



ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

ХРОМАТЭК АНАЛИТИК

ЭКСПОРТ ДАННЫХ В LIMS (ЛИУС)

Редакция 17.05.2022



# 1 ВВЕДЕНИЕ

---

## 1.1 Что такое LIMS (ЛИУС)?

LIMS – Laboratory Information Management System – Лабораторная информационно-управляющая система (ЛИУС).

LIMS – это специальное программное обеспечение, предназначенное для управления лабораторными потоками работ и документов. Оно оптимизирует сбор, анализ, возврат и отчетность лабораторных данных. Часто применяется в фармацевтической и пищевой промышленности.

Назначением LIMS является получение достоверной информации по результатам испытаний и оптимизации управления этой информацией с целью её использования для принятия корректных своевременных управленческих решений.

Русскоязычный аналог термина – ЛИС, ЛИУС.

## 1.2 Как соотносятся LIMS и "Хроматэк Аналитик"?

Хроматограф служит одним из источников информации о производимых продуктах или протекающих на производстве процессах, наряду с другим аналитическим оборудованием и прочими поставщиками информации, необходимой для управления качеством продукции.

"Хроматэк Аналитик" передает в LIMS результаты хроматографического анализа, а также специальных расчётов по некоторым нормативным документам.

## 1.3 Какие LIMS поддерживает "Хроматэк Аналитик"?

"Хроматэк Аналитик" не поддерживает какие-то конкретные виды LIMS. Более правильно утверждение, что он поддерживает любые виды LIMS, поскольку практически все они обладают гибкими настройками, позволяющими получать данные из внешних источников.

"Хроматэк Аналитик" позволяет экспортировать данные в нескольких форматах.

## 2 ЭКСПОРТ ДАННЫХ В LIMS

---

В настоящее время возможны два способа предоставления данных:

- Экспорт данных в файл.
- Передача данных по промышленному протоколу ModBus

Преимущество использования ModBus заключается в наличии обратной связи. Т.е. "Хроматэк Аналитик" не только передает данные в LIMS, но и может получать в ответ управляющие команды, например – команду загрузить в хроматограф определенный режим.

Описание Modbus данных приведено в соответствующем руководстве.

### 2.1 Экспорт данных в файл

В "Хроматэк Аналитик" штатными средствами обеспечивается экспорт данных в файл определенного формата, сохраняемый в определенной папке. В LIMS создается настройка, обеспечивающая периодическое чтение данного файла и передачу данных далее к потребителю. Поскольку данные специфичны для конкретной аналитической задачи, то некоего универсального формата и структуры данных нет. Формат выбирается и настраивается индивидуально, причем в этом процессе участвуют специалисты заказчика и производителя LIMS.

Разработчики "Хроматэк" могут обеспечить экспорт данных в наиболее удобном для конкретной LIMS виде. Настройка "Хроматэк Аналитик" сводится к подготовке шаблона отчета в форме, согласованной с разработчиком LIMS и конечным пользователем.

Поддерживаемые форматы файлов: TXT, CSV, HTML, XLSX, XML, JSON.

Настройки экспорта в LIMS имеет отчёт (v2) и расширение "Специальные расчёты".

#### 2.1.1 Отчёт v2

Отчёт v2 реализован в "Хроматэк Аналитик", начиная со сборки 3.1.2201.28.

- Перейдите за закладку **Настройки отчёта**.
- В секции **Параметры отчёта** настройте соответствующие параметры. Укажите формат выходного файла (рекомендуется – XML, JSON, CSV, TXT);
- Включите необходимые секции отчёта.
- Включите секцию **Экспорт в LIMS**.
- В её настройках укажите входную папку LIMS. Она может быть сетевой. В эту папку будут скопированы файлы отчётов, в заданных форматах.
- Если доступ к входной папке LIMS ограничен, укажите имя учётной записи, имеющей права на запись в данную папку и пароль.

