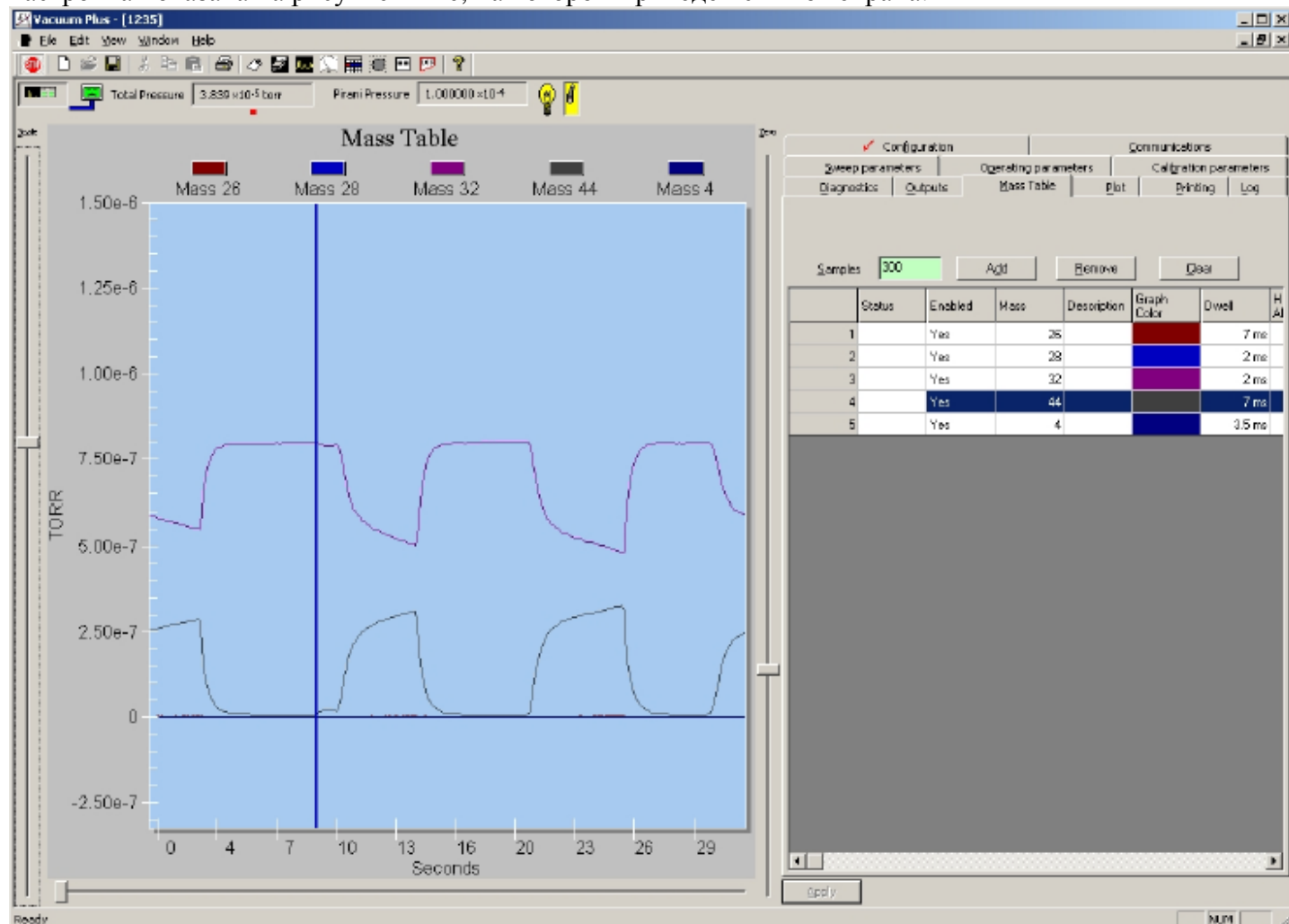


Указание по применению № 103: использование XML-данных режима Trend (Тренд) в Excel

Краткий обзор: XML-данные из ПО VacuumPlus имеют фиксированный формат, как показано в руководстве Extorr. Этот же формат используется для инкапсуляции вывода из режима Trend. В данном указании по применению рассматривается использование вывода XML-данных в Microsoft Excel для анализа, настройки и отображения этих данных. Приведен пример анализа выдыхаемого воздуха, поступающего в вакуумную камеру через ограничительный капилляр.

