

QA5300

Версия 2.1

Программа количественного анализа
для спектрофотометров ПЭ-5300ВИ, ПЭ-5300УФ

Руководство пользователя
БКРЕ.941412.006.01РП

Версия 2.3 от 22.11.2017

© ООО «ЭКРОСХИМ»

Содержание

1. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ ПРОГРАММЫ	2
2. СИСТЕМНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ	2
3. ФУНКЦИИ	2
3.1. УПРАВЛЕНИЕ ПРИБОРОМ.....	2
3.2. ГРАДУИРОВКА.....	2
3.3. ИЗМЕРЕНИЯ	2
3.4. ПЕЧАТЬ ПРОТОКОЛОВ	3
3.5. СОХРАНЕНИЕ И ЗАГРУЗКА.....	3
3.6. ЭКСПОРТ.....	3
4. УСТАНОВКА, ЗАПУСК И УДАЛЕНИЕ ПРОГРАММЫ	4
4.1. УСТАНОВКА ПРОГРАММЫ	4
4.2. ЗАПУСК ПРОГРАММЫ.....	4
4.3. УДАЛЕНИЕ ПРОГРАММЫ	5
5. СТРУКТУРА ПРОГРАММЫ	5
5.1. ГЛАВНОЕ ОКНО ПРОГРАММЫ	5
5.2. ГЛАВНОЕ МЕНЮ, ПАНЕЛЬ ИНСТРУМЕНТОВ И ПАНЕЛЬ УПРАВЛЕНИЯ	5
5.3. ОСНОВНАЯ ПАНЕЛЬ	7
5.4. ПАНЕЛЬ СОСТОЯНИЯ.....	9
6. НАСТРОЙКА ПРОГРАММЫ	10
6.1. ПОДКЛЮЧЕНИЕ ПРИБОРА К КОМПЬЮТЕРУ	10
6.2. НАСТРОЙКА ПОРТА	10
6.3. ИНФОРМАЦИЯ О ПРИБОРЕ.....	11
7. УПРАВЛЕНИЕ ПРИБОРОМ.....	12
7.1. КАЛИБРОВКА НУЛЯ ОПТИЧЕСКОЙ ПЛОТНОСТИ	12
7.2. КОМПЕНСАЦИЯ ТЕМНОВОГО ТОКА	12
8. ГРАДУИРОВКА.....	12
8.1. ЗАДАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ГРАДУИРОВКИ.....	12
8.2. ИЗМЕРЕНИЕ СТАНДАРТНЫХ ОБРАЗЦОВ	14
8.3. СОХРАНЕНИЕ ГРАДУИРОВКИ.....	15
8.4. ПЕЧАТЬ ПРОТОКОЛА ГРАДУИРОВКИ	15
8.5. ЗАГРУЗКА ГРАДУИРОВКИ ИЗ ФАЙЛА.....	15
8.6. ЭКСПОРТ ТАБЛИЦЫ РЕЗУЛЬТАТОВ В ФОРМАТЕ MS EXCEL™	15
9. ИЗМЕРЕНИЯ	16
9.1. ВЫБОР ГРАДУИРОВКИ	16
9.2. ЗАДАНИЕ ПАРАМЕТРОВ ИЗМЕРЕНИЙ	16
9.3. ВЫПОЛНЕНИЕ ИЗМЕРЕНИЙ	17
9.4. СОХРАНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ.....	17
9.5. ПЕЧАТЬ ПРОТОКОЛА ВЫПОЛНЕНИЯ ИЗМЕРЕНИЙ	18
9.6. ЗАГРУЗКА РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ ИЗ ФАЙЛА	18
9.7. ЭКСПОРТ ТАБЛИЦЫ РЕЗУЛЬТАТОВ В ФОРМАТЕ MS EXCEL™	18
10. ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИЯ.....	18
10.1. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ.....	18
10.2. ОБНОВЛЕНИЕ ПРОГРАММЫ ЧЕРЕЗ ИНТЕРНЕТ	19
10.3. ОБНОВЛЕНИЕ МИКРОПРОГРАММЫ ПРИБОРА	19
10.4. ВОЗМОЖНОСТИ ОКНА ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО ПРОСМОТРА И ПЕЧАТИ ПРОТОКОЛОВ	20
10.5. ТЕХНИЧЕСКАЯ ПОДДЕРЖКА	22

1. Общее описание программы

Программное обеспечение QA5300 предназначено для работы на персональном компьютере под управлением операционной системы Windows вместе со спектрофотометром ПЭ-5300ВИ или ПЭ-5300УФ. Данное ПО обеспечивает управление спектрофотометром, возможность создания градуировок и выполнения количественного анализа, сохранение и загрузку градуировок и результатов измерений и печать протоколов градуировки и измерений.

2. Системные требования

Для нормальной работы программы требуется:

- IBM-совместимый персональный компьютер с установленной 32 или 64-битной операционной системой Windows XP, Windows Vista, Windows 7 или Windows 8/8.1/10.
- Видеокарта, обеспечивающая разрешение экрана не менее 1024 на 768 точек, при качестве цветопередачи 16 или выше бит (предпочтительно 1280 на 1024 точек) и монитор, поддерживающий данное разрешение.
- Один порт USB 1.1 или 2.0.
- Не менее 10 МБ свободного дискового пространства.

3. Функции

3.1. Управление прибором

Реализованы следующие возможности:

- Компенсация темнового тока
- Калибровка 0A/100%T
- Отображение текущего значения оптической плотности или пропускания

3.2. Градуировка

- В программе предусмотрено два типа градуировочных уравнений: зависимость оптической плотности от концентрации $A(C)$, как предписывается большинством нормативных документов, и зависимость концентрации от оптической плотности $C(A)$, как реализовано во внутреннем программном обеспечении спектрофотометра.
- Имеется четыре вида аппроксимации градуировочной зависимости: линейная, проходящая через начало координат, линейная, квадратичная (параболическая) и степенная.
- Также предусмотрено два способа задания коэффициентов градуировочного уравнения: прямым вводом известных значений и автоматическим расчётом значений коэффициентов после измерения образцов с известной концентрацией анализируемого вещества (стандартных образцов – СО).
- Для второго метода может быть использовано до 10-ти серий параллельных измерений до 20-ти стандартных образцов в каждой серии.
- Существует возможность проводить измерения с использованием результата контрольного опыта (контрольного образца – КО), при которых значение его оптической плотности вычитается из каждого значения оптической плотности стандартных образцов.
- После выполнения градуировки по стандартным образцам автоматически вычисляются следующие параметры: квадрат коэффициента корреляции градуировочного уравнения, максимальное значение среднеквадратического отклонения вычисляемой величины в процентах и максимальная ошибка вычисляемой величины в процентах по всем стандартным образцам.

3.3. Измерения

Измерения производятся на одной заданной длине волны, на основе ранее выполненной градуировки.

Один файл измерений может содержать результаты анализа до 20-ти образцов до 10-ти параллельных измерений для каждого образца.

В процессе выполнения измерений для каждого образца автоматически рассчитывается его концентрация, а также среднее значение концентрации и сходимость в процентах для параллельных измерений.

3.4. Печать протоколов

Программа предоставляет возможность распечатки протоколов градуировки и измерений.

3.5. Сохранение и загрузка

В программе имеется возможность сохранить созданную градуировку в файл. В дальнейшем ее можно будет загрузить из файла и использовать для проведения новых измерений или печати протокола градуировки.

Также предусмотрено сохранение в файл и загрузка из файла результатов измерений. При этом вместе с результатами измерений сохраняются и данные градуировки, по которой выполнялись измерения. Они могут быть записаны в отдельный файл градуировки и использованы для выполнения новых измерений.

3.6. Экспорт

Функция экспорта предназначена для сохранения таблицы данных градуировки или измерений в формате Microsoft Excel™.



Рисунок 1 – Меню автозапуска компакт-диска.

4. Установка, запуск и удаление программы

4.1. Установка программы

Вставьте в привод CD-ROM компакт-диск с программным обеспечением. На экране появится меню автозапуска компакт-диска (Рисунок 1).

Если меню не появилось, то в проводнике Windows откройте корневой каталог компакт-диска и дважды щёлкните мышью на значке  **Starter**.

В меню автозапуска выберите пункт «Установить программу QA5300». Запустится программа установки – выполните установку, следуя указаниям программы. Обратите внимание на то, что для работы программы с прибором требуется установка драйвера виртуального порта CP210x. Если программа устанавливается на компьютер первый раз, то необходимо выбрать опцию «Полная установка».

Внимание!

Не подключайте спектрофотометр к компьютеру кабелем до завершения установки программного обеспечения, в частности, драйвера виртуального порта.

Примечание.

Для установки программы требуются права администратора, дальнейшая работа с программой возможна под ограниченной учётной записью.