Метод | Расчёт | Отчёт | Редактор градуировки

< №68 17.01.2020 13:35:10

- Параметры отчёта
- Заголовок отчёта
- Паспорт
- Метод инструмента
- Компоненты
- Градуировка
- МСД: Результат поиска
- МСД: Спектры
- График хроматограммы
- Подпись
- Экспорт в LIMS

Создать отчёт в форматах	PDF XML	...
Путь к папке отчётов	d:\Analytic 3\Rep	...
Шаблон имени файла	Отчёт	...
Шаблон отчёта HTML и PDF	d:\Analytic 3\Tem	...
Шаблон отчёта XLSX		...
Открыть отчёт после создания		
Ориентация страницы PDF	0	
Поля страницы в PDF, см	1	...
Базовая высота шрифта, пт	10	

Метод | Расчёт | Отчёт | Редактор градуировки

< №68 17.01.2020 13:35:10

- Параметры отчёта
- Заголовок отчёта
- Паспорт
- Метод инструмента
- Компоненты
- Градуировка
- МСД: Результат поиска
- МСД: Спектры
- График хроматограммы
- Подпись
- Экспорт в LIMS

Lims		...
Учётная запись	MyAccount	
Пароль	*****	...
Входная папка LIMS	D:\Analytic 3\Test	...

В секции Компоненты и МСД: Результаты поиска вы можете включить в отчёт и экспортируемый файл любые предусмотренные параметры, задать формат округления и порядок столбцов (перетаскиванием с помощью мыши).

<input checked="" type="checkbox"/> Параметры отчёта	Компоненты		
<input checked="" type="checkbox"/> Заголовок отчёта	<input type="checkbox"/> С новой страницы		<input type="checkbox"/>
<input checked="" type="checkbox"/> Паспорт	Фильтр данных	0	
<input type="checkbox"/> Метод инструмента	Сортировка	0	
<input checked="" type="checkbox"/> Компоненты	<input checked="" type="checkbox"/> Компонент		
<input type="checkbox"/> Градуировка	<input type="checkbox"/> №	F0	...
<input type="checkbox"/> МСД: Результат поиска	<input type="checkbox"/> Группа		
<input type="checkbox"/> МСД: Спектры	<input type="checkbox"/> Время заданное, мин	F3	...
<input checked="" type="checkbox"/> График хроматограммы	<input checked="" type="checkbox"/> Время, мин	F3	...
<input checked="" type="checkbox"/> Подпись	<input type="checkbox"/> Индекс заданный	F3	...
<input checked="" type="checkbox"/> Экспорт в LIMS	<input type="checkbox"/> Индекс	F3	...
	<input type="checkbox"/> Площадь группы, мВ*s	F3	...
	<input type="checkbox"/> Площадь группы, %	F3	...
	<input checked="" type="checkbox"/> Площадь, мВ*s	F3	...
	<input type="checkbox"/> Площадь, %	F3	...
	<input type="checkbox"/> Высота, мВ	F3	...
	<input type="checkbox"/> Высота, %	F3	...
	<input type="checkbox"/> Стандарт		
	<input type="checkbox"/> Функция		
	<input type="checkbox"/> Множитель	F3	...
	<input type="checkbox"/> Концентрация заданная	G3	...
	<input type="checkbox"/> Неопределённость заданная	G3	...
	<input type="checkbox"/> Концентрация min.	G3	...
	<input type="checkbox"/> Концентрация макс.	G3	...
	<input type="checkbox"/> Концентрация группы	G3	...
	<input checked="" type="checkbox"/> Концентрация	G3	...
	<input type="checkbox"/> Неопределённость	G3	...
	<input checked="" type="checkbox"/> Ед. конц.		