Для примера, система Extorr была настроена в режиме Trend для мониторинга пяти пиков в течение 100 мс. В режиме Trend ПО сообщает максимальное значение среди пяти равноотстоящих позиций масс в пределах $\frac{1}{4}$ а.е.м. точной позиции массы. Таким образом осуществляется коррекция любых возможных ошибок определения массы из-за настроек или дефектов массы. Каждое из заданных времен выдержки необходимо умножить на пять, чтобы получить время, затраченное на каждую позицию номинальной массы. В этом примере для мониторинга выбраны массы 26, 28, 32, 44 и 4 а.е.м. Время выдержки для каждой массы равно 20,5 мс, а общее время выдержки составляет приблизительно 100 мс. Эта настройка показана на рисунке ниже, на котором приведен снимок экрана.



Капилляр из плавленного кварца использовался в качестве ввода в вакуумную систему, откачиваемую турбомолекулярным насосом, с анализатором остаточных газов Extorr. Конец капилляра был помещен в пластиковую трубку диаметром $\frac{1}{4}$ дюйма, в которую и производился выдох и вдох. Это показано на снимке окна графического интерфейса пользователя Vacuum Plus на рисунке выше.

Для экспорта данных, приведенных на этом графике, с целью последующего анализа, выберите «File (Файл) > Save as XML (Сохранить как XML)». Накопленные данные помещаются в файл в формате XML, который можно открыть в любом браузере.

Затем эти данные можно импортировать в любую другую программу, поддерживающую формат XML. В частности, чтобы импортировать данный файл в Microsoft Excel выберите «Data (Данные) > Import External Data (Импорт внешних данных) > Import Data (Импорт данных)». Просто укажите имя и путь конкретного файла в диалоговом окне результирующего файла, и эти данные вводятся в Excel в формате, указанном ниже.

1	/Data										
2	/@HighMass	/@HighMass/#agg	/@LowMass	/@LowMass/#agg	/@Sample	/@Sample/#agg	/@SamplesPerAMU	/@SamplesPerAMU/#agg	/@Units	/Sample/@Value	
3	50	50	12	12	0	0	10	10	Torr	2.22126E-09	
4	50		12		0		10		Torr	3.04857E-06	
5	50		12		0		10		Torr	5.9175E-07	
6	50		12		0		10		Torr	2.53196E-07	
7	50		12		0		10		Torr	-1.80319E-10	
8	50		12		0		10		Torr	2.24894E-09	
9	50		12		0		10		Torr	3.04285E-06	
10	50		12		0		10		Torr	5.85072E-07	
11	50		12		0		10		Torr	2.54159E-07	
12	50		12		0		10		Torr	-9.62938E-11	
13	50		12		0		10		Torr	2.25278E-09	
14	50		12		0		10		Torr	3.03886E-06	
15	50		12		0		10		Torr	5.85399E-07	
16	50		12		0		10		Torr	2.55474E-07	
17	50		12		0		10		Torr	-2.49291E-10	
18	50		12		0		10		Torr	2.17729E-09	
19	50		12		0		10		Torr	3.03273E-06	
20	50		12		0		10		Torr	5.84994E-07	
21	50		12		0		10		Torr	2.57382E-07	
22	50		12		0		10		Torr	-1.42441E-10	
23	50		12		0		10		Torr	2.29354E-09	
24	50		12		0		10		Torr	3.03141E-06	
25	50		12		0		10		Torr	5.82784E-07	
26	50		12		0		10		Torr	2.59067E-07	
27	50		12		0		10		Torr	-4.93174E-11	
28	50		12		0		10		Torr	2.20285E-09	
29	50		12		0		10		Torr	3.03088E-06	
30	50		12		0		10		Torr	5.80322E-07	
31	50		12		0		10		Torr	2.60000E-07	