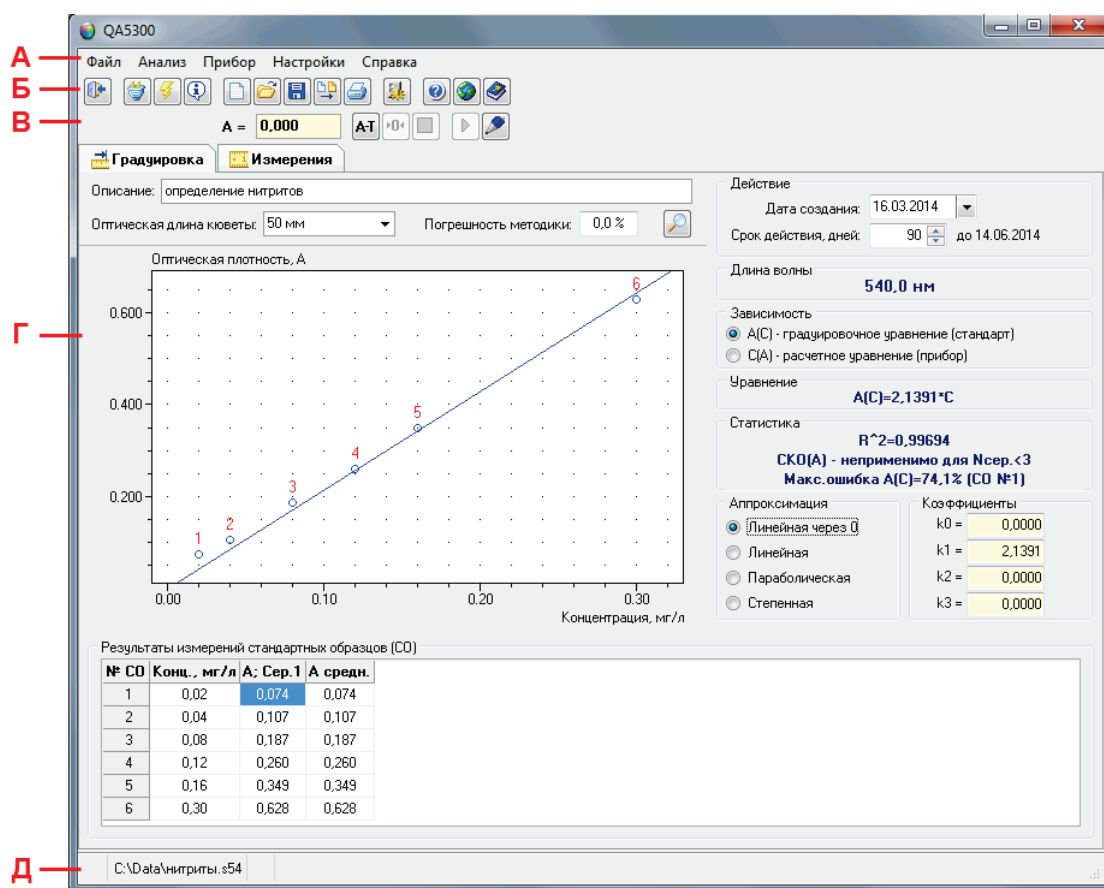


Рисунок 2 – Главное окно программы.

4.2. Запуск программы

Для запуска программы можно использовать ярлык  на рабочем столе Windows или значок  QA5300, находящийся в программной группе «QA5300», доступной через кнопку «Пуск» > «Все программы». Программу следует запускать после включения прибора.

4.3. Удаление программы

Удаление программы QA5300 производится стандартным образом с помощью утилиты «Установка и удаление программ» из «Панели управления» Windows.

5. Структура программы

5.1. Главное окно программы

При запуске программы открывается её главное окно (Рисунок 2). В верхней части окна находится главное меню – **А**, под ним расположена панель инструментов – **Б**, которая повторяет содержание главного меню, обеспечивая быстрый доступ к его командам. Ниже находится панель управления спектрофотометром – **В**. Далее расположена основная панель – **Г** с двумя страницами: «Градуировка» и «Измерения» и под ней панель состояния – **Д**.

5.2. Главное меню, панель инструментов и панель управления

Главное меню программы имеет четыре раздела – «Файл», «Анализ», «Прибор» и «Справка» (Рисунок 3). В каждом из них сгруппированы пункты меню раздела. Каждому пункту меню соответствует кнопка панели инструментов (Рисунок 4) или панели управления (Рисунок 5).

5.2.1. Раздел «Файл»

- **Пункт «Новый»** - . Задать параметры новой градуировки или нового измерения в зависимости от того, какая из закладок «Градуировка» или «Измерения» открыта на основной панели. После задания параметров, текущие параметры и данные будут удалены.

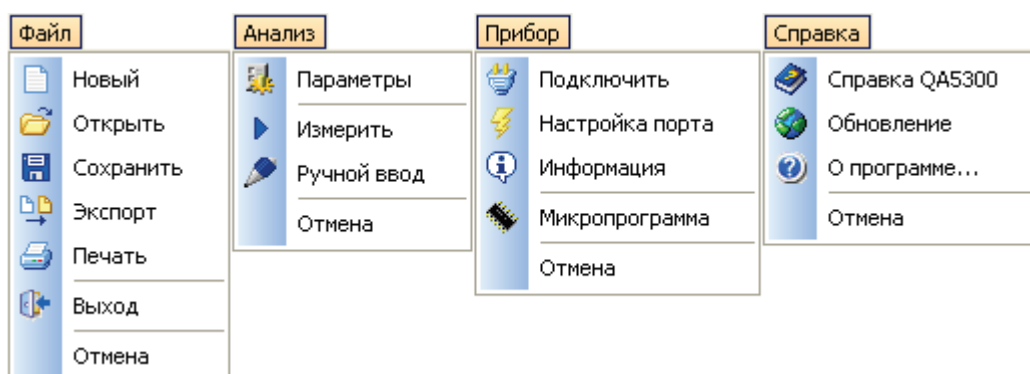


Рисунок 3 – Структура главного меню программы.



Рисунок 4 – Панель инструментов.



Рисунок 5 – Панель управления.

- **Пункт «Открыть»** - . Открыть файл, содержащий параметры и данные ранее выполненной градуировки или измерения.
- **Пункт «Сохранить»** - . Сохранить в файл параметры и данные текущей градуировки или измерения.
- **Пункт «Экспорт»** - . Записать таблицу градуировки или измерения в файл Microsoft® Excel™. Доступен, если на компьютере установлен Excel. В противном случае, выдаётся ошибка.

- **Пункт «Печать»** - . Распечатать протокол текущей градуировки или измерения.
- **Пункт «Выход»** - . Завершить работу программы. При этом если установлена связь с прибором, то она будет автоматически разорвана. Если имеются несохраненные параметры и данные градуировки или измерения, то будет выдано соответствующее предупреждение.

5.2.2. Раздел «Анализ»

- **Пункт «Параметры»** - . Просмотреть или изменить параметры текущей градуировки или измерения.
- **Пункт «Измерить»** - . Измерить установленный образец и занести результат в таблицу градуировки или измерения. Заблокирован, если не заданы параметры измерения или отсутствует связь с прибором.
- **Пункт «Ручной ввод»** - . Вручную ввести данные в выделенную ячейку таблицы или отредактировать ранее введённое значение. Прервать выполнение измерения на любой стадии. Заблокирован, если не заданы параметры измерения.

5.2.3. Раздел «Прибор»

- **Пункт «Подключить/Отключить»** - . Установить связь с прибором. Если связь установлена, то разорвать её.
- **Пункт «Настройка порта»** - . Настроить параметры соединения с прибором. Вызывает окно, в котором необходимо установить номер виртуального последовательного порта. Также можно выбрать параметр «Соединение при запуске программы», чтобы связь с прибором устанавливалась автоматически (смотрите п.6.2 Настройка порта).
- **Пункт «Информация»** - . Ввести информацию о приборе, с которым работает программа. В вызываемом данной командой окне необходимо выбрать модель прибора и ввести некоторые сведения о нём, которые затем будут отображаться в протоколах измерения в соответствии со стандартом GLP.
- **Пункт «Микропрограмма»** - . Обновить внутреннее микропрограммное обеспечение прибора из файла, поставляемого производителем.

5.2.4. Раздел «Справка»

- **Пункт «Справка QA5300»** - . Открыть оглавление справочной системы. Справка также может вызываться нажатием клавиши F1 на клавиатуре компьютера.
- **Пункт «Обновление»** - . Обновление программы через интернет.
- **Пункт «О программе...»** - . Вывести окно со сведениями о данной версии программы.

5.2.5. Дополнительные элементы панели управления

В левой части панели управления расположена группа элементов управления спектрофотометром. К ним относятся:

- **Окно отображения текущего значения измеряемой величины.** В этом окне отображается текущее значение оптической плотности или пропускания образца, в зависимости от выбранного кнопкой  режима отображения. При отсутствии связи с прибором окно отображения текущего значения измеряемой величины окрашено в чёрный цвет.
- **Кнопка переключения режима отображения текущего значения измеряемой величины** – . В

зависимости от выбранного этой кнопкой режима, измеряемая величина отображается либо в единицах оптической плотности (A), либо в процентах пропускания (T). Вне зависимости от выбранного режима отображения, в таблицу измерений вносится значение в единицах оптической плотности.

