммы".

**Удаление пиков** – сначала все пики удаляются в выбранном фрагменте, а затем производится поиск и расстановка пиков их заново (иначе эта операция добавит пики к уже существующим в выбранном фрагменте).

#### 4.13.2.1 Выбор параметров поиска пиков

В случае, когда параметр **Число слитых пиков** (максимальное число неразрешенных пиков на участке спектра) равен 1, то базовая линия будет проведена от минимума к минимуму (“Долина – Долина” см. расшифровку спектра). Если число слитых пиков будет равно 2 и более, базовая линия проведена от начала группы пиков до её окончания.

Минимальную полуширину пика можно вычислить так: выберите самый узкий пик в спектре / во фрагменте и установите маркеры на границах этого пика. В верхней строчке окна указаны левая и правая границы пика в минутах, разность которых, деленная на 2, соответствует полуширине пика. Параметр “Минимальная полуширина пика” не должен превышать рассчитанное значение, но часто оказывается необходимым уменьшать этот параметр для более качественного поиска. В случае если ширины пиков сильно изменяются в пределах рассматриваемого фрагмента, то необходимо проводить автопоиск в нескольких фрагментах, в которых ширины пиков близки по величине.

Минимальная площадь под пиком (предел площади) указывается в милливольт-минутах (мВ-мин) или в наноамперах-минутах (нА-мин). Естественно, площадь может быть указана, также, в мВ-сек и нА-сек. Пики, площадь которых меньше указанного значения, не рассматриваются. Параметр “Предел площади” подбирается оператором опытным путем.

Максимальный уровень шума (мВ или нА) находим так: выберите самый зашумленный участок спектра. С помощью маркеров и дисплея окна спектра находится максимальный разброс данных, соответствующий максимальному уровню шума в вольтах.

Коррекция границ. Этот параметр необходимо устанавливать в случае, когда базовая линия имеет резкий подъем или резкий спад. В остальных случаях границы пиков отыскиваются корректно.

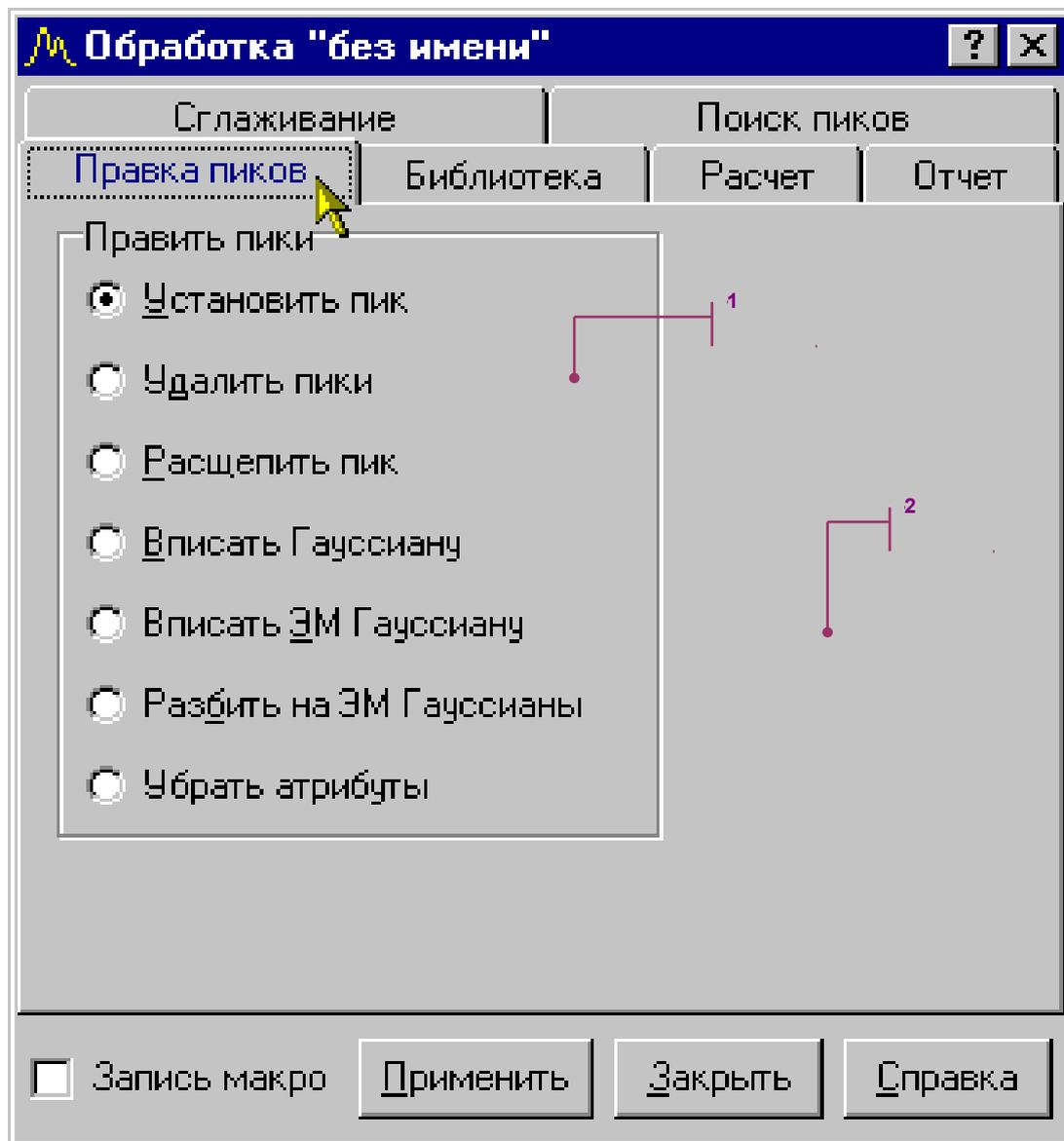
**Внимание!** Правильно выбирайте, где должен производиться автопоиск: /Во фрагменте/ – между маркерами; /В спектре/ – по всему спектру.

### 4.13.3 Правка пиков

Ручная расстановка пиков позволяет оператору обрабатывать только интересующие его пики либо корректировать пики, расставленные в автоматическом режиме.

Рис. 44. Характерный вид страницы правки пиков окна обработки спектра

1 – список доступных методов правки пика; 2 – область для параметров выбранного метода.



**Установить пик** – интерпретировать участок спектра между маркерами как пик. Эту операцию также можно выполнить в окне спектра нажатием [Ctrl] + [+].

**Удалить пики** – уничтожение информации о пиках между маркерами. Эту операцию также можно выполнить в окне спектра нажатием [Ctrl] + [-].

**Расщепить пик** – расщепляет существующий пик на два в точке, где находится активный маркер. Эту операцию также можно выполнить в окне спектра нажатием [Ctrl] + [/].

Ручная расстановка пиков позволяет оператору обрабатывать только интересующие его пики либо откорректировать пики, расставленные в автоматическом режиме. При нажатии на кнопку **[Применить]** будет нарисована базовая линия под пиком и зафиксировано положение максимума (время выхода) пика в виде вертикального отрезка.

**Вписать Гауссиану** – подобрать параметры Гауссовой кривой (A, σ) так, чтобы наилучшим образом описать пик:

$$I(x) = A \cdot e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$$

**Вписать ЭМ Гауссиану** – подобрать параметры экспоненциально модифицированной Гауссовой кривой (A, σ, τ) так, чтобы наилучшим образом описать пик:

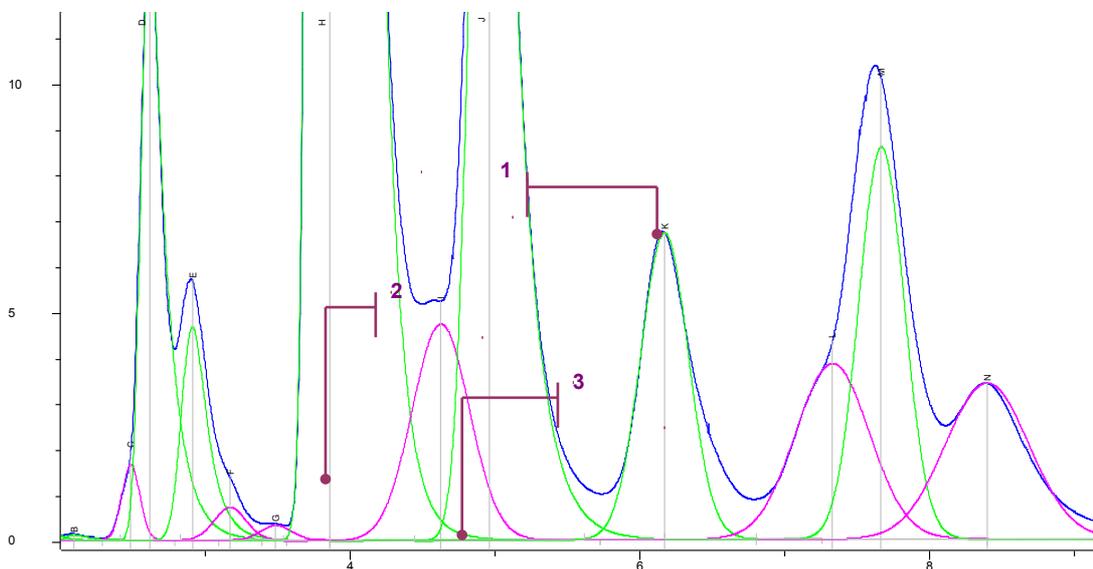
$$I(x) = \int_0^{+\infty} A \cdot e^{-\frac{(x-x_0-t)^2}{2\sigma^2}} \cdot e^{-\frac{t}{\tau}} \cdot dt$$

**Разбить на ЭМ Гауссианы** – разбить группу слитых пиков на ЭМГ с учетом перекрытия базовых линий для уточнения координат центра и площади.

На рисунке изображена группа пиков, разбитая на ЭМГ. Для каждого пика известны (A, σ, τ), их значения можно получить в окне свойств пика на страничке **"Специальные"**.

Рис. 45. Группа пиков, разбитая на ЭМГ

*1 – измеренные данные; 2 – чистый Гаусс; 3 – ЭМГ.*



**Убрать атрибуты** – превратить пик, в который был вписан Гауссов контур в обычный пик (убрать атрибут "Гауссовости").

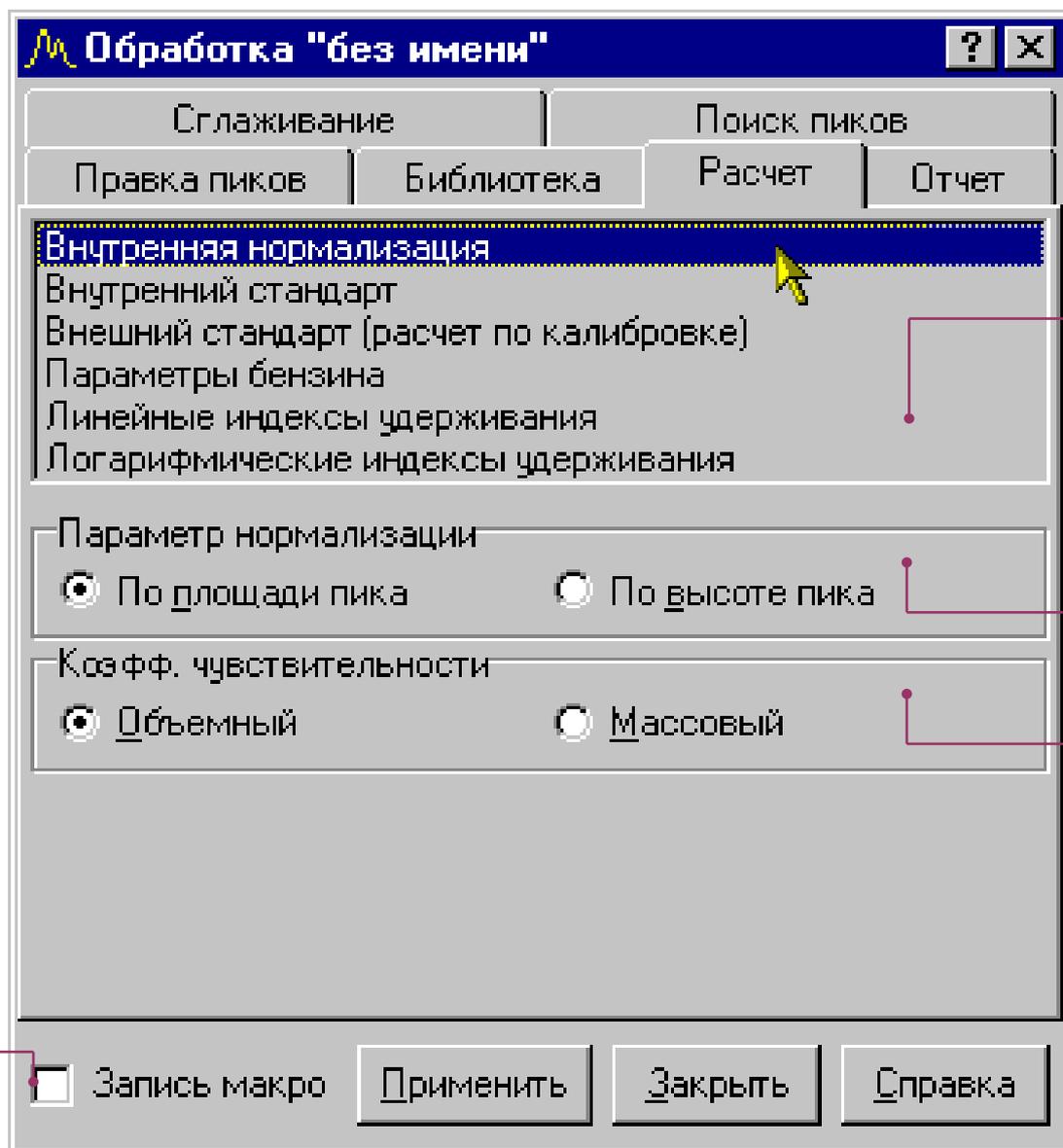
**Внимание!** Операции установки пика и удаления одного или группы пиков выполняются только во фрагменте между маркерами, а расщепление пиков - в позиции только одного активного маркера.

#### 4.13.4 Расчёт параметров пиков

Результаты всех расчётов изменяют свойства пиков, и немедленно отражаются в таблице пиков окна спектра. Расчёты производятся только после нажатия кнопки **[Применить]**.

Рис. 46. Характерный вид страницы расчёта параметров пиков окна обработки спектра

1 – список доступных методов расчёта; 2 – выбор площади или амплитуды для расчёта концентрации; 3 – определение типа используемого коэффициента чувствительности; 4 – запись макроккоманды.



##### 4.13.4.1 Расчёт концентрации методом внутренней нормализации

Концентрация  $i$ -го компонента методом внутренней нормализации рассчитывается по формуле:

$$C_i = \frac{S_i \cdot F_i}{\sum_{j=1}^N S_j \cdot F_j} \cdot 100\%$$

где  $i, j = 1..N$ ;

$S_i$  – высота или площадь в зависимости от режима;

$F_i$  – фактор отклика детектора, задаётся в окне свойств пика или в таблице пиков окна спектра.

#### 4.13.4.2 Относительные коэффициенты чувствительности

Перед расчётом концентрации методами внутренней нормализации или внутреннего стандарта часто бывает необходимо определить отклик детектора (коэффициент чувствительности) для всех или для выбранных компонентов. Как видно из выражений для концентраций – коэффициент может иметь любую размерность.

Безразмерные факторы отклика (относительные коэффициенты чувствительности) можно определить, используя внутренний стандарт.

Введем понятие – исправленный отклик (высота или площадь пика):

$$S'_i = F_i \cdot S_i, \text{ где } F_i = \frac{C_i(S_i)}{S_i} \cdot \frac{S_S}{C_S(S_S)}$$

$C_i(S_i)$  – калибровочная кривая для  $i$ -го компонента, в том числе и стандартного.

Если калибровочная кривая для данного компонента существует, то перед расчётом концентраций можно определить относительные факторы отклика – выбрать в списке компонент, относительно которого определяются факторы отклика и нажать кнопку применить.

Концентрации, рассчитываемые системой UniChrom в зависимости от опций метода внутренней нормализации:

Доля	Объёмный коэффициент чувствительности $F_i$	Массовый коэффициент чувствительности $F_i$
V	$\frac{S_i \cdot F_i}{\sum S_j \cdot F_j}$	$\frac{S_i \cdot F_i}{\rho_i \sum \frac{S_j \cdot F_j}{\rho_j}}$
M	$\frac{S_i \cdot F_i \cdot \rho_i}{\sum S_j \cdot F_j \cdot \rho_j}$	$\frac{S_i \cdot F_i}{\sum S_j \cdot F_j}$
Mol	$\frac{S_i \cdot F_i \cdot \rho_i}{M_i \sum \frac{S_j \cdot F_j \cdot \rho_j}{M_j}}$	$\frac{S_i \cdot F_i}{M_i \sum \frac{S_j \cdot F_j}{M_j}}$
T	$\frac{S_i \cdot F_i \cdot \rho_i \cdot 10^3}{\sum S_j \cdot F_j}$	$\frac{S_i \cdot F_i}{\sum \frac{S_j \cdot F_j}{\rho_j}} \cdot 10^3$
Mty	$\frac{S_i \cdot F_i \cdot \rho_i}{M_i \sum S_j \cdot F_j} \cdot 10^3$	$\frac{S_i \cdot F_i}{M_i \sum \frac{S_j \cdot F_j}{\rho_j}} \cdot 10^3$

#### 4.13.4.3 Расчёт концентрации методом внутреннего стандарта

Концентрация  $i$ -го компонента методом внутреннего стандарта рассчитывается по формуле:

$$C_i = \frac{C_S}{A_S \cdot F_S} A_i \cdot F_i,$$

где  $i = 1 \dots N$ ;

$C_S$  – концентрация стандарта;

$A_S$  – площадь стандарта.

Результаты заносятся в графу “Концентрация” таблицы пиков (см. пики окна спектра).

