

Программное обеспечение МультиХром версии 3.4

Хеометрический пакет Описание и инструкция

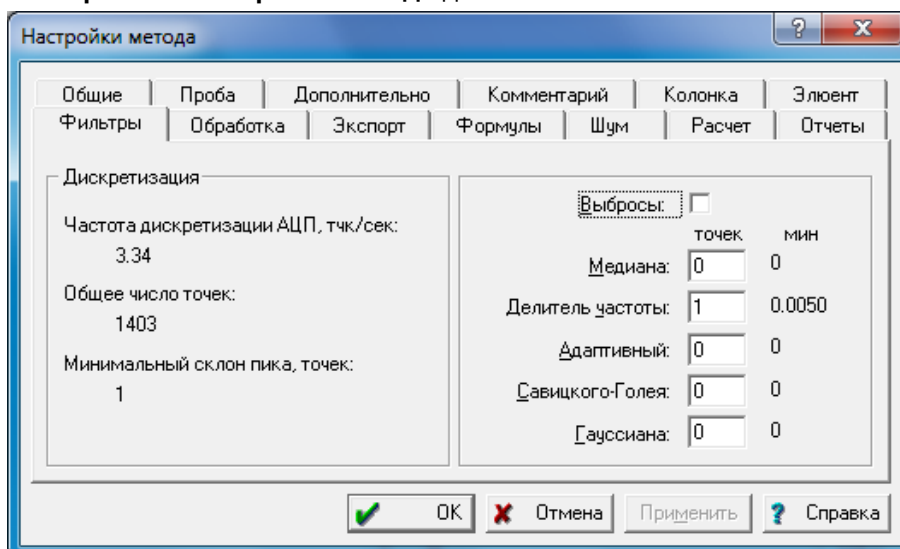
АМПЕРСЕНД
2022

Оглавление

Фильтрация сигнала	3
Экспоненциально-модифицированная функция Гаусса	5
Разделение смежных хроматографических пиков	6
Инициализация	6
Аппроксимация функцией Гаусса	7
Аппроксимация экспоненциально-модифицированной функцией Гаусса	7
Аппроксимация функцией, подобной образцовому пику	7
Итерации	8
Параметры, изменяемые при итерациях	8
Завершение	9
Результаты гаусс-разложения	10
Как добавить собственный столбец в Таблицу пиков	11
Как создать формулу для расчета параметра	11
Дополнительный параметр	13

Фильтрация сигнала

Лист **Фильтры** окна **Настройка метода** делится на 2 области.



В левой области представлены следующие сведения:

Частота дискретизации АЦП – частота приема данных, заданная в драйвере АЦП;

Общее число точек – полное число точек во всей хроматограмме;

Минимальный склон пика – минимальное число точек от базы до вершины, обнаруженное для какого-либо из размеченных пиков.

В правой области расположены поля для ввода параметров фильтрации.

Фильтр *одиночных выбросов* (флажок **Выбросы**) изменяет первую и последнюю точку хроматограммы, а также точки, идентифицированные как одиночные выбросы. Одиночный выброс заменяется половиной суммы значений для двух соседних точек. Фильтр одиночных выбросов не искажает форму хроматографических пиков. Его целесообразно использовать практически всегда, даже при отсутствии видимых выпадающих точек, так как он корректирует первую и последнюю точки, нередко имеющие экстремальные значения, которые при использовании опции **Показать все** задают масштабирование, далекое от оптимального для рабочей области хроматограммы.


При использовании фильтров **Медиана**, **Адаптивный**, **Савицкого-Голея**, **Гауссиана** для каждой точки хроматограммы производится замена измеренного значения величиной, полученной путем обработки измерений для группы ближайших точек, число которых задается величиной *щели*. Алгоритм обработки определяется типом фильтра.

Фильтр **Медиана**. При медианной фильтрации значения в пределах щели сортируются в порядке возрастания. Отклик, соответствующий середине щели, заменяется другим значением, попадающим в центр отсортированного массива. Этот метод хорошо сглаживает базовую линию, не меняет форму пика на склонах и очень эффективно устраняет отдельные выбросы (в этом случае выброс заменяется на одну из соседних точек). Однако он слегка "приглаживает" вершины пиков и ложбины между пиками и может изменять как высоту, так и площадь хроматографических пиков.

В число фильтров включен **Делитель частоты**. Его действие состоит в замене группы точек, число которых задается в соответствующем поле, одной точкой со средним значением сигнала для этих точек. При этом эффективная величина отношения сигнал/шум возрастает примерно, как квадратный корень из делителя. Использовать делитель частоты без искажения пиков можно только в том случае, если полученное при этом значение параметра **Минимальный склон пика** будет не менее 10.

Фильтр **Адаптивный** использует оригинальный алгоритм предельного подавления шумов, разработанный в ООО «Амперсенд». При этом обеспечивается:

- минимальный доверительный интервал для каждой точки;
- максимальное подавление шума, без повреждения формы пика;
- правильная обработка резких изменений сигнала;
- правильные оценки ошибок измерения высоты и площади пика.

 Адаптивный фильтр доступен при включении соответствующей опции в лицензию.

Фильтр **Савицкого-Голея**. Применение этого фильтра состоит в построении методом наименьших квадратов аппроксимирующего полинома для точек в пределах щели и заменой измерения для центральной точки расчетным значением с использованием этого полинома. Этот метод не изменяет форму, величину площади и высоты «нормальных» пиков, однако вносит значительные искажения при обработке участков с резкими перепадами амплитуды сигнала.

