ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

ХРОМАТЭК АНАЛИТИК

СБОРКА 4.0

РУКОВОДСТВО ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

214.00045-51И

СПЕЦИАЛЬНЫЕ РАСЧЁТЫ И ПЛАГИНЫ

Редакция 22.10.2026

Оглавление

1 Введение 4
2 Получение лицензии 6
3 Настройка специальных расчётов 8
3.1 Проверка идентичности состава 8
3.2 ГОСТ 31369-2021 8
3.3 ГОСТ 31371.7-2020 9
4 Справочник компонентов 11
5 История измерений 12
5.1 Последовательное сохранение данных 12
5.2 Создание набора данных по хроматограммам 13

1 ВВЕДЕНИЕ

Специальные расчёты добавляют в отчёт секции, сформированные в соответствии с требованиями выбранного нормативного документа.

В "Хроматэк Аналитик" реализованы следующие специальные расчёты:

ASTM D2421-21e1	EN 15199-2-2020	ГОСТ 34723-2021 (с изм. №1)
ASTM D2598-2016	EN 15199-3-2021	ГОСТ 34858-2020
ASTM D2887-2022	EN 15199-4-2015 (0°C)	ГОСТ 35228-2024
ASTM D2887-2024	EN 15199-4-2015 (35°C)	ГОСТ 35228-2024 Приложение Д
ASTM D3588-98 (2017)	EN 27941-1994	ГОСТ 50802-2021
ASTM D5134-2013	EN 589:2009	ГОСТ 50802-95
ASTM D5307-1997	ISO 15403-1:2006	ГОСТ EN 13132-2012
ASTM D5442-2017	ISO 6974:2000-2002	ГОСТ EN 589-2014
ASTM D6352-2019	ISO 6976:1995	ГОСТ ISO 8973:2013
ASTM D6352-2024	ISO 7941:1988	ГОСТ Р 52087-2018
ASTM D6729-2020	ISO 8973:1997	ГОСТ Р 53367-2009
ASTM D6730-2019	ISO/TR 22302:2014	ГОСТ Р 54484-2011
ASTM D6733-2001	ГОСТ 10679-2019	ГОСТ Р 57851.1-2017
ASTM D7096-2019	ГОСТ 10679-2019 (с изм. №1)	ГОСТ Р 57851.2-2017
ASTM D7096-2025	ГОСТ 27577-2000	ГОСТ Р 57851.3-2017
ASTM D7169-2011	ГОСТ 28656-2019	ГОСТ Р 57975.1-2017
ASTM D7169-2018	ГОСТ 31369-2008	МИ ФР 1.21.2014.18560
ASTM D7169-2023	ГОСТ 31369-2021	М-МВИ-263-12
ASTM D7213-15 (2019)	ГОСТ 313717-2020	Р Газпром 5.9:2010
ASTM D7213-2023	ГОСТ 313717-2020 (с изм. №1)	СТ КР ASTM D 2598-2015
ASTM D7500-2015	ГОСТ 32507-2013 Метод А	СТ РК ИСО 8973:2004
ASTM D7500-2024	ГОСТ 32507-2013 Метод Б (0°C)	СТБ EN 589-2008
ASTM D7900-2023 (0°C)	ГОСТ 32507-2013 Метод Б (35°C)	СТО 03-7.76-2016
ASTM D7900-2023 (35°C)	ГОСТ 32918-2014	СТО Газпром 5.5 (Метод А)
ASTM D7900-2025 (0°C)	ГОСТ 33012-2014 Метод В	СТО Газпром 5.5 (Метод Б)
ASTM D7900-2025 (35°C)	ГОСТ 33690-2015	СТО Газпром 5.6
BS EN ISO 8973:1999	ГОСТ 34704-2020	ФР 1.31.2020.37947
DIN EN 27941-1993	ГОСТ 34723-2021	ФР 1.31.2024.47968
DIN EN ISO 8973:2000	ГОСТ 34723-2021	

… т.д., список будет пополняться.