Обратите внимание, что это тот же формат, который имеют и данные развертки. Из всех приведенных сведений, полезны только данные в столбце J. Учтите, что данные приведены группами по пять записей, каждая запись данных соответствует одной из масс за один интервал времени. Вручную проводить дальнейший анализ этих данных в таком формате трудно, однако можно написать макрос Excel в VBA для выполнения над этими данными операции, обратной свертке. Приведенный ниже макрос запрашивает сведения о наборе данных, имени файла на рабочем столе, затем сортирует выходные данные для каждой массы по отдельным столбцам.

```
Sub Deconvolute()
```

```
' Deconvolute() will ask for .xml files located in the C: directory.
```

```
' Information about the data set is asked for and the single data
```

```
' column will deconvolute into single mass columns .
```

```
ActiveCell.FormulaR1C1 = "# Samples" 'Fill out new column labels.
Range("C1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "Mass1"
Range("D1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "Mass2"
Range("E1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "Mass3"
Range("F1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "Mass4"
Range("G1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "Mass5"
Range("H1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "Mass6"
Range("I1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "Mass7"
Range("J1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "Mass8"
Range("K1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "Mass9"
Range("L1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "Mass10"
Range("B1").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = "# Masses"
Range("A2").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = InputBox("Enter the number of sampes taken")
Range("B2").Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = InputBox("Enter the number of masses measured")
Range("C2").Select
' Input masses used
For x = 1 To Range("B2")
ActiveCell.FormulaR1C1 = InputBox("Enter Mass")
ActiveCell.Offset(0, 1).Select
Next
```

```

'Input .xml file starting at "A3".
Range("A3").Select
Filename$ = InputBox("Enter name of file located in C: on desktop(do not type .xml extension)")
With ActiveSheet.QueryTables.Add(Connection:= _
"FINDER;C:\\" + Filename$ + ".xml", _
Destination:=Range("A3"))
.Name = "Breath"
.FieldNames = True
.RowNumbers = False
.FillAdjacentFormulas = False
.PreserveFormatting = True
.RefreshOnFileOpen = False
.BackgroundQuery = True
.RefreshStyle = xlInsertDeleteCells
.SavePassword = False
.SaveData = True
.AdjustColumnWidth = True
.RefreshPeriod = 0
.WebSelectionType = xlAllTables
.WebFormatting = xlWebFormattingNone
.WebPreFormattedTextToColumns = True
.WebConsecutiveDelimitersAsOne = True
.WebSingleBlockTextImport = False
.WebDisableDateRecognition = False
.WebDisableRedirections = False
.Refresh BackgroundQuery:=False
End With
'Clean out unused headers.
Range("A3:P4").Select
Selection.Delete Shift:=xlUp
Range("A3:I1503").Select
Selection.Delete Shift:=xlToLeft
'Do the deconvolution.
For x = 0 To Range("A2")
For z = 1 To Range("B2")
y$ = Chr(66 + z) + Trim(Str$(x + 4))
Range("A3").Select
Selection.Cut
Range(y$).Select
ActiveSheet.Paste
Range("A3").Select
Selection.Delete Shift:=xlUp
Selection.Cut
Next z
Next x
End Sub