Фильтр **Гауссиана**. В случае использования этого фильтра вычисляется среднее взвешенное значение всех точек в пределах щели с весом, распределенным по функции Гаусса с центром в середине щели, результат используется как новое значение сигнала для этой точки. Гауссов фильтр, по сравнению с медианным, дает лучшее визуальное сглаживание собственно пиков, но меньше сглаживает шумы базовой линии. Пики после сглаживания становятся ниже и шире, но их площадь при этом не меняется.

Величина щели для всех перечисленных фильтров задается пользователем и может быть только нечетным числом больше 1 (максимальное значение 511). При этом:


- если вводится четное число, происходит автоматическое прибавление 1;
- если вводится 1, происходит автоматическая замена на 0 (отсутствие фильтрации).

В качестве первоначальной величины щели рекомендуется установить:

- для пиков с умеренной асимметрией – параметр **Минимальный склон пика** или значение 11, если используется оптимальный делитель частоты¹;
- для пиков с резко выраженной асимметрией (например, для капиллярного электрофореза) – ширину самого узкого пика, оцененную визуально.

Далее следует сравнить результаты фильтрации, которые получаются при изменениях ширины щели в 1.5–2 раза в обе стороны. Учитывая полученный результат, можно продолжить поиск оптимального значения щели.

Выбор фильтров в значительной степени определяется спецификой задачи и производится путем подбора типа фильтра и величины щели. Возможно одновременное использование нескольких фильтров, при этом программа производит обработку хроматограммы последовательно в том порядке, как это представлено в окне **Фильтры** – начиная с применения фильтра отдельных выбросов.

 Применение фильтров имеет обратимый характер: при восстановлении для всех фильтров параметров по умолчанию вновь будут представлены в полном объеме исходные данные хроматограммы, как это требуется согласно GLP.

¹ Для фильтра **Медиана** всегда следует ориентироваться на значение параметра **Минимальный склон пика** без делителя, так как это фильтр применяется до процедуры деления частоты.

Экспоненциально-модифицированная функция Гаусса

Обычно экспоненциально-модифицированная функция Гаусса (ЭМГ) представляется в следующем виде:

$$F(t) = \frac{h \cdot \sigma}{\tau} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot e^{\left(\frac{\sigma^2}{2\tau^2} \cdot \frac{t-\mu}{\tau}\right)} \cdot \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\mu-t+\sigma}{\sigma+\tau}\right)/\sqrt{2}\right) = \frac{h \cdot \sigma}{\tau} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot e^{\left(\frac{\mu-t+\sigma^2}{\tau+2\tau^2}\right)} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{\mu-t+\sigma}{\sigma+\tau}\right)/\sqrt{2} \quad (1)$$

Недостатком такого представления является тот факт, что в представляющих практический интерес случаях можно легко попасть в ситуацию, когда экспонента окажется числом, слишком большим для вычисления в компьютере, а erfc – слишком маленьким, т.е. мы получим неопределенность в виде произведения нуля на бесконечность.

Формула (1) может быть преобразована к иному виду:

$$F(t) = \frac{h \cdot \sigma}{\tau} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot e^{-\frac{(\mu-t)^2}{2\sigma^2}} \cdot \operatorname{erfcx}\left(\frac{\mu-t+\sigma}{\sigma}\right)/\sqrt{2} \quad (2)$$

Тем самым получается очень удобное выражение функции ЭМГ, которое представляет собой произведение исходной «немодифицированной» гауссианы и статистической функции erfcx , вычисляемой теми же математическими библиотеками, что и erf и erfc . Это представление дает возможность вычислять ЭМГ в некоторых из тех случаях, когда не работает формула (1). В то же время (2) не может полностью заменить (1), поскольку у нее есть своя область неопределенности, то есть, обе формулы могут оказаться неприменимыми при большой величине отношения σ/τ . Однако можно показать, что выражение (2) при малых величинах τ стремится к обычной гауссиане:

$$\lim_{\tau \rightarrow +0} F(t, \tau) = h \cdot e^{-\frac{(\mu-t)^2}{2\sigma^2}} \cdot \lim_{\tau \rightarrow +0} \left(\frac{\sigma}{\tau} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot \operatorname{erfcx}\left(\frac{\mu-t+\sigma}{\sigma}\right)/\sqrt{2} \right) = h \cdot e^{-\frac{(\mu-t)^2}{2\sigma^2}} \quad (3)$$

и начиная с некоторых значений этого параметра различия в результатах вычислений по формулам (2) и (3) не выходят за пределы допустимой погрешности.

При выполнении расчетов программой *МультиХром* разделение областей применения формул

(1), (2) и (3) производится по величине параметра $z = \frac{\tau}{|\tau|} \left(\frac{\mu-t}{\sigma} + \frac{\sigma}{\tau} \right)$:

при $z > 6.71 \cdot 10^7$ используется формула (3), $6.71 \cdot 10^7 \geq z \geq 0$ формула (2), $z < 0$ формула (1).

