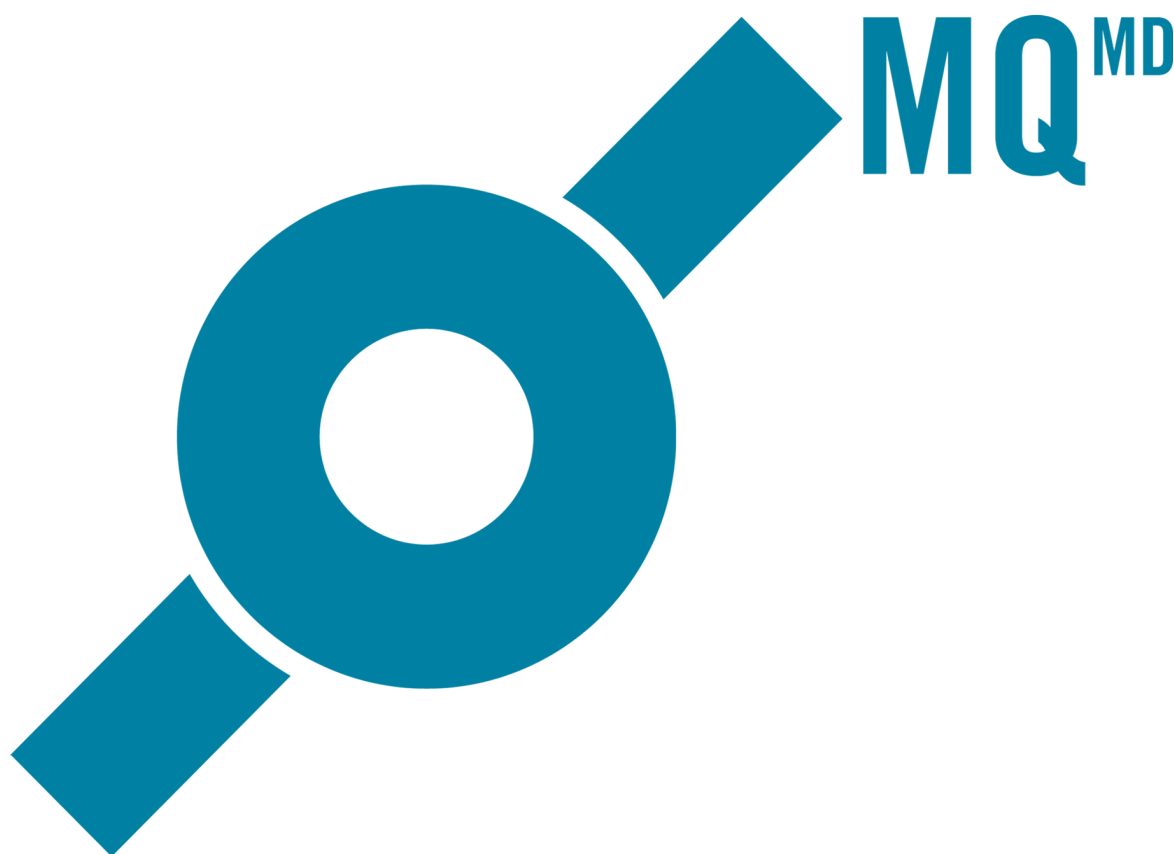


---

# Software MultiQuant™ MD 3.0.3

Guida di riferimento



Il presente documento è fornito ai clienti che hanno acquistato le apparecchiature SCIEX come guida per l'uso e il funzionamento di queste ultime. Il presente documento è protetto da copyright e qualsiasi riproduzione, parziale o totale, dei contenuti del presente documento è severamente vietata, salvo il rilascio di un'autorizzazione scritta da parte di SCIEX.

IVD

Il software menzionato nel presente documento viene fornito con un contratto di licenza. La copia, le modifiche e la distribuzione del software attraverso qualsiasi mezzo sono vietate dalla legge, salvo diversa indicazione presente nel contratto di licenza. Inoltre, il contratto di licenza può vietare che il software venga disassemblato, sottoposto a ingegneria inversa o decompilato per qualsiasi fine. Le garanzie sono indicate nel presente documento.

Alcune parti di questo documento possono far riferimento a produttori terzi e/o ai loro prodotti, che possono contenere parti i cui nomi siano registrati e/o siano usati come marchi registrati dei rispettivi proprietari. Tali riferimenti mirano unicamente a designare i prodotti di terzi forniti da SCIEX e incorporati nelle sue apparecchiature e non implicano alcun diritto e/o licenza circa l'utilizzo o il permesso concesso a terzi di utilizzare i nomi di tali produttori e/o dei loro prodotti come marchi registrati.

CE

Le garanzie di SCIEX sono limitate alle garanzie espresse fornite al momento della vendita o della licenza dei propri prodotti e costituiscono le uniche ed esclusive dichiarazioni, garanzie e obblighi di SCIEX. SCIEX non concede altre garanzie di nessun tipo, né espresse né implicite, comprese, a titolo esemplificativo, garanzie di commerciabilità o di idoneità per uno scopo particolare, derivanti da leggi o altri atti normativi o dovute a pratiche ed usi commerciali, tutte espressamente escluse, né si assume alcuna responsabilità o passività potenziale, compresi danni indiretti o conseguenti, per qualsiasi utilizzo da parte dell'acquirente o per eventuali circostanze avverse conseguenti.

#### **Per Uso Diagnostico In Vitro.**

##### **Rx only.**

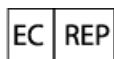
Non disponibile in tutti i paesi. Per i dettagli, contattare un rappresentante di vendita SCIEX.

AB Sciex è sul mercato come SCIEX.

I marchi registrati menzionati nel presente documento sono di proprietà di AB Sciex Pte. Ltd. o dei rispettivi proprietari.

AB SCIEX™ è utilizzato su licenza.

© 2017 AB Sciex



AB Sciex Netherlands B.V.  
1e Tochtweg 11,  
2913LN Nieuwerkerk aan den IJssel  
Paesi Bassi



AB Sciex Pte. Ltd.  
Blk 33, #04-06  
Marsiling Ind Estate Road 3  
Woodlands Central Indus. Estate.  
SINGAPORE 739256

# Contenuto

---

<b>1 Introduzione al software.....</b>	<b>7</b>
Help del software.....	7
Tipo di file.....	8
Per contattarci.....	8
Assistenza tecnica.....	8
<b>2 Menu File.....</b>	<b>9</b>
Importare un metodo di quantificazione.....	10
Sottomenu Export.....	11
Esportazione delle Results Table.....	11
Esportazione della metrica della Results Table.....	13
Trasferimento a LIMS.....	14
<b>3 Menu Edit.....</b>	<b>15</b>
Modifica il metodo delle Results Table.....	17
Default calibrazione e unità progetto.....	18
Impostare esportazione sicura progetto.....	18
<b>4 Menu Process.....</b>	<b>19</b>
Esportazione della calibrazione.....	19
Importazione della calibrazione esterna.....	20
<b>5 Menu Audit Trail.....</b>	<b>22</b>
Audit Trail Viewer.....	22
Visualizzazione dei risultati di Audit Trail nell'Audit Trail Viewer.....	22
Esecuzione di una ricerca per parola chiave.....	24
Filtraggio degli eventi controllati.....	24
Esportazione di Audit Trail Viewer.....	26
Stampa dell'Audit Trail Viewer.....	26
Audit Trail Manager.....	26
Informazioni sulle mappe di audit.....	27
Creazione di una mappa di audit.....	27
Variazione della mappa di audit.....	30
Modifica della mappa di audit.....	31
Visualizzazione della configurazione di audit integrata.....	33
<b>6 Menu Help.....</b>	<b>35</b>
<b>7 Results Table.....</b>	<b>36</b>
Elenco componenti e gruppi.....	37
Results Table: menu di scelta rapida.....	38
Applicazione delle concentrazioni effettive dell'analita attuale a tutti.....	39
Impostazioni colonne.....	39
Filtro tipo di campione.....	41
Visualizzazione delle righe nascoste.....	41
Finestre di dialogo della Results Table.....	42

## Contenuto

---

Selezione dei campioni.....	42
Selezione del metodo.....	43
Selezione di un campione rappresentativo.....	44
Definizione dei componenti.....	45
Definizione dei parametri di integrazione.....	47
Parametri per gli Outliers.....	50
Colonne della Results Table.....	52
<b>8 Verifica dei picchi.....</b>	<b>60</b>
Manual Integration.....	60
Apply.....	61
Suggerimenti per la revisione dei picchi.....	61
Peak Review: menu di scelta rapida .....	62
Finestra di dialogo Peak Review Options: scheda Appearance.....	62
Finestra di dialogo Peak Review Options: scheda Zooming.....	65
Impostazione del formato titolo revisione picco.....	67
Copia dei parametri.....	67
Incolla parametri.....	67
Impostazione del picco su 'Not Found'.....	68
Utilizzo del picco.....	68
Aggiornamento del metodo di quantificazione per componente.....	68
Aggiornamento del metodo di quantificazione per gruppo.....	68
Applicazione dei parametri di integrazione al campione nel gruppo.....	69
Ripristino del picco al metodo originale.....	69
Ripristino di tutti i picchi per il componente.....	69
<b>9 Revisione dei campioni affiancati.....</b>	<b>70</b>
Esecuzione di una Side-by-Side Sample Review.....	70
<b>10 Riquadro Calibration.....</b>	<b>72</b>
Finestra di dialogo Regression Options.....	72
Suggerimenti per la calibrazione.....	73
Menu tasto destro di Calibration.....	73
<b>11 Tabelle statistiche.....</b>	<b>75</b>
Suggerimenti per la tabella delle statistiche.....	76
Menu tasto destro di Statistics Table.....	77
<b>12 Metric Plot.....</b>	<b>78</b>
Creazione di un Metric Plot.....	78
Salvataggio delle impostazioni di un metric plot.....	78
Suggerimenti per Metric Plot.....	78
Menu tasto destro di Metric Plot.....	79
Finestra di dialogo Regression.....	80
<b>13 Quantitation Method Editor.....</b>	<b>81</b>
Scheda Components.....	81
Sottomenu Groups.....	82
Sottomenu Internal Standards.....	84
Scheda Integration .....	85
Finestra di dialogo Highlight Components.....	86
Finestra di dialogo Update Retention Time.....	86
Scheda Outlier Settings .....	87

<b>14 Esercitazione sul flusso di lavoro dell'analisi di quantificazione.....</b>	<b>89</b>
Informazioni sulle curve di calibrazione.....	89
Prerequisiti.....	89
Modifica delle colonne mostrate nella Results Table.....	89
Elaborazione dei dati utilizzando l'algoritmo di integrazione SignalFinder™.....	91
Impostazione dei parametri di integrazione picchi.....	91
Creazione di una Results Table.....	92
Verifica dei picchi.....	96
Modifica della curva di calibrazione.....	97
Revisione delle statistiche campione.....	98
Elaborazione dei dati utilizzando l'algoritmo di integrazione MQ4.....	99
Impostazione dei parametri di integrazione picchi.....	99
Creazione di una Results Table.....	100
Verifica dei picchi.....	104
Modifica della curva di calibrazione.....	105
Revisione delle statistiche campione.....	106
Algoritmi di integrazione.....	107
Descrizione dell'algoritmo di integrazione SignalFinder.....	107
Parametri dell'algoritmo di integrazione SignalFinder™.....	110
Parametri dell'algoritmo di integrazione MQ4.....	114
Attività facoltative.....	117
Creazione di metric plot.....	117
Creazione di colonne personalizzate.....	117
Informazioni sui file del metodo di quantificazione e sui metodi incorporati.....	118
<b>A Parametri dell'algoritmo di integrazione.....</b>	<b>119</b>
Parametri dell'algoritmo di integrazione SignalFinder.....	119
Parametri dell'algoritmo di integrazione MQ4.....	122
<b>B Equazioni di regressione.....</b>	<b>125</b>
Fattori di pesatura.....	126
Regressioni.....	126
Lineare.....	127
Lineare attraverso lo zero.....	127
Fattore di risposta medio.....	127
Quadratica.....	128
Potenza.....	128
Wagner.....	128
Hill.....	129
Calcolo delle concentrazioni finali.....	129
Lineare.....	129
Lineare attraverso zero e Fattore di risposta medio.....	129
Quadratica.....	129
Potenza.....	129
Wagner.....	129
Hill.....	130
<b>C Report.....</b>	<b>131</b>
Creazione di rapporti.....	131
Creazione di modelli di rapporto personalizzati.....	132

## Contenuto

---

Modelli di rapporti.....	133
Tag dei modelli di rapporto.....	135
<b>D Rumore relativo e calcoli segnale-rumore.....</b>	<b>148</b>
Nota sul rapporto segnale-rumore durante l'utilizzo dell'algoritmo di integrazione SignalFinder.....	152
<b>E Icone del software.....</b>	<b>153</b>
<b>F Accesso al software MultiQuant™ MD.....</b>	<b>160</b>
Impostazioni di sicurezza.....	162
<b>Cronologia delle revisioni.....</b>	<b>166</b>

# Introduzione al software

---

# 1

Questo documento descrive le funzioni disponibili nel software MultiQuant™ MD.

L'accesso al software si basa sul ruolo assegnato all'utente nel software Analyst® MD. Verificare che a ogni utente venga assegnato l'accesso corretto al software.

Sono supportate soltanto le versioni inglesi dei seguenti sistemi operativi Microsoft:

- Windows 7 (32 bit e 64 bit) con SP1
- Windows 10

---

**ATTENZIONE:** Il formato di numeri, valute, data e ora deve essere impostato in inglese (Stati Uniti). L'impostazione del formato a un valore diverso può portare alla generazione di dati errati.

---

Il software MultiQuant™ MD con le funzioni di audit trail e sicurezza richiede la licenza completa e l'installazione del software Analyst® MD.

I modi controllati per emettere i dati dal software sono l'esportazione delle Results Table, il trasferimento a LIS e la creazione di rapporti. Le altre fonti di emissione di dati come copia e incolla dalle Results Table non sono controllate. Gli utenti non devono utilizzare questi metodi di emissione incontrollati a scopo regolamentato.

---

**Nota:** Il software MultiQuant™ MD utilizza le informazioni di blocco schermo del software Analyst® MD. Non sono necessarie impostazioni aggiuntive per il software MultiQuant™ MD.

---

---

**Nota:** È necessario conservare la struttura di file e di cartella per poter visualizzare i cromatogrammi. Se si devono spostare dei dati, spostare l'intero progetto conservando la struttura dei file.

---

## Help del software

Il software contiene suggerimenti e messaggi di errore che forniscono informazioni aggiuntive sulle funzioni del software.

- Se un campo non è disponibile, spostare il cursore sul campo per visualizzare i suggerimenti che spiegano perché la funzione non è disponibile. Le informazioni aggiuntive includono come abilitare il campo o quale impostazione di protezione è necessaria per abilitarlo.
- I messaggi di errore contengono informazioni sulle impostazioni di protezione necessarie per usare la funzione.

## Tipo di file

Tabella 1-1 Tipi di file del software

Tipo di file	Descrizione
*.qsession	Results Table del software MultiQuant. Conserva i dati degli audit trail di quantificazione.
*.qmethod	Metodo di quantificazione del software MultiQuant.
*.qmap	Mappa di audit del software MultiQuant.
*.mqcal	File di calibrazione esterna.
*.cset	File impostazioni colonna.

## Per contattarci

### Assistenza SCIEX

- [sciex.com/contact-us](https://sciex.com/contact-us)
- [sciex.com/request-support](https://sciex.com/request-support)

### Formazione dei clienti

- In Nord America: [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- In Europa: [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- Al di fuori dell'Unione Europea e del Nord America, visitare [sciex.com/education](https://sciex.com/education) per visualizzare le informazioni di contatto.

### Centro di istruzione online

- [SCIEXUniversity](https://sciex.com/sciexuniversity)

Per la guida più aggiornata sulla sicurezza informatica per i prodotti SCIEX, visitare [sciex.com/productsecurity](https://sciex.com/productsecurity).

## Assistenza tecnica

SCIEX e i suoi rappresentanti si affidano a uno staff di tecnici di manutenzione e assistenza formati e qualificati, presenti in tutto il mondo. Saranno felici di rispondere a domande sul sistema o su eventuali problemi tecnici che potrebbero sorgere. Per ulteriori informazioni, visitare il sito web SCIEX all'indirizzo [sciex.com](https://sciex.com).



Tabella 2-1 Opzioni del menu File

Opzione di menu	Descrizione
New Results Table	Esegue la quantificazione di una serie di dati e crea una Results Table. Seleziona i file di dati da elaborare e il metodo di quantificazione da applicare. Fare riferimento a <a href="#">Finestre di dialogo della Results Table a pagina 42</a> .
New Quantitation Method	Dopo la selezione del campione viene creato un Quantitation Method Editor vuoto. Generalmente l'utente crea un metodo all'interno della procedura guidata New Results Table. Tuttavia, questo comando è utile se l'utente vuole creare un metodo ma non vuole applicarlo immediatamente a una raccolta di campioni creando una Results Table. <ul style="list-style-type: none"><li>• Il riquadro di navigazione mostra le sottocartelle, i file wiff e i campioni disponibili nella cartella <b>Data</b> del progetto selezionato.</li><li>• Espandere le singole cartelle per visualizzare eventuali altre sottocartelle o file wiff. Espandere il file wiff per mostrare i campioni disponibili.</li></ul>
Open Results Table	Apri una Results Table precedentemente salvata. Dopo aver selezionato il comando, si apre una finestra di dialogo <b>Open</b> standard. Fare riferimento a <a href="#">Results Table a pagina 36</a> .
Open Quantitation Method	Apri un metodo di quantificazione precedentemente salvato. Dopo aver selezionato il comando, si apre una finestra di dialogo <b>Open</b> standard. Fare riferimento a <a href="#">Quantitation Method Editor a pagina 81</a> .
Save	Consente di salvare la Results Table attiva o il Quantitation Method Editor su file. Se la Results Table o il Quantitation Method Editor non sono mai stati salvati, l'utente dovrà specificare il nome di file. Diversamente, verrà sovrascritta la versione precedente.
Save As	Consente di salvare la Results Table attiva o il Quantitation Method Editor come nuovo file.
Recent Results Table	Contiene voci di sottomenu per ogni Results Table utilizzata di recente. Selezionare una delle voci per aprire il file corrispondente.
Recent Quantitation Methods	Contiene voci di sottomenu per ogni metodo di quantificazione utilizzato di recente. Selezionare una delle voci per aprire il file corrispondente.

Tabella 2-1 Opzioni del menu File (continua)

Opzione di menu	Descrizione
Import	Crea un nuovo metodo di quantificazione da un file di testo. Generalmente l'utente crea un metodo manualmente usando il comando New Quantitation Method (fare riferimento a <a href="#">Quantitation Method Editor a pagina 81</a> ) o durante il processo di creazione di una nuova Results Table (fare riferimento a <a href="#">Results Table a pagina 36</a> ). Questo comando è utile se l'utente vuole creare o modificare un metodo di quantificazione. In questo caso, creare manualmente un metodo, quindi usare il comando <b>Quantitation Method as Text</b> .
Export	Contiene i comandi per l'esportazione dei metodi di quantificazione come file .qmethod o .txt. Fare riferimento a <a href="#">Sottomenu Export a pagina 11</a> . I modi controllati per emettere i dati dal software sono l'esportazione delle Results Table, il trasferimento a LIMS e la creazione di rapporti. Le altre fonti di emissione di dati come copia e incolla dalle Results Table non sono controllate. Gli utenti non devono utilizzare questi metodi di emissione incontrollati per scopi regolamentati.
Transfer to LIMS	Per attivare questa funzione è richiesto un file di licenza LIMS. Fare riferimento a <a href="#">Trasferimento a LIMS a pagina 14</a> .
Export and Save Results Table	L'esportazione delle Results Table è uno dei metodi controllati per l'emissione di dati.
Create Report and Save Results Table	Crea un rapporto in Microsoft Word utilizzando il software Reporter. Fare riferimento a <a href="#">Report a pagina 131</a> . Qualora si crei un modello personalizzato, l'utente è responsabile della relativa convalida. L'utente può solo modificare il formato numero nell'editor dei modelli di rapporti. Se il formato numero non è specificato nel modello, nel rapporto verrà utilizzato il formato presente in <b>Results Table Column Setting</b> .
Exit	Chiude il programma. All'utente viene chiesto di salvare eventuali dati non salvati.

## Importare un metodo di quantificazione

1. Fare clic su **File > Import > Quantitation Method from Text**.
2. Selezionare il file di testo.
3. Selezionare un campione rappresentativo.

Si apre il metodo di quantificazione

4. Salvare il metodo nel formato \*.qmethod in modo che possa essere usato in seguito per la quantificazione di un nuovo set di dati.

## Sottomenu Export

I modi controllati per emettere i dati dal software sono l'esportazione delle Results Table, il trasferimento a LIMS e la creazione di rapporti. Le altre fonti di emissione di dati come copia e incolla dalle Results Table non sono controllate. Gli utenti non devono utilizzare questi metodi di emissione incontrollati a scopo regolamentato.

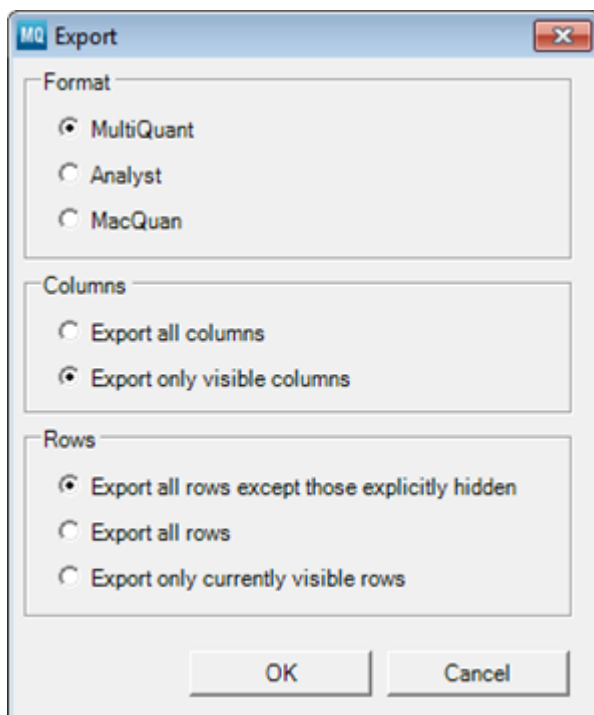
**Tabella 2-2 Opzioni del menu Export**

Opzione di menu	Descrizione
Results Table-Metric	Crea un file di testo delimitato da tabulazioni contenente le informazioni della Results Table attiva. Fare riferimento alla <a href="#">Esportazione della metrica della Results Table a pagina 13</a> .
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod	Esporta il metodo di quantificazione in un nuovo file. Quando viene creata una Results Table, una copia del metodo di quantificazione utilizzato per generare la tabella viene salvata internamente nella tabella. Questo è utile se il metodo di quantificazione originale è stato eliminato o modificato e si desidera applicare il metodo originale ad un nuovo batch di campioni creando una Results Table.
Results Table's Quantitation Method as Text	Esporta una copia del metodo in formato testo. Quando viene creata una Results Table, una copia del metodo di quantificazione utilizzato per generare la tabella viene salvata internamente nella tabella.
Quantitation Method as Text	Questi file contengono una riga di intestazione e una riga per ogni componente (analita o standard interno). Vi è una colonna per il nome del componente, l'intervallo di massa, ciascun parametro di integrazione e così via. Le righe di intestazione non devono essere modificate né si devono aggiungere o eliminare delle colonne se il metodo di quantificazione deve essere importato nel software MultiQuant™ MD. Se si modifica una riga di intestazione di una colonna che specifica un parametro di integrazione o se viene eliminata la colonna stessa, il valore predefinito specificato in User Integration Defaults per quel parametro di integrazione verrà applicato per tutti i componenti. Se viene modificata o eliminata la riga di intestazione di qualunque altra colonna, il metodo non verrà importato. L'utente deve aprire il metodo e confermare che tutte le modifiche richieste siano presenti nel metodo di quantificazione importato. Fare riferimento alla <a href="#">Tabella 2-1</a> .

## Esportazione delle Results Table

**Nota:** Il produttore non si assume alcuna responsabilità o passività potenziale, compresi danni indiretti o conseguenti, dopo che i dati sono stati esportati dal software. La Results Table viene esportata con precisione completa, indipendentemente dal formato numero presente nelle impostazioni delle colonne.

Figura 2-1 Finestra di dialogo Export



Etichetta	Descrizione
<b>Format</b>	
MultiQuant	Consente di esportare con la massima precisione. In questo formato il file di testo contiene una riga di intestazione che utilizza gli stessi nomi di colonna mostrati nella <b>Results Table</b> . Questo è il formato consigliato per l'esportazione delle <b>Results Table</b> .
Analyst	Selezionare per esportare con la precisione definita nell'impostazione della colonna. Questo formato è lo stesso formato esportato dalle <b>Results Table</b> di quantificazione del software Analyst <sup>®</sup> MD. La differenza tra questo formato e il formato precedente è che le intestazioni di colonna usano nomi leggermente differenti in alcuni casi (per trovare corrispondenza con il formato del software Analyst <sup>®</sup> MD) e vi sono righe di intestazione aggiuntive per ogni analita per la descrizione della calibrazione.
MacQuan	Questo formato è simile al software Analyst <sup>®</sup> MD, tranne per il fatto che i nomi di intestazione delle colonne corrispondono a quelli usati dal pacchetto di quantificazione MacQuan.
<b>Columns</b>	
Export all columns	Selezionare per esportare tutti i campi possibili, comprese le colonne attualmente nascoste nella <b>Results Table</b> .

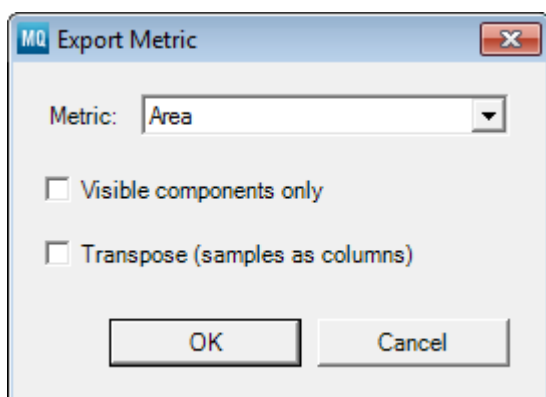
Etichetta	Descrizione
Export only visible columns	Selezionare per esportare solo le colonne attualmente mostrate nella <b>Results Table</b> . L'utente può anche selezionare quali colonne sono visibili usando il comando <b>Results Table Column Settings</b> . Fare riferimento a <a href="#">Results Table: menu di scelta rapida a pagina 38</a> .
<b>Rows</b>	
Export all rows except those explicitly hidden	Selezionare per esportare tutte le righe tranne quelle nascoste a seguito di filtri specifici. Fare riferimento a <a href="#">Icone del software a pagina 153</a> . Le righe nascoste in base al filtro <b>Sample Type</b> o <b>Component</b> vengono esportate.
Export all rows	Selezionare per esportare tutte le righe (cioè tutti i componenti di tutti i campioni).
Export only currently visible rows	Selezionare per esportare solo le righe attualmente mostrate nella <b>Results Table</b> . Le righe nascoste in base al filtro <b>Sample Type</b> o <b>Component</b> non vengono incluse.

## Esportazione della metrica della Results Table

**Nota:** Il produttore non si assume alcuna responsabilità o passività potenziale, compresi danni indiretti o conseguenti, dopo che i dati sono stati esportati dal software. La **Results Table** viene esportata con precisione completa, indipendentemente dal formato numero presente nelle impostazioni delle colonne.

Viene utilizzata per creare un file di testo delimitato da tabulazioni contenente le informazioni della Results Table attiva.

**Figura 2-2 Finestra di dialogo Export Metric**



## Menu File

Etichetta	Descrizione
Metric	Selezionare il campo da esportare. Fare riferimento a <a href="#">Colonne della Results Table a pagina 52</a> .
Visible components only	Se questa opzione è selezionata, vengono esportati nel file solo quei componenti per i quali almeno una riga corrispondente è attualmente visibile nella Results Table. Se questa opzione non viene selezionata, le informazioni sono esportate per tutti i componenti.
Transpose (samples as columns)	Se questa opzione viene selezionata, il file risultante ha una colonna per ciascun campione e una riga per ciascun componente (analita o standard interno). Se non viene selezionata, c'è una colonna per ciascun componente e una riga per ciascun campione.

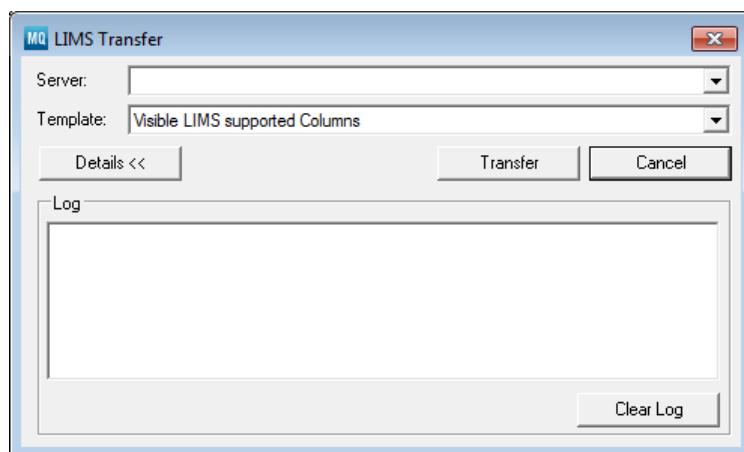
## Trasferimento a LIMS

Questo comando è disponibile solo quando la Results Table è aperta. Per attivare questa funzione è richiesto un file di licenza LIMS.

I modi controllati per emettere i dati dal software sono l'esportazione delle Results Table, il trasferimento a LIMS e la creazione di rapporti. Le altre fonti di emissione di dati come copia e incolla dalle Results Table non sono controllate. Gli utenti non devono utilizzare questi metodi di emissione incontrollati per scopi regolamentati.

1. Fare clic su **Help > Install License** per attivare una licenza.

**Figura 2-3 Finestra di dialogo LIMS Transfer**



2. Inserire il nome del server nel campo **Server** nel seguente formato: **http:\\indirizzo IP server;numero porta**.
3. Selezionare un modello dall'elenco **Template**.
4. Fare clic su **Transfer**.

Tabella 3-1 Opzioni del menu Edit

Opzione di menu	Descrizione
Clear	Cancella la selezione corrente. Da utilizzare quando nella scheda <b>Components</b> del <b>Quantitation Method Editor</b> vi sono una o più righe selezionate.
Copy	Quando la <b>Results Table</b> è attiva, questo comando copia la porzione selezionata della tabella negli appunti. Quando il plot <b>Peak Review</b> o <b>Calibration</b> è attivo, ne viene copiata un'immagine.
Paste	Quando la <b>Results Table</b> è attiva con un'area selezionata modificabile, questo comando incolla celle o colonne dagli appunti.
Copy Entire Table	Quando una <b>Results Table</b> o una <b>Statistics Table</b> è attiva, questo comando copia tutti i dati negli appunti. Nel caso di una <b>Results Table</b> , vengono copiate solo le righe e colonne attualmente visibili.
Fill Down	Quando la <b>Results Table</b> è attiva con un'area selezionata modificabile, questo comando copia le informazioni della prima riga selezionata in tutte le righe successive selezionate.
Select all Rows	Seleziona tutte le righe nella <b>Results Table</b> o nella <b>Statistics Table</b> attualmente attiva. È utile se l'utente vuole in seguito applicare un comando, ad esempio <b>Copy</b> , che agisce sulle righe selezionate.
Modifica il metodo delle Results Table	<p>Modificare il metodo di quantificazione associato alla <b>Results Table</b> attiva corrente. Questa opzione è utile se l'utente vuole aggiungere o rimuovere i componenti. Per modificare solo i parametri di integrazione, usare <b>Update Quantitation Method for Group</b>. Fare riferimento a <a href="#">Verifica dei picchi a pagina 60</a>.</p> <p>Quando si seleziona il comando, si apre la finestra di dialogo <b>Quantitation Method Editor</b>. I dati vengono rielaborati e la <b>Results Table</b> si aggiorna per mostrare i nuovi dati. Fare riferimento a <a href="#">Quantitation Method Editor a pagina 81</a> e <a href="#">Finestre di dialogo della Results Table a pagina 42</a>.</p> <p>Riapplicando il <b>Quantitation Method</b> si sovrascrivono tutti i picchi modificati manualmente per il componente specificato e si deselectano le caselle di controllo nella colonna <b>Modified</b> nella Results Table.</p>

**Tabella 3-1 Opzioni del menu Edit (continua)**

Opzione di menu	Descrizione
Project Integration Defaults	Imposta i parametri predefiniti di rilevamento picchi utilizzati durante la creazione di un metodo di quantificazione. Se vi sono pochi componenti, impostare i valori predefiniti in base alla cromatografia in modo da non doverli regolare singolarmente per ogni componente. Tuttavia, nessun set di parametri è da considerarsi ottimale per tutti i componenti, pertanto per alcuni di essi può essere necessario regolare alcuni parametri singolarmente. Fare riferimento a <a href="#">Parametri dell'algoritmo di integrazione a pagina 119</a> .
Project Units & Calibration Defaults	Imposta le unità di concentrazione e i parametri di regressione predefiniti utilizzati durante la creazione di un nuovo metodo di quantificazione. L'utente può anche impostare questi parametri durante la creazione del metodo stesso. Tuttavia, se vengono utilizzate le stesse impostazioni, sarà più facile impostare i valori predefiniti dopo l'utilizzo di questo comando. Fare riferimento a <a href="#">Default calibrazione e unità progetto a pagina 18</a> .
Project Secure Export Settings	Se selezionata, i dati nel file di testo vengono crittografati durante l'esportazione. Impostare una password per abilitare la crittografia. Fare riferimento a <a href="#">Impostare esportazione sicura progetto a pagina 18</a> .
Enable Project Modified Peak Warning	Per impostazione predefinita questa opzione non è selezionata. Se è selezionata, quando l'utente apporta delle modifiche a un cromatogramma in una <b>Results Table</b> e le salva, appare un messaggio di avviso che indica che è stata apportata una modifica. L'utente può continuare con il salvataggio o tornare alla <b>Results Table</b> . Fare riferimento a <a href="#">Modifica il metodo delle Results Table a pagina 17</a> .



Tabella 3-1 Opzioni del menu Edit (continua)

Opzione di menu	Descrizione
Cache Chromatograms for Faster Peak Review	<p>Quando si attiva questa funzione, ogni volta che un cromatogramma ioni estratti (XIC) è calcolato per un campione e un componente particolare, viene salvato per essere riutilizzato in futuro fino a quando la Results Table associata rimane aperta.</p> <p>Ad esempio, se l'utente crea una <b>Results Table</b> quando questa funzione è abilitata, i cromatogrammi nel riquadro <b>Peak Review</b> appaiono velocemente perché sono stati precedentemente memorizzati durante il processo di integrazione iniziale per creare la <b>Results Table</b> e non devono essere ricalcolati in base alle informazioni nel file wiff. Se l'utente apre una <b>Results Table</b> precedentemente salvata, i singoli cromatogrammi devono essere calcolati la prima volta che appaiono nel riquadro <b>Peak Review</b>. Tuttavia, il ritorno a un particolare cromatogramma precedente sarà più veloce.</p> <p>Il computer deve disporre di memoria sufficiente per contenere tutti i cromatogrammi. Tuttavia, per set di campioni molto grandi con un maggior numero di analiti, questa opzione deve essere disabilitata per evitare la comparsa di messaggi di memoria esaurita.</p>
Cache all Chromatograms Now	<p>Quando si abilita il comando <b>Cache Chromatograms for Faster Peak Review</b>, questo comando viene usato per calcolare e memorizzare tutti i cromatogrammi per la <b>Results Table</b> attiva. Per un set di dati di grandi dimensioni, l'esecuzione di questo comando può richiedere un po' di tempo. Tuttavia, al termine, tutti i cromatogrammi vengono memorizzati nella cache e il processo di revisione dei picchi è più veloce. Il comando può essere interrotto, se necessario.</p> <p>Eseguire questa operazione se vengono revisionati diversi cromatogrammi. Se inizialmente è stata attivata l'opzione <b>Cache Chromatograms for Faster Peak Review</b>, questa operazione non deve essere ripetuta dopo la creazione di una <b>Results Table</b> in quanto i cromatogrammi sono già contenuti nella cache. Questo comando è utile dopo l'apertura di una <b>Results Table</b> salvata in precedenza.</p>

## Modifica il metodo delle Results Table

Modifica il metodo di quantificazione associato alla Results Table attiva corrente. Questa opzione è utile se l'utente vuole aggiungere o rimuovere i componenti. Per modificare solo i parametri di integrazione, usare il comando **Update Quantitation Method for Group**. Fare riferimento a [Aggiornamento del metodo di quantificazione per gruppo a pagina 68](#).

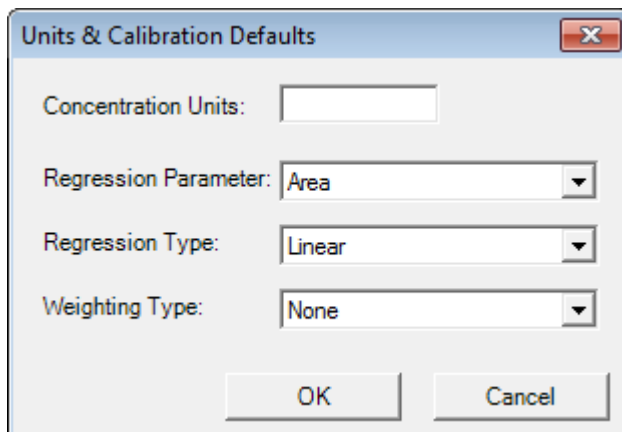
Quando si seleziona il comando, si apre la finestra di dialogo Quantitation Method Editor. I dati vengono rielaborati e la Results Table si aggiorna per mostrare i nuovi dati. Fare riferimento a [Quantitation Method Editor a pagina 81](#).

Riapplicando il metodo di quantificazione si sovrascrivono tutti i picchi modificati manualmente per il componente specificato e si deselectano le caselle di controllo nella colonna **Modified** nella **Results Table**.

## Default calibrazione e unità progetto

Impostare i valori di **Concentration Units**, **Regression Parameter** (Area o Height), **Regression Type** e **Weighting Type**. I diversi tipi di regressione e pesatura sono descritti in [Equazioni di regressione a pagina 125](#).

Figura 3-1 Finestra Units & Calibration Defaults



## Impostare esportazione sicura progetto

Durante l'esportazione, i dati nel file di testo vengono crittografati. Impostare una password per abilitare la crittografia. Fare riferimento alla [Figura 3-2](#).

Figura 3-2 Finestra di dialogo Secure Export Settings

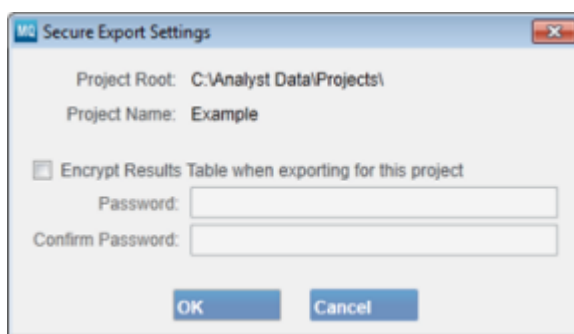


Tabella 4-1 Opzioni del menu Process

Opzione di menu	Descrizione
Add Samples	<p>Aggiunge altri campioni a una <b>Results Table</b> attualmente attiva. Fare riferimento a <a href="#">Selezione dei campioni a pagina 42</a>.</p> <p>Appare una barra di progressione mentre i nuovi campioni vengono integrati e aggiunti alla tabella esistente. Per eseguire questa attività l'utente deve avere abilitato il permesso <b>Add samples to Results Table</b>.</p>
Remove Selected Samples	<p>Rimuove i campioni selezionati da una <b>Results Table</b> attualmente attiva. Per eseguire questa attività l'utente deve avere abilitato il permesso <b>Remove samples from Results Table</b>.</p>
Show Only Outliers	<p>Mostra le righe che contengono valori anomali. Fare clic su <b>Process &gt; Show Only Outliers</b>.</p> <p>Per mostrare tutte le righe, fare nuovamente clic su <b>Process &gt; Show Only Outliers</b>.</p>
Go to Next Outlier	<p>Passa al valore anomalo successivo nella <b>Results Table</b>. Fare clic su <b>Process &gt; Go to Next Outlier</b>.</p>
Export Calibration and Save Results Table	<p>Salva una copia dell'equazione di calibrazione per tutti gli analiti associati alla <b>Results Table</b> attiva ad un file esterno (*.mqcal). In questo modo, la calibrazione da una serie di campioni standard può essere applicata ad altri campioni che non fanno parte della stessa <b>Results Table</b>. Fare riferimento a <a href="#">Esportazione della calibrazione a pagina 19</a>.</p>
Importazione della calibrazione esterna	<p>Applica una calibrazione precedentemente esportata alla <b>Results Table</b> attiva. Un'alternativa all'uso di questo comando consiste nello specificare il file di calibrazione esterna dalla procedura guidata <b>New Results Table</b> come descritto in <a href="#">Definizione dei parametri di integrazione a pagina 47</a>. Fare riferimento a <a href="#">Importazione della calibrazione esterna a pagina 20</a>.</p>
Remove External Calibration	<p>Rimuove una calibrazione esterna precedentemente applicata da una <b>Results Table</b> attiva.</p>

## Esportazione della calibrazione

Salva una copia dell'equazione di calibrazione per tutti gli analiti associati alla **Results Table** attiva ad un file esterno (\*.mqcal). In questo modo, la calibrazione da una serie di campioni standard può essere applicata ad altri campioni che non fanno parte della stessa **Results Table**.