Кроме того, "Хроматэк Аналитик" может 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" модуль "Специальные расчёты" также может именоваться "приложением" или "расширением". Эти термины в данном случае следует рассматривать, как синонимы, каждый из них был актуален на определённом этапе эволюции программного обеспечения. В настоящее время функционал настройки специальных расчётов реализован в редакторе метода, вкладка Отчёт. Определение "приложение Специальные расчёты" не предполагает, что данный программный модуль функционирует автономно от "Хроматэк Аналитик".

2 ПОЛУЧЕНИЕ ЛИЦЕНЗИИ

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

Для использования этих расчётов необходимо получить лицензию.

Если Вы ранее использовали ПО "Хроматэк Аналитик 3.1" и получали лицензию для специальных расчётов, этот факт не помешает получить лицензию для "Хроматэк Аналитик 4".

Файлы лицензий для версий 3 и 4 различны. Лицензий для версии 3 привязана к некоему идентификатору компьютера (вычисляется на основе серийного номера процессора). Лицензия для версии 4 привязана к серийному номеру хроматографа.

Это означает, что для версии 3 лицензий нужно столько, сколько вы используете компьютеров при работе с хроматографом, а для версии 4 вы получаете одну лицензию на хроматограф и можете работать с ним с любого компьютера.

Получение лицензии:



На рабочем столе "Хроматэк Навигатор" нажмите на кнопку "Лицензии". Откроется страница запроса лицензии.

Для создания запроса лицензии введите:

- Пароль. Он находится в коробке с USB-носителем. Если его там нет – убедитесь, что вы приобретали пакет специальных расчётов. Можете уточнить этот вопрос в коммерческом отделе СКБ "Хроматэк" по телефонам 8(8362) 68-59-69 и 8(8362) 68-59-70.
- Ваш email. На него будет отправлен файл лицензии.
- Через запятую перечислите серийные номера ваших приборов.


Добавьте идентификаторы расчётов, для которых вы желаете получить лицензию.

При приобретении пакета специальных расчётов вы можете выбрать до четырёх любых расчётов. Рекомендуем при запросе лицензии сразу выбрать все запросы, которые вам нужны.


Если ваш компьютер подключен к интернету, нажмите на кнопку "Активировать лицензию онлайн".

Если онлайн-активация окончилась неудачей, вы получите сообщение:

"В активации лицензии отказано. Скорее всего вы уже активировали все доступные лицензии. Если это не так, отправьте строку запроса на почту soft@chromatec.ru".

В этом случае воспользуйтесь оффлайн-активацией.

Оффлайн-активация также доступна при отсутствии интернета.

На экране появится QR-код. Вы можете отсканировать его смартфоном и получите ссылку. Пройдя по этой ссылке, вы отправите запрос в "Хроматэк". При успешной активации файл лицензии будет скачан на смартфон. Вам останется перенести его на компьютер и активировать (см. далее).



Если по какой-либо причине вы не можете воспользоваться QR-кодом – скопируйте в буфер обмена строку запроса и отправьте её на любой из адресов:
soft@chromatec.ru
support@chromatec.ru



Когда вам пришлют по электронной почте файл лицензии *.lic (или вы загрузите его со смартфона), нажмите на кнопку "Активировать лицензию оффлайн" и выберите данный файл. Лицензия будет активирована.

{video combine_license Лицензия, активация лицензии, код активации, активация}

3 НАСТРОЙКА СПЕЦИАЛЬНЫХ РАСЧЁТОВ

Результатом выполнения специальных расчётов являются дополнительные секции отчётов, поэтому чтобы применить специальные расчёты, вам нужно войти в редактор метода и добавить их в отчёт.

В видео ниже показан пример настройки расчётов по ГОСТ 31371.7-2020 и ГОСТ 31369-2021:

{video combine_settings Специальные расчёты, спецрасчёты, спец. расчёты}

3.1 Проверка идентичности состава

Секция 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*	
Идентичность состава				*Идентичные*

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.