- **Кнопка калибровки 0 оптической плотности (100% пропускания)** – . Перед нажатием данной кнопки следует поместить в зону измерения кювету с раствором сравнения. При отсутствии связи с прибором кнопка заблокирована.
- **Кнопка компенсации темнового тока** – . Выполняет компенсацию темнового тока спектрофотометра. Операция может занимать до 30 секунд. По завершении операции будет автоматически выполнена калибровка нулевого значения оптической плотности (100% пропускания), поэтому перед её выполнением рекомендуется поместить в зону измерения кювету с раствором сравнения. При отсутствии связи с прибором кнопка заблокирована.

В правой части панели управления (Рисунок 5) расположена группа элементов управления процессом измерения. В эту группу входят кнопки «Измерить» -  и «Ручной ввод» - , описанные в пункте 5.2.2.

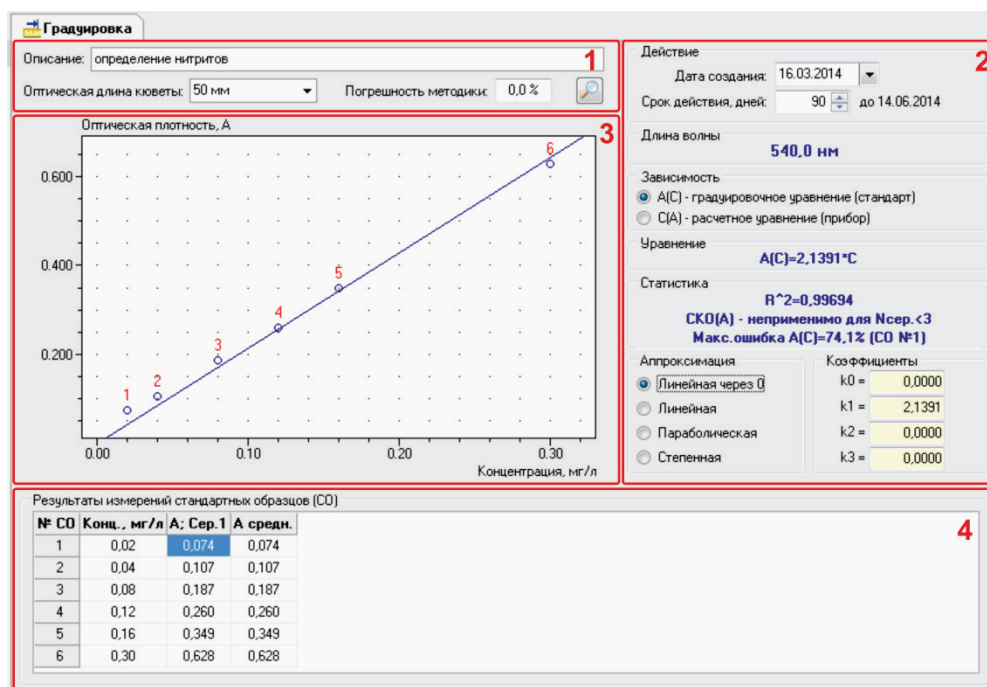


Рисунок 6 – Страница «Градуировка».

5.3. Основная панель

В верхней части основной панели расположены две закладки «Градуировка» и «Измерения», каждая из которых открывает соответствующую страницу панели.

5.3.1. Страница «Градуировка»

Все операции по выполнению градуировки производятся на странице «Градуировка» основной панели (Рисунок 6).

На странице находятся следующие основные элементы:

- **Панель параметров градуировки – 1.** Позволяет оперативно менять такие параметры градуировки как описание и оптическая длина кюветы. На ней же находится кнопка изменения масштаба графика. Элементы панели 1 доступны всегда, если заданы параметры градуировки.
- **Панель параметров градуировки – 2.** На ней расположены элементы, позволяющие изменять не-

которые параметры градуировки, и статистические данные градуировки. Элементы панели 2 доступны, только если заданы параметры градуировки, а для градуировки по стандартным образцам, также выполнен расчёт градуировки (производится автоматически после заполнения таблицы результатов измерений).

- **Градуировочный график – 3.** Отображается, если заданы параметры градуировки, а для градуировки по стандартным образцам, также выполнен расчёт градуировки. В этом случае разблокируется кнопка изменения масштаба графика – . При нажатии этой кнопки на экран выводится окно задания масштаба графика (Рисунок 7).

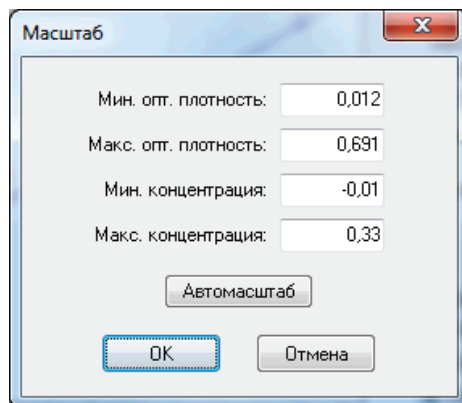


Рисунок 7 – Окно задания масштаба графика.

В этом окне можно вручную задать минимальные и максимальные значения для осей графика или воспользоваться кнопкой «Автомасштаб» для того, чтобы программа автоматически рассчитала и подставила оптимальные значения. Заданный масштаб будет применён после нажатия кнопки «OK». Чтобы отказаться от изменения масштаба, нажмите кнопку «Отмена».

Для градуировки по стандартным образцам при наведении курсора мыши на точку образца на графике градуировки отображается ошибка аппроксимации для данного образца.

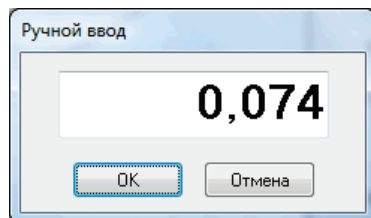


Рисунок 8 – Окно числового редактора.

- **Таблица результатов измерений – 4.** Доступна, если задана градуировка по стандартным образцам. Результаты измерений вносятся в выделенную ячейку таблицы с прибора автоматически при нажатии кнопки  на панели управления программы или вручную. Ручной ввод данных в выделенную ячейку осуществляется с помощью специального окна редактора (Рисунок 8), которое появляется на экране при нажатии кнопки  на панели управления прибором, а также при нажатии клавиши «Enter» или любой цифровой клавиши на клавиатуре ПК или двойном щелчке левой кнопкой мыши на выделенной ячейке. Удалить значение из таблицы можно нажатием клавиши «Delete». Если введено неверное число или произведено ошибочное удаление, то можно вернуть предыдущее значение с помощью нажатия клавиши «Esc». Данная возможность сохраняется до переключения на любой другой активный элемент главного окна программы.

5.3.2. Страница «Измерения»

Измерения производятся на странице «Измерения» основной панели (Рисунок 9).

Градуировка Измерения

Описание: определение нитритов Дата: 23.03.2009

Оптическая длина кюветы: 50 мм Длина волны: 540,0 нм F1=1,0000 F2=1,0000

Результаты измерений

№ изм.	Образец	A; Сер.1	C, мг/л; Сер.1	A; Сер.2	C, мг/л; Сер.2	A; Сер.3	C, мг/л; Сер.3	Ср., мг/л	d, %
1	Образец 1	0,075	0,02	0,077	0,03	0,076	0,03	0,03	0,040
2	Образец 2	0,107	0,04	0,105	0,04	0,108	0,04	0,04	0,037
3	Образец 3	0,260	0,12	0,262	0,12	0,265	0,12	0,12	0,021
4	Образец 4	0,349	0,16	0,351	0,16	0,355	0,16	0,16	0,018

Рисунок 9 – Страница «Измерения».

На странице находятся следующие основные элементы:

- **Панель параметров измерений – 1.** Позволяет оперативно изменять такие параметры как описание, дата и оптическая длина кюветы. На ней же отображаются рабочая длина волны и значения коэффициентов F1 и F2. Элементы панели 1 доступны всегда, если заданы параметры измерения.
- **Таблица результатов измерений – 2.** В ячейки столбца «Образец» вводятся наименования образцов (до 20 символов). Результаты измерений вводятся в выделенные ячейки столбцов «A; Сер. N» с прибора автоматически при нажатии кнопки  на панели управления программы или вручную. Возможности редактирования данных в таблице результатов измерений аналогичны описанным ранее для страницы «Градуировка».
- Имеется возможность оперативно удалять и добавлять строки в таблице измерений, а также удалять пустые строки между измерениями. Эти действия производятся с помощью контекстного меню, вызываемого щелчком правой кнопки мыши на таблице (Рисунок 10). Однако следует помнить, что в таблице измерений не может быть более 20-ти образцов. По достижении этого количества, соответствующий пункт меню блокируется, и дальнейшее добавление образцов невозможно.