```

После выполнения этой операции можно проводить последующий анализ. Например, данные были получены в показателях парциальных давлений в торрах. Если нужно представить результаты в виде процентов, то чтобы получить результат первого порядка умножьте каждое значение на 100 и разделите на сумму всех показаний в каждом интервале времени. Полученные результаты можно уточнить путем умножения выходного значения для каждой массы на значение чувствительности, которое учитывает соответствующее поперечное сечение ионизации и модель фрагментации молекулы для каждого из отслеживаемых газов. Также необходимо определить масштаб по оси времени, отмечая время, затраченное для каждого отсчета. Ниже приведен макрос, выполняющий эти операции для вышеуказанных данных.

```

Sub Analyze5()
'Uses relative sensitivity factors of 1.07 for Oxygen and
'0.8 for Carbon dioxide, normalizes data to 100% and places
'new data in columns I through G
For x = 1 To Range("A2")
Range("I" + Trim(Str$(x + 3))).Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = _
"=RC[-6]*100/(RC[-6]+RC[-5]+1.07*RC[-4]+0.8*RC[-3]+RC[-2])"
Range("J" + Trim(Str$(x + 3))).Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = _
"=RC[-6]*100/(RC[-7]+RC[-6]+1.07*RC[-5]+0.8*RC[-4]+RC[-3])"
Range("K" + Trim(Str$(x + 3))).Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = _
"=RC[-6]*107/(RC[-8]+RC[-7]+1.07*RC[-6]+0.8*RC[-5]+RC[-4])"
Range("L" + Trim(Str$(x + 3))).Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = _
"=RC[-6]*80/(RC[-9]+RC[-8]+1.07*RC[-7]+0.8*RC[-6]+RC[-5])"
Range("M" + Trim(Str$(x + 3))).Select
ActiveCell.FormulaR1C1 = _
"=RC[-6]*100/(RC[-10]+RC[-9]+1.07*RC[-8]+0.8*RC[-7]+RC[-6])"
Next
End Sub and displays the data on a plot as a function of time.

```

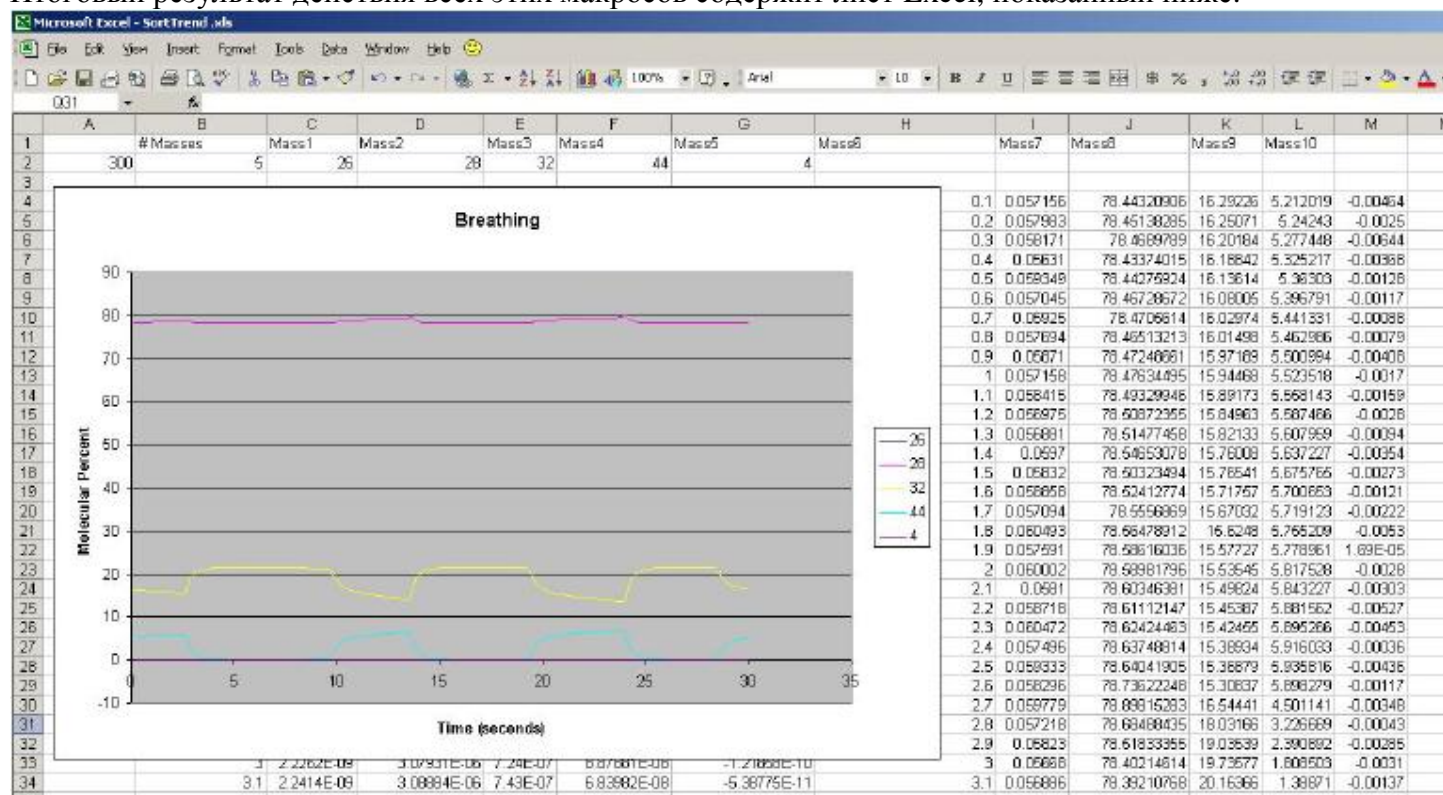
Затем можно применить временные данные, используя нижеследующий макрос.

```
Sub MakeTime()
'
' MakeTime Macro
' This asks for the time information and makes time
Range("H4").Select
TimeInt = InputBox("Enter the sum of the dwell times for the sampes taken.")
For x = 1 To Range("A2")
ActiveCell.Value = 5 * x * TimeInt
ActiveCell.Offset(1, 0).Select
Next x
End Sub
```