#### 4.13.4.4 Расчёт групповых концентраций

Для пиков с одинаковым групповым индексом считается суммарная концентрация, которая добавляется в таблицу пиков как фиктивный пик с именем, которое определяется наличием в свойствах спектра строковой переменной **grpX**, где X – число – индекс группы.

Например, если в свойствах спектра присутствуют строковые переменные в соответствии с нижеуказанной таблицей, то будут рассчитаны суммарные концентрации для пиков, принадлежащих этим группам по индексу.

Название свойства спектра	Значение	Имя переменной
Любое	парафины С6	grp6
Любое	парафины С7	grp7
Любое	олефины	grp16

После расчёта концентраций любым методом концентрации для пиков с одинаковыми групповыми индексами будут суммированы и добавлены в таблицу пиков окна спектра как фиктивные пики. Результат будет выглядеть примерно так:

Имя пика	Время выхода	Концентрация	Индекс группы
парафины С6		0,675465	6
парафины С7		1,934930	7
олефины		3,943890	16

#### 4.13.4.5 Расчёт концентрации методом внешнего стандарта

Концентрация *i*-го компонента рассчитывается с использованием калибровочной таблицы для компонента с таким же именем (см. калибровка в окне спектра):

$$C_i = \text{CalibFunction}(A_i, \text{Name}_i)$$

где  $i = 1 \dots N$ ,  $A_i$  – площадь пика *i*-го компонента;

$\text{Name}_i$  – имя *i*-го пика (должна быть калибровочная таблица для компонентов с данным именем).

При расчёте этим методом может использоваться опция "расчёт токсинов". Эта опция позволяет получать концентрацию в единицах, используемых в методике выполнения измерения и пробоподготовки (например, в мг токсина на кг продукта). Подробно использование этой опции описано в разделе "Расчёт концентрации токсинов".

#### 4.13.4.6 Расчёт концентрации токсинов

При расчете концентрации токсинов иногда удобно вводить дополнительную информацию о построении градуировочной зависимости и о параметрах испытуемой пробы. Для этого в закладке «Свойства» добавьте следующие пункты

Название переменной	Значение переменной	Имя переменной
Объем вводимого стандарта, мкл	1	Vinstd
Объем растворителя пробы, мл	1	Vsolprobe
Объем вводимой пробы, мкл	1	Vinprobe
Навеска сухой пробы, г	1	Mprobe

Эти свойства необходимы для вычисления коэффициента  $K$ :

$$K = \frac{1}{M_{probe}} \cdot \frac{V_{instd} \cdot V_{solprobe}}{V_{inprobe}}$$

Конечный результат содержания токсинов, выраженный в миллиграммах на килограмм (литр), рассчитывается по следующей формуле:

$$C_i = K \cdot \frac{S_i}{S_{i, std}} \cdot C_{i, std}$$

где  $C_i$  - концентрация *i*-го токсина;  $K$  - коэффициент рассчитанный выше;  $S_i$  - площадь под пиком *i*-го токсина;  $S_{i, std}$  - площадь под пиком *i*-го стандарта;  $C_{i, std}$  - концентрация *i*-го стандарта.

Пропишите стандартную смесь.

Обозначьте пики стандартов и введите их концентрации.

Концентрация стандарта, выраженная в миллиграммах на миллилитр, определяется по формуле

$$C_{std} = \frac{M}{V},$$

где  $C_{std}$  - концентрация стандарта;  $M$  - навеска сухого стандарта в миллиграммах;  $V$  - объем растворителя сухого стандарта в миллилитрах.

Перейдите в новый слой и пропишите пробу.

Имя пика  $i$ -го токсина должна совпадать с именем  $i$ -го стандарта.

Рассчитайте пробу методом внешнего стандарта, установив флажок расчета токсинов.

Искомые концентрации токсинов приводятся в таблице пиков в графе объемных процентов (об. %)

#### 4.13.4.7 Расчёт линейных и логарифмических индексов удерживания в группе пиков

Расчёт линейных индексов удерживания выполняется по формуле:

$$I = 100 \cdot \left[ n \cdot \frac{R_x - R_z}{R_{z+n} - R_z} + Z \right];$$

Расчёт логарифмических индексов удерживания выполняется по формуле:

$$I = 100 \cdot \left[ n \cdot \frac{\lg(R_x - R_m) - \lg(R_z - R_m)}{\lg(R_{z+n} - R_m) - \lg(R_z - R_m)} + Z \right],$$

где  $R_x$  – время удержания неизвестного компонента;

$R_z$  – время удержания нормального алкана, имеющего  $Z$  атомов углерода;

$R_{z+n}$  – время удержания нормального алкана, имеющего  $Z+n$  атомов углерода;

$R_m$  – время удержания несорбирующегося компонента;

$n$  – разность в количестве атомов углерода нормальных алканов.

Для того чтобы рассчитать индексы удерживания в интересующей Вас группе пиков предварительно необходимо выполнить следующие действия:

- 1) Установить у известных пиков их индексы удержания, вызывая диалоги с информацией о пиках (см. п. “Просмотр и редактирование параметров пика”);
- 2) установить в графе “Индекс” соответствующее число, и указать, что пик является репером.
- 3) Нажать кнопку **[Применить]**.

#### 4.13.4.8 Расчёт параметров бензинов

Октановое число рассчитывается по моторному методу (см. например, Черепица С. В., Бычков С. М., Гациха С. М., Коваленко А. Н., Мазаник А. Л. и др., “Методика газохроматографического анализа качества автомобильных бензинов”, Химия и технология топлив и масел, № 4, 2001, С. 44 -48.) с использованием следующей стандартной формулы:

$$O = \sum_{i=1}^{31} a'_i \cdot C_i,$$

где  $a'_i$  – эффективное октановое число  $i$ -й группы;

$C_i$  – содержание  $i$ -й группы в бензине.

В этом методе рассматривается 31 группа. Расчёт содержания каждой группы происходит автоматически по формуле:

$$C_i = \frac{A_i \cdot F_i}{\sum_j A_j \cdot F_j} \cdot 100$$

где  $C_i$  – массовая концентрация  $i$ -го компонента;

$A_i$  – площадь под пиком  $i$ -го компонента;

$F_i$  – коэффициент чувствительности детектора к  $i$ -му компоненту;

$j$  – индекс суммирования, пробегающий по всем пикам на хроматограмме.

От оператора требуется указать границы этих групп до того, как будет создаваться отчёт. Для этого необходимо установить названия у соответствующих пиков: н-бутан; изопентан; н-пентан; 2-метилпентан; 3-метилпентан; н-гексан; бензол; 2-метилгексан; 3-метилгексан; н-гептан; толуол; 2-метилгептан; 3-метилгептан; н-октан; этилбензол; п-ксилол; м-ксилол; о-ксилол; н-нонан; н-декан.

#### 4.13.4.9 Настройка групп углеводородов для расчёта октанового числа

Настройка групп для расчёта параметров бензина осуществляется через окно обработки спектра.

Рис. 47. Окно настройки групп углеводородов для расчёта параметров бензинов

1 – первый компонент группы; 2 – последний компонент группы; 3 – флаг, определяющий границы группы; 4 – молекулярная масса; 5 – давление насыщенных паров; 6 – эффективное октановое число.

№	Начало группы	Конец группы	Флаг	а.е.м.	кПа	Эф.ОЧ
1		н-бутан	0	47	496,1	103,9
2	н-бутан	н-бутан	3	48	348,5	88,1
3	н-бутан	2-метилбутан	0	47	286,9	144,3
4	2-метилбутан	2-метилбутан	3	72	141,5	84
5	2-метилбутан	н-пентан	0	70	123,3	198,2
6	н-пентан	н-пентан	3	72	107,8	67,9
7	н-пентан	2-метилпентан	0	76	67,8	95,2
8	2-метилпентан	3-метилпентан	3	86	44,6	86,6
9	3-метилпентан	н-гексан	0	82	36,3	95,9
10	н-гексан	н-гексан	3	86	34,3	20,9
11	н-гексан	бензол	0	92	30,6	94,9

Флаг: 0 - граничные пики не включаются в группу; 1 - начальный пик входит в группу; 2 - конечный пик входит в группу; 3 - начальный и конечный пики входят в группу  
 А.е.м., кПа, Эф.ОЧ - средняя молекулярная масса, среднее парциальное давление и эффективное октановое число компонентов группы

Эти настройки являются глобальными и при изменениях сохраняются на диске в папке, где установлен UniChrom, в виде файла **petrol.dat**.

#### 4.13.4.10 Давление насыщенных паров

Давление насыщенных паров рассчитывается по формуле:

$$P = \frac{\sum_{i=1}^{31} C_{gi} / M_i}{\sum_j C_{gj} / M_j} \cdot p_i^0$$

где P – давление насыщенных паров;

$C_{gi}$  – содержание i-ой хроматографической группы в бензине, рассчитанной по методу внутренней нормализации;

$M_i$  – эффективная молекулярная масса компонентов в группе в соответствии с п.8.4.;

$p_i^0$  – эффективное парциальное давление компонентов в группе;

$j, i$  – индексы суммирования, пробегающие от 1 до 31 (номера хроматографических групп).

#### 4.13.5 Работа с библиотекой

Параметры библиотеки позволяют выполнить ряд операций для идентификации компонентов смеси, а также для коррекции временных границ пунктов методики, которые следуют за этим.

Рассчитать зависимость шкал времени - устанавливается закон преобразования временной шкалы при переходе от библиотечного спектра к обрабатываемому.

$$t_1 \rightarrow t'_1, \quad t_2 \rightarrow t'_2, \quad \dots \quad t_n \rightarrow t'_n$$

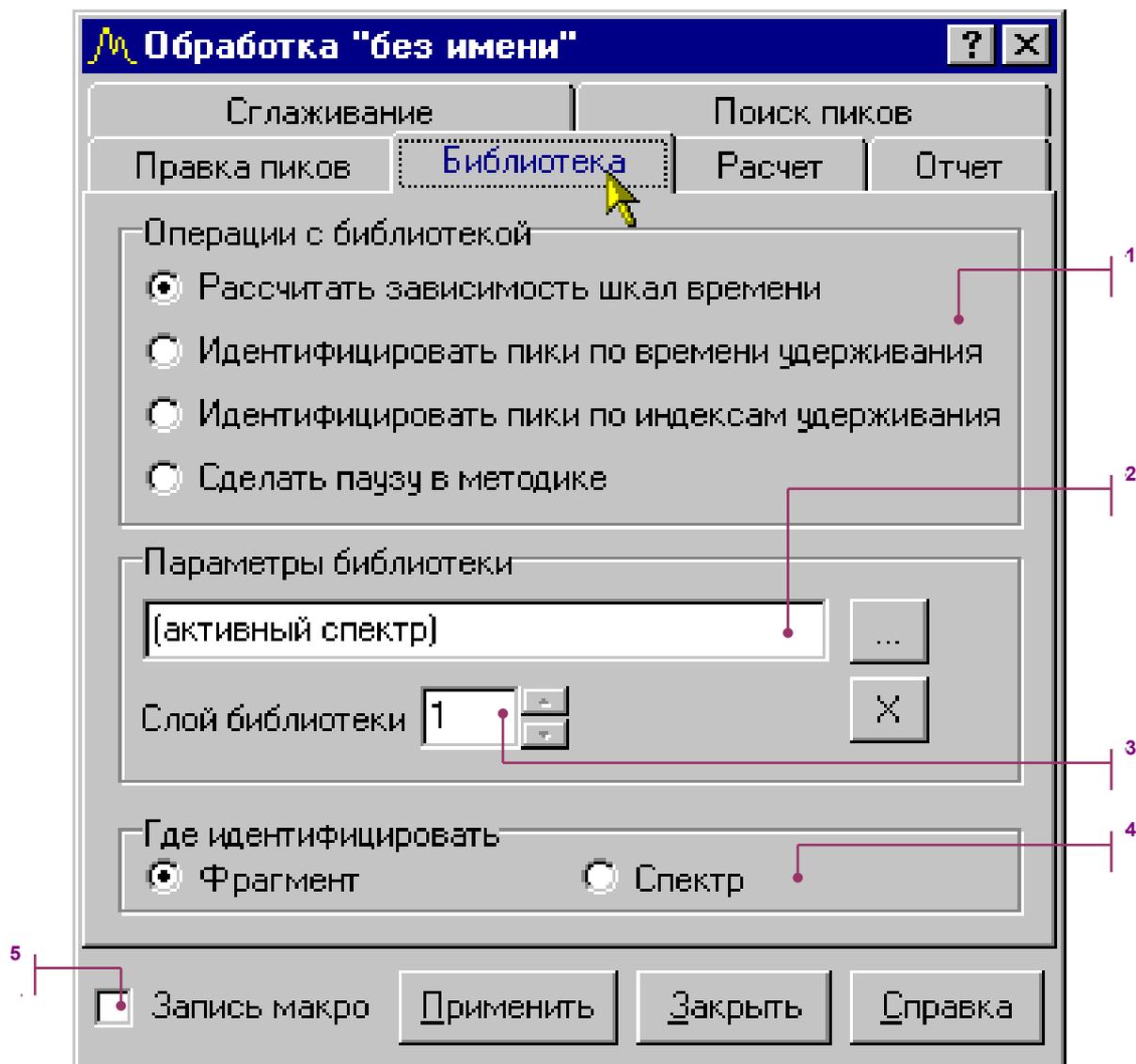
1,2...N – реперные пики. То есть устанавливается зависимость:

$$t' = \alpha \cdot t + \beta$$

Для того, чтобы выполнялся этот расчёт оператор должен установить реперы вручную.

Рис. 48. Характерный вид страницы библиотеки в окне обработки спектра

1 – опции идентификации; 2 – файл библиотеки; 3 – слой библиотеки; 4 – фрагмент, в котором выполняется операция; 5 – запись макроккоманды.



Для того, чтобы во время работы сценария оператор мог это сделать предусмотрен пункт **Сделать паузу в методике**. Во время паузы оператор установит реперы, подправит пики, выпьет кофе и т.п.

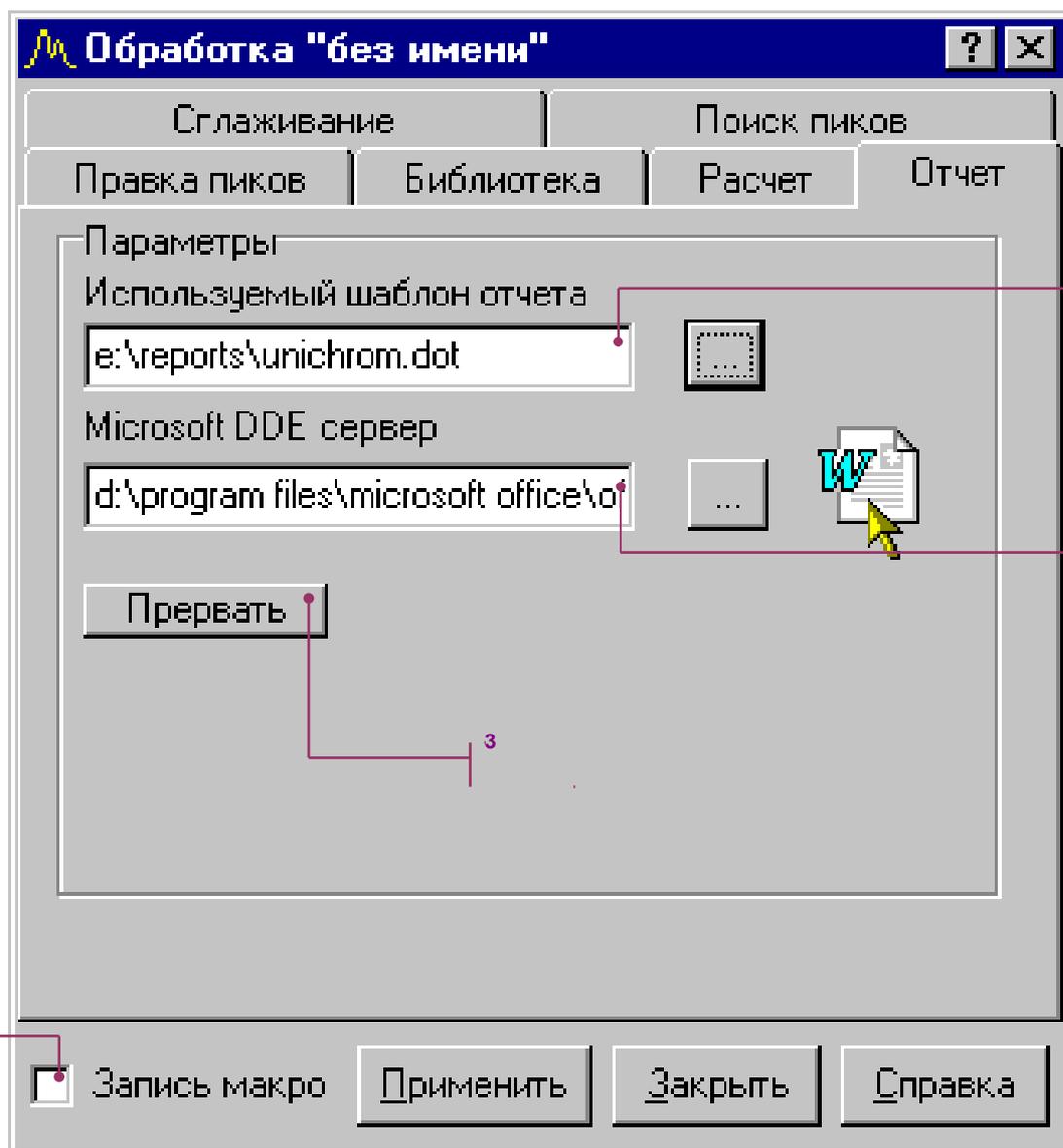
Для продолжения метода нужно нажать кнопку  в панели инструментов или клавишу **F9** на клавиатуре. В качестве библиотеки можно выбрать любой слой любого спектра. Кнопка **[X]** сбрасывает выбранную библиотеку и устанавливает ее на активный спектр (текущий). Идентифицировать пики можно либо во фрагменте, либо в спектре по нажатию кнопки **[Применить]**.

