

**CHROMULAN**  
**řídící a vyhodnocovací**  
**software pro**  
**chromatografické separace**

Jindřich Jindřich, Pavel Píša  
Chiranal 2005

# Požadavky na systém

- Otevřenost, rozšiřitelnost a konfigurovatelnost na uživatelské i programátorské úrovni
- Univerzální datový formát + export/import
- Sběr dat a obousměrná komunikace
- Automatické načtení seznamu přístrojů a jejich parametrů
- Sestavení více řízených kanálů
- Vyhodnocení a porovnávání analýz i s více datovými záznamy, externí a interní kalibrace

# Vznik projektu CHROMULAN

Potřeba definovaného systému svedla dohromady

- Odborníky z více oborů
  - vývoje hardware a firmware přístrojů
  - vývoje software
  - uživatele chromatografických systémů
- Společnosti zabývající se



- vývojem přístrojů



- výrobou přístrojů



# Současné vlastnosti projektu CHROMULAN

- Otevřený (Open Source, MS Windows, Borland Delphi) systém pro sběr a vyhodnocení dat
- Zajišťuje digitální přenos dat z jednoho nebo více přístrojů propojených:
  - sběrnici uLan (sériový port s adaptérem, karta do PC)
    - obousměrná komunikace – přístroje PiKRON
  - jinou digitální komunikací (RS-232, sériový port, DLL ovladač)
    - jednosměrná komunikace – přístroje jiných výrobců

# Současné vlastnosti projektu CHROMULAN ...



- Umožňuje monitorovat a řídit nezávislé sestavy přístrojů (=kanály)
- Zařízení s analogovým výstupem lze připojit pomocí uLan ADC převodníku, AD převodníků jiných výrobců nebo digitálních multimetrů
- Vyhodnocení záznamů (autodetekce baseline a píků, kvantitativní vyhodnocení s přepočty na vnitřní a vnější standard)

# Přístroje komunikující RS- 232: AD převodník GHLab

**Jindrich**soft  
**Jindrich**



- 8-10 bitový AD převodník
- napájený ze seriového portu
- 20 měření / s
- ovladač GHLAB.DLL

# Přístroje komunikující RS-232: Digitální multimetry

**Jindrich**soft  
**Jindrich**



- Metex, Voltcraft, Protek
- 1 měření / s
- ovladač Device.DLL  
konfigurovatelný pomocí  
definičního XML souboru

# Provedení analýzy



- Výběr templátu (pro standardní kanál vytvořen automaticky vzorový templát)
- Název analýzy
- Volitelně modifikace instrumentu (kanálu, podmínky analýzy)
- Volitelně modifikace metody (parametry pro autodetekci a vyhodnocení peaků)
- Start z programu/přístroje



# Zpracování dat



- Autodetekce baseline, píků
- Manuální modifikace hranic baseline, píků
- Kalibrace píků
  - Vnitřní standard
  - Kalibrační soubor
- Výstupy: tisk, přenos přes schránku
- Export .ASC (všechny parametry), .TXT (jen X, Y)