3.2 ГОСТ 31369-2021

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

Параметры:

- **Новая страница в PDF**. Для PDF формата секция начинается с новой страницы.
- Справочные данные.
- **Входные данные**. Укажите источник входных данных.
- **Тип концентрации**. Указывается тип долей входных данных: молярные, массовые, объёмные.

- **Единицы концентрации**. Указываются единицы измерения долей входных данных: проценты или доли единицы.
- **Формат отображения входных данных**.
- **Температура сгорания**. Указывается температура из набора: 0°C, 15°C, 60°F, 20°C, 25°C. В РФ стандартное значение – 25°C.
- **Температура измерений**. Указывается температура из набора: 0°C, 15°C, 60°F, 20°C. В РФ стандартное значение – 20°C.
- **Стандартное давление измерений, кПа (диапазон 90…110)**. Указывается давление для расчёта объёмных показателей. В РФ стандартное значение 101,325.
- **Выводить ФХП идеального газа**. Выводит в отчёт соответствующую таблицу физико-химических показателей при активном признаке.
- **Округление ФХП**. Нормативный документ допускает выбор способа округления: по неопределённости либо фиксированное значение для каждого показателя.
- **Коэффициент охвата**. Выбор значения коэффициента, соответствующего доверительной вероятности, для вычисления расширенной неопределённости ФХП: 2 (P≈95%); 1,960 (P=95%); 2,576 (P=99%).
- **Дополнительные расчёты в единицах, отличных от СИ**. Позволяет вывести показатели во внесистемных единицах: калории (для энергетических показателей), кВт·ч (для энергетических показателей), английской системе мер (для всех показателей).
- **Корреляционная матрица молярной доли $r(x_i, x_j)$**. Нормативный документ допускает выбор при вычислениях неопределённости ФХП: единичная, полная. В случае полной матрицы определение способа вычисления основного компонента (по разности относительно прочих или по градуировке) происходит автоматически по настройкам первой среди рассчитываемых хроматограмм.

3.3 ГОСТ 31371.7-2020

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

Параметры:

- **Новая страница в PDF**. Для PDF формата секция начинается с новой страницы.
- Справочные данные.
- **Расчёт**. Выбор типа расчёта: определение состава пробы либо проверка приемлемости градуировки. Если выбран **Состав**, но не указаны хроматограммы расчёта пробы, то выполнится проверка приемлемости градуировки.
- Метод анализа. Значения для выбора: Автоматически, Метод Б.

Нормативный документ подразумевает определение состава пробы тремя методами: А, Б, В. Каждый компонент может быть определён любым из методов.

Метод В устанавливается, если у компонента более одного градуировочного уровня (различных градуировочных молярных долей).

Метод Б устанавливается, если в настройках выбран Метод Б и у компонента не более одного градуировочного уровня. Для компонента с названием "C6+" и одним градуировочным уровнем

всегда устанавливается метод Б. Углеводородам с числом атомов углерода более 6 не может быть установлен метод Б.

Углеводородам с числом атомов углерода более 6 и одним градуировочным уровнем всегда устанавливается метод А. В остальных случаях компоненту устанавливается метод А.

- **Градуировочные хроматограммы**. Укажите список градуировочных хроматограмм. Это должны быть хроматограммы с назначением "Градуировка" в паспорте, у градуируемых компонентов должна быть задана концентрация и неопределённость.
- **Хроматограммы контроля градуировки для метода В**. При работе по методу В укажите список контрольных хроматограмм. Это должны быть хроматограммы с заданными концентрациями и неопределённостями, тип назначения не имеет значение.
- **Хроматограммы проверки линейности для метода В**. При работе по методу В укажите список хроматограмм. Это должны быть хроматограммы с заданными концентрациями и неопределённостями, тип назначения не имеет значение.
- **Вычислять дополнительно С6+ и С6+высшие для методов без обратной продувки**. Аналитический метод определения суммарной доли компонентов. Компонент "С6+" определяется через градуировочный коэффициент н-гексана и суммарную площадь всех углеводородных компонентов с числом атомов углерода 6 и более. Компонент "С6+высшие" – это просто суммирование всех индивидуальных компонентов группы С6 и выше, которые были вычислены по своим градуировочным коэффициентам.
- **Неопределённость вне диапазона измерений**. Может быть использован для вывода таблицы состава в формате организации. Выбор из значений: не вычислять, аппроксимация, по ближайшей границе.
- Формат округления.
- **Вывод состава в формате организации**. Настройка способа вывода округлённых значений: нет (таблица не выводится), можно указать фиксированное число знаков после запятой, либо округлить по неопределённости.