Используемые функции:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad \operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt$$

$$\operatorname{erfcx}(x) = e^{x^2} \operatorname{erfc}(x) = e^{x^2} \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{x^2} \int_x^\infty e^{-t^2} dt$$

$$\operatorname{erfcx}(0) = 1 \quad \lim_{x \rightarrow -\infty} \operatorname{erfcx}(x) = +\infty \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} \operatorname{erfcx}(x) = \lim_{x \rightarrow +\infty} \left(\frac{1}{x\sqrt{\pi}} \right) = 0$$

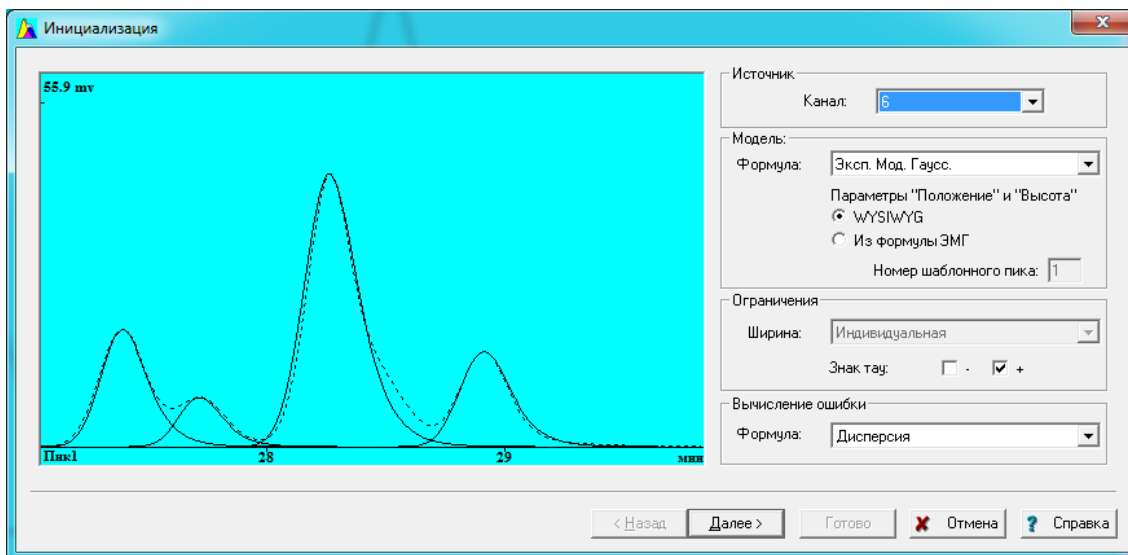
Разделение смежных хроматографических ПИКОВ

Для разделения группы смежных пиков предусмотрена процедура, позволяющая разложить группу на отдельные пики, аппроксимировав их функцией Гаусса, экспоненциально-модифицированной функцией Гаусса или произвольной функцией, задаваемой формой выбранного эталонного пика. Для краткости эта процедура именуется *разложение пиков по форме*.

Для выполнения гаусс-разложения выполните следующее.

- Откройте хроматограмму и выделите с помощью мыши группу смежных пиков, которые требуется разделить. В результате в окне будет представлена только выбранная область. Участок хроматограммы следует выделять таким образом, чтобы на нем полностью помещались выбранные пики, но не попадали вершины других пиков.
- Выберите команду **Обработка/Дополнительно/Разложение пиков по форме**.
 - ♦ Если группа пиков полностью помещается в окне, сразу откроется окно **Инициализация**.
 - ♦ Если начальная и/или конечная точки выбранной группы пиков выходят за пределы окна, появится сообщение: «Пик №... выходит за пределы окна. Увеличить окно? Да/Нет». Нажмите кнопку **Да** – в противном случае пик, не поместившийся в окне, будет исключен из анализа. После этого откроется окно **Инициализация**.

Инициализация



- Если обрабатывается многоканальная хроматограмма, выберите канал, для которого будет проводиться аппроксимация, в списочном поле **Источник/Канал**.
- В списочном поле **Модель/Формула** выберите модель, по которой будет производиться аппроксимация: *Гауссиана*, *Эксп.Мод.Гаусс*, *По образцу* и задайте соответствующие выбранной модели параметры процедуры (см. далее).

Подбор параметров аппроксимирующих функций производится путем минимизации величины ошибки. Способ вычисления ошибки выбирается в списочном поле **Вычисление ошибки/Формула**: *Дисперсия* или *Высота*Дисперсия*. В первом случае программа будет минимизировать величину

$$\sqrt{\sum (y_i - y_{ai})^2}$$

где y_i и y_{ai} – у-координаты точки хроматографического пика и аппроксимирующей кривой соответственно. Во втором – величину

$$\sqrt{\sum y_i (y_i - y_{ai})^2}$$

то есть, во втором случае каждая точка берется с весом, пропорциональным ее у-координате.

Аппроксимация функцией Гаусса

Этот вариант используется для аппроксимации симметричных пиков функцией Гаусса:

$$G(t) = h \cdot e^{-\frac{(T-t)^2}{2\sigma^2}}$$

где h – высота пика, T – позиция (положение максимума), σ – половина ширины по уровню 0.607.

Единственным выбираемым параметром является способ варьирования ширины пиков: она может подбираться индивидуально для каждого пика, иметь одно и то же оптимизированное значение для всех пиков или же оптимизироваться при условии одинаковой эффективности для всех пиков.

- В списочном поле **Ограничения/Ширина** выберите значение *Индивидуальная*, *Одинаковая* или *По эффективности*.

