ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

ХРОМАТЭК АНАЛИТИК

РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

214.00045-51И

ПРИЛОЖЕНИЕ

СПЕЦИАЛЬНЫЕ РАСЧЁТЫ

Редакция 17.09.2024

1 ВВЕДЕНИЕ

"Специальные расчёты" (также "Спец. расчёты") – это расширение возможностей ПО "Хроматэк Аналитик" в части выполнения специфических вычислений, предназначено для выполнения расчёта по различным нормативным документам:

- ASTM D2598-16
- ASTM D2887-16
- ASTM D3588-98 (2017)
- ASTM D5134-13
- ASTM D5307
- ASTM D6352-19
- ASTM D6729-20
- ASTM D6730-19
- ASTM D6733-01
- ASTM D7096-19
- ASTM D7169-11
- ASTM D7213-15 (2019)
- ASTM D7500-15 (2019)
- BS EN ISO 8973:1999
- СТ РК ASTM D 2598-2015
- DIN EN 27941-1993
- DIN EN ISO 8973:2000
- EN 27941-1994
- ISO 15403-1:2006
- ISO 6974:2000-2002
- ISO 6976:1995
- ISO 7941:1988
- ISO 8973:1997
- ISO/TR 22302:2014
- ГОСТ EN 589-2014
- ГОСТ ISO 8973:2013
- ГОСТ 10679-2019
- ГОСТ EN 13132-2012
- ГОСТ 27577-2000
- ГОСТ 28656-2019
- ГОСТ 31369-2008
- ГОСТ 31369-2021
- ГОСТ 313717-2020
- ГОСТ 32507-2013
- ГОСТ 32918-2014
- ГОСТ 33012-2014
- ГОСТ 33690-2015
- ГОСТ 34704-2020
- ГОСТ 34723-2021
- ГОСТ 50802-95
- ГОСТ 50802-2021
- ГОСТ Р 52087-2018
- ГОСТ Р 53367-2009
- ГОСТ Р 54484-2011
- ГОСТ Р 579751-2017
- МИ ФР 1.21.2014.18560
- М-МВИ-263-12
- Р Газпром 5.9:2010
- СТ РК ИСО 8973:2004
- СТБ EN 589-2008
- СТО 03-7.76-2016

… т.д., список пополняется по мере реализации новых задач.

Кроме того, приложение позволяет выполнять расчёт сходимости, отображать входные данные и график хроматограммы. Расчёты добавляются в очередь и выполняются последовательно, формируя единый отчёт, который можно создать в форматах:

- HTML
- PDF
- XLSX
- TXT
- CSV

При необходимости отчёты можно создать во всех этих форматах одновременно.

Расширение "Специальные расчёты" является неотъемлемой часть программного обеспечения "Хроматэк Аналитик" и отдельно не поставляется.

В различных документах "Хроматэк" расширение "Специальные расчёты" также может именоваться "приложением". Эти термины в данном случае следует рассматривать, как синонимы. Определение "приложение Специальные расчёты" не предполагает, что данный программный модуль функционирует автономно от "Хроматэк Аналитик".

2 НАСТРОЙКА РАСШИРЕНИЯ

2.1 Запуск расширения "Спец. расчёты"

Как сказано выше – расширение "Спец. расчёты" не является самостоятельной программой, это часть ПО "Хроматэк Аналитик". Поэтому при первом запуске необходимо сначала запустить "Хроматэк Аналитик", в которой выполняется обработка хроматограмм анализов.

Запуск "Хроматэк Аналитик" осуществляется:


С помощью ярлыка "Хроматэк Навигатор" на рабочем столе Windows.
Далее следует:

- или запустить соединение с хроматографом ("Хроматэк Аналитик" загрузится после "Панели управления",
- или на рабочем столе "Хроматэк Навигатор" нажать на кнопку 

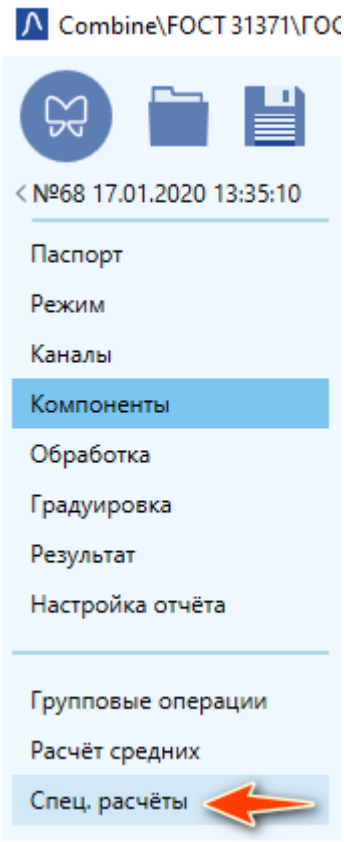


Рисунок 2.1 – Запуск "Спец. расчёты"

Вы можете добавить на рабочий стол Windows ярлык быстрого запуска расширения "Специальные расчёты".

1. Для этого в окне "Специальных расчётов" нажмите на ссылку "Расширение: Спец. расчёты" (слева-сверху).
2. Выберите "Создать ярлык на рабочем столе":

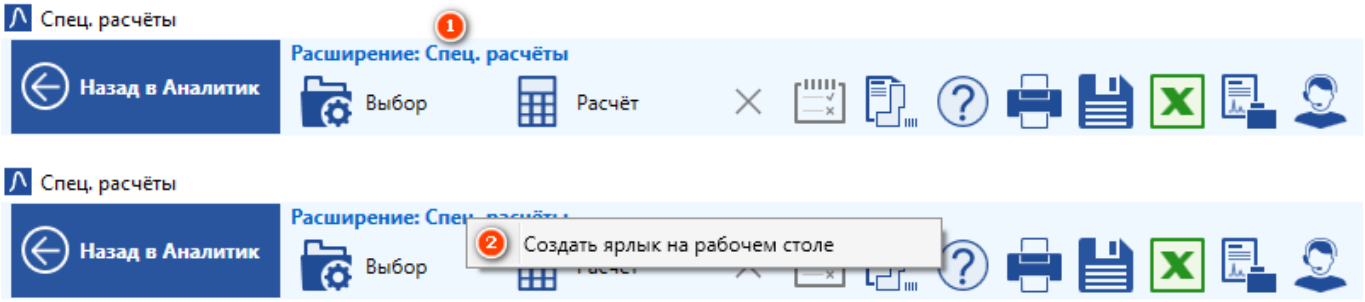


Рисунок 2.2 – Создание ярлыка расширения на рабочем столе

2.2 Панель инструментов

В верхней части окна "Спец. расчёты" расположена панель кнопок. Некоторые из них доступны только после выполнения расчёта:

Выбор. Открывает окно настройки расчётов и выбора хроматограмм.

Расчёт. Запускает повторно расчёт с последними настройками.

Планировщик. Запускает окно настроек для планировщика. Настройки при этом сохраняются в отдельном хранилище и доступны для использования в Планировщике. В обычном режиме работы настройки сохраняются для проекта, открытого в данный момент в "Хроматэк Аналитик" и Планировщику недоступны.

Вызов справки.

Показ окна предварительного просмотра перед печатью.

Сохранение текущего отчёта. При сохранении можно выбрать путь сохранения и формат.

Экспорт текущий отчёт в формат xlsx и открытие этого файла соответствующим редактором, если он установлен на компьютере (MS Excel и его аналоги).

Открытие папки ранее сохранённых отчётов.

Техподдержка. Позволяет сформировать пакет диагностических файлов для отправки разработчику, применить исправления настроек, полученные от разработчика, получить исходные данные расчёта.

2.3 Настройка специальных расчётов

2.3.1 Основные сведения о настройке

При переходе в окно "Специальных расчётов", а также при нажатии в нём кнопки "Выбор" открывается окно с двумя закладками:

- **Хроматограммы**. Здесь выбираются хроматограммы для расчёта.
- **Настройка**. Здесь выполняются настройки расчётов.