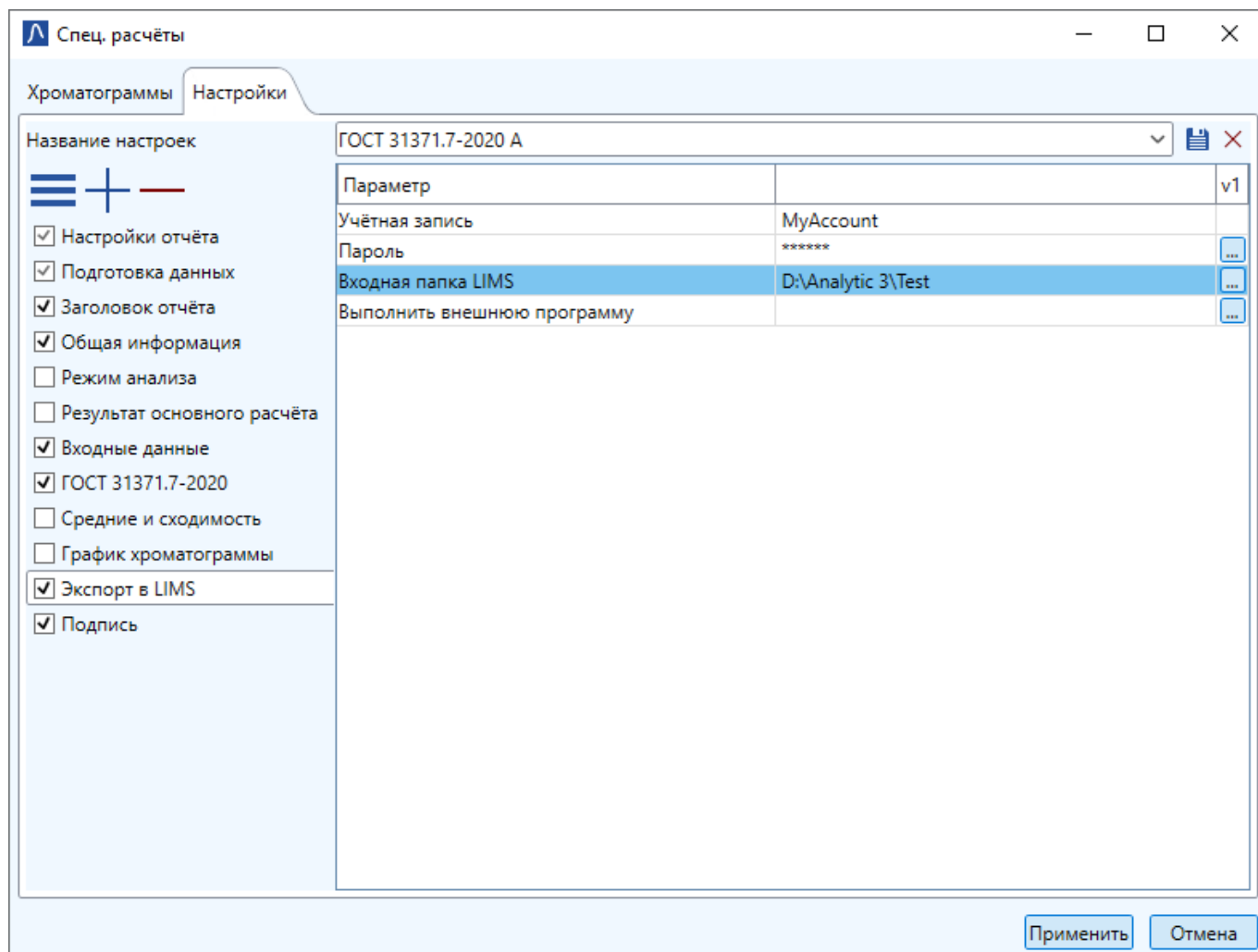
## 2.1.2 Специальные расчёты

- Запустите расширение "Спец. расчёты".
- Перейдите на закладку **Настройка**.
- Включите необходимые секции отчёта.

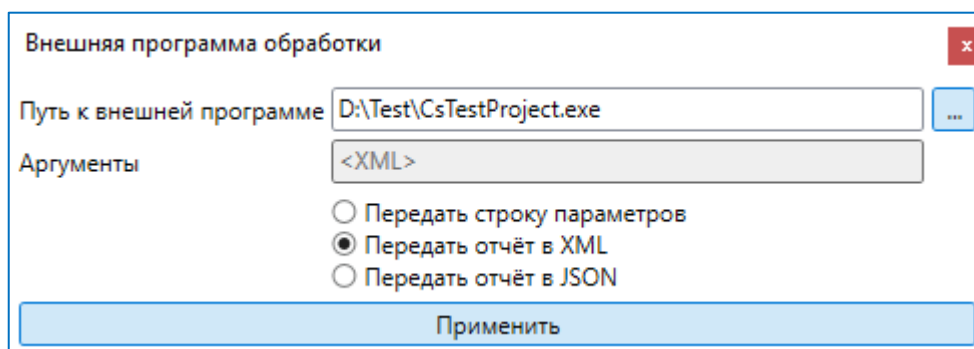
+ Добавьте необходимые расчёты по нормативным документам. Добавьте в список секций **Экспорт в LIMS**.