Аппроксимация экспоненциально-модифицированной функцией Гаусса

Этот вариант используется для аппроксимации асимметричных пиков экспоненциально-модифицированной функцией Гаусса (ЭМГ). В ПО МультиХром используются 2 варианта формулы для ЭМГ (см. Экспоненциально-модифицированная функция Гаусса):

$$F(t) = \frac{h \cdot \sigma}{\tau} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot e^{\left(\frac{\sigma^2}{2\tau^2} \frac{t-\mu}{\tau}\right)} \cdot \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\mu-t}{\sigma} + \frac{\sigma}{\tau}\right)\right)\right) \quad \text{«классическая» формула}$$

или в виде произведения «гауссовой» и «экспоненциальной» функций $F(t) = G(t) \cdot E(t)$

где $G(t)$ – функция Гаусса, $E(t)$ – функция, осуществляющая экспоненциальную модификацию:

$$E(t) = \frac{\sigma}{\tau} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot \operatorname{erfcx}\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{T-t}{\sigma} + \frac{\sigma}{\tau}\right)\right)$$

τ – параметр, характеризующий степень асимметрии пика. Остальные параметры те же, что и для функции Гаусса, но не имеют того же наглядного смысла.


В отчете для пиков могут быть представлены параметры h и T , соответствующие высоте и положению пика на графике, либо формальные параметры из формулы ЭМГ. Выбор производится переключателями **Параметры «Положение»** и **«Высота»: WYSIWYG** или **Из формулы ЭМГ**.

В области **Ограничения** для параметра **Ширина** зафиксировано значение *Индивидуальная*, соответственно ширина каждого пика подбирается только индивидуально

Возможность выбора параметра **Знак tau** позволяет ограничиться только положительными (по умолчанию) или только отрицательными значениями, а также разрешить использовать оба знака. В последнем случае число вариантов, которые программа анализирует при выборе оптимума, резко возрастает, поэтому его рекомендуется использовать только тогда, когда известно, что отдельные пики могут иметь явно выраженную асимметрию другого знака

Аппроксимация функцией, подобной образцовому пику

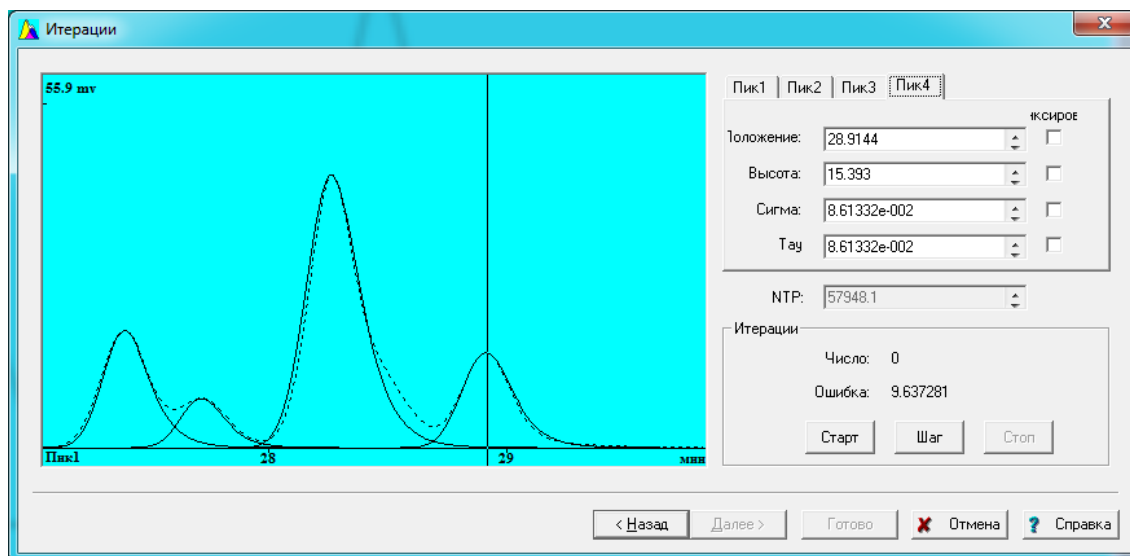
Этот вариант используется в тех случаях, когда различные пики имеют похожую форму, но недостаточно хорошо аппроксимируются функцией Гаусса или ЭМГ.

 В качестве образца следует выбирать отдельно стоящий пик с низким уровнем шума (большим отношением сигнал/шум). Как правило, такие пики не попадают в окно вместе с разделяемыми пиками, поэтому пик-образец следует выбрать заранее и зафиксировать его номер.

- Введите в поле **Модель/Номер пика-образца** номер выбранного пика, под которым он представлен на хроматограмме.

- ♦ В списочном поле **Ограничения/Ширина** выберите значение *Индивидуальная*, *Одинаковая* или *По эффективности*.
- После выбора модели и соответствующих ей параметров перейдите к следующему шагу, нажав кнопку **Далее (Next)**, при этом произойдет переход в окно **Итерации**.

Итерации



- Для запуска автоматического процесса подбора аппроксимирующей функции методом последовательных итераций нажмите кнопку **Итерации/Старт**.

После выполнения очередной итерации значение в поле **Итерации/Число** увеличивается на единицу, а в поле **Итерации/Ошибка** выводится достигнутое на этом шаге значение ошибки (в %), вычисляемое по формуле, выбранной в окне **Инициализация**. Одновременно на листах **Пик1**, **Пик2** и т. д. обновляются значения *параметров* (см. раздел **Параметры, изменяемые при итерациях**) для соответствующих пиков. Процедура останавливается, когда при очередном шаге величина ошибки остается неизменной.