Il flusso di lavoro tipico è il seguente:

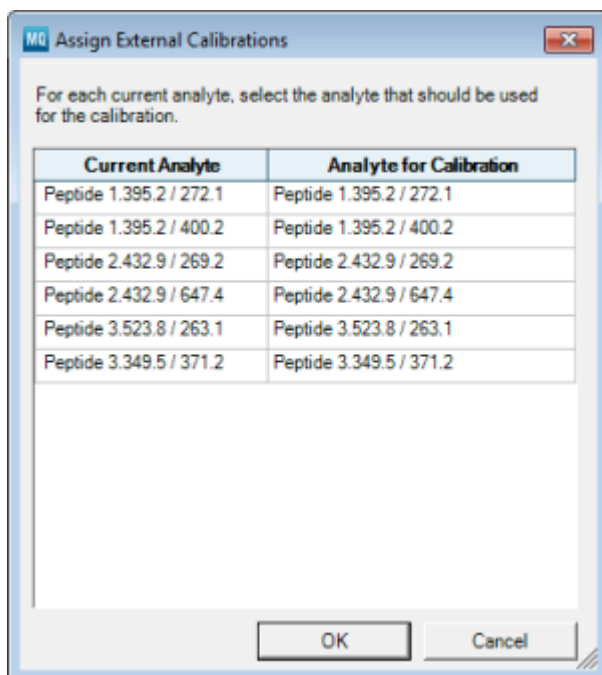
1. Creare una nuova **Results Table** contenente solo lo **Standard**.
2. Usare il riquadro **Peak Review** per verificare la correttezza dell'integrazione.
3. Usare il comando **Export Calibration** per salvare una copia della calibrazione.
4. Creare una nuova **Results Table** contenente campioni con concentrazione sconosciuta.
5. Applicare la calibrazione precedentemente esportata alla nuova tabella usando il comando **Import External Calibration** o specificando il file di calibrazione.
6. Ripetere i punti 4 e 5 secondo necessità.

Se la **Results Table** originale (con i campioni **Standard**) viene modificata, le eventuali calibrazioni precedentemente esportate non vengono aggiornate automaticamente. La **Results Table** deve essere esportata nuovamente.

## Importazione della calibrazione esterna

Se nella **Results Table** corrente vengono usati gli stessi nomi di analita presenti nella calibrazione esportata, la finestra di dialogo viene completata automaticamente e l'utente può fare clic su **OK**. Se gli analiti nella **Results Table** corrente vengono assegnati a gruppi specifici e se gli analiti nella calibrazione esportata vengono assegnati a gruppi con nomi identici, la finestra di dialogo verrà completata automaticamente. Se vi sono solo alcuni analiti, usare gli stessi nomi di analita in entrambi i casi o usare nomi **Group** coerenti.

**Figura 4-1** Finestra di dialogo Assign External Calibrations



---

Etichetta	Descrizione
Current Analyte	Contiene un inserimento per ogni analita del metodo di quantificazione per la <b>Results Table</b> corrente.
Analyte for Calibration	Contiene un elenco dei nomi di tutti gli analiti disponibili nel file di calibrazione esterno. Per ciascun analita corrente, selezionare l'analita esterno corrispondente da cui proviene la calibrazione.

**Nota:** La mappa di audit viene aggiunta alla sessione alla creazione della **Results Table**. Dopo essere stata aggiunta non può essere modificata.

**Tabella 5-1 Menu Audit Trail**

Voce di menu	Descrizione
Audit Trail Viewer	Apri <b>Audit Trail Viewer</b> .
Audit Map Manager	Seleziona, modifica e attiva <b>Audit Maps</b> .
View Session Audit Map	Apri la mappa corrente della <b>Results Table</b> attiva.

## Audit Trail Viewer

L'Audit Trail Viewer mostra la cronologia completa di un particolare campione nella Results Table. Le Results Table vengono salvate nella cartella <unità>:\Analyst Data\Projects\<nome progetto>\Results.

**Nota:**

La Results Table non deve essere nascosta durante l'esecuzione di altre azioni. Per esempio, durante il salvataggio di un audit trial.

Per massimizzare un altro riquadro, ad esempio Peak Review, e migliorare la visualizzazione dei dati, usare il pulsante **Toggles tab mode** situato sulla barra degli strumenti.

Tramite l'**Audit Trail Viewer**, gli utenti possono effettuare le seguenti operazioni:

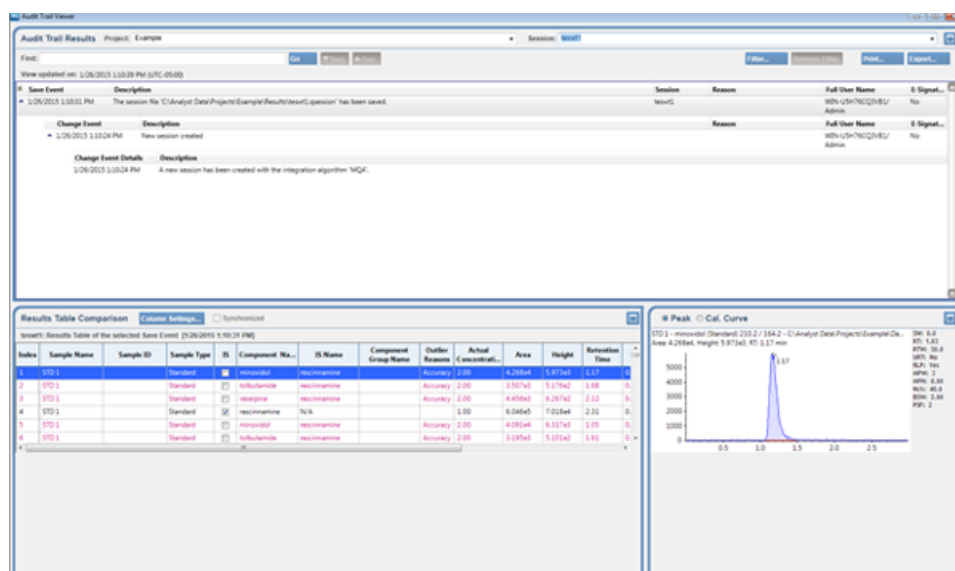
- Visualizzare i record relativi agli audit trail per ogni **Results Table**.
- Eseguire una ricerca per parola chiave, che evidenzia ogni occorrenza del testo.
- Filtrare gli eventi controllati nell'audit trail del software sulla base di un gruppo di criteri specificati.
- Esportare i record degli audit trail in un file txt. I file esportati sono modificabili.
- Stampare su PDF protetto.

## Visualizzazione dei risultati di Audit Trail nell'Audit Trail Viewer

1. Aprire una Results Table.
2. Fare clic su **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.

3. Per cambiare i progetti, fare clic sull'elenco **Projects** e quindi selezionare un altro progetto.
4. Per visualizzare altre sessioni, fare clic sull'elenco **Sessions**, quindi selezionare un'altra sessione. L'utente può anche selezionare di visualizzare tutte le sessioni del progetto contemporaneamente.

Figura 5-1 Audit Trail Viewer



Etichetta	Descrizione
Project	Selezionare un progetto dall'elenco.
Session	Selezionare un file della sessione
Find	Ricerca per parola chiave senza filtri. Evidenzia ogni occorrenza del testo.
Go	Fare clic per avviare la ricerca.
Next	Fare clic per passare al termine successivo.
Prev	Fare clic per tornare al termine precedente.
Filter	Fare clic per mostrare solo gli eventi che corrispondono ai criteri selezionati.
Remove Filter	Fare clic per rimuovere il filtro.
Print	Fare clic per stampare l'audit trail.
Export	Fare clic per esportare l'audit trail.
Save Event	Quando si salva un file di sessione, viene creato un evento di salvataggio. L'evento di salvataggio cattura qualunque modifica effettuata dal precedente evento di salvataggio nonché ogni valore nella <b>Results Table</b> .
Descrizione	Dettagli della modifica eventi.
Session	Mostra il nome del file di sessione.

Etichetta	Descrizione
Reason	Mostra la ragione per cui è stata apportata una modifica alla <b>Results Table</b> .
Full User Name	Mostra il nome dell'utente che ha apportato la modifica alla <b>Results Table</b> .
E-Signature	Indica se le modifiche apportate alla <b>Results Table</b> sono state accettate.
Column Settings	Fare clic per mostrare o nascondere le colonne nella <b>Results Table</b> .
Synchronized	Selezionare per scorrere simultaneamente in orizzontale entrambe le <b>Results Table</b> .
Previous version	Mostra la versione precedente del file di sessione selezionato.
Peak	Fare clic per visualizzare il picco del campione selezionato.
Cal Curve	Fare clic per mostrare la curva di calibrazione del campione selezionato.

## Esecuzione di una ricerca per parola chiave

Gli utenti possono eseguire una ricerca per parola chiave, che evidenzia ogni occorrenza del testo.

1. Aprire una Results Table.
2. Fare clic su **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. Nel campo **Find**, digitare la parola da cercare, quindi fare clic su **Go**.

Se vengono trovate corrispondenze, il campo **Find** diventa verde, il numero di corrispondenze viene mostrato e la parola appare evidenziata in giallo. Se non vengono trovate corrispondenze, il campo **Find** diventa rosa.

4. Utilizzare i pulsanti **Next** e **Prev** per spostarsi tra le corrispondenze.

## Filtraggio degli eventi controllati

L'utente può filtrare gli eventi controllati nell'audit trail sulla base di un gruppo di criteri specificati.

1. Aprire una Results Table.
2. Fare clic su **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. Fare clic su **Filter**.



Figura 5-2 Finestra di dialogo Filter Audit Trail Events

Elemento	Descrizione
1	Nome del file della <b>Results Table</b> . È possibile filtrare un file della <b>Results Table</b> o tutti i file della <b>Results Table</b> del progetto attivo.
2	<b>Description:</b> immettere il tipo di evento parziale o completo <b>Sample Name:</b> immettere il nome parziale o completo del campione. <b>Full User Name:</b> immettere il nome parziale o completo dell'utente. <b>E-Signature:</b> selezionare Sì o No. <b>Reason:</b> immettere il motivo parziale o completo.
3	<b>is:</b> consente di filtrare in base a una parola specifica o una frase.
4	<b>contains:</b> consente di filtrare in base a una parola parziale o una frase.
5	<b>Date:</b> consente di filtrare in base agli eventi che si sono verificati durante una data e un'ora specifica.

4. Nella finestra di dialogo **Filter Audit Trail Events**, usare gli elenchi per selezionare i criteri di filtraggio.

**Nota:** Il campo Results Table non può essere modificato.

## Menu Audit Trail

---

5. Fare clic su **Clear** per ripristinare i criteri di filtro su **No filter**.
6. Fare clic su **OK** per filtrare gli eventi.

---

**Suggerimento!** Per rimuovere il filtro, in **Audit Trail Viewer** fare clic su **Remove Filter**.

---

## Esportazione di Audit Trail Viewer

1. Aprire una Results Table.
2. Fare clic su **Export** e digitare un nome di file.

Il file viene esportato come file di testo delimitato da tabulazioni.

---

**Nota:** Viene esportata solo la porzione di eventi salvata di Audit Trail Viewer.

---

## Stampa dell'Audit Trail Viewer

1. Aprire una Results Table.
2. Fare clic su **Print** e selezionare una stampante.

Gli utenti possono stampare un PDF protetto usando pdfFactory.

---

**Nota:** Viene stampata solo la porzione di eventi salvata di Audit Trail Viewer.

---

## Audit Trail Manager

Il software raggruppa gli eventi di quantificazione controllati in audit trail. Gli audit trail sono file che memorizzano i record degli eventi controllati. Gli audit trail, associati a file quali i file wiff, i metodi di quantificazione e i file della **Results Table** formano record elettronici validi che possono essere utilizzati ai fini della conformità.

Il software **Audit Trail Manager** gestisce tutti gli eventi come definito nella mappa di audit. Il software acquisisce le firme elettroniche e i motivi, oltre all'utente, la data e i dettagli delle modifiche. Registra inoltre informazioni aggiuntive, tra cui i commenti, in base alla mappa di audit.

---

**Suggerimento!** Un file di sessione contiene la **Results Table**, una copia del metodo di quantificazione, una copia della mappa di audit al momento della creazione, oltre all'audit trail completo dell'intera sessione.

---

Quando il software crea o modifica un file qsession o qmethod, l'evento viene acquisito nel **Project Audit Trail** sulla scheda **History** nel software Analyst<sup>®</sup> MD. Vengono acquisiti gli eventi elencati di seguito:

- Il file del metodo di quantificazione è stato creato.
- Il file del metodo di quantificazione è stato modificato.

- La **Results Table** di quantificazione è stata creata.
- La **Results Table** di quantificazione è stata modificata.

Se **E-signature** o **Reason Prompt** è selezionato per creare o modificare il file del metodo di quantificazione, la finestra di dialogo **Audit Trail** generata dal software Analyst<sup>®</sup> MD si apre nel software MultiQuant<sup>™</sup> MD.

**Tabella 5-2 Audit Trail**

Audit Trail	Esempi di eventi registrati
Quantitation Audit Trail (one per Results Table)	Modifiche a: <ul style="list-style-type: none"><li>• Creazione e modifica di file di sessione.</li><li>• Informazioni sui campioni.</li><li>• Parametri di integrazione picchi.</li></ul>

## Informazioni sulle mappe di audit

Il software MultiQuant<sup>™</sup> MD mantiene la cronologia di tutte le modifiche alle impostazioni di elaborazione associate ai risultati di quantificazione. Il software controlla tutti gli eventi in base alla mappa di audit del progetto attivo, acquisisce tutte le firme elettroniche e si collega ai record corrispondenti.

### Creazione di una mappa di audit

Il software installa diverse mappe di audit. Visualizzarle per determinare se modificarne alcune sarebbe più semplice che crearne delle nuove. La creazione o la modifica di mappe di audit sono eventi controllati nell'audit trail del progetto del software Analyst<sup>®</sup> MD.

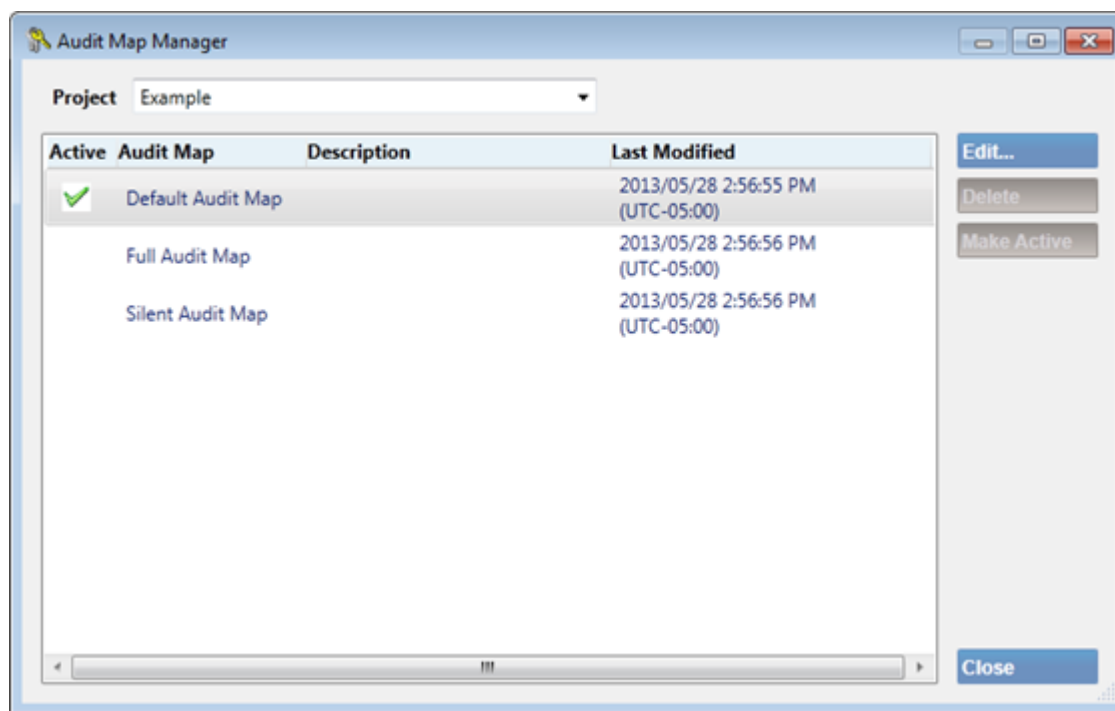
**ATTENZIONE:** Se due utenti modificano la stessa mappa di audit contemporaneamente, verranno applicate solo le modifiche apportate dall'utente che ha salvato il file per ultimo.

La mappa di audit attiva per il progetto determina quali eventi verranno registrati nell'audit trail per tutte le **Results Table** create.

**Nota:** Dopo aver salvato una **Results Table**, la mappa di audit attiva viene salvata con la **Results Table** e la mappa non può essere modificata.

1. Fare clic su **Audit Trail > Audit Map Manager**.

**Figura 5-3 Audit Map Manager**



Etichetta	Descrizione
Project	Selezionare un progetto dall'elenco.
Edit	Fare clic per modificare la mappa di audit attiva.
Delete	Fare clic per cancellare la mappa di audit selezionata.

2. Nell'elenco **Project**, selezionare un progetto per il quale creare una mappa di audit.
3. Selezionare una mappa di audit, quindi fare clic su **Edit**.

Figura 5-4 Audit Map Editor

Event	Audit ...	Reason Pro...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1	Predefined Reason 2
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		

Etichetta	Descrizione
Description	Inserire una descrizione della mappa di audit.
Check	Fare clic per selezionare una casella di controllo.
Uncheck	Fare clic per deselectare la casella di controllo.
Add Predefined Reasons	Fare clic per aggiungere un motivo predefinito all'elenco.

4. Inserire una descrizione della mappa di audit nel campo **Description**, se necessario.
5. Nella tabella **Audit Map**, configurare ciascun evento come segue:
  - Per controllare l'evento, selezionare la casella di controllo nella colonna **Audited**.

**Suggerimento!** Per riempire delle celle consecutive in una colonna con il valore della casella di controllo, premere **Ctrl** o **Shift**, fare clic sulle celle, quindi fare clic su **Check**.

## Menu Audit Trail

---

- Se si vuole che l'utente inserisca un motivo personalizzato o ne scelga uno predefinito, selezionare la casella di controllo nella colonna **Reason Prompt**.
- Se invece l'utente deve selezionare solo un motivo predefinito per la modifica quando si verifica l'evento, selezionare le caselle di controllo nelle colonne **Reason Prompt** e **Predefined Reasons Only**. Nelle colonne **Predefined Reason** \_ , selezionare fino a dieci motivi.

---

**Suggerimento!** Per aggiungere un motivo predefinito, fare clic su **Add Predefined Reasons**.

---

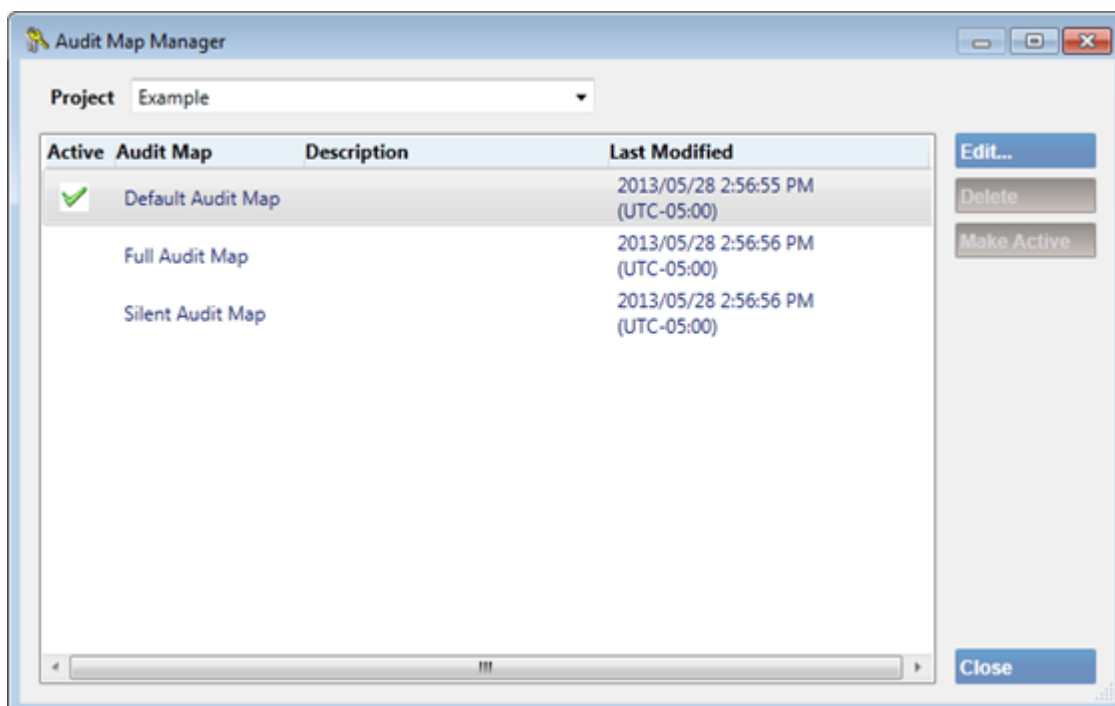
- Per richiedere la firma elettronica per l'evento, selezionare la casella di controllo nella colonna **E-Sig**.
6. Fare clic su **Save As**, quindi inserire il nome nella finestra di dialogo **Save Audit Map As**.
  7. Fare clic su **Save**.
  8. Fare clic su **Close** nella finestra di dialogo **Audit Map Editor**.
  9. Fare clic su **Make Active**.

Quando si applica una mappa di audit, essa diventerà la mappa di audit attiva. La configurazione di controllo nella mappa di audit attiva determina gli eventi che verranno registrati negli audit trail da questo punto in poi.

## Variazione della mappa di audit

1. Fare clic su **Audit Trail > Audit Map Manager**.

**Figura 5-5 Audit Map Manager**



Etichetta	Descrizione
Project	Selezionare un progetto dall'elenco.
Edit	Fare clic per modificare la mappa di audit attiva.
Delete	Fare clic per cancellare la mappa di audit selezionata.

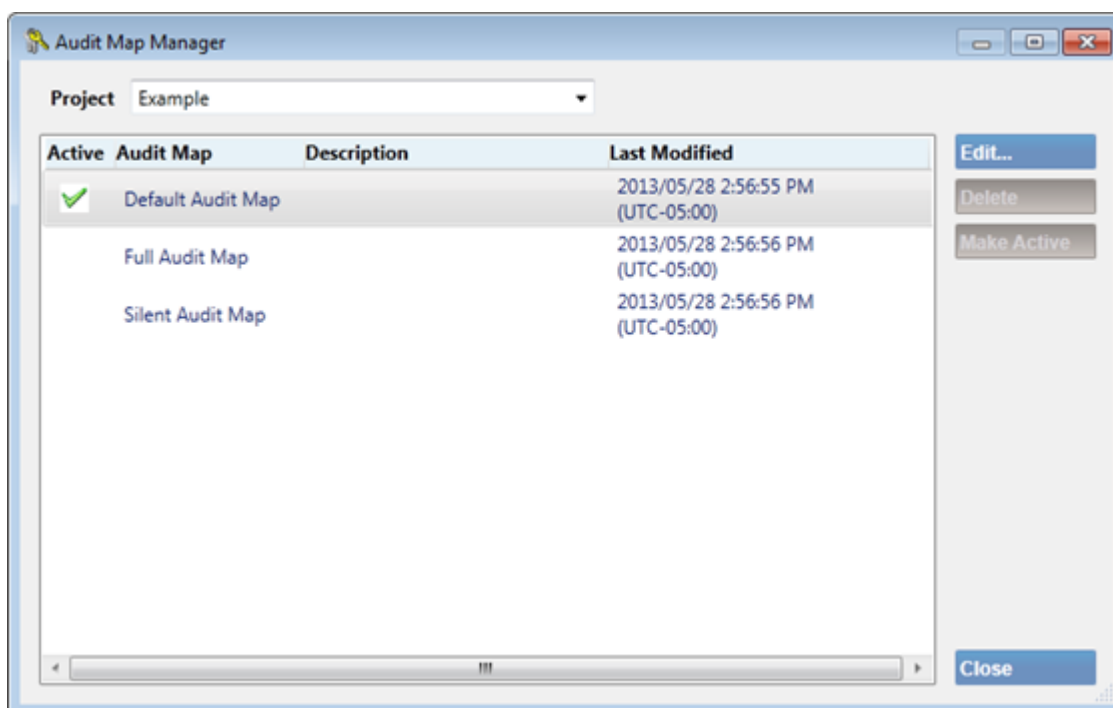
2. Nell'elenco **Project**, selezionare un progetto per il quale modificare la mappa di audit.
3. Selezionare un'altra mappa e fare clic su **Make Active**.
4. Fare clic su **Close**.

## Modifica della mappa di audit

I seguenti eventi di controllo vengono sempre registrati, pertanto non sono visualizzati in **Audit Map Editor**:  
Print Report, Export Results Table e Transfer to LIMS.

1. Fare clic su **Audit Trail > Audit Map Manager**.

**Figura 5-6 Audit Map Manager**



## Menu Audit Trail

Etichetta	Descrizione
Project	Selezionare un progetto dall'elenco.
Edit	Fare clic per modificare la mappa di audit attiva.
Delete	Fare clic per cancellare la mappa di audit selezionata.

2. Selezionare una mappa di audit, quindi fare clic su **Edit**.

**Figura 5-7 Audit Map Editor**

Audit Map Editor

Audit Map: Default Audit Map

Description:

Check Uncheck Add Predefined Reasons...

Event	Audit ...	Reason Pro...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1	Predefined Reason 2
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>		

Save Save As... Close

Etichetta	Descrizione
Description	Inserire una descrizione della mappa di audit.
Check	Fare clic per selezionare una casella di controllo.
Uncheck	Fare clic per deselezionare la casella di controllo.
Add Predefined Reasons	Fare clic per aggiungere un motivo predefinito all'elenco.

3. Inserire una descrizione della mappa di audit nel campo **Description**, se necessario.



4. Nella tabella **Audit Map**, configurare ciascun evento come segue:

- Per controllare l'evento, selezionare la casella di controllo nella colonna **Audited**.

---

**Suggerimento!** Per riempire delle celle consecutive in una colonna con il valore della casella di controllo, premere **Ctrl** o **Shift**, fare clic sulle celle, quindi fare clic su **Check**.

---

- Se si vuole che l'utente inserisca un motivo personalizzato o ne scelga uno predefinito, selezionare la casella di controllo nella colonna **Reason Prompt**.
- Se invece l'utente deve selezionare solo un motivo predefinito per la modifica quando si verifica l'evento, selezionare le caselle di controllo nelle colonne **Reason Prompt** e **Predefined Reasons Only**. Nelle colonne **Predefined Reason** \_ , selezionare fino a dieci motivi.

---

**Suggerimento!** Per aggiungere un motivo predefinito, fare clic su **Add Predefined Reasons**.

---

- Per richiedere la firma elettronica per l'evento, selezionare la casella di controllo nella colonna **E-Sig**.

5. Fare clic su **Save**.

6. Fare clic su **Make Active**.

Quando si applica una mappa di audit, essa diventerà la mappa di audit attiva. La configurazione di controllo nella mappa di audit attiva determina gli eventi che verranno registrati negli audit trail da questo punto in poi.

## Visualizzazione della configurazione di audit integrata

La configurazione di audit utilizzata per una Results Table è incorporata nel file Results Table quando si crea la Results Table. Questa configurazione non può essere modificata. Il timestamp visualizzato accanto al nome della mappa di audit indica l'ultimo salvataggio della mappa di audit usata per incorporare la configurazione.

1. Aprire una Results Table.
2. Fare clic su **Audit Trail > View Session Audit Map**.

**Figura 5-8 Finestra Session Audit Map**

Session Audit Map (ResultsTable1.qsession)

Audit Map: Default Audit Map Last Modified: 2013/05/28 2:56:55 PM (UTC-05:00)

Description:

Event	Audited	Reason Prom ...	Predefined Reasons Only	E-Sig	Predefined Reason 1
New session created	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Session file saved	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Integration parameters changed for sample	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Modify and apply quantitation method	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Actual concentration changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample name changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample type changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Sample ID changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Dilution factor changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Used column changed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Custom columns modified	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Manually integrated	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Clear integration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
Samples added or removed	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
External Calibration	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	

Close

Ad eccezione della voce **About**, questo menu contiene le voci elencate nella [Tabella 6-1](#). Questi file vengono automaticamente installati e sono reperibili nella cartella <unità>:\Program Files\AB SCIEX\MultiQuant 3\Help.

I documenti o le cartelle (o le scelte rapide per accedervi) possono essere copiati nella cartella Help affinché appaiano automaticamente nel menu.

**Tabella 6-1 Menu Help**

Voce di menu	Descrizione
Install License	Fare clic per aprire la finestra di dialogo MultiQuant™ MD Activation.
Verify Installation	Fare clic per verificare i file e l'installazione.
Software Reference Guide	Descrive le funzioni e le caratteristiche del software.
Software Release Notes	Fornisce informazioni sul software oltre alle procedure per l'installazione.
About	Mostra la versione del programma, il copyright e altre informazioni sul programma, oltre a informazioni sulle funzioni della licenza installate.

# Results Table

# 7

La **Results Table** è il punto di partenza per la revisione e l'esportazione dei dati. Usare la procedura guidata **New Results Table** o fare clic su **File > New Results Table** per creare una Results Table. Fare riferimento a [Finestre di dialogo della Results Table a pagina 42](#).

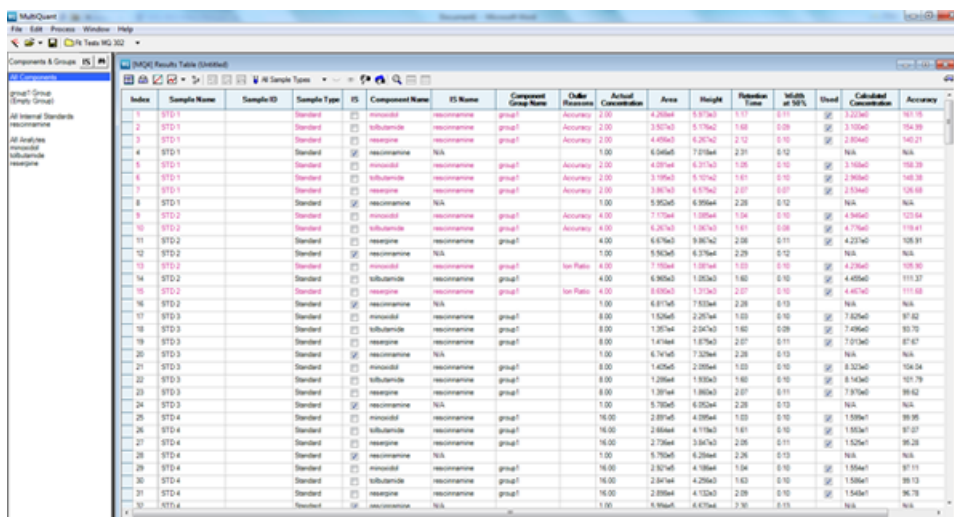
**Nota:** Le colonne **Sample Name** e **Sample ID** non possono contenere: \ / : \* ? " < > | =.

La configurazione di audit utilizzata per una **Results Table** viene integrata nel file **Results Table** quando si crea la **Results Table**. Questa configurazione non può essere modificata. Il timestamp visualizzato accanto al nome della mappa di audit indica l'ultimo salvataggio della mappa di audit usata per incorporare la configurazione.

**Nota:** Durante lo spostamento dei dati, spostare l'intero progetto per mantenere la struttura dei file. Se non si mantiene la struttura dei file e delle cartelle, non sarà possibile visualizzare la **Results Table** o i cromatogrammi.

Esiste una riga separata per ciascun componente di ciascuno dei campioni originariamente selezionati.

Figura 7-1 Esempio di Results Table



Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Outer Retention	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.28e4	5.17e4	1.12	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.22e4	101.16
2	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	sulfadiazole	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.52e4	5.17e4	1.08	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.52e4	154.39
3	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.49e4	6.26e4	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.89e4	142.21
4	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.34e4	7.01e4	2.31	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.03e4	6.31e4	1.08	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.16e4	158.28
6	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	sulfadiazole	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.19e4	5.17e4	1.01	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.96e4	148.38
7	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.96e4	6.17e4	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.53e4	126.68
8	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.95e4	6.95e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	7.17e4	1.08e4	1.54	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.54e4	123.64
10	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	sulfadiazole	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.24e4	1.06e4	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.77e4	119.41
11	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.67e4	9.87e4	2.98	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.23e4	109.91
12	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.95e4	6.31e4	2.29	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	7.15e4	1.08e4	1.53	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.23e4	109.90
14	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	sulfadiazole	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.98e4	1.05e4	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.45e4	113.27
15	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.69e4	1.07e4	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.40e4	111.62
16	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.81e4	7.92e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.62e4	2.25e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.62e4	87.62
18	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	sulfadiazole	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.35e4	2.04e4	1.60	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	7.49e4	93.70
19	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.41e4	1.87e4	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.01e4	87.47
20	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.74e4	7.29e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.40e4	2.05e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.32e4	104.54
22	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	sulfadiazole	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.29e4	1.93e4	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.14e4	101.79
23	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.39e4	1.86e4	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.91e4	89.62
24	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.79e4	6.92e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.39e4	4.29e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.59e4	89.98
26	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	sulfadiazole	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.88e4	4.17e4	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.93e4	97.07
27	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.75e4	3.94e4	2.06	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.52e4	95.28
28	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.79e4	6.28e4	2.26	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.92e4	4.18e4	1.54	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.89e4	97.13
30	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	sulfadiazole	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.34e4	4.25e4	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.59e4	98.13
31	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.89e4	4.12e4	2.09	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.54e4	96.78
32	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.95e4	6.47e4	2.30	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

- Le colonne **IS**, **Component Name** e **IS Name** contengono informazioni sugli analiti.
- La casella di controllo selezionata indica lo standard interno per il campione.
- Selezionare le colonne da mostrare nella **Results Table** usando la finestra di dialogo **Column Settings**. Fare riferimento a [Impostazioni colonne a pagina 39](#).

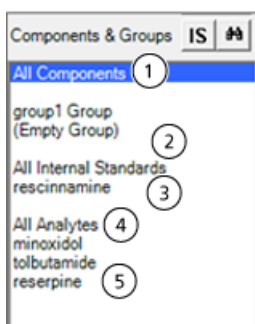
- Modificare la larghezza delle colonne trascinando la linea che separa due intestazioni di colonna. Queste informazioni vengono salvate automaticamente e applicate quando l'utente apre le **Results Table** precedentemente salvate.
- Modificare l'ordine delle colonne facendo clic su un'intestazione di colonna e trascinandola in una nuova posizione. Queste informazioni vengono salvate automaticamente e applicate quando l'utente apre le **Results Table** precedentemente salvate.
- L'utente può limitare la Results Table in modo che mostri solo le righe corrispondenti a specifici analiti o a standard interni. Usare la barra degli strumenti per limitare i tipi di campioni visualizzati. Fare riferimento a [Elenco componenti e gruppi a pagina 37](#) e [Filtro tipo di campione a pagina 41](#).
- Determinate operazioni, come la sincronizzazione con il riquadro **Peak Review**, vengono applicate alla riga o alle righe correntemente selezionate. Selezionare le righe facendo clic sull'area a sinistra della prima colonna.

## Elenco componenti e gruppi

Quando si apre una **Results Table**, a sinistra della finestra principale viene visualizzato un elenco dei componenti e gruppi correnti. Usare l'elenco per modificare i componenti da visualizzare nella **Results Table** e in qualsiasi riquadro **Peak Review** o plot **Calibration**.

I componenti sono definiti come transizione singola o range di massa. Un gruppo viene definito come nome del gruppo di cui fa parte il componente.

**Figura 7-2 Elenco componenti e gruppi**



Elemento	Etichetta	Descrizione
1	All Components	Fare clic per visualizzare tutti gli analiti e gli standard interni disponibili nella <b>Results Table</b> nonché i valori <b>Peak Review</b> e <b>Calibration</b> , se mostrati.
2	All Internal Standards	Fare clic per visualizzare tutti gli standard interni e per nascondere tutti gli analiti. Questa voce non è disponibile se non sono stati definiti standard interni.
3	Specific Internal Standards	Nell'elenco è presente il nome di ogni standard interno separato. Fare clic su una di queste voci per visualizzare lo standard interno e nascondere tutti gli altri componenti.

## Results Table

Elemento	Etichetta	Descrizione
4	All Analytes	Fare clic per visualizzare tutti gli analiti e nascondere tutti gli standard interni. Questa voce non è inclusa se non sono stati definiti standard interni.
5	Specific Analytes	Nell'elenco è incluso il nome di ogni singolo analita. Fare clic su una di queste voci per visualizzare quell'analita e nascondere tutti gli altri componenti.

Fare clic su una voce dell'elenco per visualizzare i componenti che appartengono soltanto ad essa. Premere **Shift** o **Ctrl** per selezionare più voci. Questo è utile, ad esempio, per visualizzare solo due analiti specifici. Usare i tasti freccia su e giù quando l'elenco è attivo per spostarsi tra gli elementi.

**Suggerimento!** Per ingrandire o rimpicciolire l'elenco, trascinare il bordo destro del riquadro verso sinistra o verso destra.

L'ordine corrente delle righe nella Results Table non viene interessato dai filtri. La Results Table è predefinita per essere ordinata dapprima per campione, quindi per componente, nell'ordine indicato nel metodo di quantificazione. Tuttavia, la tabella può essere ordinata anche in base ad un ordine specifico, come descritto in [Icone del software a pagina 153](#).

## Results Table: menu di scelta rapida

Fare clic con il tasto destro del mouse sulla Results Table per accedere a un menu contestuale. Sono disponibili i seguenti comandi.

**Tabella 7-1 Opzioni del menu tasto destro della Results Table**

Opzione di menu	Descrizione
Column Settings	Questo comando consente di modificare le colonne <b>Results Table</b> . Le modifiche vengono applicate solo alla <b>Results Table</b> corrente, a meno che non siano salvate come impostazioni predefinite del progetto.
Add Custom Column	Aggiunge una nuova colonna modificabile alla tabella. Popolare la colonna digitando direttamente nelle celle o incollando il contenuto. È possibile inserire qualunque testo, tra cui commenti o risultati di calcoli personalizzati.
Rename Custom Column	Rinomina una colonna personalizzata esistente. Prima di usare questo comando, fare clic sull'intestazione personalizzata per selezionare la colonna personalizzata.
Remove Custom Column	Consente di eliminare una colonna personalizzata esistente. Prima di usare questo comando, fare clic sull'intestazione di colonna per selezionare la colonna personalizzata.

Tabella 7-1 Opzioni del menu tasto destro della Results Table (continua)

Opzione di menu	Descrizione
Applicazione delle concentrazioni effettive dell'analita attuale a tutti	Fornisce una scelta rapida per impostare il campo <b>Actual Concentration</b> per tutti gli analiti dei campioni di tipo <b>Standard</b> , nel caso in cui ci sia più di un analita e che tutti gli analiti siano presenti nei campioni alla stessa concentrazione. Fare riferimento a <a href="#">Applicazione delle concentrazioni effettive dell'analita attuale a tutti a pagina 39</a> .
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	Simile a <b>Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All</b> con la sola differenza che si applica agli standard interni anziché agli analiti.
Set 'Used'	Utilizzare questo comando per eseguire la quantificazione assoluta al fine di stabilire se utilizzare un particolare campione <b>Standard</b> nel calcolo della curva di calibrazione per un determinato analita.  Le prime due voci vengono utilizzate per selezionare o cancellare il campo <b>Used</b> per le righe attualmente selezionate nella <b>Results Table</b> . La terza e la quarta voce sono simili, con la sola differenza che l'operazione si applica a tutti gli analiti di un qualsiasi campione corrispondente a una riga selezionata.
Set Peaks to 'Not Found' for Selected Rows	Utilizzare questo comando per eliminare l'integrazione dei picchi per le righe correntemente selezionate.

## Applicazione delle concentrazioni effettive dell'analita attuale a tutti

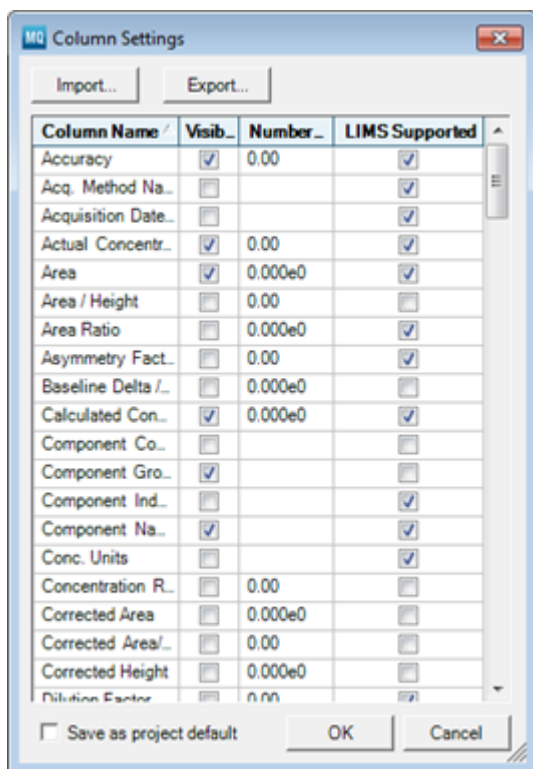
1. Usare [Elenco componenti e gruppi a pagina 37](#) per limitare la tabella in modo da visualizzare solo un particolare analita.
2. In alternativa, usare **Sample Type Filter** per visualizzare solo i campioni **Standard**. Fare riferimento a [Filtro tipo di campione a pagina 41](#).
3. Specificare le concentrazioni effettive dell'analita, digitando direttamente all'interno delle celle oppure selezionando la colonna e di seguito **Paste** se le concentrazioni sono disponibili altrove in formato testo.
4. Fare clic su **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All**.
5. Ritornare alla visualizzazione di tutti i componenti e di tutti i tipi di campione, secondo necessità.

## Impostazioni colonne

Se i nomi di colonna sono troncati, spostare il cursore sopra il campo per visualizzare il nome della colonna tramite suggerimento.

Per i campi numerici, usare il formato 0.00 per le notazioni non scientifiche e il formato 0.00e0 per le notazioni scientifiche. Modificare i punti decimali per indicare la precisione dei numeri mostrati. Come separatore decimale è possibile utilizzare solo il punto (.) . Il raggruppamento cifre non è supportato.

Figura 7-3 Finestra di dialogo Column Settings



Campo	Descrizione
Import	Fare clic per selezionare un file di impostazioni colonna precedentemente salvato usando <b>Export</b> . I campi della finestra di dialogo vengono aggiornati per utilizzare le informazioni ottenute dal file selezionato.
Export	Fare clic per salvare le attuali impostazioni della finestra di dialogo in un file. Ciò consente all'utente di passare tra diverse impostazioni di colonna.
Column name	Mostra il nome delle colonne in ordine alfabetico. Fare riferimento a <a href="#">Colonne della Results Table a pagina 52</a> .
Visible	Selezionare per rendere visibile la colonna. Diversamente la colonna risulta nascosta.
Number Format	Per i campi numerici, usare il formato 0.00 per le notazioni non scientifiche e il formato 0.00e0 per le notazioni scientifiche. Per la precisione visualizzata, modificare il punto decimale.
LIMS Supported	Questa riga mostra che i LIMS supportati selezionati sono predefiniti dal LIMS e che non è possibile modificare le selezioni nella colonna.
Save as project default	Selezionare per usare le impostazioni di colonna nelle future Results Table.