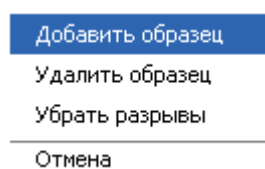


Рисунок 10 – Контекстное меню таблицы измерений.

5.4. Панель состояния

При установленной связи с прибором в левой части панели состояния обычно отображается наименование модели прибора и спектральная ширина щели, далее - имя файла данных, если данные сохранены или загружены из файла. Правее могут появляться следующие сообщения:

- **Внимание! Слишком высокое значение пропускания образца.** – появляется, если значение пропускания установленного образца T больше 100,3% (оптическая плотность A менее -0,001). Данное сообщение является предупредительным. Оно не требует от пользователя никаких действий и исчезает, как только значение вернётся в допустимый диапазон.
- **Ошибка! Установите раствор сравнения и выполните калибровку 0A/100%T.** – появляется, если динамический диапазон, установленный калибровкой, недопустимо мал. Это происходит если, например, выполнено обнуление при установленном образце, имеющем слишком высокую оптическую плотность. Следует выполнить указанные действия.
- **Ошибка! Выполните компенсацию темнового тока.** – появляется, если ток фотоприёмника при прохождении через образец светового потока или при перекрытии светового потока меньше зафиксированного значения темнового тока. Следует выполнить указанные действия.

6. Настройка программы

6.1. Подключение прибора к компьютеру

Прибор подключается к компьютеру стандартным кабелем USB A – USB B для периферийных устройств. В дальнейшем нет необходимости отсоединять кабель от прибора. Всегда запускайте программу только после включения прибора, его прогрева и выхода на рабочий режим.

6.2. Настройка порта

Обычно при первом запуске программа сама находит присоединённый к компьютеру прибор, и нет необходимости в настройке соединения.

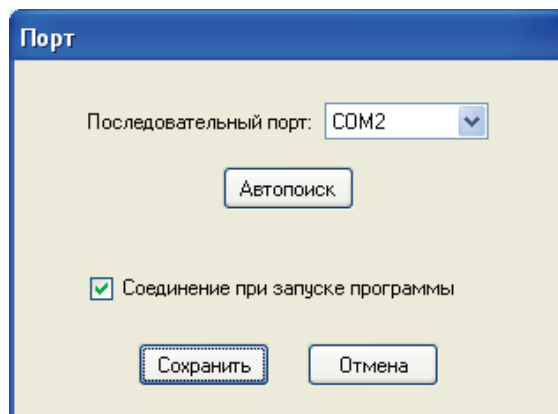


Рисунок 11 – Окно настройки последовательного порта.

Если по каким-либо причинам этого не произошло, имеется возможность настроить параметры соединения вручную. После присоединения, включения и окончания прогрева прибора запустите программу QA5300 и выберите пункт главного меню «Прибор» > «Настройка порта» (кнопка  на панели инструментов). На экране появится окно «Порт» (Рисунок 11).

Нажмите кнопку «Автопоиск» и программа попытается определить номер COM-порта, к которому подключён прибор, и указать его в поле «Последовательный порт».

Также можно непосредственно выбрать номер порта из выпадающего списка «Последовательный порт». Этот номер вы можете узнать, если запустите «Диспетчер устройств» Windows и развернёте ветку «Порты (COM и LPT)» (прибор должен быть присоединён). Найдите устройство «Silicon Labs CP210x USB to UART Bridge», рядом в скобках будет указан нужный номер порта (Рисунок 12).

Если отметить чекбокс «Соединение при запуске программы», программа будет автоматически устанавливать связь с прибором при запуске. В противном случае установку и разрыв связи с прибором нужно будет выполнять вручную через пункт главного меню «Прибор» > «Подключить/Отключить» (кнопка  на панели инструментов). Нажмите кнопку «Сохранить» для сохранения выполненных настроек.

Примечание: Если не удаётся обнаружить порт, к которому присоединён прибор, необходимо ещё раз убедиться в том, что установлен драйвер виртуального COM-порта, USB-кабель исправен и правильно подключён, а также в том, что прибор включён и находится в режиме измерения.

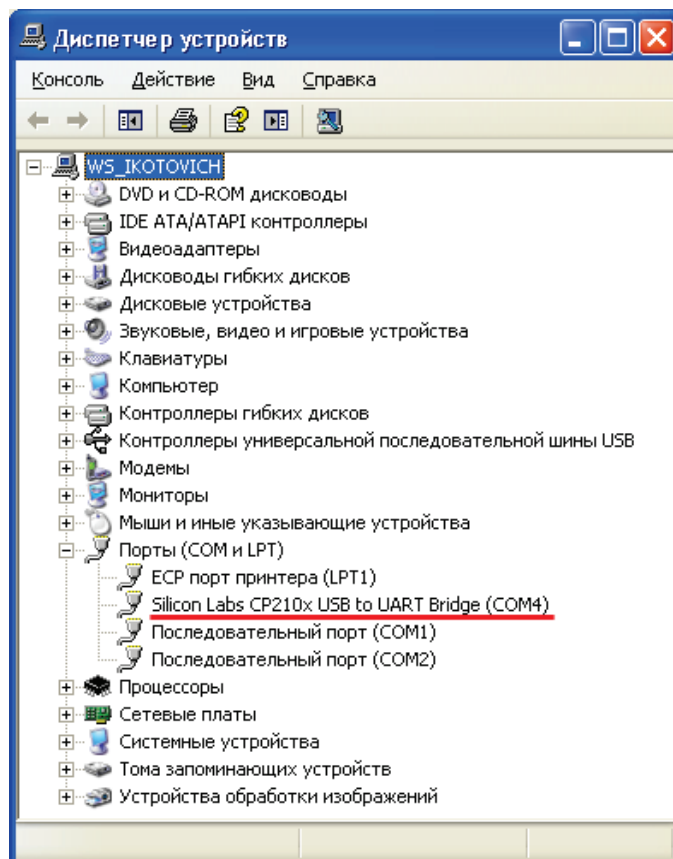


Рисунок 12 – Номер последовательного порта.

6.3. Информация о приборе

В программе имеется возможность вносить и хранить некоторые сведения о спектрофотометре. В дальнейшем эти сведения будут отражаться в протоколах измерений. Окно для ввода и просмотра информации о приборе (Рисунок 13) можно вызвать через пункт главного меню «Прибор» > «Информация» (кнопка  на панели инструментов).

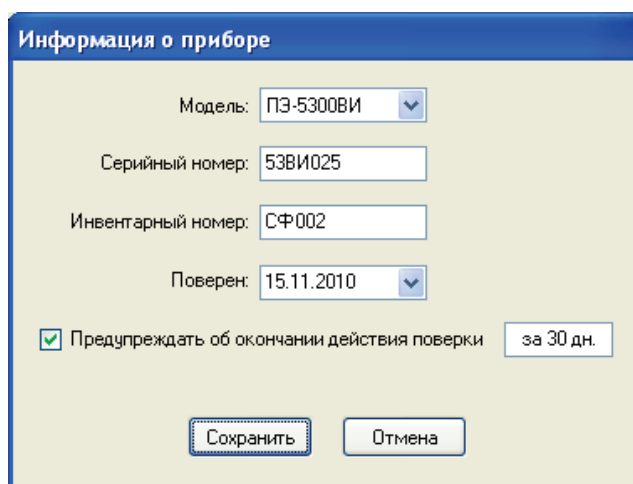


Рисунок 13 – Окно сведений о приборе.

Вводятся следующие параметры:

- **Модель.** Выбирается из выпадающего списка. Обратите внимание на то, что если модель прибора будет задана неправильно, то программа может ограничить рабочий диапазон длин волн прибора значениями, соответствующими выбранной модели.
- **Серийный номер.** Заводской номер прибора. Отображается в протоколах.

- **Инвентарный номер.** Отображается в протоколах.
- **Поверен.** Дата поверки прибора. Отображается в протоколах.
- **Предупреждать об окончании действия поверки.** Если установлен этот флаг, то при запуске, начиная с указанного числа дней до истечения срока поверки, программа будет выводить напоминание. Нажмите кнопку «Сохранить», чтобы записать сделанные изменения или кнопку «Отмена», чтобы отказаться от них.

7. Управление прибором

После установки связи программы со спектрофотометром, на дисплее прибора отображается сообщение «Связь с ПК...». В этом режиме кнопки прибора не действуют, доступна только установка длины волны. Все остальные операции производятся из программы с помощью кнопок панели управления (Рисунок 5). Элементы управления спектрофотометром описаны в пункте 5.2.5 настоящего Руководства.

7.1. Калибровка нуля оптической плотности

Для выполнения процедуры, поместите в зону измерения кювету с раствором сравнения, закройте крышку кюветного отделения и нажмите кнопку  на панели управления.