Пользователю также предоставляется возможность управления процедурой аппроксимации вручную:

- остановка процедуры (кнопка **Итерации/Сtop**);
- пошаговое управление процедурой (кнопка **Итерации/Шаг**);
- блокировка изменения отдельных параметров в ходе процедуры (установка флажка **Блок**)²;
- ручная установка для любого параметра для оценки его влияния на величину ошибки (вводом с клавиатуры или прокруткой).

Параметры, изменяемые при итерациях

Набор параметров, варьируемых программой при итерациях, так и доступных для изменения пользователем вручную, зависит от выбранной модели и заданных ограничений.

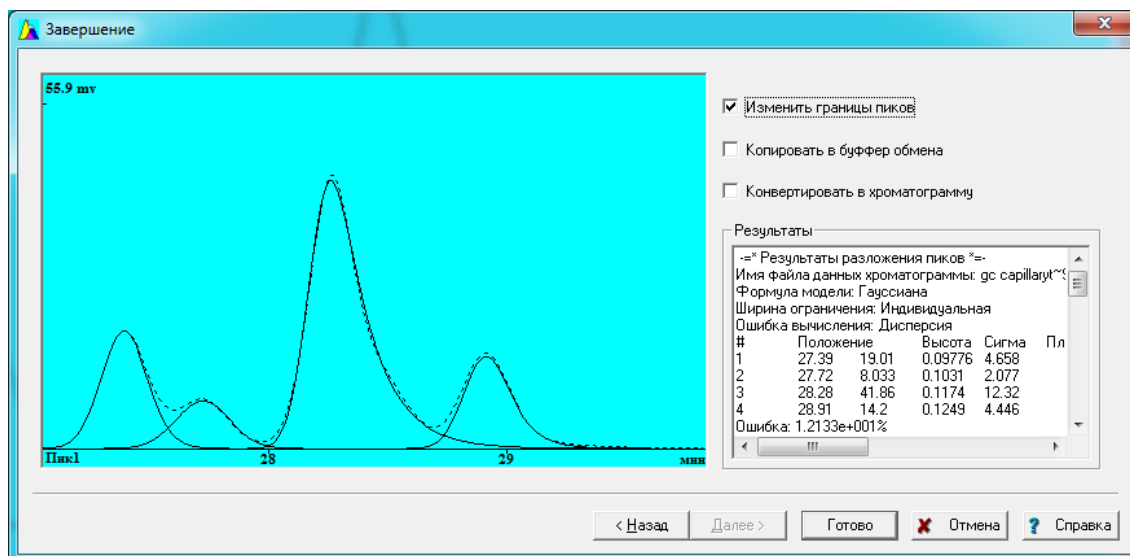
<i>Положение</i>	Положение максимума пика на графике (или параметр T в формулах $G(t)$ и $E(t)$ при установке Из формулы ЭМГ).	Изменяется для всех пиков независимо
<i>Высота</i>	Высота пика на графике (или параметр h в формулах $G(t)$ и $E(t)$ при установке Из формулы ЭМГ).	Изменяется для всех пиков независимо

² Блокировка параметров производится отдельно для каждого пика. Кроме того, при выборе режима варьирования ширины пика *По эффективности* возможна блокировка числа теоретических тарелок (**NTP**).

<i>Сигма</i>	Параметр σ в формулах $G(t)$ и $E(t)$, равный для модели Гауссиана половине ширины пика по уровню 0.607 Для модели По образцу – расчетная величина, характеризующая ширину пика (для пиков Гауссовой формы совпадает с σ).	Зависит от установки параметра Ограничения/Ширина: Одинаковая – изменяется для всех пиков одинаково. Индивидуальная – изменяется для всех пиков независимо. По эффективности – является вычисляемым параметром.
<i>Tau</i>	Параметр τ в формуле $E(t)$, используемый только для модели Эксп. Мод.Гаусс	Изменяется для всех пиков независимо
<i>NTP</i>	Число теоретических тарелок	Является вычисляемым параметром. При установке параметра Ограничения/Ширина: По эффективности изменение этой величины может быть заблокировано.

- По завершении процедуры аппроксимации перейдите к следующему шагу, нажав кнопку **Далее (Next)**, при этом произойдет переход в окно **Завершение**.

