Руководство пользователя: Расчёт №124 «Двухканальная идентификация для методик МУК 4.1.3166-14 –МУК 4.1.3171-14»

ХАС 3.124.001 РП

Редакция от 23 ноября 2026 г.
Актуальная версия: 1.0.0.0
Сайт : kb.has.ru

Содержание

1. Введение.....3
2. Установка программы.....4
3. Интерфейс программы.....6
4. Порядок проведения расчёта.....7
   Добавление хроматограмм.....7
   Таблица компонентов.....7
   Идентификация.....8
   Градуировка.....10
   Расчет.....11
   Вывод отчета.....12
5. Настройка программы.....14
6. Идентификация программы.....15

1. Введение

Программа «Двухканальная идентификация для методик МУК 4.1.3166-14 –МУК 4.1.3171-14» предназначена для автоматизации процесса качественного подтверждения целевых компонентов и количественного расчета по группе методик МУК 4.1.3166-14 — МУК 4.1.3171-14 с использованием двух хроматографических каналов детектирования разной полярности.

Для начала работы необходимо ознакомиться с данными нормативными документами.

Данная программа работает как дополнение к ПО «Хромос» и может быть запущена только на зарегистрированном ПО.

Установочный файл программы и сопутствующая документация доступны в сети Интернет по адресу: https://kb.has.ru/soft:dop_raschjot_124.

Предложения и пожелания по программе сообщайте на e-mail: soft@has.ru

2. Установка программы

Перед установкой программы «Двухканальная идентификация для методик МУК 4.1.3166-14 –МУК 4.1.3171-14» на ПК должно быть установлено ПО «Хромос». Для установки дополнения рекомендуется 3 Мб свободного места на жёстком диске. Папку установки изменять не рекомендуется.

1. Запустите установочный файл.
2. По завершении установки нажмите **Готово**.

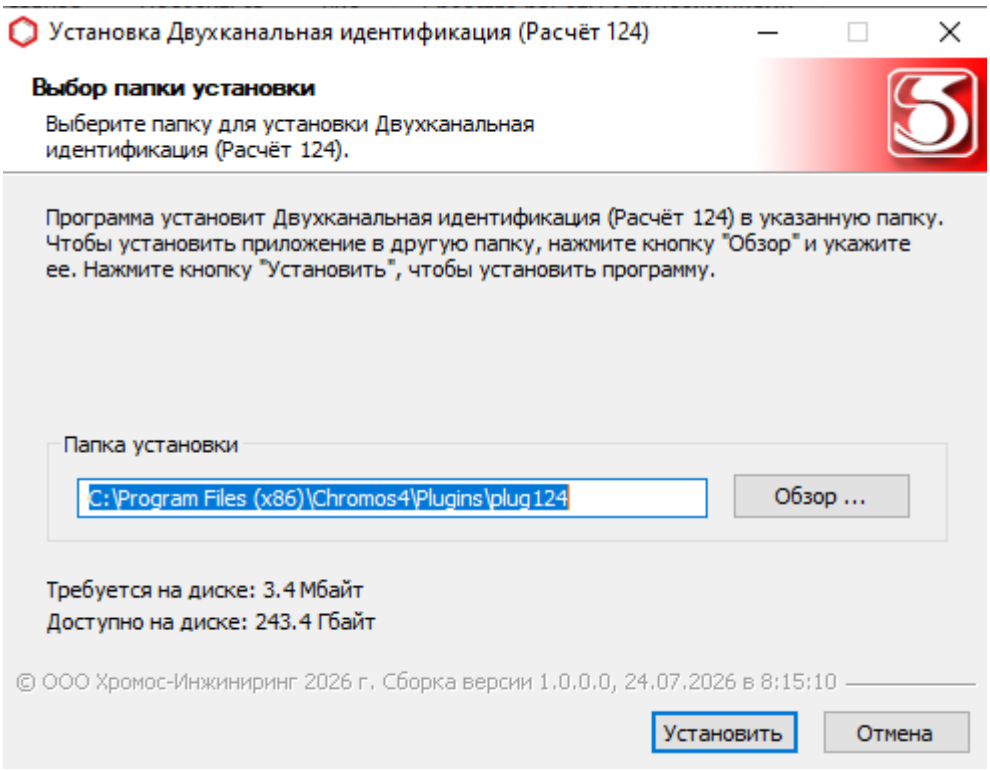

Рис. 1. Установка программы

После успешной установки программы её можно запустить через ПО «Хромос».