## Filtro tipo di campione

Tabella 7-2 Descrizione dei tipi di filtro

Tipo di filtro	Descrizione
All Sample Types	Mostra tutti i tipi di campioni.
Unknowns	Mostra solo i campioni sconosciuti, ossia campioni normali con concentrazione sconosciuta. Quando si utilizzano i campioni Standard, la loro concentrazione viene ricalcolata dalla curva di calibrazione e riportata nella Results Table come Calculated Concentration. Fare riferimento a <a href="#">Equazioni di regressione a pagina 125</a> .
Standards	Mostra solo i campioni con una concentrazione nota. Questi campioni vengono utilizzati per creare la curva di calibrazione.
Quality Controls	Mostra solo i campioni Quality Control. Questi campioni con una concentrazione nota vengono utilizzati per controllare la precisione della curva di calibrazione, senza tuttavia influenzarne la struttura.
Standards & QCs	Mostra sia i campioni Standard che i campioni Quality Control.
Unknowns, Standards & QCs	Mostra i campioni sconosciuti, standard e controllo di qualità.
Vuoti	Mostra solo i campioni Blank. Di solito si tratta di campioni che contengono i composti standard interni, se utilizzati, ma non analiti e che sono stati sottoposti alla normale procedura di preparazione dei campioni. Questi campioni non vengono utilizzati nella costruzione della curva di calibrazione. Per includerli, selezionare il tipo di campione Standard e impostare Actual Concentration a 0.
Double Blanks	Mostra solo i campioni Double Blank). Sono campioni privi di standard interni e di analiti.
Solvents	Mostra solo i campioni Solvent. Si tratta di campioni vuoti doppi che sono stati sottoposti alla normale procedura di elaborazione dei campioni.
Blanks, Double Blanks & Solvents	Mostra tutti i tipi di campioni vuoti: campioni vuoti, vuoti doppi e di solvente.

## Visualizzazione delle righe nascoste

Nella **Results Table**, per ogni specifico componente, le righe sono visibili solo per i campioni per i quali è disponibile la transizione MRM corrispondente. Le righe inutilizzate, i componenti con transizioni non disponibili per un determinato campione, sono contenute nella tabella ma, per impostazione predefinita, vengono nascoste.

1. Mostrare la colonna **Peak Comment** nella **Results Table**, se non è già visibile.
2. Ordinare la tabella usando questa colonna.
3. Selezionare le righe (ora adiacenti) con il commento **Not Present**.

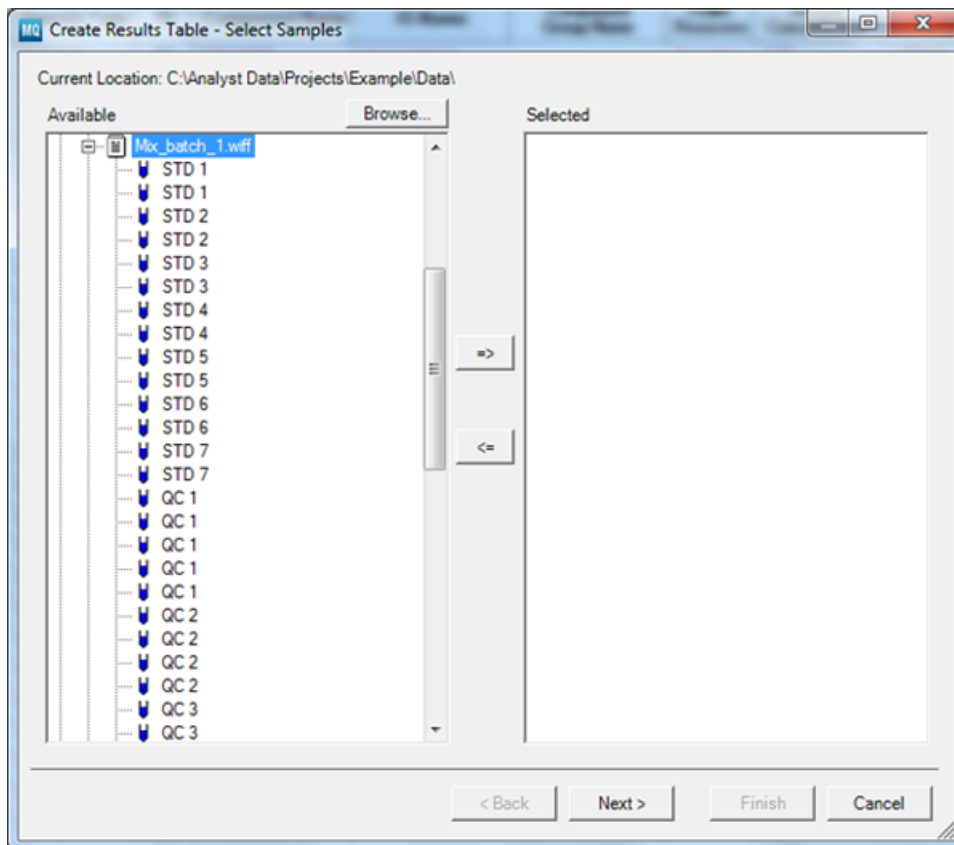
4. Fare clic sull'icona **Hide selected rows(s)**. Fare riferimento a [Icone del software a pagina 153](#).

# Finestre di dialogo della Results Table

## Selezione dei campioni

Selezionare i campioni dai file wiff da elaborare.

**Figura 7-4 Pagina Create Results Table - Select Samples**

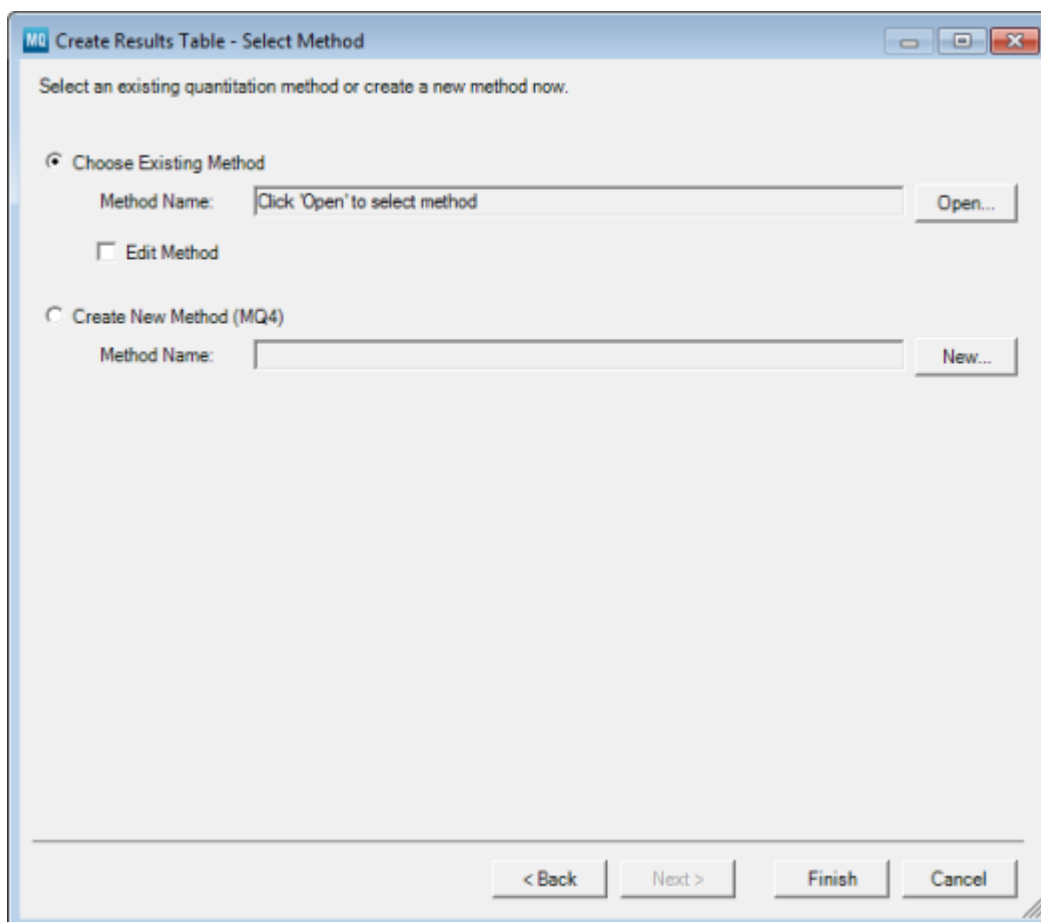


- Il riquadro **Available** mostra le sottocartelle, i file wiff e i campioni disponibili nella cartella **Data** della cartella selezionata.
- Espandere le singole cartelle per visualizzare eventuali altre sottocartelle o file wiff. Se il file wiff viene espanso, si aprirà per mostrare i campioni disponibili.
- Usare le frecce per aggiungere o rimuovere i campioni.
- Selezionare i campioni facendo doppio clic su un singolo campione, selezionando un campione o un file di dati e facendo clic sul pulsante => o trascinando un campione o un file di dati dal riquadro sinistro a quello destro. Premere **Shift** o **Ctrl** per selezionare più file o campioni prima di spostarli.

## Selezione del metodo

Selezionare il metodo di quantificazione. Se il metodo esistente viene selezionato ma non modificato, apparirà una barra di progressione durante l'elaborazione dei campioni selezionati. Al termine di questo processo, viene creata una **Results Table**.

Figura 7-5 Pagina Create Results Table - Select Method



Etichetta	Descrizione
Choose Existing Method	Fare clic su <b>Open</b> per selezionare un metodo di quantificazione esistente.
Edit Method	Selezionare questo comando per modificare un metodo esistente. Le pagine successive della procedura guidata contengono informazioni provenienti dal metodo esistente che possono essere modificate secondo necessità.
Create New Method	Fare clic su <b>New</b> per creare un metodo di quantificazione. L'algoritmo tra parentesi è l'algoritmo selezionato nella finestra di dialogo <b>Integration Defaults</b> .

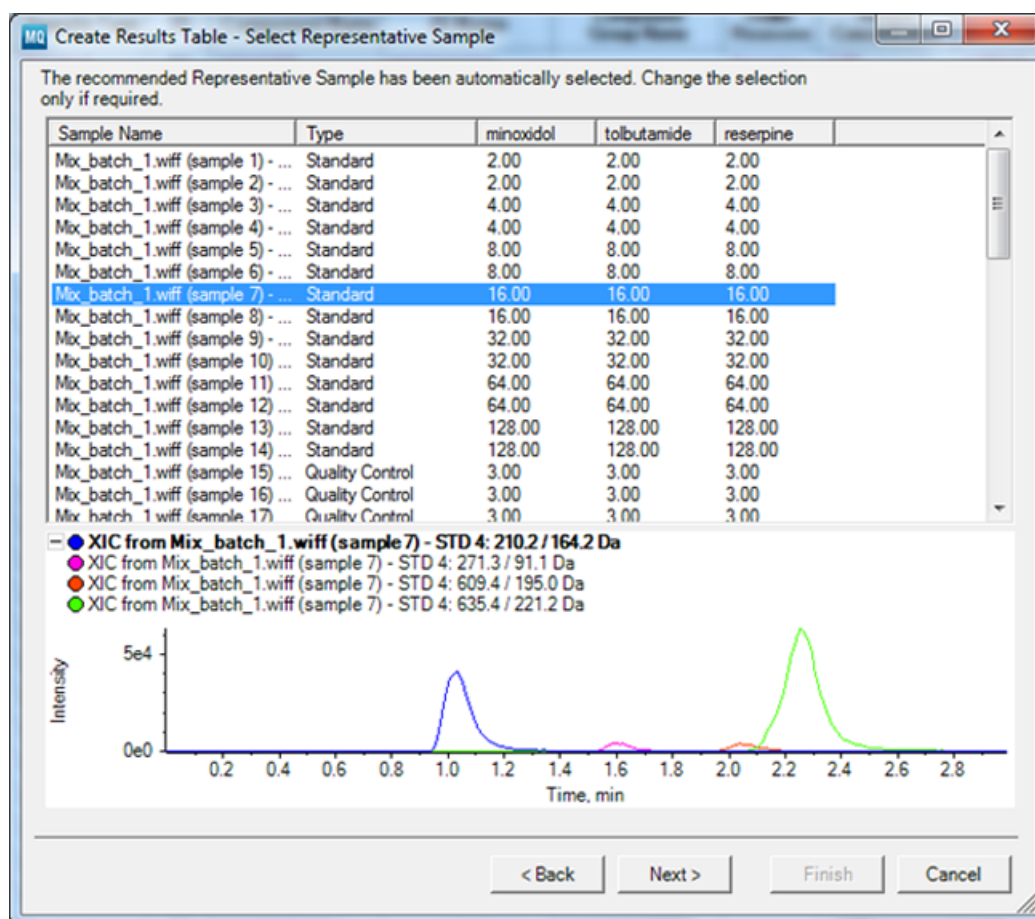
## Selezione di un campione rappresentativo

La pagina **Select Representative Sample** mostra il campione rappresentativo selezionato per il quale vengono visualizzati i cromatogrammi quando si impostano visivamente i parametri di rilevamento picchi e di integrazione. Questo campione deve contenere tutti i composti che verranno inclusi nel metodo di quantificazione.

Se i tipi di campioni e le concentrazioni di analiti sono stati selezionati usando il Batch Editor del software Analyst<sup>®</sup> MD prima dell'acquisizione dei campioni, queste informazioni appariranno come colonne aggiuntive.

Per impostazione predefinita, il software seleziona un campione. Se il campione selezionato non è appropriato, selezionare un altro campione rappresentativo. Se si seleziona l'algoritmo SignalFinder<sup>™</sup>, per evitare di generare un modello di integrazione errato, il software non consiglia alcun campione rappresentativo se il livello TIC è superiore a 1.0e6 in tutti i campioni. In queste condizioni, gli utenti possono selezionare manualmente un campione rappresentativo.

**Figura 7-6 Pagina Create Results Table - Select Representative Sample**



## Definizione dei componenti

La pagina **Define Components** contiene una riga per ogni analita o standard interno. Selezionare i nomi degli analiti e degli standard interni, se usati. Fare riferimento a [Menu tasto destro Define Components a pagina 46](#).

**Figura 7-7 Pagina Create Results Table - Define Components**

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: **MRM (4 transitions)**

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back    Next >    Finish    Cancel

Etichetta	Descrizione
Experiment	Selezionare un esperimento da elaborare dall'elenco. Per dati multi-periodo o multi-esperimento, selezionare ciascun esperimento da elaborare, quindi inserire nella tabella i componenti dell'esperimento corrispondente.
Row	Contiene il numero di riga corrente.
IS	Indica se il componente definito per la riga è un analita (non selezionato) o uno standard interno (selezionato).
Name	Contiene il nome del componente. Per gli esperimenti MRM, il nome viene completato automaticamente utilizzando le masse di transizione <b>Q1/Q3</b> . Per un nome più specifico, inserire un nome nel campo.

## Results Table

Etichetta	Descrizione
Group	<p>Contiene il nome del gruppo a cui appartiene il componente della riga. Se nello stesso gruppo vengono collocati analiti o standard interni correlati tra loro, sarà possibile revisionarli e manipolarli insieme in modo più semplice. Ciò vale per le entità aventi lo stesso tempo di ritenzione, ad esempio diverse transizioni MRM per lo stesso composto.</p> <p>Digitare i nomi di gruppo o inserirli automaticamente. Fare riferimento a <a href="#">Menu tasto destro Define Components a pagina 46</a>.</p>
IS Name	Contiene il nome dello standard interno facoltativo che deve essere usato per l'analita definito per la riga. Questo campo non è applicabile agli standard interni stessi.
Mass Info	<p>Per gli esperimenti MRM, questa colonna ha come titolo <b>Q1/Q3</b> e contiene la coppia di massa del componente definito per la riga. Selezionare la transizione richiesta dall'elenco che mostra tutte le transizioni disponibili per l'esperimento. Generalmente, la colonna viene automaticamente inizializzata con le transizioni disponibili.</p> <p>Per gli esperimenti di profilo (scansione), questa colonna ha come titolo <b>Start - Stop</b> e contiene l'intervallo di massa usato per calcolare un XIC (cromatogramma ioni estratti) per il componente definito per la riga. Digitare l'intervallo di massa, separando le due masse con un trattino. Ad esempio, 200-201 o 200-1. Per l'ultima opzione, l'intervallo di massa è 199,5-200,5.</p>

### Menu tasto destro Define Components

Fare clic con il tasto destro del mouse sulla pagina **Define Components** per accedere a un menu contestuale. Sono disponibili i seguenti comandi.

**Tabella 7-3 Definizione componenti: opzioni menu Tasto destro**

Opzione di menu	Descrizione
Clear	Cancella i contenuti di qualunque riga o colonna selezionata. Le righe vengono selezionate facendo clic o trascinando nell'area davanti ai numeri di riga.
Copy	Copia negli appunti qualunque riga o colonna selezionata.
Paste	Incolla il contenuto degli appunti.
Find Component by Name	<p>Seleziona il componente il cui <b>Nome</b> corrisponde al testo. Non è richiesto il nome completo per trovare una corrispondenza. È utile per selezionare un componente specifico nel caso vi siano più componenti.</p> <p>Se inizialmente nel foglio di calcolo non è stata selezionata nessuna riga, la ricerca inizia dalla prima riga. Altrimenti, inizia dalla riga successiva alla riga selezionata e ritorna all'inizio. È utile nel caso in cui ci siano più componenti il cui <b>Nome</b> contiene il testo. Se la prima ricerca non trova il componente, cercare nuovamente, lasciando il primo componente selezionato, per individuare un'altra corrispondenza nella tabella.</p>
Insert Row Above	Inserisce una sola riga vuota immediatamente sopra la riga attualmente selezionata.

Tabella 7-3 Definizione componenti: opzioni menu Tasto destro (continua)

Opzione di menu	Descrizione
Delete Selected Rows	Rimuove dalla tabella le righe attualmente selezionate.
Sum Multiple Ions	Somma i cromatogrammi per più transizioni MRM o intervalli di massa a scansione completa. Dopo aver selezionato il comando, le colonne addizionali della massa vengono aggiunte alla tabella <b>Components</b> . Qualunque massa selezionata per una determinata riga viene usata nella costruzione del cromatogramma ioni estratti (XIC) sommato per l'analita o lo standard interno corrispondente. Si consiglia di lasciare sempre selezionata questa funzione.
Groups	Fare riferimento a <a href="#">Sottomenu Groups a pagina 82</a> .
Internal Standards	Fare riferimento a <a href="#">Sottomenu Internal Standards a pagina 84</a> .

## Definizione dei parametri di integrazione

Selezionare il tempo di ritenzione previsto e altri parametri di rilevamento picco per ciascun componente.

L'elenco a sinistra mostra una voce per ogni componente definito nella pagina precedente della procedura guidata. Fare clic su una riga specifica per visualizzare il cromatogramma corrispondente e l'integrazione corrente per il campione rappresentativo. Scorrere l'elenco usando i tasti freccia verso l'alto e verso il basso o usando la rotella di scorrimento. In generale, si consiglia di verificare l'esatta integrazione di tutti i componenti. Tuttavia, in presenza di numerosi componenti, usare il comando **Highlight Components with Uncertain RT** per limitare il numero da revisionare.

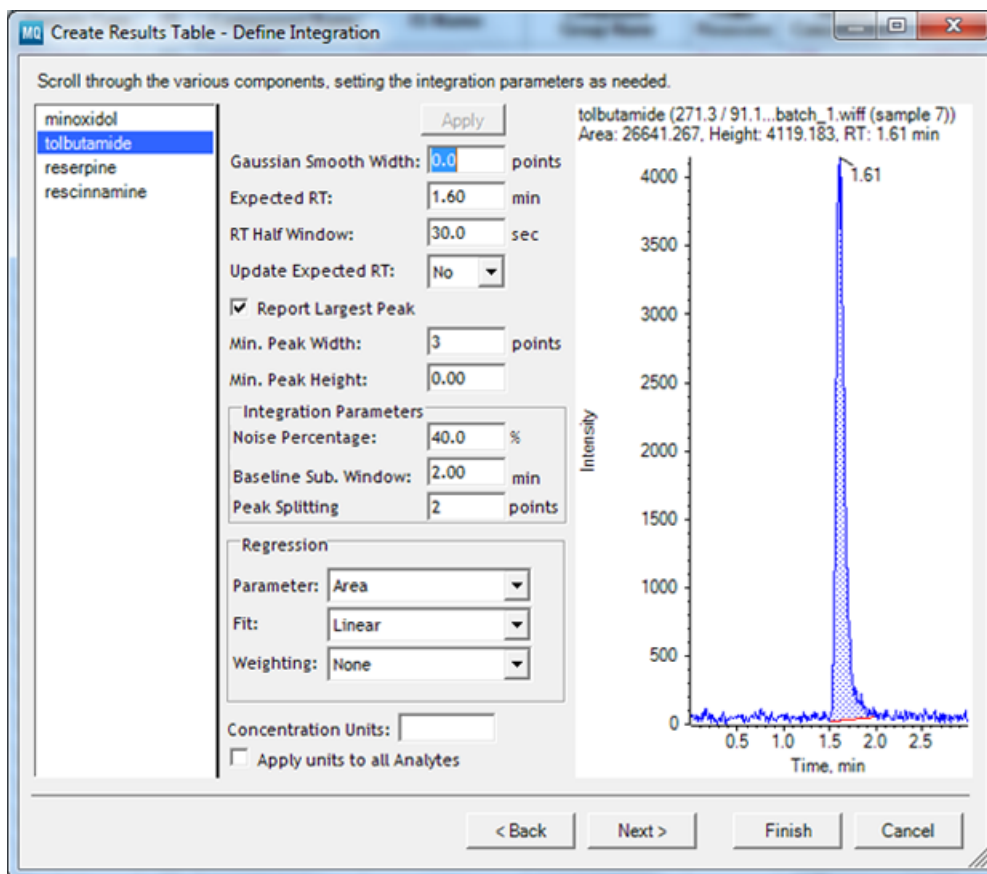
**Nota:** Se vi sono pochi componenti, verificare che i parametri di rilevamento picco siano impostati a valori predefiniti ragionevoli prima di eseguire la procedura guidata per evitare di regolare i parametri per ogni componente.

Fare clic con il tasto destro del mouse nella pagina per visualizzare i comandi disponibili. Fare riferimento a [Menu tasto destro Define Integration a pagina 49](#).

Nel gruppo **Regression**, modificare le opzioni di calibrazione per tutti i componenti o per quelli selezionati dopo la creazione della Results Table. Impostare le unità di concentrazione e i parametri di regressione predefiniti in modo da non doverli regolare ogni volta.

**Suggerimento!** Ingrandire il grafico trascinando le aree degli assi x o y. Tornare alla vista predefinita usando il menu tasto destro (**Home Graph Axes**) o facendo doppio clic nell'area dell'asse.

Figura 7-8 Pagina Create Results Table - Define Integration



Etichetta	Descrizione
Apply	Regola i parametri di rilevamento picco, se necessario, per un determinato componente. Quando si crea la nuova Results Table, i parametri specificati per un determinato componente vengono applicati a quel componente per tutti i campioni quando viene eseguita l'integrazione dei dati. Fare riferimento a <a href="#">Parametri dell'algoritmo di integrazione a pagina 119</a> .
Expected RT	Inizialmente impostato come il tempo di ritenzione del punto con l'intensità maggiore per il cromatogramma. Generalmente questo è il picco richiesto. Tuttavia, se sono presenti degli isomeri, potrebbe essere necessario regolare questo valore. Per regolare il valore, digitare un nuovo valore nel campo <b>Expected RT</b> , quindi fare clic su <b>Apply</b> . In alternativa, fare clic sul grafico e trascinare sul picco di interesse. Fare attenzione a non trascinare accidentalmente il cursore nel grafico e regolare il tempo di ritenzione previsto.
Parameter	Selezionare <b>Area</b> o <b>Height</b> .
Fit	I vari tipi di adattamento sono descritti in <a href="#">Equazioni di regressione a pagina 125</a> .
Weighting	I diversi tipi di pesatura sono descritti in <a href="#">Fattori di pesatura a pagina 126</a> .



Etichetta	Descrizione
Concentration Units	Digitare le unità di concentrazione usate per gli analiti e qualunque standard interno. Se viene eseguita la quantificazione relativa, questo campo deve essere lasciato vuoto. La procedura guidata ipotizza l'uso delle stesse unità per tutti i componenti. In caso contrario, usare il <b>Quantitation Method Editor</b> .
Apply units to all Analytes	L'utente può inserire un'unità di concentrazione per i singoli componenti. Per applicare la stessa unità a tutti i componenti, selezionare questa casella. Le informazioni devono essere coerenti con le <b>Concentration Units</b> .

### Menu tasto destro Define Integration

Fare clic con il tasto destro del mouse sulla pagina **Define Integration** per accedere a un menu contestuale. Sono disponibili i seguenti comandi.

**Tabella 7-4 Opzioni del menu tasto destro di Define Integration**

Opzione di menu	Descrizione
Find Component by Name	Simile al comando disponibile nella pagina <b>Definizione components</b> , con la differenza che invece di selezionare le righe del foglio di calcolo <b>Components</b> , si selezionano singole voci nell'elenco dei componenti.
Highlight Components with Uncertain RT	Utilizzato per evidenziare quei componenti per i quali il tempo di ritenzione predefinito previsto (preso come RT del picco con la più grande intensità per ciascun cromatogramma) non è corretto. Se vi sono solo pochi componenti, rivederli singolarmente e non usare questo comando. Tuttavia, se vi sono molti componenti, utilizzare questo comando per verificare visivamente solo quelli per i quali è presente più di un picco significativo nel cromatogramma. Fare riferimento a <a href="#">Finestra di dialogo Highlight Components a pagina 86</a> .
Home Graph Axis	Riporta il grafico ingrandito alla visualizzazione originale in cui tutti i dati sono visibili.

Tabella 7-4 Opzioni del menu tasto destro di Define Integration (continua)

Opzione di menu	Descrizione
Overlay Other Components for Group	<p>Usare questo comando per sovrapporre i cromatogrammi se ai gruppi sono stati assegnati diversi componenti e se si prevede che i componenti assegnati a un determinato gruppo abbiano lo stesso tempo di ritenzione. Per esempio, se rappresentano diverse transizioni MRM dello stesso composto effettivo.</p> <p>Se selezionato, il cromatogramma del componente corrente, i cui parametri di integrazione sono in corso di definizione, è disegnato con una traccia blu e viene mostrata la sua area di picco integrato. I cromatogrammi, e non l'area di picco integrato, per gli altri componenti dello stesso gruppo sono sovrapposti mediante una linea tratteggiata.</p>
Update Retention Times	<p>Utilizzato per ripristinare i tempi di ritenzione previsti per un metodo di quantificazione creato in precedenza. Se si apre un metodo di quantificazione esistente e si seleziona <b>Set New Typical Sample</b>, i cromatogrammi mostrati corrispondono al nuovo campione, ma i tempi di ritenzione previsti rimangono invariati.</p> <p>Per ciascun componente, il tempo di ritenzione previsto viene aggiornato per corrispondere al tempo di ritenzione del picco con la maggiore intensità all'interno di una finestra della larghezza specificata centrata al tempo di ritenzione previsto originale.</p> <p>Fare riferimento a <a href="#">Finestra di dialogo Update Retention Time a pagina 86</a>.</p>

## Parametri per gli Outliers

Gli utenti possono contrassegnare i valori anomali relativi alla precisione per **Standards**, **QC**, **Ion Ratio** e **Calculated Concentration**. Sono disponibili i seguenti comandi.

Figura 7-9 Finestra di dialogo Create Results Table - Outlier Settings

Set criteria for flagging outliers.

☒ Accuracy for Standards

Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std):  %

Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ:  %

☒ Accuracy for QCs

Max. Accuracy Tolerance for QC:  %

☒ Ion Ratio ☒ Calculated Concentration

Component	IS	Group	Ion Ratio Tolerance (%)	Lower Limit of Calculated Conce..	Upper Limit of Calculated Conce..
▶ minoxidol	<input type="checkbox"/>	Group A			
tolbutamide	<input type="checkbox"/>	Group A	20		
reserpine	<input type="checkbox"/>				
rescinnamine	<input checked="" type="checkbox"/>				

< Back   Next >   Finish   Cancel

Etichetta	Descrizione
Accuracy for Standards	Modifica la tolleranza di precisione dei campioni <b>Standard</b> .
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Modifica la tolleranza di precisione per i campioni <b>Standard</b> con un valore coerente con le procedure operative standard di laboratorio.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Modifica la tolleranza di precisione per lo <b>Standard</b> di concentrazione più basso, se la procedura operativa standard di laboratorio indica una tolleranza diversa per questo <b>Standard</b> .
Accuracy for QCs	Modifica la tolleranza di precisione dei campioni di <b>Quality Control</b> .
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Modifica la tolleranza di precisione per i campioni di <b>Quality Control</b> con un valore coerente con le procedure operative standard di laboratorio.
Ion Ratio	Disponibile solo se i componenti sono assegnati ai gruppi. Selezionare per utilizzare il rapporto ioni dell'area del picco o dell'altezza del picco. L'area del picco o l'altezza del picco è impostata quando si seleziona il parametro di regressione durante lo sviluppo del metodo di quantificazione.

## Results Table

Etichetta	Descrizione
Calculated Concentration	Quando si utilizzano campioni <b>Standard</b> con concentrazione nota, indica la concentrazione retrocalcolata dalla curva di calibrazione. Le equazioni di regressione descrivono in che modo la regressione viene eseguita per i vari tipi di regressione e pesatura.
Component	Gli analiti o standard interni per tutti i campioni.
IS	Lo standard interno selezionato. Disponibile solo se è selezionata la casella <b>Ion Ratio</b> .
Group	I componenti che hanno lo stesso tempo di ritenzione (cioè, transizioni diverse per lo stesso composto) possono essere raggruppati. Disponibile solo se è selezionata la casella <b>Ion Ratio</b> .
Ion Ratio Tolerance (%)	Utilizzare l'impostazione predefinita o modificare secondo le procedure operative standard del laboratorio. Disponibile solo se è selezionata la casella <b>Ion Ratio</b> .
Lower Limit of Calculated Concentration	Immettere il limite inferiore della gamma di concentrazioni accettabile. Qualsiasi campione con <b>Calculated Concentration</b> inferiore a questo valore sarà contrassegnato come valore con concentrazione anomala.
Upper Limit of Calculated Concentration	Immettere il limite superiore dell'intervallo di concentrazioni accettabile. Qualsiasi campione con <b>Calculated Concentration</b> superiore a questo valore sarà contrassegnato come valore con concentrazione anomala.

Fare clic con il tasto destro del mouse sulla pagina **Outlier Settings** per accedere a un menu contestuale.

**Tabella 7-5 Outlier Settings: opzioni menu Tasto destro**

Etichetta	Descrizione
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Applica il limite inferiore della concentrazione calcolata a tutti gli analiti, se tutti gli analiti hanno gli stessi criteri.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Applica il limite superiore della concentrazione calcolata a tutti gli analiti, se tutti gli analiti hanno gli stessi criteri.

## Colonne della Results Table

**Nota:** Alcune colonne critiche delle informazioni sui campioni come **Sample Name**, **Sample ID**, e così via, non devono essere nascoste quando gli utenti personalizzano le impostazioni delle colonne **Results Table**.

Per i campi numerici, usare il formato 0.00 per le notazioni non scientifiche e il formato 0.00e0 per le notazioni scientifiche. Modificare i punti decimali per indicare la precisione dei numeri mostrati. Come separatore decimale è possibile utilizzare solo il punto (.) . Il raggruppamento cifre non è supportato.

**Tabella 7-6 Colonne della Results Table**

Etichetta	Descrizione
Accuracy	Quando si utilizzano campioni <b>Standard</b> con concentrazione nota per campioni <b>Standard</b> e <b>Quality Control</b> , si ha la seguente definizione: $100\% * (\text{Concentrazione calcolata}) / (\text{Concentrazione reale})$ Per gli altri tipi di campioni, il valore è N/A.
Acq. Method Name	Il nome del metodo di acquisizione utilizzato per acquisire il campione.
Acquisition Date & Time	La data e l'ora in cui è stato acquisito il campione wiff.
Actual Concentration	Per i campioni <b>Standard</b> e <b>Quality Control</b> , indica la concentrazione nota prevista.
Area	L'area del picco rilevata. Se non viene rilevato alcun picco, il valore sarà N/A.
Area / Height	L'area del picco rilevata divisa per l'altezza. Se non viene rilevato alcun picco, il valore sarà N/A.
Area Ratio	Per gli analiti che utilizzano uno standard interno, è il rapporto tra <b>Area</b> e <b>IS Area</b> . Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, il valore è N/A.
Asymmetry Factor	La distanza dalla linea centrale del picco alla pendenza posteriore divisa per la distanza dalla linea centrale del picco alla pendenza anteriore, con tutte le misurazioni eseguite al 10% dell'altezza massima del picco.
Baseline Delta / Height	Il valore assoluto della differenza di altezza della linea di base (all'inizio e alla fine del picco) rispetto all'altezza del picco reale. I valori maggiori di 0,1 indicano che la linea di base può non essere integrata correttamente e che il picco deve essere revisionato.
Calculated Concentration	Quando si utilizzano campioni <b>Standard</b> con concentrazione nota, indica la concentrazione retrocalcolata dalla curva di calibrazione. Per informazioni su come viene eseguita la regressione per i vari tipi di regressione e pesatura, fare riferimento a <a href="#">Equazioni di regressione a pagina 125</a> .
Component Comment	Un commento arbitrario che si applica all'analita o allo standard interno per tutti i campioni.
Component Group Name	Il nome del gruppo (eventuale) associato all'analita o allo standard interno.
Component Index	L'indice dell'analita o dello standard interno nel metodo di quantificazione originale. Può essere utile ordinare la tabella in base a questo campo.
Component Name	Il nome dell'analita o dello standard interno.

## Results Table

Tabella 7-6 Colonne della Results Table (continua)

Etichetta	Descrizione
Conc. Units	Le unità di concentrazione.
Concentration Ratio	Per gli analiti che utilizzano uno standard interno, è il rapporto tra la <b>Actual Concentration</b> e la <b>IS Actual Concentration</b> . Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, il valore è N/A.
Corrected Area	L'area del picco rilevata. Se non viene rilevato alcun picco, il valore sarà N/A.
Corrected Area / Height	L'area del picco rilevata divisa per l'altezza. Se non viene rilevato alcun picco, il valore sarà N/A.
Corrected Height	L'altezza del picco rilevata. Se non viene rilevato alcun picco, il valore sarà N/A.
Dilution Factor	Il fattore per il quale il campione è stato diluito. Questo fattore è utilizzato nel calcolo della curva di calibrazione. Fare riferimento a <a href="#">Equazioni di regressione a pagina 125</a> .
End Time	Il tempo di ritenzione finale del picco rilevato, in minuti.
End Time at 10%	Il tempo in minuti lungo il lato posteriore del picco dove l'intensità è al 10% dell'altezza del picco.
End Time at 5%	Il tempo in minuti lungo il lato posteriore del picco dove l'intensità è al 5% dell'altezza del picco.
Expected Ion Ratio	Il rapporto di ioni previsto per tutti i tipi di campioni.
Expected RT	Il tempo di ritenzione previsto dal metodo di quantificazione, in minuti.
Height	L'altezza del picco rilevata. Se non viene rilevato alcun picco, il valore sarà N/A.
Height Ratio	Per gli analiti che utilizzano uno standard interno, indica il rapporto tra <b>Height</b> e <b>IS Height</b> . Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, il valore è N/A.
Index	L'indice della riga nell'ordine originale non ordinato. Se la tabella è ordinata sulla base di un'altra colonna, può essere riportata all'ordine originale eseguendo l'ordinamento su questa colonna.
Injection Volume	Il volume del campione iniettato dall'autocampionatore, in mL.
Integration Type	<ul style="list-style-type: none"><li>Un valore <b>Baseline</b> indica che un picco indipendente è stato integrato nel modo consueto.</li><li>Un valore <b>Valley</b> indica che erano presenti due picchi adiacenti e che il segnale non è ritornato al valore della linea di base tra di essi.</li><li>Un valore <b>Manual</b> indica che il picco è stato integrato manualmente.</li><li>Un valore <b>N/A</b> indica che non sono stati rilevati picchi.</li></ul>

Tabella 7-6 Colonne della Results Table (continua)

Etichetta	Descrizione
Ion Ratio	<ul style="list-style-type: none"> <li>Gli <b>Ion Ratio</b> sono determinati quando almeno due transizioni MRM di un singolo analita sono state raccolte in un gruppo.</li> <li>Il primo componente in un sottogruppo sarà utilizzato come ioni <b>Quantifier</b>. Il resto dei componenti del sottogruppo verrà usato come ioni <b>Qualifier</b>.</li> <li>Rapporto ioni = (Area Picco o Altezza del Qualificatore) / (Area Picco o Altezza del Quantificatore)</li> <li>Sottogruppi <ul style="list-style-type: none"> <li>Tutti gli analiti di un gruppo costituiscono un sottogruppo <b>Analyte</b>.</li> <li>Tutti gli standard interni di un gruppo costituiscono il sottogruppo <b>IS</b>.</li> </ul> </li> <li>Se un componente non fa parte di un gruppo, il rapporto <b>Ion Ratio</b> è N/A.</li> <li>Se il picco non viene rilevato, il rapporto <b>Ion Ratio</b> è N/A.</li> <li>Applicato a tutti i componenti nei sottogruppi sia <b>Analyte</b> che <b>IS</b>, per il <b>Quantifier</b>, il <b>Qualifier</b> è esso stesso.</li> <li>Se l'integrazione cambia per i picchi <b>Quantifier</b> o <b>Qualifier</b>, il rapporto <b>Ion Ratio</b> viene calcolato nuovamente.</li> <li>Può essere calcolato per l'area picco o per l'altezza picco. Se si utilizza <b>Area</b> nella parte della regressione di un .qmethod per il primo componente (l'indice componente è 1) nella <b>Results Table</b>, l'area del picco sarà utilizzata per il calcolo del rapporto <b>Ion Ratio</b> per tutta la <b>Results Table</b>. Se si utilizza <b>Height</b> nella regressione del primo componente, per il calcolo verrà usata l'altezza del picco.</li> </ul>
IS	Una casella di controllo selezionata indica che il componente della riga è uno standard interno, non un analita.
IS Actual Concentration	La concentrazione effettiva per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Area	Area per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Area / Height	Il rapporto tra <b>Area</b> e <b>Height</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Baseline Delta / Height	<b>Baseline Delta / Height</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Comment	Un commento arbitrario per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Corrected Area	Area corretta per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.

## Results Table

**Tabella 7-6 Colonne della Results Table (continua)**

<b>Etichetta</b>	<b>Descrizione</b>
IS Corrected Area / Height	<b>Area corretta/altezza corretta</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Corrected Height	<b>Altezza corretta</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS End Time	<b>Ora finale</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Expected RT	<b>RT previsto</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Height	<b>Altezza</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Integration Type	<b>Tipo di integrazione</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Mass Info	<b>Informazioni sulla massa</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Name	<b>Nome componente</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Peak Comment	<b>Commento picco</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Quality	Qualità per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Region Height	Metrica qualità per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Retention Time	<b>Tempo di ritenzione</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Signal / Noise	<b>Segnale/rumore</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Start Time	<b>Ora di inizio</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Total Width	<b>Larghezza totale</b> per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
IS Width at 50%	Larghezza al 50% per lo standard interno associato all'analita corrente o N/A per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno.
Mass Info	Le informazioni sulla massa associata al componente. Per gli esperimenti MRM è <b>Q1/Q3</b> e per gli esperimenti di profilo (scansione completa) è <b>Start - Stop</b> .



Tabella 7-6 Colonne della Results Table (continua)

Etichetta	Descrizione
Modified	Un segno di spunta indica che i parametri di rilevamento dei picchi sono stati modificati, utilizzando il riquadro <b>Peak Review</b> , rispetto ai valori originali indicati nel metodo di quantificazione.
Operator Name	Il nome dell'operatore dello strumento che ha acquisito il campione.
Original Filename	Il nome del file wiff.
Outlier Reasons	<p>Quando i criteri per i valori anomali sono stati impostati nel metodo di quantificazione, questa colonna indica quale criterio è stato trovato fuori dai limiti predeterminati per il componente.</p> <p>La colonna <b>Outlier Reasons</b> è collegata solo a <b>Outlier Settings</b> nel metodo di quantificazione ed è una colonna predefinita nella <b>Results Table</b>.</p> <p>La ragione del valore anomalo è contrassegnata nel modo seguente:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Accuracy</b></li> <li>• <b>Concentration</b></li> <li>• <b>Ion Ratio</b> Se è presente un picco per il quantificatore ma non per il qualificatore, il rapporto di ioni verrà contrassegnato per entrambi i componenti. Se è presente un picco per il qualificatore ma non per il quantificatore, il rapporto di ioni verrà contrassegnato per entrambi i componenti. Se nessuno dei due presenta un picco, non apparirà nessun contrassegno per nessun componente.</li> <li>• <b>Cannot calculate the Expected Ion Ratio.</b></li> </ul>
Peak Comment	Un commento arbitrario per la riga.
Plate Number	Numero piastra autocampionatore, come originariamente indicato nel <b>Batch Editor</b> utilizzato per acquisire i dati.
Points Across Baseline	Il numero di scansioni dall'avvio all'arresto del picco.
Points Across Half Height	Il numero di scansioni attraverso il picco a circa il 50% dell'altezza.
Quality	<p>Questa metrica tenta di indicare la qualità del picco integrato.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• I valori vicini a zero indicano che il picco è scarsamente integrato (o che non è presente alcun picco reale).</li> <li>• I valori vicini a 1,0 indicano che il picco è integrato bene e non deve essere revisionato.</li> </ul>
Rack Number	Numero rack autocampionatore, come originariamente specificato nel <b>Batch Editor</b> utilizzato per acquisire i dati.