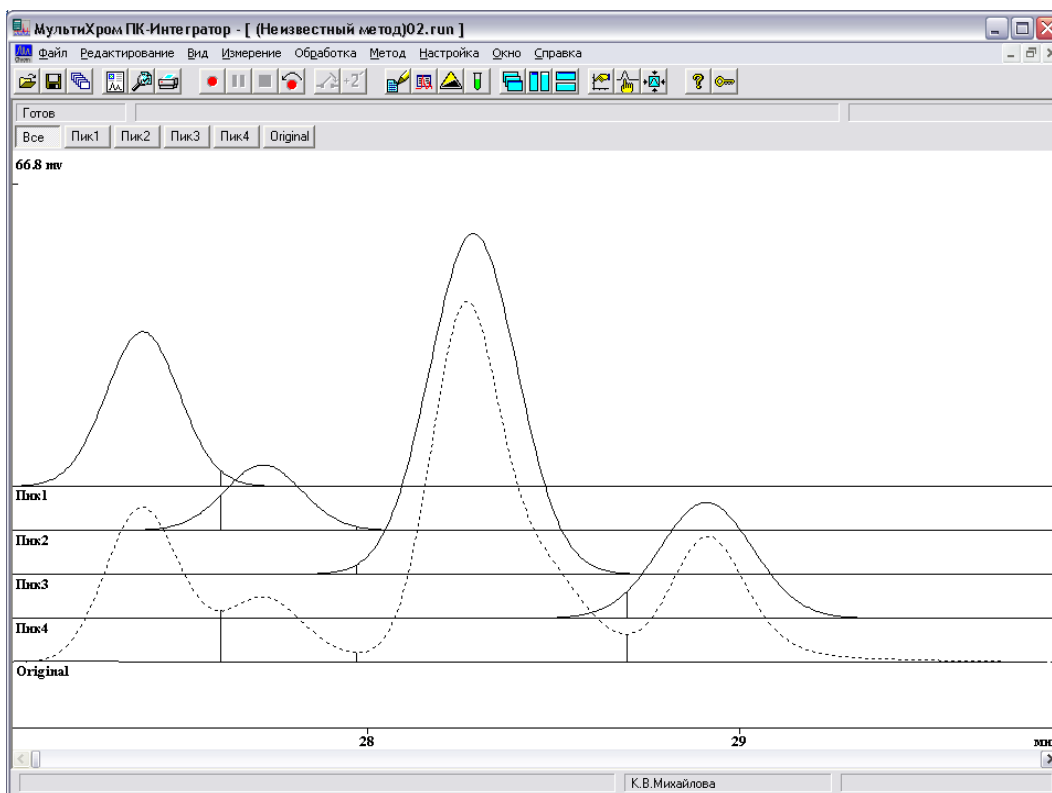
Завершение



На листе **Завершение** пользователю предоставляется возможность выбрать, каким образом использовать результаты гаусс-разложения. По умолчанию предлагается в исходной хроматограмме изменить границы пиков таким образом, чтобы отношение их площадей на хроматограмме с исправленными границами пиков было таким же, как отношение площадей аппроксимирующих пиков.

- Для того чтобы отказаться от внесения изменений в исходную хроматограмму, снимите флажок **Изменить границы пиков**.
- Для того чтобы скопировать график из окна **Окончание** в буфер, установите флажок **Копировать в буфер обмена**.
- Для того чтобы преобразовать полученный результат разложения участка хроматограммы на отдельные пики в многоканальную хроматограмму, установите флажок **Преобразовать в хроматограмму**. Полученная многоканальная хроматограмма гаусс-разложения откроется в новом окне³.

³ Предварительно многоканальную хроматограмму можно просмотреть в окне **Завершение**, дважды щелкнув мышью по графику.



- Завершите процедуру гаусс-разложения, нажав кнопку **Готово (Finish)**.

Результаты гаусс-разложения



Результаты гаусс-разложения записываются в хроматограмме с преобразованными границами и/или в полученной многоканальной хроматограмме в окне **Настройки метода/Комментарий**. Эти данные могут быть включены в *простой отчет* к этим хроматограммам при выборе соответствующего раздела в окне **Опции отчета**.

Отчет представляется в виде таблицы пиков.

=* Результаты разложения пиков *=-

Имя файла данных хроматограммы: 1.gup

Формула модели: Эксп. Мод. Гаусс.

Ширина ограничения: Индивидуальная

Знак тау: +

Ошибка вычисления: Дисперсия

#	Положение G	Высота G	Сигма	Тау	Отн.Та у	Площадь ь	Удерживани е	Высот а	Высота / MaxУровень %
1	0.38	18.95	0.0948 6	0.00993 4	0.1047	4.506	0.3932	18.85	3.516
2	0.72	7.71	0.1165	0	0	2.25	0.7204	7.707	1.48
3	1.19	70.79	0.0740 9	0.1394	1.882	13.15	1.264	43.42	8.218
4	1.86	19.05	0.0792 3	0.08079	1.02	3.784	1.917	14.85	2.856

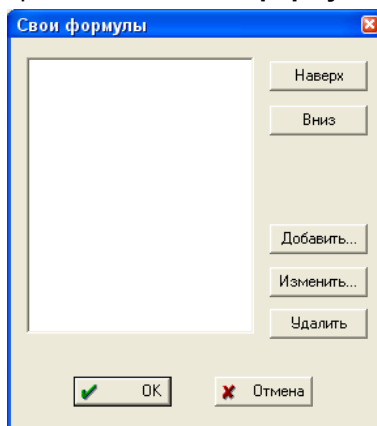
Ошибка: 2.8883e+000%

В первых 5 столбцах приведены параметры ЭМГ: **T, h, σ, τ**, а также отношение **τ/σ**. В следующих 3 столбцах представлены традиционные хроматографические параметры пика: **Площадь, Удерживание, Высота**. В последнем столбце приведено отношение высоты пика к верхней границе области линейности сигнала – эта величины превышает 100% в случае восстановления формы пика за пределами области линейности.

Как добавить собственный столбец в Таблицу пиков

Для добавления в Таблицу пиков столбца, в котором будет представлен параметр пиков, рассчитанный по собственной формуле пользователя, выполните следующее.

- Если при расчетах требуется использовать какие-либо дополнительные данные, получаемые из других источников (результаты измерений, литературные данные и т.п.), введите их на листе **Паспорт/Дополнительно** (см. раздел). Ввод этих данных можно выполнить и после создания формулы.
- В окне **Настройка отчета** в поле **Метод расчета** выберите значение *Заказной*, при этом активируется кнопка **Формулы**.
- Нажмите кнопку **Формулы** – откроется окно **Свои формулы**. Далее выполните следующее.