7.2. Компенсация темнового тока

Данную процедуру рекомендуется выполнять после прогрева прибора, время от времени в процессе работы, при изменении внешних условий и перед ответственными измерениями. Для этого поместите в рабочую зону кюветного отделения заглушку, перекрывающую световой пучок, закройте крышку и нажмите кнопку  на панели управления.

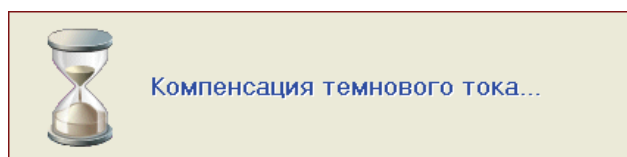


Рисунок 14 – Окно ожидания.

Операция может занимать до 30 секунд. Во время её выполнения на экране отображается соответствующая надпись (Рисунок 14). По завершении операции необходимо поместить в зону измерения кювету с раствором сравнения и выполнить калибровку нулевого значения оптической плотности (100% пропускания).

8. Градуировка

8.1. Задание параметров градуировки

Перед тем как приступить к выполнению градуировки, необходимо задать все ее параметры. Для этого должна быть открыта страница «Градуировка» основной панели. Окно задания параметров градуировки (Рисунок 15) можно вызвать двумя способами: через пункт главного меню «Файл» > «Новый» (кнопка  панели инструментов) или через пункт «Анализ» > «Параметры» (кнопка  панели инструментов). В первом случае окно откроется с параметрами по умолчанию, а во втором, если до этого уже была открыта градуировка, то с параметрами этой градуировки.

Задаются следующие параметры градуировки:

- **Описание.** Любой текст, поясняющий назначение градуировки, длиной до 255 символов. Отображается в панели предварительного просмотра окна загрузки из файла ранее выполненной градуировки.

- **Действие.** Дата создания и срок действия градуировки. Дата создания также отображается в панели предварительного просмотра окна загрузки из файла ранее выполненной градуировки.
- **Длина волны.** Длина волны в нанометрах, на которой выполняется градуировка.
- **Концентрация.** Наименование единицы концентрации (до 255 символов), выбираемое из выпадающего списка или вводимое вручную и число знаков после запятой (от 0 до 6).
- **Аппроксимация.** Выбор одного из четырёх видов аппроксимации градуировочной зависимости: линейной, проходящей через начало координат, линейной, квадратичной (параболической) или степенной. Для линейной аппроксимации требуется не менее двух стандартных образцов в серии, а для квадратичной – не менее трёх.

Рисунок 15 – Окно задания параметров градуировки.

- **Зависимость.** Тип градуировочного уравнения: зависимость оптической плотности от концентрации $A(C)$, как предписывается большинством нормативных документов, или зависимость концентрации от оптической плотности $C(A)$, как реализовано во внутреннем программном обеспечении спектрофотометра. Второй тип уравнения можно использовать для перенесения в программу градуировок, выполненных на спектрофотометре без подключения к компьютеру или созданных с помощью предыдущей версии программного обеспечения, поставлявшегося вместе с прибором.
- **Способ.** Задание коэффициентов градуировочного уравнения: автоматическим расчётом значений коэффициентов после измерения образцов с известной концентрацией анализируемого вещества (стандартных образцов – СО) или прямым вводом ранее полученных значений. В первом случае необходимо ввести количество серий параллельных измерений и количество стандартных образцов с известными концентрациями в серии. Во втором – от одного до трех значений коэффициентов в зависимости от выбранного вида аппроксимации.
- **Концентрации стандартных образцов.** Вводятся в случае построения градуировки по стандартным образцам в порядке возрастания концентрации.
- **Использовать контрольный образец (C=0).** Выбирается, если методика выполнения измерений требует использования результата контрольного опыта (контрольного образца). В этом случае в качестве раствора сравнения применяется дистиллированная вода, а затем при расчёте коэффициентов градуировочного уравнения из каждого измеренного значения оптической плотности стандартных образцов вычитается значение оптической плотности контрольного образца.
- **Оптическая длина кюветы.** Справочная информация для удобства пользователя. В расчётах не применяется. Может быть выбрана из выпадающего списка или введена вручную (до 15 символов).

- **Погрешность методики.** Справочная величина, которая будет отражена в протоколах измерений.

После задания всех параметров градуировки нажмите кнопку «Сохранить». При этом окно задания параметров градуировки закроется. В зависимости от способа задания коэффициентов градуировочного уравнения, далее можно либо сохранить градуировку и переходить к выполнению измерений проб, либо приступить к измерению стандартных образцов. Во втором случае таблица результатов измерений на странице «Градуировка» будет очищена, и в неё будут внесены значения концентраций стандартных образцов.

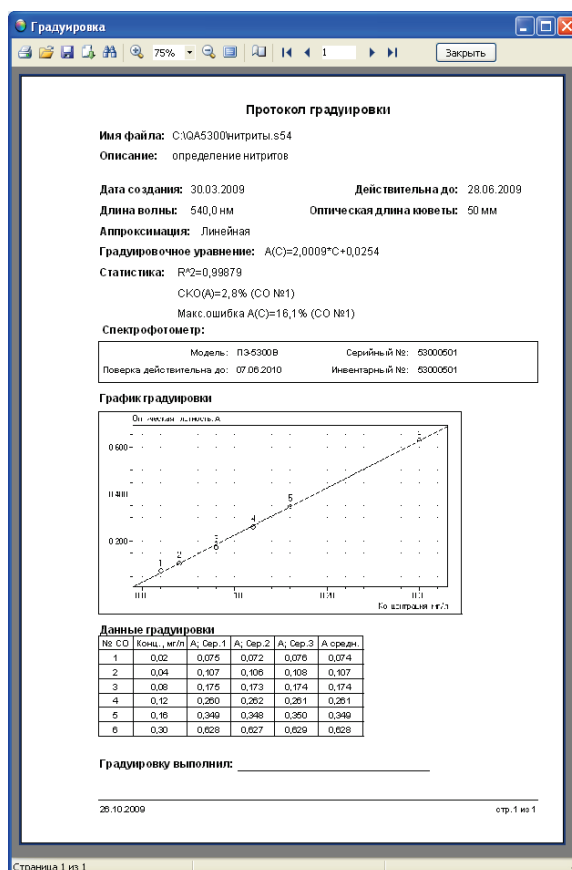


Рисунок 16 – Окно предварительного просмотра и печати протокола градуировки.

8.2. Измерение стандартных образцов

- Измерения выполняются в соответствии с руководством по эксплуатации спектрофотометра. Полученные значения вносятся в выделенные ячейки таблицы результатов измерений автоматически при нажатии кнопки  на панели управления программы.
- После выполнения последнего измерения, программа автоматически рассчитывает коэффициенты градуировочного уравнения, статистические характеристики градуировки и строит градуировочный график. При этом становятся доступными элементы панели параметров градуировки – 2, с помощью которых можно оперативно изменять основные параметры градуировки и кнопка изменения масштаба графика – .
- Для того чтобы приступить к выполнению измерений на основе выполненной градуировки необходимо сохранить её в файл. Сохранение градуировки следует производить каждый раз при любом изменении её параметров с помощью элементов панели параметров градуировки – 2.

8.3. Сохранение градуировки

Для сохранения созданной градуировки в файл необходимо воспользоваться кнопкой  панели инструментов. При этом на экран будет выведено стандартное диалоговое окно сохранения файла.

Допускается сохранение незаконченной градуировки с тем, чтобы впоследствии завершить ее выполнение.

После сохранения градуировки имя файла отображается в панели состояния.

8.4. Печать протокола градуировки

В программе имеется возможность печати протокола созданной градуировки. Печать протокола доступна, если заданы параметры градуировки, а для градуировки по стандартным образцам также выполнены все измерения. Окно предварительного просмотра и печати протокола (Рисунок 16) вызывается с помощью команды главного меню «Файл» > «Печать» (кнопка  панели инструментов).