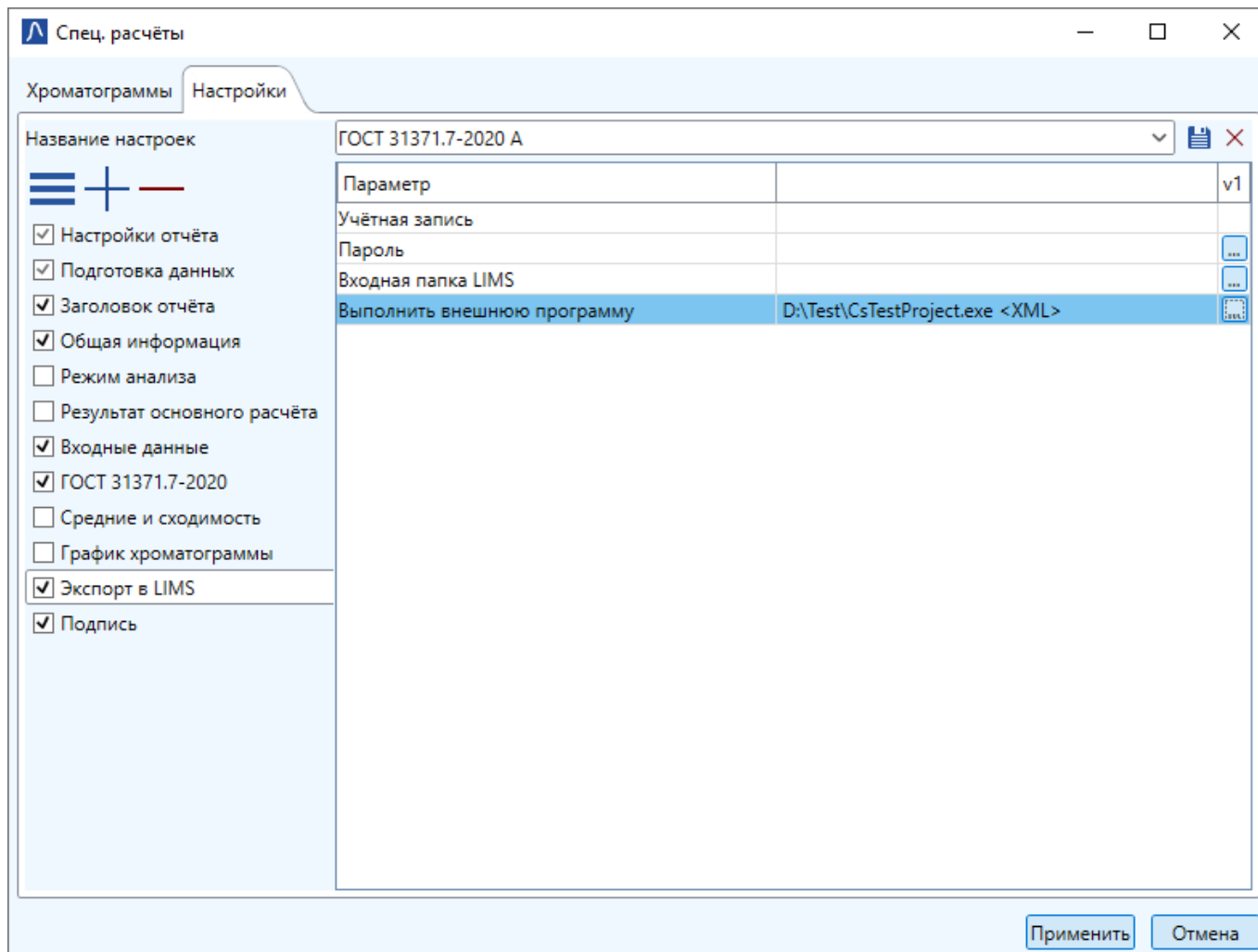
Параметр	Значение	v5
Создать отчёт в форматах	HTML	...
Путь к папке отчётов	d:\Analytic 3\Reports	...
Шаблон имени файла	Отчёт	...
Шаблон отчёта HTML и PDF	d:\Analytic 3\Templates\SpecialCalcsTemplate.html	...
Шаблон отчёта XLSX		...
Открыть отчёт после создания	<input checked="" type="checkbox"/>	
Ориентация страницы PDF	Книжная	
Поля страницы в PDF, см	1	...
Базовая высота шрифта, пт	10	
История измерений	Не сохранять	