### 4.13.6 Создание отчёта

При создании отчёта используются шаблоны документов Microsoft Word и Microsoft Excel. По типу выбранного шаблона UniChrom определяет, какой из компонентов Microsoft Office будет создавать отчёт. Если Microsoft Office установлен правильно, то справа от строки с именем файла (winword.exe или excel.exe) появится значок соответствующей программы. При наличии этого значка при нажатии кнопки **[Применить]** отчёт будет создан в виде соответствующего документа. Внешний вид отчёта определяется используемым шаблоном.

Рис. 49. Характерный вид страницы создания отчёта в окне обработки спектра

*1 – имя шаблона документа или исполняемого модуля, в котором будет выполнен отчёт (VB, Java, PERL script или URL); 2 – приложение, которое выполняет шаблон (устанавливается автоматически); 3 – если предыдущий отчёт не закончился, прервите его этой кнопкой; 4 – запись макроккоманды.*



Если во время выполнения отчёта произошла ошибка в шаблоне отчёта, в результате которой отчёт не может быть выполнен корректно, то прервать ожидание программой UniChrom конца выполнения можно с помощью кнопки **[Прервать]**.

## 4.14 Принципы автоматической обработки хроматограмм

Система UniChrom с самого начала своего существования предлагала так называемые “макросы” обработки хроматограмм. Макрос представляет собой последовательность записанных команд обработки. Практически все виды обработки могут быть записаны в виде макроса, а затем “проиграны” на тех хроматограммах, которые нужны.

Начиная с версии 4.3, появилась возможность не только одновременно получать хроматограммы с разных детекторов в одном окне, синхронно, но и обрабатывать сразу несколько хроматограмм сразу. Предположим, измерение состоит из регистрации сигналов с двух детекторов, например ДТП и ПИД, последующей обработки этих данных и выдачи результирующего отчета.

Как эту последовательность реализовать в Вашем новом UniChrom?

### 4.14.1 Основные определения

Назовем сценарием обработки ту последовательность команд, которая применяется к конкретной хроматограмме (слою). Назовем макросом группу сценариев (см. рис.), выполняющихся одновременно, каждый по своей хроматограмме. Естественно, что друг на друга выполняющиеся одновременно сценарии влиять не должны.

В UniChrom каждая хроматограмма может помнить, какой сценарий её должен обрабатывать. Сценарии различаются по именам. На странице “Макрос” каждый сценарий представлен в виде дерева, “листочками” которого являются операции обработки. Сценарии создаются и удаляются в этом окне. При нажатии правой кнопки мыши появляется контекстное меню, где можно выбрать операцию над сценариями. Один из сценариев всегда активен (выбран). Если включен переключатель “Запись макро” в окне обработки, то добавление новых элементов происходит в этот активный сценарий. Чтобы перейти к правке другого сценария, достаточно выбрать его мышкой.

- **элемент обработки** – например операция сглаживания или поиска пиков;
- **сценарий** – последовательность элементов обработки, выполняющаяся в том порядке, как она была создана;
- **макрос** – группа сценариев, выполняющихся каждый на своей хроматограмме.

### 4.14.2 Окно макроса

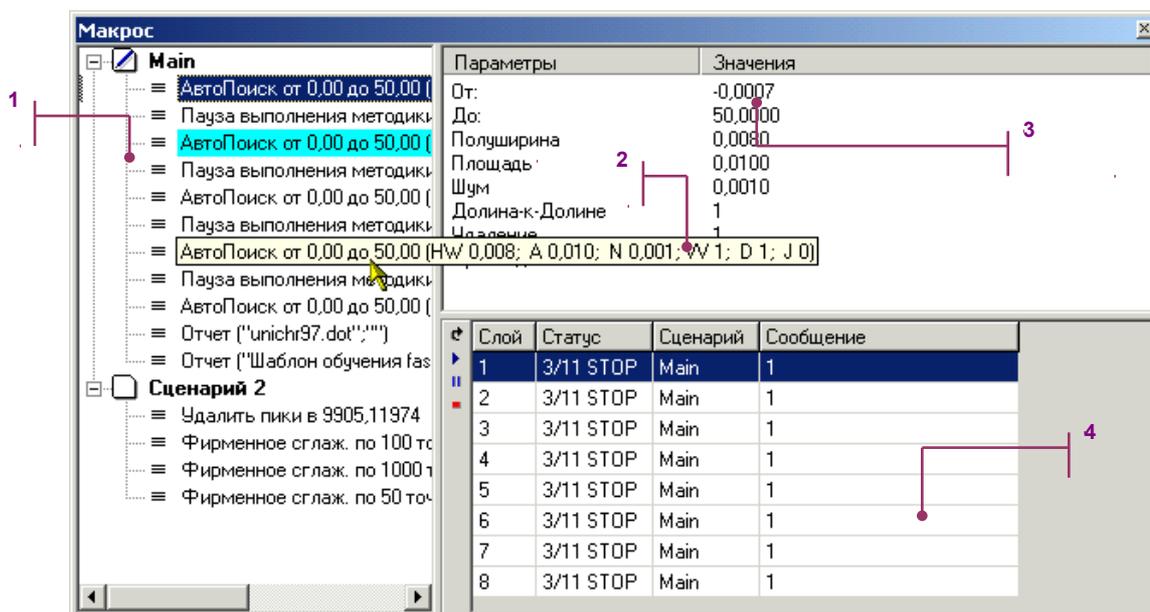
Окно макроса обычно находится на странице “Макрос” окна хроматограммы. Здесь можно производить ряд операций по редактированию макроса. Здесь также видно состояние выполняющихся сценариев.

Одним из важных сведений является то, на каком элементе остановился данный сценарий. Итак, если текущий слой обрабатывается, например, сценарием “Main”, который остановился на третьем пункте (смотри рисунок), то продолжить исполнение можно с любого элемента данного сценария. Для этого следует дважды щелкнуть мышкой элемент, которому следует работать по продолжению. На рисунке элемент сценария, на котором произошла остановка, выделен голубым цветом. Следует также помнить, что элемент остановленного сценария подсвечивается только тогда, когда этот сценарий работает по текущему слою. То есть, если вы находитесь в другом слое, то элемент подсвечен не будет. Это связано с тем, что разные хроматограммы, в общем, могут обрабатываться разными сценариями, которые могут находиться в разных состояниях. Следовательно, голубая подсветка отображает состояние сценария только для текущей (просматриваемой) хроматограммы.

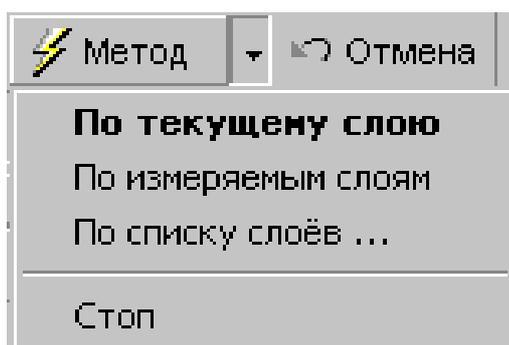
Сценарии, выполняющиеся по отдельным хроматограммам, можно запускать по отдельности или вместе. Для продолжения обработки отдельно выбранной хроматограммы выберите хроматограмму (или их группу) в панели статуса и нажмите кнопку . Кнопка остановки  служит для окончания исполнения одного или группы сценариев.

Рис. 50. Общий вид страницы “Макрос” и её разделов

1 – все сценарии обработки данного метода; 2 – выделенный элемент сценария (на нём сценарий остановился); 3 – параметры выбранного элемента обработки; 4 – состояние слоёв, которые обрабатываются в настоящий момент.



#### 4.14.3 Кнопка запуска макроса на исполнение



Теперь макрос можно исполнить в следующих режимах:

- по текущему слою (который вы видите);
- по тем слоям, по которым идет измерение (это операция выполняется автоматически, если разрешено автоматическое исполнение макроса по окончании измерения);
- по списку слоёв – просто выбрать хроматограммы, которые надо обработать;
- стоп выполнения – прекращает выполнение всех сценариев без условий. Просто стоп.

## 4.15 Общие сведения по работе с окнами в Windows

Управление окнами системы UniChrom в Windows обеспечивается стандартными элементами, которые позволяют выполнять следующие операции:

### 4.15.1 Активизация окна

Текущая активность окна отображается на экране цветом заголовка окна.

Для активизации окна щёлкните левой кнопкой мыши в любую видимую область данного окна.

Для активизации окна программы UniChrom нажмите кнопку программы  на панели задач Windows.

Для активизации окна спектра щёлкните меню программы **Окна** и выберите имя спектра, который нужно активизировать.

### 4.15.2 Свёртывание окна

Для свёртывания окна нажмите системную кнопку **Свернуть** в области заголовка данного окна.

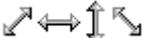
Окно программы в свёрнутом состоянии отображается в виде кнопки  на панели задач Windows.

Окно спектра в свёрнутом состоянии отображается укороченным заголовком на рабочем столе программы.

### 4.15.3 Развёртывание окна и восстановление его исходных размеров

Для развёртывания / восстановления окна нажмите системную кнопку **Развернуть / Восстановить** в области заголовка окна или дважды щёлкните заголовок данного окна.

### 4.15.4 Изменение размеров окна

- 1) Установите указатель на рамку или угол захвата окна так, чтобы курсор манипулятора модифицировался в двунаправленную стрелочку .
- 2) Переместите мышь в указанном направлении с нажатой левой кнопкой.
- 3) При достижении необходимого размера окна отпустите кнопку манипулятора.

### 4.15.5 Перемещение окна по экрану

- 1) Установите указатель на заголовок окна.
- 2) Переместите мышь с нажатой левой кнопкой так, чтобы указатель с перемещаемым объектом попал в необходимую область экрана.
- 3) Отпустите кнопку манипулятора.

### 4.15.6 Закрытие окна

Для закрытия окна нажмите системную кнопку **Закрыть** в области заголовка окна.

Примечание. Программа UniChrom автоматически отслеживает все изменения в спектрах. При попытке закрыть окно модифицированного спектра UniChrom предложит сохранить данные.

### 4.15.7 Системное меню окна

Системное меню окна дублирует функции перемещения, изменения размеров, свёртывания и развёртывания окна, а также функцию закрытия окна.

Щёлкните в область системного меню и выберите соответствующую команду.

### 4.15.8 Дополнительные сведения

Если окно спектра находится в развёрнутом состоянии, то системное меню данного окна и системные кнопки **Свернуть**, **Развернуть**, **Восстановить** и **Закрыть** находятся в области меню программы UniChrom.

Для получения дополнительных сведений об окнах выполните следующее:

- 1) Нажмите  **Пуск** и выберите команду **Справка**.
- 2) На вкладке **Указатель** в поле строки поиска введите ключевое слово **Окна**.

- 3) Для получения справки по диалоговым окнам, введите ключевые слова **Диалоговые окна**.
- 4) Для получения справки по окнам MS-DOS, введите ключевые слова **Окна MS-DOS**.
- 5) Выберите тему справки из списка и нажмите кнопку **Вывести**.

## 4.16 Контекстная помощь

В программе UniChrom краткую помощь по работе с системой можно получить, не прибегая к данному описанию.

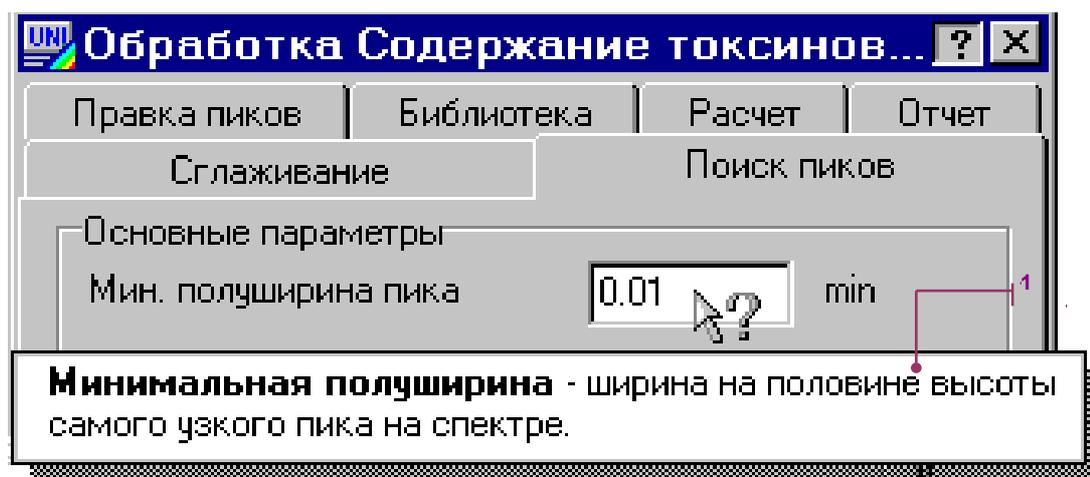
Для этого есть несколько способов:

### 4.16.1 Кнопка помощи Help

Кнопка помощи **Help**, при наличии её в окне, позволит Вам получить краткую справку о видимых элементах данного окна. При нажатии мышкой на кнопку помощи курсор мыши приобретет вид стрелочки с вопросом,  и Вы теперь можете щелкнуть мышкой на любой видимый элемент окна для получения справки об этом элементе, если таковая имеется.

Рис. 51. Характерный вид окна контекстной помощи

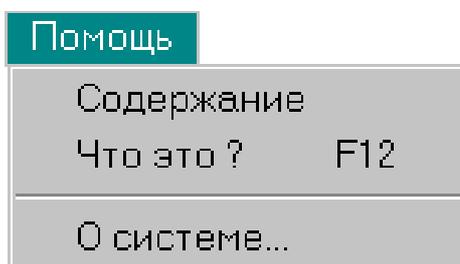
*1 – краткая информация о выбранном элементе.*



Для удаления справки с экрана достаточно щелкнуть мышкой в любое место рабочего стола либо нажать клавишу **Esc** на клавиатуре.

### 4.16.2 Меню “Помощь”

Программа UWin32 поддерживает стандартную для Windows – приложений работу с файлом Справки. По этой причине в программное обеспечение системы UniChrom введен файл  **UniChrom.hlp**, в котором, в виде гипертекста, собрана некоторая информация по системе UniChrom. При отсутствии данного файла в основном<sup>16</sup> каталоге системы UniChrom программа сообщит Вам об этом. В случае правильной установки программного обеспечения системы UniChrom Вы можете воспользоваться меню “Помощь”.



#### 4.16.2.1 Меню “Содержание”

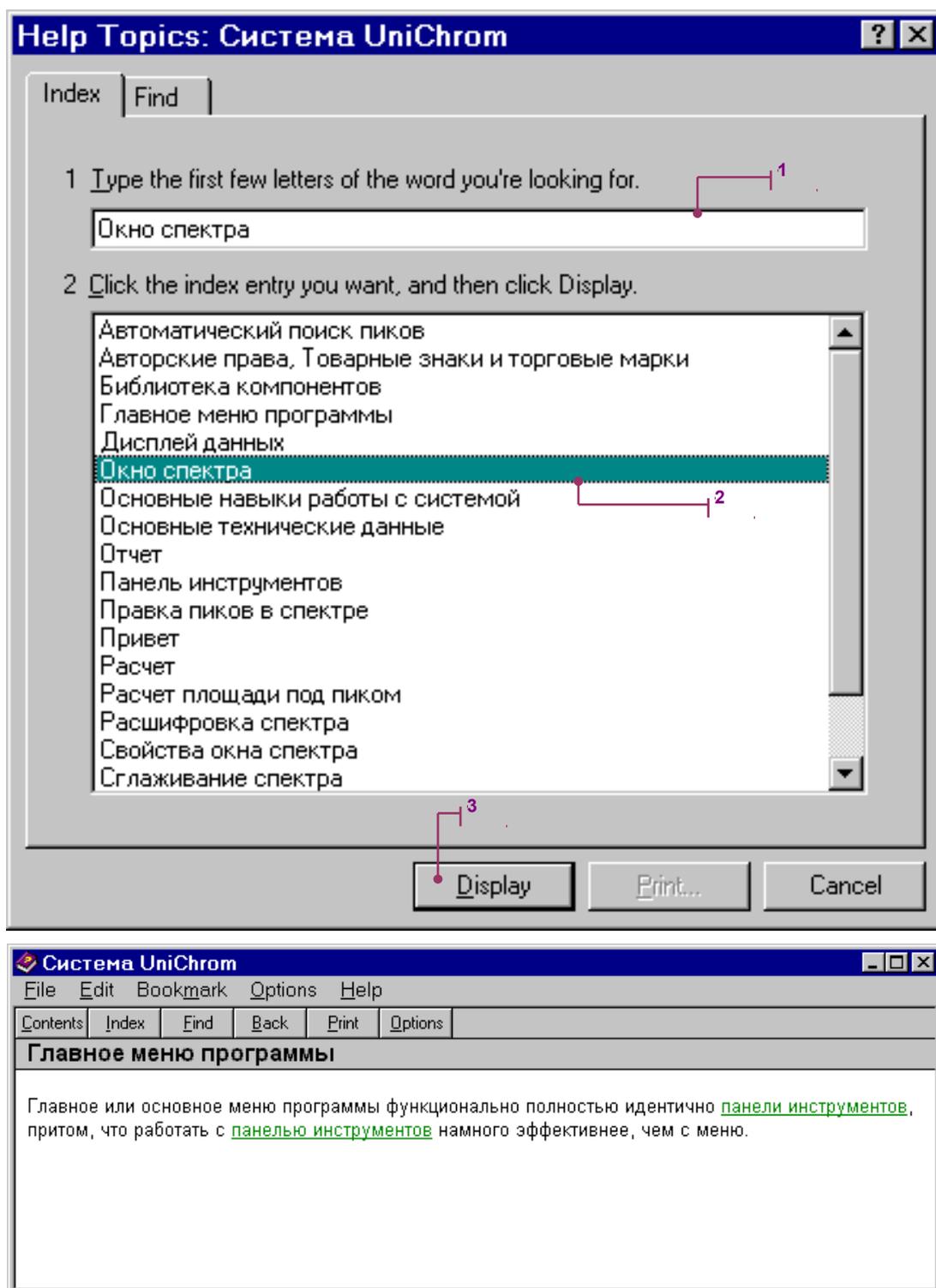
Щелчок мышкой на пункт “Содержание” приведет к появлению на рабочем столе Windows 95 стандартного диалога **Help Topics**<sup>17</sup>, в котором приводится содержание файла Справки о системе UniChrom. Выбирая мышкой разделы Справки, Вы получите соответствующую информацию в окне **Система UniChrom**.