Программа «Двухканальная идентификация для методик МУК 4.1.3166-14 –МУК 4.1.3171-14» работает как дополнение к ПО «Хромос».Чтобы запустить его, выполните следующие действия:

1. Запустите ПО «Хромос».
2. В меню Данные выберите **Расчёты --> Двухканальная идентификация для методик МУК 4.1.3166-14 –МУК 4.1.3171-14**. Откроется окно программы (Рис. 2).

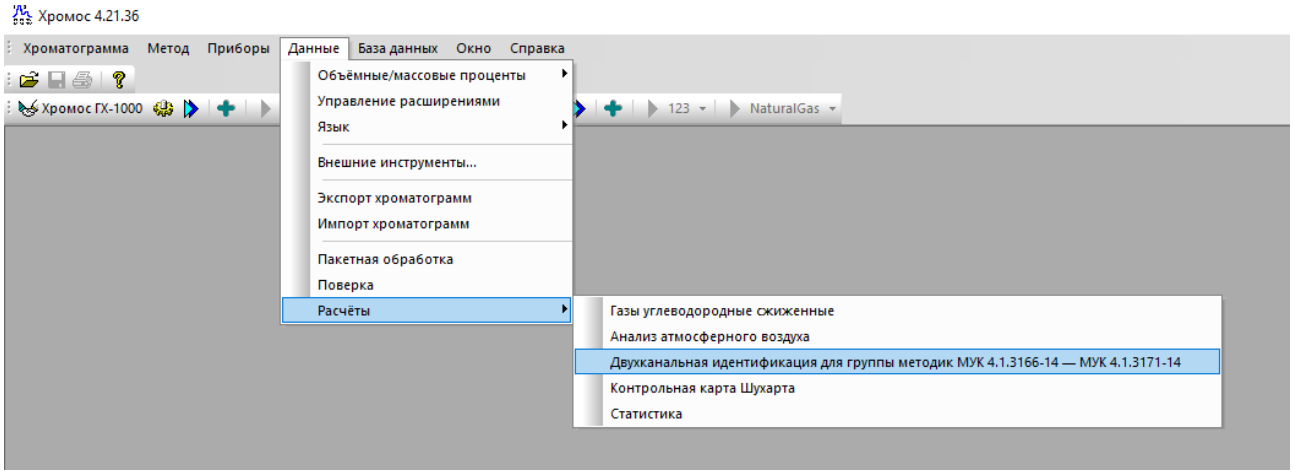

Рис. 2. Запуск дополнения в ПО «Хромос»

3. Интерфейс программы

Основное окно программы (Рис. 3) состоит из рабочей области и вкладок анализа. В рабочей области осуществляется добавление, удаление хроматограмм, формирование отчёта и т.д. Вкладки анализа: *Инф. с хром.*, *Идентификация*, *Градуировка*, *Расчет*, *Сообщения отвечают за вывод информации*. На вкладке *Сообщения* отображаются ошибки и предупреждения, возникшие в процессе вычислений.