В заключение можно отобразить данные на графике, используя макрос построения графика.

```
Sub MakeTrendPlot5()
'
' MakeTrendPlot5 Macro
Range("H4:M303").Select
Range("M303").Activate
Charts.Add
ActiveChart.ChartType = xlXYScatterSmoothNoMarkers
ActiveChart.SetSourceData Source:=Sheets("Sheet1").Range("H4:M303"), PlotBy _
:=xlColumns
ActiveChart.SeriesCollection(1).Name = """"26""""
ActiveChart.SeriesCollection(2).Name = """"28""""
ActiveChart.SeriesCollection(3).Name = """"32""""
ActiveChart.SeriesCollection(4).Name = """"44""""
ActiveChart.SeriesCollection(5).Name = """"4""""
ActiveChart.Location Where:=xlLocationAsObject, Name:="Sheet1"
With ActiveChart
.HasTitle = True
.ChartTitle.Characters.Text = "Breathing"
.Axes(xlCategory, xlPrimary).HasTitle = True
.Axes(xlCategory, xlPrimary).AxisTitle.Characters.Text = "Time (seconds)"
.Axes(xlValue, xlPrimary).HasTitle = True
.Axes(xlValue, xlPrimary).AxisTitle.Characters.Text = "Molecular Percent"
End With
Windows("SortTrend.xls").ScrollRow = 3
Windows("SortTrend.xls").ScrollRow = 2
Windows("SortTrend.xls").ScrollRow = 1
ActiveSheet.Shapes("Chart 1").IncrementLeft -284.25
ActiveSheet.Shapes("Chart 1").IncrementTop -192#
ActiveWindow.Visible = False
Windows("SortTrend.xls").Activate
Range("Q31").Select
End Sub
```

Итоговый результат действия всех этих макросов содержит лист Excel, показанный ниже.



Приведена, конечно, не полная картина анализа «дыхания» вакуумной камеры, поскольку, например, мы не учитывали водяной пар, который чрезвычайно отличается для вдыхаемого и выдыхаемого воздуха. Данное указание предназначено только для демонстрации использования макроса Excel с целью уточнения и отображения необработанных данных.