<sup>16</sup>  **UniChrom** – основной каталог для ПО UniChrom, в котором находится исполняемый модуль UWin32.exe.

<sup>17</sup> Подробную информацию по работе со стандартными окнами помощи **Help Topics** и другими читайте в документации по Windows 95.

Рис. 52. Характерный вид окна содержания справки

1 – введите первые несколько букв слова, информацию о котором вы хотите получить; 2 – выберите интересный вас пункт и нажмите кнопку Display; 3 – кнопка Display.



#### 4.16.2.2 Меню "Что это?"

Пункт меню "Что это" является аналогом кнопки помощи "Help" для окон, не имеющих такой кнопки в своем заголовке. Выполняется эта команда следующим образом. Установите курсор мыши на видимый объект окна и нажмите клавишу F12. Простой выбор мышью данного пункта меню ни к чему не приведет.

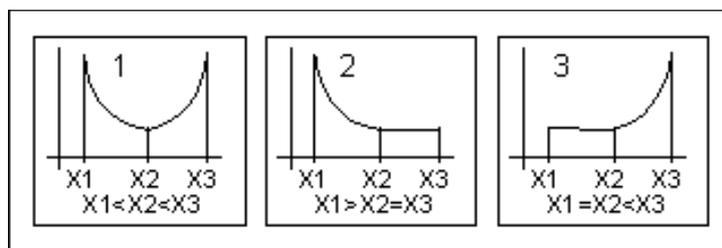
#### 4.16.2.3 Меню “О системе...”

Выбор пункта меню **“О системе...”** покажет Вам торговый знак ООО “Новые аналитические системы” и координаты разработчиков данного продукта в окне [О создателях](#).

## 4.17 Расшифровка хроматограммы

Алгоритм автоматического детектирования пиков заключается в следующем: Измеренный спектр анализируется с целью выявления локальных минимумов (см. рисунок), которые принимаются за начало следующего и конец предыдущего пиков (левая и правая границы пиков соответственно). В найденных границах ищется точка, соответствующая максимальной интенсивности измеренных данных, которая принимается за центр анализируемого пика (в случае хроматографических исследований эта точка соответствует времени выхода вещества из колонки).

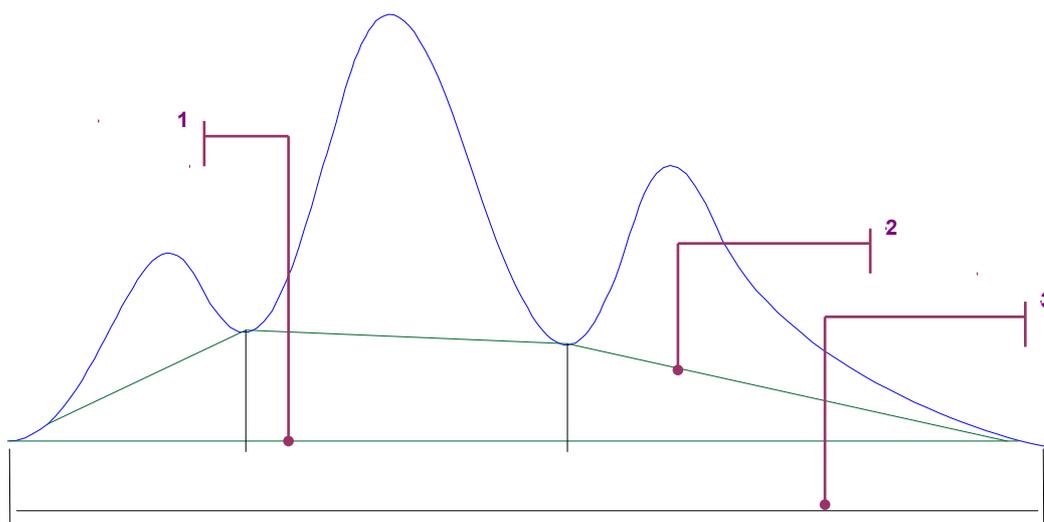
Рис. 53. Типичные локальные минимумы (точки  $x_2$ ) определяемые системой UniChrom по измеренным данным



Одновременно с поиском границ пиков осуществляется расчёт базовой линии, который зависит от, установленного оператором, параметра "Число слитых пиков". Значение этого параметра должно соответствовать числу плохо разрешённых пиков, объединённых в группу (см. рисунок).

Рис. 54. Определение группы слитых пиков и базовой линии в системе UniChrom

*1 – базовая линия I; 2 – базовая линия II; 3 – группа слитых пиков.*



В случае, если установленное число слитых пиков соответствует числу плохо разрешённых пиков в группе, система UniChrom рассчитает базовую линию I, начало и конец которой совпадут с началом первого и концом последнего пиков группы. В случае, если число слитых пиков равно 1 (один), Система рассчитает базовую линию II в виде ломаной кривой, у которой начало и конец каждого фрагмента совпадут с началом и концом каждого пика группы. Таким образом, изменяя параметр "Число слитых пиков", оператор может установить требуемую базовую линию. Необходимо также отметить, что при установке пиков вручную система UniChrom рассчитывает базовую линию I.

Параметр "Минимальная полуширина" (минимальная ширина пика на половине его высоты) в системе UniChrom задаётся в единицах оси X и не должен превышать полуширину самого узкого пика на анализируемом участке спектра. Установка оператором данного параметра позволяет исключить из рассмотрения "пики", образованные дрейфом нулевой линии, полуширина которых меньше указанного значения.

По ходу расшифровки спектров происходит расчёт площади и определение интенсивности пиков, обнаруженных и прошедших через фильтр "Минимальная полуширина".

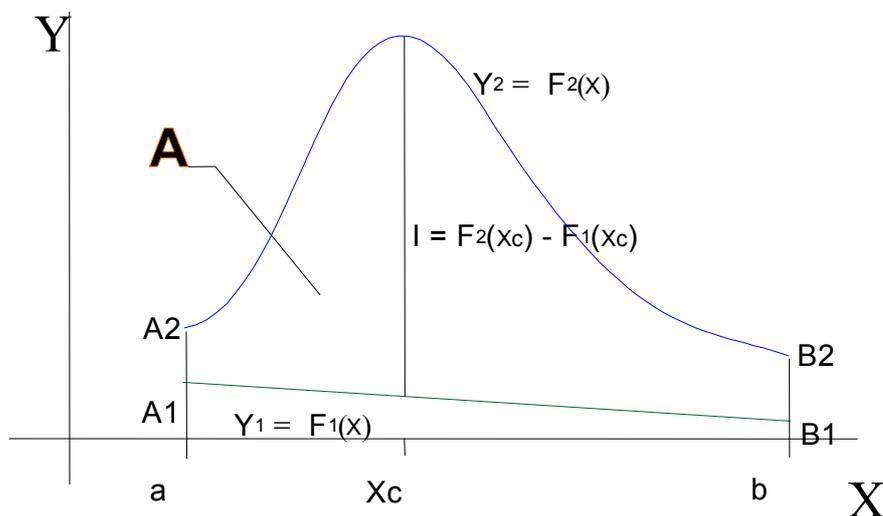
Площадь (A) под пиком в системе UniChrom определяется как площадь криволинейной трапеции  $A_1A_2B_2B_1$  (см. рисунок), ограниченной сверху измеренными данными  $Y_2=F_2(x)$ , снизу – базовой линией  $Y_1=F_1(x)$ , слева и справа – прямыми  $x=a$  и  $x=b$ :

$$A = \int_a^b [F_2(x) - F_1(x)] \cdot dx \quad (1)$$

Интенсивность (I) пика в системе UniChrom определяется как расстояние между вершиной пика и базовой линией (см. рисунок) в единицах оси Y и, если  $x_c$  - координата центра пика, то

$$I = F_2(x_c) - F_1(x_c) \quad (2)$$

Рис. 55. Определение площади под пиком (A) и интенсивности пика (I) в системе UniChrom

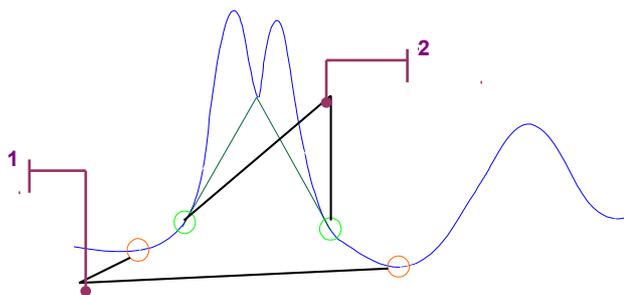


Если рассчитанная площадь пика оказывается меньше предела (порога) площади или определенная интенсивность пика оказывается меньше уровня шумов, установленных оператором, то такой пик исключается из рассмотрения. Таким образом, изменяя параметры "Предел площади" и "Уровень шума", оператор может воздействовать на чувствительность данного метода поиска пиков.

Последним параметром, который необходимо установить оператору, является параметр "Коррекция границ". Коррекцию желательно включать при обработке спектров, базовая линия у которых имеет резкий подъем или резкий спад (см. рисунок).

Рис. 56. Применяемый в системе UniChrom способ коррекции границ пиков

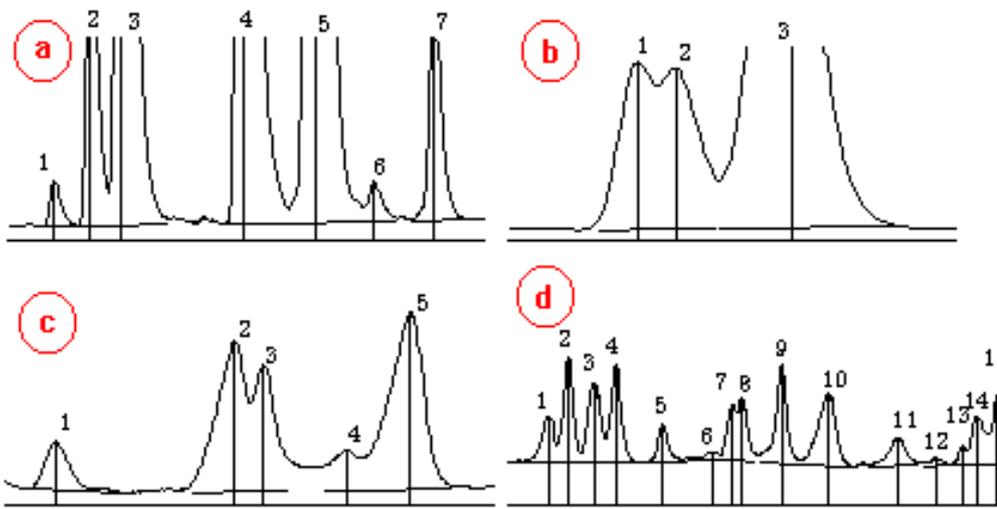
*1 – локальные минимумы; 2 – откорректированные границы пиков.*



Заложенный в UniChrom алгоритм автоматического поиска пиков, приведенный выше, является стандартным (см. Э. А. Кюллик, М. П. Кальюранд, М. Н. Козль, "Применение ЭВМ в газовой хроматографии", Москва, изд. "Наука", 1978; McCloskey D. H., Hawkes S. J., "J. Chromatogr. Sci.", 13, 1, 1975), адаптированным к обработке сильно зашумленных сигналов, поступающих от устаревших источников сигнала отечественного производства (например, хроматограф типа ЛХМ-8).

Расшифрованные фрагменты реальных спектров, полученных в процессе измерений сигналов от различных хроматографов, приведены на рисунках:

Рис. 57. Обработанные при помощи алгоритма автоматического поиска пиков, используемого в UniChrom реальные спектры (хроматограммы)



## 4.18 Расчёт площади под пиком

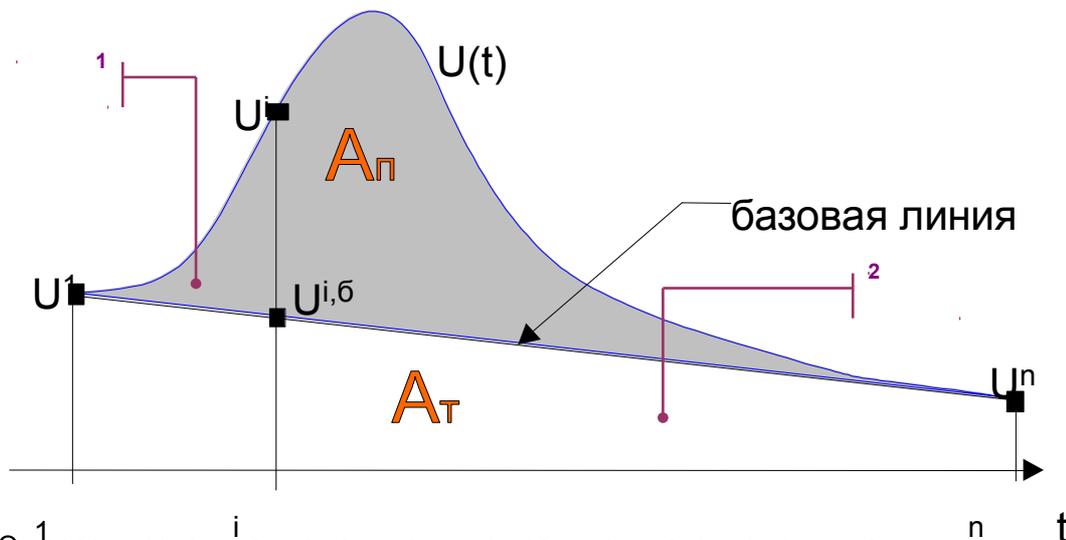
Площадь под пиком  $A$  представляет собой площадь криволинейной фигуры, ограниченной сверху измеренными данными  $U(t)$ , а снизу – прямой  $U=0$ , которая не является базовой линией измеренного сигнала. В соответствии с определением площади под пиком в системе UniChrom, которая используется при расчётах концентраций соответствующих компонент, последняя требует дополнительной коррекции:

$$A_{\text{п}} = A - A_{\text{т}} \quad (3)$$

где  $A_{\text{п}}$  – откорректированная (истинная) площадь под пиком (см. рисунок);  
 $A_{\text{т}}$  – площадь трапеции, ограниченной сверху базовой линией  $U_{\text{б}}(t)$ .

Рис. 58. Коррекция площади под пиком в системе UniChrom

1 – откорректированная площадь под пиком ( $A_{\text{п}}$ ); 2 – площадь под базовой линией ( $A_{\text{т}}$ ).



Откорректированную площадь под пиком запишем в следующем виде:

$$A_i = \frac{1}{f} \sum_{i=1}^m \{U^i - U_b^i\} \quad (4)$$

где  $n$  – число точек, приходящихся на пик;

$\bar{U}_b^i$  – точки базовой линии, рассчитанные по формуле:

$$U_b^i = \alpha \cdot i + \beta \quad (5)$$

где  $i=1,2,\dots,n$ .

С учетом формул (4) и (5) площадь под пиком запишется в виде:

$$A_i = \Delta t \cdot \sum_{i=1}^n \left\{ \bar{U}^i - \bar{U}^1 + (i-1) \cdot (\bar{U}^n - \bar{U}^1) / n \right\} \quad (6)$$

Формула (6) используется в системе UniChrom для расчёта площади под пиком. Из неё следует, что погрешность вычисления площади в UniChrom зависит от погрешности задания частоты измерений и от погрешности измерения самого сигнала.

## 5 Автоматическая обработка хроматограмм



## 5.1 Обработка хроматограммы

Обработка хроматограммы включает в себя пять основных этапов:

- 1) Коррекция измеренных данных.
- 2) Разметка и интегрирование хроматограммы.
- 3) Идентификация пиков.
- 4) Расчёт концентраций компонентов анализируемой смеси.
- 5) Вывод результатов измерений на печать.

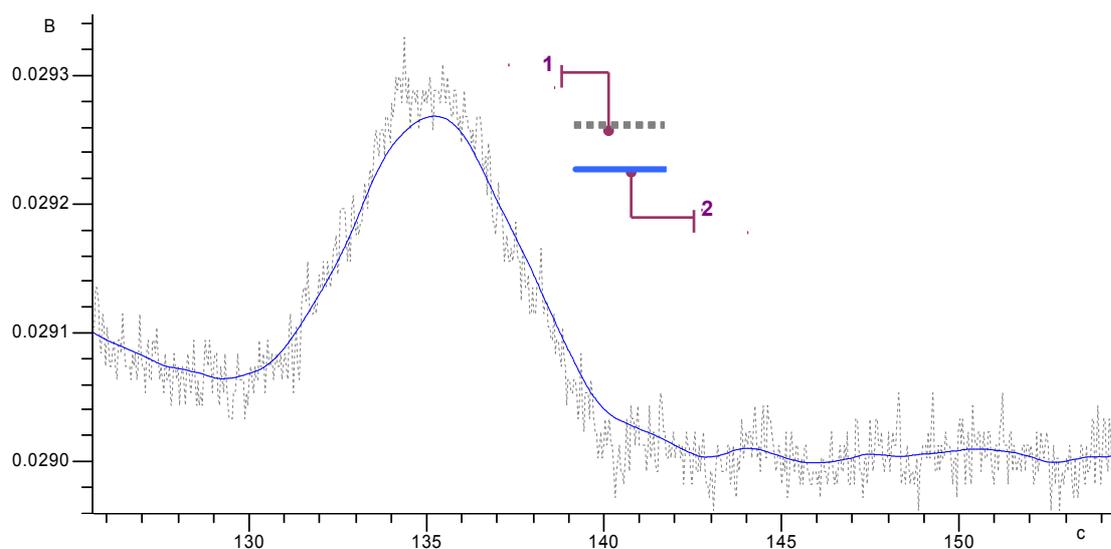
### 5.1.1 Коррекция измеренных данных

Под коррекцией измеренных данных надо понимать сглаживание хроматограммы и устранение одиночных высокочастотных выбросов.