4 СПРАВОЧНИК КОМПОНЕНТОВ

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.

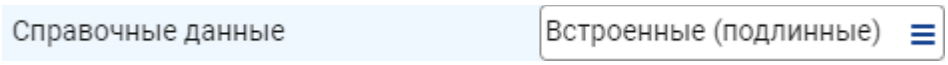


Рисунок 4.1 – Справочные данные для расчёта

Вы можете пользоваться встроенными данными, а также отредактировать их.

Если у вас возникла необходимость изменить справочные данные, вы можете это сделать с помощью специального редактора.


Редактор вызывается с помощью кнопки на рабочем столе "Хроматэк Навигатор" или непосредственно из настроек специального расчёта.

{video handbook Справочник, справочник компонентов}

Встроенные справочники доступны только для просмотра. Чтобы отредактировать справочник, нажмите на кнопку "Разрешить редактирование". При этом вам будет предложено задать новое имя справочника. Использовать уже существующие имена программа не позволит.


В пользовательском справочнике вы можете добавлять компоненты.

… или удалить их.


Можно удалить пользовательский справочник, если вы обладаете привилегией удалять данные.


Любой справочник можно скачать на компьютер.


… или загрузить с компьютера на сервер.

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.

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

5 ИСТОРИЯ ИЗМЕРЕНИЙ

5.1 Последовательное сохранение данных

Некоторые расчёты позволяют сохранять историю измерений, которую можно просмотреть в табличном и графическом виде.

Соответствующая опция задаётся в основных настройках отчёта:

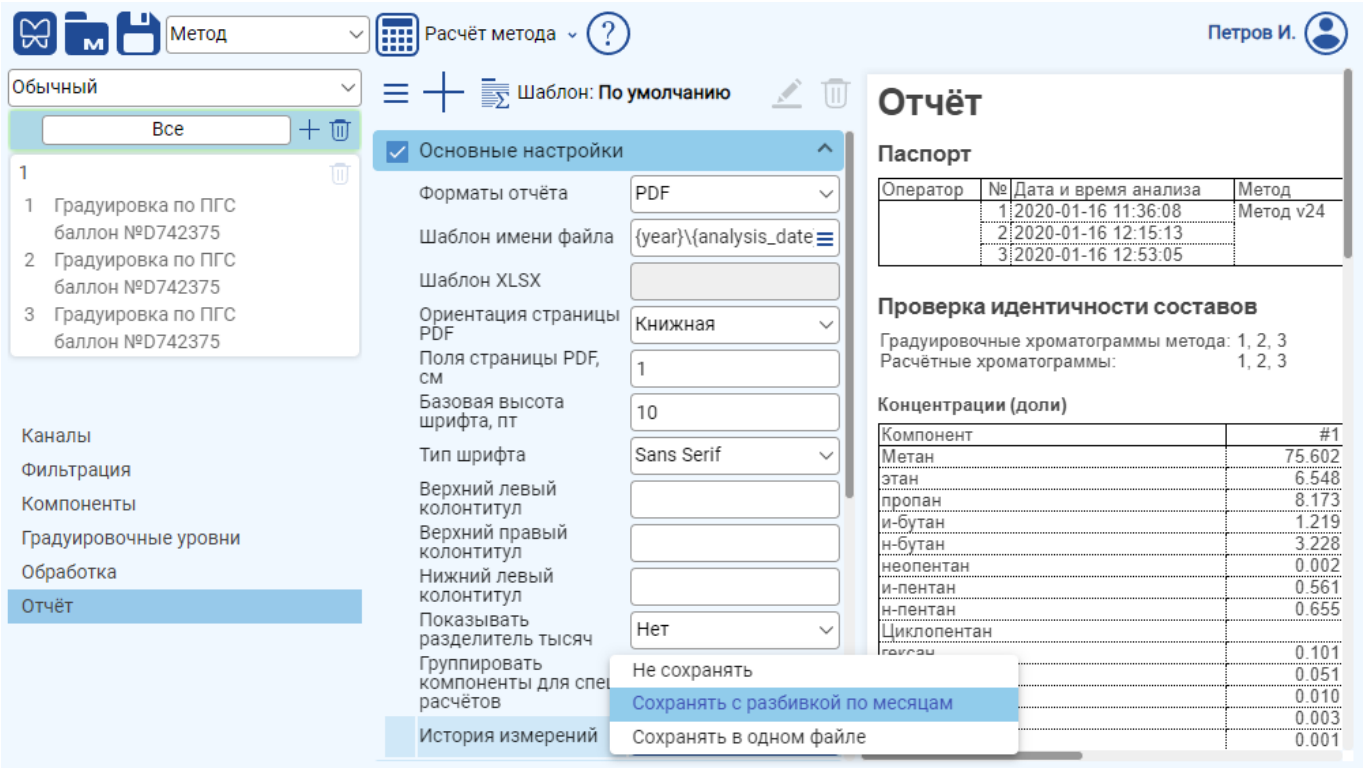


Рисунок 5.1 – Включение опции "История измерений"

Если вы выберите значения "Сохранять с разбивкой по месяцам" и "Сохранять в одном файле", то история измерений будет вестись для следующих секций (спецциальных расчётов):

- **Компоненты**. Сохраняется результат расчёта площадей пиков и концентраций компонентов.
- **ГОСТ 31369-2021**. Сохраняется результат расчёта физико-химических параметров природного газа.
- **ГОСТ 31371.7-2020**. Сохраняется результат расчёта компонентного состава природного газа.
- **ГОСТ 34704-2020**. Сохраняется результат измерения метанового числа.

{video trend_start Запись истории измерений}

Когда сохранение опции включено, программа при выполнении каждого анализа сохраняет его результаты, для каждой из вышеперечисленных секций свои.

Данные сохраняются в файлах на сервере с относительными путями:

Место отбора пробы / группа расчётных показателей / год-месяц

Например:

Газ 1 / Концентрации / 2023-05

Здесь:

- "Газ 1" – место отбора пробы (например, название пробоотборной линии),
- "Концентрации" – группа параметров.
- "2023-05" – имя файла, соответствующие году и месяцу анализа.

В файле с расширением .csv данные заносятся следующим образом:

```
Date;Number;гелий;водород;метан;кислород;диоксид углерода
2023-02-01 9:10;1;1,2852E-05;1,18668E-05;0,067221726;5,98793E-06;0,002147976
2023-02-01 9:45;2;1,16953E-05;1,07988E-05;0,06386064;5,92805E-06;0,002083537
2023-02-01 10:20;3;1,13444E-05;1,15547E-05;0,067053672;6,22446E-06;0,002041866
2023-02-01 10:55;4;1,11176E-05;1,23635E-05;0,070406355;5,7265E-06;0,001858098
2023-02-01 11:30;5;1,03393E-05;1,1869E-05;0,064773847;5,95556E-06;0,001672289
2023-02-01 12:05;6;1,06495E-05;1,10381E-05;0,069308016;5,65778E-06;0,001755903
2023-02-01 12:40;7;1,12885E-05;1,04862E-05;0,074852658;5,43147E-06;0,00180858
2023-02-01 13:15;8;1,08369E-05;9,64732E-06;0,074104131;5,86599E-06;0,001935181
```

Для просмотра истории измерений перейдите на соответствующую страницу "Хроматэк Навигатор".