## Results Table

Tabella 7-6 Colonne della Results Table (continua)

Etichetta	Descrizione
Region Height	L'altezza di picco del picco più grande vicino al picco reale rilevato. È utile insieme al campo <b>Quality</b> . I picchi di bassa qualità che hanno anche una ragionevole <b>Region Height</b> devono essere rivisti. Se <b>Region Height</b> è piccola, significa che non è presente alcun picco significativo.
Relative RT	Per gli analiti che utilizzano uno standard interno, è il rapporto tra <b>Retention Time</b> e <b>IS Retention Time</b> . Per gli standard interni o per gli analiti senza uno standard interno, il valore è N/A.
Retention Time	L'effettivo tempo di ritenzione del picco rilevato, in minuti.
Sample Comment	Un commento arbitrario per il campione.
Sample ID	Un identificatore arbitrario del campione. Viene inizializzato dal valore originariamente specificato nel <b>Batch Editor</b> utilizzato per acquisire i dati.
Sample Index	L'indice del campione corrente.
Sample Name	Un nome arbitrario per il campione. Viene inizializzato dal valore originariamente specificato nel <b>Batch Editor</b> utilizzato per acquisire i dati.
Sample Type	Il tipo di campione. Fare riferimento a <a href="#">Filtro tipo di campione a pagina 41</a> .
Signal / Noise	Una stima del rapporto tra l'altezza del picco rilevato e il rumore di fondo presente nel cromatogramma.  Quando si utilizza l'algoritmo di integrazione SignalFinder, il rumore è stimato mediante il rumore relativo calcolato e la linea di base nella posizione di apice del picco. L'algoritmo di integrazione MQ4 utilizza un approccio simile salvo per il fatto che la linea di base viene stimata utilizzando tutto il cromatogramma.  Fare riferimento a <a href="#">Rumore relativo e calcoli segnale-rumore a pagina 148</a> .
Slope of Baseline	Indica la deriva della linea di base.
Start Time	Il tempo di ritenzione iniziale del picco rilevato, in minuti.
Start Time at 10%	Il tempo in minuti lungo il lato anteriore del picco dove l'intensità è al 10% dell'altezza del picco.
Start Time at 5%	Il tempo in minuti lungo il lato anteriore del picco dove l'intensità è al 5% dell'altezza del picco.
Tailing Factor	La distanza dalla pendenza anteriore alla pendenza posteriore del picco divisa per il doppio della distanza dalla linea centrale del picco alla pendenza anteriore, con tutte le misure eseguite al 5% dell'altezza massima del picco.
Total Width	La larghezza del picco cromatografico, minuti, alla linea di base.

Tabella 7-6 Colonne della Results Table (continua)

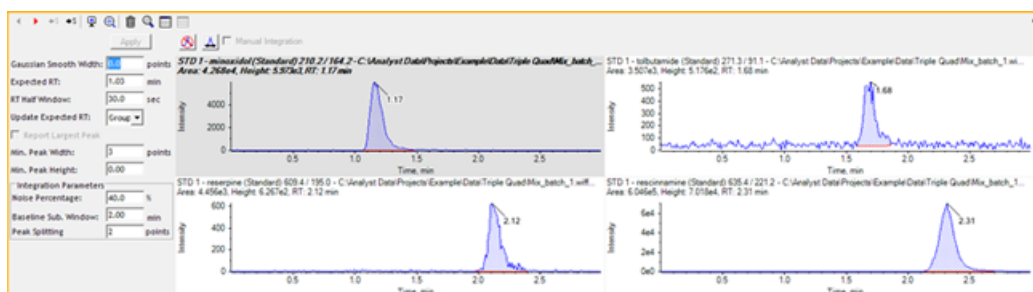
Etichetta	Descrizione
Used	Per i campioni <b>Standard</b> un segno di spunta indica che l'analita corrispondente è attualmente utilizzato per la costruzione della curva di calibrazione. Per i campioni <b>Quality Control</b> un segno di spunta indica che l'analita è utilizzato per il calcolo delle statistiche <b>QC</b> . Per altri tipi di campioni, questo campo è solo a scopo informativo.
Vial Number	Il numero della fiala dell'autocampionatore, come originariamente specificato nel <b>Batch Editor</b> utilizzato per acquisire i dati.
Width at 10%	La larghezza del picco misurata al 10% dell'altezza del picco.
Width at 5%	La larghezza del picco misurata al 5% dell'altezza del picco.
Width at 50%	La larghezza del picco cromatografico, in minuti, del picco rilevato misurato a metà della sua intensità apice.

Usare il riquadro **Peak Review** per ispezionare visivamente i cromatogrammi grezzi in modo da determinare la qualità del processo di ricerca dei picchi. Quando vi è una **Results Table** attiva, fare clic sull'icona **Show Peak Review** nella barra degli strumenti della tabella stessa per aprire il riquadro Peak Review. I revisori devono rivedere i dati quantitativi secondo i criteri dell'integrazione dei picchi e l'accettazione dei dati nelle loro procedure operative standard (SOP).

Il raggruppamento dei numeri non è supportato. Gli utenti non devono raggruppare i numeri in alcuna casella di testo (ad esempio, parametri di integrazione) e griglia (ad esempio, **Results Table**).

Il **Peak Review** migliorato indica l'accettazione di **Ion Ratio** su un cromatogramma sovrapposto. L'utente può anche ingrandire un singolo cromatogramma.

**Figura 8-1 Riquadro Peak Review**



Utilizzare il riquadro **Peak Review** per correggere i cromatogrammi che non si sono integrati correttamente, regolando i parametri di ricerca dei picchi oppure selezionando manualmente i punti di integrazione iniziale e finale. Una volta integrato il cromatogramma, la **Results Table** viene aggiornata automaticamente con la nuova area dei picchi ed altri parametri.

I metodi di quantificazione includono i criteri utilizzati per quantificare i picchi selezionati per l'integrazione. I revisori devono rivedere i dati quantitativi secondo i criteri dell'integrazione dei picchi e l'accettazione dei dati nelle loro SOP (Procedure Operative Standard).

## Manual Integration

Dopo aver integrato manualmente un picco in un determinato cromatogramma, selezionare questa casella per indicare che il cromatogramma è stato integrato manualmente. In questo stato, se l'utente deselecta la casella, l'integrazione manuale del picco viene annullata e il picco viene automaticamente reintegrato attraverso i parametri del metodo.

La differenza tra questa casella e il pulsante **Enable Manual Integration Mode** si trova nel fatto che questa casella riflette lo stato del picco corrente, mentre il pulsante specifica il comportamento durante il trascinamento di un cromatogramma.

---

**Nota:** Dopo aver abilitato la modalità di integrazione manuale, questa rimane abilitata per tutti i riquadri fino a quando non viene disattivata.

---

## Apply

Se l'utente ha regolato qualche parametro di rilevamento picchi, il pulsante **Apply** viene abilitato. Fare clic sul pulsante per applicare i parametri di rilevamento picchi modificati al cromatogramma attivo.

Tranne nel modo di integrazione manuale, trascinare su un particolare picco in un cromatogramma equivale a regolare il parametro **Expected RT** e a fare clic su **Apply**.

---

**Nota:** Se l'utente modifica i parametri di rilevamento picchi e attiva un cromatogramma differente senza fare clic su **Apply**, i parametri non verranno applicati e le modifiche verranno ignorate.

---

## Suggerimenti per la revisione dei picchi

- Ordinare la **Results Table** su una particolare colonna e rivedere solo i cromatogrammi che vengono ordinati nella parte superiore o inferiore della tabella.
- Il riquadro **Peak Review** è sempre sincronizzato con la **Results Table** corrispondente e mostra i cromatogrammi per gli stessi picchi, nello stesso ordine, come nella **Results Table**. Qualsiasi modifica (come ordinare le righe, filtrare tipi di campioni o selezionare componenti) apportata alla **Results Table** si riflette automaticamente nel riquadro **Peak Review**.
- Selezionare il numero di cromatogrammi da visualizzare contemporaneamente.
- Utilizzare la barra di scorrimento a destra del riquadro per scorrere i cromatogrammi disponibili. Quando il riquadro **Peak Review** è attivo, utilizzare i tasti freccia su e giù della tastiera o la rotella di scorrimento del mouse per spostarsi tra i cromatogrammi.
- In un qualsiasi momento, un cromatogramma particolare è considerato attivo ed è indicato dal titolo in grassetto. Rendere attivo un cromatogramma particolare facendo clic in un qualsiasi punto al suo interno.
- Quando un cromatogramma diventa attivo, i parametri di integrazione mostrati a sinistra del riquadro vengono aggiornati per riflettere il nuovo cromatogramma attivo. Se l'utente regola i parametri di integrazione dei picchi e quindi fa clic su **Apply**, influirà sull'attuale cromatogramma attivo.
- Selezionare una riga nella **Results Table** facendo clic nella regione grigia a sinistra della prima colonna per mostrare il picco corrispondente nel riquadro **Peak Review**. Se l'utente scorre fino a un cromatogramma particolare nel riquadro **Peak Review**, la **Results Table** evidenzia la riga corrispondente e quindi la visualizza.
- Se l'utente trascina attraverso un picco particolare in un cromatogramma, il parametro di integrazione **Expected RT** viene aggiornato con l'effettivo tempo di ritenzione del picco. Il nuovo tempo di ritenzione viene quindi applicato automaticamente e il picco è nuovamente integrato, aggiornando la **Results Table**.
- Se l'utente sta rivedendo i picchi in modalità di integrazione manuale, il trascinamento attraverso il picco integrerà manualmente il picco selezionato.

## Verifica dei picchi

---

- Il processo di revisione del picco può essere velocizzato eseguendo il caching dei cromatogrammi precedentemente calcolati. Fare riferimento a [Menu Edit a pagina 15](#).

## Peak Review: menu di scelta rapida

Queste funzioni controllano l'aspetto dei parametri di integrazione mostrati a sinistra dei cromatogrammi. Fare clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Peak Review** per accedere a un menu contestuale. Sono disponibili i seguenti comandi.

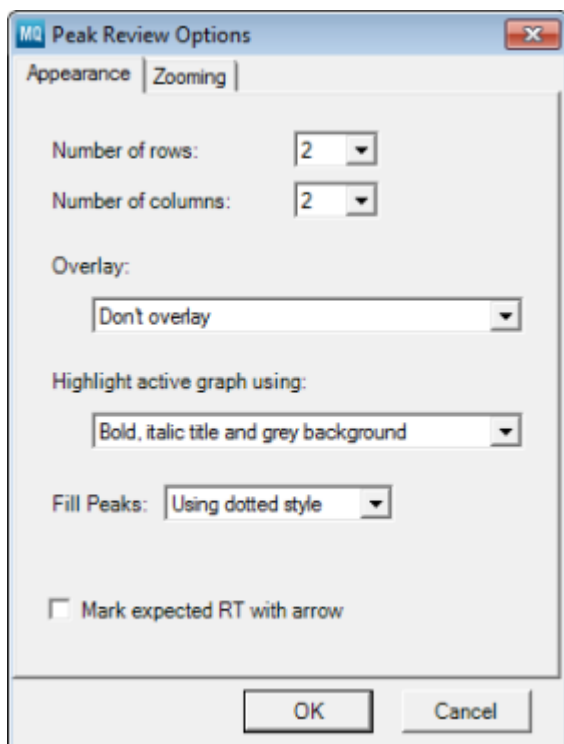
**Tabella 8-1 Parametri i Peak Review**

Attività	Comandi
Modificare l'aspetto del riquadro <b>Peak Review</b> .	<a href="#">Finestra di dialogo Peak Review Options: scheda Appearance a pagina 62</a> o <a href="#">Finestra di dialogo Peak Review Options: scheda Zooming a pagina 65</a> .
Impostare il formato del titolo della peak review.	<a href="#">Impostazione del formato titolo revisione picco a pagina 67</a> .
Mostrare i parametri utilizzando nomi descrittivi per i singoli parametri.	Per default, il valore <b>Show Parameters-Normal Width</b> è sempre impostato.
Copiare i parametri.	<a href="#">Copia dei parametri a pagina 67</a> .
Incollare i parametri.	<a href="#">Incolla parametri a pagina 67</a> .
Impostare il picco su 'Non trovato'.	<a href="#">Impostazione del picco su 'Not Found' a pagina 68</a> .
Utilizzare il picco.	<a href="#">Utilizzo del picco a pagina 68</a> .
Aggiornare il metodo di quantificazione per il componente.	<a href="#">Aggiornamento del metodo di quantificazione per componente a pagina 68</a> .
Aggiornare il metodo di quantificazione per il gruppo.	<a href="#">Aggiornamento del metodo di quantificazione per gruppo a pagina 68</a> .
Applicare i parametri di integrazione ad un campione all'interno di un gruppo.	<a href="#">Applicazione dei parametri di integrazione al campione nel gruppo a pagina 69</a> .
Ripristinare il picco al metodo originale.	<a href="#">Ripristino del picco al metodo originale a pagina 69</a> .
Ripristinare tutti i picchi del componente.	<a href="#">Ripristino di tutti i picchi per il componente a pagina 69</a> .

## Finestra di dialogo Peak Review Options: scheda Appearance

Fare clic con il tasto destro del mouse sul riquadro **Peak Review** per regolare le opzioni che influenzano l'aspetto del riquadro **Peak Review**. Si consiglia di non impostare più di quattro righe e quattro colonne.

Figura 8-2 Finestra di dialogo Peak Review Options: scheda Appearance



## Verifica dei picchi

Etichetta	Descrizione
Number of rows and Number of columns	Controlla il numero di cromatogrammi visibili contemporaneamente. A meno che i cromatogrammi non siano già stati memorizzati, occorrerà del tempo per scorrere le pagine nel caso in cui vengano visualizzati più cromatogrammi. Fare riferimento a <a href="#">Menu Edit a pagina 15</a> .
Overlay	<p>Stabilisce la necessità o meno di sovrapporre altri cromatogrammi sopra il cromatogramma principale in ciascuno dei sotto-riquadri.</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Don't Overlay:</b> Impedisce la sovrapposizione di altri cromatogrammi.</li><li>• <b>All components for group:</b> Sovrappone tutti i cromatogrammi per i componenti dello stesso gruppo come componente principale (per il campione corrente).</li><li>• <b>Analytes and IS's separately for group:</b> Simile all'opzione precedente, con la differenza che anziché sovrapporre tutti i componenti dello stesso gruppo, gli analiti e gli standard interni vengono mantenuti separati.</li><li>• <b>Internal Standard with Analyte:</b> Per gli analiti, sovrappone lo standard interno utilizzato dall'analita (i cromatogrammi dello standard interno non dispongono di altre sovrapposizioni).</li><li>• <b>Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines:</b> Mostra le linee del rapporto ioni. Selezionare questa opzione per visualizzare l'accettazione del rapporto ioni nella <b>Results Table</b>. Gli utenti possono visualizzare l'accettazione del rapporto ioni quando vi sono gruppi definiti nel metodo di quantificazione. Tuttavia, le <b>Ion Ratio Lines</b> sono solo un'indicazione dell'accettazione, non sono il risultato finale. Le linee appaiono nel cromatogramma come altezza di picco, ma vengono calcolate sulla base dell'area o dell'altezza del picco a seconda delle impostazioni definite nel metodo di quantificazione. Se risulta una discrepanza tra l'altezza e l'area, l'utente deve verificare i valori anomali di <b>Ion Ratio</b> nella <b>Results Table</b>.</li></ul>
Highlight active graph using:	Indica la modalità di visualizzazione del cromatogramma attualmente attivo. Impostare in modo da utilizzare il titolo in grassetto corsivo e lo sfondo grigio.

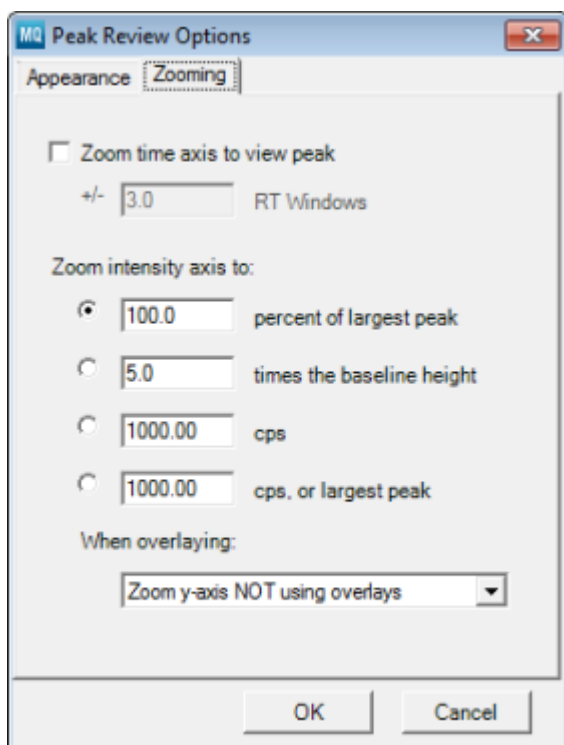


Etichetta	Descrizione
Fill peaks	<p>Indica la modalità di visualizzazione dell'area integrata per i picchi. Le opzioni disponibili sono:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Utilizzo di uno stile punteggiato come nelle acquisizioni delle schermate in questo documento.</li> <li>• Utilizzo di uno stile solido.</li> <li>• Nessun riempimento. In tutti i casi viene tracciata (in rosso) anche la linea di base del picco.</li> </ul> <p>Se si seleziona la terza opzione, verrà tracciata solo la linea di base e il picco non verrà riempito.</p>
Mark expected RT with arrow	<p>Indica l'<b>Expected Retention Time</b> con una freccia blu disegnata sotto l'asse del tempo. Questa opzione è utile per stabilire se il picco integrato è prossimo al valore RT previsto.</p>

## Finestra di dialogo Peak Review Options: scheda Zooming

Fare clic con il tasto destro del mouse sul riquadro **Peak Review** per regolare le opzioni che influenzano l'aspetto del riquadro **Peak Review**. Le opzioni **Zoom intensity axis to** vengono utilizzate per regolare automaticamente l'asse y dei cromatogrammi.

Figura 8-3 Finestra di dialogo Peak Review Options: scheda Zooming



## Verifica dei picchi

Etichetta	Descrizione
Zoom time axis to view peak	Se selezionata, questa opzione consente di regolare automaticamente l'asse x dei cromatogrammi in modo da rendere visibile solo una porzione dell'intera attività. Questa opzione è utile nel caso di attività LC lunghe in quanto consente di vedere più chiaramente la regione di interesse. La larghezza della finestra viene espressa in termini di multiplo del parametro di integrazione RT Window. La larghezza totale della regione ingrandita è due volte il numero di multipli specificato in <b>RT Window</b> .
Zoom intensity axis to percent of largest peak	Questa opzione viene utilizzata per regolare automaticamente l'asse y dei cromatogrammi. Scala l'asse y alla percentuale specificata del picco più ampio all'interno dell'intervallo x visibile del cromatogramma. Questo sarà inferiore alla lunghezza totale dell'attività LC se si utilizza l'opzione Zoom time axis to view peak.
Zoom intensity axis to times the baseline height	Questa opzione viene utilizzata per regolare automaticamente l'asse y dei cromatogrammi. Viene utilizzata per focalizzare la regione iniziale.
Zoom intensity axis to cps	Scala l'asse y direttamente al valore specificato.
Zoom intensity axis to cps, or largest peak	Scala l'asse y sul valore specificato inferiore o sul picco superiore.
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays	Mantiene le impostazioni di Zoom intensity axis to nella sezione usando solo il set di dati principale. Questa impostazione può causare la visibilità parziale delle sovrapposizioni nel caso in cui siano più intense del set di dati principale.
When overlaying Zoom y-axis using overlays	Utilizza il set di dati principale e tutte le sovrapposizioni, adottando il valore y più grande. Questa funzione mantiene le sovrapposizioni costantemente visibili.
When overlaying Use a percentage y-axis	Scala il set di dati principale e le sovrapposizioni separatamente utilizzando una scala percentuale. In questo modo ogni traccia utilizza l'intera altezza disponibile. Tuttavia le altezze di picco relative non potranno essere confrontate visivamente in modo diretto.

**Suggerimento!** Fare doppio clic all'interno dell'asse y per scalare l'asse sul picco più intenso all'interno dell'intero set di dati.

Se selezionato, il cromatogramma del picco correntemente in fase di verifica viene disegnato con una traccia blu e viene mostrata la sua area di picco integrato. I cromatogrammi, e non l'area di picco integrato, per gli altri componenti (dello stesso campione) sono sovrapposti mediante una linea tratteggiata.

Se il grafico mostra questo tipo di sovrapposizione, fare doppio clic in un punto qualsiasi dell'area del titolo per visualizzare i titoli di tutti i cromatogrammi o solo quelli del cromatogramma attivo.

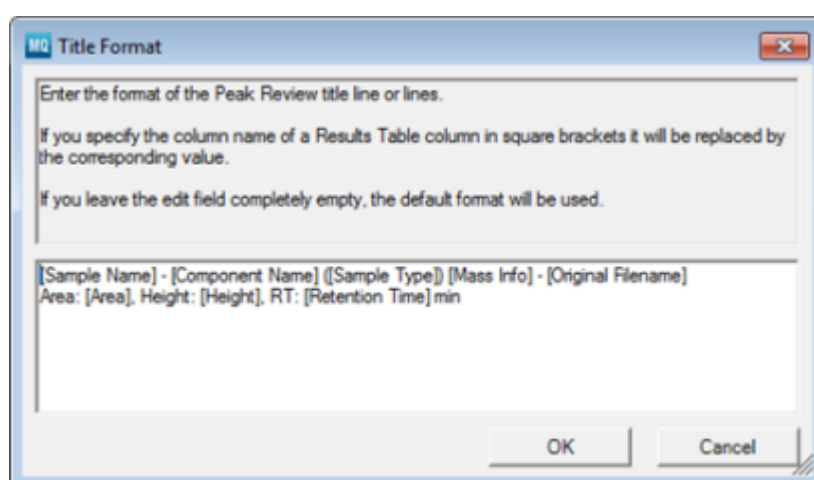
**Suggerimento!** Fare doppio clic nell'asse x per riportare il grafico alla visualizzazione iniziale in cui tutti i dati sono visibili. Per ingrandire, muoversi all'interno dell'asse per selezionare un intervallo di tempo.

## Impostazione del formato titolo revisione picco

Usare la finestra di dialogo per personalizzare le informazioni che appaiono nel titolo del grafico per ciascun cromatogramma. Se l'utente immette un nome di colonna nella **Results Table** in parentesi quadra, verrà sostituito dal valore del campo del campione e del componente corrente. L'utente può anche immettere un eventuale testo aggiuntivo che viene lasciato così com'è. Si consiglia di inserire il nome del campione [Sample Name] nel titolo di revisione picco.

- Fare clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Peak Review**, quindi fare clic su **Set Peak Review Title Format**.

Figura 8-4 Finestra di dialogo Title Format



## Copia dei parametri

Fare clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Peak Review** per accedere a questo comando. Usare questo comando insieme a **Paste Parameters** per copiare i parametri di rilevamento dei picchi da un cromatogramma all'altro. Questo comando può essere utilizzato se la stessa regolazione dei parametri deve essere eseguita per diversi cromatogrammi.

1. In un grafico con un cromatogramma attivo aperto, fare clic con il pulsante destro, quindi fare clic su **Copy Parameters**.
2. Usare il comando **Update Quantitation Method for Component** per applicare la modifica a tutti i cromatogrammi del componente.

## Incolla parametri

1. In un grafico con un cromatogramma attivo aperto, fare clic con il pulsante destro, quindi fare clic su **Copy Parameters**.
2. Fare clic con il tasto destro del mouse su un cromatogramma diverso e fare clic su **Paste Parameters**.

I parametri copiati in precedenza vengono applicati al nuovo cromatogramma.

## Impostazione del picco su 'Not Found'

- In un grafico con un cromatogramma attivo aperto, fare clic con il tasto destro del mouse, quindi fare clic su **Set Peak to 'Not Found'** per rimuovere l'integrazione dal cromatogramma selezionato.

## Utilizzo del picco

- In un grafico con un cromatogramma attivo aperto, fare clic con il tasto destro del mouse, quindi fare clic su **Use Peak** per includere o escludere il picco attivo dalla curva di calibrazione.

## Aggiornamento del metodo di quantificazione per componente

Dopo aver regolato i parametri di rilevamento dei picchi per un cromatogramma particolare, selezionare questa funzione per regolare la copia del metodo di quantificazione salvata con la Results Table per utilizzare tali parametri per il componente.

- Regolare i parametri di rilevamento dei picchi, fare clic con il tasto destro del mouse, quindi clic su **Update Quantitation Method for Component**.

Per il componente particolare, tutti i campioni vengono automaticamente integrati per utilizzare i nuovi parametri e il riquadro **Peak Review** e la **Results Table** vengono aggiornati. Se alcuni picchi sono stati integrati manualmente, all'utente viene chiesto se la reintegrazione deve applicarsi a tutti i picchi o solo a quelli che non sono stati integrati manualmente.

## Aggiornamento del metodo di quantificazione per gruppo

Come per il comando **Update Quantitation Method for Component**, salvo che l'integrazione si applica a tutti i componenti che appartengono allo stesso gruppo del componente del cromatogramma attualmente attivo. Se l'utente ha assegnato i vari componenti a gruppi e se si prevede che i componenti assegnati a un dato gruppo abbiano lo stesso tempo di ritenzione, questa funzione è utile in quanto l'utente

può ripristinare i parametri, compreso il tempo di ritenzione previsto, per tutti i componenti del gruppo in una volta sola. Questa funzione non è utile se i componenti dei gruppi non hanno gli stessi tempi di ritenzione.

- Regolare i parametri di rilevamento dei picchi, fare clic con il tasto destro del mouse, quindi clic su **Update Quantitation Method for Group**.

## Applicazione dei parametri di integrazione al campione nel gruppo

Dopo aver regolato i parametri di rilevamento dei picchi per un cromatogramma specifico, utilizzare questa funzione per applicare i parametri originali dalla copia del metodo di quantificazione salvata con la **Results Table** nel cromatogramma.

- Dopo aver regolato i parametri di rilevamento dei picchi per un cromatogramma specifico, fare clic con il tasto destro, quindi fare clic su **Apply Integration Parameters to Sample Within Group**.

## Ripristino del picco al metodo originale

Dopo aver regolato i parametri di rilevamento dei picchi per un cromatogramma specifico, utilizzare questa funzione per applicare i parametri originali dalla copia del metodo di quantificazione salvata con la **Results Table** nel cromatogramma.

- Fare clic con il tasto destro del mouse, quindi fare clic su **Revert Peak to Original Method**.

## Ripristino di tutti i picchi per il componente

Dopo aver regolato i parametri di rilevamento dei picchi per alcuni cromatogrammi, usare questa funzione per applicare i parametri originali dalla copia del metodo di quantificazione salvata con la **Results Table** in tutti i cromatogrammi per lo stesso componente del cromatogramma attivo. Se alcuni picchi sono stati integrati manualmente, all'utente viene chiesto se la reintegrazione deve applicarsi a tutti i picchi o solo a quelli che non sono stati integrati manualmente.

- Fare clic con il tasto destro del mouse, quindi fare clic su **Revert All Peaks for Component**.

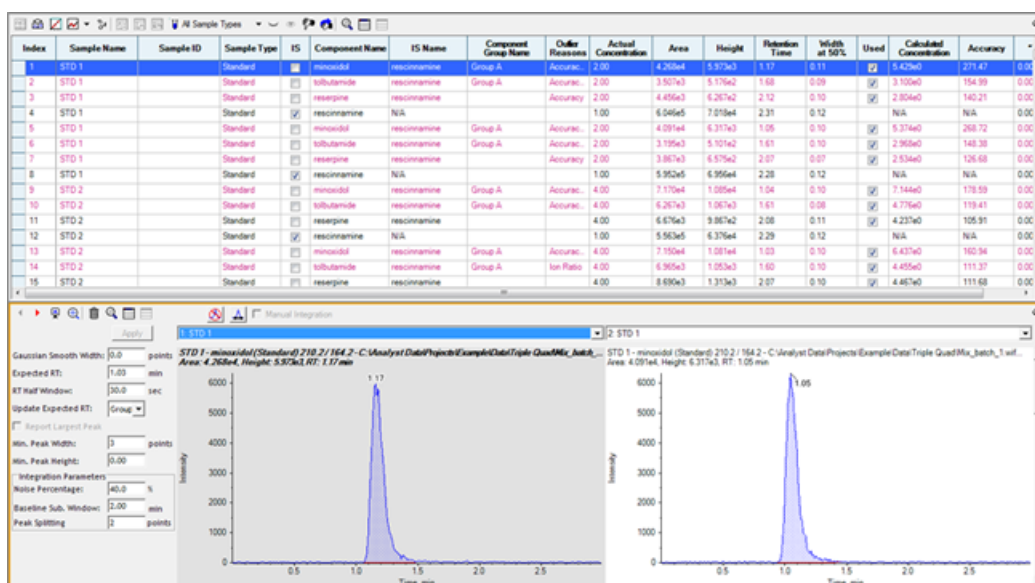
# Revisione dei campioni affiancati

# 9

Usare la funzione **Side-by-side Sample Review** per visualizzare determinati composti target. Gli utenti possono selezionare fino a sei campioni per confrontare le risposte dei picchi tra i campioni. I revisori devono rivedere i dati quantitativi secondo i criteri dell'integrazione dei picchi e l'accettazione dei dati nelle loro procedure operative standard (SOP).

Quando una **Results Table** è attiva, fare clic sull'icona **Side by Side Sample Review** nella barra degli strumenti della **Results Table** per aprire il riquadro **Side by Side Sample Review**.

Figura 9-1 Riquadro Side by Side Sample Review



I metodi di quantificazione includono i criteri utilizzati per quantificare i picchi selezionati per l'integrazione. I revisori devono rivedere i dati quantitativi secondo i criteri dell'integrazione dei picchi e l'accettazione dei dati nelle loro SOP (Procedure Operative Standard).

## Esecuzione di una Side-by-Side Sample Review

1. Aprire una Results Table.
2. Fare clic sull'icona **Side by Side Sample Review**.
3. Selezionare un campione dall'elenco nel riquadro **Side by Side Sample Review**.

Vengono visualizzati i parametri di integrazione.

---

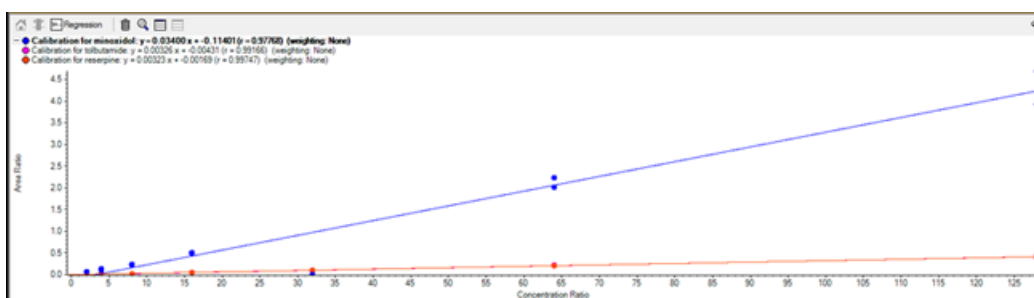
**Suggerimento!** Fare clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Side by Side Sample Review**, quindi fare clic su **Options** per modificare il numero di righe o colonne nella revisione affiancata.

---

4. Selezionare un altro campione dall'altro elenco.

Usare il riquadro **Calibration** per ispezionare visivamente la regressione di ciascun analita, qualora si utilizzino campioni **Standard** a concentrazione nota. Questo riquadro non è applicabile se l'utente sta eseguendo la quantificazione relativa e non ha campioni **Standard**. Quando una **Results Table** è attiva, fare clic su **Show Calibration** nella barra degli strumenti.

Figura 10-1 Riquadro Calibration

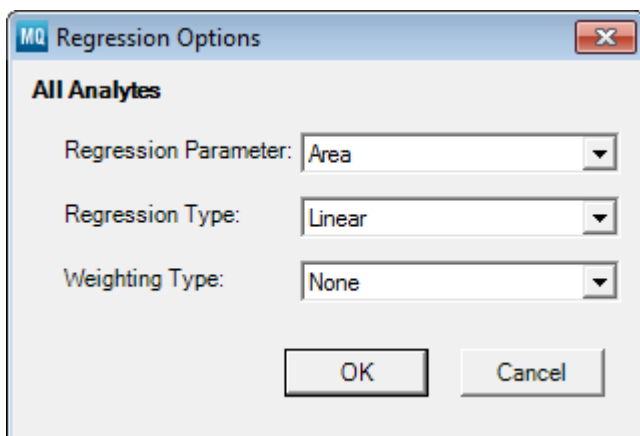


Analogamente all'ispezione della regressione, l'utente può escludere i campioni **Standard** affinché non vengano usati per la regressione. Dopo aver eseguito le regolazioni, viene calcolata automaticamente una nuova regressione e i parametri come **Calculated Concentration** e **Accuracy** vengono ricalcolati per tutti i campioni dell'analita. Fare riferimento a [Equazioni di regressione a pagina 125](#).

## Finestra di dialogo Regression Options

Se vi sono molti analiti, sarà più facile applicare le modifiche usando la finestra di dialogo **Regression Options** invece che modificando i parametri di regressione uno alla volta.

Figura 10-2 Finestra di dialogo Regression Options





## Suggerimenti per la calibrazione

- Per gli analiti senza standard interno associato, l'asse y indica il valore **Area** o **Height** del picco secondo quanto selezionato nel metodo di quantificazione. Per gli analiti con uno standard interno, l'asse y indica il rapporto **Area** o **Height** del picco (dell'analita rispetto allo standard interno).
- Per gli analiti senza standard interno associato, l'asse x indica il valore **Actual Concentration**. Diversamente, indica il rapporto **Actual Concentration** (dell'analita rispetto allo standard interno).
- Se sono stati selezionati più analiti dal **Components & Groups List**, le calibrazioni di tutti gli analiti saranno sovrapposte. In caso contrario, apparirà la calibrazione dell'analita selezionato.
- L'area del titolo mostra sempre il nome dell'analita attivo e l'equazione di regressione associata con il coefficiente di correlazione. Se non è possibile calcolare la regressione, ad esempio in assenza di campioni **Standard**, il titolo indicherà tale condizione. Se le calibrazioni per più analiti si sovrappongono, alternare la visualizzazione del titolo affinché appaiano informazioni su tutti gli analiti o solo su quello attivo facendo doppio clic in un punto qualunque all'interno dell'area del titolo. In presenza di numerosi analiti sovrapposti, potrebbe non essere possibile visualizzare tutte le informazioni. In questo caso, scorrere il titolo trascinando all'interno di esso.
- I punti di dati per i campioni **Standard** utilizzati vengono sempre tracciati in base all'equazione di calibrazione che utilizza tali punti. L'utente può scegliere se visualizzare i punti di dati per i campioni **Standard** esclusi e per i campioni **Quality Control**.
- Se l'utente fa clic su un punto dati, la riga corrispondente nella **Results Table** viene automaticamente selezionata e visualizzata, a condizione che la riga sia attualmente visibile in un punto della tabella e non sia nascosta.

## Menu tasto destro di Calibration

Fare clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Calibration** per accedere a un menu contestuale. Sono disponibili i seguenti comandi.

**Tabella 10-1 Opzioni del menu tasto destro del riquadro Calibration**

Opzione di menu	Descrizione
Exclude (o Include)	Se l'utente fa clic con il tasto destro del mouse direttamente su un punto dati per uno standard che non è stato escluso, questa opzione verrà usata per escludere il campione dal calcolo di regressione (per il campione e l'analita corrispondenti al punto dati selezionato). Se il campione è già stato escluso, apparirà la voce di menu <b>Include</b> che consente di includere tale punto. Dopo la selezione, la regressione viene calcolata e la <b>Results Table</b> viene aggiornata. Questa funzione equivale a deselectare o selezionare la casella di controllo <b>Used</b> nella Results Table per la riga corrispondente.
Exclude – All Analytes (o Include – All Analytes)	Esclude o include tutti gli analiti, non solo l'analita corrispondente a un punto dati selezionato.

**Tabella 10-1 Opzioni del menu tasto destro del riquadro Calibration (continua)**

Opzione di menu	Descrizione
Show Excluded Standards	Se selezionata, i punti dati degli standard esclusi (se presenti) vengono tracciati usando cerchi vuoti. Se deselezionata, gli standard esclusi non vengono visualizzati.
Show QCs	Se selezionata, i punti dati per i campioni <b>Quality Control</b> (QC) vengono tracciati con rombi aperti. Se deselezionata, i campioni <b>QC</b> non vengono visualizzati.
Show Legend	<p>Se selezionata, viene creata una legenda a destra del tracciato contenente i simboli dei punti per i vari tipi di campioni (cerchi pieni per i campioni <b>Standard</b>, cerchi vuoti per gli Standard esclusi e rombi per i campioni <b>Quality Control</b>).</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> Se l'utente non visualizza determinati tipi di campione, ad esempio se non è selezionata l'opzione <b>Show QCs</b>, significa che per questi tipi di campione non è presente l'inserimento. Se non appaiono né i campioni <b>QC</b> né gli standard esclusi, significa che questa opzione non è disponibile e non viene tracciata alcuna legenda.</p> <hr/>
Use Percent Y - Axis	<p>Se non è selezionata, l'asse y del tracciato contiene unità di <b>Area</b> o <b>Height</b> di picco assoluta (o il rapporto <b>Area</b> o <b>Height</b> del picco se viene usato uno standard interno). Se selezionata, l'asse y viene espresso come percentuale del punto dati con il valore y massimo per ogni analita in modo indipendente.</p> <p>L'uso di un asse percentuale è utile se vi sono più analiti sovrapposti e le rispettive risposte assolute sono abbastanza diverse in quanto consente di scalare ogni traccia per usare l'intera area verticale disponibile. Diversamente, gli analiti con risposta bassa rimangono vicini all'asse x e il tracciato deve essere ingrandito per vederli in modo dettagliato.</p>
Log-Log Plot	Consente di passare da <b>Area</b> a <b>Concentration</b> e da <b>Log(Area)</b> a <b>Log(Concentration)</b> .

Usare le **Statistics Table** per visualizzare le informazioni relative alla riproducibilità di un'analisi. Ogni riga della tabella riassume informazioni, quali la deviazione media e la deviazione standard di un gruppo di picchi collegati dello stesso analita, che dovrebbero idealmente avere la stessa risposta.

**Figura 11-1 Riquadro Statistics**

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	mecarbol	2.00	2 of 2	5.402e0	3.884e-2	0.72	270.59	5.429e0	5.374e0
2	mecarbol	4.00	2 of 2	6.791e0	4.995e-1	7.35	169.76	7.144e0	6.437e0
3	mecarbol	8.00	2 of 2	1.026e1	3.500e-1	3.41	128.21	1.001e1	1.050e1
4	mecarbol	16.00	2 of 2	1.797e1	3.199e-1	1.79	111.94	1.875e1	1.768e1
5	mecarbol	32.00	1 of 2	3.366e0	N/A	N/A	10.49	N/A	3.396e0
6	mecarbol	64.00	2 of 2	6.580e1	4.679e0	7.11	102.82	6.911e1	6.250e1
7	mecarbol	128.00	2 of 2	1.302e2	1.583e1	12.16	101.69	1.414e2	1.190e2
8	tolbutamide	2.00	2 of 2	3.034e0	9.352e-2	3.08	151.69	3.100e0	2.960e0
9	tolbutamide	4.00	2 of 2	4.616e0	2.274e-1	4.93	115.39	4.776e0	4.405e0
10	tolbutamide	8.00	2 of 2	7.819e0	4.579e-1	5.86	97.74	7.496e0	8.143e0
11	tolbutamide	16.00	2 of 2	1.570e1	2.324e-1	1.48	98.10	1.553e1	1.586e1
12	tolbutamide	32.00	2 of 2	2.865e1	1.188e0	3.98	90.30	2.902e1	3.070e1
13	tolbutamide	64.00	2 of 2	4.485e1	3.313e0	5.11	101.33	4.251e1	4.719e1
14	tolbutamide	128.00	2 of 2	1.281e2	2.000e1	15.61	100.10	1.423e2	1.140e2
15	reserpine	2.00	2 of 2	2.683e0	1.912e-1	7.16	133.44	2.804e0	2.534e0
16	reserpine	4.00	2 of 2	4.352e0	1.633e-1	3.75	108.80	4.237e0	4.467e0
17	reserpine	8.00	2 of 2	7.491e0	6.761e-1	9.03	93.64	7.013e0	7.970e0
18	reserpine	16.00	2 of 2	1.535e1	1.693e-1	1.10	96.03	1.525e1	1.548e1

Etichetta	Descrizione
Row	Il numero di riga. Fare clic su una delle altre intestazioni di colonna per ordinare la tabella. Riportare la tabella alla visualizzazione originale facendo clic su questa intestazione.
Component Name	Il nome dell'analita.
Actual Concentration (or Sample Name)	Se si raggruppa in base alla concentrazione effettiva, questa colonna mostrerà la concentrazione. Se si raggruppa per nome campione, il titolo della colonna cambia e viene visualizzato il nome del campione.
Num. Values	Mostra il valore "m di n" in cui n rappresenta il numero totale di campioni alla concentrazione effettiva (o con lo stesso nome), mentre m rappresenta il numero dei campioni utilizzati per i calcoli. I campioni non vengono utilizzati se non è stato possibile integrarne il picco oppure se il campo <b>Used</b> è stato cancellato manualmente.
Mean	La media dei campioni utilizzati.
Standard Deviation	La deviazione standard dei campioni utilizzati.
Percent CV	Il coefficiente di variazione espresso come valore percentuale: $100 \times (\text{deviazione standard}) / \text{media}$ .

Etichetta	Descrizione
Accuracy	Il valore medio diviso per la concentrazione effettiva espressa in percentuale: $100 * \text{Medio} / (\text{Concentrazione effettiva})$ . Questo campo viene visualizzato solo in caso di raggruppamento in base alla concentrazione effettiva, non in caso di raggruppamento in base al nome del campione.
Values	I singoli valori dei campioni vengono visualizzati in colonne supplementari. Se non è stato possibile integrare il campione corrispondente, il valore sarà N/A. Se il campo <b>Used</b> è stato eliminato manualmente, il valore appare con una linea barrata.