Сглаживание хроматограммы приводит к модификации измеренных данных. Степень модификации зависит от применяемых методов и параметров сглаживания. Любая коррекция измеренных данных приводит к изменению высот и площадей под пиками, что в итоге влияет на расчётные концентрации компонентов анализируемой смеси. По этой причине применение сглаживания в общем случае является некорректным с точки зрения норм GLP (The Good Laboratory Practice). Однако в частных случаях умелое и правильное использование алгоритмов сглаживания может существенно улучшить сходимость и воспроизводимость измерений, уменьшить предел детектирования (или уменьшить минимальную видимую концентрацию индивидуального компонента) за счёт увеличения отношения «Сигнал / Шум», упростить настройку алгоритма «поиска пиков» и повысить качество интегрирования хроматограммы. Если использовать один и тот же метод сглаживания для хроматограмм градуировочных растворов и хроматограмм пробы, то такое программное сглаживание можно рассматривать как дополнительную аппаратную фильтрацию сигнала.

Рис. 59. Пример фильтрации измеренных данных.

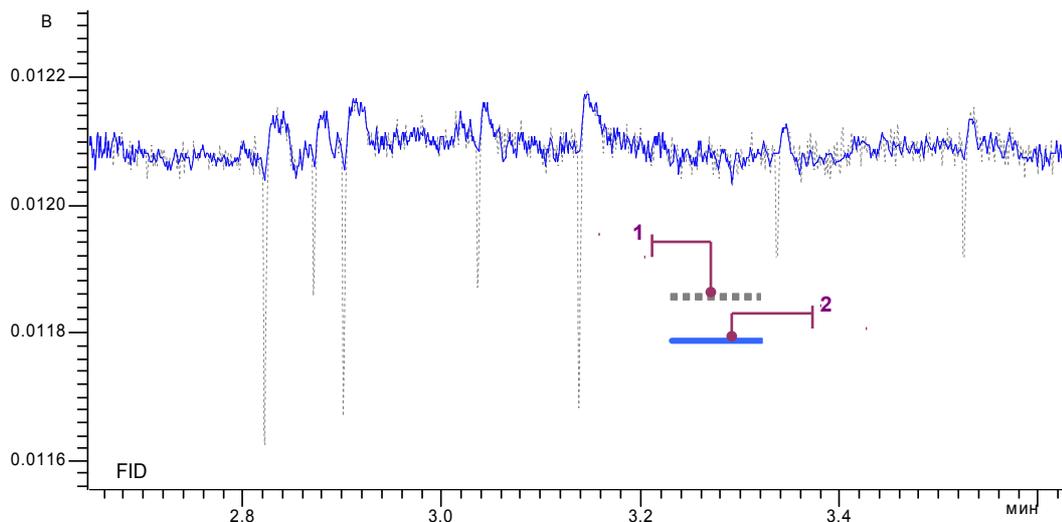
*1 – измеренные данные; 2 – сглаженные данные.*



Устранение выбросов является одним из элементов сглаживания данных. Данный элемент сглаживания устраняет только высокочастотные промахи, вызванные нестабильностью сети питания, нестабильностью горения пламени для пламенно-ионизационных детекторов и т.д. Если ширина пиков много больше ширины высокочастотного выброса, то искажения высот и площадей под пиками не будет. Устранение выбросов необходимо применять для упрощения настройки алгоритма «поиска пиков» и повышения качества интегрирования хроматограммы.

Рис. 60. Пример устранения "выбросов" в системе UniChrom.

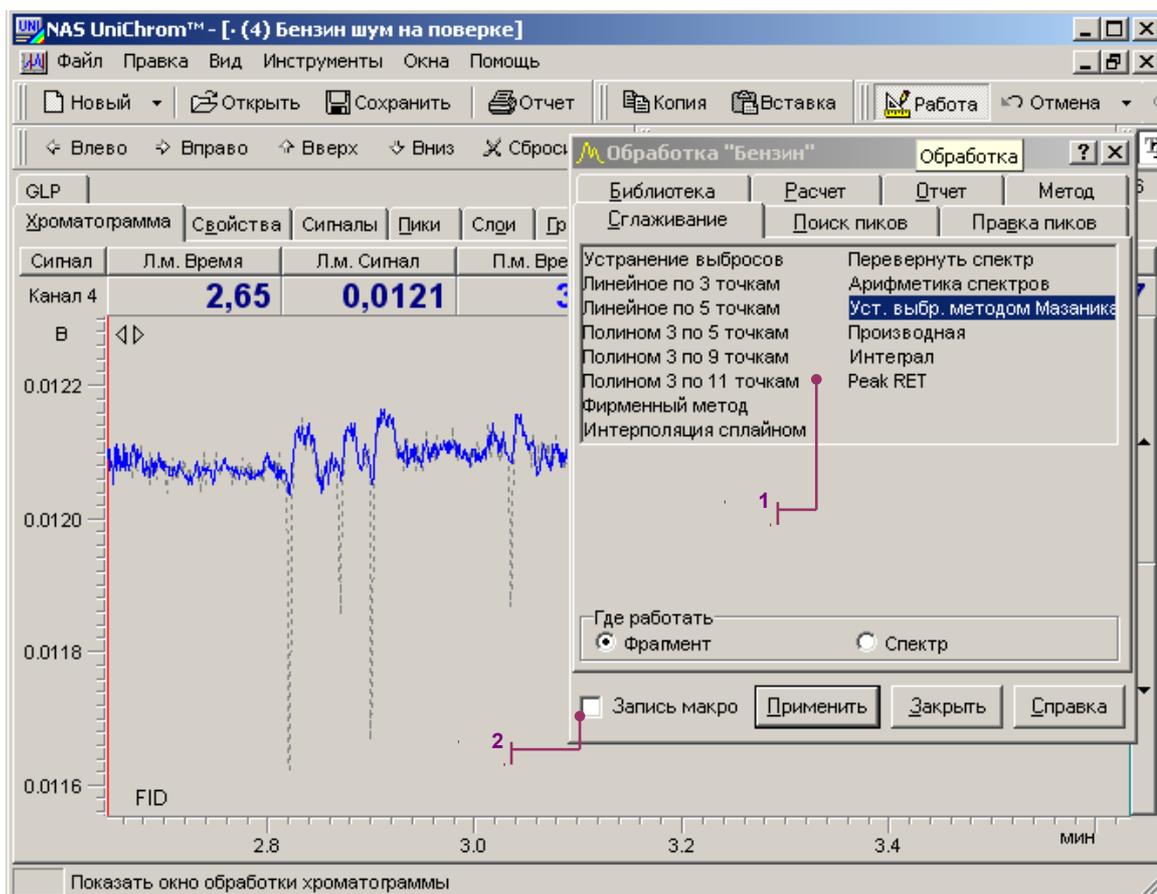
1 – измеренные данные; 2 – сглаженные данные.



В UniChrom интегрировано пять стандартных методов сглаживания (линейное по 3 и 5 точкам, полиномиальное с использованием полинома 3-й степени по 5, 9 и 11 точкам), интерполяция сплайном, один фирменный метод, два алгоритма устранения выбросов и другие специальные алгоритмы. Все эти алгоритмы могут работать как по всей хроматограмме, так и на отдельных её фрагментах (между маркерами).

Рис. 61. Окно закладки "Сглаживание".

1 – элементы управления; 2 – установка флага записи команды макроса.



Применяя в определённом порядке указанные методы сглаживания к разным фрагментам хроматограммы, можно добиться желаемого результата сглаживания данных. Чтобы повторить такую «удачную» последовательность действий в будущем при обработке других однотипных хроматограмм,

данную последовательность можно сохранить. Для этого требуется до применения процедур сглаживания установить флаг «Запись макро» (см. рис. выше).

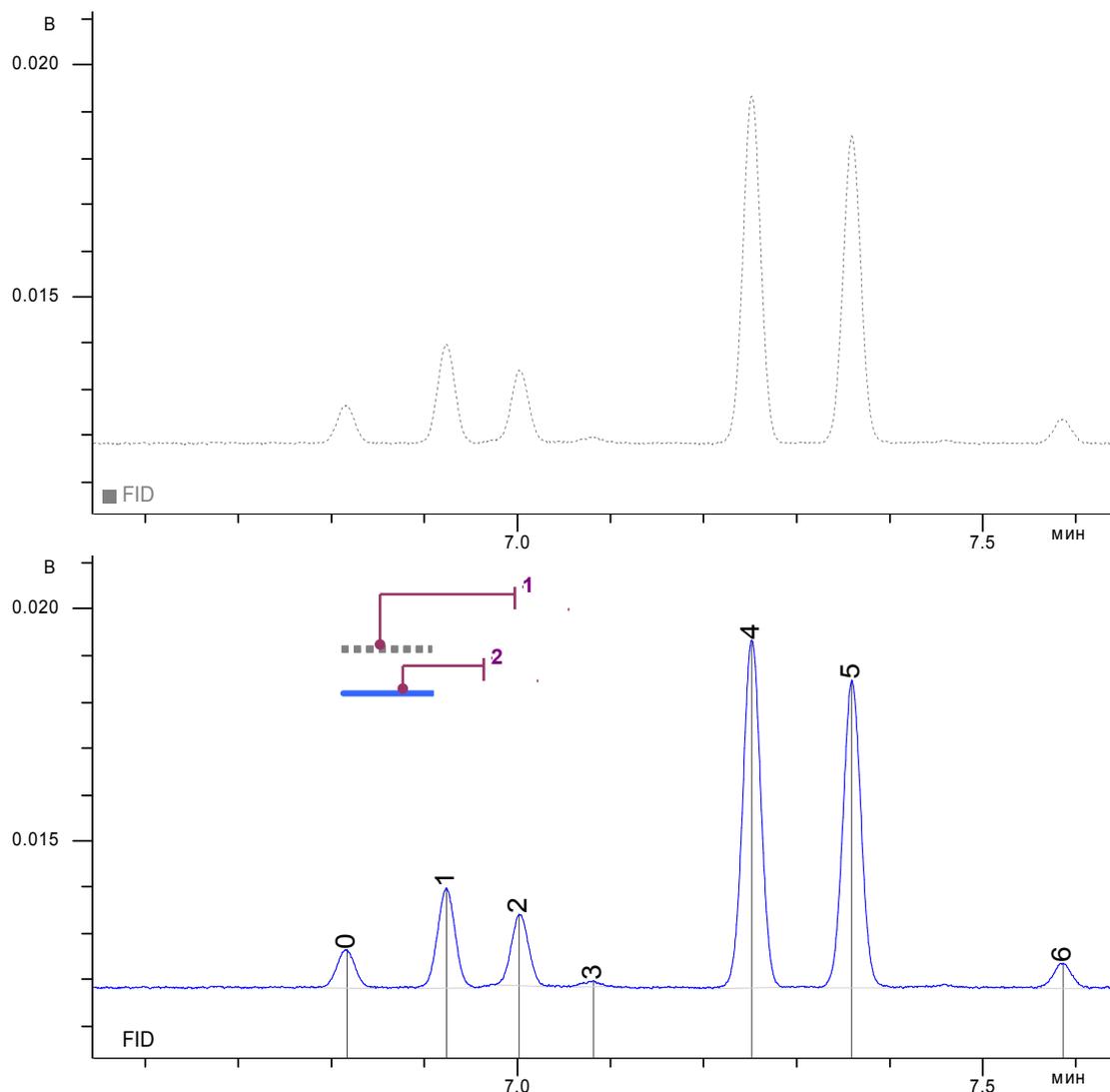
Элементы сглаживания рекомендуется применять в самых крайних случаях. В первую очередь необходимо заставить прибор работать в соответствии с паспортными данными.

### 5.1.2 Разметка и интегрирование хроматограммы

Под разметкой хроматограммы надо понимать установку позиций начала, вершины и конца для каждого анализируемого пика на хроматограмме. Это осуществляется путём выполнения процедуры установки пиков.

Рис. 62. Иллюстрация разметки измеренной хроматограммы.

*1 – неразмеченная хроматограмма; 2 – размеченная хроматограмма с установленными позициями начала, вершины и конца для каждого пика анализируемого компонента.*



Каждый пик может быть установлен явно или с применением настраиваемого алгоритма «автоматического поиска пиков» в заданном фрагменте хроматограммы.

Процедура явной установки пиков состоит в следующем:

- Первый маркер устанавливается в позицию начала пика (см. рис. ниже);
- Второй маркер устанавливается в позицию конца пика;
- Выполняется операция «Установить пик».

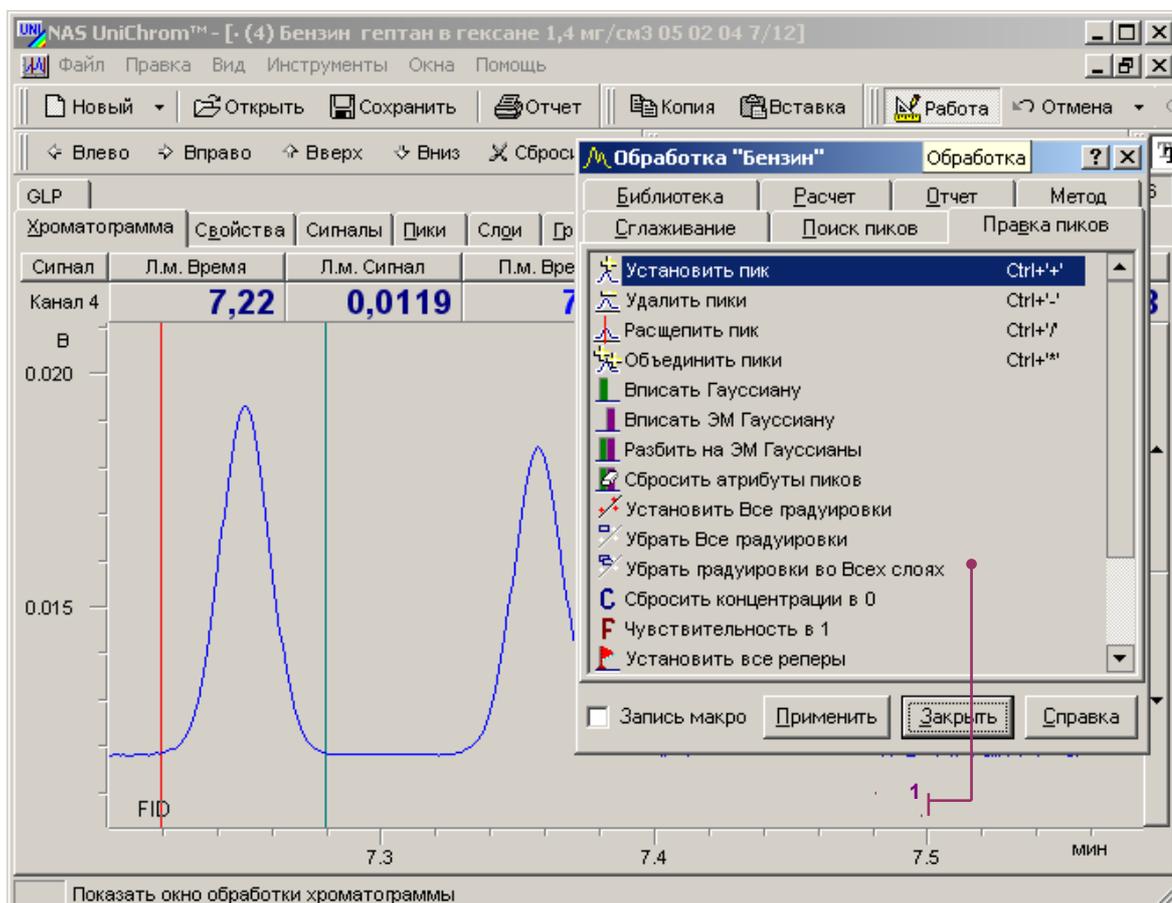
Процедура явной установки пика даёт возможность установить пик даже там, где его фактически нет. Установленный таким образом пик может иметь нулевую высоту и площадь, но при этом для него определены позиции начала, вершины и конца. Этот пик добавляется в коллекцию пиков и может быть использован в процедурах идентификации пиков другой хроматограммы.

Для разметки хроматограммы используются также дополнительные процедуры:

- Удаление пиков в заданном маркерами фрагменте хроматограммы;
- Расщепление пиков;
- Объединение пиков в один пик.

Рис. 63. Окно с закладкой "Правка пика".