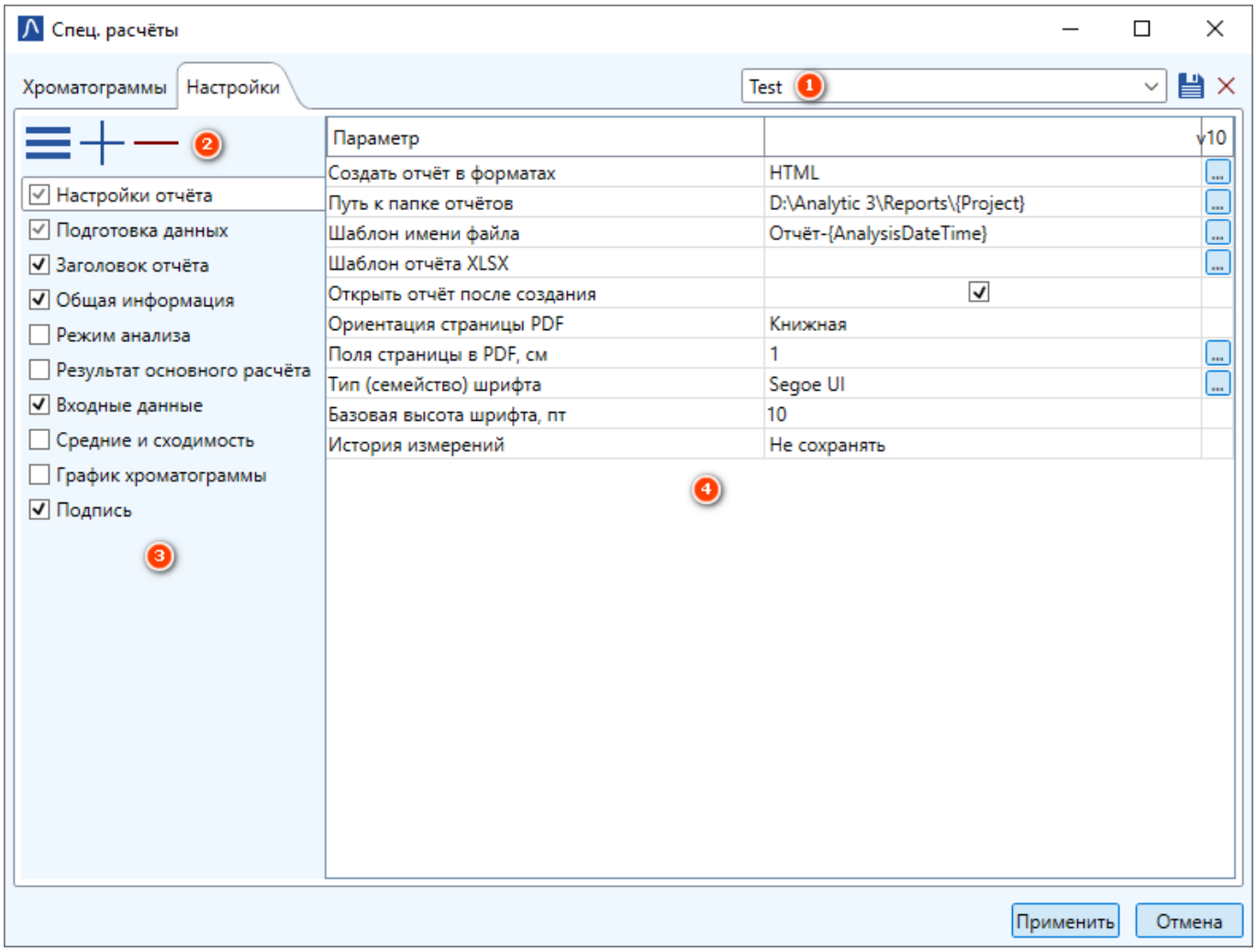


Рисунок 2.3 – Настройки Специальные расчёты по умолчанию

Перейдите на закладку "Настройка". На ней расположены:

1. Название настроек. Вы можете создать неограниченное количество настроек, задав каждой уникальное название в соответствующей строке.

- для выбора набора настроек из списка нажмите кнопку ,
- для сохранения ,
- для удаления .
- Настройки сохраняются в файлах в папке **c:\ProgramData\Chromatec\Analytic31\CombineSettings**.

2. Группа кнопок:

Меню. Также можно его вызвать нажатием левой клавиши мыши в области очереди расчётов.

Добавить расчёт в список выполняемых.

Удалить расчёт из списка выполняемых.

Кнопка "Меню" содержит:

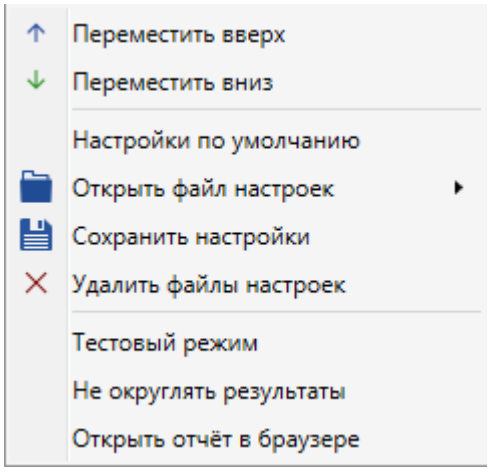


Рисунок 2.4 – Настройки кнопки **Меню**.

Кнопками "Переместить вверх" и "Переместить вниз" вы можете перемещать расчёты друг относительно друга и располагать их в требуемой последовательности.

Переместить расчёт можно мышью (перетащить, зажав левую клавишу на нужное место) Располагать расчёты перед операцией "Подготовка данных" программа запрещает.

Порядок расположения отчётов в очереди имеет значение для тех из них, которые в качестве входных данных используют результаты какого-либо из предыдущих. Например, для расчёта по ГОСТ 31369-2021 могут потребоваться результаты расчёта по ГОСТ 31371.7.2020. В этом случае расчёт по ГОСТ 31371.7.-2020 **должен стоять в списке до** ГОСТ 31369-2021.

Кнопка "Настройки по умолчанию" сбрасывает все настройки в исходное состояние.

Кнопка "Открыть файл" настроек позволяет применить ранее сохранённую очередь расчётов.

Кнопка "Сохранить настройки" позволяет сохрнить текущую очередь расчётов под уникальным названием.

Кнопка "Удалить файлы" настроек открывает окно, в котором вы можете выбрать и удалить ранее сохранённые и ненужные наборы настроек.

"Тестовый режим" формирует после выполнения расчёта файл электронных таблиц с исходными данными из хромтаограмм, участвующих в расчёте (отклики, справочные данные и пр.)

"Не округлять результаты" позволяет вывести в отчёте неокруглённые значения.

"Открыть в браузере" после выполнения расчёта откроет отчёт в web-браузере, установленном в Windows по умолчанию.

3. Очередь расчётов. Представляет собой последовательность выполнения настраиваемых секций (событий). Выполняются секции последовательно друг за другом в порядке сверху вниз. Секции бывают неотключаемые и отключаемые. К неотключаемым относятся **Настройки отчёта** и **Подготовка данных**, они будут выполняться всегда. Прочие можно отключать, добавлять, удалять.
4. Параметры выделенного расчёта. Для каждого расчёта настройки свои. Настраиваются по отдельности

В нижней правой части окна настроек расположены кнопки:

"Применить" – для запуска выполнения настроенной последовательности расчётов

"Отмена" – для отмены выполнения настроенной последовательности расчётов

По умолчанию очередь выполнения состоит из расчётов:

- Подготовка данных. Этот расчёт нельзя выключить или удалить из очереди.
- Общая информация.
- Входные данные.
- Отчёт. Этот расчёт нельзя выключить или удалить из очереди.

Настройки сохраняются автоматически при выполнении расчёта и при закрытии данного окна даже если расчёт не был выполнен.

2.3.2 Добавление расчёта в очередь выполнения

Нажмите на кнопку "Добавить". Откроется выпадающий список, показанный на рисунке 2.5.

1. Список содержит строку фильтра, в которую сразу устанавливается курсор. Вы можете начать вводить название интересующего расчёта или часть названия и список автоматически отфильтруется.
2. Выберите интересующий отчёт, и он добавится в очередь выполнения.