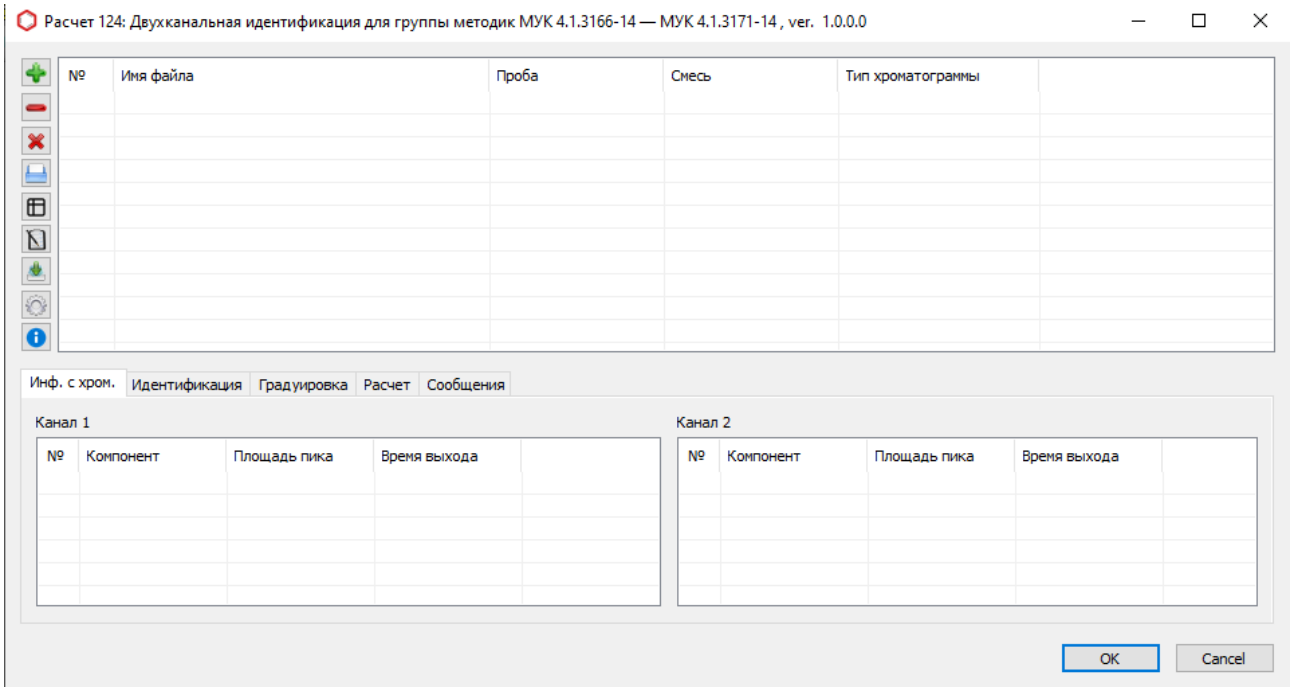

Рис. 3. Основное окно программы

Вкладки рабочей области содержат следующую информацию:

- *Хроматограммы* — список хроматограмм, по которым производится расчет, с данными об идентификаторе, пробе, смеси, типе хроматограммы (анализ или градуировка);
- *Инф. с хром.* — информация о компонентах выбранной хроматограммы для двух каналов (порядкой номер, имя компоненты, площадь пика, время выхода);
- *Идентификация* — данные идентификации компонентов;
- *Градуировка* — данные расчета градуировочных коэффициентов;
- *Расчет* — данные расчета концентрации компонентов;
- *Отчет* — формирование и открытие отчета по текущему расчету;
- *Сохранить отчет* — формирование отчета и выбор места сохранения;
- *Настройки* — настройки программы;
- *Компоненты* — открытие окна с настройками всех компонентов;
- *О программе* — идентификатор программы.

4. Порядок проведения расчёта

ПО «Двухканальная идентификация для методик МУК 4.1.3166-14 –МУК 4.1.3171-14» выполняет расчёт по группе методик МУК 4.1.3166-14 –МУК 4.1.3171-14 в следующей последовательности:

1. Сопоставление пиков компонента по обоим каналам с учетом его роли и определение итогового статуса компонента.
2. Расчет градуировочных коэффициентов.
3. Расчет итоговой концентрации каждого компонента по данным «Основного» канала с учетом статуса идентификации.

При возникновении ошибки на одном из этапов расчёт останавливается и на экране отображается предупреждение. В журнале уведомлений отображаются сообщения с описанием ошибок.

Добавление хроматограмм

Чтобы добавить хроматограммы для расчёта, нажмите кнопку **Добавить** в рабочей области слева. Чтобы удалить хроматограмму, кликните по ней и нажмите **Удалить**.

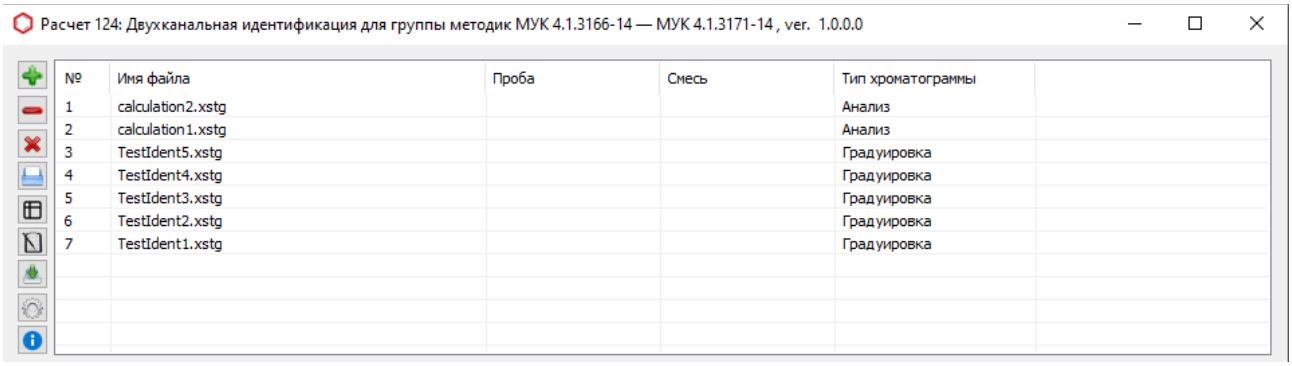

Рис. 4. Вкладка «Хроматограммы»