{video trend_review Тренд, история измерений}

5.2 Создание набора данных по хроматограммам

Помимо последовательного построение набора данных (каждая запись в таблице формируется при обработке очередного анализа), вы можете быстро создать набор данных по уже записанным хроматограммам для параметров:

- Концентрация компонента.
- Площадь пика.
- Высота пика.
- Результат расчета по формуле пользователя для компонента.

Для этого на боковой панели нажмите на кнопку "Создать данные из хроматограмм".

Откроется диалог, в нём выберите проект и хроматограммы. Вы можете использовать фильтры по названию пробы, комментариям. Можно показать в таблице хроматограмм за определённый период времени.

Набор данных можно создать сразу для всех компонентов в выбранных хроматограммах или перечислить интересующие в соответствующей строке (см. рисунок ниже).

После того, как интересующие хроматограммы выбраны в таблице, нажмите "ОК".

Если необходимо, на верхней панели инструментов укажите значения минимума и максимума измеряемого значения. При этом на графике появятся пунктирные линии, соответствующие указанным границам.

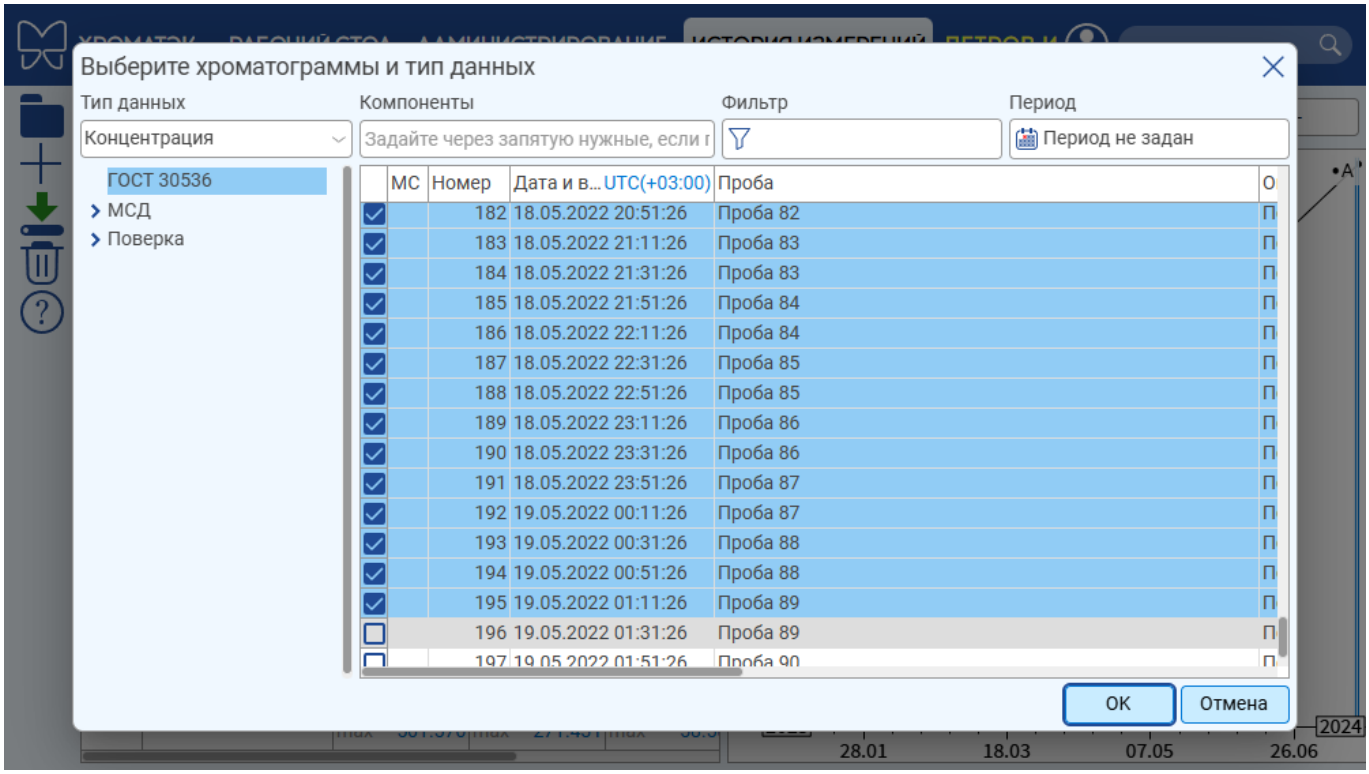


Рисунок 5.2 – Выбор хроматограмм

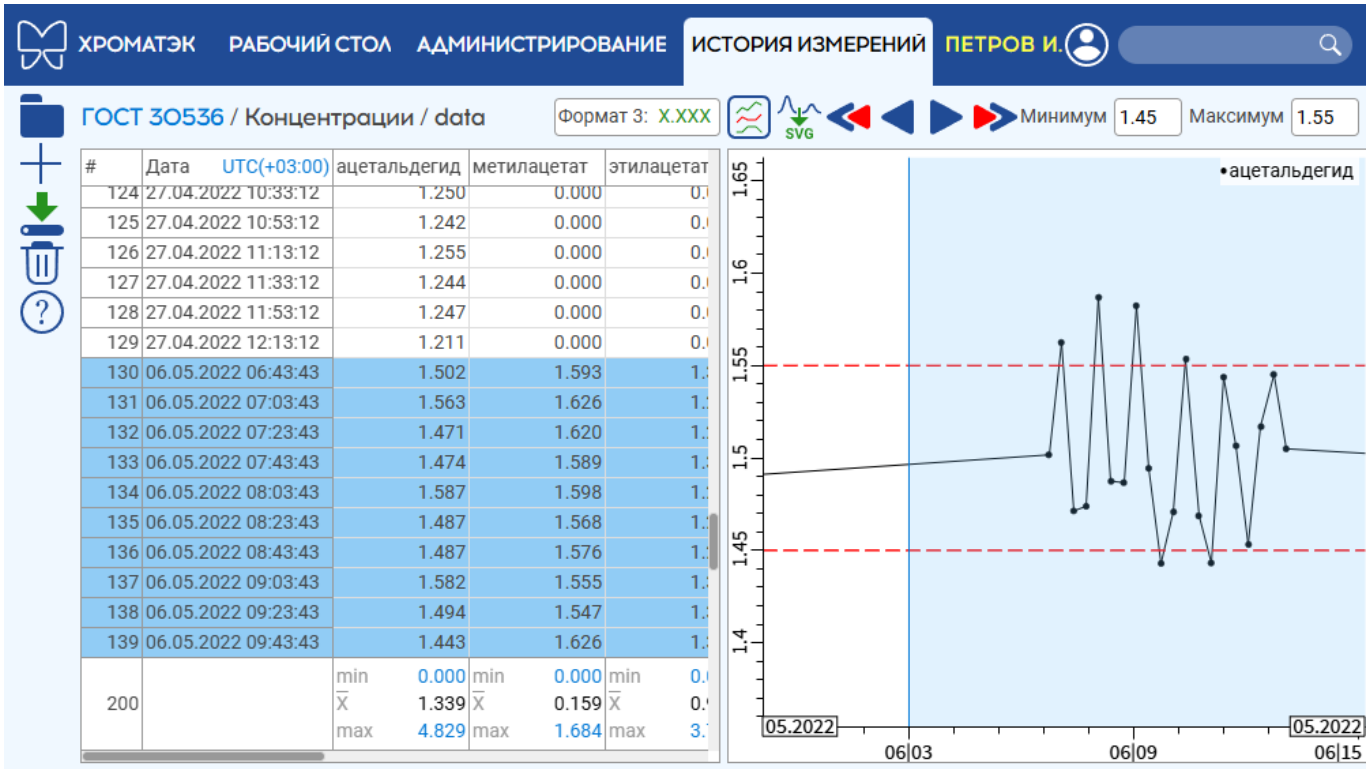


Рисунок 5.3 – График изменения концентрации выбранного компонента