- В настройках секции **Экспорт в LIMS** укажите входную папку LIMS, если система настроена на чтение данных из этой папки. Папка может быть сетевой. В эту папку будут скопированы файлы отчётов, в заданных форматах.
- Если доступ к входной папке LIMS ограничен, укажите имя учётной записи, имеющей права на запись в данную папку и пароль.



- Если данные в LIMS передаются путём передачи выходного файла XML или JSON в качестве аргумента сторонней утилиты (приложения), настройте параметр **Выполнить внешнюю программу**.





## 2.2 Сканер штрих-кодов

При работе с LIMS для автоматизации заполнения информации об образце может использоваться считыватель (сканер) штрих-кодов. Данное устройство подключается к компьютеру по интерфейсу USB или PS/2. Распознаётся Windows автоматически. Настройка не требуется.

Для считывания информации со штрих-кода при старте нового анализа (или при заполнении паспорта до анализа) необходимо поставить курсор в поле **Название пробы** паспорта хроматограммы и поднести считыватель к штрих-коду. Идентификатор пробы будет автоматически внесён в это поле и при выполнении экспорта будет включен в выгружаемый файл.

# 3 ФОРМАТ ЭКСПОРТА

---

## 3.1 Экспорт в TXT и CSV

Данные экспортируются в текстовый файл.

Для TXT разделитель столбцов таблиц – символ табуляции "\t".

Для CSV разделитель столбцов таблиц – точка с запятой ";".

Пример экспорта в CSV:

### ПАСПОРТ

ID оборудования;Хроматэк-Кристалл 9000 1991503;  
Номер хроматограммы;68;  
Дата и время анализа;2020-01-17 13:35:10;  
Метод;D:\Analytic 3\Projects\Combine\ГОСТ 31371\ГОСТ 31371.7-2020 A\methods\Метод.mthx;  
Название пробы;ПНГ с подогревом пробоотборника, точка отбора – УУГ УПН;  
Объём пробы;1.000;

### КОМПОНЕНТЫ

Компонент;Время, мин;Площадь, мВ\*с;Концентрация;Ед. конц.;Детектор;  
Метан;1.147;182440.215;63.8;мол.%;ДТП-1;  
этан;5.431;32136.600;7.02;мол.%;ДТП-1;  
пропан;7.581;95554.355;14;мол.%;ПВД-1;  
и-бутан;7.946;20230.879;2.18;мол.%;ПВД-1;  
н-бутан;8.199;55698.275;6.05;мол.%;ПВД-1;  
неопентан;15.877;24.695;0.00344;мол.%;ДТП-1;  
и-пентан;9.062;13243.524;1.13;мол.%;ПВД-1;  
н-пентан;9.435;15850.653;1.35;мол.%;ПВД-1;  
Циклопентан;9.500;0.000;0;ПВД-1;  
гексан;11.493;3408.844;0.239;мол.%;ПВД-1;  
гептан;14.163;705.826;0.0431;мол.%;ПВД-1;  
октан;16.974;198.931;0.011;мол.%;ПВД-1;  
нонан;19.539;60.757;0.00304;мол.%;ПВД-1;  
декан;21.709;22.468;0.00101;мол.%;ПВД-1;  
диоксид углерода;2.346;8576.969;2.03;мол.%;ДТП-1;  
гелий;0.751;15.830;0.0112;мол.%;ДТП-3;  
водород;1.003;24.187;0.00998;мол.%;ДТП-3;  
кислород;1.935;19.878;0.00437;мол.%;ДТП-2;  
азот;4.105;4481.431;1.14;мол.%;ДТП-2;  
Сероводород;9.000;0.000;0;ДТП-1;  
метанол;12.557;0.805;0.000499;мол.%;ДТП-1;