Добавленные хроматограммы отображаются в таблице (Рис. 4). Выводится следующая информация:

- *Имя файла* — имя файла хроматограммы;
- *Проба* — наименование пробы из паспорта;
- *Тип* хроматограммы — анализ или градуировка;
- *Смесь* — наименование смеси из паспорта;

Таблица компонентов

При нажатии кнопки «Компоненты» открывается окно с компонентами (Рис. 5). Окно содержит следующие элементы:

Кнопки управления:

- *Добавить компонент* — добавляет новый компонент в таблицу;
- *Удалить компонент* — удаляет выбранный компонент из таблицы;

- *Сохранить* — сохранить изменения в таблице;
- *Отмена* — выход из окна.

Колонки таблицы компонентов:

- *Имя* — имя компонента;
- *Альт. имя* — альтернативное имя компонента (например, для случая, когда на одном канале 2 пика выходят в одно время, в этом поле можно указать название суммы компонентов);
- *Время выхода (канал 1 и 2)* — времена удерживания из МУК (например, для МУК 4.1.3166-14 это таблица 6);
- *Канал 1(2) окно* — окна поиска;
- *Осн. канал* — выбор основного канала, другой канал автоматически становится подтверждающим. Значение 1 или 2 — ручной выбор основного канала. Значение 0 — основной канал определяет программа;
- *Откл.* — значение отклонения площадей между каналами (колонка отображается, если в настройках выбрана функция «Контроль соотношения площадей»).

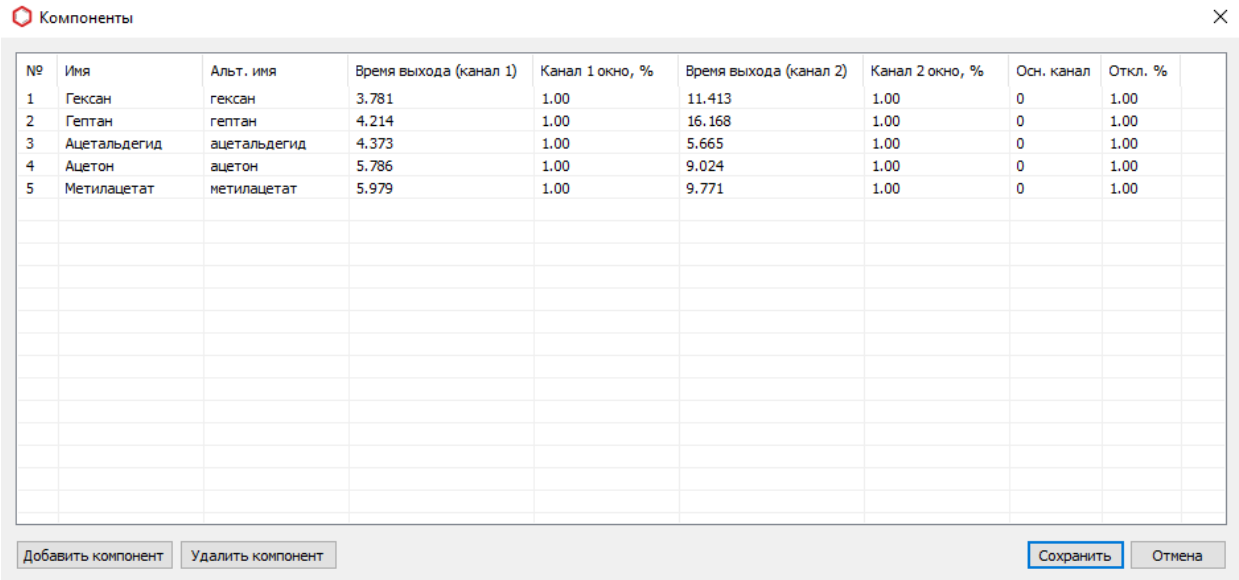

Рис. 5. Окно «Компоненты»

Идентификация

Для проведения расчета требуется не менее 2 градуировочных хроматограмм с разными концентрациями (тип «Градуировка») и 2 аналитические хроматограммы (тип «Анализ»).