## Suggerimenti per la tabella delle statistiche

- La **Statistics Table** collega l'elenco **Components & Groups List** per mostrare le righe corrispondenti agli analiti selezionati. Se vengono selezionate le voci **All Components** o **All Analytes**, vi saranno inserimenti per tutti gli analiti. Se si seleziona un analita singolo, saranno presenti inserimenti solo per quell'analita. Se si seleziona un singolo standard interno dall'elenco, la **Statistics Table** sarà vuota. Fare riferimento a [Elenco componenti e gruppi a pagina 37](#).
- Se l'utente fa clic su una delle celle **Value**, la riga corrispondente nella **Results Table** per l'analita e il campione viene selezionata a condizione che sia attualmente visibile nella **Statistics Table**. Vengono mostrati solo campioni **Unknown** nella **Results Table**. Se la **Statistics Table** contiene informazioni sui campioni **Standard**, le righe corrispondenti non sono visibili nella **Results Table**. Se il riquadro **Peak Review** è visibile, viene collegato alla **Results Table** e aggiornato quando si fa clic sulla cella.
- Fare clic su una delle intestazioni di colonna per ordinare la **Statistics Table**.
- L'utente può copiare l'intera **Statistics Table** o solo le righe desiderate.
  - Per copiare la tabella intera, fare clic su **Edit > Copy**.
  - Per copiare solo le righe che interessano, selezionare manualmente le righe, quindi fare clic su **Edit > Copy**.
- Se si regola la larghezza delle colonne, tali larghezze verranno ripristinate alla successiva visualizzazione della **Statistics Table**.
- Il formato e la precisione sono uguali a quelli della **Results Table**.
- **Group by Concentration for Standards and QCs** si basa su **Displayed Actual Concentration**, non sulla **Actual Concentration** memorizzata nella **Results Table**. Se la concentrazione Std 1 è 0,001 e la concentrazione Std 2 è 0,005, e il formato di visualizzazione è 0, Std 1 e Std 2 saranno raggruppati assieme perché entrambi sono trattati come 0. Per raggrupparli separatamente, nella finestra di dialogo **Column Settings**, impostare la precisione di **Analyte Concentration** a 0,000. Se Std 1 è 0,500 e Std 2 è 0,499, per raggrupparli impostare la precisione a 0,00.

## Menu tasto destro di Statistics Table

Fare clic con il tasto destro del mouse nella **Statistics Table** per accedere al comando **Use Peak**. Usare questo comando per impostare il campo **Used** per il campione e l'analita corrispondenti alla cella selezionata in una delle colonne **Value**. Prima di fare clic con il tasto destro per visualizzare il menu, fare clic sulla cella appropriata in una delle colonne **Value** per selezionarla.

Usare Metric Plots per tracciare i valori in una colonna della Results Table rispetto al numero di riga o a un'altra colonna. Questi grafici rappresentano un valido aiuto per la revisione visiva dei dati, specialmente se non è necessario rivedere manualmente ogni cromatogramma usando il riquadro Peak Review.

## Creazione di un Metric Plot

1. Selezionare una o due colonne nella **Results Table**.
2. Fare clic su **Show Metric Plot**.

Se si seleziona una colonna, il tracciato risultante mostra i valori della colonna in funzione del numero di riga nella tabella. Se si selezionano due colonne, i valori delle colonne sono tracciati gli uni rispetto agli altri. La prima delle due colonne da selezionare contiene i valori x e la seconda i valori y.

## Salvataggio delle impostazioni di un metric plot

1. Aprire un metric plot selezionando una colonna e fare clic su **Show Metric Plot**.
2. Fare clic con il tasto destro del mouse sul plot, quindi fare clic su **Save Setting**.

Ciò consente all'utente di generare rapidamente i **Metric Plot** che vengono usati frequentemente senza dover selezionare ogni volta la colonna corrispondente.

## Suggerimenti per Metric Plot

- Se l'utente fa clic con il pulsante sinistro su un punto dati, la riga corrispondente nella Results Table viene selezionata automaticamente e fatta scorrere nella visualizzazione. Se il riquadro Peak Review è aperto, si aggiorna per mostrare il cromatogramma corrispondente. Ciò fornisce un comodo strumento per eseguire la revisione dei picchi per valori anomali.
- Se nell'elenco Components & Groups sono stati selezionati più componenti, le tracce di tutti i componenti saranno sovrapposte. Altrimenti, verrà mostrata la traccia del componente selezionato.
- L'area del titolo mostra sempre il nome della traccia attiva. Se le tracce di più componenti sono sovrapposte, facendo doppio clic in qualsiasi punto all'interno dell'area del titolo è possibile alternare la visualizzazione delle informazioni di tutte le tracce oppure solo di quelle attive. È possibile attivare una traccia particolare facendo clic sul punto colorato a sinistra del titolo corrispondente.
- Salvare le impostazioni del Metric plot per utilizzarle nuovamente. Fare clic con il pulsante destro nel metric plot, quindi fare clic su **Save Settings As**.

## Menu tasto destro di Metric Plot

Fare clic con il tasto destro del mouse su Metric Plot per accedere a un menu contestuale. Sono disponibili i seguenti comandi.

**Tabella 12-1 Opzioni del menu pulsante destro del mouse di Metric Plot**

Opzione di menu	Descrizione
Regression	Mostra una linea di regressione nel metric plot. <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Regression Type</b></li><li>• <b>Weighting Type</b></li><li>• <b>Include standard deviation lines and Multiplier</b></li></ul> Fare riferimento a <a href="#">Finestra di dialogo Regression a pagina 80</a> .
Display "N/A" as 0.0	Quando si seleziona questa opzione, vengono tracciati i valori che non sono numerici usando un valore y pari a zero. In caso contrario questi punti vengono omessi dal tracciato. Ad esempio, il <b>Retention Time</b> viene definito come N/A per i picchi che non è stato possibile integrare. Per questa opzione, è presente un punto per ciascuno dei suddetti picchi in modo che l'utente possa vedere i campioni potenzialmente problematici e collegarli al riquadro <b>Peak Review</b> facendo clic sul punto.
Show Legend	Modifica la leggenda che annota i simboli punteggiati usati per i diversi tipi di campione.
Label Active Series (using sample names)	Modifica l'etichetta dei punti dati tramite il testo del campo <b>Sample Name</b> della <b>Results Table</b> . Se esistono più tracciati sovrapposti, verrà etichettato solo il tracciato attualmente attivo.
Use Percent Y - Axis	Stabilisce se l'asse y utilizza unità assolute o una percentuale del valore y massimo. Se si utilizza l'opzione percentuale, la percentuale verrà calcolata in modo indipendente per ogni tracciato sovrapposto. Questa opzione può essere utilizzata per tracciare tracciati sovrapposti per più componenti e la risposta per le metriche dei componenti è sensibilmente diversa.
Start Y-Axis at Zero	Stabilisce se l'asse y inizia da y=0 o dal valore y minimo da tracciare.
Connect Points With Lines	Stabilisce se i punti dei dati sono collegati mediante linee.
Save Setting	Se il tracciato è correntemente associato ad un'impostazione, questa funzione salva le opzioni correnti. In caso contrario questa opzione si comporta come <b>Save Setting As</b> .

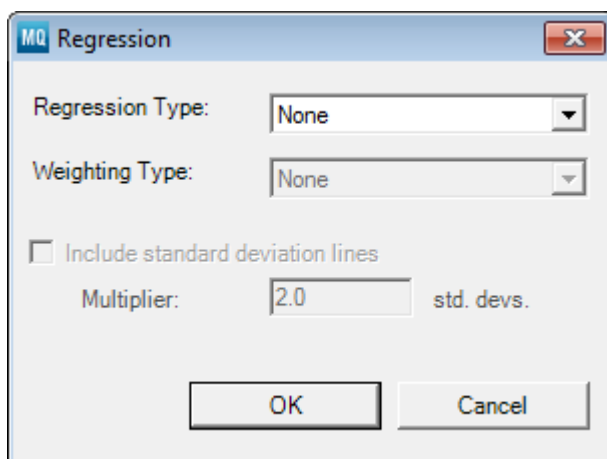
Tabella 12-1 Opzioni del menu pulsante destro del mouse di Metric Plot (continua)

Opzione di menu	Descrizione
Save Setting As	Se si tracciano con frequenza le stesse colonne, l'utente può salvare le opzioni di tracciatura come impostazione predefinita. Ciò consente all'utente di generare con rapidità un tracciato anche se le colonne richieste non sono attualmente visibili nella <b>Results Table</b> . Oltre alle colonne, vengono salvate le diverse opzioni di tracciatura. Una volta salvata un'impostazione, il nome verrà visualizzato nel menu <b>Metric Plot</b> .
Delete Setting	Se il tracciato corrente è associato ad un'impostazione, usare questa opzione per cancellare l'impostazione.

## Finestra di dialogo Regression

Fare clic per visualizzare una linea di regressione sul metric plot.

Figura 12-1 Finestra di dialogo Regression



Etichetta	Descrizione
Regression Type	Comprende i diversi tipi di regressione (lineare, quadratica, ecc.). Il tipo di regressione <b>Mean</b> genera una linea orizzontale nel punto del valore y medio per tutti i punti dati, mentre il tipo di regressione <b>Median</b> genera una linea orizzontale nel punto del valore y mediano per i punti. Inoltre, è disponibile l'opzione <b>None</b> che rimuove qualunque regressione precedente.
Weighting Type	I diversi tipi di pesatura sono descritti in <a href="#">Fattori di pesatura a pagina 126</a> .
Include standard deviation lines and Multiplier	Queste opzioni sono disponibili se si seleziona il tipo di regressione <b>Mean</b> o <b>Median</b> . Se selezionata, verranno aggiunte altre linee orizzontali tratteggiate per tracciare il numero specificato di deviazioni standard sopra e sotto la linea principale. Questa opzione consente di visualizzare i punti che rappresentano, ad esempio, più di due o tre deviazioni standard rispetto alla media.



Utilizzare il **Quantitation Method Editor** per creare un metodo di quantificazione o per modificarne uno esistente.

Il flusso di lavoro tipico prevede la creazione di metodi di quantificazione usando la **New Results Table wizard**. Tuttavia, l'utente può usare il **Quantitation Method Editor** per creare un metodo di quantificazione da utilizzare secondo necessità.

## Scheda Components

Fare clic con il tasto destro del mouse sulla scheda **Components** per accedere a un menu contestuale. Sono disponibili i seguenti comandi.

**Tabella 13-1 Componenti: opzioni menu Tasto destro**

Opzione di menu	Descrizione
Find Component by Name	Utilizzato per selezionare il componente il cui <b>Nome</b> corrisponde al testo. Non è richiesto il nome completo per trovare una corrispondenza. È utile per selezionare un componente specifico nel caso vi siano più componenti.  Se inizialmente nel foglio di calcolo non è stata selezionata nessuna riga, la ricerca inizia dalla prima riga. Altrimenti, inizia dalla riga successiva alla riga selezionata e ritorna all'inizio. È utile nel caso in cui ci siano più componenti il cui <b>Nome</b> contiene il testo. Se la prima ricerca non trova il componente, cercare nuovamente, lasciando il primo componente selezionato, per individuare un'altra corrispondenza nella tabella.
Insert Row Above	Inserisce una sola riga vuota immediatamente sopra la riga attualmente selezionata.
Delete Selected Rows	Rimuove dalla tabella le righe attualmente selezionate.
Sum Multiple Ions	Somma i cromatogrammi per più transizioni MRM o intervalli di massa a scansione completa. Dopo aver selezionato il comando, le colonne aggiuntive della massa vengono aggiunte alla tabella <b>Components</b> . Qualunque massa selezionata per una determinata riga viene usata nella costruzione del cromatogramma ioni estratti (XIC) sommato per l'analita o lo standard interno corrispondente. Si consiglia di lasciare sempre selezionata questa funzione.
Groups	Fare riferimento a <a href="#">Sottomenu Groups a pagina 82</a> .
Internal Standards	Fare riferimento a <a href="#">Sottomenu Internal Standards a pagina 84</a> .

## Sottomenu Groups

**Tabella 13-2 Opzioni del menu Groups**

Opzione di menu	Descrizione
Using Constant Group Size	Apri la finestra di dialogo Set Automatic Groups, che viene utilizzata per riempire automaticamente la colonna Group con il nome del primo componente di ciascun gruppo, presumendo che ciascun gruppo contenga lo stesso numero di componenti. Fare riferimento a <a href="#">Finestra di dialogo Set Automatic Groups a pagina 83</a> .
By Filling Down Existing Groups	Completa automaticamente lo stesso nome di gruppo per un numero di componenti sequenziali.  Per usare il comando, specificare manualmente il nome del gruppo del primo componente per ogni gruppo separato, quindi selezionare il comando. I nomi dei gruppi specificati sono ricopiati verso qualsiasi componente seguente per il quale il nome del gruppo è vuoto. Vengono considerate solo le righe per le quali il Nome è stato compilato.
Using Q1 Masses	Disponibile solo negli esperimenti di MRM. Utilizzato per riempire la colonna Group con la massa Q1. È utile se la stessa massa Q1 è stata specificata per più transizioni per lo stesso composto e sono stati monitorati diversi frammenti. Se i componenti sono molti e se alcuni condividono per caso la stessa massa Q1, questi saranno assegnati allo stesso gruppo.
Using Q3 Masses	Disponibile solo negli esperimenti di MRM. Utilizzato per riempire la colonna Group con la massa Q3. È utile se sono state monitorate diverse forme isotopiche di un composto (con diverse masse Q1), ma è stata monitorata una massa Q3 costante. Se i componenti sono molti e se alcuni condividono per caso la stessa massa Q3, questi saranno assegnati allo stesso gruppo.
Using (Q1 – Q3) Mass Differences	Utilizzato per completare la colonna Group con la differenza tra le masse Q1 e Q3 (disponibile solo per gli esperimenti MRM). È utile se sono state monitorate diverse forme isotopiche di un composto (con diverse masse Q1), ma è stato monitorato un frammento Q3 costante contenente tutti gli isotopi modificati. Se i componenti sono molti e se alcuni condividono la stessa differenza di massa, questi saranno assegnati allo stesso gruppo.
Add Group to Start of Component Name	Aggiunge il nome del gruppo all'inizio del nome dell'analita o dello standard interno. Può essere utile se i nomi iniziali non sono univoci.

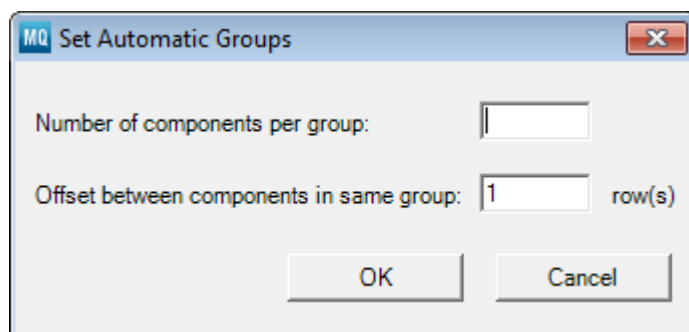
Tabella 13-2 Opzioni del menu Groups (continua)

Opzione di menu	Descrizione
Remove Group from Start of Component Name	Rimuove il nome del gruppo, se presente, dall'inizio del nome dell'analita o dello standard interno.
Append Summed Ions for Groups	Quando è abilitata l'opzione Sum Multiple Ions, questo comando aggiunge un nuovo componente per ogni gruppo che utilizza il cromatogramma sommato per il gruppo. Per gli analiti vengono aggiunti componenti separati e standard interni per i gruppi, se sono definiti entrambi. Per impostazione predefinita, il nome dei nuovi analiti corrisponde al nome del gruppo, mentre per gli standard interni al nome del gruppo con l'aggiunta di .IS. Se sono necessari i componenti sommati e non i componenti originali a massa singola, i secondi possono essere eliminati.

### Finestra di dialogo Set Automatic Groups

Popola automaticamente la colonna Group usando il nome del primo componente per ogni gruppo, presumendo che ciascun gruppo contenga lo stesso numero di componenti.

Figura 13-1 Finestra di dialogo Set Automatic Groups



Etichetta	Descrizione
Number of components per group	Numero totale di componenti per ogni gruppo.
Offset between components in same group	Scarto di righe tra componenti sequenziali nello stesso gruppo. Solitamente questo valore è 1, ma può essere maggiore se i componenti del gruppo non si trovano in righe adiacenti.

## Sottomenu Internal Standards

Tabella 13-3 Opzioni del menu Internal Standards

Opzione di menu	Descrizione
Set IS for All Analytes	Imposta il campo del IS Name per tutte le righe degli analiti. Se è stato definito uno standard interno, verrà utilizzato il suo nome. Diversamente, selezionare lo standard interno richiesto dalla finestra di dialogo mostrata.
Set IS for Selected Analytes	Se si utilizza lo stesso standard interno per più di un analita, inserire un collegamento rapido per impostare lo standard interno separatamente per ciascun singolo analita. Fare riferimento a <a href="#">Imposta IS per gli analiti selezionati a pagina 84</a> .
Set Last Component of Group as IS	Utilizzare questo comando se i vari componenti sono stati assegnati ai Groups, manualmente o tramite le voci del sottomenu Set Groups. Viene selezionata la casella di controllo IS per l'ultimo componente di ogni gruppo e tutti gli altri componenti del gruppo, presumibilmente analiti, vengono impostati in modo da usare quell'ultimo componente come standard interno.
Set for All Groups as for Selected Group	Utilizzato per copiare la disposizione degli standard interni per il gruppo corrispondente alla riga attualmente selezionata in tutti gli altri gruppi in modo simmetrico. È utile nel caso in cui ci sia più di uno standard interno per ciascun gruppo. Fare riferimento a <a href="#">Imposta per tutti i gruppi come per il gruppo selezionato a pagina 84</a> .

### Imposta IS per gli analiti selezionati

1. Verificare che lo standard interno richiesto sia definito (entrambe le caselle **Name** e **IS** selezionate).
2. Selezionare le righe di analiti per le quali usare lo standard interno.
3. Selezionare la voce di menu.

Se sono stati definiti più standard interni, apparirà una finestra di dialogo che chiede all'utente di selezionare quello richiesto.

### Imposta per tutti i gruppi come per il gruppo selezionato

1. Assegnare i gruppi.
2. Indicare manualmente quali componenti sono standard interni selezionando la casella nella prima colonna del primo gruppo.
3. Indicare manualmente lo standard interno per ciascun analita del primo gruppo selezionandolo dalla casella combo nella colonna **IS Name**.
4. Selezionare qualsiasi riga singola corrispondente al primo gruppo.
5. Fare clic su **Set for All Groups as for Selected Group**.

## Scheda Integration

Fare clic con il tasto destro del mouse sulla scheda **Integration** per accedere a un menu contestuale. Sono disponibili i seguenti comandi.

**Tabella 13-4 Scheda Integration & Regression: opzioni menu tasto destro**

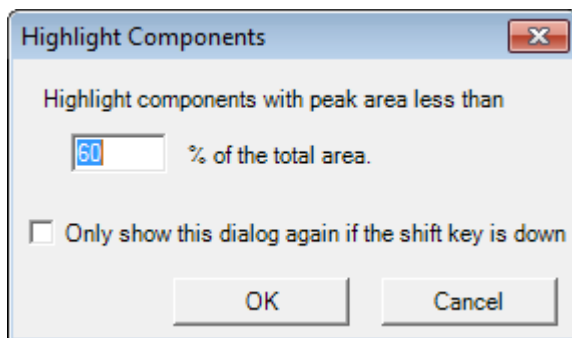
Opzione di menu	Descrizione
Find Component by Name	Simile al comando disponibile nella scheda <b>Components</b> , con la differenza che invece di selezionare righe del foglio di calcolo <b>Components</b> , si selezionano singole voci nell'elenco dei componenti.
Highlight Components with Uncertain RT	Utilizzato per evidenziare quei componenti per i quali il tempo di ritenzione predefinito previsto (preso come RT del picco con la più grande intensità per ciascun cromatogramma) non è corretto. Se vi sono solo pochi componenti, rivederli singolarmente e non usare questo comando. Tuttavia, se vi sono molti componenti, utilizzare questo comando per verificare visivamente solo quelli per i quali è presente più di un picco significativo nel cromatogramma. Fare riferimento a <a href="#">Finestra di dialogo Highlight Components a pagina 86</a> .
Home Graph Axis	Riporta il grafico ingrandito alla visualizzazione originale in cui tutti i dati sono visibili.
Overlay Other Components for Group	<p>Usare questo comando per sovrapporre i cromatogrammi se ai gruppi sono stati assegnati diversi componenti e se si prevede che i componenti assegnati a un determinato abbiano lo stesso tempo di ritenzione. Per esempio, se rappresentano diverse transizioni MRM dello stesso composto effettivo.</p> <p>Se selezionato, il cromatogramma del componente corrente, i cui parametri di integrazione sono in corso di definizione, è disegnato con una traccia blu e viene mostrata la sua area di picco integrato. I cromatogrammi, e non l'area di picco integrato, per gli altri componenti dello stesso gruppo sono sovrapposti mediante una linea tratteggiata.</p>
Update Retention Times	<p>Utilizzato per ripristinare i tempi di ritenzione previsti per un metodo di quantificazione creato in precedenza. Se si apre un metodo di quantificazione esistente e si seleziona <b>Set New Typical Sample</b>, i cromatogrammi mostrati corrispondono al nuovo campione, ma i tempi di ritenzione previsti rimangono invariati.</p> <p>Per ciascun componente, il tempo di ritenzione previsto viene aggiornato per corrispondere al tempo di ritenzione del picco con la maggiore intensità all'interno di una finestra della larghezza specificata centrata al tempo di ritenzione previsto originale. Fare riferimento a <a href="#">Finestra di dialogo Update Retention Time a pagina 86</a>.</p>
Set New Typical Sample	Utilizzato per associare un campione rappresentativo al metodo. Ciò potenzialmente influenza le selezioni disponibili nella colonna <b>Q1/Q3</b> (per esperimenti MRM) o nella colonna <b>Start - Stop</b> (per esperimenti di profilo). Influisce anche sui cromatogrammi mostrati nella scheda <b>Integration</b> .

## Finestra di dialogo Highlight Components

I nomi dei componenti per i quali il picco selezionato automaticamente non tiene conto di almeno la percentuale specificata dell'area di picco totale nel cromatogramma sono indicati in grassetto. Ad esempio, nella [Figura 13-2](#), se il picco predefinito selezionato corrisponde dal 70% al 100% dell'area totale, non verrà segnalato. Rivedere solo questi picchi selezionandoli dall'elenco dei componenti.

Se è selezionata la casella **Only show this dialog again if the shift key is down**, la finestra di dialogo non apparirà la prossima volta che il comando viene selezionato, a meno che l'utente non prema **Shift**. Verrà usato automaticamente il parametro di percentuale dell'area totale specificato.

**Figura 13-2 Finestra di dialogo Highlight Components**



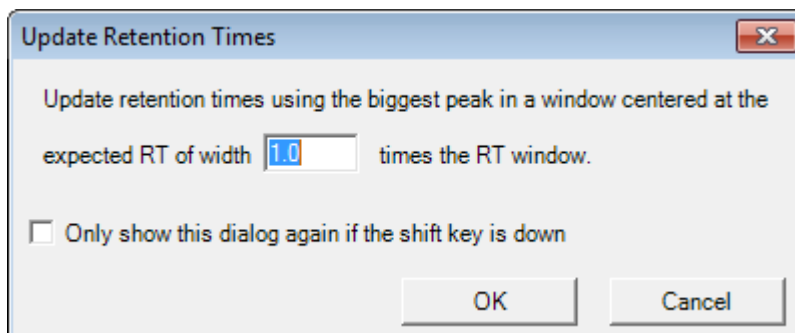
## Finestra di dialogo Update Retention Time

Utilizzato per ripristinare i tempi di ritenzione previsti per un metodo di quantificazione creato in precedenza. Se si apre un metodo di quantificazione esistente e si seleziona Set New Typical Sample, i cromatogrammi mostrati corrispondono al nuovo campione, ma i tempi di ritenzione previsti rimangono invariati.

Per ciascun componente, il tempo di ritenzione previsto viene aggiornato per corrispondere al tempo di ritenzione del picco con la maggiore intensità all'interno di una finestra della larghezza specificata centrata al tempo di ritenzione previsto originale.

Se è selezionata la casella **Only show this dialog again if the shift key is down**, la finestra di dialogo non apparirà la prossima volta che il comando viene selezionato, a meno che l'utente non prema **Shift**. Verrà usato automaticamente il tempo di ritenzione specificato in precedenza.

**Figura 13-3 Finestra di dialogo Highlight Components**



## Scheda Outlier Settings

Fare clic con il tasto destro del mouse sulla scheda **Outlier Settings** per accedere a un menu contestuale. Sono disponibili i seguenti comandi.

Etichetta	Descrizione
Accuracy for Standards	Modifica la tolleranza di precisione dei campioni <b>Standard</b> .
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Modifica la tolleranza di precisione per i campioni <b>Standard</b> con un valore coerente con le procedure operative standard di laboratorio.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Modifica la tolleranza di precisione per lo <b>Standard</b> di concentrazione più basso, se la procedura operativa standard di laboratorio indica una tolleranza diversa per questo <b>Standard</b> .
Accuracy for QCs	Modifica la tolleranza di precisione dei campioni di <b>Quality Control</b> .
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Modifica la tolleranza di precisione per i campioni di <b>Quality Control</b> con un valore coerente con le procedure operative standard di laboratorio.
Ion Ratio	Disponibile solo se i componenti sono assegnati ai gruppi. Selezionare per utilizzare il rapporto ioni dell'area del picco o dell'altezza del picco. L'area del picco o l'altezza del picco è impostata quando si seleziona il parametro di regressione durante lo sviluppo del metodo di quantificazione.
Calculated Concentration	Quando si utilizzano campioni <b>Standard</b> con concentrazione nota, indica la concentrazione retrocalcolata dalla curva di calibrazione. Le equazioni di regressione descrivono in che modo la regressione viene eseguita per i vari tipi di regressione e pesatura.
Component	Gli analiti o standard interni per tutti i campioni.
IS	Lo standard interno selezionato. Disponibile solo se è selezionata la casella <b>Ion Ratio</b> .
Group	I componenti che hanno lo stesso tempo di ritenzione (cioè, transizioni diverse per lo stesso composto) possono essere raggruppati. Disponibile solo se è selezionata la casella <b>Ion Ratio</b> .
Ion Ratio Tolerance (%)	Utilizzare l'impostazione predefinita o modificare secondo le procedure operative standard del laboratorio. Disponibile solo se è selezionata la casella <b>Ion Ratio</b> .
Lower Limit of Calculated Concentration	Immettere il limite inferiore della gamma di concentrazioni accettabile. Qualsiasi campione con <b>Calculated Concentration</b> inferiore a questo valore sarà contrassegnato come valore con concentrazione anomala.
Upper Limit of Calculated Concentration	Immettere il limite superiore dell'intervallo di concentrazioni accettabile. Qualsiasi campione con <b>Calculated Concentration</b> superiore a questo valore sarà contrassegnato come valore con concentrazione anomala.

**Tabella 13-5 Outlier Settings: opzioni menu Tasto destro**

<b>Etichetta</b>	<b>Descrizione</b>
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Applica il limite inferiore della concentrazione calcolata a tutti gli analiti, se tutti gli analiti hanno gli stessi criteri.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Applica il limite superiore della concentrazione calcolata a tutti gli analiti, se tutti gli analiti hanno gli stessi criteri.



# Esercitazione sul flusso di lavoro dell'analisi di quantificazione

# 14

Obiettivi:

- Apprendere come elaborare i dati usando l'algoritmo SignalFinder™.
- Apprendere come elaborare i dati usando l'algoritmo di integrazione MQ4.
- Apprendere come usare i parametri dell'algoritmo di integrazione MQ4 e SignalFinder™.

I metodi di quantificazione includono una serie di istruzioni per quantificare i picchi selezionati per l'integrazione. In questa esercitazione verrà creato un metodo di quantificazione contemporaneamente alla Results Table.

Sono inoltre incluse attività aggiuntive che possono essere usate per manipolare i dati nella **Results Table**, nonché informazioni sulle icone del software disponibili.

---

**Nota:** Gli utenti Audit Trail e Security edition sono limitati all'uso della struttura della cartella Analyst Data. Gli utenti possono solo elaborare i file di dati contenuti nella struttura di file del software Analyst® MD. Se le strutture di file e cartella non vengono mantenute, l'utente potrebbe non essere in grado di visualizzare i cromatogrammi.

---

## Informazioni sulle curve di calibrazione

Una curva di calibrazione (nota anche come curva di concentrazione standard) è un metodo per determinare la concentrazione di una sostanza in un campione **Unknown** confrontando il campione **Unknown** con un gruppo di campioni **Standard** aventi una concentrazione nota. La curva di calibrazione è il diagramma della risposta (il segnale analitico) dello strumento alle modifiche alla concentrazione dell'analita (la sostanza da misurare). L'utente prepara una serie di campioni **Standard** in un intervallo di concentrazioni vicine alla concentrazione prevista dell'analita nel campione **Unknown**.

## Prerequisiti

Nel software Analyst® MD, selezionare il progetto **Example**.

Il file Mix\_batch\_1. Wiff può essere contenuto nella cartella Analyst Data\Projects\Example\Data\Triple Quad.

## Modifica delle colonne mostrate nella Results Table

Utilizzare questa procedura per mostrare o nascondere le colonne nella **Results Table** o per modificare la precisione del formato del numero. Per i campi numerici, usare il formato 0.00 per le notazioni non scientifiche e il formato 0.00e0 per le notazioni scientifiche. Modificare i punti decimali per indicare la precisione dei

## Esercitazione sul flusso di lavoro dell'analisi di quantificazione

---

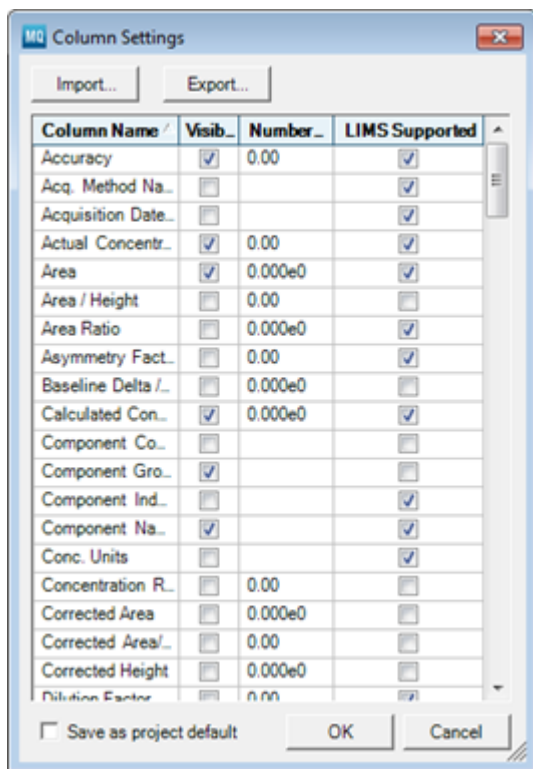
numeri mostrati. Come separatore decimale è possibile utilizzare solo il punto (.) . Il raggruppamento cifre non è supportato.

**Nota:** Alcune colonne critiche delle informazioni sui campioni come **Sample Name**, **Sample ID**, e così via, non devono essere nascoste quando gli utenti personalizzano le impostazioni delle colonne **Results Table**.

---

1. Fare clic con il tasto destro del mouse nella **Results Table**, quindi fare clic su **Column Settings**.

**Figura 14-1** Finestra di dialogo Column Settings



2. Selezionare o deselezionare la casella di controllo nella colonna **Visible**, come richiesto.
3. Nella colonna **Number Format**, modificare il formato in numero intero o notazione scientifica. È inoltre possibile modificare il numero di punti decimali da mostrare.

**Suggerimento!** Per applicare le impostazioni delle colonne a tutte le **Results Table** del progetto, selezionare la casella di controllo **Save as project default**.

---

4. Fare clic su **OK**.

## Elaborazione dei dati utilizzando l'algoritmo di integrazione SignalFinder™

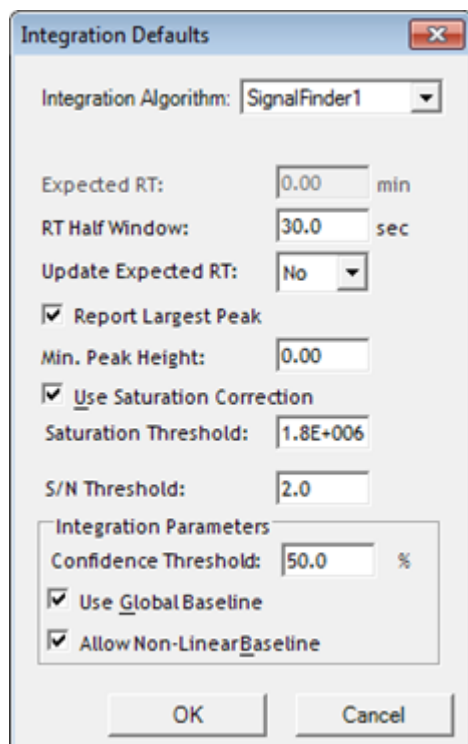
A differenza dell'algoritmo di integrazione MQ4 o degli algoritmi disponibili nel software Analyst® MD, il SignalFinder™ crea un modello del picco usando il campione selezionato durante la creazione di un metodo di quantificazione. Questo modello descrive la forma del picco selezionato utilizzato dall'algoritmo. Al momento dell'integrazione, l'algoritmo di integrazione SignalFinder applica questo modello agli altri campioni, allungando o inclinando il campione. Ciò fa sì che la forma del picco sia simile, ma non identica, per un determinato analita o standard interno per più campioni.

### Impostazione dei parametri di integrazione picchi

Utilizzare la seguente procedura per verificare o impostare l'algoritmo di integrazione per l'elaborazione dei dati. Fare riferimento a [Descrizione dell'algoritmo di integrazione SignalFinder a pagina 107](#).

1. Nel software Analyst® MD, nella barra di **navigazione** sotto **Companion Software**, fare doppio clic su **MultiQuant 3.0.3**.
2. Fare clic su **Edit > Project Integration Defaults**.
3. Nella finestra di dialogo **Integration Defaults**, selezionare **SignalFinder1** dall'elenco **Integration Algorithm**.
4. Selezionare la casella **Use Saturation Correction**, quindi impostare **Saturation Threshold** a **1.8E+006**.

Figura 14-2 Finestra di dialogo Integration Defaults



---

**Nota:** I picchi sopra la **Saturation Threshold** sono considerati saturi. Questo valore dipende dal rivelatore.

---

5. Fare clic su **OK**.

## Creazione di una Results Table

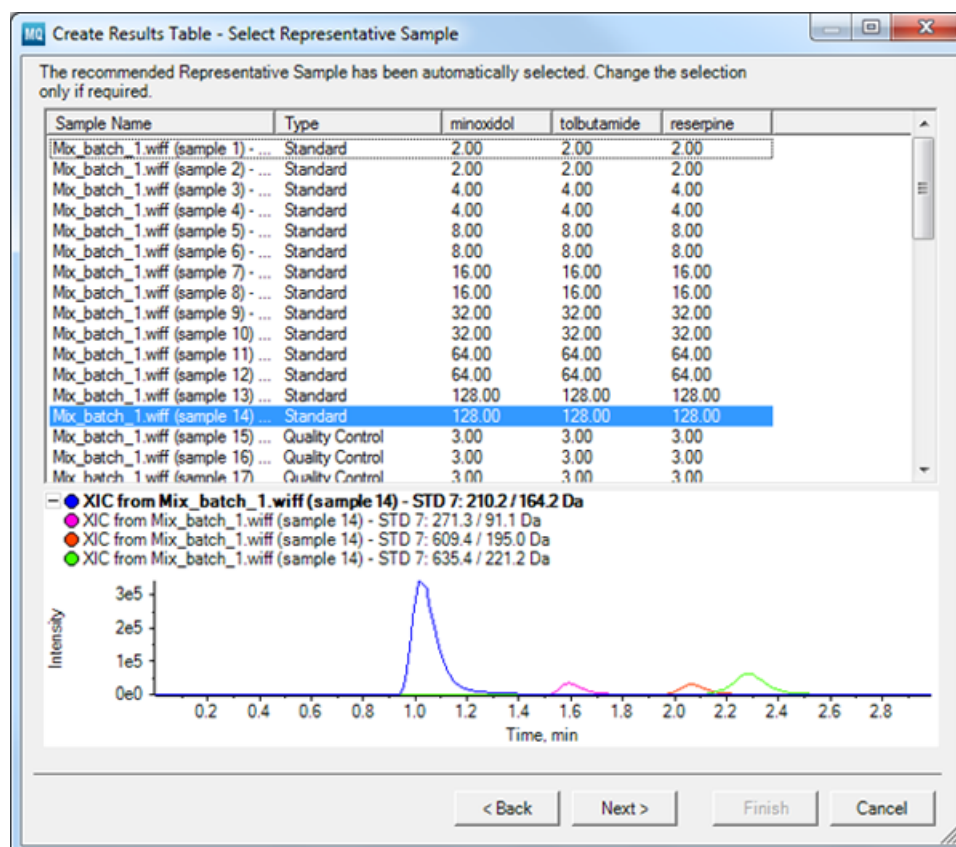
1. Fare clic su **File > New Results Table**.
2. Nella pagina **Create Results Table - Select Samples**, ingrandire la cartella **Example Data** e trascinare il file **Mix\_batch\_1.wiff** nel riquadro **Selected**.
3. Fare clic su **Next**.
4. Fare clic sull'opzione **Create New Method (SignalFinder1)**.
5. Fare clic su **New**.
6. Inserire un nome per il metodo nella finestra di dialogo **Save Quantitation Method As** e fare clic su **Save**.
7. Fare clic su **Next**.

Nella pagina **Create Results Table - Select Representative Sample** è stato selezionato un campione rappresentativo. Il software consiglia un campione rappresentativo basato sulla selezione di un

cromatogramma che fornisce la migliore opportunità di selezionare i parametri di integrazione adatti per l'intero lotto. Si consiglia di selezionare un campione standard o **QC** non saturo e ad alta concentrazione (TIC inferiore a 1E+006 cps).

**Suggerimento!** Durante la revisione del picco, è possibile selezionare un altro campione da cui creare un modello di picco.

**Figura 14-3** Pagina Create Results Table - Select Representative Sample



8. Nella pagina **Create Results Table - Define Components**, confermare gli analiti e gli standard interni.
9. Fare clic su **Next**.

Figura 14-4 Pagina Create Results Table - Define Components

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: MRM (4 transitions)

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

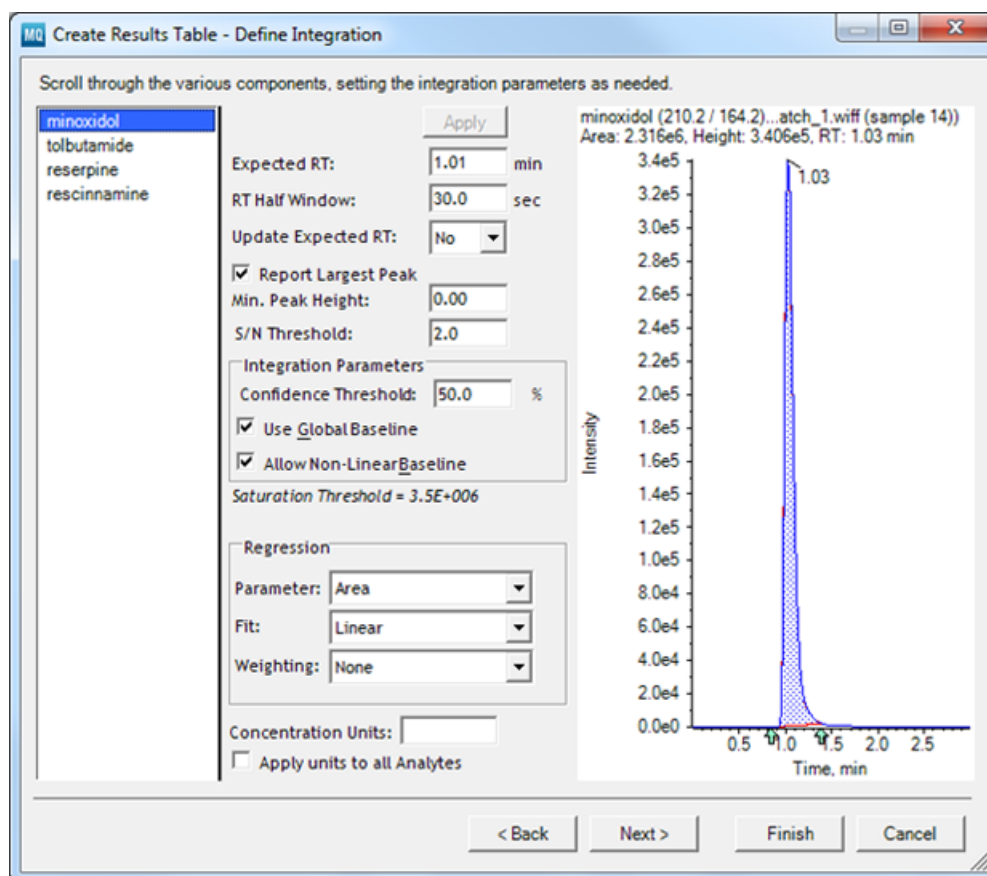
< Back    Next >    Finish    Cancel

**Nota:** Quando viene creato un metodo di acquisizione, se il nome del componente è incluso nella colonna **ID** nella tabella degli intervalli delle masse, allora tale nome verrà inserito automaticamente nella pagina **Define Components**. Se il nome del componente non è stato incluso, aggiornare manualmente la tabella con il nome del componente.

Nella pagina **Create Results Table - Define Integration**, gli analiti e gli standard interni appaiono sul lato sinistro. Gli attuali parametri di integrazione sono stati applicati al campione rappresentativo e il cromatogramma viene visualizzato.

I componenti del campione rappresentativo selezionato in precedenza sono visualizzati nel riquadro **Integration**. I picchi di questo campione rappresentativo vengono trovati e integrati utilizzando i parametri impostati nella finestra di dialogo **Integration Defaults**.

Figura 14-5 Pagina Create Results Table - Define Integration



Se necessario, regolare i parametri di rilevamento picco e le posizioni delle frecce verdi nell'asse x dei cromatogrammi. Ciò consente all'utente di impostare in modo più accurato la posizione iniziale e finale richiesta di integrazione dei picchi. Si tratta in realtà di un metodo visivo di regolazione di due parametri di rilevamento picchi che vengono salvati con il metodo di quantificazione e applicati a tutti i picchi da integrare. Il software vincola i limiti di questi parametri all'interno di valori ragionevoli in base all'ampiezza del picco.

