

安捷伦气相色谱小程序使用说明

caumine

2018.11.25

该小程序主要实现了两个功能，一是批量导出色谱信号为 csv 文件， 二根据 csv 文件自动批量积分， 能解决一些峰发生偏移的情况。

一、批量导出色谱信号

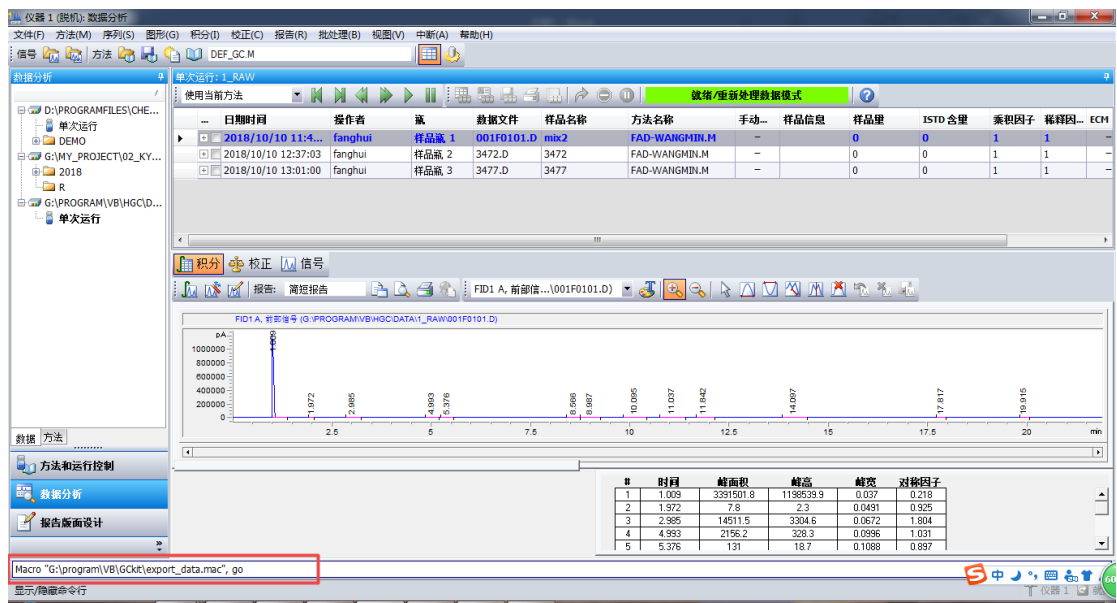
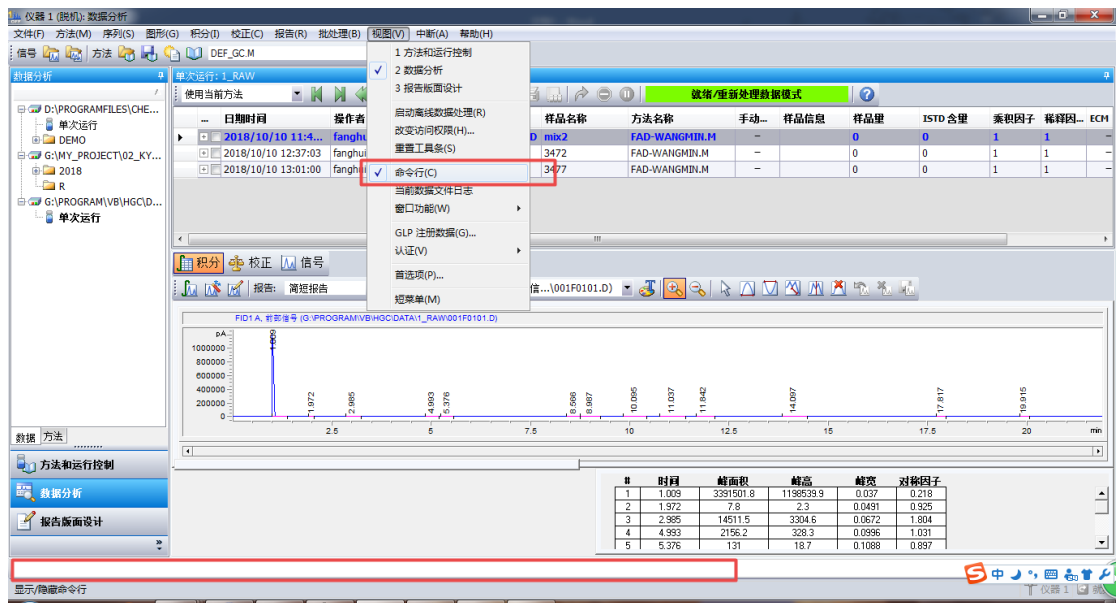
基本原理： GC ChemStation 有批处理的宏命令， 本程序批量生产导出数据的宏命令。测试基于的 GC ChemStation 见下图，