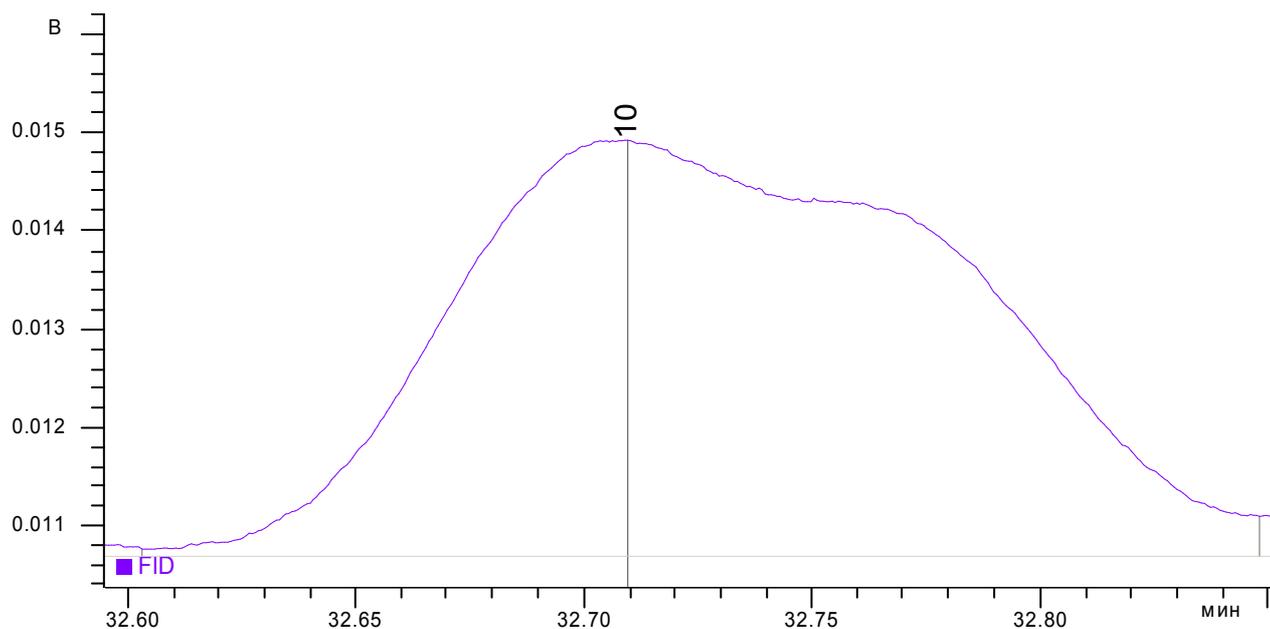
*1 – установка, удаление, расщепление и объединение пиков;*



Удаление пиков не приводит к искажению измеренных данных. При выполнении данной операции пики удаляются из коллекции пиков (из списка пиков, который хранится в памяти компьютера), а на хроматограмме исчезает разметка, соответствующая удалённым пикам.

Процедура расщепления пиков используется, как правило, после выполнения процедуры автоматического поиска пиков, если алгоритм поиска пиков не удалось настроить на расщепление плохо разделённых (слитых) пиков.

Рис. 64. Два плохо разделённых пика после выполнения процедуры автоматического поиска пиков распознаны как один пик

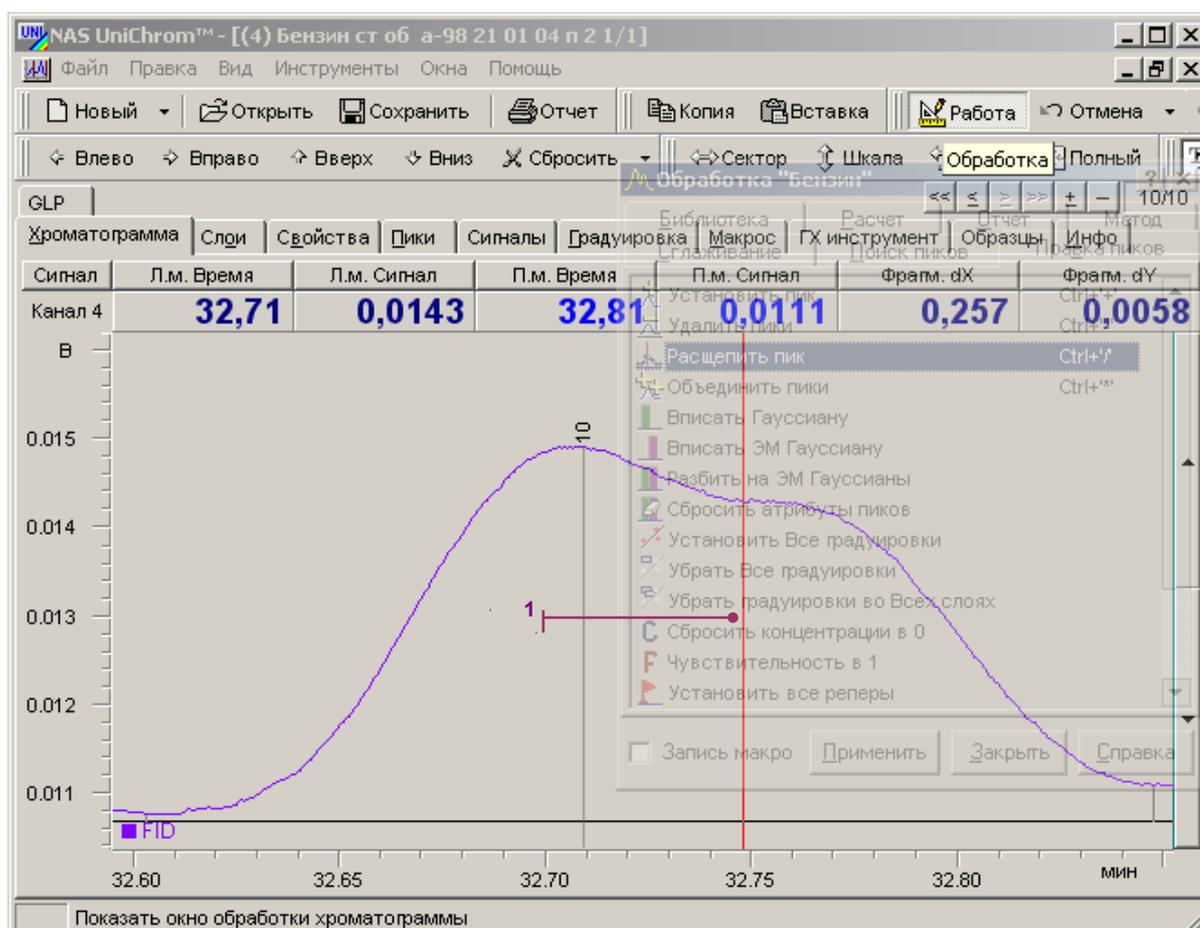


Для выполнения процедуры расщепления пика необходимо:

- Установить маркер (любой) на границу раздела пиков;
- Выполнить операцию “Расщепить пик”;

Рис. 65. Пример расщепления пика на несколько долей.

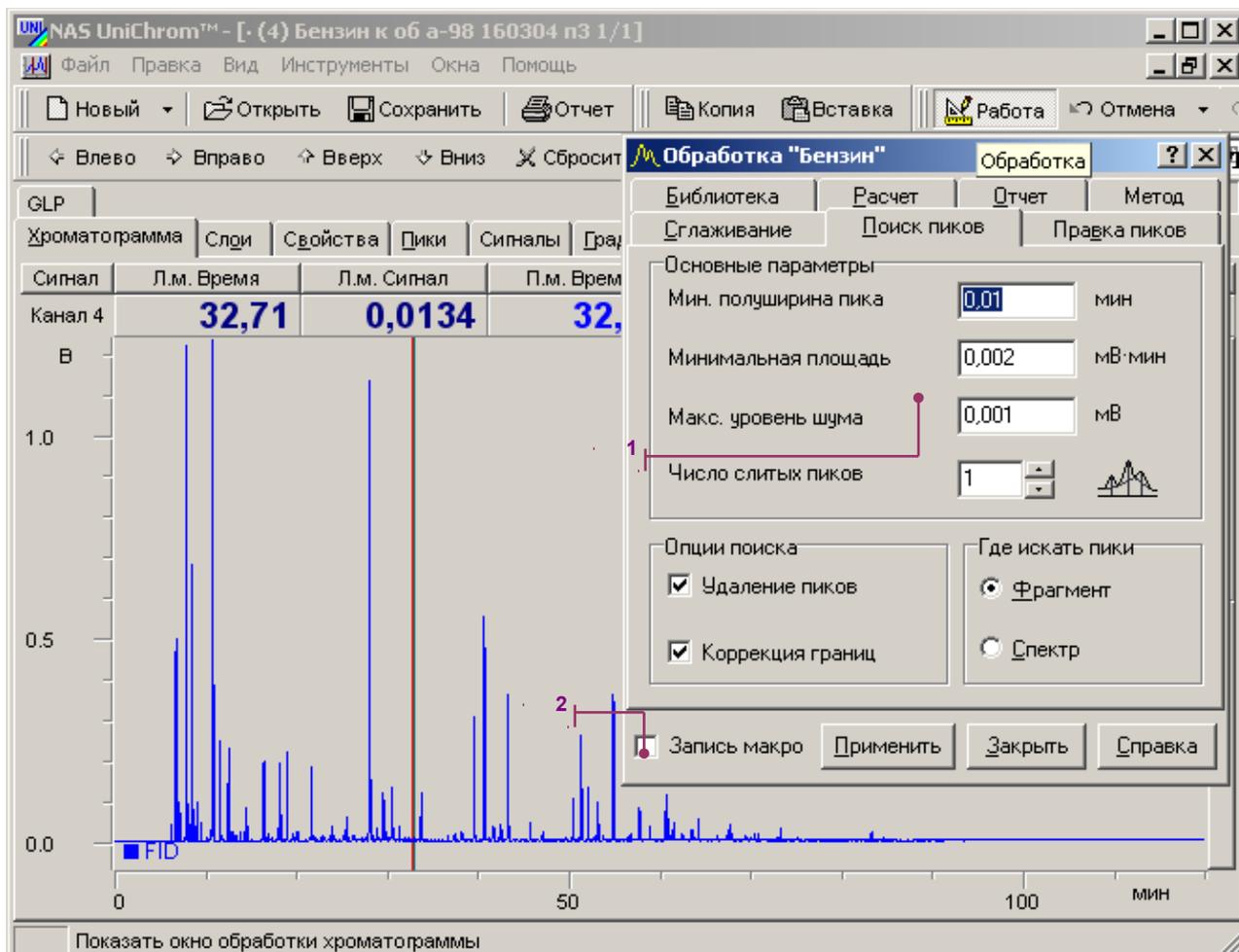
*1 – маркер на границе раздела пиков;*



Разметка хроматограммы указанным выше способом может занять много времени, если анализируемая смесь включает в себя уже более 10-ти компонентов. В этом случае желательно применять алгоритм автоматического поиска пиков.

Рис. 66. Окно закладки "Поиск пиков".

1 – автоматический поиск пиков; 2 – ?.



Процедура поиска пиков является настраиваемой. Для её работы требуется задать следующие параметры:

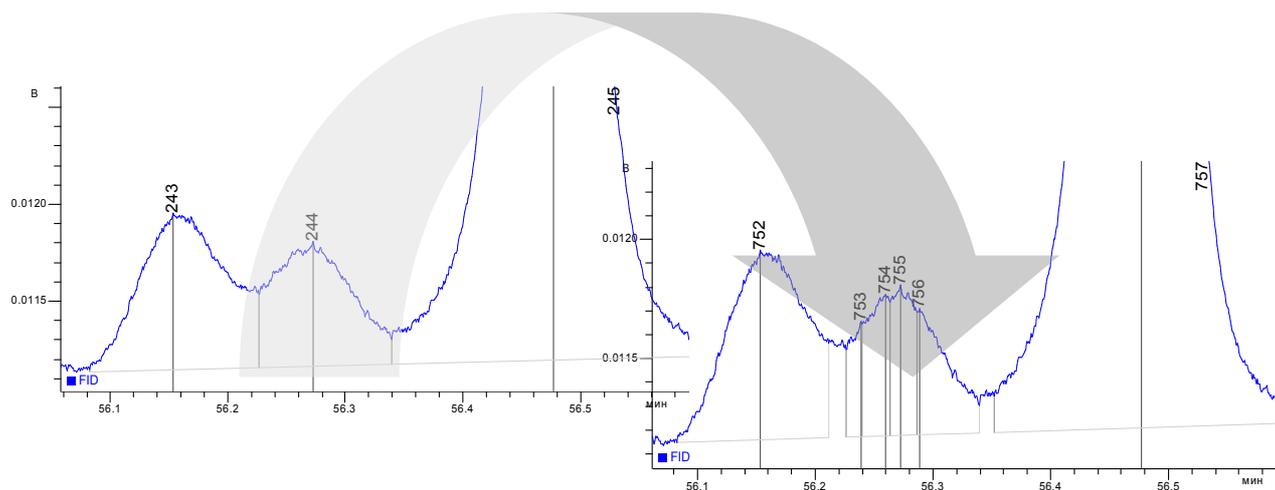
- Минимальная полуширина пика;
- Минимальная площадь;
- Максимальный уровень шума;
- "Число слитых пиков";
- Удаление предыдущей разметки (удаление пиков);
- Поиск с коррекцией границ пиков.

Начиная с версии программы 4.3 число слитых пиков определяется автоматически. Параметр "Число слитых пиков" превратился в параметр логического типа ("Да" / "Нет"). Если число слитых пиков установлено в 1 (один), то базовая линия для каждого пика будет проведена от долины к долине (valley to valley). Иначе используется метод опускания перпендикуляра к базовой линии.

Хроматограммы, богатые пиками разной полуширины, рекомендуется размечать процедурой поиска пиков в два и более этапов. Сначала алгоритм настраивается на поиск широких пиков (варьируется значение параметра поиска "минимальная полуширина пика"), а затем без удаления предыдущей разметки можно выполнить поиск более узких пиков и т. д.

Если процедуру поиска пиков, настроенную на обнаружение узких пиков, применить к участку хроматограммы с зашумлёнными широкими пиками, то результатом поиска может оказаться раздробление искомого пика на множество узких шумовых пиков.

Рис. 67. Иллюстрация поиска пиков в зашумленном спектре.



Широкий пик разбивается на большое количество узких пиков, которые обусловлены случайным распределением шума по контуру искомого пика.

Исправить указанную выше разметку можно повторным применением алгоритма поиска пиков с откорректированным параметром «минимальной полуширины» или использовать процедуру объединения пиков в один пик.

Применяя в определённом порядке указанные методы разметки к разным фрагментам хроматограммы, можно добиться желаемой разметки. Чтобы повторить такую «удачную» последовательность действий в будущем при обработке других однотипных хроматограмм, данную последовательность можно сохранить. Для этого требуется до применения процедур поиска и правки пиков установить флаг «Запись макро» (см. рис. выше).

Интегрирование хроматограммы – расчёт площадей пиков, высот пиков и параметров базовой линии – происходит автоматически при разметке хроматограммы.

### 5.1.3 Идентификация пиков

Под идентификацией пиков надо понимать процесс распознавания пиков путём сравнения их параметров удерживания с табличными параметрами (библиотечными параметрами). При этом каждому распознанному пику присваивается уникальное имя из библиотечной таблицы.

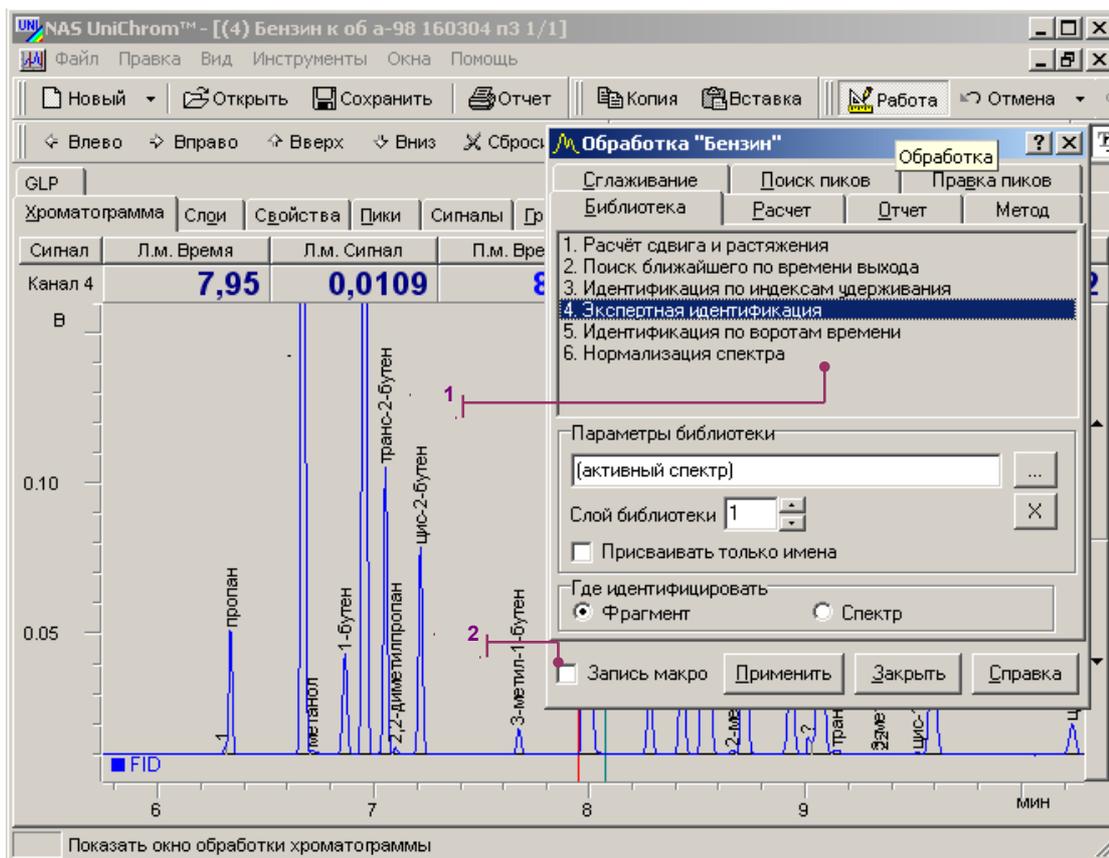
Распознавание хроматографических пиков осуществляется по времени выхода и (или) индексам удерживания (индексам Ковача).

В качестве библиотечной таблицы сравнения можно использовать таблицы пиков любого слоя текущего спектра хроматограмм и таблицы пиков любого слоя из любого другого файла системы UniChrom (\*.\$\$\$).

Для выполнения идентификации пиков текущей хроматограммы необходимо иметь заготовленную ранее библиотечную таблицу пиков. Иначе не с чем будет сравнивать.

Рис. 68. Закладка “Библиотека” с набором вариантов идентификации установленных пиков.

1 – идентификация пиков; 2 – флаг установки команды записи команды макроса.



В UniChrom интегрировано четыре метода идентификации.