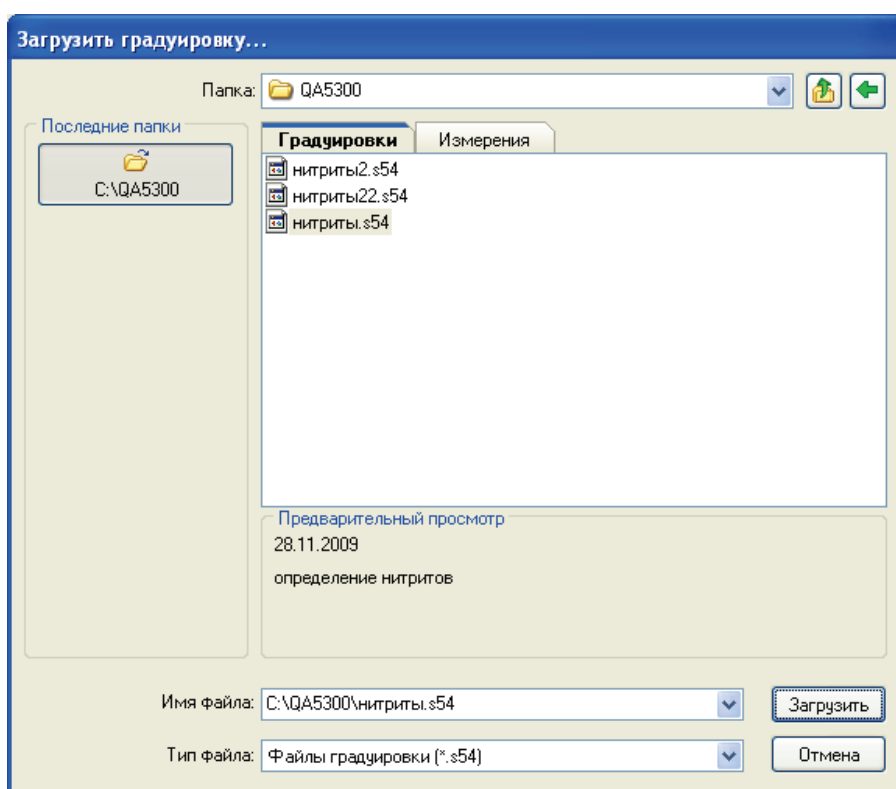


Рисунок 17 – Окно загрузки данных из файла.

8.5. Загрузка градуировки из файла

Чтобы загрузить ранее созданную и сохранённую градуировку из файла необходимо находясь на странице «Градуировка» воспользоваться командой главного меню «Файл» > «Открыть» (кнопка  панели инструментов). Откроется окно загрузки (Рисунок 17).

Для загрузки градуировки в поле «Тип файла» должен быть выбран пункт «Файлы градуировки (*.s54)». При выделении в окне файла градуировки, в поле «Предварительный просмотр» отображаются описание и дата создания градуировки, содержащейся в данном файле.

После загрузки имя файла отображается в панели состояния.

8.6. Экспорт таблицы результатов в формате MS Excel™

Таблица результатов измерений стандартных образцов может быть экспортирована в файл Microsoft®

Excel™ той версии, которая установлена на ПК. Если приложение не установлено, то попытка выполнения данной операции приведёт к ошибке.

Выполнить экспорт можно воспользовавшись пунктом главного меню «Файл» > «Экспорт» (кнопка  панели инструментов). При этом откроется стандартное диалоговое окно сохранения файла, в котором необходимо задать имя файла.

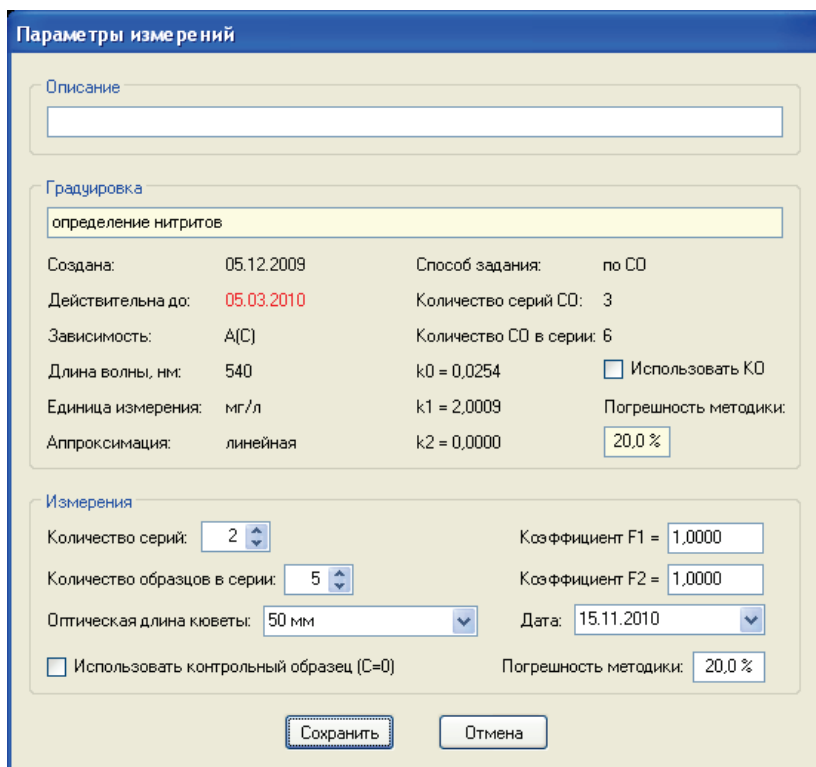
9. Измерения

9.1. Выбор градуировки

Измерения проводятся на основе ранее созданной градуировки. Поэтому чтобы перейти на страницу «Измерения» и приступить к заданию параметров измерений, необходимо чтобы на странице «Градуировка» была открыта законченная сохранённая градуировка.

9.2. Задание параметров измерений

Параметры измерений задаются в окне параметров измерений (Рисунок 18), вызываемом с помощью пункта главного меню «Файл» > «Новый» (кнопка  панели инструментов) при открытой странице «Измерения». В этом случае окно открывается с параметрами по умолчанию, даже если до этого уже были заданы какие-то параметры измерений.



Параметры измерения			
Описание			
Градуировка			
определение нитритов			
Создана:	05.12.2009	Способ задания:	по СО
Действительна до:	05.03.2010	Количество серий СО:	3
Зависимость:	A(C)	Количество СО в серии:	6
Длина волны, нм:	540	k0 = 0,0254	☐ Использовать КО
Единица измерения:	мг/л	k1 = 2,0009	Погрешность методики:
Аппроксимация:	линейная	k2 = 0,0000	20,0 %
Измерения			
Количество серий:	2	Коэффициент F1 =	1,0000
Количество образцов в серии:	5	Коэффициент F2 =	1,0000
Оптическая длина кюветы:	50 мм	Дата:	15.11.2010
☐ Использовать контрольный образец (C=0)		Погрешность методики:	20,0 %
Сохранить Отмена			

Рисунок 18 – Окно параметров измерений.

Окно параметров также можно вызвать через пункт главного меню «Анализ» > «Параметры» (кнопка  панели инструментов). При этом если ранее уже были заданы параметры измерений, то окно откроется с этими параметрами.

В данном окне отображаются следующие параметры:

- **Описание.** Любой текст, поясняющий назначение измерений, длиной до 255 символов. Отображается в панели предварительного просмотра окна загрузки из файла ранее выполненных измерений.
- **Градуировка.** Справочная информация. Параметры градуировки, выбранной для проведения из-

мерений.

- **Количество серий.** Число серий параллельных измерений (от 1 до 10).
- Количество образцов в серии. До 20-ти образцов.
- **Оптическая длина кюветы.** По умолчанию устанавливается величина из параметров градуировки. Может быть изменена пользователем.
- **Коэффициенты F1 и F2.** Задаются пользователем для определения специфических условий измерения – разбавление и т.п. Измеренные величины оптической плотности образцов последовательно умножаются на эти коэффициенты. По умолчанию равны единице, что исключает их влияние на расчёты.
- **Дата.** Дата выполнения измерений.
- **Использовать контрольный образец (C=0).** Параметр, равный заданному для градуировки. Не может быть изменён.
- **Погрешность методики.** По умолчанию равна погрешности, заданной для градуировки. Может быть изменена для текущего измерения.

После задания параметров измерений нажмите кнопку «Сохранить». Окно параметров измерений закроется, а таблица результатов измерений на странице «Измерения» будет очищена и сконфигурирована под заданное количество серий и образцов. Теперь можно приступать к выполнению измерений.

9.3. Выполнение измерений

Измерения производятся в соответствии с методикой и руководством по эксплуатации спектрофотометра. Результаты измерений вносятся в соответствующие ячейки таблицы результатов измерений как указано выше (пункт «[Таблица результатов измерений](#)»).

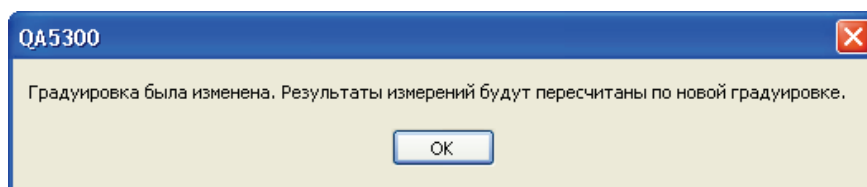


Рисунок 19 – Предупреждение о пересчёте результатов измерений.

При этом автоматически рассчитываются и вносятся в соответствующие ячейки таблицы следующие величины: значение концентрации, средняя концентрация по параллельным измерениям и сходимость по параллельным измерениям – **d** в процентах. Если задана величина «Погрешность методики», то средние концентрации выводятся в таблице с указанием соответствующей погрешности.