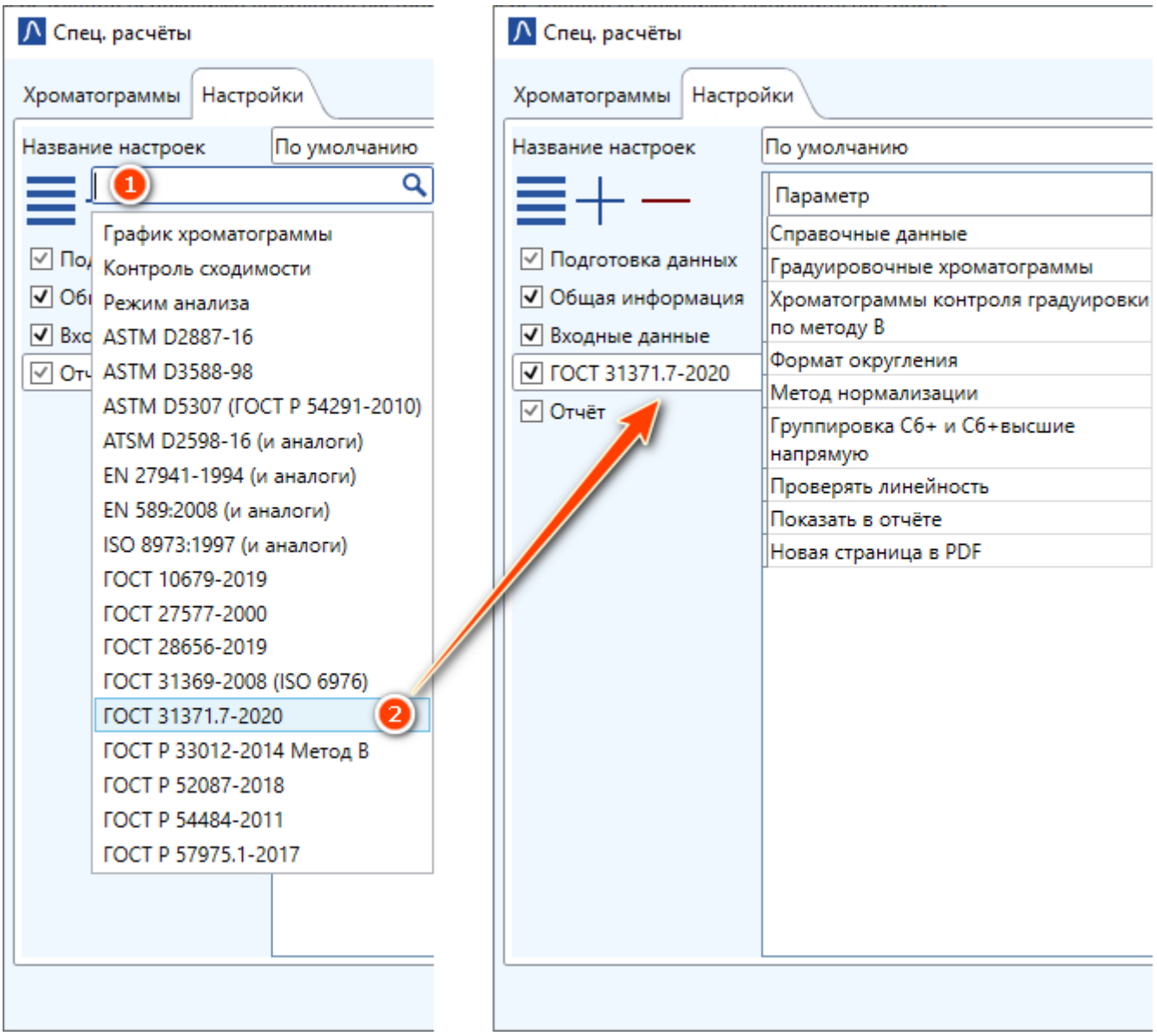


Рисунок 2.5 – Добавление расчёта в очередь выполнения

По окончании настроек для выполнения глобального расчёта всех настроенных секций нажмите кнопку "Применить".

2.3.3 Работа со справочными данными

Многие расчёты содержат справочные данные. Для каждого вида расчёта набор справочных данных индивидуальный. Поэтому, если какой-либо расчёт требует дополнения справочных данных, то редактировать справочник необходимо именно для этого расчёта.

Параметр	Значение	
Справочные данные	Встроенные	...

Рисунок 2.6 – Справочные данные для расчёта

Вы можете пользоваться встроенными данными, а также отредактировать их.

Нажмите на кнопку активности ... и в появившемся меню выберите справочные данные. По умолчанию в списке доступны только "Встроенные".

Чтобы создать новый справочник, выберите команду "Редактировать". Откроется редактор справочных данных.

1. Найдите интересующий компонент. Можно воспользоваться поиском.
2. При необходимости измените свойства компонента.
3. Часть свойств расположена в свернутых таблицах. Если необходимо, разверните нужную таблицу и измените ее содержимое.

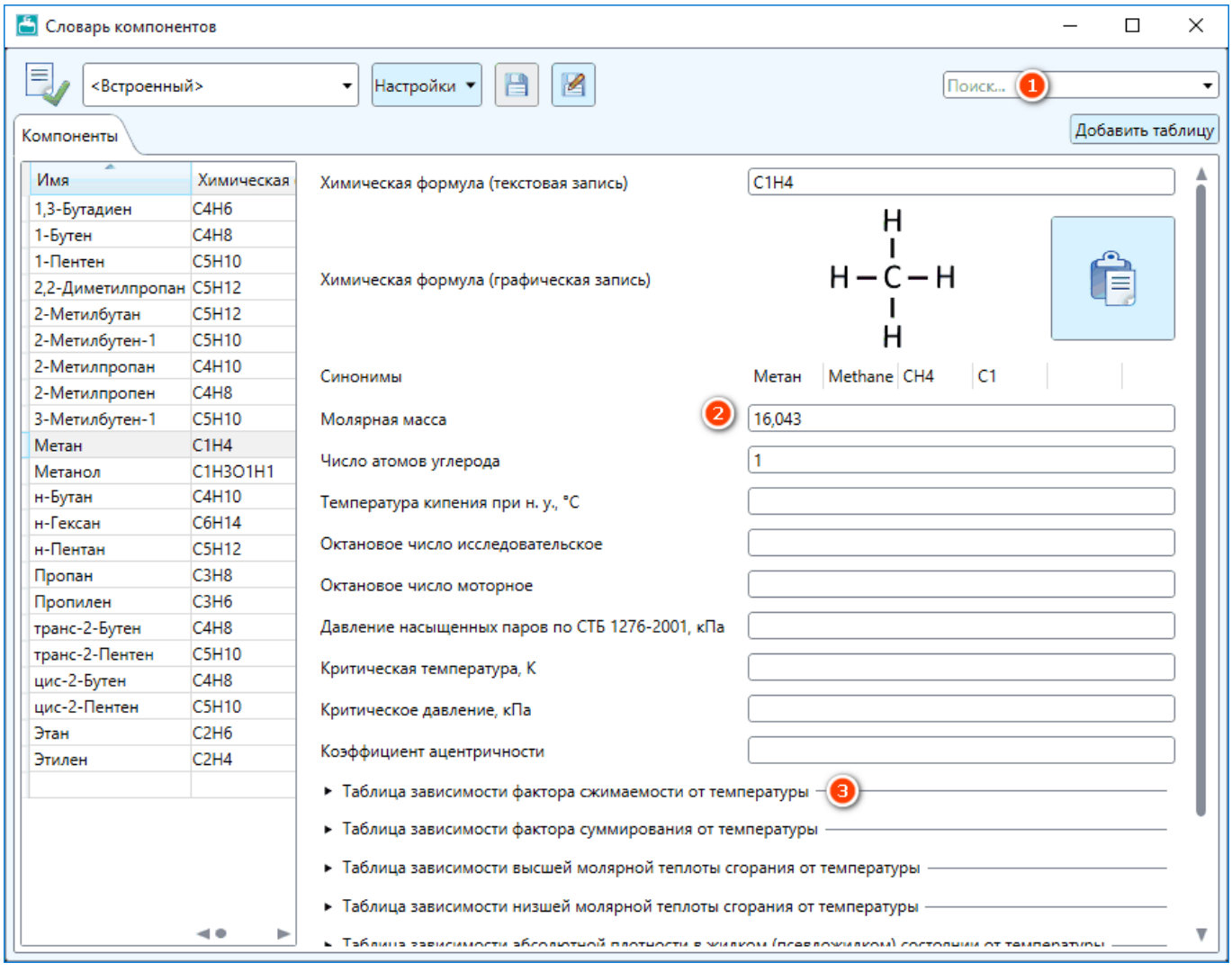


Рисунок 2.7 – Редактор справочных данных

Чаще всего в справочник требуется добавить синонимы названий компонентов (в том числе, если расчёт выдаёт предупреждение, что для каких-то компонентов не найдены справочные данные) либо добавить новый компонент, который ранее отсутствовал в справочнике. Для добавления нового компонента в левой части окна заполните название в последней снизу пустой строке списка и укажите необходимые свойства компонента в прочих ячейках.

Встроенный справочник изменить нельзя, но можно сохранить изменения под другим именем, нажав кнопку:



Файлы справочников сохраняются в папке *D*:\Analytic 3\References*Расчёт*, где D – буква рабочего раздела на диске хранения данных, *Расчёт* – название папки, которое формируется автоматически и совпадает с названием текущего расчёта. Для каждого расчёта создаётся своя папка.

После сохранения справочника его нужно выбрать с помощью кнопки активности .

В отчёте в разделе вывода служебной информации выводится информация о подлинности справочных данных. Подлинными считаются только встроенные, все внешние справочники являются отредактированными. Поэтому рекомендуется в хроматограммах компонентам давать названия из списка синонимов, а не редактировать справочник добавлением синонимов.

2.3.4 Форматы округления

Во многих расчётах присутствует параметр **Формат округления**. В качестве значения он может принимать буквенно-цифровой код или символ 0. В буквенно-цифровом коде буква определяет тип округления, а цифра – количество знаков.

- F – задаётся количество знаков после запятой.
- G – задаётся количество значащих знаков.
- E – экспоненциальная запись числа.
- 0 – данные выводятся без округления.

Например, исходное число **0.00123456789**. В зависимости от заданного кода оно может быть округлено так:

F3 – 0.001

F4 – 0.0012

F6 – 0.001235

G2 – 0.0012

G4 – 0.001235

E3 – 1.235E-03

0 – 0.00123456789

2.3.5 Выбор дополнительных хроматограмм

В некоторых расчётах необходимо выбрать дополнительные хроматограмм. Чаще всего градуировочные. Иногда нужно выбрать хроматограммы контрольных образцов или хроматограмму нулевой линии.