# CHROMuLAN

File Edit Setup Window Help



D:\pi\CHROMuLan\ULD.ULD:Devices

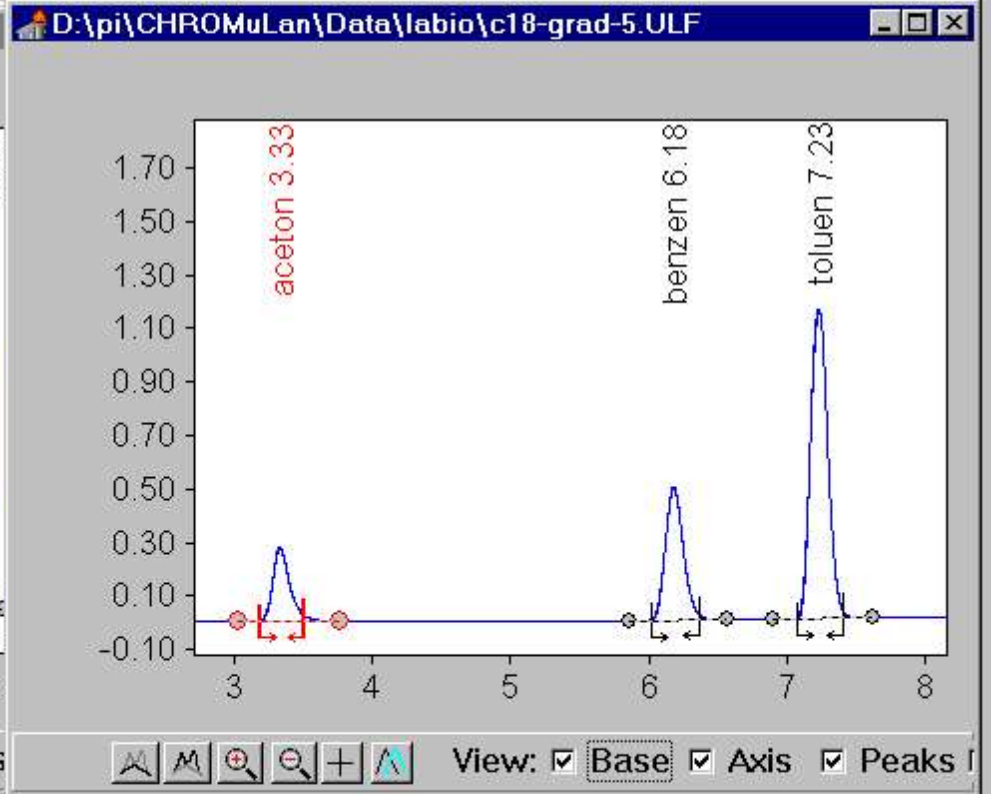
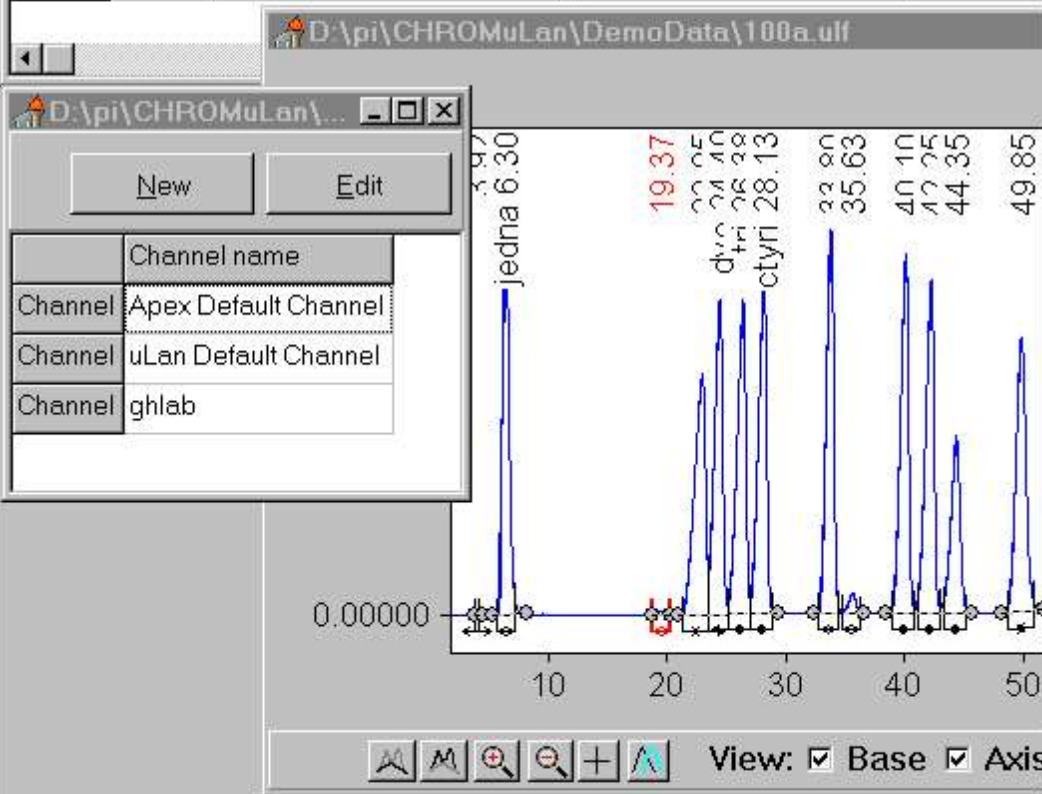
New Edit Delete  All details  Internal Values

	AddrStr	IDName	DeviceName	DeviceMode	DeviceType
Device	0		Apex Default Device	dmApex	dtDetector
Device	3	.mt LCD5000 v1.0 .uP 51x	.mt LCD5000 v1.1 .uP 51x	dmUlan	dtDetector
Device	4	.mt LCP5020 v1.3 .uP 51x .dy	.mt LCP5020 v1.3 .uP 51x .dy	dmUlan	dtPump
Device	7	.mt LCS5040 v1.4 .uP 51x	.mt LCS5040 v1.4 .uP 51x	dmUlan	dtAutoSampler
Device	0		ghlab	dmExtDev	dtDetector

D:\pi\CHROMuLan\Data\labio\c18-grad-5.ULF...

New Edit Delete  All details  Internal Va

X [min]	Area	Name	Amount	UsrPeakCoef	Window [min]
3.33	56.53	acetone	6.096	1	0.50
6.18	111.2	benzen	2.089	1	0.50
7.23	251.5	toluen	2.062	1	0.50



# PIKRON

## iniciátor projektu



Vývojový tým společnosti PiKRON již 13 let nabízí chemickým laboratořím, nemocnicím a univerzitám cenově dostupné analytické přístroje, polohovací zařízení a elektronické řídicí systémy.

Na realizaci a sériové výrobě vyvinutých zařízení PiKRON spolupracuje s dalšími společnostmi :  
INGOS, Linet Compact, Laboratory Imaging,  
ČVUT FEL, Neovision, OPTEN, OPTAX.

# Přístroje PiKRON – INGOS



- Analyzátor aminokyselin AAA-400



- Programovatelná čerpadla LCP s nízkotlakým gradientem



- UV-Vis detektor LCD5000

- Dávkovač LCS5040
- Levný filtrový detektor LCD5254
- AD Převodník ULAD 10
- Termostat kolon LCT5000

# Další možné vývojové cíle

- Rozšíření možností práce s nulovou linií
- Výpočty nerozdělených píků
- Sběr a ukládání spekter při STOP-FLOW
- On-line hledání čela píků pro účely řízení sady ventilů nebo mechanického sběrače frakcí (pro zrychlení vyhodnocení se předpokládá i spolupráce s firmware detektorů)
- Řízení přípravy vzorků a manipulátorů

# CHROMULAN – chromatografický systém pro každého



- Volně šiřitelný program i zdrojový kód
- Download: <http://www.chromulan.org>  
<http://www.pikron.com>
- Přístroje: <http://www.ingos.cz>
- Placena pouze uživatelská podpora
- Neomezená možnost rozšiřování funkcí, podporovaných zařízení a datových formátů



# EUROPE