Se il cromatogramma contiene più di un picco e il picco corretto non è stato selezionato automaticamente, trascinare su un picco per impostare il tempo di ritenzione previsto. Trascinare dall'estremità effettiva iniziale a quella finale del picco e non selezionare un'area troppo larga o troppo stretta. Questo perché l'algoritmo ipotizza la presenza di un solo picco all'interno della selezione. Ad esempio, se il gruppo di dati genera rumore e l'algoritmo trova due picchi uniti quando è presente un solo picco, selezionare un'area contenente entrambi i picchi affinché l'algoritmo regoli i propri parametri interni in modo da trovare un solo picco. In alternativa, se l'algoritmo ha trovato un picco quando invece si ritiene vi siano due o più picchi adiacenti, selezionare un'area che comprenda solo il picco di interesse.

10. Nel gruppo **Integration Parameters**, selezionare la casella **Global Baseline** per usare l'intero cromatogramma come linea di base.

Se non si seleziona questa opzione, il software considera solo un'area ristretta attorno al picco di interesse.

11. Selezionare la casella **Allow Non-Linear Baseline** per selezionare una linea di base lineare o non lineare. Una linea di base non lineare stima la linea di base sotto ciascun picco. Una linea di base lineare inserisce una linea tra i punti all'inizio e alla fine di quel gruppo specifico di picchi.
12. Rivedere l'integrazione dei picchi per ciascun componente facendo clic sul nome del componente nel riquadro a sinistra. Regolare i parametri di integrazione per far sì che il picco rappresentativo venga integrato correttamente.
13. Per i componenti **Minoxidol**, **Tolbutamide** e **Reserpina**, usare i parametri del gruppo **Regression** per impostare quanto segue, quindi fare clic su **Apply**:
  - **Parameter**: Area
  - **Fit**: Linear
  - **Weighting**: None
14. Impostare **Concentration Units** a **ng/mL**, quindi selezionare la casella **Apply units to all Analytes**.
15. Fare clic su **Apply**.
16. Fare clic su **Finish**.

I file campioni sono automaticamente integrati e viene generata una **Results Table**.

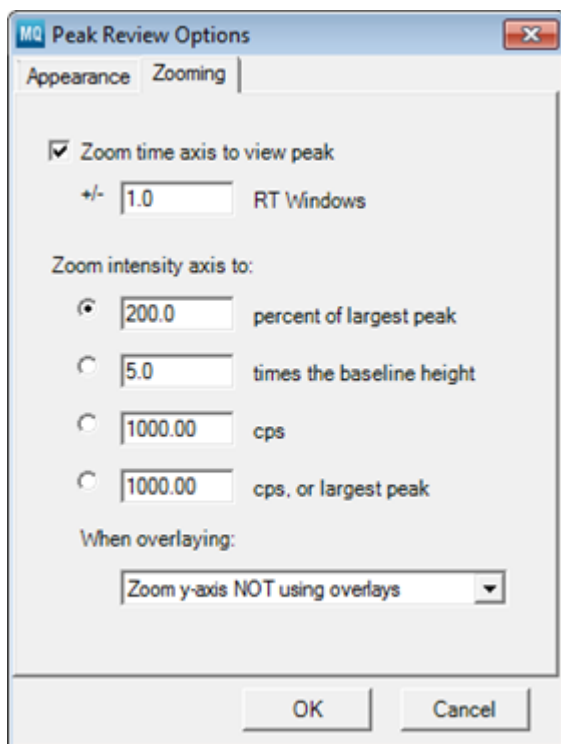
Fare riferimento a [Verifica dei picchi a pagina 96](#) per la gestione dei dati nella **Results Table**. Fare riferimento a [Report a pagina 131](#) per informazioni sulla creazione di rapporti.

## Verifica dei picchi

1. Fare clic sull'icona **Peak Review**.
2. Fare clic con il tasto destro del mouse nella tabella, quindi fare clic su **Column Settings**.
3. Rendere visibile la colonna **SF Saturated**.
4. Fare clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Peak Review**, quindi fare clic su **Options**.
5. Nella scheda **Zooming**, impostare **Zoom time axis to view peak** a **1**.
6. Impostare **Zoom intensity axis** a **200 percent of largest peak**.



Figura 14-6 Peak Review Options



7. Usare le frecce rosse per scorrere i picchi.

Se il rivelatore è saturo, il picco apparirà più piatto del normale. Per esempio, questo picco potrebbe avere un profilo rosso attorno al picco e **Yes** appare nella colonna **SF Saturated** poiché l'intensità del picco è superiore alla soglia di saturazione di  $1,8^6$  cps.

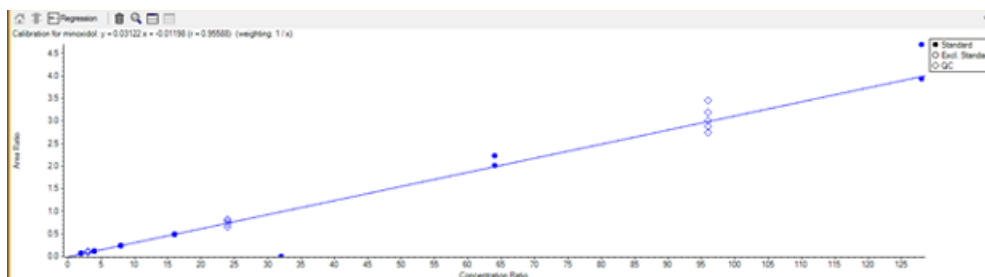
**Nota:** Il campione rappresentativo potrebbe non essere adatto a tutti i componenti. È possibile selezionare un nuovo campione rappresentativo durante la revisione dei picchi e generare un nuovo modello.

8. Per creare un nuovo modello, selezionare un nuovo picco e fare clic sull'icona **Update Peak Model**. Selezionare un picco che abbia forma simile agli altri picchi e non sia saturo.
9. Fare clic con il tasto destro del mouse, quindi fare clic su **Update Quantitation Method for Component** per applicare le modifiche a tutti i campioni nel componente.

## Modifica della curva di calibrazione

1. Fare clic sull'icona **Show Calibration Curve** per visualizzare la curva di calibrazione.
2. Per aggiungere una legenda, fare clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Calibration**, quindi fare clic su **Show Legend**.

**Figura 14-7 Curva di calibrazione**



- Per aggiungere i QC alla curva, fare nuovamente clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Calibration** e fare clic su **Show QCs**.

**Suggerimento!** Per escludere un punto dalla curva, fare clic con il pulsante destro del mouse su un punto della curva, quindi fare clic su **Exclude**.

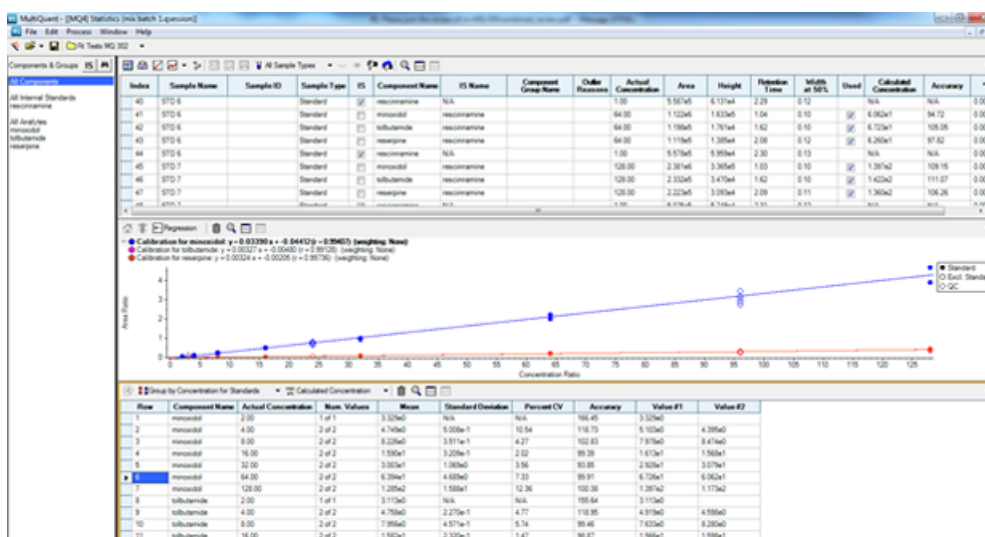
- Per confermare o modificare i parametri di regressione di un singolo analita, selezionare l'analita nell'elenco **Components and Group**, quindi fare clic sul pulsante **Regression** nella barra degli strumenti.

## Revisione delle statistiche campione

L'utente può revisionare le statistiche per una singola Results Table. La revisione dell'integrazione picco, della curva di calibrazione e delle statistiche campione sono processi iterativi.

- Con una Results Table aperta, fare clic sull'icona **Show Statistics Table**.
- Dall'elenco **Sample Grouping** fare clic su una voce per specificare il modo in cui il campione (per un determinato analita) deve essere raggruppato per il calcolo delle statistiche.

**Figura 14-8 Riquadro Statistics**



3. Nell'elenco **Metric**, fare clic su una voce per specificare la metrica effettiva utilizzata per il calcolo delle statistiche.
4. Rivedere le colonne **Value**. I punti barrati indicano i punti dati esclusi.

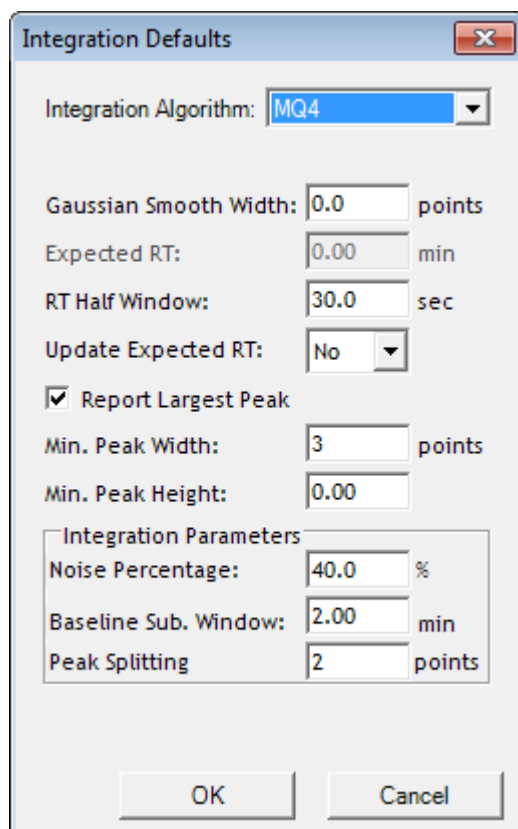
## Elaborazione dei dati utilizzando l'algoritmo di integrazione MQ4

### Impostazione dei parametri di integrazione picchi

Utilizzare la seguente procedura per verificare o impostare l'algoritmo di integrazione prima dell'elaborazione dei dati. Fare riferimento a [Parametri dell'algoritmo di integrazione MQ4 a pagina 114](#).

1. Nel software Analyst<sup>®</sup> MD, nella barra di **navigazione** sotto **Companion Software**, fare doppio clic su **MultiQuant 3.0.3**.
2. Fare clic su **Edit > Project Integration Defaults**.
3. Nella finestra di dialogo **Integration Defaults**, nell'elenco **Integration Algorithm**, selezionare **MQ4**.

Figura 14-9 Finestra di dialogo Integration Defaults



4. Se necessario, modificare i parametri del progetto e fare clic su **OK**.

L'algoritmo di integrazione MQ4 e le impostazioni dei parametri vengono usati per ogni nuovo metodo creato in questa cartella di progetto **Example**. Queste impostazioni predefinite si basano sul progetto. Per modificare le impostazioni predefinite per altri progetti, ripetere questa procedura per il progetto selezionato.

## Creazione di una Results Table

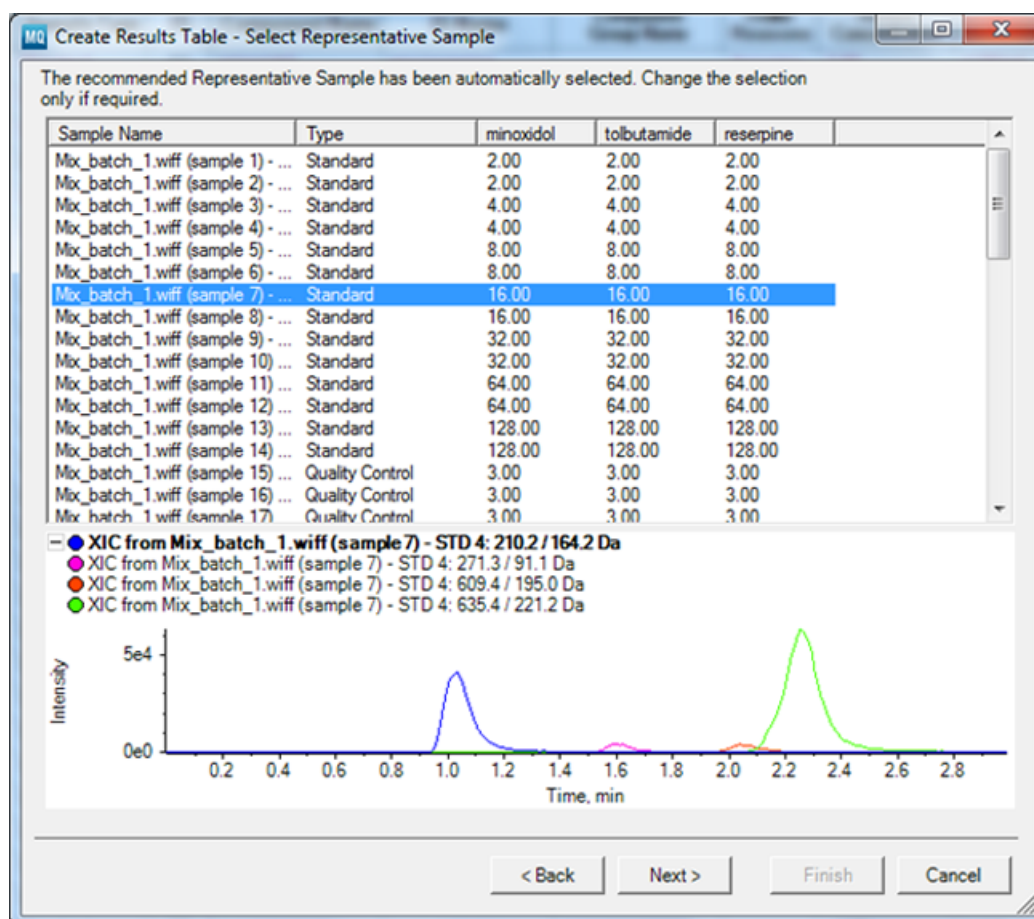
1. Fare clic su **File > New Results Table**.
2. Nella pagina **Create Results Table - Select Samples**, ingrandire la cartella **Example Data** e trascinare il file **Mix\_batch\_1.wiff** nel riquadro **Selected**.
3. Fare clic su **Next**.
4. Fare clic sull'opzione **Create New Method (MQ4)**.
5. Fare clic su **New**.
6. Inserire un nome per il metodo nella finestra di dialogo **Save Quantitation Method As** e fare clic su **Save**.

In questa esercitazione verrà creato un metodo. La creazione di metodi permette di rivedere e di applicare diversi parametri per l'integrazione dei dati.

Se esiste un metodo, selezionare l'opzione **Choose Existing Method**, quindi selezionare la casella **Edit Method** per rivedere e applicare i diversi parametri al metodo. Se la casella di controllo **Edit Method** non viene selezionata, la procedura guidata creerà la Results Table utilizzando il metodo esistente.

7. Nella pagina **Create Results Table - Select Representative Sample**, viene consigliato e selezionato un campione rappresentativo.

Figura 14-10 Pagina Create Results Table - Select Representative Sample



8. Fare clic su **Next**.

Il software consiglia un campione rappresentativo basato sulla selezione di un cromatogramma che fornisce la migliore opportunità di selezionare i parametri di integrazione adatti per l'intero lotto. Si consiglia di selezionare il secondo standard o campione QC a concentrazione inferiore per l'algoritmo di integrazione MQ4 se le informazioni di concentrazione dell'analita sono integrate nel file .wiff. Per esempio, se l'intervallo di concentrazione è compreso tra uno e otto, il secondo valore più basso è due. Se il campione rappresentativo predefinito non è sufficientemente intenso, selezionare un altro campione rappresentativo facendo clic sul pulsante **Back** nella procedura guidata, quindi selezionare un altro campione. La selezione di un altro campione può avvenire durante la revisione dei picchi. Fare riferimento a [Verifica dei picchi a pagina 104](#).

9. Nella pagina **Create Results Table - Define Components**, confermare gli analiti e gli standard interni.

Figura 14-11 Pagina Create Results Table - Define Components

Select or verify the analyte and internal standard names and masses.

Experiment: MRM (4 transitions)

Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4 / 221.2
5	<input type="checkbox"/>				

< Back   Next >   Finish   Cancel

- Fare clic su **Next**.

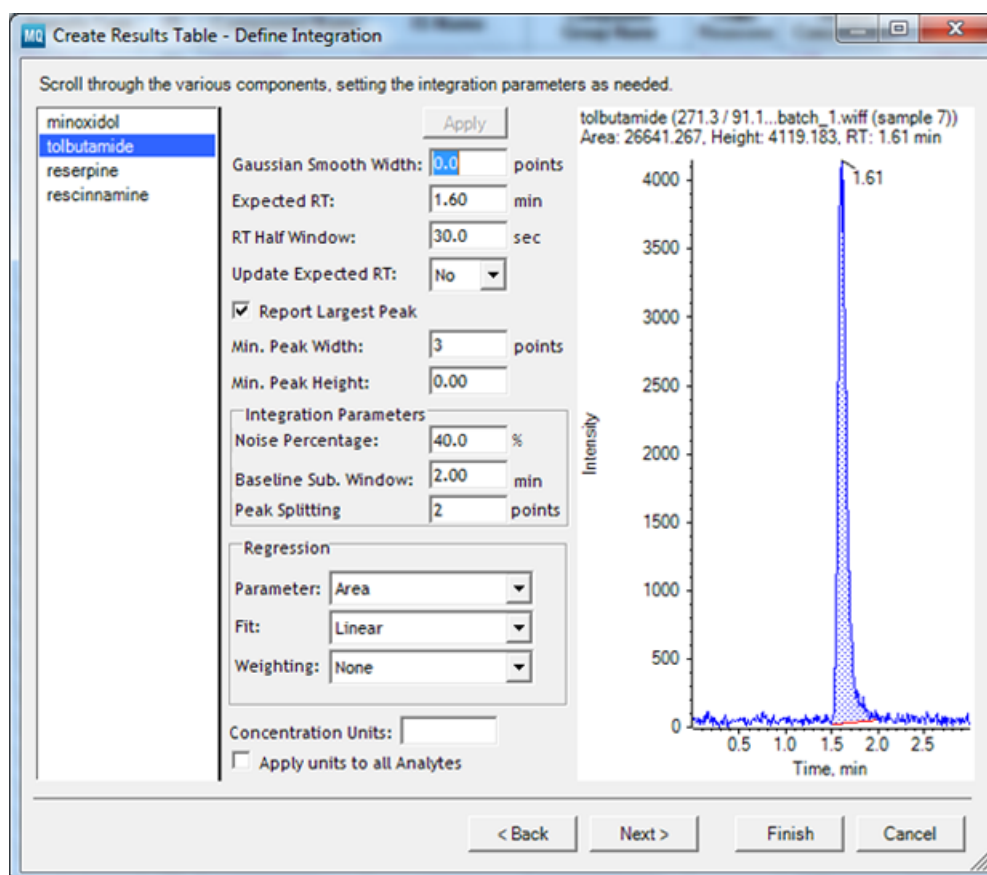
**Nota:** Quando viene creato un metodo di acquisizione, se il nome del componente è incluso nella colonna **ID** nella tabella degli intervalli delle masse, allora tale nome verrà inserito automaticamente nella pagina **Define Components**. Se il nome del componente non è stato incluso, aggiornare manualmente la tabella con il nome del componente. Se viene aggiunta un'estensione .IS al nome di componente, il software identifica il componente come standard interno e assegna il componente .IS come standard interno all'analita corrispondente.

Nella pagina **Create Results Table - Define Integration**, gli analiti e gli standard interni appaiono sul lato sinistro. Gli attuali parametri di integrazione sono stati applicati al campione rappresentativo e il cromatogramma viene visualizzato.

I componenti del campione rappresentativo selezionato in precedenza sono visualizzati nel riquadro **Integration**. I picchi di questo campione rappresentativo vengono trovati e integrati utilizzando i parametri impostati nella finestra di dialogo **Integration Defaults**.

- Rivedere l'integrazione dei picchi per ciascun componente facendo clic sul nome del componente nel riquadro a sinistra. Regolare i parametri di integrazione per far sì che il picco rappresentativo venga integrato correttamente. Fare riferimento a [Impostazione dei parametri di integrazione picchi a pagina 99](#).

Figura 14-12 Pagina Create Results Table - Define Integration



12. Per i componenti **Minoxidol**, **Tolbutamide** e **Reserpina**, usare i parametri del gruppo **Regression** per impostare quanto segue, quindi fare clic su **Apply**:
  - **Parameter:** Area
  - **Fit:** Linear
  - **Weighting:** None
13. Impostare **Concentration Units** a **ng/mL**, quindi selezionare la casella **Apply units to all Analytes**.
14. Fare clic su **Apply**.
15. Fare clic su **Finish**.

I file campioni sono automaticamente integrati e viene generata una Results Table.

**Figura 14-13 Results Table**

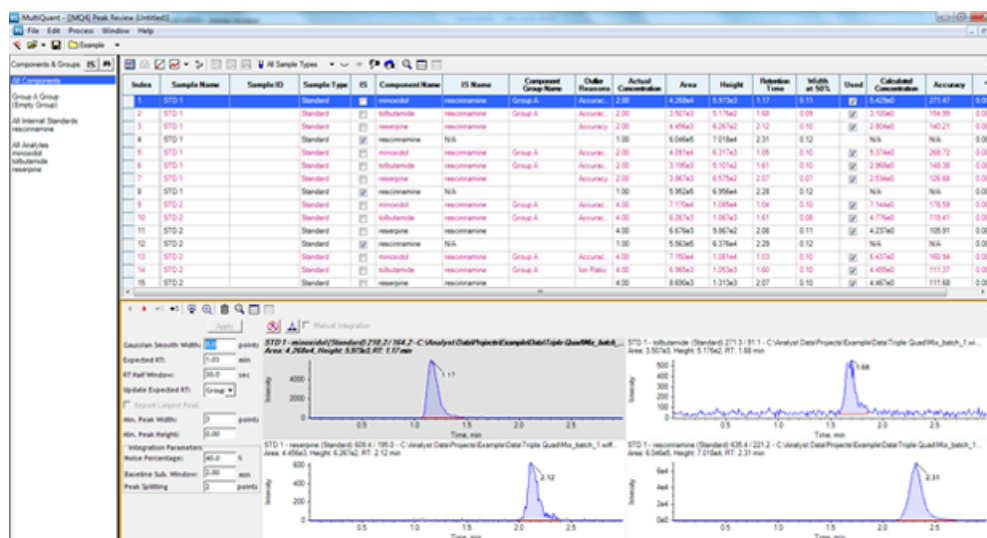
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Order	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.284e4	5.375e3	1.17	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	2.12e0	101.76
2	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.507e3	5.176e2	1.68	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.105e0	154.99
3	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.495e4	6.267e2	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.856e0	140.21
4	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.045e4	7.218e4	2.31	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.037e4	6.317e3	1.05	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	5.375e0	269.72
6	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.105e4	5.107e2	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.865e0	140.26
7	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.807e3	6.575e2	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.536e0	126.68
8	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.902e4	6.956e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	7.175e4	1.085e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.946e0	123.64
10	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.267e3	1.067e3	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.176e0	119.41
11	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.676e3	9.967e2	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.221e0	108.91
12	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.902e4	6.956e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	7.175e4	1.085e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.296e0	108.90
14	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.267e3	1.067e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.405e0	111.37
15	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.045e4	7.218e4	2.31	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	4.407e0	111.68
16	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.045e4	7.218e4	2.31	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.026e4	2.287e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.625e0	97.62
18	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.387e4	2.047e4	1.60	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	7.495e0	93.70
19	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.404e4	1.876e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.975e0	97.67
20	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.767e4	7.326e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.407e4	2.285e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.325e0	104.34
22	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.285e4	1.833e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.145e0	101.79
23	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.387e4	1.863e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.975e0	99.62
24	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.767e4	6.956e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.897e4	4.395e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.939e1	99.95
26	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.897e4	4.116e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.935e1	97.07
27	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.776e4	3.847e3	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.925e1	98.28
28	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.902e4	6.956e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.897e4	4.186e3	1.54	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.936e1	97.11
30	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.897e4	4.296e3	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.938e1	99.13
31	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.897e4	4.133e3	2.09	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.940e1	96.78
32	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.902e4	6.956e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

Fare riferimento a [Verifica dei picchi a pagina 96](#) per la gestione dei dati nella Results Table. Fare riferimento a [Report a pagina 131](#) per informazioni sulla creazione di rapporti.

## Verifica dei picchi

1. Fare clic sull'icona **Peak Review**.

**Figura 14-14 Riquadro Peak Review**



2. Fare clic con il tasto destro del mouse nella tabella, quindi fare clic su **Column Settings**.
3. Fare clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Peak Review**, quindi fare clic su **Options**.



4. Nella scheda **Zooming**, impostare **Zoom time axis to view peak** su **3 RT Windows**.
5. Se un cromatogramma contiene più picchi e viene integrato un picco errato, trascinare il picco corretto per impostare un nuovo **Expected RT**. Se necessario, regolare il rilevamento del picco e i parametri di integrazione. Fare riferimento a [Algoritmi di integrazione a pagina 107](#).
6. Per applicare i nuovi parametri a tutti gli altri campioni, per lo stesso componente, fare clic con il tasto destro nel cromatogramma, quindi fare clic su **Update Quantitation Method for Component**.
7. Il metodo di quantificazione incorporato può essere modificato durante la visualizzazione della **Results Table** facendo clic su **Edit > Modify Results Table Method**. L'utente può cambiare le opzioni di regressione dei parametri di integrazione e le informazioni per ciascun componente.

Se le opzioni di regressione dei parametri di integrazione e le informazioni sui singoli componenti vengono modificate, verrà modificato solo il metodo di quantificazione integrato nella **Results Table**. Il file del metodo di quantificazione utilizzato per creare la **Results Table** non verrà modificato. Per utilizzare questo metodo di quantificazione integrato per elaborare altri file di dati, occorre esportare questo metodo integrato in un file di metodo utilizzando la funzione **Export**.

---

**Nota:** Cancellare l'integrazione facendo clic su **Set Peak to Not Found** per visualizzare i dati grezzi prima dell'integrazione manuale del picco.

---

8. Per usare la modalità di integrazione manuale, fare clic sull'icona **Enable Manual Integration Mode** nel riquadro **Peak Review**. Trascinare il cursore dalla base di un lato del picco di interesse all'altro. Il picco viene integrato manualmente e i parametri di integrazione precedentemente utilizzati diventano indisponibili.

---

**Suggerimento!** Se il picco è appena stato modificato, ripristinare il picco al metodo originale facendo clic sul pulsante destro del mouse e quindi facendo clic su **Revert Peak to Original Method**.

---

---

**Nota:** Il campo **Calculated Concentration** nella **Results Table** riflette tutti i cambiamenti conseguenti all'adattamento della curva ai punti dello standard.

---

## Modifica della curva di calibrazione

1. Fare clic sull'icona **Show Calibration Curve** per visualizzare la curva di calibrazione.
2. Per aggiungere una legenda, fare clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Calibration**, quindi fare clic su **Show Legend**.
3. Per aggiungere i QC alla curva, fare nuovamente clic con il tasto destro del mouse nel riquadro **Calibration** e fare clic su **Show QCs**.

---

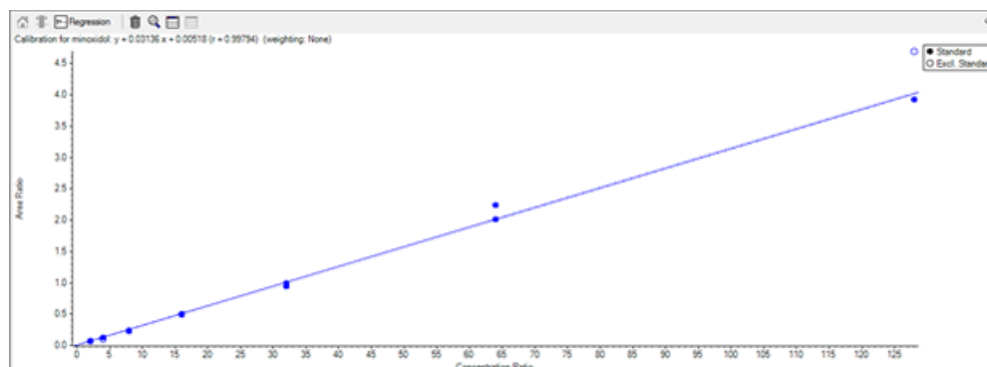
**Suggerimento!** Per escludere un punto dalla curva, fare clic con il pulsante destro del mouse su un punto della curva, quindi fare clic su **Exclude**.

---

## Esercitazione sul flusso di lavoro dell'analisi di quantificazione

4. Per confermare o modificare i parametri di regressione di un singolo analita, selezionare l'analita nel riquadro **Components and Group**, quindi fare clic sul pulsante **Regression** nella barra degli strumenti.
5. Affinché la curva di calibrazione abbia un adattamento migliore, escludere il secondo campione STD 2 (concentrazione 4,00 ng/mL) e il primo campione STD 7 (concentrazione 128,00 ng/mL). Per fare ciò, usare la colonna **Actual Concentration** e la colonna **Used** per rimuovere i campioni. Deselezionare la casella nella colonna Used per rimuovere il punto dalla curva. Ora la curva di calibrazione dovrebbe apparire come quella mostrata nella [Figura 14-15](#).

Figura 14-15 Curva di calibrazione con campioni esclusi



## Revisione delle statistiche campione

L'utente può revisionare le statistiche per una singola Results Table. La revisione dell'integrazione picco, della curva di calibrazione e delle statistiche campione sono processi iterativi.

1. Con una Results Table aperta, fare clic sull'icona **Show Statistics Table**.

Figura 14-16 Tabella delle statistiche

Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Order	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Initial at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
2	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Accurate	2.00	3.50763	5.17662	1.68	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	2.42740	121.35
6	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	2.00	3.10563	5.10762	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.29540	114.59
14	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	4.00	6.26763	1.06762	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.15740	103.43
18	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	4.00	6.86563	1.06562	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.80940	98.23
22	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	8.00	1.35764	2.04763	1.60	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	6.91540	96.40
26	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	8.00	1.20564	1.93563	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.87540	94.69
30	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	16.00	2.68564	4.11563	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.91141	94.44
34	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	16.00	2.84164	4.20563	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.94541	96.54
38	STD 5		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	32.00	5.67564	8.42763	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	2.88741	90.23
42	STD 5		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	32.00	5.61764	8.42763	1.62	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.05641	98.59
46	STD 6		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	64.00	1.11565	1.76264	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	6.30441	99.50
50	STD 6		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	64.00	1.10565	1.76164	1.62	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	6.76241	105.97
54	STD 7		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	128.00	2.33565	3.47564	1.62	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.44442	112.83
58	STD 7		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Ion Ratio	128.00	2.20565	3.48564	1.60	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	1.19542	90.28
62	QC 1		Quality Control	<input checked="" type="checkbox"/>	telitruendite	telitruendite	Group A	Accurate	1.00	6.75563	8.30562	1.60	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	3.79540	125.16

Row	Component Name	Actual Concentration	Sum Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	telitruendite	2.00	2 of 2	2.3360	3.541e-2	4.04	117.96	2.42740	2.29540
2	telitruendite	4.00	2 of 2	3.9760	2.330e-1	5.84	99.33	4.15740	3.80940
3	telitruendite	8.00	2 of 2	7.24240	4.670e-1	6.45	90.52	6.91540	7.87540
4	telitruendite	16.00	2 of 2	1.52041	2.371e-1	1.55	95.49	1.91141	1.94541
5	telitruendite	32.00	2 of 2	2.97041	1.21540	4.08	92.91	2.88741	3.05641
6	telitruendite	64.00	2 of 2	6.54341	3.38540	5.17	102.23	6.30441	6.76241
7	telitruendite	128.00	2 of 2	1.30542	2.04141	15.70	101.55	1.44442	1.19542

2. Dall'elenco **Sample Grouping** fare clic su una voce per specificare il modo in cui il campione (per un determinato analita) deve essere raggruppato per il calcolo delle statistiche
3. Fare clic sulla colonna **Value #1**.

---

**Nota: Group by Concentration for Standards and QCs** è basato sulla **Displayed Actual Concentration** e non sulla **Actual Concentration** memorizzata nella Results Table. Se la concentrazione Std 1 è 0,001, la concentrazione Std 2 è 0,005 e il formato di visualizzazione è 0, Std 1 e Std 2 saranno raggruppati assieme perché entrambi sono trattati come 0. Per raggrupparli separatamente, nella finestra di dialogo **Column Settings**, impostare la precisione di **Analyte Concentration** a 0,000. Se Std 1 è 0,500 e Std 2 è 0,499, per raggrupparli impostare la precisione a 0,00. Fare riferimento a [Modifica delle colonne mostrate nella Results Table a pagina 89](#).

---

4. Nell'elenco **Metric** fare clic su una voce per specificare la metrica effettiva utilizzata per il calcolo delle statistiche.
5. Rivedere le colonne **Value**. I punti barrati indicano i punti dati esclusi.

## Algoritmi di integrazione

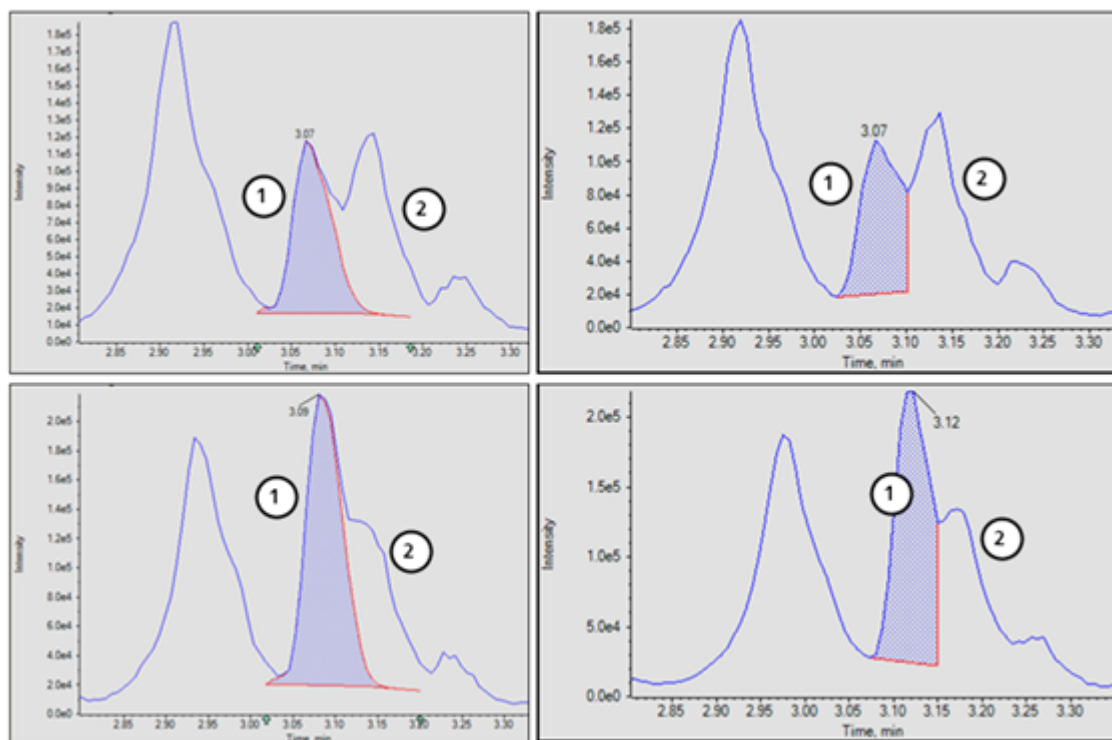
Questa sezione descrive i vari parametri disponibili per ciascun algoritmo.

### Descrizione dell'algoritmo di integrazione SignalFinder

#### Picchi strettamente eluiti

SignalFinder™ fornisce una rappresentazione più accurata dell'area dei picchi dove si trovano picchi strettamente eluiti. La [Figura 14-17](#) mostra un esempio di come gli algoritmi di integrazione MQ4 (grafico a destra) e SignalFinder (grafico a sinistra) gestiscono i picchi strettamente eluiti. In questo esempio, il picco di fondo (2) interferisce con il picco di interesse (1). Poiché il picco di interferenza proviene da LC o dalla matrice, risulta abbastanza costante all'interno dell'intero lotto. Tuttavia, l'intensità del picco dell'analita aumenta all'aumentare della concentrazione dell'analita, di conseguenza le forme dei picchi combinate cambiano in modo sostanziale. L'algoritmo di integrazione SignalFinder, basato su un modello di picco definito dall'utente, può identificare in modo coerente il picco di interesse di tutti i livelli di concentrazione, mentre l'algoritmo di integrazione MQ4 può solo tracciare una linea verticale dalla valle alla linea di base. In questo modo avviene l'integrazione solo di un picco parziale, con conseguente introduzione di errori nell'area dei picchi.

Figura 14-17 Picchi strettamente eluiti



Elemento	Descrizione
1	Picco di interesse
2	Picchi di fondo co-eluiti

### Picchi di scodamento

Per quanto riguarda i picchi di scodamento, gli algoritmi precedenti sono spesso incoerenti nella selezione del tempo di ritenzione nel quale termina il picco. In base all'esatta natura del rumore in questa area, due picchi simili possono avere estremità di picco differenti. L'integrazione può essere generalmente resa più coerente regolando i parametri di rilevamento picchi. Tuttavia, ciò avviene a spese di tempo e impegno. Con un approccio basato sulla modellazione, l'integrazione viene interrotta quando il modello scende sotto una soglia, pertanto è molto meno influenzato dal rumore.

### Picchi saturi

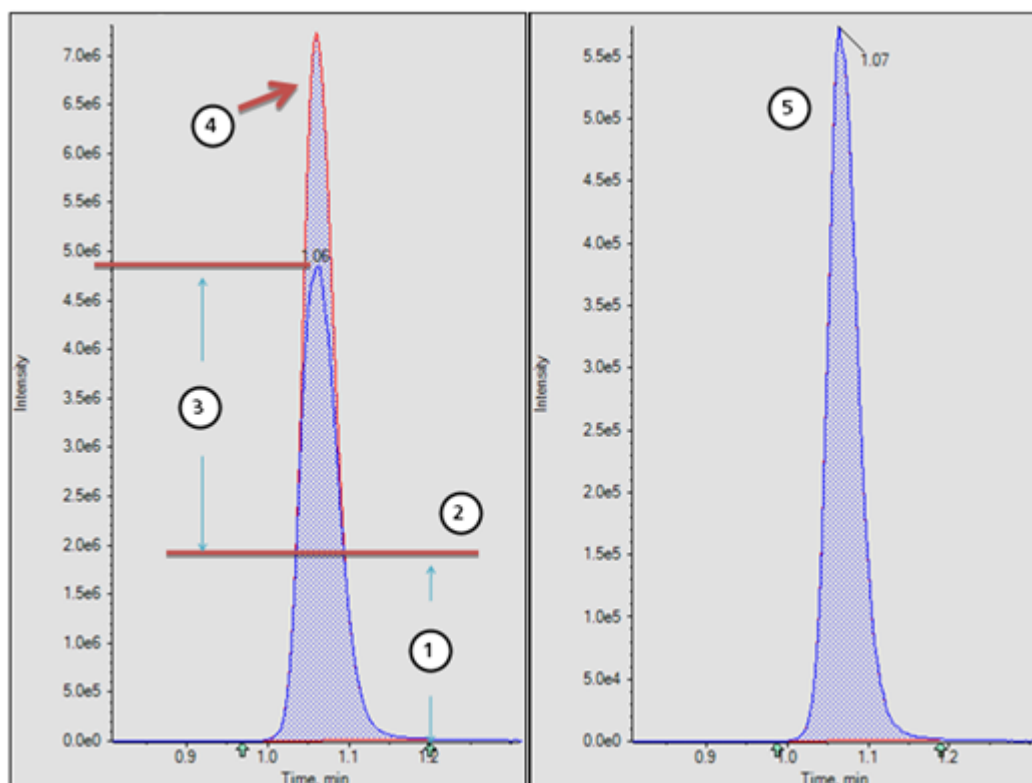
Quando l'algoritmo rileva che un picco è saturo, utilizza un modello per prevedere come questo potrebbe apparire se il rivelatore non fosse saturo. Ciò appare sotto forma di un profilo rosso che si estende sopra il picco per approssimare la risposta che si otterrebbe se il rivelatore non fosse saturo. Questa funzione corregge solo la saturazione del rivelatore e non la saturazione della sorgente di ionizzazione o della colonna. La [Figura 14-18](#) mostra un esempio di correzione della saturazione.

Prima di utilizzare l'algoritmo SignalFinder™, selezionare un campione non saturo da usare per la creazione del modello del picco, quindi impostare la soglia di saturazione a un valore adeguato al rivelatore. In questo

esempio viene usata una soglia di saturazione di  $1.8\text{E}+006$  cps. L'algoritmo fa corrispondere la restante porzione non satura del picco, cioè il picco inferiore a  $1.8\text{E}+006$  cps, al modello del picco. L'algoritmo predice il resto del picco indicato dalla traccia rossa sulla base del modello di picco selezionato.

**Nota:** La soglia di saturazione dipende da numerosi fattori, tra cui il tipo e l'età del rivelatore e il composto di interesse. Per risultati ottimali, la soglia di saturazione deve essere regolata adeguatamente.

**Figura 14-18** Correzione della saturazione del rivelatore



Elemento	Descrizione
1	Porzione non satura (corrispondenza al modello di picco)
2	Soglia $1.8\text{E}+006$ cps
3	Porzione satura
4	Profilo picco corretto
5	Modello di picco

### Note relative all'utilizzo

Alcuni flussi di lavoro non hanno un campione tipico contenente tutti i componenti di interesse. Ad esempio, nel processo di individuazione di farmaci, gli utenti possono cercare i metaboliti di ossidazione aggiungendo +16 alla massa Q1 del farmaco principale e +0 o +16 alla massa Q3. Questi metaboliti sono generalmente

presenti in alcuni campioni, ma non necessariamente nel campione scelto come modello usato per creare il metodo di quantificazione. In questa situazione, l'algoritmo SignalFinder™ utilizzerà un modello predefinito se, per una determinata transizione MRM, non esiste un picco ragionevole nel campione tipico. In molti casi questo modello predefinito sarà sufficientemente accurato. Tuttavia, è anche possibile creare un nuovo modello durante la revisione di picchi successivi usando un modello contenente il picco di interesse.