- 1) Поиск ближайшего по времени выхода. Самый простой способ сопоставления пиков текущей таблицы с пиками библиотечной хроматограммы. Из списка пиков библиотеки выбирается пик, время выхода которого наиболее близко совпадает со временем выхода анализируемого пика и параметры этого библиотечного пика (включая уникальное имя) передаются анализируемому пику.
- 2) Идентификация по индексам удерживания. Данный способ аналогичен предыдущему за исключением того, что в качестве параметра сравнения вместо времени удерживания используется индекс удерживания. Для выполнения данной процедуры требуется присвоить каждому пику текущей хроматограммы уникальный индекс удерживания.
- 3) Идентификация по воротам времени. Данный способ аналогичен методу поиска ближайшего по времени. Но накладывается дополнительное условие. Расхождение между временами выхода текущего и библиотечного пиков не должно превышать допустимых временных ворот. Ворота в процентах времени удерживания пика указываются в библиотечной таблице пиков для каждого пика.
- 4) Экспертная идентификация. Параметрами сравнения являются время выхода, высота и площадь под пиком. Временные ворота рассчитываются автоматически.

Известно, что времена выхода компонентов анализируемой смеси зависят не только от фазы колонки и её габаритов, но и от условий анализа: расхода газа-носителя и температуры колонки. На практике часто случается, особенно для хроматографов прошлых лет, что указанные условия «плывут» от анализа к анализу. Если условия были очень сильно изменены, то идентификация с поиском ближайшего по времени не даст положительного результата, так как библиотечная и текущая хроматограммы не совместятся. Они будут сдвинуты и растянуты друг относительно друга.

Теоретически идентификация по индексам удерживания и экспертная идентификация должны были устранить эффекты, вызванные изменением условий. Но практика показала, что условия могут изменяться даже во время анализа как в одну, так и в другую сторону и чем длиннее анализ, тем более это заметно. То есть, оказывается, что сравнивать текущую хроматограмму с библиотечной нужно не целиком, а отдельными фрагментами.

Все перечисленные методы идентификации могут работать как по всей хроматограмме, распознавая сразу все пики, так и по фрагментам.

Учитывая вышесказанное, можно ожидать, что идентификация всех пиков хроматограммы представляет собой длительный процесс: выбери фрагмент и примени процедуру идентификации, выбери второй фрагмент и снова примени процедуру идентификации, выбери третий фрагмент и т. д.

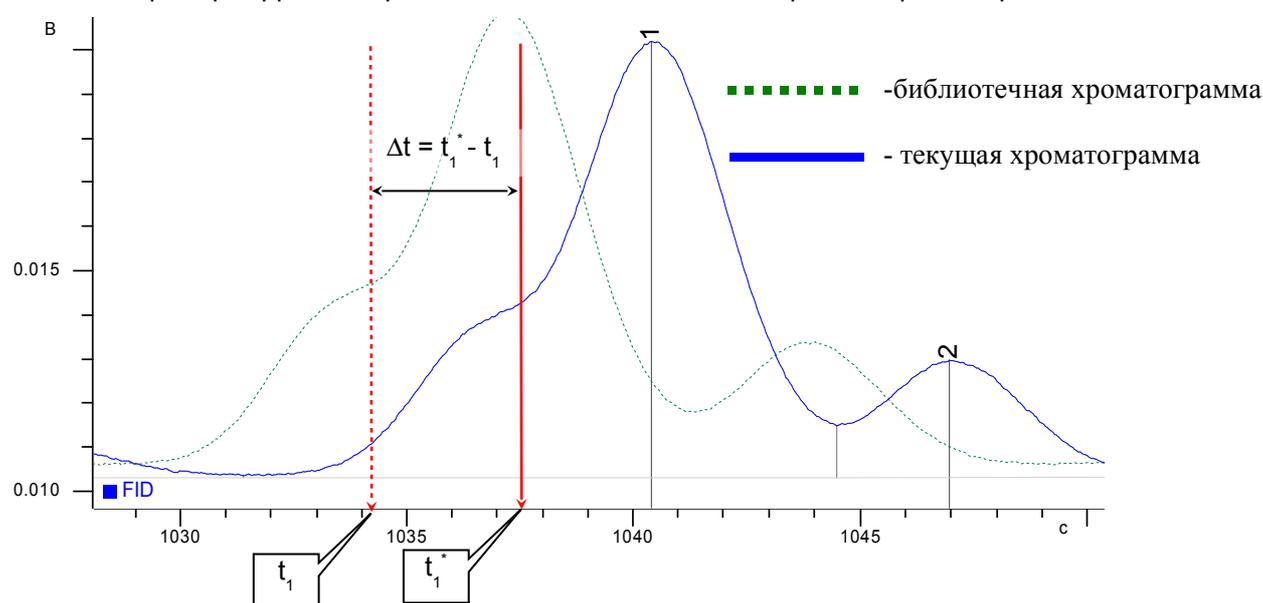
Для упрощения идентификации всех пиков при изменении условий хроматографирования было введено понятие репера.

Репер это опорный пик, однозначно соответствующий пику библиотечной таблицы. Для создания такой однозначной связи опорный пик должен быть помечен меткой “репер” и называться так же, как библиотечный пик. Реперы разбивают хроматограмму на фрагменты. В каждом фрагменте свой сдвиг и растяжение относительно библиотечной хроматограммы. Каждый метод идентификации компенсирует эти локальные сдвиги и растяжения и только затем выполняет процедуру распознавания.

С использованием реперов процесс идентификации выглядит следующим образом: пользователь устанавливает реперы (один, два и более – в зависимости от текущей ситуации) и один раз выполняет идентификацию по всей хроматограмме.

Коэффициенты сдвигов и растяжений текущей хроматограммы относительно библиотечной после выполнения любого метода идентификации остаются в памяти компьютера до тех пор, пока пользователь не выполнит снова какую-нибудь процедуру идентификации. Эти коэффициенты используются при автоматической обработке хроматограмм (по макросам) в процедурах явной установки, удаления, расщепления и объединения пиков. Поясним это следующим образом:

Рис. 69. Пример коррекции временной шкалы исходной измеренной хроматограммы.



Пусть при создании макроса автоматической обработки было указано, что в момент времени  $t_1$  необходимо расщепить пик. Во время измерения текущей хроматограммы произошёл её сдвиг относительно библиотечной на время  $\Delta t$ . Очевидно, что в момент времени  $t_1$  расщеплять пик уже нельзя. При автоматической обработке текущей хроматограммы алгоритм идентификации, который должен был исполниться до момента расщепления, определяет этот сдвиг  $\Delta t$ . Процедура расщепления учитывает этот сдвиг, определяя текущий момент расщепления как  $t_1^* = t_1 + \Delta t$ . Следовательно, реальное расщепление пика произойдёт в точке  $t_1^*$ .

Расчёт сдвига и растяжения можно выполнить и без распознавания пиков. Смотри первый пункт списка процедур на странице «Библиотека» в окне «Обработка».

Применяя в определённом порядке указанные методы идентификации к разным фрагментам хроматограммы, можно добиться желаемого результата распознавания. Чтобы повторить такую “удачную” последовательность действий в будущем при обработке других однотипных хроматограмм, данную последовательность можно сохранить. Для этого требуется перед применением процедур идентификации установить флаг “Запись макро” (см. рис. выше).

#### 5.1.4 Расчёт концентраций

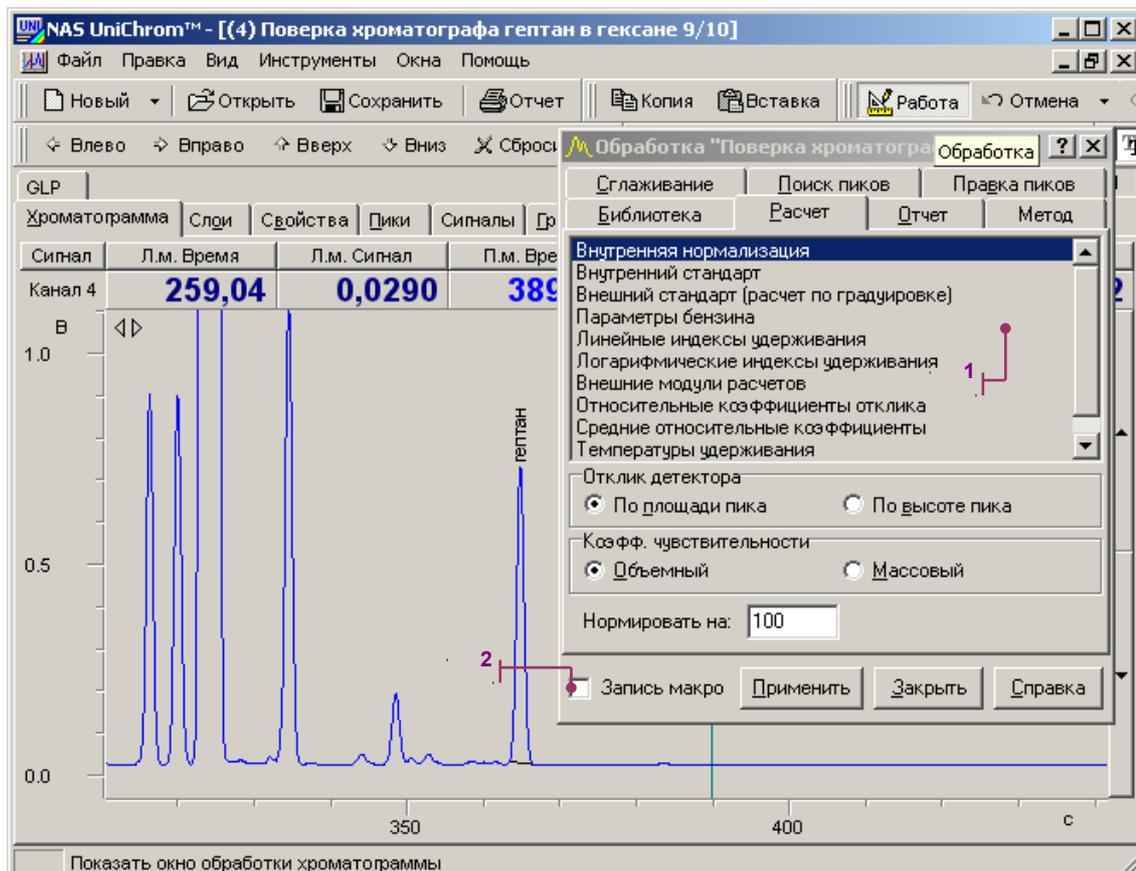
В UniChrom интегрированы все три стандартных метода расчёта концентраций:

- Метод внутренней нормализации;

- Метод внутреннего стандарта;
- Метод внешнего стандарта (расчёт по абсолютной или относительной градуировке).

Рис. 70. Окно закладки "Расчет".

1 – расчет концентраций; 2 – ?.



Чтобы повторить метод расчёта при обработке однотипных хроматограмм в автоматическом режиме, данный метод можно сохранить. Для этого требуется перед применением процедуры расчёта установить флаг "Запись макро" (см. рис. выше).

После выполнения любой процедуры расчёта в таблице пиков пересчитываются групповые концентрации.

Групповая концентрация – суммарная концентрация пиков одной группы.

Рис. 71. Пример расчета групповых концентраций.

1 – фиктивные пики.

№	Имя пика	t,c	A,мВ·с	C,%	Групп. индекс
31	30	430,240	0,27254	0,00007	0,00000
32	31	449,000	7,71781	0,00208	0,00000
33	32	453,080	0,51944	0,00014	0,00000
34	33	455,880	0,35752	0,00010	0,00000
35	34	460,640	0,64384	0,00017	0,00000
36	35	468,920	0,29067	0,00008	0,00000
37	36	481,360	0,67274	0,00018	0,00000
38	37	489,520	0,68298	0,00018	0,00000
39	38	493,480	1,29652	0,00035	0,00000
40	39	499,120	5,21871	0,00141	0,00000
41	40	507,160	0,41257	0,00011	0,00000
42	41	525,720	0,97391	0,00026	0,00000
43	42	539,880	4,07012	0,00110	0,00000
44	43	548,840	0,17336	0,00005	0,00000
45	44	585,000	1,57125	0,00041	0,00000
46	Примеси		3411,77620	0,92033	0,00000
47	гексан		366484,50592	98,86001	1,00000
48	гептан		814,29179	0,21966	2,00000

Групповые концентрации приписываются к так называемым фиктивным пикам. Фиктивных пиков нет на хроматограмме, но они есть в таблице пиков (см. рис. выше). Эти пики можно использовать в других расчётах как встроенных, так и внешних. Эти пики можно использовать как итоговый результат обработки хроматограммы в отчётах и т. д.

### 5.1.5 Вывод результатов измерений на печать

В UniChrom есть два типа отчётов – встроенный и внешний:

Встроенный отчёт настраивается внутри программы. Настройка заключается в выборе разделов, которые будут выводиться на печать. Это свойства спектра хроматограмм, локальные свойства текущей хроматограммы, хроматографический метод, график, таблица пиков, градуировочная информация и дополнительная информация, то есть содержание каждой страницы данных окна спектра хроматограмм.

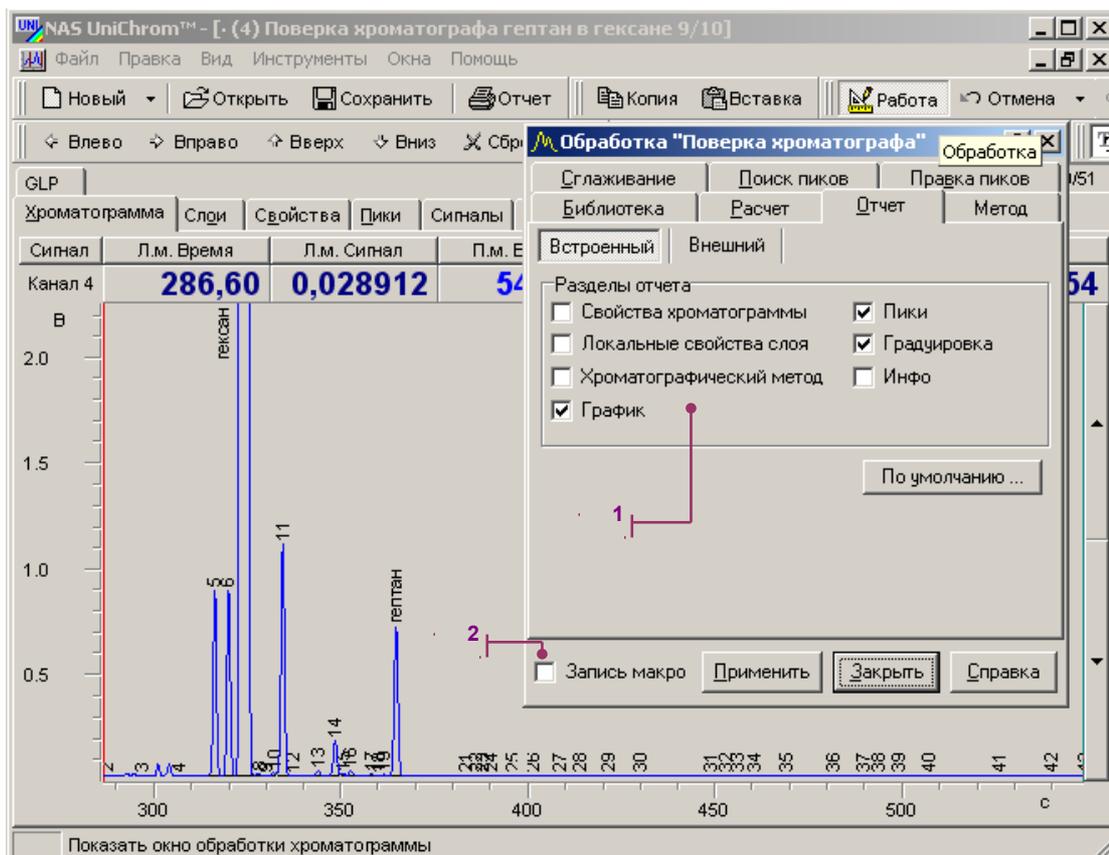
Допускается выполнить предварительный просмотр отчёта в любой момент времени.

Применение процедуры встроенного отчёта без лишних вопросов выводит текущий отчёт на принтер.

Чтобы повторить процедуру встроенного отчёта в автоматическом режиме, данную процедуру можно сохранить отдельным пунктом в макросе. Для этого требуется перед применением процедуры встроенного отчёта установить флаг “Запись макро”.

Рис. 72. Окно закладки "Отчет". Возможности встроенного отчета.

1 – встроенный отчёт; 2 – ?.



Внешний отчёт создаётся не в UniChrom. Это может быть MS Word или MS Excel. Программа UniChrom может общаться с другими приложениями по каналу DDE или через OLE интерфейс, передавая данные о хроматограммах и пиках. Указанные выше приложения способны по этим каналам получать данные от других приложений. Это и было использовано для генерации внешних отчётов. Выбрав шаблон отчёта (\*.doc для MS Word, \*.xlt или \*.xls для MS Excel) предлагаемого из списка, или явно указав имя файла внешнего отчёта, можно выполнить данную процедуру. Отчёт формируется в выбранном приложении. Распечатать его можно средствами того приложения, которое было открыто. Вывод на печать отчёта в данном случае не автоматический. С другой стороны это удобно. Отчёт можно не печатать, а просто сохранить его на диске, то есть можно уйти от бумажного производства и вести полностью электронный журнал анализов.