Как в процессе выполнения измерений, так и после загрузки готового файла измерений имеется возможность перейти на страницу «Градуировка» и внести изменения в параметры градуировки или даже загрузить другую ранее созданную градуировку из файла. В этом случае при возвращении на страницу «Измерения» будет выдано предупреждение (Рисунок 19), и все результаты измерений будут пересчитаны в соответствии с новой градуировкой.

9.4. Сохранение результатов измерений

Для сохранения результатов измерений в файл необходимо воспользоваться кнопкой  панели инструментов. При этом на экран будет выведено стандартное диалоговое окно сохранения файла.

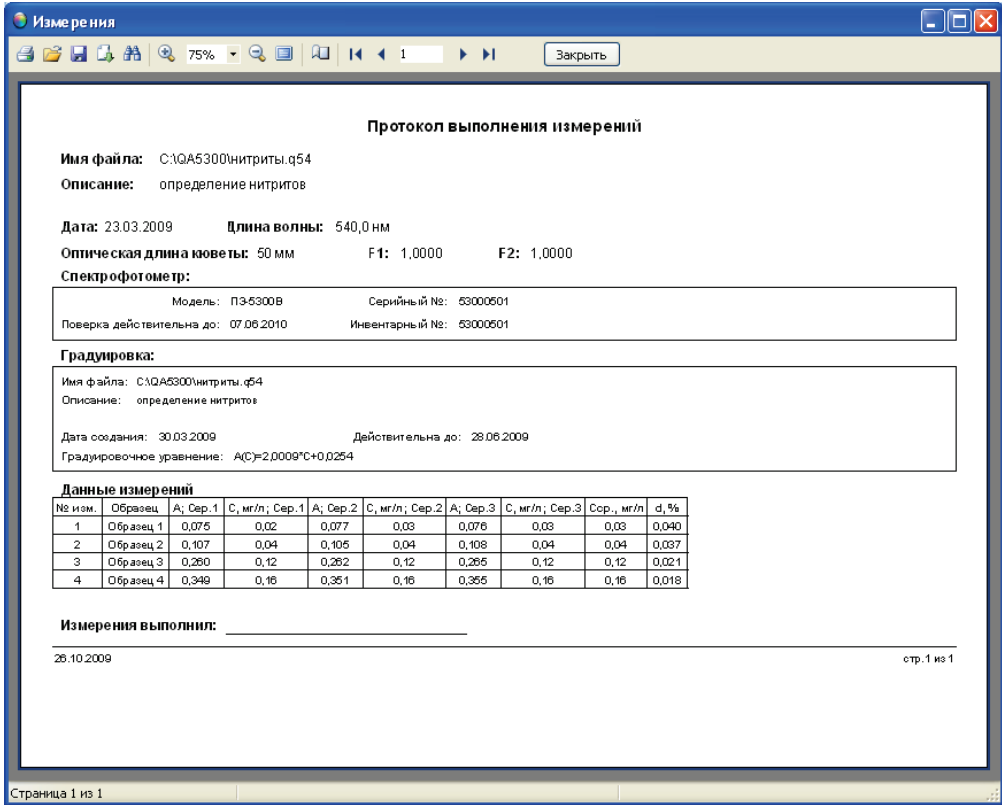
Вместе с результатами измерений в этом же файле сохраняется и градуировка, по которой они проводились.

Допускается сохранение незаконченных измерений с тем, чтобы впоследствии завершить их выполнение.

После сохранения градуировки имя файла отображается в панели состояния.

9.5. Печать протокола выполнения измерений

Печать протокола (Рисунок 20) вызывается с помощью команды главного меню «Файл» > «Печать» (кнопка  панели инструментов).



Измерения

Протокол выполнения измерений

Имя файла: C:\QA5300\нитриты.q54
Описание: определение нитритов

Дата: 23.03.2009 Длина волны: 540,0 нм
Оптическая длина кюветы: 50 мм F1: 1,0000 F2: 1,0000

Спектрофотометр:

Модель: ПЗ-5300В	Серийный №: 53000501
Проверка действительна до: 07.06.2010	Инвентарный №: 53000501

Градуировка:

Имя файла: C:\QA5300\нитриты.q54
Описание: определение нитритов

Дата создания: 30.03.2009 Действительна до: 28.06.2009
Градуировочное уравнение: $A(C) = 2,0009 \cdot C + 0,0254$

Данные измерений

№ изм.	Образец	A, Сер.1	C, мг/л; Сер.1	A, Сер.2	C, мг/л; Сер.2	A, Сер.3	C, мг/л; Сер.3	Cсер., мг/л	d, %
1	Образец 1	0,075	0,02	0,077	0,03	0,076	0,03	0,03	0,040
2	Образец 2	0,107	0,04	0,105	0,04	0,108	0,04	0,04	0,037
3	Образец 3	0,260	0,12	0,262	0,12	0,265	0,12	0,12	0,021
4	Образец 4	0,349	0,16	0,351	0,16	0,355	0,16	0,16	0,018

Измерения выполнил: _____

25.10.2009 стр. 1 из 1

Страница 1 из 1

Рисунок 20 – Окно предварительного просмотра и печати протокола измерений.

9.6. Загрузка результатов измерений из файла

Окно загрузки (Рисунок 17) вызывается с помощью команды главного меню «Файл» > «Открыть» (кнопка  панели инструментов). Если открыта страница «Измерения», то нужный тип файла выбран по умолчанию. Однако если градуировка не загружена, то страница «Измерения» недоступна, и тогда необходимо находясь на странице «Градуировка» в окне загрузки в поле «Тип файла» выбрать пункт «Файлы результатов измерений (*.q54)» или активизировать закладку «Измерения». Отобразятся доступные для загрузки файлы измерений. При их выделении, в поле «Предварительный просмотр» окна загрузки отобразятся описание и дата создания измерений, содержащихся в данном файле. После загрузки имя файла отображается в панели состояния.

9.7. Экспорт таблицы результатов в формате MS Excel™

Таблица результатов измерений может быть экспортирована в файл Microsoft® Excel™.

Экспорт производится с помощью пункта главного меню «Файл» > «Экспорт» (кнопка  панели инструментов). При этом откроется стандартное диалоговое окно сохранения файла, в котором необходимо задать имя файла.

10. Дополнительная информация

10.1. Математические расчёты

При построении градуировки:

1. После измерения всех заданных точек градуировки находятся среднеарифметические значения **A**

для каждого образца (каждой концентрации) по параллельным измерениям.

2. По методу наименьших квадратов производится аппроксимация полученных пар точек "концентрация - средняя оптическая плотность" линейной зависимостью, проходящей через 0 ($Y=k \cdot X$), линейной зависимостью ($Y=k_0 \cdot X + k_1$), квадратичной (параболической) зависимостью ($Y=k_0 + k_1 \cdot X + k_2 \cdot X^2$) либо степенной зависимостью ($Y=k_0 \cdot X^{k_1}$) в зависимости от выбранного вида аппроксимации. То есть, находятся коэффициенты регрессии.
3. Вычисляется коэффициент детерминации R^2 для полученной регрессии. В частном случае он равен квадрату коэффициента корреляции и показывает, насколько хорошо вычисленная зависимость описывает полученную на практике зависимость между измеренными данными. Изменяется в диапазоне от 0 до 1. Чем полученное значение ближе к единице, тем лучше.
4. Вычисляется среднеквадратическое отклонение (СКО). Если количество параллельных измерений (серий) меньше 3-х, то СКО не имеет математического смысла и не вычисляется (появляется надпись "СКО(A) - неприменимо для $N_{сер} < 3$ ").
5. По полученной в пункте 2 зависимости вычисляются расчётные значения **A** для каждой концентрации (образца) и сравниваются с измеренными (находится разница в процентах). Определяется, для какого образца она максимальная, и выводится соответствующая надпись: "Макс. ошибка A(C)=56,4% (CO №1)". Значение ошибки для каждой точки на графике можно увидеть, если навести на неё курсор мыши.

На счёт допустимости тех или иных отклонений никаких общих правил нет. Все требования содержатся в конкретных методиках измерений. Вышеперечисленные значения рассчитываются программой потому, что именно они требуются в большинстве методик.

При выполнении измерений:

1. По параллельным измерениям каждого образца по градуировочному уравнению рассчитываются концентрации, и находится средняя величина концентрации **Сср**.
2. Если задана величина «Погрешность методики» в процентах, то для средних концентраций рассчитываются и выводятся в таблице соответствующие погрешности в единицах этих концентраций.
3. Для вычисления сходимости d берутся максимальная C_{max} и минимальная C_{min} полученные концентрации из параллельных измерений. $d = 2 \cdot (C_{max} - C_{min}) / (C_{max} + C_{min}) \cdot 100\%$.

10.2. Обновление программы через интернет

Если компьютер подключён к интернету, то имеется возможность обновления программы через интернет. Проверка наличия обновлений производится автоматически вскоре после запуска программы. Если обновления отсутствуют, то никаких сообщений не выдаётся.