### Parametri dell'algoritmo di integrazione SignalFinder™

I seguenti parametri vengono utilizzati per identificare e segnalare il picco di interesse. Per un elenco completo dei parametri disponibili, fare riferimento a [Parametri dell'algoritmo di integrazione a pagina 119](#).

#### Use Saturation Correction

Questa opzione è disponibile solo durante l'impostazione dei valori generali predefiniti dell'algoritmo e non durante la creazione del metodo di quantificazione o la revisione dei singoli picchi, in quanto non è utile usare questa impostazione solo per alcuni picchi.

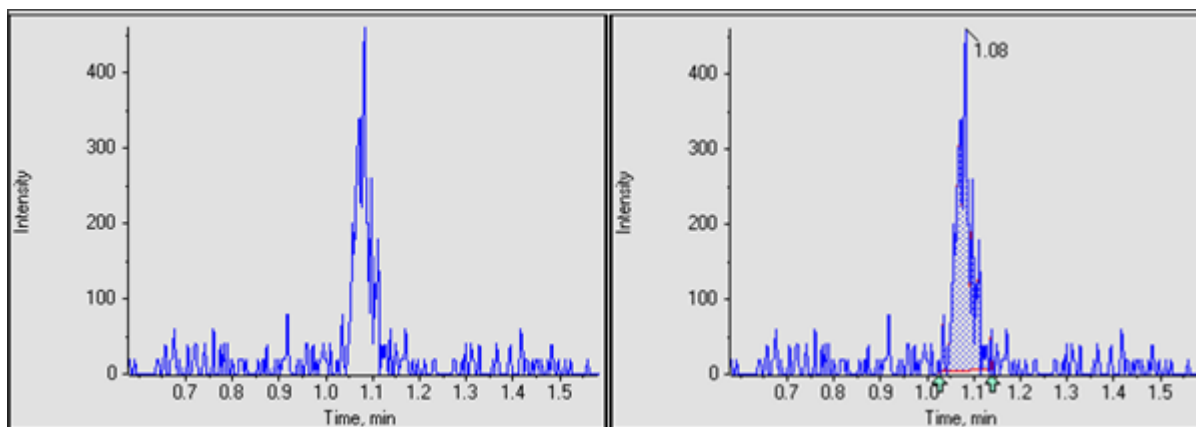
#### Saturation Threshold

I picchi sopra questa soglia sono considerati saturi. Questo valore dipende dal rivelatore.

#### S/N Threshold

Nella [Figura 14-19](#), se la soglia S/N è impostata a sette (grafico a sinistra), il picco non viene riportato. Se la soglia S/N è impostata a due (grafico a destra), il picco viene riportato. Questo parametro non influisce sull'integrazione.

**Figura 14-19 S/N Threshold**



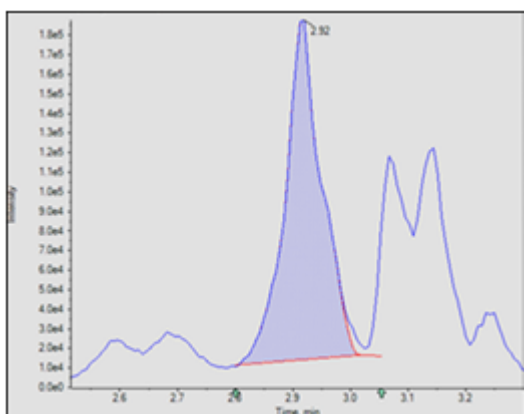
#### Confidence Threshold

Questo parametro è utilizzato per filtrare potenziali picchi che sono falsi positivi. Il valore predefinito è 50%, che è generalmente adatto. Tuttavia, l'utente potrebbe voler utilizzare un valore maggiore per i dati con un notevole rumore di fondo o per quelli aventi una larghezza di picco che varia notevolmente da campione a campione.

Figura 14-20 e Figura 14-21 mostrano come la **Confidence Threshold** influenzi il numero di picchi identificati. Quando la **Confidence Threshold** è impostata a 50%, il picco con una piccola spalla viene identificato come un picco. Quando la **Confidence Threshold** è al di sotto del 16%, l'algoritmo SignalFinder™ rileva due picchi. Trascinare attraverso le regioni dei due picchi per visualizzarli.

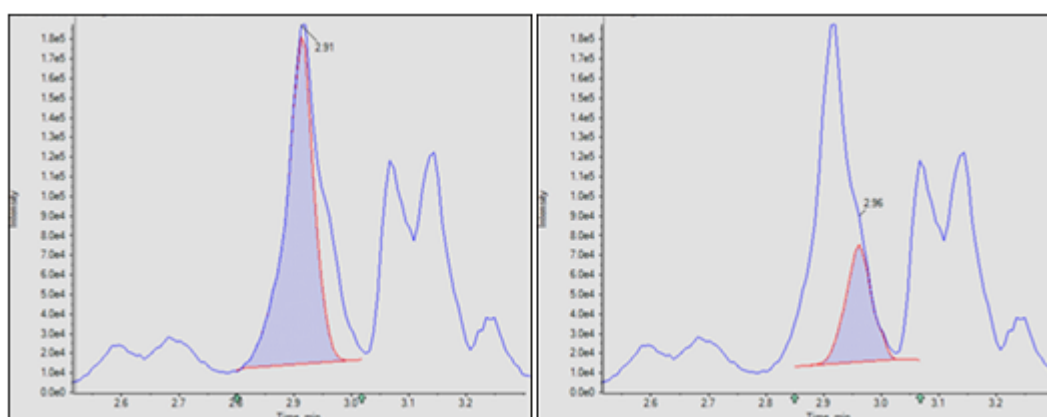
Per determinare quali altri picchi sono potenzialmente presenti in questo picco singolo e se la **Confidence Threshold** corretta non è nota, premere **Ctrl** e trascinare attraverso la regione del picco di interesse. In tal modo si abbassa automaticamente la **Confidence Threshold** rivelando il secondo picco di interesse che non è presente quando la **Confidence Threshold** è impostata al 50%.

**Figura 14-20** Soglia di probabilità al 50%

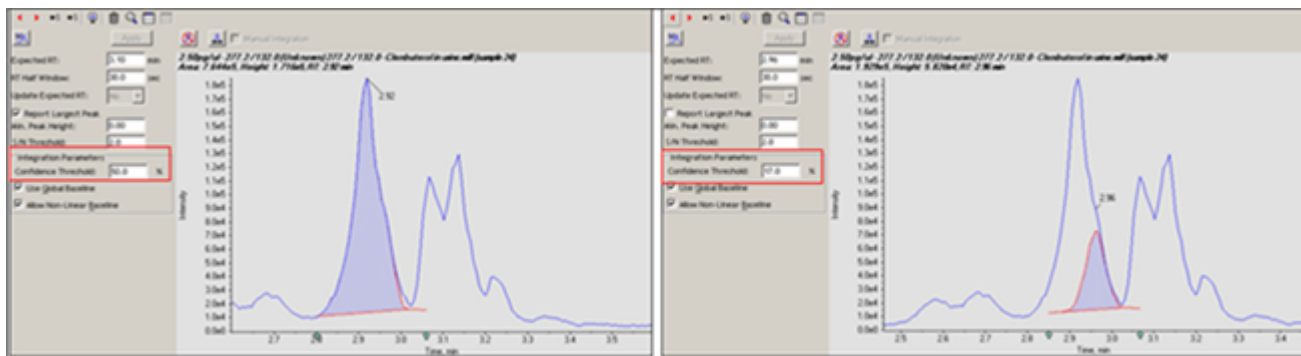


Con una confidence al 16%, vengono rilevati due picchi. Trascinare attraverso l'area del picco per identificare i due picchi.

**Figura 14-21** Soglia di probabilità al 16%



**Figura 14-22 Parametri della soglia di probabilità**

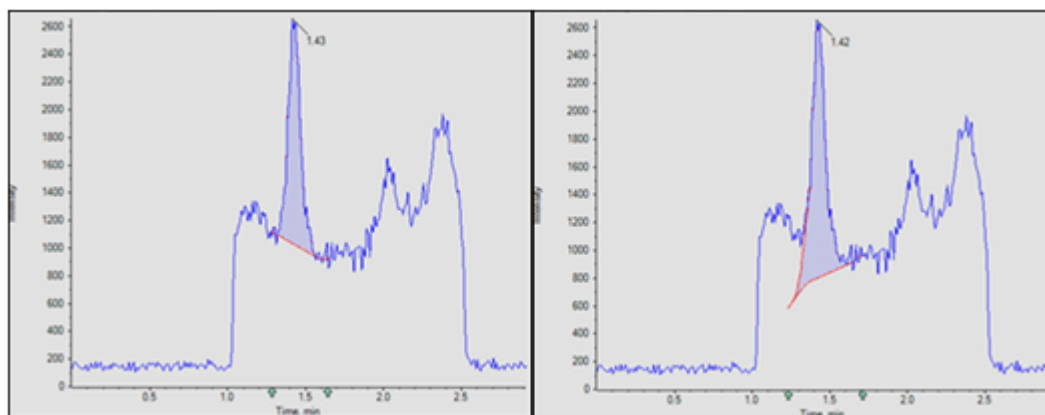


### Use Global Baseline

Selezionare questa opzione per utilizzare l'intero cromatogramma come linea di base. Se l'opzione non è selezionata, il software di quantificazione valuta le modifiche alla linea di base localmente. La [Figura 14-23](#) mostra un esempio di quando occorre utilizzare la linea di base locale.

Il grafico a sinistra mostra un cromatogramma che è stato integrato correttamente utilizzando la linea di base locale. Il grafico a destra mostra lo stesso cromatogramma, integrato in modo non appropriato usando la linea di base globale.

**Figura 14-23 Use Global Baseline**



### Allow Non-Linear Baseline

Utilizzare questa opzione per selezionare tra una linea di base lineare o non lineare. Una linea di base non lineare stima la linea di base sotto ciascun picco. L'opzione lineare inserisce una linea tra i punti all'inizio e alla fine di quel gruppo specifico di picchi. [Figura 14-24](#) e [Figura 14-25](#) mostrano esempi di linee di base lineari e non lineari per picchi coeluiti. Gli elementi da 1 a 4 sono picchi convoluti.

La linea di base non lineare è consigliata per picchi multipli. Per il picco singolo, la differenza tra lineare e non lineare è irrilevante.



Figura 14-24 Esempio di linea di base lineare

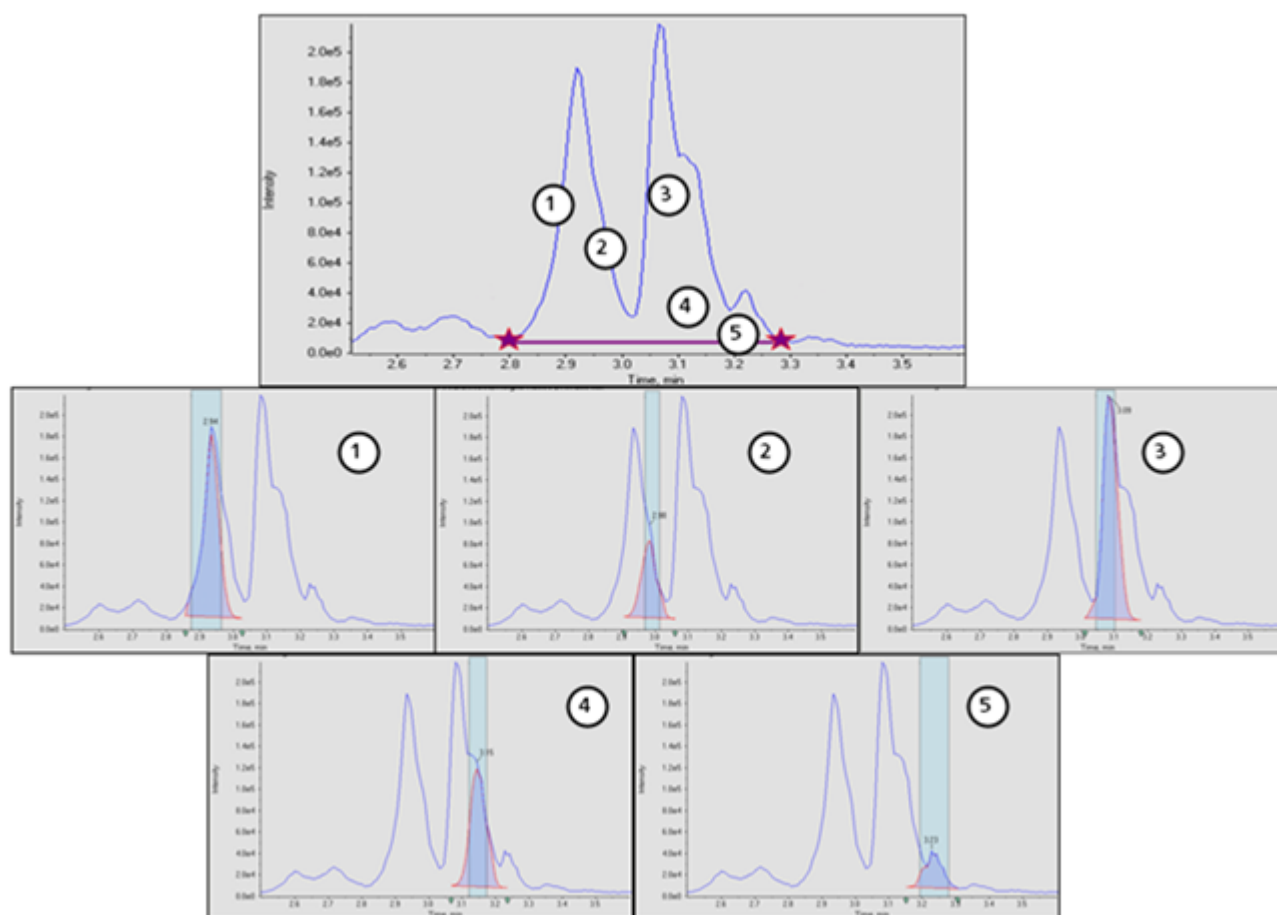
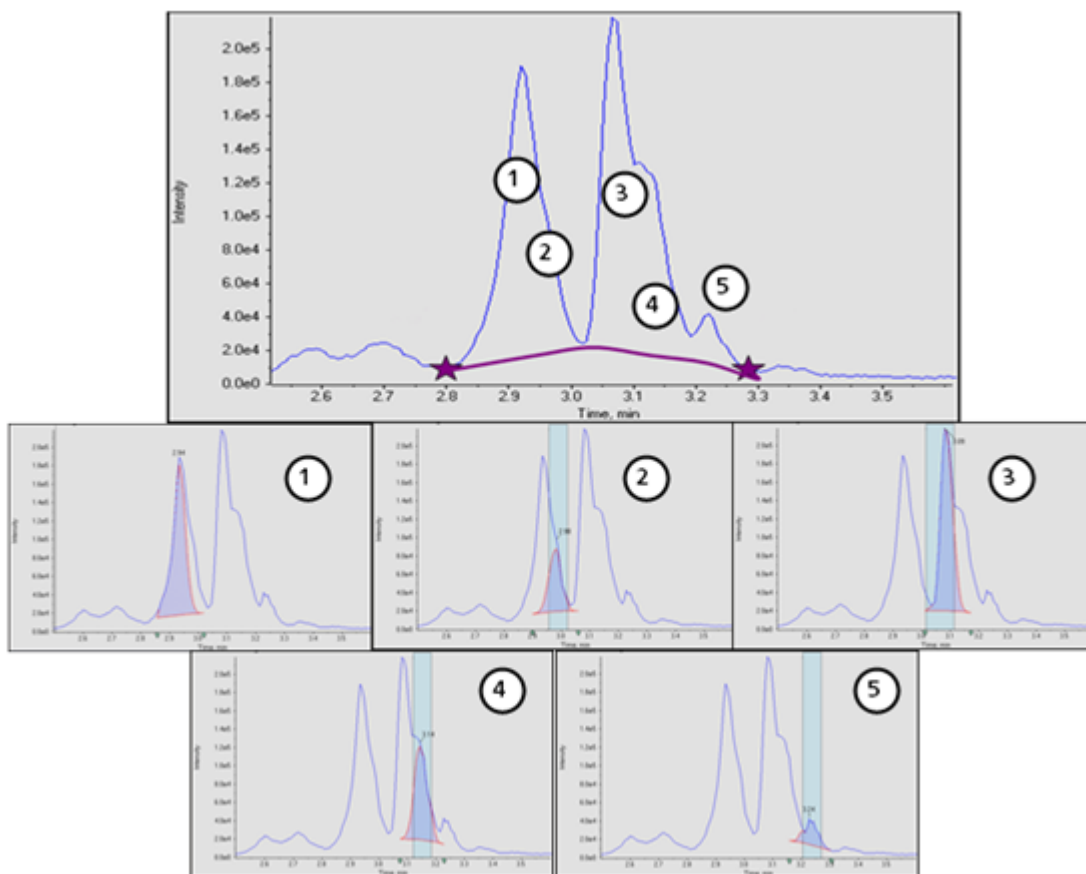


Figura 14-25 Esempio di linea di base non lineare



### Suggerimenti per l'uso dell'algoritmo di integrazione SignalFinder™

- Fusione di due picchi: a volte può accadere che l'algoritmo di integrazione SignalFinder rilevi due picchi. Per unire i due picchi, premere **Ctrl** e trascinare su di essi. Il software tenta di unire i picchi riducendo la sensibilità di convoluzione, a meno che i due picchi non siano troppo distanti.
- Modifica del momento iniziale e finale dei picchi: per modificare il momento iniziale e finale di un picco mentre si crea una **Results Table** o durante la revisione dei picchi, trascinare le frecce di inizio e fine del picco.

---

**Nota:** L'utente può modificare le frecce di inizio e fine solo entro limiti ragionevoli.

---

### Parametri dell'algoritmo di integrazione MQ4

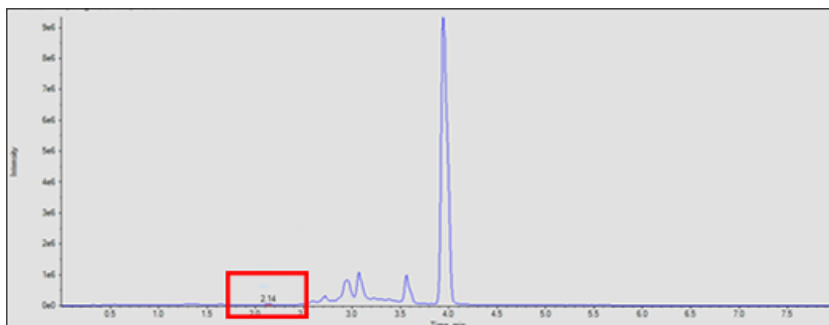
I seguenti parametri vengono utilizzati per identificare e segnalare il picco di interesse. Per un elenco completo dei parametri disponibili, fare riferimento a [Parametri dell'algoritmo di integrazione a pagina 119](#).

### Noise Percentage

Questo parametro è utilizzato per stimare il livello di rumore di fondo nei cromatogrammi. La percentuale specificata dei punti dati con l'intensità più piccola è considerata con rumore di fondo.

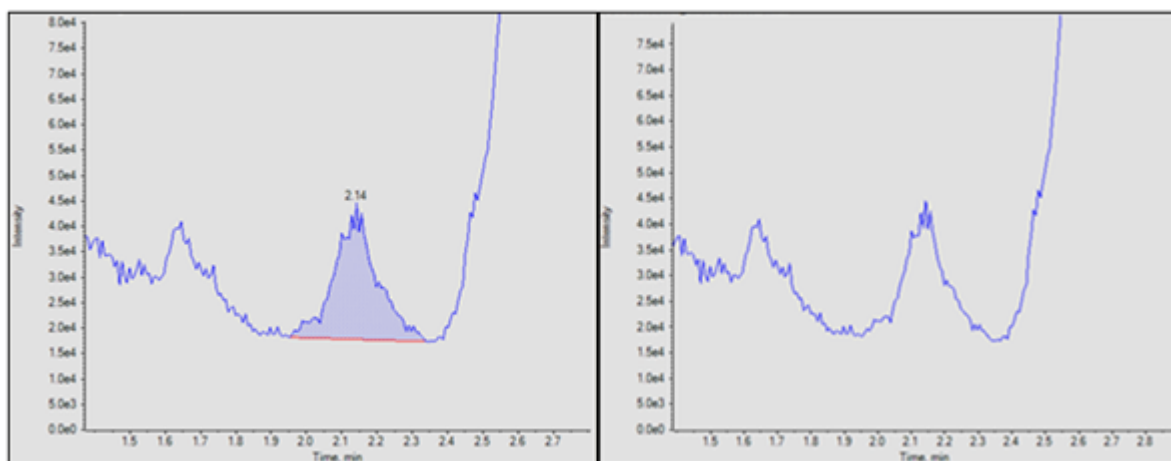
I valori tipici variano dal 20 al 60%. Se non si trovano picchi piccoli in presenza di picchi più grandi, la percentuale di rumore deve essere abbassata. La [Figura 14-26](#) è un esempio di picco piccolo in presenza di picco molto grande. Questo picco piccolo non viene trovato quando la percentuale di rumore è impostata a 90%, ma viene trovato quando la percentuale è impostata a 40%.

**Figura 14-26 Picco di interesse**



Nella [Figura 14-27](#), il grafico a sinistra mostra la percentuale di rumore impostata a 40%. Il grafico a destra mostra l'impostazione a 90%.

**Figura 14-27 Livelli di rumore**

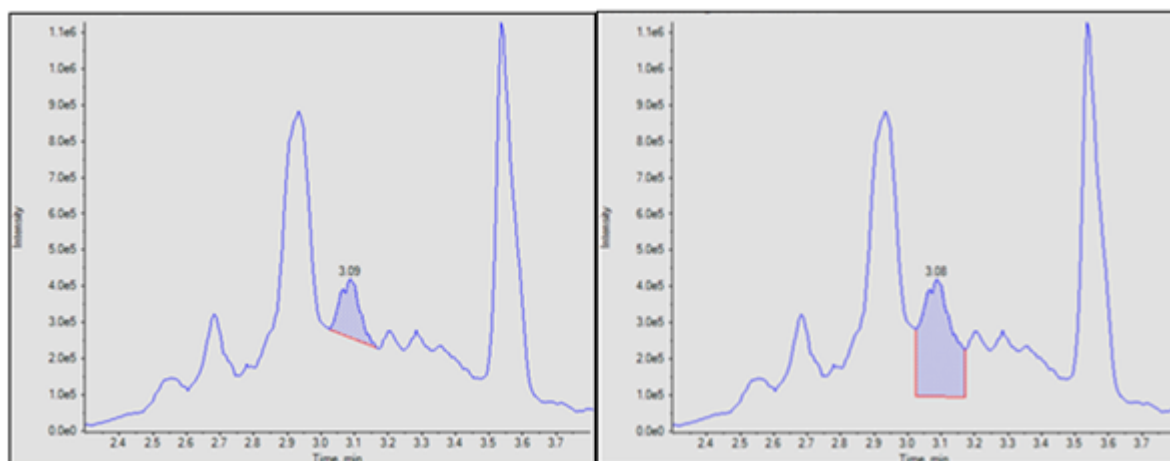


### Baseline Sub. Window

Dopo lo smussamento, ma prima di altre elaborazioni, nei cromatogrammi si esegue la sottrazione della linea di base per rimuovere le gobbe nei dati. Per ogni punto dato, la linea di base è calcolata utilizzando i punti dati a sinistra e a destra del punto attuale con l'intensità minima (nella finestra di sottrazione).

Il valore esatto di questo parametro non è critico, a condizione che sia impostato su un valore leggermente maggiore della larghezza di picco prevista.

**Figura 14-28 Finestra di sottrazione della linea di base**



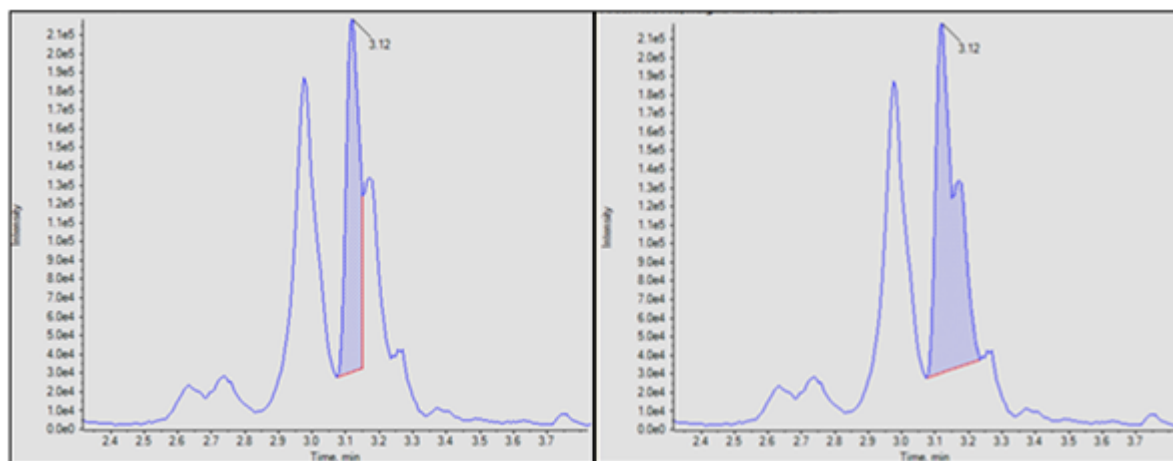
### Peak Splitting

Questo parametro controlla se un picco potenzialmente rumoroso è rilevato come picco singolo o come due (o più) picchi separati. Se il calo tra due picchi potenziali è inferiore al valore specificato, si rileva un picco singolo. In caso contrario, vengono rilevati due picchi.

Impostando questo parametro su un valore elevato, i picchi rumorosi non verranno divisi e rilevati come due picchi separati. Tuttavia, è necessario utilizzare un valore più piccolo se sono presenti due picchi distinti strettamente eluiti (sovrapposti).

Il grafico a sinistra mostra la divisione dei picchi impostata a due punti. Il grafico a destra mostra la divisione dei picchi impostata a tre punti.

**Figura 14-29 Divisione dei picchi**



## Attività facoltative

Questa sezione contiene attività opzionali che possono essere usate per migliorare l'analisi dei dati.

### Creazione di metric plot

Usare un **Metric Plot** per tracciare i valori in una colonna della **Results Table** rispetto al numero di riga o a un'altra colonna. Questi grafici rappresentano un valido aiuto per la revisione visiva dei dati, specialmente se non è necessario rivedere manualmente ogni cromatogramma usando il pannello **Peak Review**.

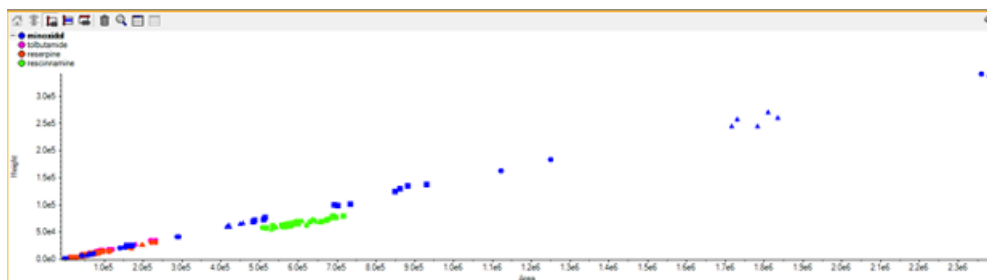
**Nota:** I metric plot usano le stesse formule di regressione delle curve di calibrazione. Per i metric plot vi sono due formule aggiuntive, media e mediana.

1. Aprire una **Results Table**.
2. Selezionare una o due colonne, quindi fare clic sull'icona **Metric Plot**. Per questo esempio, selezionare la colonna **IS Area**.

Se si seleziona una colonna, il tracciato risultante mostra i valori della colonna in funzione del numero di riga nella tabella. Se si selezionano due colonne, i valori delle colonne sono tracciati gli uni rispetto agli altri. La prima delle due colonne da selezionare contiene i valori x e la seconda i valori y.

3. Fare clic con il tasto destro nel riquadro del tracciato, quindi fare clic su **Show Legend** per visualizzare una spiegazione dei simboli utilizzati dal tracciato.

Figura 14-30 Metric Plot



### Creazione di colonne personalizzate

1. Con una **Results Table** aperta e attiva, fare clic con il tasto destro del mouse, quindi fare clic su **Add Custom Column**.

Una colonna viene aggiunta alla fine della tabella.

2. Inserire il nome della colonna nella finestra di dialogo **Custom Column Name**.
3. Fare clic su **OK**.

## Informazioni sui file del metodo di quantificazione e sui metodi incorporati

I metodi di quantificazione possono essere creati procedendo in uno dei seguenti modi:

- Utilizzando il **Quantitation wizard**.
- Modificando un metodo esistente nel **Quantitation wizard** con la casella di controllo **Edit** selezionata.
- Aprendo e modificando un metodo di quantificazione esistente.

I metodi di quantificazione vengono salvati nella cartella **Quantitation Method**.

Quando si crea una **Results Table**, il metodo di quantificazione usato per creare la **Results Table** viene integrato nella **Results Table**. Modificando il metodo di quantificazione integrato, tuttavia, qualunque modifica apportata al metodo di quantificazione viene applicata solo al metodo integrato della **Results Table** e non ai metodi della cartella **Quantitation Method**.

---

**Suggerimento!** Questo metodo integrato modificato può essere esportato per uso futuro.

---

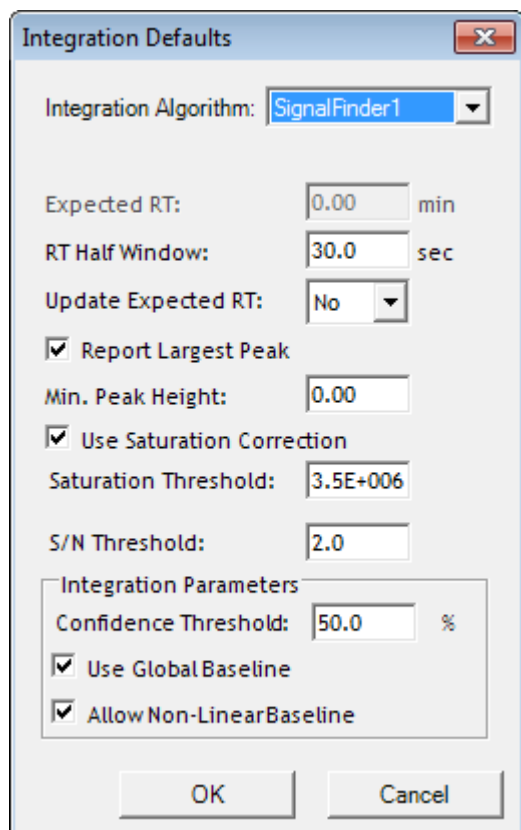
# Parametri dell'algoritmo di integrazione

# A

## Parametri dell'algoritmo di integrazione SignalFinder

Il software SignalFinder™ crea un modello di picco utilizzando il campione selezionato durante la creazione di un nuovo metodo di quantificazione. Questo modello descrive la forma del picco selezionato utilizzato per preparare l'algoritmo.

**Figura A-1** Finestra di dialogo Integration Defaults



## Parametri dell'algoritmo di integrazione

Etichetta	Descrizione
Integration Algorithm	L'algoritmo di integrazione selezionato.
Expected RT	Il tempo di ritenzione previsto in minuti. Inizialmente è impostato sul tempo di ritenzione del picco più grande nel cromatogramma per il campione rappresentativo utilizzato per generare il metodo di quantificazione. Questo campo non è modificabile. Viene aggiornato a seconda del composto nel metodo di quantificazione.
RT Half Window	La metà della finestra del tempo di ritenzione totale in secondi. Per rilevare e segnalare un picco, la differenza tra il suo apice e il tempo di ritenzione previsto deve essere inferiore o uguale a questo valore.
Update Expected RT	<p>Indica se il tempo di ritenzione previsto deve essere regolato sul momento utilizzando altri componenti. Impiega informazioni aggiuntive per compensare gli scostamenti del tempo di ritenzione da campione a campione. Le opzioni disponibili sono:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>No:</b> Il tempo di ritenzione previsto è utilizzato così com'è.</li> <li>• <b>Group:</b> Applicabile ai componenti che sono stati assegnati a gruppi per i quali tutti i componenti di un dato gruppo hanno lo stesso tempo di ritenzione (transizioni diverse per lo stesso composto). Il tempo di ritenzione previsto è aggiornato utilizzando la posizione della sovrapposizione massima dei singoli cromatogrammi per il gruppo (per un dato campione) all'interno della finestra RT. L'idea è di impostare l'RT previsto sull'RT probabile per l'effettivo componente in questione (dove è previsto un picco in ogni cromatogramma).</li> </ul> <p>Se per un gruppo sono definiti almeno due standard interni, solo i loro cromatogrammi vengono utilizzati per determinare il nuovo tempo di ritenzione. Altrimenti, vengono utilizzati tutti i cromatogrammi del gruppo. L'intenzione è solo quella di utilizzare quei cromatogrammi per i quali è più probabile che il componente sia presente ad un livello ragionevole.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>IS:</b> Per gli analiti che utilizzano uno standard interno, viene determinato prima l'effettivo tempo di ritenzione del picco standard interno (per il campione corrispondente). L'RT previsto per l'analita è determinato moltiplicando l'RT previsto specificato per il rapporto tra RT effettivo e previsto per lo standard interno. Questa opzione viene talvolta indicata come tempo di ritenzione relativo.</li> </ul> <p><b>Nota:</b> Questa opzione non si applica agli standard interni né agli analiti che non utilizzano uno standard interno.</p>
Report Largest Peak	<p>Se si trova più di un picco in un cromatogramma all'interno di una finestra di tempo di ritenzione, soddisfacendo la larghezza e l'altezza minime, questo parametro controlla il picco che viene segnalato. Quando si seleziona la casella di controllo, viene segnalato il picco con l'area più grande. Quando si deselecta la casella, viene segnalato il picco con il tempo di ritenzione più vicino al tempo previsto.</p> <p>Si consiglia di attivare questa opzione, a meno che i tempi di ritenzione siano molto riproducibili.</p>



## Parametri dell'algoritmo di integrazione

Etichetta	Descrizione
Min. Peak Height	Questo parametro non influisce sull'integrazione. Viene utilizzato solo a fini di reporting. Eventuali picchi con intensità inferiore a questo valore sono considerati non di interesse e non vengono utilizzati.
Use Saturation Correction	Quando l'algoritmo rileva che un picco è saturo, utilizza il modello per prevedere come questo potrebbe apparire se il rivelatore non fosse saturo. In questo modo il profilo si estende sopra la parte superiore del picco per approssimare la risposta che si otterrebbe se il rivelatore non fosse saturo. Ciò può estendere l'intervallo dinamico lineare delle curve di calibrazione. Questa opzione è disponibile solo durante l'impostazione dei valori generali predefiniti dell'algoritmo e non durante la creazione del metodo di quantificazione o la revisione dei singoli picchi, in quanto non è utile usare questa impostazione solo per alcuni picchi.
Saturation Threshold	I picchi sopra questa soglia sono considerati saturi. Questo valore dipende dal rivelatore.
S/N Threshold	Questo parametro non influisce sull'integrazione. Viene utilizzato solo a fini di reporting. I picchi sotto la soglia segnale non vengono riportati.
Confidence Threshold	Utilizzata per filtrare potenziali picchi che sono falsi positivi. Il valore predefinito è 50%, che è generalmente adatto. Tuttavia, è possibile utilizzare un valore maggiore per i dati con un notevole rumore o per quelli aventi una larghezza di picco che varia notevolmente da campione a campione.
Use Global Baseline	Selezionare per utilizzare l'intero cromatogramma come linea di base. Se la casella non è selezionata, il software valuta le modifiche alla linea di base localmente.
Allow Non-Linear Baseline	Selezionare tra una linea di base lineare o non lineare. Una linea di base non lineare stima la linea di base sotto ciascun picco. Una linea di base lineare inserisce una linea tra i punti all'inizio e alla fine di quel gruppo specifico di picchi.

## Parametri dell'algoritmo di integrazione MQ4

Figura A-2 Finestra di dialogo Integration Defaults

Etichetta	Descrizione
Integration Algorithm	L'algoritmo di integrazione selezionato.
Gaussian Smoothing Width	Viene applicato un algoritmo di smoothing Gaussiano standard con metà larghezza pari al valore specificato (in punti). Per i cromatogrammi con rumore, un valore vicino all'effettiva larghezza del picco (a metà altezza) rappresenta una buona scelta. Per dati con meno rumore, può essere utilizzato un valore inferiore.
Expected RT	Il tempo di ritenzione previsto, in minuti. Inizialmente è impostato sul tempo di ritenzione del picco più grande nel cromatogramma per il campione rappresentativo utilizzato per generare il metodo di quantificazione.
RT Half Window	La metà della finestra del tempo di ritenzione totale in secondi. Per rilevare e segnalare un picco, la differenza tra il suo apice e il tempo di ritenzione previsto deve essere inferiore o uguale a questo valore.

Etichetta	Descrizione
Update Expected RT	<p>Indica se il tempo di ritenzione previsto deve essere regolato sul momento utilizzando altri componenti. Impiega informazioni aggiuntive per compensare gli scostamenti del tempo di ritenzione da campione a campione. Le opzioni disponibili sono:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>No:</b> Il tempo di ritenzione previsto è utilizzato così com'è.</li> <li>• <b>Group:</b> Applicabile ai componenti che sono stati assegnati a gruppi per i quali tutti i componenti di un dato gruppo hanno lo stesso tempo di ritenzione (transizioni diverse per lo stesso composto). Il tempo di ritenzione previsto è aggiornato utilizzando la posizione della sovrapposizione massima dei singoli cromatogrammi per il gruppo (per un dato campione) all'interno della finestra RT. L'idea è di impostare l'RT previsto sull'RT probabile per l'effettivo componente in questione (dove è previsto un picco in ogni cromatogramma).</li> </ul> <p>Se per un gruppo sono definiti almeno due standard interni, solo i loro cromatogrammi vengono utilizzati per determinare il nuovo tempo di ritenzione. Altrimenti, vengono utilizzati tutti i cromatogrammi del gruppo. L'intenzione è solo quella di utilizzare quei cromatogrammi per i quali è più probabile che il componente sia presente ad un livello ragionevole.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>IS:</b> Per gli analiti che utilizzano uno standard interno, viene determinato prima l'effettivo tempo di ritenzione del picco standard interno (per il campione corrispondente). L'RT previsto per l'analita è determinato moltiplicando l'RT previsto specificato per il rapporto tra RT effettivo e previsto per lo standard interno. Questa opzione viene talvolta indicata come tempo di ritenzione relativo.</li> </ul>
Report Largest Peak	<p>Se si trova più di un picco in un cromatogramma, all'interno di una finestra di tempo di ritenzione, soddisfacendo la larghezza e l'altezza minime, questo parametro controlla il picco che viene segnalato. Quando si seleziona la casella di controllo, viene segnalato il picco con l'area più grande. Quando si deselecta la casella, viene segnalato il picco con il tempo di ritenzione più vicino al tempo previsto.</p> <p>Si consiglia di attivare questa opzione, a meno che i tempi di ritenzione siano molto riproducibili.</p>
Min. Peak Height	Questo parametro non influisce sull'integrazione. Viene utilizzato solo a fini di reporting. Eventuali picchi con intensità inferiore a questo valore sono considerati non di interesse e non vengono utilizzati.
Min. Peak Width	Eventuali picchi più stretti di questo valore sono considerati con rumore di fondo e non vengono utilizzati.
Noise Percentage	<p>Questo parametro è utilizzato per stimare il livello di rumore di fondo nei cromatogrammi. La percentuale specificata dei punti dati con l'intensità più piccola è considerata con rumore di fondo.</p> <p>I valori tipici variano da 20% a 60%. Se non si trovano picchi piccoli in presenza di picchi più grandi, questo valore deve essere abbassato.</p>

## Parametri dell'algoritmo di integrazione

Etichetta	Descrizione
Baseline Sub. Window	<p>Dopo lo smussamento, ma prima di altre elaborazioni, nei cromatogrammi si esegue la sottrazione della linea di base per rimuovere le gobbe nei dati. Per ogni punto dato, la linea di base è calcolata utilizzando i punti dati a sinistra e a destra del punto attuale con l'intensità minima (nella finestra di sottrazione).</p> <p>Il valore esatto di questo parametro non è critico, a condizione che sia impostato su un valore leggermente maggiore della larghezza di picco prevista.</p>
Peak Splitting	<p>Questo parametro controlla se un picco potenzialmente rumoroso è rilevato come picco singolo o come due (o più) picchi separati. Se il calo tra due picchi potenziali è inferiore al valore specificato, si rileva un picco singolo. In caso contrario, vengono rilevati due picchi.</p> <p>Impostando questo parametro su un valore elevato, i picchi rumorosi non verranno divisi e rilevati come due picchi separati. Tuttavia, è necessario utilizzare un valore più piccolo se sono presenti due picchi distinti strettamente eluiti (sovrapposti).</p>

# Equazioni di regressione

## B

Questa sezione descrive le equazioni utilizzate per calcolare le curve di regressione. Nelle seguenti equazioni,  $x$  rappresenta la concentrazione dell'analita per i campioni **Standard**, mentre  $y$  rappresenta l'area o l'altezza del picco corrispondente. Le variabili esatte utilizzate per la regressione dipendono dal fatto che si utilizzi uno standard interno e dal fatto che si utilizzi l'area o l'altezza del picco come mostrato nella [Tabella B-1](#).

**Tabella B-1 Variabili di regressione**

Si utilizza uno standard interno?	Si utilizza un'area?	$x$	$y$
Sì	Sì	$C_a / C_{is} / DF$	$A_a / A_{is}$
Sì	No	$C_a / C_{is} / DF$	$H_a / H_{is}$
No	Sì	$C_a / DF$	$A_a$
No	No	$C_a / DF$	$H_a$

dove:

- $C_a$  = effettiva concentrazione analita
- $C_{is}$  = concentrazione standard interno
- $DF$  = fattore di diluizione
- $A_a$  = area picco analita
- $A_{is}$  = area picco standard interno
- $H_a$  = altezza picco analita
- $H_{is}$  = altezza picco standard interno

## Fattori di pesatura

La [Tabella B-2](#) mostra come il fattore di pesatura (w nelle equazioni seguenti) è calcolato per ciascuno dei sette tipi di pesatura.