Эти хроматограммы могут быть выбраны вместе с хроматограммами анализов в основном списке выбора на закладке **Хроматограммы**, но рекомендуется выбирать их в настройках расчёта. При таком способе выбора дополнительные хроматограммы будут связаны с этим расчётов и не будут участвовать в других расчётах.

Нажмите на кнопку активности [...]. Появится окно со списком хроматограмм. Выберите нужные и нажмите кнопку **Выбрать хроматограммы**.

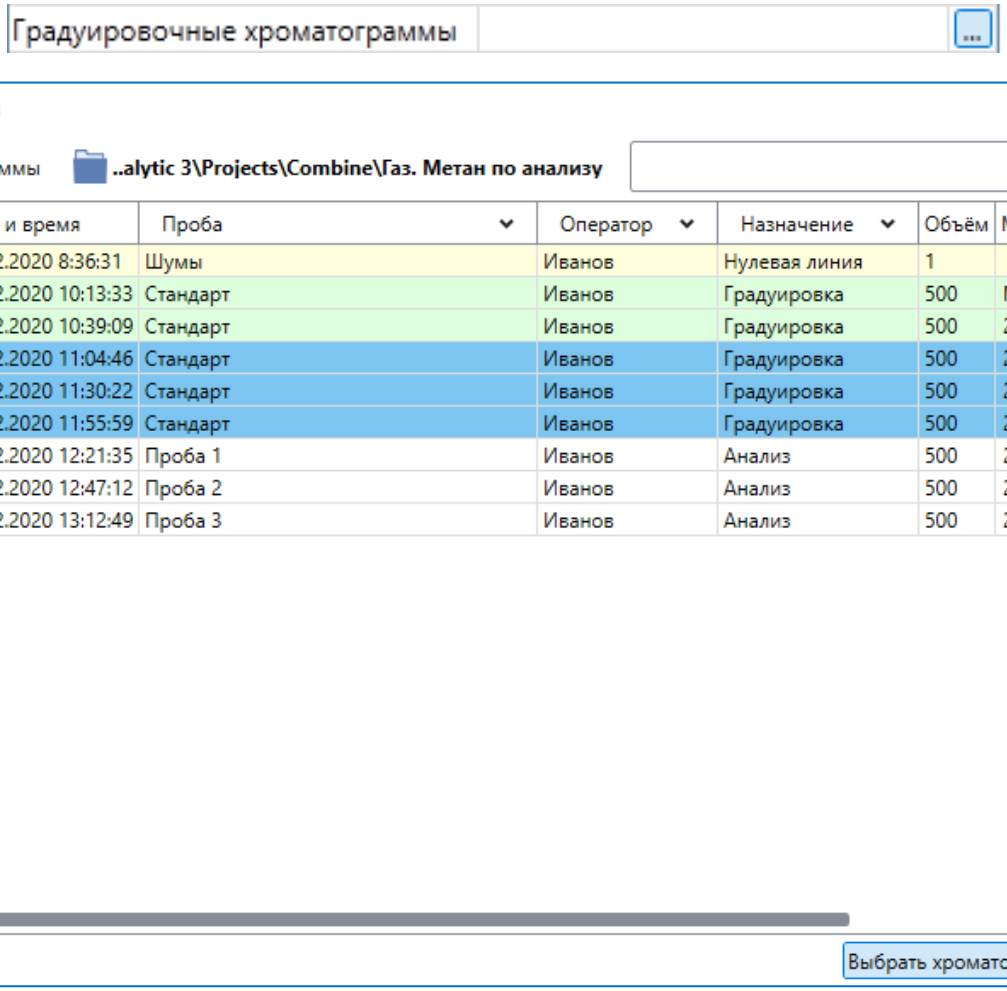


Рисунок 2.8 – Выбор градуировочных хроматограмм

При выборе "Из расчёта..." необходимо указать соответствующий расчёт из выпадающего списка. При этом сам выбираемый расчёт должен ОБЯЗАТЕЛЬНО располагаться в списке последовательности в любом месте ДО текущего. При необходимости измените порядок секций (п. 2.3.1).

3 ЛИЦЕНЗИИ

Большинство расчётов, входящих в состав приложения "Специальные расчёты" защищено от несанкционированного распространения программным ключом.

При первом выполнении расчёта программа выдает сообщение о необходимости ввести код активации (цифровую подпись).

1. Нажмите на кнопку **Зарегистрировать**. Откроется окно "Хроматэк Навигатор" на странице **Запрос кода активации приложения**.
2. Введите пароль.

Пароль, это цифровой код, указанный внутри коробки с USB-носителем программного обеспечения, поставленного в комплекте с хроматографом. Если такого кода нет, укажите вместо него серийный номер хроматографа.

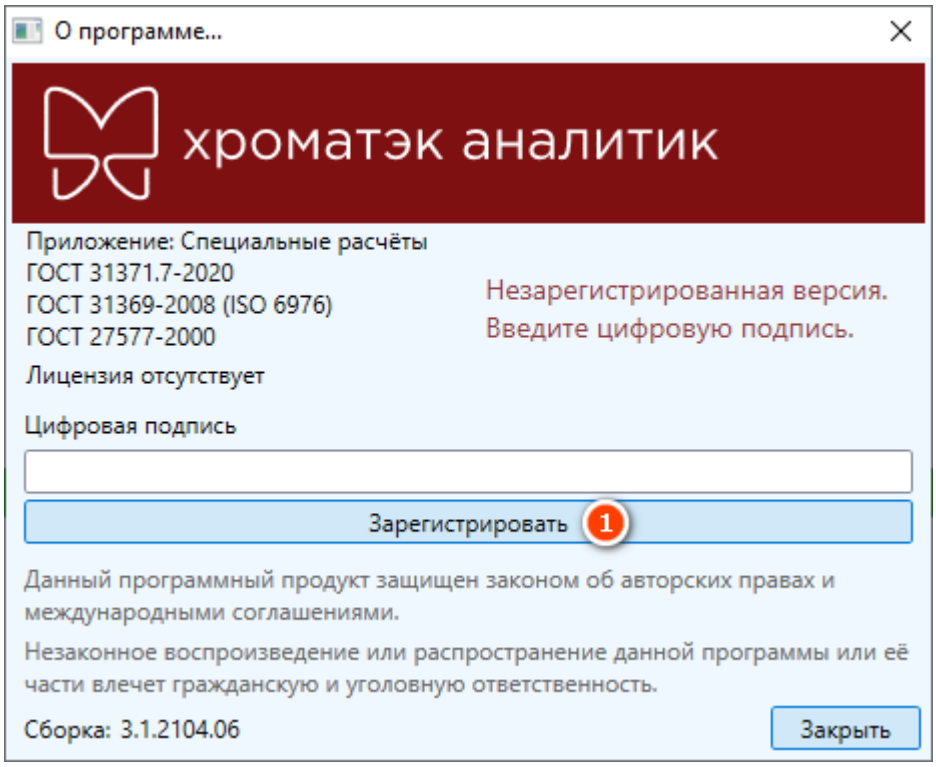


Рисунок 3.1 – Запрос лицензии

3. Укажите свой **email**, на который будет отправлен код активации.
4. Появится QR-код. Отсканируйте его с помощью смартфона и получите ссылку. Нажмите на неё для отправки запроса кода активации.
5. Вы можете не сканировать QR-код, а просто скопировать текст из соответствующей строки и послать на почту soft@chromatec.ru.