После добавления градуировочных хроматограмм программа последовательно выполняет:

- усреднение времен уддерживания компонентов по градуировочным хроматограммам отдельно для канала 1 и канала 2;
- выбор основного канала по лучшему разделению пиков — только для тех компонентов, у которых в таблице компонентов в колонке «Осн. канал» задано значение «0»;
- идентификацию компонентов по двум каналах в пределах заданных окон поиска.

Компонент получает статус «Идентифицирован», если его пик обнаружен и на основном, и на подтверждающем канале в пределах окон поиска. Если пик обнаружен только на одном из двух каналов, компоненту присваивается статус «Не подтвержден», и количественный расчет по нему не выполняется.

На вкладке Идентификация (Рис. 6) отображается следующая информация:

- *Компонент* — наименование компонента;
- *Время канал 1(2) факт* — фактическое время удерживания пика на канале 1 (2) в анализируемой хроматограмме;
- *Время канал 1(2) град* — усредненное время удерживания, полученное по градуировочным хроматограммам;
- *Время канал 1(2) табл* — время удерживания, заданное в таблице компонентов;
- *Осн. Канал* — канал, назначенный основным для данного компонента; второй канал автоматически считается подтверждающим;
- *Статус* — итоговый статус компонента: «Идентифицирован» или «Не подтвержден»

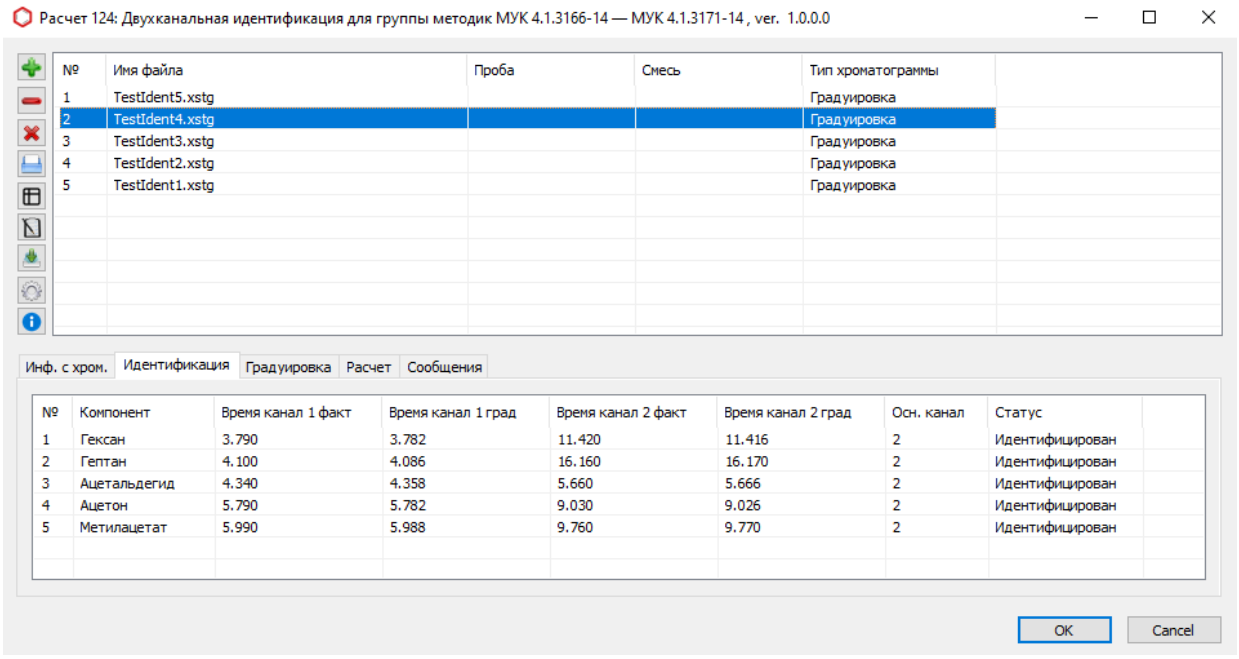

Рис. 6. Вкладка «Идентификация»

Особые случаи:

- усредненные времена удерживания применяются, если загружена хотя бы одна градуировочная хроматограмма; табличные времена используются только когда градуировочных нет совсем или пик не найден по имени. Автоматический выбор основного канала работает при наличии градуировочных; при их отсутствии основной канал нужно задать вручную.
- если компонент задан только в одном канале (одноканальная идентификация), основной канал также необходимо выбрать вручную в таблице компонентов.