Указанным выше способом можно поднимать любые приложения, а также выполнять любые внешние программы, написанные практически на любом языке программирования, имеющем возможности создания объектов OLE Automation:

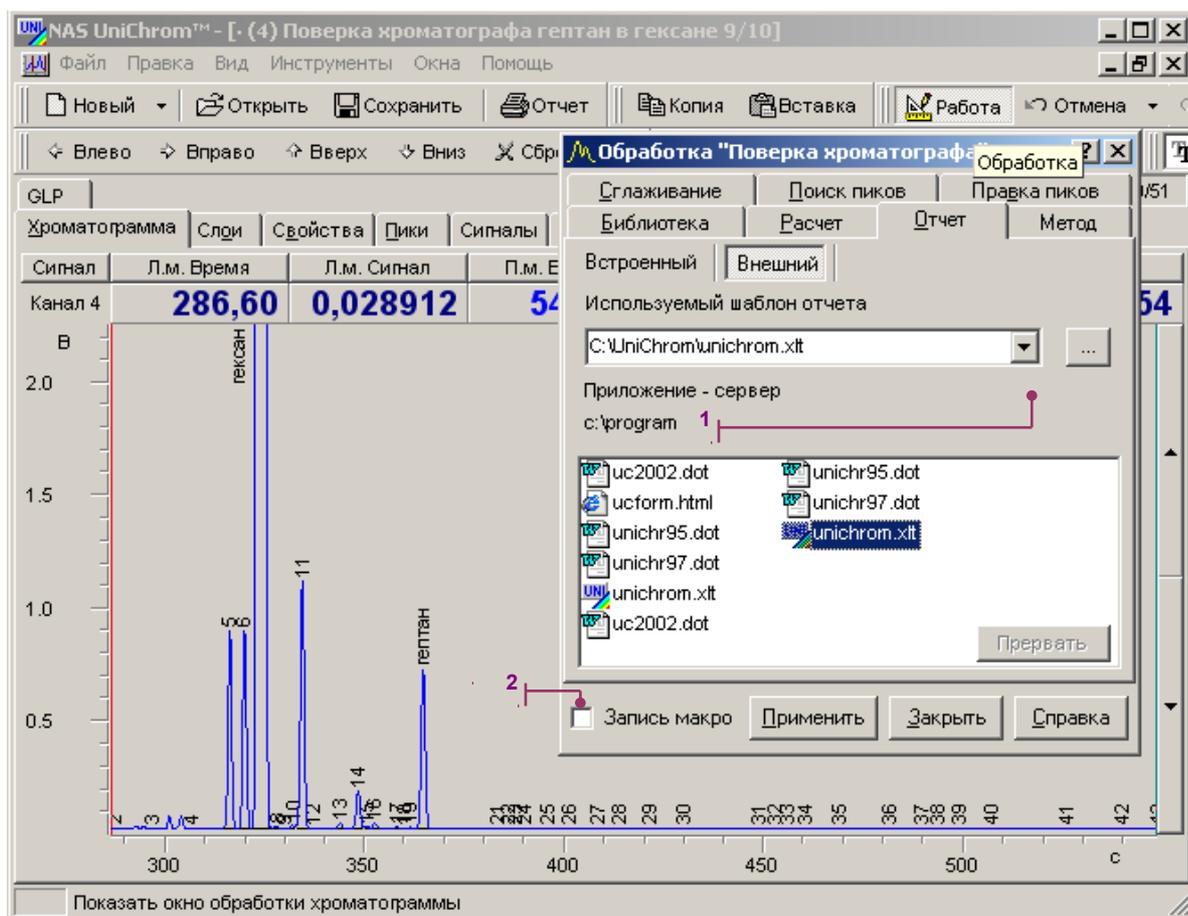
- 1) UniChrom может открыть Web-страницу, содержащую сценарий JavaScript, который, получив данные из UniChrom, передаст их на сервер по протоколу HTTP.
- 2) UniChrom может запустить на выполнение сценарий VisualBasic (\*.vbs) или JavaScript (\*.js), которые являются стандартными скриптами для современных Windows.
- 3) UniChrom может выполнить любое \*.exe приложение, которое будет взаимодействовать с ним, используя интерфейс OLE Automation.
- 4) UniChrom может заставить ОС открыть любой документ, который распознаётся Windows shell (то есть расширение файла-документа зарегистрировано в системе, например: \*.doc, \*.xlt, \*.cdr, \*.mdb, \*.html, \*.bat, \*.pl, и т.д.).

Это даёт возможность быстро написать свою специфическую функцию, которая расширит возможности программы UniChrom дополнительными процедурами и методами расчёта не прибегая к перекомпиляции программы.

Чтобы повторить процедуру внешнего отчёта в автоматическом режиме, данную процедуру можно сохранить отдельным пунктом в макросе. Для этого требуется перед применением процедуры внешнего отчёта установить флаг "Запись макро".

Рис. 73. Окно закладки "Отчет". Возможности внешних отчетов.

1 – внешний отчет (или внешний расчёт); 2 – ?.



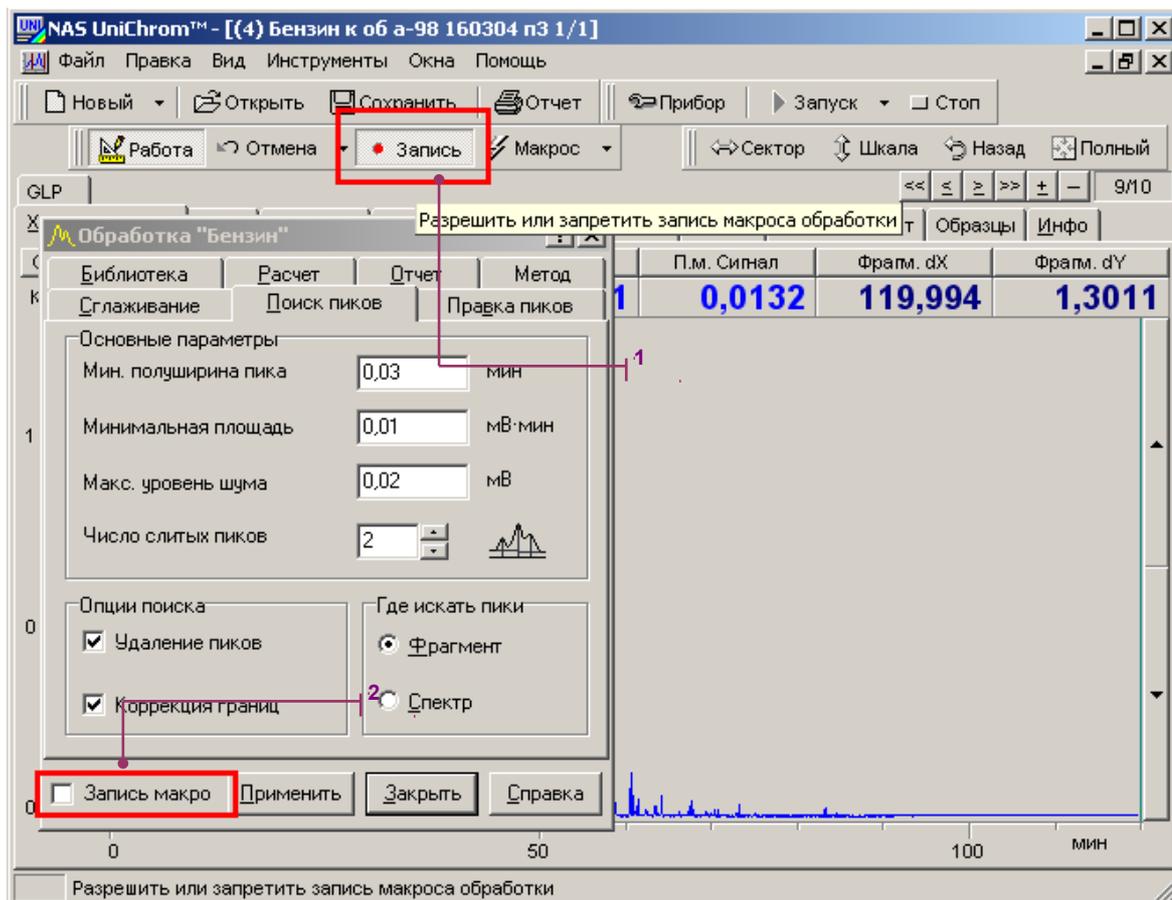
### 5.1.6 Запись макро

Процедуры обработки хроматограмм, представленные в диалоговом окне “Обработка”, рассматриваются как отдельные команды, каждая со своими параметрами. Последовательность таких команд с параметрами образует макрокоманду (или макро-процедуру) обработки хроматограмм, которая называется в UniChrom макросом или сценарием обработки.

Последовательность команд записывается во время обработки при установленном флаге “Запись макро” в окне “Обработка” или при нажатой кнопке “Запись” на панели инструментов “Обработка”.

Рис. 74.

1, 2 – “запись макро”.



Количество команд в макросе не нормируется. Команды могут быть записаны в любой очерёдности. Единственное условие, которое желательно соблюдать при создании макроса, это чтобы последовательность команд имела смысл. Например, не имеет смысла последовательность установки пика, а затем его удаление или идентификация пиков в момент, когда этих пиков ещё нет на хроматограмме, или автоматический поиск пиков, а затем сглаживание измеренных данных и так далее. Программа UniChrom в любом случае выполнит данную макрокоманду, но результат будет нулевой.

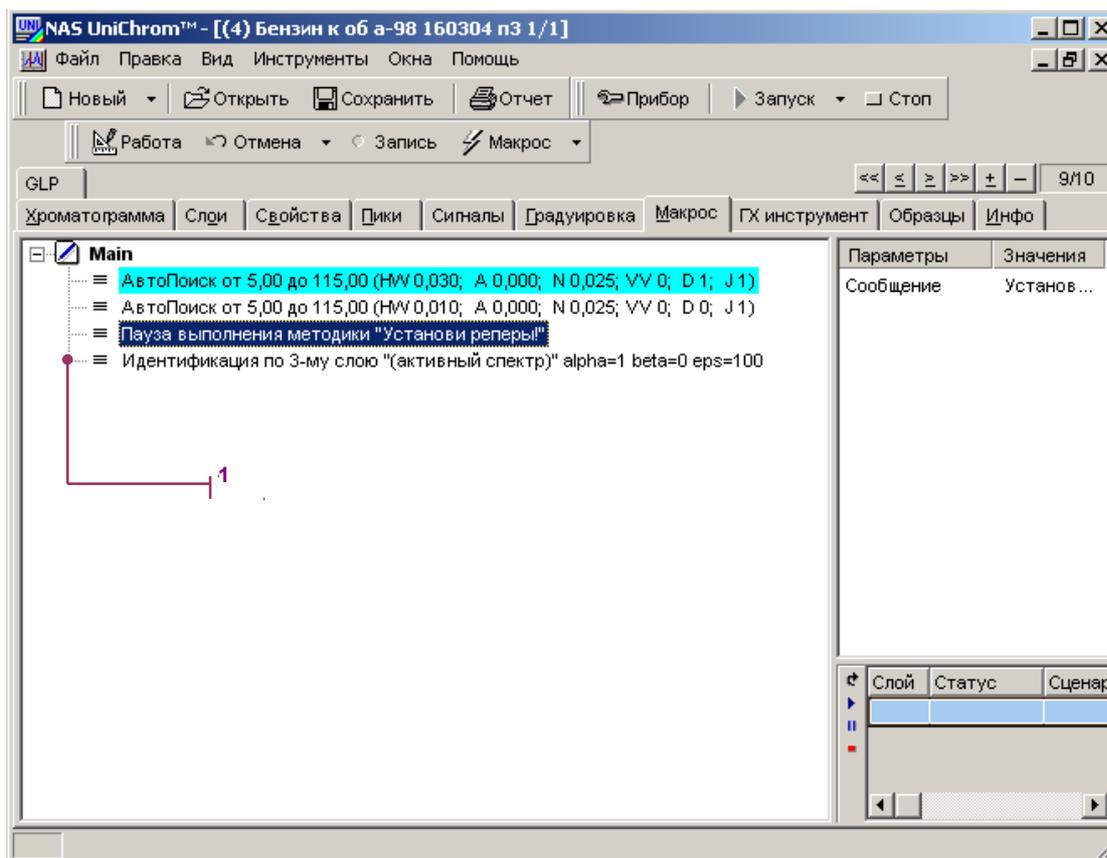
В общем случае, макрос должен состоять из пяти последовательных (основных) этапов обработки хроматограмм, о которых говорилось выше. Это сглаживание измеренных данных, поиск и установка пиков, идентификация пиков, расчёт и вывод результатов на печать.

В частных случаях макросы могут представлять собой более сложные последовательности процедур обработки.

Макросы хранятся в файле вместе с данными, отображаются в одном окне с данными и используются для автоматической обработки хроматограмм в этом окне. Возможности использования сценариев обработки из других файлов и окон в UniChrom не предусмотрены.

Рис. 75. Отображение макросов в окне спектра на странице “Макрос”

1 – последовательность команд обработки, образующих макрос.



Слева на данной странице располагаются последовательности команд обработки, а справа – параметры выбранной команды.

Процесс создания макроса может выглядеть следующим образом:

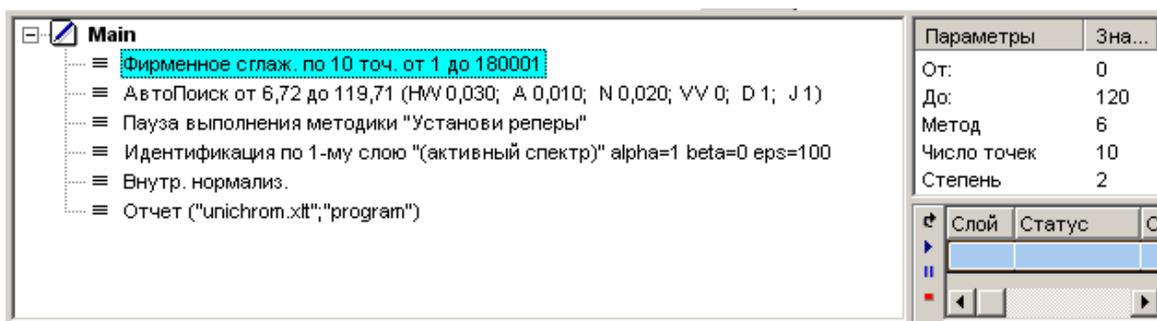
- 1) Измеряете хроматограмму или открываете ранее измеренную хроматограмму с диска.
- 2) Смотрите. Если требуется сглаживание, выполняете сглаживание одним из имеющихся способов.
- 3) Если результат сглаживания не удовлетворительный, делаете откат, нажимая кнопку “Отмена” на панели инструментов “Обработка”;
- 4) Повторяете пункты 2 и 3 до тех пор, пока результат не окажется удовлетворительным;
- 5) Опять осуществляете откат, чтобы повторить удачное сглаживание для записи в макрос;
- 6) Включаете запись макроса;
- 7) Повторяете удачное сглаживание. При этом соответствующий пункт попадает в список команд макроса, в чём можно убедиться, зайдя на страницу “Макрос”;
- 8) Снимаете флаг записи макро (чтобы дальнейшие промежуточные действия по обработке не попали в макрос);
- 9) Настраиваете параметры автоматического поиска пиков и выполняете эту процедуру;
- 10) Если результат автоматического поиска не удовлетворительный, делаете откат, нажимая кнопку “Отмена” на панели инструментов “Обработка”;
- 11) Повторяете пункты 9 и 10 до тех пор, пока результат поиска пиков не окажется положительным;
- 12) Опять осуществляете откат, чтобы повторить удачный поиск для записи в макрос;
- 13) Включаете запись макроса;
- 14) Повторяете удачный поиск. При этом соответствующий пункт попадает в конец списка команд макроса. Так как предыдущей была команда сглаживания, то пункт автоматического поиска будет следовать за пунктом сглаживания;
- 15) Снимаете флаг записи макро (чтобы дальнейшие промежуточные действия по обработке не попали в макрос);
- 16) Выполняете идентификацию одним из имеющихся способов. При этом в качестве библиотеки выбираете ранее измеренную и обработанную хроматограмму;
- 17) Если результат идентификации не удовлетворительный, делаете откат;
- 18) Повторяете пункты 16 и 17 до тех пор, пока результат идентификации не окажется положительным. Не забывайте, что для корректной идентификации может потребоваться

установка реперных пиков и возможно перед идентификацией следует сделать паузу в методике для установки реперов;

- 19) Опять осуществляете откат, чтобы повторить удачную идентификацию;
- 20) Включаете запись макроса;
- 21) Повторяете удачную процедуру идентификации. При этом соответствующий пункт попадает в конец списка команд макроса;
- 22) Выполняете расчёт и создаёте отчёт (встроенный или внешний). При этом соответствующие пункты один за другим попадут в конец списка команд макроса;
- 23) Снимаете флаг записи макро;
- 24) Сохраняете внесённые изменения, нажав кнопку “Сохранить” на панели инструментов “Стандартная” или через меню “Файл \ Сохранить”.

Всё. Макрос готов!

Рис. 76. Отображение макросов в окне спектра на странице “Макрос”



Теперь созданный макрос можно применять для автоматической обработки всех однотипных хроматограмм в данном окне.



## 6 Предметный указатель

<b>А</b>			
АЦП.....	80	отчёт.....	80
<b>Б</b>		<b>П</b>	
базовая линия.....	134	Пик.....	
<b>В</b>		фактор "хвостатости".....	131
Высота, эквивалентная эффективной		Полуширина.....	129
теоретической тарелке.....	130	Порт.....	36
<b>Д</b>		<b>Р</b>	
Детектор.....	57, 60, 75, 77, 116	Разрешение пиков.....	130
<b>Е</b>		режим работы регулятора.....	
единый стиль работы.....	12	расход.....	58
<b>И</b>		РРГ.....	38, 41, 44
Измерение.....	80	<b>С</b>	
Инжектор.....	57, 116	свойства метода.....	7, 102, 107
<b>К</b>		свойства хроматограмм.....	90
Кабель.....	69	Слой.....	90, 93, 94, 95, 96, 121, 122, 146
коэффициент ёмкости колонки.....	130	Спектр.....	80
Кoeffициент извлечения.....	130	структура газового хроматографа.....	59
<b>Л</b>		<b>Т</b>	
линия.....		Термостат.....	57, 75, 116
правка».....	101	<b>Ф</b>	
<b>О</b>		Фактор \"хвостатости\".....	131
Окно обработки.....	81, 132	<b>Ч</b>	
Относительное удерживание.....	130	Число теоретических тарелок.....	130
		Число эффективных теоретических тарелок.....	130