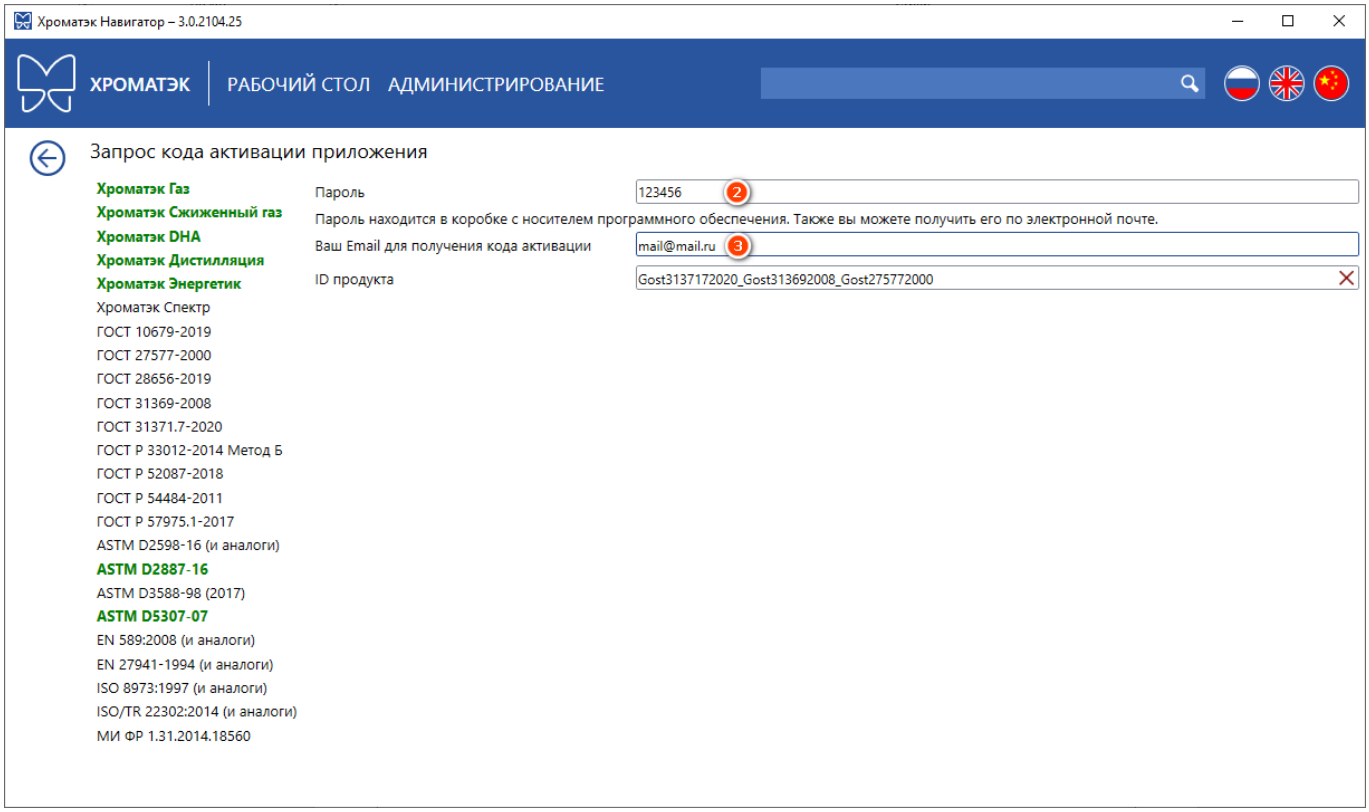


Рисунок 3.2 – Ввод пароля и email

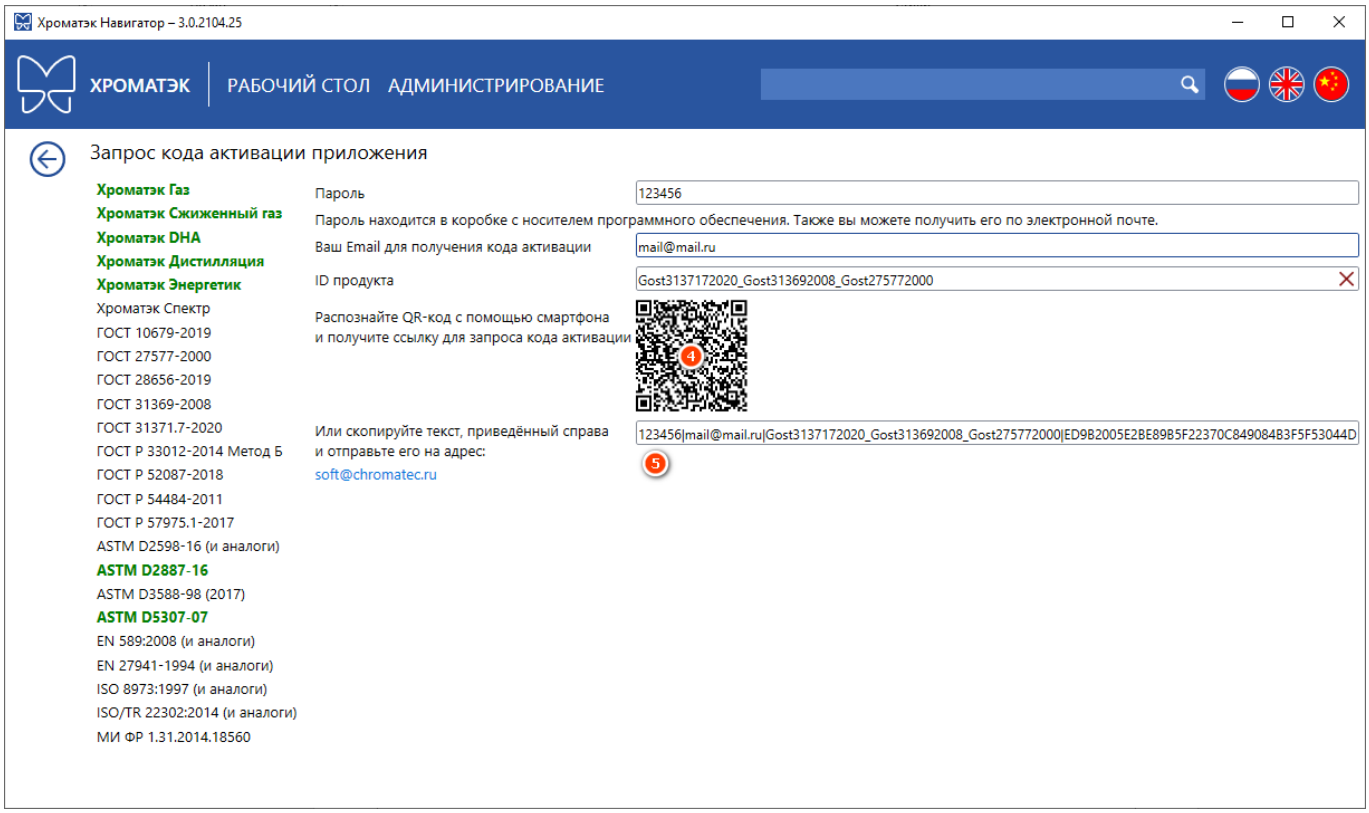


Рисунок 3.3 – QR-код запроса кода активации

Справа вы можете видеть доступные расчёты и приложения. Уже активированные выделены зелёным.

Ожидайте получения кода активации. Его нужно ввести в соответствующее поле окна запроса лицензии (Рисунок 3.1).

Если вы ошиблись и выбрали не те расчёты, которые вам нужны, вы можете повторить попытку запроса кода активации с нужными расчётами. Более двух попыток использовать нельзя.

Если вы закроете окно запроса лицензии (Рисунок 3.1), расчёты будут выполнены, но все данные в таблицах заменены на X.XXX.

Компонент	#7	#8	#9	Количество
метан	X.XXX	X.XXX	X.XXX	X.XXX
гелий	X.XXX	X.XXX	X.XXX	X.XXX
водород	X.XXX	X.XXX	X.XXX	X.XXX
кислород	X.XXX	X.XXX	X.XXX	X.XXX
азот	X.XXX	X.XXX	X.XXX	X.XXX
диоксид углерода	X.XXX	X.XXX	X.XXX	X.XXX
этан	X.XXX	X.XXX	X.XXX	X.XXX
пропан	X.XXX	X.XXX	X.XXX	X.XXX
Сумма	*X.XXX*	*X.XXX*	*X.XXX*	
Вывод				*Однородный состав*

Если версия "Хроматэк Навигатор" ниже 3.0.2104.25, то для запроса кода активации откроется не "Хроматэк Навигатор", а программа "Блокнот" с текстом, содержащим ID продукта и код компьютера (Рисунок 3.4). В этом тексте нужно ввести пароль и затем **весь текст** послать по электронной почте на адрес soft@chromatec.ru.