## 3.2 Экспорт в XML и JSON

В этих форматах сохраняется древовидная структура. Ниже приведён код на языке **C#**, который её описывает.

```
public class ExportData
{
    public string Id { get; set; }
    public string Name { get; set; }
    public List<ExportDataTable> Tables { get; set; }
}

public class ExportDataTable
{
    public string Id { get; set; }
    public string Name { get; set; }
    public List<ExportParam> Params { get; set; }
}

public class ExportParam
{
    public string Key { get; set; }
    public string Name { get; set; }
    public object Value { get; set; }
}
```

В **ExportParam.Name** содержится или название компонента, или локализованное название параметра.

Пример экспорта в XML отчёта по ГОСТ 31369-2021, созданного расширением "Специальные расчёты":

```
<?xml version="1.0"?>
<ArrayOfExportData>
  <ExportData>
    <Id>Gost31371_7_2020</Id>
    <Name>ГОСТ 31371.7-2020</Name>
    <Tables>
      <ExportDataTable>
        <Id>GasComposition</Id>
        <Name>Состав пробы</Name>
        <Params>
          <ExportParam>
            <Key>Conc</Key>
            <Name>Метан</Name>
            <Value xmlns:q207="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q207:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">62.76</Value>
          </ExportParam>
          <ExportParam>
            <Key>Uncert</Key>
            <Name>Метан</Name>
            <Value xmlns:q208="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q208:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">0.15</Value>
          </ExportParam>
          <ExportParam>
            <Key>Method</Key>
            <Name>Метан</Name>
            <Value xmlns:q209="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q209:string"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">A (индивидуально)</Value>
          </ExportParam>
          <ExportParam>
            <Key>RangeMol</Key>
            <Name>Метан</Name>
            <Value xmlns:q210="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q210:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">2.66</Value>
          </ExportParam>
        </Params>
      </ExportDataTable>
    </Tables>
  </ExportData>
</ArrayOfExportData>
```

```

    <ExportParam>
      <Key>RangeMolNorm</Key>
      <Name>Метан</Name>
      <Value xmlns:q211="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q211:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">0.2</Value>
    </ExportParam>
    <ExportParam>
      <Key>Acceptability</Key>
      <Name>Метан</Name>
      <Value xmlns:q212="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q212:boolean"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">>false</Value>
    </ExportParam>
    <ExportParam>
      <Key>Conc</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q213="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q213:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">7.4</Value>
    </ExportParam>
    <ExportParam>
      <Key>Uncert</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q214="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q214:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">0.3</Value>
    </ExportParam>
    <ExportParam>
      <Key>Method</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q215="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q215:string"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">A (индивидуально)</Value>
    </ExportParam>
    <ExportParam>
      <Key>RangeMol</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q216="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q216:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">0.51</Value>
    </ExportParam>
    <ExportParam>
      <Key>RangeMolNorm</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q217="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q217:double"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">0.41</Value>
    </ExportParam>
    <ExportParam>
      <Key>Acceptability</Key>
      <Name>этан</Name>
      <Value xmlns:q218="http://www.w3.org/2001/XMLSchema" d7p1:type="q218:boolean"
xmlns:d7p1="http://www.w3.org/2001/XMLSchema-instance">>false</Value>
    </ExportParam>
.....

  </Params>
</ExportDataTable>
</Tables>
</ExportData>
</ArrayOfExportData>

```

Например, чтобы из массива **GasComposition** получить концентрации всех компонентов, нужно выбрать все элементы, у которых **Key == Conc**.

Чтобы найти все параметры метана, нужно из массива **GasComposition** получить все элементы, у которых **Name == метан**.

И т.п.

## 4 ПАРАМЕТРЫ ЭКСПОРТА

---

### 4.1 Расчёт по ГОСТ 31369-2021

ExportData.Id – Gost31369\_2021

#### 4.1.1 Входные нормализованные доли

ExportDataTable.Id: NormalizedConc

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
MolarConc	Название	Double	Молярная нормализованная доля
MassConc	компонента	Double	Массовая нормализованная доля
VolumeConc		Double	Объёмная нормализованная доля

#### 4.1.2 Физико-химические показатели идеального газа

ExportDataTable.Id: IdealGas

ExportDataTable.Params:

PhysicalParameterValue – Значение параметра.