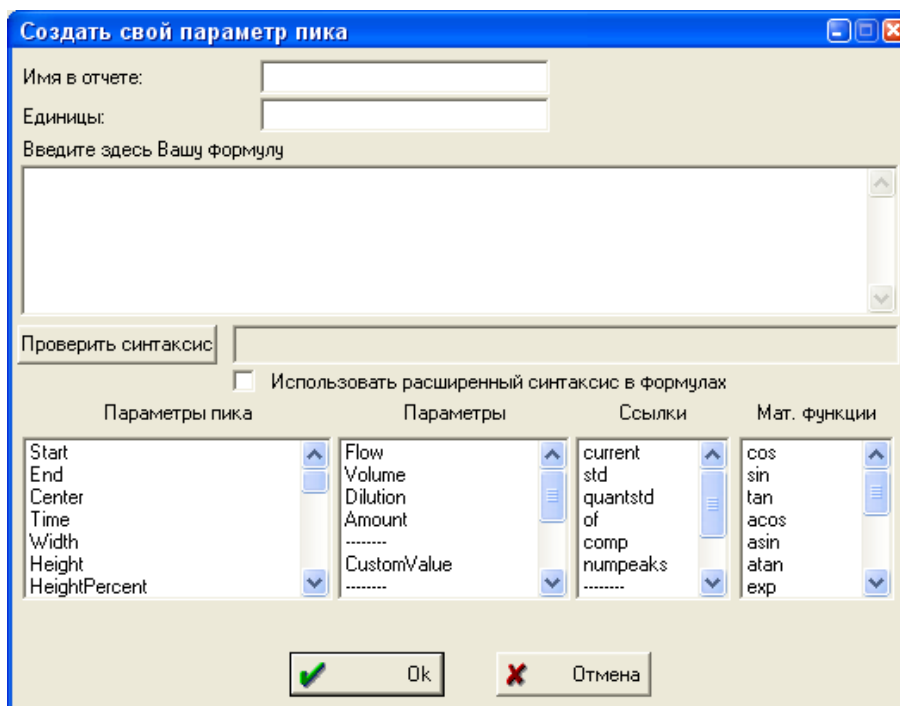
- ♦ Нажмите кнопку **Добавить** – откроется окно **Создать свой параметр пика**.
- ♦ Введите имя параметра, под которым он будет представлен в **Таблице пиков**, и создайте формулу для его вычисления, как это описано в разделе
- ♦ **Более** подробные сведения о создании формул содержатся в **Справке** к ПО (раздел **Формулы пользователя**).
- ♦ Дополнительный параметр.
- ♦ Для того чтобы внести изменения в созданную формулу, повторно откройте окно **Создать свой параметр пика** с помощью кнопки **Изменить**.
- ♦ Создайте, если требуется, другие формулы.

Группа столбцов новых параметров будет включена в **Таблицу пиков** после столбцов всех стандартных параметров, перед столбцами, содержащими имена компонентов и хроматограмм. Внутри группы добавленные столбцы можно располагать в любом удобном порядке.

- ♦ Для того чтобы поменять порядок новых столбцов в **Таблице пиков**, выделите в списке формул нужную строку и переместите ее в требуемое положение с помощью кнопки **Наверх** или **Вниз**.

Как создать формулу для расчета параметра

Для создания формул предназначено специальное окно **Создать свой параметр пика**.



- В поле **Имя в отчете** введите название параметра, которое будет служить заголовком столбца в **Таблице пиков** (можно использовать как латиницу, так и кириллицу).
- Если величина имеет размерность, введите название единицы в поле **Единицы**.
- Введите формулу для вычисления требуемой величины.

В формулу могут включаться *параметры пика* и *параметры*, которые выбираются из соответствующих списков в окне, а также численные коэффициенты, вводимые с клавиатуры. Также с клавиатуры вводятся символы арифметических операций, а для ввода ряд *математических функций* используется выбор из списка в окне.

- ♦ Для того чтобы ввести в формулу параметр пика, дважды щелкните мышкой по требуемой строке в списке **Параметры пика**. При вычислении в каждой строке столбца будет использоваться значение выбранной величины для *текущего* (*current*) пика. Если требуется ввести величину для другого пика, этот пик может быть указан в *квадратных скобках*, например, $Time[current+1]$ – время выхода для пика, следующего за текущим.

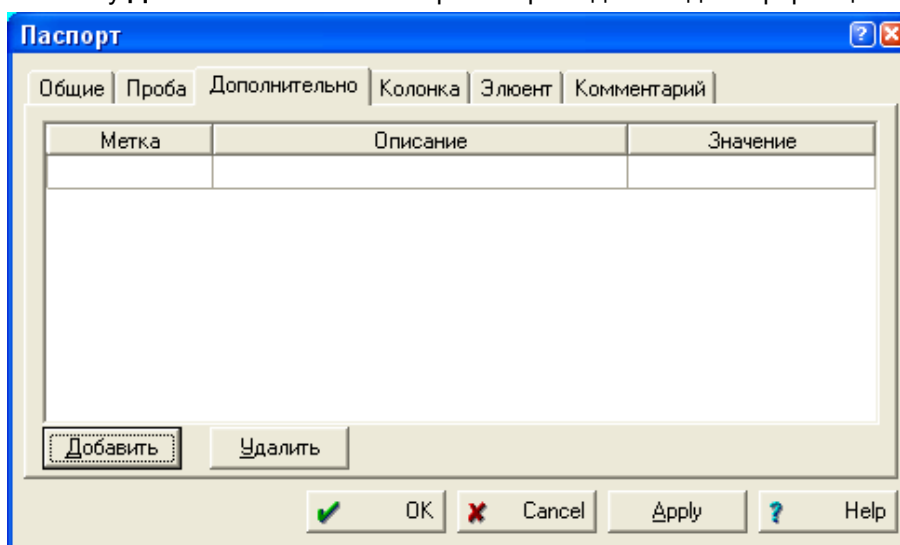
Для некоторых из вводимых величин, которые сами являются вычисляемыми, в скобках указываются параметры процедуры вычисления. Например, при выборе строки *Resolution* (разрешение) величина, вводимая в формулу, будет иметь вид $Resolution(current+1, -1)$. Первый параметр *current+1* означает, что разрешение рассчитывается для текущего и следующего за ним пика, а второй параметр *-1* означает, что расчет разрешения проводится по формуле, выбранной пользователем в окне **Настройка метода/Формулы**.