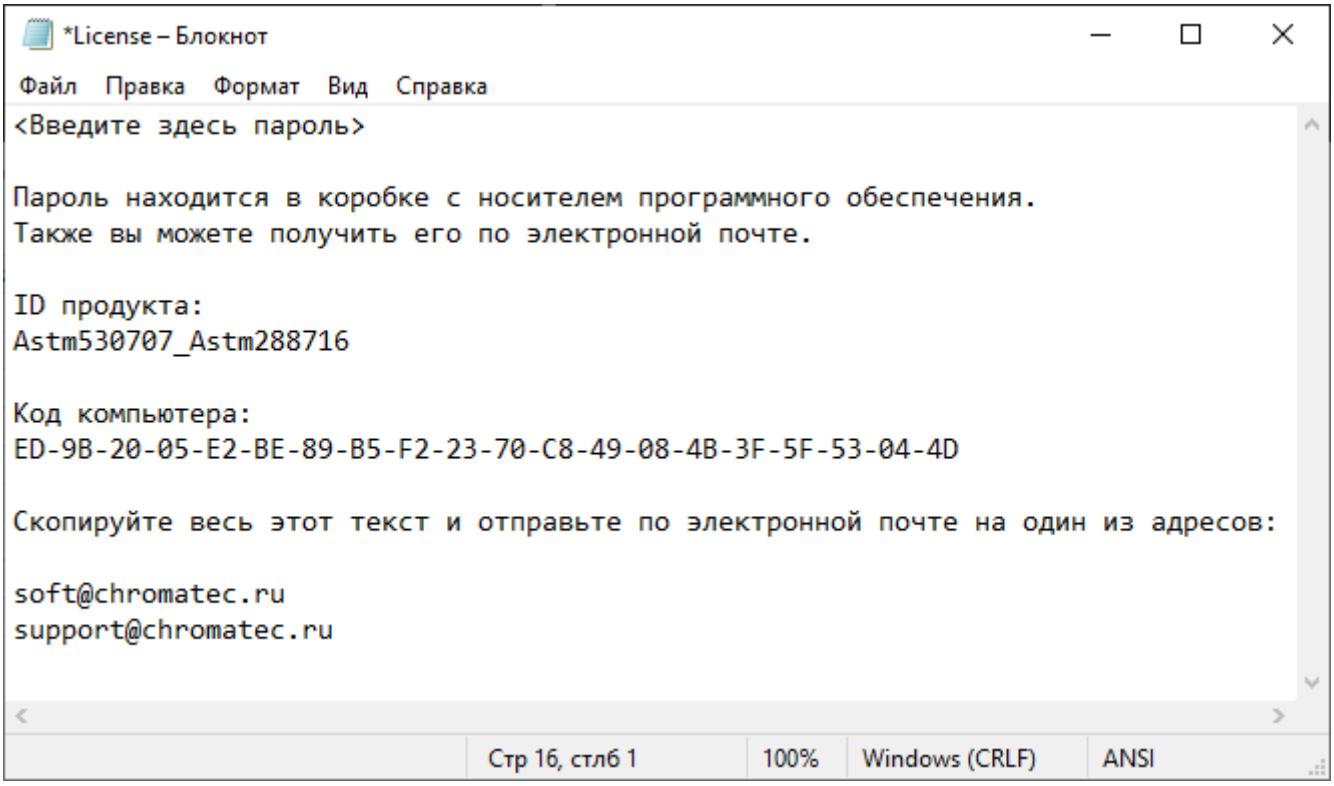


Рисунок 3.4 – Запрос лицензии, если версия "Хроматэк Навигатор" ниже 3.0.2104.25

4 ОСНОВНЫЕ СЕКЦИИ

В данном разделе приведено описание параметров секций из разряда свободно распространяемых.

4.1 Настройки отчёта

Секция отвечает за формирование файлов отчёта. Описание настроек ниже.

Создать отчёт в форматах. Нажмите на кнопку активности [...] и выберите формат сохранения файла отчёта. Доступные форматы: HTML, PDF, XLSX, TXT, CSV. Можно выбрать сразу несколько форматов, при этом будет сформировано сразу несколько файлов отчёта во всех выбранных форматах.

Путь к папке отчётов. Нажмите на кнопку активности [...] и выберите путь сохранения отчётов.

Шаблон имени файла. Нажмите на кнопку активности [...] и выберите доступные переменные для имени файла (**Ошибка! Источник ссылки не найден.**). Переменные можно располагать в любой последовательности и разделять символами или словами.

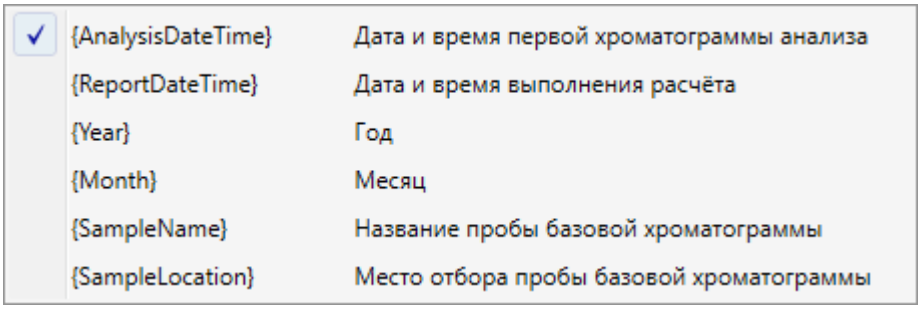


Рисунок 4.1 – Переменные для имени файла

Шаблон отчёта HTML и PDF. Укажите путь к файлу шаблона отчёта. Нажмите на кнопку активности [...], чтобы выбрать файл или открыть его для редактирования в "Блокноте". В шаблоне Вы можете изменить стили CSS.

При создании отчёта в PDF не все возможные стили CSS могут быть применены.

Вы можете добавлять в шаблон любые данные, соблюдая правила разметки HTML. Нельзя удалять или изменять специальный тэг **[data]**.

Шаблон отчёта XLSX. Укажите путь к файлу шаблона отчёта. Нажмите на кнопку активности [...], чтобы выбрать файл или открыть его для редактирования в соответствующем редакторе. Для удобства рекомендуется выполнить экспорт готового отчёта в формат XLSX (п. **Ошибка! Источник ссылки не найден.**), а потом на его основе создать файл-шаблон.

Открыть отчёт после создания. При установке активности файл отчёта, сохранённый в дополнительном формате, откроется в соответствующей программе для просмотра данного формата файла.

Ориентация страницы PDF. Актуально только для формата PDF. Возможные значения: книжная, альбомная.

Поля страницы в PDF. Актуально только для формата PDF. По умолчанию задан 1 см для всех полей. Вы можете указать несколько значений, разделённых пробелами, начиная с левого поля по часовой стрелке.

Тип (семейство) шрифта. Укажите тип шрифта для отчёта.

Базовая высота шрифта, пт. Укажите размер шрифта отчёта. При этом высота шрифта заголовков будет устанавливаться автоматически увеличением относительно базовой. Вы можете также задать иные шрифты с помощью стилей CSS в шаблоне отчёта HTML и PDF.

История измерений. Позволяет сохранять в файл накопительные данные измеряемых параметров (тренд). Выполняется только для тех расчётов, которые предусматривают сохранение тренда. Файл тренда сохраняется в папке Analytic 3\Reports\ в формате CSV.

4.2 Подготовка данных

Секция отвечает за подготовку данных для последующих расчётов. Описание настроек ниже.

Суммировать компоненты по группам. Выводит в отчёте для показа групповой, а не индивидуальный состав. Объединение (суммирование) производится по названию столбца "Группа" таблицы "Компоненты" в программе "Хроматэк Аналитик". Если группа пустая, то она приравнивается к названию компонента.

Например, в хроматограмме присутствуют компоненты "н-бутан" и "изо-бутан" с общей группой "бутаны". Если данная опция включена, то в отчёте будет фигурировать компонент "бутаны" с суммарной концентрацией бутанов, а по отдельности они в отчёте не будут отображаться.

Некоторые отчёты игнорируют данную опцию и выполняют суммирование в группы по своим правилам или не выполняют вообще.

Расчёт средних без нулевых значений. Выбор способа вычисления усреднённой концентрации из нескольких хроматограмм: нулевые значения не участвуют в расчёте среднего значения либо участвуют.

Например, среднее из значений 2, 4, 0 будет 2, если опция отключена и 3, если опция включена.

Импорт данных из XLSX. Файл. Импорт входных данных осуществляется не из хроматограмм, а из файла XLSX. Это удобно для тестирования расчёта и использования ПО в качестве внешнего калькулятора. Нажмите на кнопку активности , выберите "Создать шаблон" и укажите путь и имя файла для нового шаблона. Если шаблон уже создан, выберите "Выбрать файл" и укажите путь к нему. Для редактирования выбранного шаблона выберите "Редактировать".

4.3 Заголовок отчёта

Секция для формирования особого заголовка отчёта.

Заголовок отчёта. Текстовое поле.

Макет заголовка. Нажмите на кнопку активности  и отредактируйте вид по своему усмотрению.

4.4 Общая информация

Секция для вывода служебной информации в отчёте.

Номер протокола. Текстовое поле.

Показать заголовок. Показ особого заголовка из секции "Заголовок отчёта" (п. 4.3).

Показать информацию о хроматографе. Вывод модели и номера прибора из хроматограмм.

Показать название программы и номер сборки. Вывод информации о программном обеспечении.

Показать путь к проекту. Вывод пути хранения хроматограмм на компьютере.

Отображать информацию. Настройка, откуда брать информацию о пробе:

- Дата отбора.
- Место отбора.
- Условия отбора.
- Пробоотборник.
- Комментарии.

Информацию можно брать из хроматограмм (первой или последней) либо непосредственно из текущей секции настроек.

4.5 Режим анализа

Секция для вывода служебной информации инструментального метода прибора для выполнения анализа. Берётся из первой по дате среди хроматограмм для расчёта анализа.

Новая страница в PDF. Для PDF формата секция начинается с новой страницы.

4.6 Результат основного расчёта

Секция для формирования вида таблицы, основанной на таблице "Результат" в программе "Хроматэк Аналитик".

Параметры компонентов. Нажмите на кнопку активности  и укажите столбцы для отображения и формат вывода значений.

Новая страница в PDF. Для PDF формата секция начинается с новой страницы.