Градуировка

Градуировка строится как линейная зависимость концентрации от площади C = k1*A +k0 (поддерживается также вариант C=k1*A), по площадям пиков на основном канале и только для идентифицированных компонентов. Точки берутся по уровням концентрации: измерения одной концентрации усредняются в одну точку (до 6 точек). Коэффициент рассчитывается, если есть не менее 2 разных концентраций.

На вкладке Градуировка (Рис. 7) отображается следующая информация:

Вверху вкладки два выпадающих списка: выбор компонента и выбор вида зависимости (k1*A + k0 или k1*A (через ноль));

Таблица точек выбранного компонента: № | Концентрация, мг/дм^3 | Средняя площадь | Кол-во измерений;

Рядом выводятся коэффициенты выбранного компонента: k1=…; k0=… (в случае «через ноль» только k1) и строится график градуировки (точки и прямая).

Концентрация компонента берется из самого пика градуировочной хроматограммы (заданная концентрация в поле пика). Если для компонента в градуировочных хроматограммах задано менее двух разных концентраций (например, загружены хроматограммы одной концентрации), прямую построить нельзя, на вкладке Сообщения выводится предупреждение, и градуировка по этому компоненту не строится.

При включённой в настройках функции *«Контроль соотношения площадей»* программа дополнительно сравнивает соотношение откликов компонента на основном и подтверждающем каналах с нормативом, заданным в колонке *Откл.* таблицы компонентов. При превышении норматива на вкладке Сообщения выводится предупреждение.

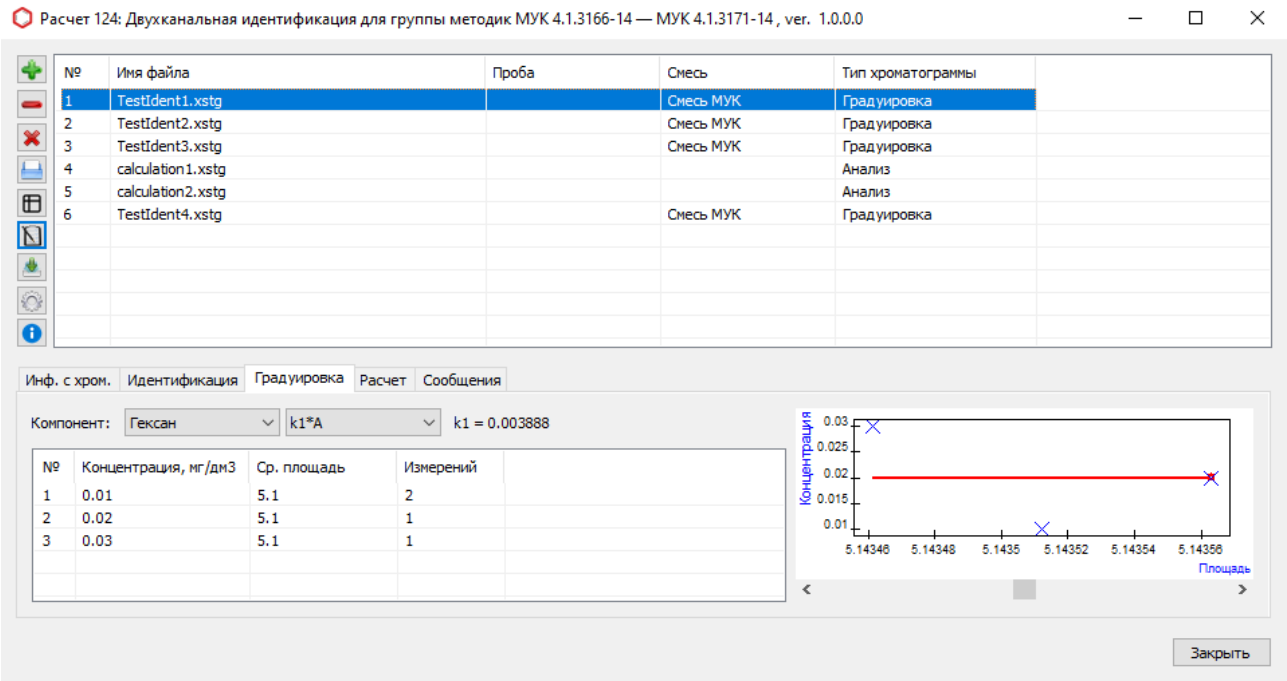

Рис. 7. Вкладка «Градуировка»

Расчет

Концентрация каждого компонента рассчитывается строго по данным основного канала: по площади пика на основном канале и среднему градуировочному коэффициенту. Итоговый результат представляет собой среднее двух параллельных определений, полученных по двум аналитическим хроматограммам.