PhysicalParameterUncert – Неопределённость параметра.

Key	Name	Тип значения	Описание
MolarConc	Название компонента	Double	Молярная нормализованная доля
MassConc		Double	Массовая нормализованная доля
VolumeConc		Double	Объёмная нормализованная доля
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	MolarMass	Double	Молярная масса, г/моль
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	CompressFactor	Double	Фактор сжимаемости
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	HighCombustionHeatMolar	Double	Молярная теплота сгорания высшая, кДж/моль
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	LowCombustionHeatMolar	Double	Молярная теплота сгорания низшая, кДж/моль
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	HighCombustionHeatMass	Double	Массовая теплота сгорания высшая, МДж/кг
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	LowCombustionHeatMass	Double	Массовая теплота сгорания низшая, МДж/кг

PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	HighCombustionHeatVolume	Double	Объёмная теплота сгорания высшая, МДж/м <sup>3</sup>
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	LowCombustionHeatVolume	Double	Объёмная теплота сгорания низшая, МДж/м <sup>3</sup>
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	DensityAbs	Double	Плотность, кг/м <sup>3</sup>
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	DensityRel	Double	Плотность относительная
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	HighWobbe	Double	Число Воббе высшее, МДж/м <sup>3</sup>
PhysicalParameterValue PhysicalParameterUncert	LowWobbe	Double	Число Воббе низшее, МДж/м <sup>3</sup>

### 4.1.3 Физико-химические показатели реального газа

ExportDataTable.Id: RealGas

Параметры аналогично описанным в п.4.1.2.

## 4.2 Расчёт по ГОСТ 31371.7-2020

ExportData.Id – Gost31371\_7\_2020

### 4.2.1 Входные нормализованные доли, мол.%

ExportDataTable.Id: AllConcentrations

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Номер хроматограммы	Название компонента	Double	Входная нормализованная доля

### 4.2.2 Таблица градуировочных зависимостей

ExportDataTable.Id: CalibrationFunctions

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
CalibrationFunction	Название компонента	String	Градуировочная функция

### 4.2.3 Приемлемость градуировочных коэффициентов (методы А и Б)

ExportDataTable.Id: CalibrationFactorsAcceptability

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
K#<Номер хроматограммы>	Название компонента	Double	Градуировочный коэффициент компонента в данной хроматограмме
Kavg		Double	Средний градуировочный коэффициент
CalibrationFactorRangeValue		Double	Значение относительного размаха
CalibrationFactorRangeNormative		Double	Норматив относительного размаха
Acceptability		Boolean	Приемлемость

## 4.2.4 Приемлемость градуировочных коэффициентов (метод В)

ExportDataTable.Id: CalibrationFactorsAcceptability

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
StandardMolarPercent	Название	Double	Паспортная мол. доля, %
MeasuredMolarPercent	компонента	Double	Измеренная мол. доля, %
MolarRelRange		Double	Относительный размах мол. долей, %
RangeMolNorm		Double	Норматив размаха, мол.%
Acceptability		Boolean	Приемлемость

## 4.2.5 Приемлемость сходимости приведённых откликов градуировочных уровней

ExportDataTable.Id: CalibrationFactorsAcceptability

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
ConcStandard	Название компонента	Double	Доля в стандартном образце по паспорту, мол%
RelResponseRange		Double	Относительный размах отклика, %
RangeMolNorm		Double	Норматив размаха, мол.%
Acceptability		Boolean	Приемлемость

## 4.2.6 Контроль градуировочной характеристики

ExportDataTable.Id: CalibrationControl

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
ResponseRange	Название	Double	Размах откликов, отн. %
ResponseRangeNorm	компонента	Double	Норматив размаха, отн. %
Accuracy		Double	Точность, отн. %
AccuracyNorm		Double	Норматив точности, отн. %
Acceptability		Boolean	Приемлемость