4.7 Входные данные

Выводит в отчёт таблицу входных данных вида:

Компонент	#7	#8	#9	Количество
метан	82.090	82.090	82.090	3
диоксид углерода	2.113	2.113	2.113	3
этан	6.678	6.678	6.678	3
пропан	9.119	9.119	9.119	3
Сумма	*100.000*	*100.000*	*100.000*	
Вывод				*Однородный состав*

Здесь #7, #8, #9 – номера выбранных хроматограмм.

Формат округления. Выбор формата вывода значений.

Проверять состав на однородность. Если опция включена, выдаётся заключение об однородности состава хроматограмм. Состав считается однородным, если компонент (или группа в случае вывода группового состава) присутствует в каждой расчётной хроматограмме с ненулевой концентрацией либо во всех одновременно с нулевой концентрацией.

Новая страница в PDF. Для PDF формата секция начинается с новой страницы.

4.8 Средние и сходимость

Секция для вывода в отчёт таблицы средних значений по результатам вычислений индивидуальных хроматограмм таблиц "Результат" в программе "Хроматэк Аналитик".

Показать в отчёте. Нажмите на кнопку активности  и укажите столбцы для отображения и формат вывода значений.

Настройки расчёта погрешности/неопределённости. Настройка позволяет приписать усреднённому результату погрешность или неопределённость по простым линейным или показательным уравнениям. Нажмите на кнопку активности и выберите настройки из существующего набора либо создайте свои.

Настройки контроля сходимости. Позволяет оценить приемлемость сходимости результатов одиночных измерений. Норматив задаётся простым линейным или показательным уравнением. Нажмите на кнопку активности  и выберите настройки из существующего набора либо создайте свои.

Диалог настройки параметров сходимости показан на рисунке **Ошибка! Источник ссылки не найден.**. В данном диалоге:

- Введите название нормативного документа для отображения в отчёте.
- Выберите контролируемый параметр.
- Задайте диапазоны концентраций, укажите вхождение границ диапазонов.
- Задайте параметры A и B.

Норматив сходимости вычисляется по формуле: $A + B \cdot C$, где C – концентрация, A и B – действительные числа.

Часто в нормативных документах, на основе которых создается метод, указывается только одно число – r (норматив сходимости, так же может называться нормативом повторяемости). В этом случае данный параметр соответствует числу A.

- Если в нормативном документе диапазоны контроля заданы не для определённых документов, укажите их в соответствующем столбце.

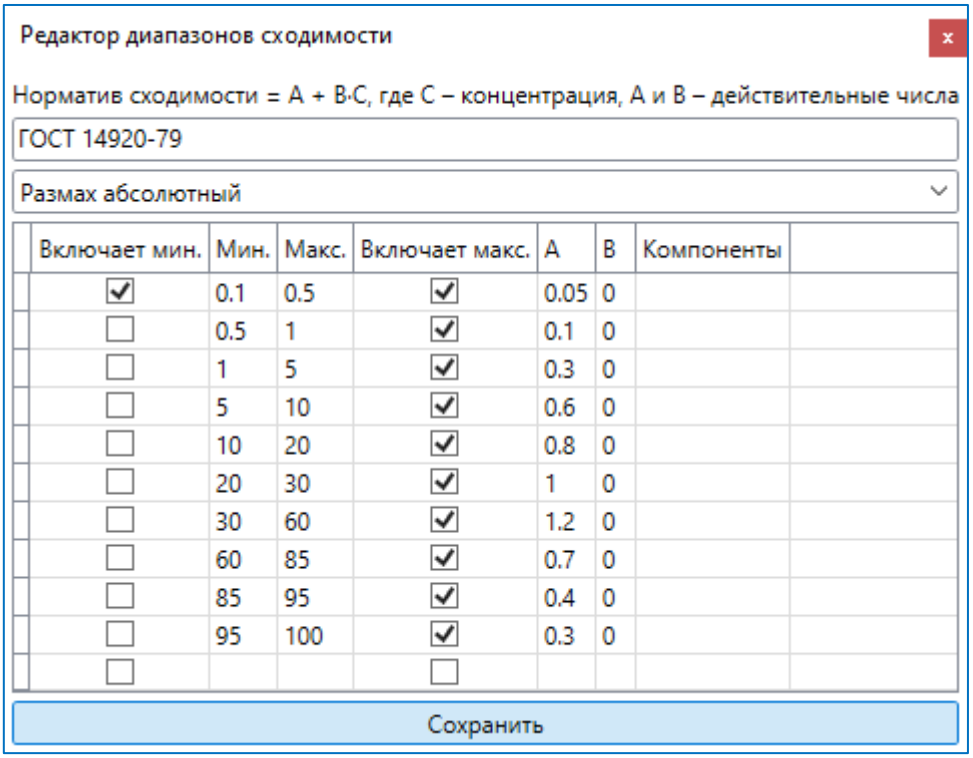


Рисунок 4.2 – Редактор настроек сходимости

Нажмите на кнопку **Сохранить** и задайте имя файла настроек.

Сохранённый файл нужно выбрать с помощью кнопки активности ....

Отображать настройки в отчёте. Настройка вывода служебной информации.

Новая страница в PDF. Для PDF формата секция начинается с новой страницы.

4.9 График хроматограммы

Секция для отображения графика хроматограммы.

Высота графика. Укажите значение высоты в сантиметрах.

Разделить хроматограммы на секции, мин. Укажите ширину окна графика в минутах. Хроматограмма будет отображаться в нескольких окнах. Если задано 0, то хроматограмма не разделяется на секции.

Отображение хроматограмм. Выберите удобный способ для отображения нескольких графиков.

Новая страница в PDF. Для PDF формата секция начинается с новой страницы.

4.10 Подпись

Секция итогов страницы.

Макет подписи. Нажмите на кнопку активности ... и отредактируйте вид по своему усмотрению.

QR-код. Формирует QR-код с информацией о пробе. Нажмите на кнопку активности ... и укажите переменные для формирования кода из списка:

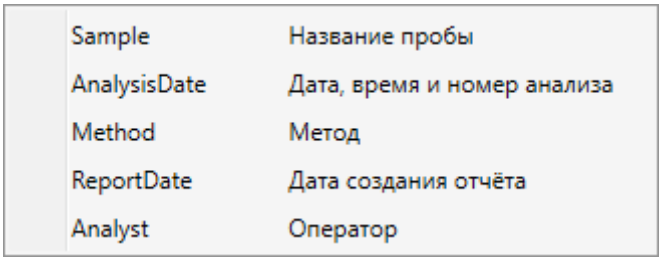


Рисунок 4.3 – Переменные для QR-кода.

5 ДОБАВЛЯЕМЫЕ СЕКЦИИ

5.1 ASTM D3588

Standard practice for calculating heat value, compressibility factor, and relative density of gaseous fuels.

Стандартная практика расчета теплотворной способности, коэффициента сжимаемости и относительной плотности газообразных топлив.

Расчёт выдаёт теплотворную способность, коэффициент сжимаемости и относительную плотность газообразных топлив.

Параметры расчёта:

Справочные данные.

Тип концентрации. Указывается тип концентрации входных данных – молярная, массовая или объёмная.

Единицы концентрации. Указываются единицы измерения концентрации входных данных – проценты или доли единицы.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

Способ расчёта. Если выбран способ **на основе усреднённых концентраций**, то сначала расчёт выполняется по усреднённых входным данным. Если выбран способ **на основе индивидуальных значений**, то сначала расчёт выполняется для каждой из выбранных хроматограмм, а затем каждый выходной параметр усредняется.

Нормализовать входные данные. Если выбрано **Да**, то входные данные нормализуются к 100% (или к 1, если тип концентрации – доли единицы).

Коррекция максимальной концентрации до суммы 1 (100%). Все расчёты выполняются с максимальной точностью, но в отчёт выводятся округлённые значения выходных параметров. Если сложить значения входных нормализованных долей, то даже при наличии нормализации из-за округления их сумма может не быть равной 100 (или 1). Включение данной опции позволяет скорректировать максимальную долю таким образом, чтобы сумма округлённых долей равнялась 100 (или 1).

Показать в отчёте. Здесь вы можете указать, какие параметры следует показывать в отчёте. По умолчанию отображаются все.

5.2 ASTM D2598

Standard practice for calculation of certain physical properties of liquefied petroleum gases from compositional analysis.

Стандартная практика расчета некоторых физических свойств сжиженных нефтяных газов на основе композиционного анализа.

Расчёт выдаёт физические свойства сжиженных нефтяных газов на основе композиционного анализа.

Параметры:

Справочные данные.

Заголовок отчёта. Здесь вы можете выбрать вариант заголовка расчёта, в зависимости от используемого нормативного документа.

Тип концентрации. Указывается тип концентрации входных данных – молярные, массовые, объёмные в газовой фазе или объёмные в жидкой фазе.

Единицы концентрации. Указываются единицы измерения концентрации входных данных – проценты или доли единицы.

Нормализовать входные данные. Если выбрано **Да**, то входные данные нормализуются к 100% (или к 1, если тип концентрации – доли единицы).