На вкладке Расчет (Рис. 8) отображается следующая информация:

- *№* — порядковый номер компонента;
- *Компонент* — наименование компонента;
- *Статус* — статус идентификации компонента;
- *Концентрация, мг/дм3* — итоговая концентрация компонента.

Для компонентов со статусом *«Не подтвержден»* вместо значения концентрации выводится *«не обнаружено»*. Если в настройках включен параметр *«Скрывать необнаруженные компоненты»*, такие компоненты не выводятся в отчет.

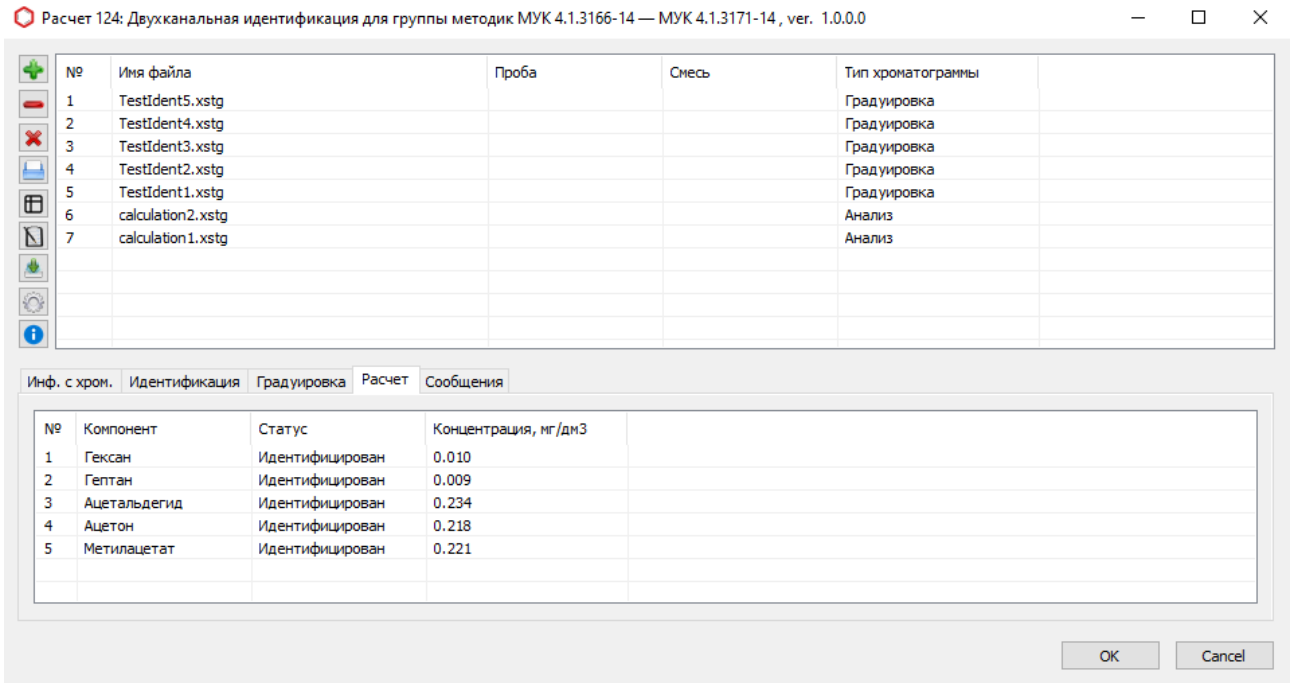

Рис. 8. Вкладка «Расчет»

Вывод отчета

В программе можно подготовить печатную форму отчета с полученными данными (Рис. 9). Отчет формируется в формате html и автоматически открывается браузером при нажатии кнопки «Отчет». Отчет можно сохранить, нажав кнопку «Сохранить отчет».