## 4.2.7 Состав пробы

ExportDataTable.Id: GasComposition

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Conc	Название компонента	Double	Нормализованная доля, мол. %
Uncert		Double	Неопределённость, мол. %
Method		Double	Метод анализа
RangeMol		Double	Размах, мол.%
RangeMolNorm		Double	Норматив размаха, мол.%
Acceptability		Boolean	Приемлемость

## 4.2.8 Проверка соответствия ГСО и пробы

ExportDataTable.Id: StandardAndSampleCompliance

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Conc	Название компонента	Double	Нормализованная доля, мол. %
Min		Double	Мин. допустимого диапазона градуировочного стандартного образца, мол. %
Max		Double	Макс. допустимого диапазона градуировочного стандартного образца, мол. %
StandardConc		Double	Паспортное значение молярной доли стандартного образца, %
Acceptability		Boolean	Приемлемость

## 4.2.9 Проверка соответствия ГСО и пробы

ExportDataTable.Id: StandardAndSampleCompliance

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Conc	Название	Double	Нормализованная доля, мол. %
Min	компонента	Double	Мин. допустимого диапазона градуировочного стандартного образца, мол. %
Max		Double	Макс. допустимого диапазона градуировочного стандартного образца, мол. %
StandardConc		Double	Паспортное значение молярной доли стандартного образца, %
Acceptability		Boolean	Приемлемость

## 4.2.10 Контроль правильности результатов измерений

ExportDataTable.Id: AccuracyControl

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
MeasuredMolarPercent	Название	Double	Измеренная мол. доля, %
StandardMolarPercent	компонента	Double	Паспортная мол. доля, %
RangeMol		Double	Размах, мол.%
RangeMolNorm		Double	Норматив размаха, мол.%
Acceptability		Boolean	Приемлемость

## 4.3 Расчёт по ГОСТ Р 53367-2009 и ГОСТ 34723-2021

Для ГОСТ Р 53367-2009: ExportData.Id – Gost53367\_2009

Для ГОСТ 34723-2021: ExportData.Id – Gost34723\_2021

### 4.3.1 Градуировочные зависимости

ExportDataTable.Id: CalibrationDependencies

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
CalibrationFunction	Название компонента	String	Вид градуировочной функции

### 4.3.2 Проверка приемлемости градуировки

ExportDataTable.Id: CalibrationAcceptability

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Chromatogram	Название компонента	Double	Хроматограмма
Volume		Double	Объём
Value		Double	Значение отклика в данной хроматограмме
Average		Double	Среднее значение отклика
RealValue		Double	Фактическое значение относительного расхождения
NormValue		Double	Норматив относительного расхождения

### 4.3.3 Концентрации компонентов оптимального уравнения регрессии

ExportDataTable.Id: RegressionTable

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
UncertaintyRel	Название компонента	Double	Неопределённость относительная
UncertaintyNorm		Double	Норматив неопределённости
UncertaintyAbs		Double	Неопределённость абсолютная

Volume	Double	Объём
Response	Double	Отклик

### 4.3.4 Контроль правильности

ExportDataTable.Id: RegressionTable

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
ConcMeasured	Название компонента	Double	Концентрация контрольного образца измеренная
ConcSetted		Double	Концентрация контрольного образца заданная
Deviation		Double	Отклонение
Normative		Double	Норматив

### 4.3.5 Серосодержащие компоненты

ExportDataTable.Id: SulfurComponents

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Concentration	Название компонента	Double	Концентрация
UncertaintyRel		Double	Неопределённость относительная
UncertaintyAbs		Double	Неопределённость абсолютная
Range		Double	Размах относительный
RangeNorm		Double	Норматив размаха относительного

### 4.3.6 Разрешение пиков

ExportDataTable.Id: PeakResolution

ExportDataTable.Params:

Key	Name	Тип значения	Описание
Resolution	Название компонента	Double	разрешение

# 5 ЧТО НУЖНО ДЛЯ ИНТЕГРАЦИИ "ХРОМАТЭК АНАЛИТИК" И LIMS?

---

На адрес [soft@chromatec.ru](mailto:soft@chromatec.ru) нужно прислать максимально подробное описание задачи. Желательно предоставить контакты разработчиков LIMS, которая устанавливается у конечного пользователя, для согласования форматов передачи данных.