Округлять нормализованные входные данные. Если выбрано **Нет**, данные не будут округлены в отчёте.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

Выводить содержание непредельных. Если **Да**, то в отчёт выводится сумма концентраций (долей) непредельных углеводородов.

Раскрыть состав непредельных углеводородов. Если **Да**, то в отчёт выводится детальная информация по составу непредельных углеводородов.

Округлять парциальное давление перед суммированием. Если **Нет**, то расчёт проводится с максимальной точностью.

5.3 EN 27941 (ГОСТ 33012-2014 Метод А)

Commercial propane and butane. Analysis by gas chromatography.

Пропан и бутан технические. Анализ методом газовой хроматографии.

Расчёт позволяет оценить сходимость и воспроизводимость компонентного состава сжиженного газа.

Параметры:

Справочные данные.

Заголовок отчёта. Здесь вы можете выбрать вариант заголовка расчёта, в зависимости от используемого нормативного документа.

Тип концентрации. Указывается тип концентрации входных данных – молярные, массовые, объёмные.

Единицы концентрации. Указываются единицы измерения концентрации входных данных – проценты или доли единицы.

Ввод пробы для анализа. Указывается тип вводимой фазы – жидкая или газовая.

Тип сжиженного газа. Коммерческий пропан, коммерческий бутан или другое.

Данные для расчёта воспроизводимости. Здесь выбирается пользовательское поле в таблице компонентов "Хроматэк Аналитик". В это поле пользователь вводит расчётный концентрации компонентов, **полученные на другом хроматографе** для оценки воспроизводимости.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

5.4 EN 589:2008

Топлива для двигателей внутреннего сгорания. Газы углеводородные сжиженные. Технические требования и методы испытаний.

Расчёт выдаёт октановое число по моторному методу и зависимость давления насыщенных паров от температуры для сжиженного газа.

Параметры:

Справочные данные.

Заголовок отчёта. Здесь вы можете выбрать вариант заголовка расчёта, в зависимости от используемого нормативного документа.

Тип концентрации. Указывается тип концентрации входных данных – молярные, массовые, объёмные.

Единицы концентрации. Указываются единицы измерения концентрации входных данных – проценты или доли единицы.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

Температура измерения, °С. Выбирается из списка значений – 0, 15, 20.

Атмосферное давление, кПа.

Выводить сумму диеновых. Если **Да**, в отчёте дополнительно выводится сумма диеновых углеводородов.

5.5 ISO 8973:2013

Liquefied petroleum gases. calculation of density and saturated vapour pressure.

Газы углеводородные сжиженные. расчет плотности и давления насыщенных паров

Расчёт выдаёт зависимость давления насыщенных паров от температуры для сжиженного газа.

Параметры:

Справочные данные.

Заголовок отчёта. Здесь вы можете выбрать вариант заголовка расчёта, в зависимости от используемого нормативного документа.

Тип концентрации. Указывается тип концентрации входных данных – молярные, массовые, объёмные.

Единицы концентрации. Указываются единицы измерения концентрации входных данных – проценты или доли единицы.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

5.6 ГОСТ 10679-2019

Газы углеводородные сжиженные. Метод определения углеводородного состава.

Расчёт выполняет контроль сходимости концентраций компонентов сжиженного газа для нескольких измерений и выдаёт компонентный состав с вычисленными неопределённостями.

Параметры:

Справочные данные.

Тип концентрации. Указывается тип концентрации входных данных – молярные, массовые.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

5.7 ГОСТ 27577-2000

Газ природный топливный компримированный для двигателей внутреннего сгорания

Расчёт вычисляет октановое число по моторному методу.

Параметры:

Справочные данные.

Тип концентрации. Указывается тип концентрации входных данных – молярные, массовые.

Единицы концентрации. Указываются единицы измерения концентрации входных данных – проценты или доли единицы.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

Формат октанового числа. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

5.8 ГОСТ 28656-2019

Газы углеводородные сжиженные. Расчетный метод определения плотности и давления насыщенных паров.

Расчёт выдаёт плотность сжиженного газа и давление насыщенных паров.

Параметры:

Справочные данные.

Заголовок отчёта. Здесь вы можете задать вариант заголовка расчёта, в зависимости от используемого нормативного документа.

Тип концентрации. Указывается тип концентрации входных данных – молярные, массовые.

Единицы концентрации. Указываются единицы измерения концентрации входных данных – проценты или доли единицы.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

Плотность при температуре, °C. В строке через точку с запятой перечисляются температуры, для которых вычисляется плотность сжиженного газа.

Давление насыщенных паров при температуре, °C. В строке через точку с запятой перечисляются температуры, для которых вычисляется давление насыщенных паров сжиженного газа.

Раскрыть состав непредельных углеводородов. Если **Да**, то в отчёт выводится детальная информация по составу непредельных углеводородов.

Нормализовать входные данные. Если выбрано **Да**, то входные данные нормализуются к 100% (или к 1, если тип концентрации – доли единицы).

5.9 ГОСТ Р 33012-2014 Метод В

Определение углеводородного состава сжиженных углеводородных газов с использованием капиллярной хроматографической колонки.

Расчёт выполняет контроль градуировки и сходимости результатов анализа, выдаёт состав на основе индивидуальных компонентов и групповой состав.

Параметры:

Справочные данные.

Градуировочные хроматограммы.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

Нормализовать входные данные. Если выбрано **Да**, то входные данные нормализуются к 100%.

5.10 ГОСТ 31369-2008

Газ природный. Вычисление теплоты сгорания, плотности, относительной плотности и числа Воббе на основе компонентного состава.

Параметры:

Справочные данные.

Тип концентрации. Указывается тип концентрации входных данных – молярные, массовые.

Единицы концентрации. Указываются единицы измерения концентрации входных данных – проценты или доли единицы.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

Формат коррекции по воздуху. Коррекция по воздуху осуществляется согласно ГОСТ 31371.3-2009. Обычно коррекция не производится. Можно выбрать варианты:

- Бег коррекции.
- Колонка делит O_2 и N_2.
- Колонка нет делит O_2 и N_2.

Способ расчёта. Если выбран способ **на основе усреднённых концентраций**, то сначала расчёт выполняется по усреднённых входным данным. Если выбран способ **на основе индивидуальных значений**, то сначала расчёт выполняется для каждой из выбранных хроматограмм, а затем каждый выходной параметр усредняется.

Неопределённость вне диапазона. Можно выбрать варианты расчёта неопределённости для концентрации вне диапазона изменений согласно данному ГОСТ:

- Аппроксимация.
- По ближайшей границе.

Температура сгорания, °C.

Температура измерения, °C. Это не комнатная температура, а некая условная стандартная температура, при которой количество сжигаемого топлива определяется условно.

Единицы измерения энергетических показателей. Вы можете выбрать вывод энергетических показателей в джоулях, килокалориях и киловаттах в час.

Учитывать концентрацию менее 0.005%. Если **Нет**, концентрации ниже данного порога не будут учитываться.

5.11 ГОСТ 31371.7-2020

Газ природный. Определение состава методом газовой хроматографии с оценкой неопределенности. Часть 7. Методика измерений молярной доли компонентов.

Параметры:

Справочные данные.

Градуировочные хроматограммы.

Хроматограммы контроля градуировки по методу В. Для контроля градуировки по методу В необходимо дополнительно выбрать хроматограммы с назначением **Контрольный образец**.

Метод расчёта (А, Б или В) определяется автоматически на основе оценки выбранных градуировочных хроматограмм. Если градуировочный уровень один (заданная концентрация

только одна), то это методика измерений А или Б. Если градуировочных уровней (заданных концентраций) два и более, то это метод В.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

Метод нормализации. Если выбрана **пошаговая нормализация**, то сначала проводится нормализация в каждой из расчётных хроматограмм, потом результаты усредняются и проводится нормализация усреднённых результатов. Если выбрана **нормализация среднего**, то сначала усредняются ненормализованные результаты, в потом проводится нормализация усреднённых результатов.

Группировка C_{6+} и $C_{6+высшие}$ напрямую. Если **Да**, то выводится суммарное содержание данных групп углеводородов.

5.12 ГОСТ Р 52087-2018

Газы углеводородные сжиженные топливные. Технические условия.

Параметры:

Справочные данные.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

5.13 ГОСТ Р 57975.1-2017

Газ нефтяной попутный. Определение состава методом газовой хроматографии. Часть 1. Определение содержания углеводородов C_1-C_{8+} и неорганических газов с использованием пламенно-ионизационного детектора и детектора по теплопроводности и неорганических газов с использованием пламенно-ионизационного детектора и детектора по теплопроводности.

Параметры:

Справочные данные.

Градуировочные хроматограммы.

Хроматограммы оценки шума.

Формат округления. Выбирается из списка или вносится вручную формат округления чисел в отчёте.

Вычислять отношение Сигнал/Шум. Если **Да**, то должна быть выбрана хроматограмма оценки шума.