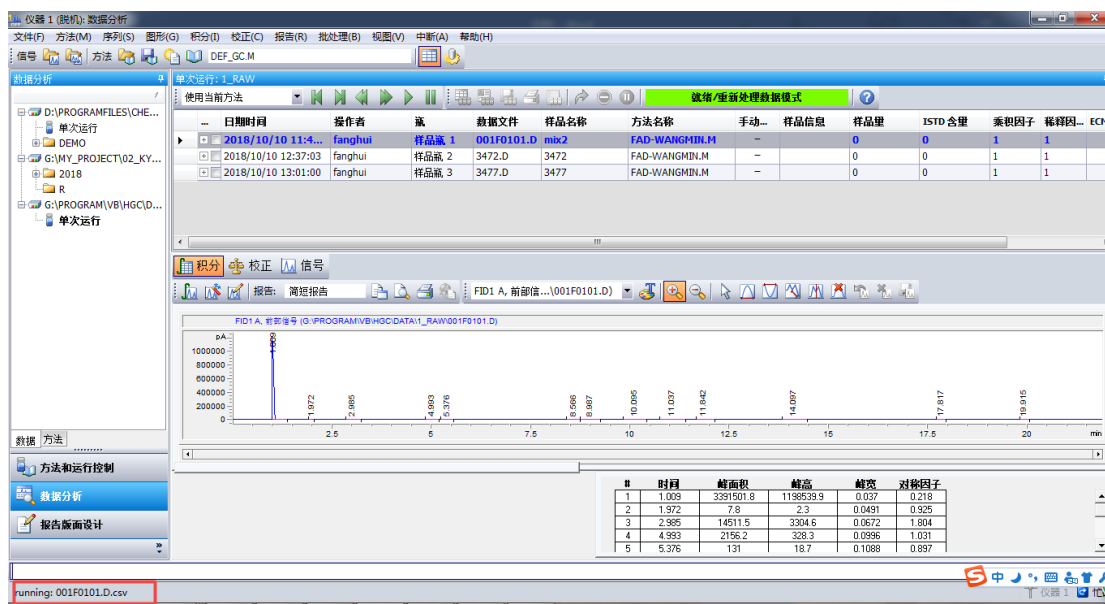


本程序使用很简单，选择信号值所在的文件夹，和 输出信号 CSV 所在的文件， 但三个宏文件可以不修改。点击“运行生成宏”后， GC ChemStation 中，勾选 命令行 选项，然后将宏命令 复制到 命令行窗口， 按 “enter” 键， 左下角出现 “OK”,就运行完毕了。