Выполнить проверку наличия обновлений также можно вручную через пункт главного меню «Справка» > «Обновление» или с помощью кнопки  панели инструментов.

10.3. Обновление микропрограммы прибора

Производитель постоянно совершенствует внутреннее программное обеспечение прибора, поэтому в некоторых случаях может понадобиться его обновление с использованием бинарного файла, поставляемого производителем.

Для выполнения обновления воспользуйтесь пунктом меню «Прибор» > «Микропрограмма». На экране появится окно «Обновление микропрограммы» (Рисунок 21).

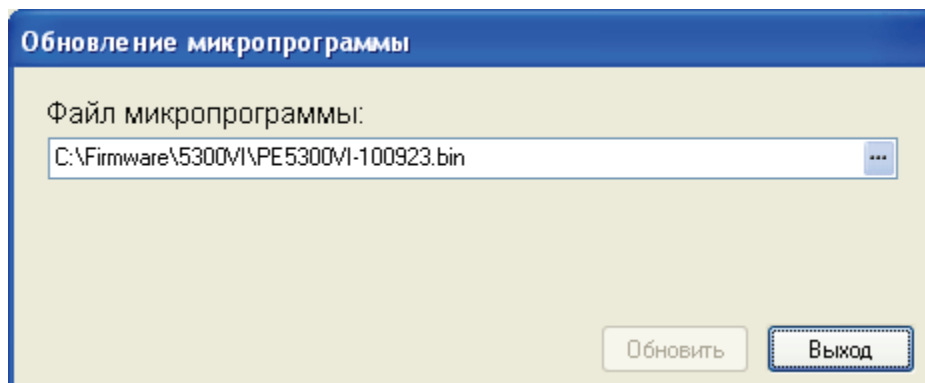


Рисунок 21 – Окно обновления микропрограммы.

При нажатии кнопки в правой части поля «Файл микропрограммы» откроется диалог выбора файла. Укажите файл с микропрограммой, поставленный производителем и нажмите кнопку «Обновить». Начнётся процесс обновления микропрограммы (Рисунок 22). При этом на дисплее прибора появится надпись «Updating...».

По окончании процесса будет выдано сообщение об успешной загрузке, произведено отключение программы от прибора, и прибор начнёт перезагрузку. Следует закрыть окно обновления, дождаться выхода прибора в рабочий режим и вновь установить связь с помощью пункта главного меню «Прибор» > «Подключить/Отключить» (кнопка  на панели инструментов).

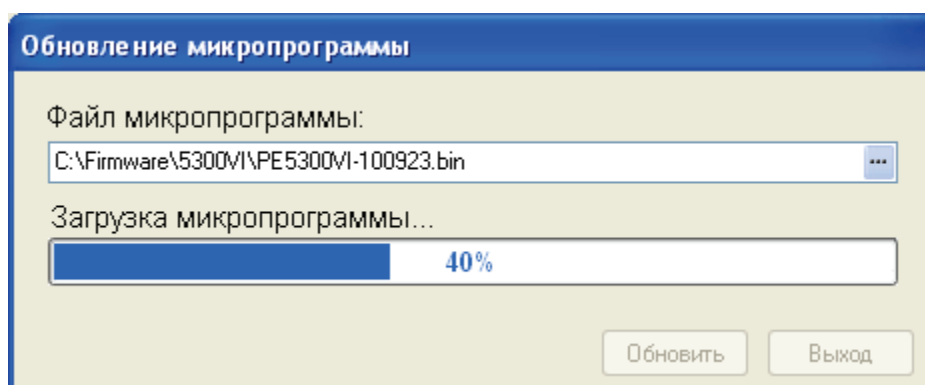


Рисунок 22 – Загрузка микропрограммы.

Внимание!

- Процесс обновления микропрограммы это очень ответственная операция, неудачное выполнение которой может привести к выходу прибора из строя, поэтому выполнять её следует только опытным пользователям или техническим специалистам, предварительно ознакомившимся с данной инструкцией.
- Во время выполнения обновления микропрограммы не следует запускать на компьютере другие приложения или нажимать на кнопки прибора.
- Ни в коем случае не прерывайте загрузку и не выключайте питание компьютера и прибора.
- Если во время загрузки микропрограммы произошёл сбой и получено сообщение об ошибке, то следует немедленно отключить питание прибора и закрыть окно обновления. Если после включения питания прибор не проходит загрузку, следует обратиться в авторизованный сервисный центр производителя.

10.4. Возможности окна предварительного просмотра и печати протоколов

Окно предварительного просмотра и печати (Рисунок 16, Рисунок 20) обеспечивает некоторые дополни-

тельные возможности. Управление ими осуществляется через панель инструментов окна (Рисунок 23).



Рисунок 23 – Панель инструментов окна предварительного просмотра и печати.

Элементы панели имеют следующее назначение:



– кнопка «Печать». Открывает стандартный диалог печати Windows, в котором можно задать параметры печати.



– кнопка «Открыть». Открытие файла протокола, предварительно сохранённого из этого же окна в формате «*.fp3» командой «Сохранить».



– кнопка «Сохранить». Сохранение текущего протокола в оригинальном формате «*.fp3».



– кнопка «Экспорт». Экспорт текущего протокола в файл формата «*.rtf» или «*.pdf».



– кнопка «Найти». Открывает окно поиска вводимого текста на страницах протокола.

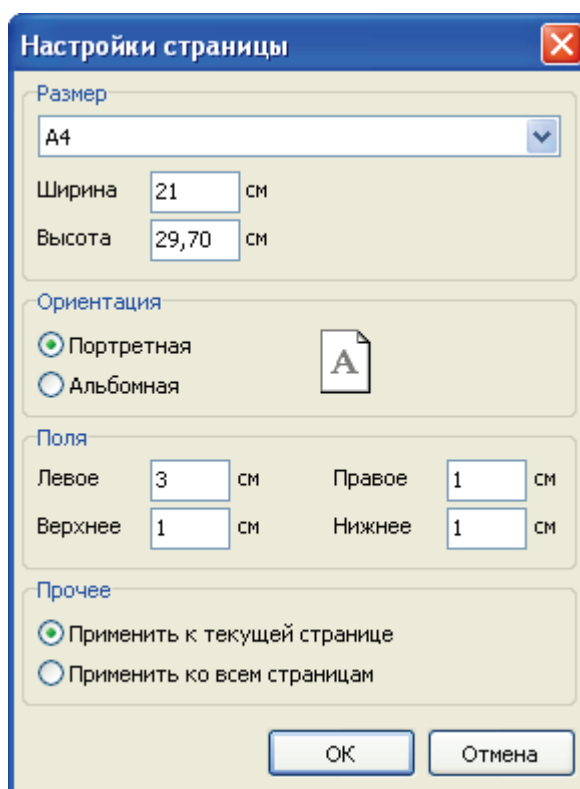
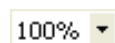


Рисунок 24 – Окно настройки страницы.



– кнопка «Увеличить». Увеличивает масштаб отображения страницы протокола в окне.



– поле «Масштаб». Позволяет из выпадающего списка выбрать масштаб отображения страницы протокола в окне.



– кнопка «Уменьшить». Уменьшает масштаб отображения страницы протокола в окне.



– кнопка «Во весь экран». Включает полноэкранный режим просмотра протокола.



– кнопка «Свойства страницы». Открывает окно настройки страницы (Рисунок 24), с помощью которого можно задать основные свойства страницы для печати.



– кнопка «На первую страницу». В случае многостраничного документа отображает в окне его первую страницу.



– кнопка «На предыдущую страницу». Отображает предыдущую страницу протокола.

– поле «Номер страницы». Показывает номер текущей страницы протокола. В данное поле можно ввести нужный номер страницы, и после нажатия клавиши «Enter» страница с этим номером будет отображена в окне просмотра.

 – кнопка «На следующую страницу». Отображает следующую страницу протокола.

 – кнопка «На последнюю страницу». Переход на последнюю страницу многостраничного протокола.

 – кнопка «Заккрыть». Закрывает окно просмотра и печати протокола.

Большая часть этих команд также доступна через контекстное меню, вызываемое щелчком правой кнопки мыши (Рисунок 25).

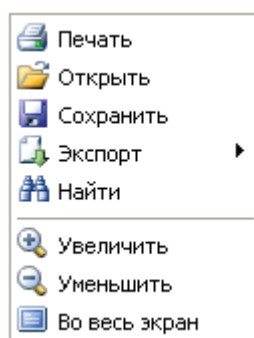


Рисунок 25 – Контекстное меню окна предварительного просмотра и печати.

10.5. Техническая поддержка

По вопросам работы с программным обеспечением обращайтесь:

ООО «ЭКРОСХИМ», www.ecohim.ru

Служба науки и развития

Котович Игорь Владимирович

Телефон: (812) 448-2830

Факс: (812) 448-2848

Мобильный: +7 921 913-7484

E-mail: kotovich@ecohim.ru