- ♦ Для того чтобы ввести в формулу параметр пробы, колонки или элюента, дважды щелкните мышкой по требуемой строке в списке **Параметры**.
- ♦ Для того чтобы ввести формулу величину, введенную в окне **Паспорт/Дополнительно**, дважды щелкните мышкой в списке **Параметры** по строке CustomValue и далее выполните процедуру, описанную в следующем разделе.

Более подробные сведения о создании формул содержатся в **Справке** к ПО (раздел **Формулы пользователя**).

Дополнительный параметр

- Для того чтобы ввести дополнительный параметр, выполните следующее.
 - ♦ Откройте окно **Паспорт/Дополнительно**.
 - ♦ Нажмите кнопку **Добавить** – появится первая строка для ввода информации о параметре.



- ♦ В поле **Метка** введите краткое обозначение, которое будет использоваться для ввода параметра в формулу.
- ♦ В поле **Описание** введите поясняющий текст, в частности, в этом поле можно указать, к какому компоненту относится параметр. Например, можно создать такую запись: в поле **Метка** написать *mEt*, в поле **Описание** – *Молекулярная масса компонента Этан*.
- ♦ В поле **Значение** введите значение параметра.
- ♦ Повторите процедуру для всех требуемых параметров.
- ♦ При необходимости удалить какой-либо параметр щелкните мышкой по соответствующей строке и нажмите кнопку **Удалить**.
- Для того чтобы ввести в формулу величину, введенную в окне **Паспорт/Дополнительно**, выполните следующее.
 - ♦ В окне **Создать свой параметр пика** дважды щелкните мышкой в списке **Параметры** по строке *Custom Value* – эта величина будет введена в формулу в виде *Custom Value("parameter name")*.
 - ♦ Вместо *parameter name* введите обозначение параметра, которое было введено для него в поле **Метка**.

Пример 1. Расчет селективности

Селективность рассчитывается по формуле (K'_{i+1}/K'_i), где K'_i и K'_{i+1} – фактор емкости для текущего и следующего за ним пика соответственно. Для добавления столбца *Селективность* откройте окно **Создать свой параметр пика** и выполните следующее.

- В поле **Имя в отчете** введите слово *Селективность*.
- Введите параметр K'_{i+1} , выполнив следующее.
 - ♦ В списке **Параметры пика** дважды щелкните мышкой по строке *Capacity* – в поле ввода формулы появится параметр *Capacity*.
 - ♦ Откройте квадратную скобку и в поле **Ссылки** щелкните мышкой по строке *current* – параметр будет введен в формулу: *Capacity[current*
 - ♦ Введите с клавиатуры *+1* и закройте квадратную скобку.
- Введите знак деления */*.
- Введите параметр K'_i , дважды щелкнув мышкой по строке *Capacity* списке **Параметры пика**. Поскольку эта величина относится к текущему пику, для нее не нужно вводить дополнительный параметр. В окончательном виде должна получиться следующая формула: *Capacity[current+1]/Capacity*.

Пример 2. Внесение поправок в измеренную концентрацию для одного компонента

Задача: известно, что один из пиков хроматограммы соответствует 2 неразделенным компонентам X и Y, при этом по данным дополнительного анализа определено, что доля компонента X составляет $nX\%$.

- В окне **Паспорт/Дополнительно** добавьте строку, нажав кнопку **Добавить**.
 - ♦ В поле **Метка** введите обозначение параметра, например, *ConcX*.
 - ♦ В поле **Описание** введите пояснение, например, *Относительное содержание компонента X в пике*.
 - ♦ В поле **Значение** введите величину $nX/100$.

Откройте **Создать свой параметр пика** и выполните следующее.

- В поле **Имя в отчете** введите название столбца, например, *Испр.конц.*
- В поле **Единицы** введите наименование используемых единиц концентрации.
- Создайте формулу для расчета исправленной концентрации. При этом параметры *current*, *Concentration*, *CustomValue* вводятся выбором из списков **Ссылки**, **Параметры пиков**, **Параметры** соответственно, остальные знаки – с клавиатуры.
 - ♦ Запишите выражение для проверки, является ли текущий пик пиком компонента X
$$(current==of("X"))?$$
 - ♦ Запишите, продолжая ту же строку, чему равна вычисляемая величина, если проверяемое условие выполняется:
$$((Concentration*CustomValue("ConcX"))$$
 - ♦ Запишите, продолжая ту же строку, чему равна вычисляемая величина, если проверяемое условие НЕ выполняется (обратите внимание на двоеточие!):
$$:Concentration$$

В окончательном виде должна получиться следующая формула:

$$(current==of("X"))?(Concentration*CustomValue("ConcX")):Concentration$$