导出数据的过程会稍微比较慢，请耐心等待。







二．自动积分

导出信号值后我们就可以自动积分。自动积分程序输入，刚刚导出的 csv 文件夹和一个时间文件。点击“运行积分”就可以。



时间文件的格式如下：

行头名称固定如下，第 1 列物质的名称，第 2,3 列出峰的起止时间，第 4 列基线。

关于基线：

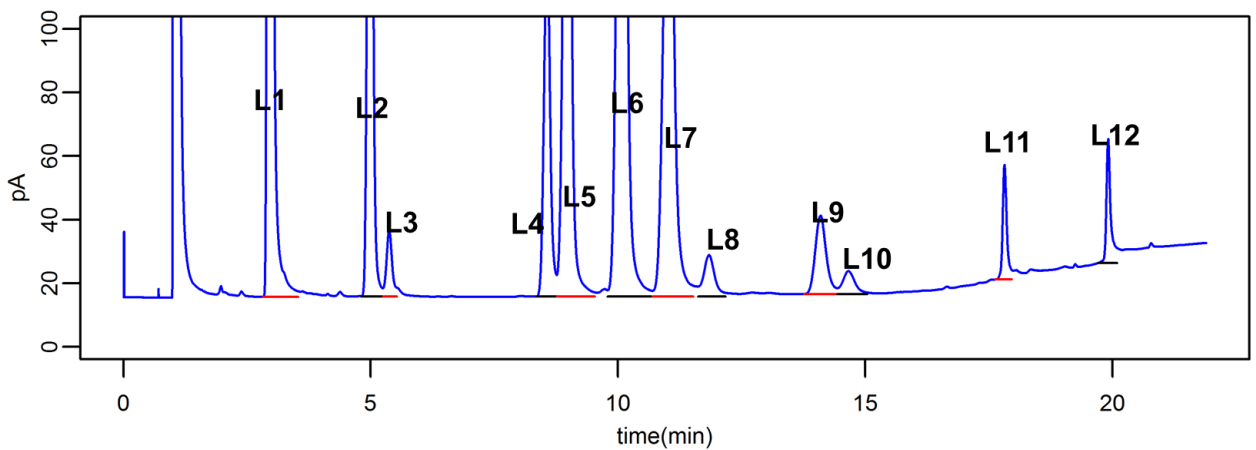
L1 的基线 1 表示以第 1 个峰左侧最小值为基线

L4-L8 峰比较集中，4 表示以第 4 个峰左侧最小值为基线。L4-L8 都以第 4 个峰左侧最小值为基线。

基线可以根据自己的峰特征合理设置。

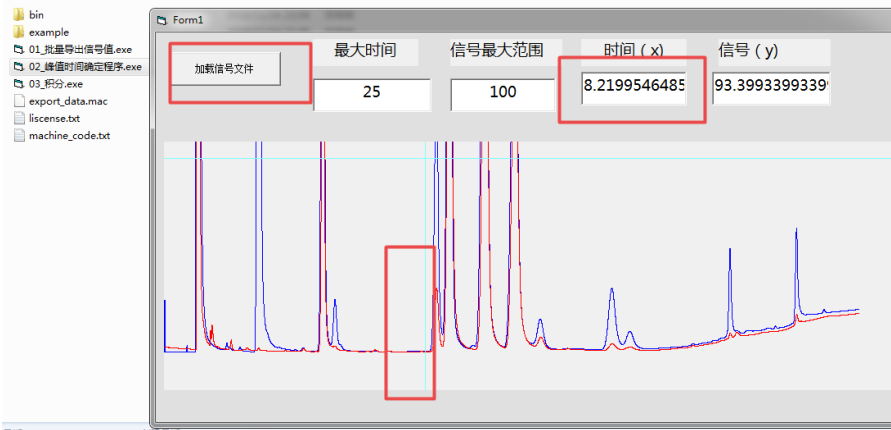
taxa	start	end	baseline
L1	2.83	3.23	1
L2	4.68	5.276206	2
L3	5.276206	5.56112	2
L4	8.310668	8.72473	4
L5	8.754146	9.498723	4
L6	9.826338	10.69005	4
L7	10.69005	11.58354	4
L8	11.58354	12.14942	4
L9	13.72793	14.50229	9
L10	14.50229	15.21708	9
L11	17.6593	17.9074	11
L12	19.83346	20.22064	12

taxa	start	end	baseline
L1	2.83	3.23	1
L2	4.68	5.276206	2
L3	5.276206	5.56112	2
L4	8.310668	8.72473	4
L5	8.754146	9.498723	4
L6	9.826338	10.69005	4
L7	10.69005	11.58354	4
L8	11.58354	12.14942	4
L9	13.72793	14.50229	9
L10	14.50229	15.21708	9
L11	17.6593	17.9074	11
L12	19.83346	20.22064	12



时间可以通过第 2 个程序很方便的确定，加载导出的 csv 文件，就可以显示出峰图，可以分别加载多个 csv 文件，移动竖线就可以确定时间。

积分时间的确定：根据给定的时间范围，找到最大值信号值，从最大信号值往两侧延伸到峰底，所以给定的时间范围一定要包含峰的最大信号值点。



注意：本程序的积分结果不能保证 100%正确，自动积分完后，请务必看一遍积分时间图

三．注册

未注册版本每次只能运行两个文件。需要注册版本请联系 minecau@qq.com