Отчёт

Расчёт 124. Двухканальная идентификация

Нормативные документы: МУК 4.1.3166-14 – 4.1.3171-14

Отчёт сгенерирован: 23.11.2026 9:32:37

Хроматограммы

№	Имя файла	Проба	Дата анализа	Тип анализа	Смесь
1	TestIdent1.xstg		16.07.2026 10:45:28	Градуировочная	Смесь МУК
2	TestIdent2.xstg		16.07.2026 10:48:05	Градуировочная	Смесь МУК
3	TestIdent3.xstg		16.07.2026 10:52:14	Градуировочная	Смесь МУК
4	calculation1.xstg		22.07.2026 11:38:49	Анализ	
5	calculation2.xstg		22.07.2026 11:39:13	Анализ	
6	TestIdent4.xstg		16.07.2026 11:01:41	Градуировочная	Смесь МУК

Градуировка

№	Компонент	Осн. канал	k0 (ko)	k1 (kx)	Точек
1	Гексан	2	504.8	-98.14	3
2	Гептан	2	---	---	1
3	Ацетальдегид	2	---	---	1
4	Ацетон	2	---	---	1
5	Метилацетат	2	---	---	1

Расчёт концентраций

№	Компонент	Статус	Концентрация, мг/дм3
1	Гексан	Идентифицирован	18.261
2	Гептан	Идентифицирован	---
3	Ацетальдегид	Идентифицирован	---
4	Ацетон	Идентифицирован	---
5	Метилацетат	Идентифицирован	---

Сообщения

Предупреждение: "Гептан": для градуировки нужно не менее 2 разных концентраций.
Предупреждение: "Ацетальдегид": для градуировки нужно не менее 2 разных концентраций.
Предупреждение: "Ацетон": для градуировки нужно не менее 2 разных концентраций.
Предупреждение: "Метилацетат": для градуировки нужно не менее 2 разных концентраций.

Отчёт сгенерирован плагином "Хромос: Расчёт 124" ver. 1.0.0.0

Рис. 9. Пример отчета

5. Настройка программы

Окно настроек (Рис. 10) содержит следующие параметры:

- Окна поиска по времени удерживания – выбор единиц окна;
- Контроль соотношения площадей – вкл/выкл контроля;
- Настройки расчета – вкл/выкл отображения в отчете необнаруженных компонентов.

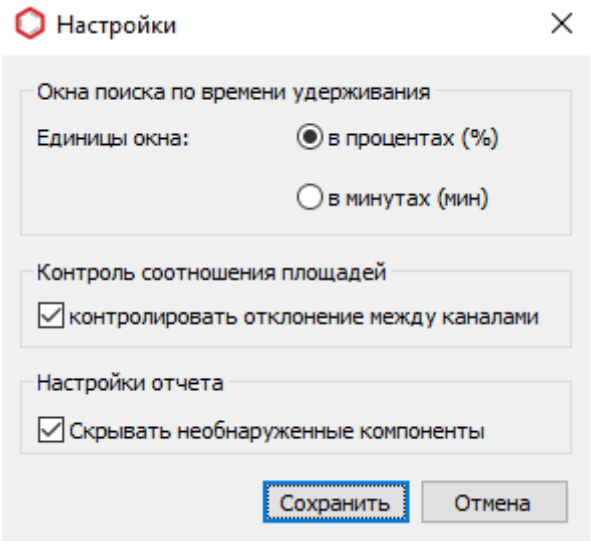

Рис. 10. Окно «Настройки»

6. Идентификация программы

Идентификационные данные ПО «Двухканальная идентификация для методик МУК 4.1.3166-14 –МУК 4.1.3171-14» размещены в окне О плагине (Рис. 11).

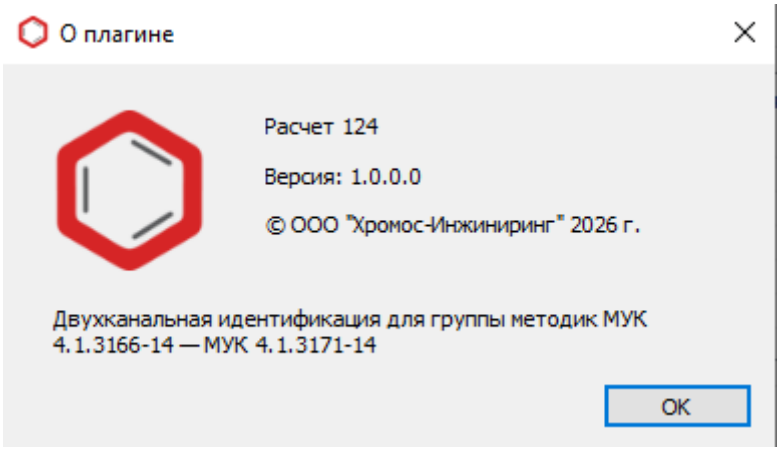

Рис. 11. Окно «О плагине»