**Tabella B-2 Fattori di pesatura**

Tipo di pesatura	Peso (w)
Nessuno	Sempre 1,0.
1/x	Se $ x  < 10^{-5}$ , allora $w = 10^5$ . Diversamente, $w = 1 /  x $ .
1 / x <sup>2</sup>	Se $ x  < 10^{-5}$ , allora $w = 10^{10}$ . Diversamente, $w = 1 / x^2$ .
1/y	Se $ y  < 10^{-8}$ , allora $w = 10^8$ . Diversamente, $w = 1 /  y $ .
1 / y <sup>2</sup>	Se $ y  < 10^{-8}$ , allora $w = 10^{16}$ . Diversamente, $w = 1 / y^2$ .
ln x	Se $x < 0$ , allora sarà generato un errore. Se $x < 10^{-5}$ , allora $w = \ln 10^5$ . Diversamente, $w =  \ln x $ .
ln y	Se $y < 0$ , allora sarà generato un errore. Se $y < 10^{-8}$ , allora $w = \ln 10^8$ . Diversamente, $w =  \ln y $ .

## Regressioni

Questa sezione riporta le equazioni per ciascun tipo di regressione. Nelle seguenti equazioni, x, y e w sono definiti come in precedenza. Tutte le somme sono calcolate su tutti i campioni **Standard**, a eccezione degli **Standard** contrassegnati come non utilizzati.

Il coefficiente di correlazione è calcolato come:

$$r = (\sum w \sum w y y_c - \sum w y \sum w y_c) / \sqrt{(D_y D_{yc})}$$

dove:

$$D_y = \sum w \sum w y^2 - (\sum w y)^2$$

$y_c$  = Valore y calcolato usando l'equazione appropriata seguente

$$D_{yc} = \sum w \sum w y_c^2 - (\sum w y_c)^2$$

## Lineare

L'equazione di calibrazione lineare è:

$$y = mx + b$$

La pendenza e l'intercetta sono calcolate come:

$$m = (\sum w \sum wxy - \sum wx \sum wy) / D_x$$

$$b = (\sum wx^2 \sum wy - \sum wx \sum wxy) / D_x$$

dove:

$$D_x = \sum w \sum wx^2 - (\sum wx)^2$$

## Lineare attraverso lo zero

L'equazione di calibrazione lineare attraverso lo zero è:

$$y = mx$$

La pendenza è calcolata come:

$$m = \sum wxy / \sum wx^2$$

## Fattore di risposta medio

La calibrazione del fattore di risposta medio è:

$$y = mx$$

Si tratta della stessa equazione utilizzata per la regressione lineare attraverso lo zero. Tuttavia, la pendenza è calcolata in modo diverso:

$$m = \sum w(y/x) / \sum w$$

e la deviazione standard del fattore di risposta è la seguente:

$$\sigma = \sqrt{(nD/(n-1)) / \sum w}$$

dove:

$$D = \sum w^* \sum wy^2 / x^2 - (\sum wy/x)^2$$

---

**Nota:** i punti il cui valore x è zero sono esclusi dalle somme.

---

Se la linea di punti è caratterizzata da qualche tratto lineare e qualche curvatura, utilizzare la regressione di potenza al posto di quella lineare o quadratica al fine di produrre una linea da qualche parte tra questi adattamenti.

### Quadratica

L'equazione di calibrazione quadratica è:

$$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$$

I coefficienti polinomiali sono calcolati come:

$$a_2 = (b_2/b_0 - b_5/b_3) / (b_1/b_0 - b_4/b_3)$$

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$$

$$a_0 = (\sum w y - a_1 \sum w x - a_2 \sum w x^2) / \sum w$$

dove:

$$b_0 = \sum w x / \sum w - \sum w x^2 / \sum w x$$

$$b_1 = \sum w x^2 / \sum w - \sum w x^3 / \sum w x$$

$$b_2 = \sum w x / \sum w - \sum w x y / \sum w x$$

$$b_3 = \sum w x^2 / \sum w x - \sum w x^3 / \sum w x^2$$

$$b_4 = \sum w x^3 / \sum w x - \sum w x^4 / \sum w x^2$$

$$b_5 = \sum w x y / \sum w x - \sum w x^2 y / \sum w x^2$$

### Potenza

L'equazione di calibrazione per la funzione di potenza è:

$$y = ax^p$$

Le equazioni per la calibrazione lineare sono utilizzate come precedentemente descritto al fine di calcolare la pendenza (m) e l'intercetta (b), ad eccezione del fatto che il valore x in tali equazioni viene sostituito da ln x e il valore y viene sostituito da ln y. Una volta eseguita tale operazione, i valori a e p vengono calcolati come segue:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Se alcuni valori x o y sono negativi o zero, viene generato un errore.

### Wagner

L'equazione di calibrazione di Wagner è:

$$\ln y = a_2 (\ln x)^2 + a_1 (\ln x) + a_0$$

Le equazioni per la calibrazione quadratica sono utilizzate come precedentemente descritto per calcolare  $a_0$ ,  $a_1$  e  $a_2$ , ad eccezione del fatto che il valore x in tali equazioni viene sostituito da ln x e il valore y viene sostituito da ln y.

Se alcuni valori x o y sono negativi o zero, viene generato un errore.



## Hill

L'equazione di calibrazione di Hill è:

$$y = (a + bx^n) / (c + x^n)$$

Non è possibile fornire una funzione analitica per la soluzione di a, b, c, n. Al contrario, i coefficienti vengono determinati tramite il metodo iterativo Levenberg-Marquardt.

## Calcolo delle concentrazioni finali

Questa sezione spiega come calcolare le concentrazioni finali dalle equazioni di regressione risultanti, usando la concentrazione IS e il fattore di diluizione utilizzati nella concentrazione originale.

### Lineare

$$x = (y - b) / m$$

### Lineare attraverso zero e Fattore di risposta medio

$$x = y / m$$

### Quadratica

$$x = (-a_1 \pm (a_1^2 - 4 \times a_2 \times (a_0 - y))^{0,5}) / (2 \times a_2)$$

- Se entrambe le radici + e - rientrano nell'intervallo degli standard, viene generato un errore poiché non esiste una soluzione univoca.
- Se esattamente una delle due radici rientra nell'intervallo di concentrazione degli standard, viene riportato tale valore.
- Se entrambe le radici sono inferiori allo standard di concentrazione minimo, viene riportata la radice +.
- Se entrambe le radici sono superiori allo standard di concentrazione massimo, viene riportata la radice -.
- Se la radice - è inferiore allo standard minimo e la radice + è maggiore dello standard massimo, viene riportata la radice - se la differenza rispetto allo standard di concentrazione minimo è inferiore alla differenza della radice + rispetto alla concentrazione massima. Diversamente, viene riportata la radice +.

### Potenza

$$x = (y / a)^{(1 / p)}$$

### Wagner

La stessa equazione del caso quadratico viene usata per il calcolo principale, ad eccezione del fatto che il valore x viene sostituito da ln x e y viene sostituito da ln y.

## Hill

$$x = ((a - y \times c) / (y - b))^{(1 / n)}$$

Questa sezione descrive come usare la funzione di creazione rapporti nel software per creare rapporti formattati dalle **Results Table**.

## Creazione di rapporti

Questo software utilizza i documenti Microsoft Word come modelli predefiniti. Quando viene creato un rapporto, i valori sono estratti dalla Results Table e dai file associati più recenti.

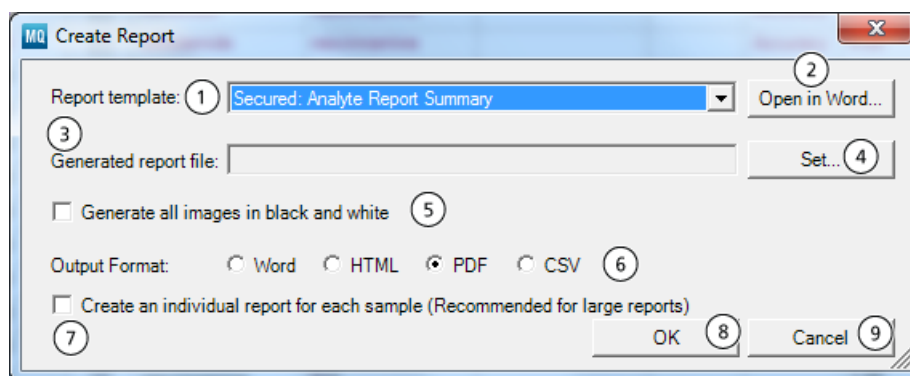
Gli utenti sono responsabili della convalida dei modelli personalizzati. L'utente può solo modificare il formato numero nell'editor dei modelli di rapporti. Se il formato numero non è specificato nel modello, nel rapporto verrà utilizzato il formato presente in **Results Table Column Setting**. Verificare che venga utilizzato il numero corretto di posizioni decimali.

I modi controllati per emettere i dati dal software sono l'esportazione delle **Results Table**, il trasferimento a LIMS e la creazione di rapporti. Le altre fonti di emissione di dati come copia e incolla dalle **Results Table** non sono controllati. Gli utenti non devono utilizzare questi metodi di emissione incontrollati per scopi regolamentati.

Spostarsi in qualunque cartella per accedere e memorizzare i dati. Per impostazione predefinita vengono aperte le precedenti posizioni di apertura dei modelli precedenti e di salvataggio dei rapporti.

1. Aprire una **Results Table**.
2. Fare clic su **File > Create Report and Save Results Table**.

**Figura C-1 Finestra di dialogo Create Report**



Elemento	Descrizione
1	Report template: selezionare un modello dall'elenco.
2	Open in Word: fare clic per aprire il modello di rapporto specificato direttamente in Microsoft Word per verificarlo o modificarlo.
3	Generated report file: mostra il nome del file del rapporto.
4	Set: fare clic per specificare il nome di file del rapporto da generare.
5	Generate all images in black and white: selezionare la casella di spunta per stampare in bianco e nero.
6	Output Format: Word, HTML, PDF o CSV. PDF è il metodo di output più sicuro perché non consente di modificare il rapporto.
7	Create an individual report for each sample (Recommended for large reports)
8	Fare clic su <b>OK</b> per stampare il rapporto.
9	Fare clic su <b>Cancel</b> per chiudere la finestra di dialogo senza creare un rapporto.

3. Selezionare un modello dall'elenco Report template. I modelli dei rapporti vengono memorizzati nelle seguenti posizioni:

- Per Windows 7 e 10: C:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

Per una descrizione dei modelli, fare riferimento a [Modelli di rapporti a pagina 133](#).

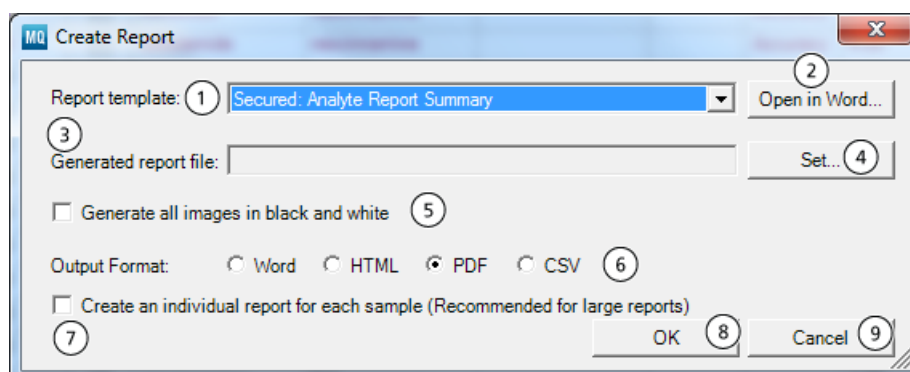
4. Fare clic su **Set** per creare il nome e la posizione del rapporto.
5. Fare clic su **OK** per generare il rapporto.

## Creazione di modelli di rapporto personalizzati

I modi controllati per emettere i dati dal software sono l'esportazione delle **Results Table**, il trasferimento a LIMS e la creazione di rapporti. Le altre fonti di emissione di dati come copia e incolla dalle **Results Table** non sono controllati. Gli utenti non devono utilizzare questi metodi di emissione incontrollati per scopi regolamentati.

1. Aprire o creare una **Results Table**.
2. Fare clic su **File > Create Report and Save Results Table**.

Figura C-2 Finestra di dialogo Create Report



Elemento	Descrizione
1	Report template: selezionare un modello dall'elenco.
2	Open in Word: fare clic per aprire il modello di rapporto specificato direttamente in Microsoft Word per verificarlo o modificarlo.
3	Generated report file: mostra il nome del file del rapporto.
4	Set: fare clic per specificare il nome di file del rapporto da generare.
5	Generate all images in black and white: selezionare la casella di spunta per stampare in bianco e nero.
6	Output Format: Word, HTML, PDF o CSV. PDF è il metodo di output più sicuro perché non consente di modificare il rapporto.
7	Create an individual report for each sample (Recommended for large reports)
8	Fare clic su <b>OK</b> per stampare il rapporto.
9	Fare clic su <b>Cancel</b> per chiudere la finestra di dialogo senza creare un rapporto.

3. Selezionare un modello dall'elenco **Report template**.
4. Fare clic su **Open in Word**.

Si apre il modello docx e viene visualizzato a destra l'editor del modello Reporter. L'editor del modello viene automaticamente compilato con le informazioni sui tag.

5. Modificare il modello, come richiesto.
6. Salvare il modello.

## Modelli di rapporti

La seguente tabella descrive i modelli disponibili contenuti in <unità>:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

## Report

---

Qualora si crei un modello personalizzato, l'utente è responsabile della relativa convalida. L'utente può solo modificare il formato numero nell'editor dei modelli di rapporti. Se il formato numero non è specificato nel modello, nel rapporto verrà utilizzato il formato presente nella finestra **Results Table Column Settings**. L'utente ha la responsabilità di validare il modello di rapporto personalizzato.

Alcuni modelli di rapporti usano query. Gli utenti possono creare query usando formule basate su Microsoft Excel per valutare, manipolare e presentare i dati dalla Results Table in un rapporto. Il contrassegno Metafield nel modello del rapporto indica al rapporto il nome del file query che deve usare. Per usare le query, il nome del file query deve essere specificato nel contrassegno MetaField nel modello di rapporto. Le query devono anche avere l'estensione ".query" per essere riconosciute come tali. Le query devono essere memorizzate nella cartella Reporter dove sono memorizzati i modelli dei rapporti.

Consigliamo all'utente di convalidare i risultati generati quando si utilizza un modello Reporter, specialmente quando si utilizzano le query in un modello. Se si apportano modifiche al modello del rapporto dopo la convalida, il modello del rapporto dovrà essere ri-convalidato. Le modifiche al modello del rapporto includono qualunque modifica ai contrassegni o alle query di reporter.

**Tabella C-1 Descrizioni dei modelli di rapporti**

Modello	Descrizione
Analyte Report Summary	Rapporto sicuro che mostra una tabella di riepilogo dei campioni per ogni analita. Questo modello di rapporto è adatto per una Results Table con gruppi definiti.
Calibration Curves Template	Rapporto che mostra informazioni sui file, tabella delle statistiche (standard) e curva di calibrazione per gli analiti, una pagina per ogni analita.
Metric Plot_IS Area	Rapporto sicuro che mostra per ogni standard interno una sezione comprendente le informazioni sui file e i Metric Plot dell'area di picco IS.
Per Analyte Ion Ratio Report	Rapporto sicuro che mostra per ogni analita una sezione comprendente le informazioni sui file, la Results Table, le curve di calibrazione per ogni analita e i cromatogrammi inclusi IS e ogni analita. Questo modello è adatto per una Results Table con gruppi definiti.
Per Analyte Report	Rapporto sicuro che mostra per ogni analita una sezione comprendente le informazioni sui file, la Results Table, le curve di calibrazione per ogni analita e i cromatogrammi inclusi IS e ogni analita. Questo modello è adatto per una Results Table con gruppi definiti.
Per Sample Ion Ratio Report	Rapporto sicuro che mostra per ogni campione una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sui campioni, la Results Table degli analiti, le curve di calibrazione per ogni analita e i cromatogrammi, inclusi IS e ciascun analita. Questo modello è adatto per una Results Table con gruppi definiti.
Per Sample Report	Rapporto sicuro che mostra per ogni campione una sezione contenente informazioni sui file, informazioni sui campioni, la Results Table degli analiti, le curve di calibrazione per ogni analita e i cromatogrammi, inclusi IS e ciascun analita. Questo modello è adatto per una Results Table con gruppi definiti.

Tabella C-1 Descrizioni dei modelli di rapporti (continua)

Modello	Descrizione
Sample Report Summary	Rapporto sicuro che mostra per ogni campione una tabella di riepilogo degli analiti. Questo modello di rapporto è adatto per una Results Table con gruppi definiti.
Sample Report with Concentration Threshold.docx	Rapporto che per ogni campione sconosciuto mostra informazioni sui file, informazioni sui campioni e una tabella di riepilogo dei risultati. La tabella di riepilogo dei risultati include soglie di concentrazione specifiche dell'analita. Gli analiti vengono contrassegnati come positivi se la concentrazione è superiore alla soglia. Questo modello fa riferimento al file Sample Report With Concentration Threshold.query. L'utente può modificare il file query per specificare i nomi degli analiti, i gruppi di analiti (es. classe dei composti) e le soglie di concentrazione degli analiti.

## Tag dei modelli di rapporto

Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
Tag dallo schema del provider di dati del software Analyst <sup>®</sup> MD		
Analyte	ForEach	Esegue in loop tutti gli analiti, nell'ordine con cui sono stati definiti nella Results Table.
AnalyteGroup	ForEach	Esegue in loop solo i vari gruppi di analiti. I tag TextField o PictureField recuperano i valori dello ione Quantifier. Se i tag di questo tipo contengono un tag For_Each aggiuntivo che specifica l'attributo Ratiolons, il loop interno si riferisce solo agli ioni Qualifier che fanno parte del gruppo corrente.
InternalStandard	ForEach	Esegue in loop tutti gli standard interni.
QCStatistics	ForEach	Esegue in loop tutte le statistiche Quality Control.
Ratiolons	ForEach	Fare riferimento a AnalyteGroup.
Sample	ForEach	Esegue in loop ogni singolo campione. Viene usato, ad esempio, insieme all'impostazione del tag TextField per inserire il nome del campione.
Statistics	ForEach	Esegue in loop tutte le statistiche Standards.

Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
MQ_Group	ForEach	Esegue in loop i vari gruppi, compresi i gruppi o i sottogruppi IS. I tag TextField o PictureField recuperano i valori dello ione Quantifier. Se i tag di questo tipo contengono un tag For_Each aggiuntivo che specifica l'attributo Ratiolons, il loop interno si riferisce solo agli ioni Qualifier che fanno parte del gruppo corrente.
MQ_AnalyteRatiolons	ForEach	Fare riferimento a MQ_Group solo per il qualificatore dell'analita.
MQ_ISRatiolons	ForEach	Fare riferimento a MQ_Group solo per il qualificatore IS.
AnalyteRatio	PictureField	Mostra le sovrapposizioni dei cromatogrammi di quantificatore e qualificatore del sottogruppo di analiti. Mostra la riga intera al centro per indicare il rapporto ioni previsto. Linea centrale = Altezza del picco del quantificatore x Rapporto ioni previsto. Mostra il limiti inferiore e superiore dell'intervallo di rapporto ioni accettabile con righe tratteggiate. Limite inferiore = Altezza del picco del quantificatore x Rapporto ioni previsto x ((100-tolleranza)/100). Limite superiore = Altezza del picco del quantificatore x Rapporto ioni previsto x ((tolleranza)/100).
AnalyteRatioNoLines	PictureField	Mostra le sovrapposizioni dei cromatogrammi di quantificatore e qualificatore del sottogruppo di analiti senza le righe.
Calibration	PictureField	Mostra la curva di calibrazione dell'analita.
IS_AnalyteRatio	PictureField	Mostra le sovrapposizioni dei cromatogrammi di quantificatore e qualificatore del sottogruppo di standard interni. Mostra la riga intera al centro per indicare il rapporto ioni previsto. Linea centrale = Altezza del picco del quantificatore x Rapporto ioni previsto. Mostra il limiti inferiore e superiore dell'intervallo di rapporto ioni accettabile con righe tratteggiate. Limite inferiore = Altezza del picco del quantificatore x Rapporto ioni previsto x ((100-tolleranza)/100) Limite superiore = Altezza del picco del quantificatore x Rapporto ioni previsto x ((tolleranza)/100)



Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField	Mostra le sovrapposizioni dei cromatogrammi di quantificatore e qualificatore del sottogruppo di standard interni senza le righe.
IS_PeakReview	PictureField	Mostra il cromatogramma dello standard interno.
Overlay_All_XIC	PictureField	Mostra la sovrapposizione dei cromatogrammi di tutti gli analiti nel campione.
Overlay_All_XIC_with_IntStd	PictureField	Mostra la sovrapposizione dei cromatogrammi di tutti gli analiti e gli standard interni nel campione.
Overlay_All_XIC_with_IntStd_NoLegend	PictureField	Mostra la sovrapposizione dei cromatogrammi di tutti gli analiti e gli standard interni nel campione, senza la legenda.
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField	Mostra la sovrapposizione dei cromatogrammi di tutti gli analiti nel campione, senza la legenda.
PeakReview	PictureField	Mostra il cromatogramma dell'analita.
TIC	PictureField	Mostra il TIC del campione.
Acquisition_Date	TextField	La data in cui è stato acquisito il campione. Mostra "Acquisition Date & Time".
Acquisition_Duration_Minutes	TextField	Mostra il periodo di tempo di acquisizione dei dati del campione, espresso in minuti.
Acquisition_Method	TextField	Il metodo di acquisizione utilizzato per acquisire i dati del campione. Mostra "Acq. Method Name".
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField	Mostra "Component Comment".
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField	Mostra il valore R di regressione.
Analyte_AnalyteRegression	TextField	Mostra l'equazione di regressione, tra cui il valore r e la pesatura.
Analyte_Concentration	TextField	La concentrazione effettiva dell'analita, secondo la definizione dell'utente nella Results Table. Mostra "Actual Concentration".
Analyte_Expected_RT	TextField	Il tempo di ritenzione previsto per un analita specifico, in minuti. Mostra "Expected RT".

Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
Analyte_Integration_Type	TextField	Il tipo di integrazione usato per i picchi dell'analita specifico. I picchi possono essere integrati manualmente o usando i parametri disponibili. Mostra "Integration Type".
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField	Il rapporto dell'area del picco dell'analita rispetto all'area del picco da una soluzione standard interno. Calcolato come Area picco analita / Area picco IS. Mostra "Area Ratio".
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField	Il rapporto dell'altezza in cicli al secondo (cps) del picco dell'analita rispetto all'altezza del picco da una soluzione standard interno. Calcolato come Altezza picco analita / Altezza picco IS. Mostra "Height Ratio".
Analyte_Mass_Ranges	TextField	La transizione MRM definita dall'utente per un analita, definita nel metodo di acquisizione usato. Mostra "Mass Info".
Analyte_Peak_Area	TextField	L'area di picco per un analita in un cromatogramma. Mostra "Area".
Analyte_Peak_Height	TextField	L'altezza del picco dell'analita, in conteggi al secondo (cps). Mostra "Height".
Analyte_Peak_Name	TextField	Il nome definito dall'utente assegnato a campioni specifici durante la creazione della Results Table. Mostra "Component Name".
Analyte_Peak_Width	TextField	La larghezza del picco dell'analita, in minuti. Mostra "Total Width".
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	La larghezza al 50% dell'altezza del picco per un picco dell'analita, in minuti. Mostra "Width at 50%".

Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
AnalyteQuantPeak_info	TextField	Mostra il informazioni di integrazione, compresi algoritmo e parametri.
Analyte_QTY	TextField	La Quantità dell'analita, calcolata dalla concentrazione calcolata dell'analita e dal rapporto peso/volume (per esempio, ng per analita per grammo di campione). Mostra "Quality".
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField	È il primo analita del gruppo.
Analyte_Processing_Algo	TextField	Mostra l'algoritmo di integrazione.
Analyte_Retention_Time	TextField	Il tempo di ritenzione effettivo per un analita in un cromatogramma usato per generare una Results Table. Mostra "Retention Time".
Analyte_R_Squared	TextField	Mostra il valore di regressione $R^2$ .
Analyte_RT_Window	TextField	L'intervallo di tempo, in secondi, in cui si prevede debba apparire un picco dell'analita. Il centro di questo intervallo è il tempo di ritenzione previsto per l'analita. Mostra il valore di "RT Half Window" dei parametri di integrazione.
Analyte_Signal_To_Noise	TextField	Il rapporto segnale/rumore per un picco analita specifico. Mostra "Signal / Noise".
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField	La pendenza della linea di base per un analita, acquisita in termini di % Intensità/minuti. Mostra "Slope of Baseline" per l'analita.
Analyte_Start_Scan	TextField	Scansione di avvio analita.
Analyte_Start_Time	TextField	Il momento in cui inizia il picco analita, in minuti. Mostra "Start Time".
Analyte_Stop_Scan	TextField	Scansione di arresto analita.
Analyte_Stop_Time	TextField	Il momento in cui finisce il picco analita, in minuti. Mostra "End Time".

Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
Analyte_Unit	TextField	Le unità usate per rappresentare la concentrazione per gli analiti. L'unità standard per le Results Table in ng/ml. Mostra "Conc. Units".
Analyte_Use_Record	TextField	Una casella di selezione che determina se un record specifico sarà usato per l'analisi successiva come le curve di calibrazione. Mostra "Used".
Analyte_Count	TextField	Mostra il numero totale di analiti.
Analyte_Index	TextField	Mostra il numero di ordine dell'analita nel campione, partendo da 0.
Calculated_Accuracy	TextField	L'accuratezza per il picco analita, ricavata confrontando la concentrazione dell'analita effettiva e la concentrazione dell'analita calcolata. Mostra "Accuracy".
Calculated_Concentration	TextField	Concentrazione calcolata per il picco analita eseguita dal software Analyst <sup>®</sup> MD usando l'area di picco. Mostra "Calculated Concentration".
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField	Il tempo di ritenzione per un analita o un record specifico standard interno in una Results Table. Mostra "Relative RT".
IS_Concentration	TextField	La concentrazione effettiva di uno standard interno, secondo la definizione dell'utente nella Results Table. Mostra "IS Actual Concentration".
IS_Expected_RT	TextField	Il tempo di ritenzione previsto di un picco dello standard interno, in minuti. Mostra "IS Expected RT".
IS_Integration_Type	TextField	Il tipo di integrazione usato per picchi dello standard interno specifici. I picchi possono essere integrati manualmente o usando i parametri disponibili. Mostra "IS Integration Type".

Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
IS_Mass_Ranges	TextField	La transizione MRM definita dall'utente per uno standard interno, definita nel metodo di acquisizione usato. Mostra "IS Mass Info".
IS_Peak_Area	TextField	L'area di picco per uno standard interno. Mostra "IS Area".
IS_Peak_Height	TextField	L'altezza del picco dello standard interno, in conteggi al secondo (cps). Mostra "IS Height".
IS_Peak_Name	TextField	Il nome definito dall'utente assegnato a uno standard interno specifico durante la creazione della Results Table. Mostra "IS Name".
IS_Peak_Width	TextField	La larghezza del picco dell'analita, in minuti. Mostra "IS Total Width".
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	La larghezza del picco, in minuti, per un picco dello standard interno a metà della sua altezza, in conteggi al secondo (cps). Mostra "IS Width at 50%".
IS_Retention_Time	TextField	Il tempo di ritenzione effettivo per uno standard interno. Mostra "IS Retention Time".
IS_RT_Window	TextField	L'intervallo di tempo, in secondi, in cui si prevede debba apparire un picco dello standard interno. Il centro di questo intervallo è il tempo di ritenzione previsto per lo standard interno. Mostra il valore di "RT Half Window" dei parametri di integrazione per IS.
ISQuantPeak_Info	TextField	Mostra le informazioni di integrazione, compresi algoritmo e parametri.
IS_Signal_To_Noise	TextField	Il rapporto segnale/rumore di un picco dello standard interno. Mostra "IS Signal / Noise".

Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
IS_Slope_of_Baseline	TextField	La curva della linea di base per uno standard interno, acquisita in termini di % Intensità/ minuti.  Mostra "Slope of Baseline" per lo standard interno.
IS_Start_Scan	TextField	Scansione di avvio standard interno.
IS_Start_Time	TextField	Il momento in cui inizia il picco dello standard interno, in minuti.  Mostra "IS Start Time".
IS_Stop_Scan	TextField	Tempo di arresto standard interno.
IS_Stop_Time	TextField	Il momento in cui finisce il picco dello standard interno, in minuti.  Mostra "IS End Time".
IS_Units	TextField	Le unità usate per rappresentare la concentrazione per gli standard interni. L'unità standard per le Results Table in ng/ml.  Mostra "Conc. Units" per IS.
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField	Mostra il valore della tolleranza max. di precisione per LLOQ nella finestra di dialogo Outlier Setting del metodo di quantificazione.
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField	Mostra il valore della tolleranza max. di precisione per gli standard nella finestra di dialogo Outlier Setting del metodo di quantificazione.
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField	Mostra il valore della tolleranza max. di precisione per QC nella finestra di dialogo Outlier Setting del metodo di quantificazione.
MQ_Analyte_Group_Name	TextField	Mostra il nome del gruppo degli analiti.
MQ_Created_With	TextField	Mostra il nome del prodotto utilizzato per generare il rapporto.
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField	Mostra "Expected Ion Ratio".
MQ_Group_Index	TextField	Mostra il numero di ordine del gruppo nel campione, partendo da 1. Usare con il loop ForEach MQ_Group.

Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
MQ_Group_Name	TextField	Mostra il nome del gruppo. Usare con il loop ForEach MQ_Group.
MQ_Ion_Ratio	TextField	Mostra "Ion Ratio".
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField	Mostra il valore della tolleranza max. del rapporto ioni per l'analita nella finestra di dialogo Outlier Setting del metodo di quantificazione.
MQ_IS_Group_Name	TextField	Mostra il nome del gruppo dello standard interno.
MQ_IsRowHidden	TextField	Mostra la riga nascosta nella Results Table.
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField	Mostra il valore del limite inferiore della concentrazione calcolata nella finestra di dialogo Outlier Setting del metodo di quantificazione.
MQ_Outlier_Reasons	TextField	Mostra "Outlier Reasons".
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField	Mostra "Asymmetry Factor".
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField	Mostra "Baseline Delta / Height".
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField	Mostra "End Time at 10%".
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField	Mostra "End Time at 5%".
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField	Mostra "Points Across Baseline".
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField	Mostra "Points Across Half Height".
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField	Mostra "Start Time at 10%".
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField	Mostra "Start Time at 5%".
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField	Mostra "Tailing Factor".
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField	Mostra "Width at 10%".
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField	Mostra "Width at 5%".
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField	Mostra "Mass Range" per il quantificatore nel gruppo degli analiti.
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField	Mostra "Area" per il quantificatore nel gruppo degli analiti.
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField	Mostra "Calculated Concentration" per il quantificatore nel gruppo degli analiti.

**Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)**

<b>Tipo</b>	<b>Tipo di campo</b>	<b>Descrizione del tag</b>
MQ_Report_Generation_Date	TextField	Mostra la data di generazione del rapporto, che indica le impostazioni delle colture dal software.
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField	Mostra il valore del limite superiore della concentrazione calcolata nella finestra di dialogo Outlier Setting del metodo di quantificazione.
Query_Name	TextField	Il nome della query a cui si fa riferimento nel modello di rapporto (se applicabile).
Record_Modified	TextField	Mostra "Modified".
Reporter_Template_Name	TextField	Il nome del modello di rapporto usato per creare il rapporto.
ResultTbl_CreateDate	TextField	Mostra la data di creazione della Results Table.
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField	Mostra l'algoritmo di elaborazione usato per elaborare la Results Table (es. MQ4, SignalFinder1).
ResultTbl_Name	TextField	Mostra il nome di file per la Results Table.
ResultTbl_ProjName	TextField	Mostra il nome di progetto in cui è stata salvata la Results Table.
Sample_Comment	TextField	Un commento correlato al campione. Mostra "Sample Comment".
Sample_Dilution_Factor	TextField	Il numero totale di volumi di unità in cui si è dissolto il campione. Mostra "Dilution Factor".
Sample_File_Name	TextField	Il nome del file di dati in cui sono archiviati i dati grezzi per il campione specifico. Mostra "Original Filename".
Sample_ID	TextField	Un valore definito dall'utente per elencare gli ID specifici per ciascun campione o analiti nella Results Table. Mostra "Sample ID".
Sample_Index	TextField	Mostra "Index".
Sample_Count	TextField	Mostra il numero totale di analiti.



Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
Sample_InjectionVolume	TextField	Il volume di iniezione usato nell'autocampionatore utilizzato quando è stato iniettato il campione originale, secondo la definizione data nel metodo di acquisizione. Mostra "Injection Volume".
Sample_Instrument	TextField	Mostra il tipo di strumento usato per acquisire il campione, estratto dal file wiff.
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField	Mostra il numero seriale dello strumento usato per acquisire il campione, estratto dal file wiff.
Sample_Name	TextField	Il nome definito dall'utente assegnato al campione specifico durante la creazione della Results Table. Mostra "Sample Name".
Sample_Operator	TextField	L'utente connesso al momento dell'acquisizione. Mostra "Operator Name".
Sample_Plate_Number	TextField	La posizione del piatto campioni nell'autocampionatore usato durante l'acquisizione dei campioni. Mostra "Plate Number".
Sample_Rack_Number	TextField	La posizione del rack campioni nell'autocampionatore usato durante l'acquisizione dei campioni. Mostra "Rack Number".
Sample_Type	TextField	Il valore definito dall'utente che indica da quale tipo di campione proviene ciascuna iniezione specifica. Per esempio Blank, Standard e così via. Mostra "Sample Type".
Sample_Vial_Position	TextField	La posizione delle fiale definita nel lotto di acquisizione usato nell'autocampionatore per determinare in quale fiala è contenuto il campione. Mostra "Vial Number".
Sample_File_Full_Name	TextField	Mostra il nome di file con il percorso completo.

Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
Sample_Index_In_Wiff	TextField	Mostra il numero di ordine del campione nel file wiff, partendo da 0.
Sta_Accuracy	TextField	L'accuratezza per il picco analita, determinata confrontando la concentrazione dell'analita effettiva e la concentrazione dell'analita calcolata. Mostra "Accuracy".
Sta_CV	TextField	Mostra la percentuale di varianza condizionale che indica in termini percentuali l'entità di deviazione di un valore di concentrazione calcolata rispetto al valore di concentrazione media. Calcolato tramite deviazione standard/ media.
Sta_ExpectedConcent	TextField	La concentrazione prevista per un analita calcolata dal software Analyst® MD, usando l'area di picco. Mostra "Actual Concentration".
Sta_Mean	TextField	Mostra il valore medio (media) per le concentrazioni che vengono calcolate dal software Analyst® MD.
Sta_NumVal	TextField	Mostra il numero di valori che compone la statistica. Numero di campioni presi in considerazione quando viene eseguita una media.
Sta_QCAccuracy	TextField	L'accuratezza determinata confrontando la concentrazione prevista e la concentrazione effettiva per un campione di controllo qualità secondo la definizione data dall'utente nella colonna tipo di campione. Mostra "Accuracy".
Sta_QCCV	TextField	Mostra la percentuale di varianza condizionale che indica in termini percentuali l'entità di deviazione di un valore di concentrazione calcolata rispetto al valore di concentrazione media. Calcolato tramite deviazione standard/ media. Si applica a un campione Quality Control.

Tabella C-2 Tag dei modelli di rapporto (continua)

Tipo	Tipo di campo	Descrizione del tag
Sta_QCExpectedConcent	TextField	La concentrazione prevista per un campione di controllo qualità, definita dall'utente.  Mostra "Actual Concentration" per il campione di controllo qualità.
Sta_QCMean	TextField	Mostra il valore medio (media) per le concentrazioni che vengono calcolate dal software Analyst <sup>®</sup> MD per un campione di controllo qualità.
Sta_QCNumVal	TextField	Mostra il numero di valori presi in considerazione per una media di concentrazione campione di controllo qualità durante l'esecuzione della media.
Sta_QCStdDev	TextField	Mostra la deviazione standard per i valori di concentrazione per ciascun campione. La deviazione standard rappresenta una misura della distribuzione di una serie di valori dal valore medio.
Sta_StdDev	TextField	Mostra la deviazione standard per un campione standard. La deviazione standard rappresenta una misura della distribuzione di una serie di valori dal valore medio.
CUSTOM	TextField	Mostra il valore delle colonne personalizzate della Results Table.

# Rumore relativo e calcoli segnale-rumore

## D

Durante l'elaborazione dei dati di spettrometria di massa quantitativi, è importante determinare se un determinato picco è significativo oppure no, dove per 'significativo' si intende tipicamente correlato alla domanda: 'questo segnale supera il rumore di fondo?'

Generalmente l'altezza del picco viene confrontata con il rumore di fondo misurato in un'area priva di picchi dove il rumore viene generalmente stimato pari a una o tre volte la deviazione standard dei punti dati di questo intervallo. Questo approccio non è ottimale per i seguenti motivi:

- È soggettivo, poiché l'area del rumore viene selezionata manualmente.
- Un'area di fondo senza un picco non può esistere o l'area potrebbe essere troppo stretta per una valutazione accurata del rumore.
- Il rumore nella posizione del picco potrebbe essere abbastanza diverso da quello nell'area di rumore selezionata.
- Anche il fattore 'uno o tre' è soggettivo e autorità diverse possono presentare raccomandazioni differenti.
- Il rumore apparente può essere alterato se i dati sono stati pre-elaborati. Ad esempio, sono stati smussati o sottoposti a soglia.

Usando il concetto di rumore relativo ( $R_n$ ), è facile sviluppare un metodo semplice per calcolare il rumore previsto in un punto qualsiasi dei dati, per eseguire un confronto rispetto al segnale misurato. Si tratta di una metrica efficace e obiettiva che può essere usata per calcolare il rapporto segnale-rumore ( $S/N$ ) e per valutare e confrontare le prestazioni dello strumento e delle analisi. Esistono diverse applicazioni del concetto di rumore relativo, una delle quali è il calcolo di  $S/N$ .

L'algoritmo di base funziona come segue:

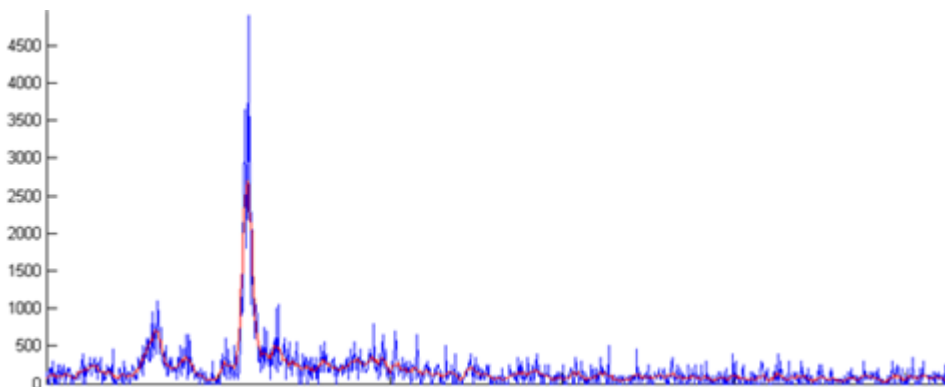
1. Creare un modello di rumore che consenta all'utente di calcolare il rumore previsto in un punto qualunque del record dati, considerando il livello del segnale sottostante in quel punto.

Il modello di rumore può essere determinato tramite considerazioni teoriche oppure può essere modellato sulla base di misurazioni reali di un determinato sistema. Per i rivelatori con conteggio impulsi, la deviazione standard di un segnale, e quindi il rumore previsto, è proporzionale alla radice quadrata del segnale, pertanto varia con il segnale. In altri sistemi ci sarà un componente di 'rumore bianco' costante, eventualmente combinato con un componente dipendente dall'intensità.

2. Valutare il segnale sottostante dal segnale misurato.

Ciò si può ottenere in diversi modi, tuttavia il più semplice consiste nel generare una versione smussata dei dati come mostrato nella [Figura D-1](#).

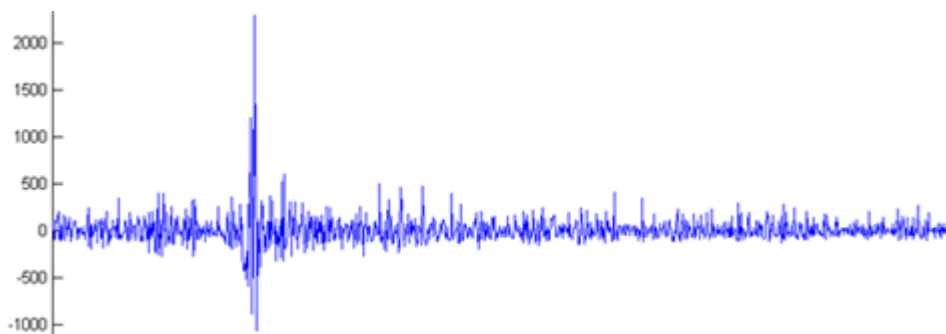
**Figura D-1 Sovrapposizione di dati grezzi e smussati**



3. Misurare il rumore reale lungo i dati usando tutti i punti (picchi e fondo).

Ciò si ottiene sottraendo la stima del segnale sottostante dal segnale misurato in qualunque punto dei dati in cui il segnale smussato è stato sottratto dall'originale. Questa azione è nota come rumore delta. L'intervallo del rumore delta è ragionevolmente costante, tranne dove vi sono picchi grandi poiché il rumore dipende dal segnale, quindi sarà più grande dove il segnale è maggiore. Fare riferimento alla [Figura D-2](#).

**Figura D-2 Grafico dei valori di rumore delta di ogni punto dati**



## Rumore relativo e calcoli segnale-rumore

---

4. In ciascun punto dati, calcolare il rapporto tra il rumore misurato e il rumore previsto.

Ciò significa che, in ogni punto dati dividiamo il rumore misurato al punto 3 per il valore previsto dal nostro modello di rumore (nel nostro caso la radice quadrata dell'intensità). Se il modello di rumore è ottimale, genera una serie di valori che rimangono prevalentemente vincolati da alcuni limiti come mostrato nella [Figura D-3](#). La [Figura D-3](#) mostra anche il diagramma di

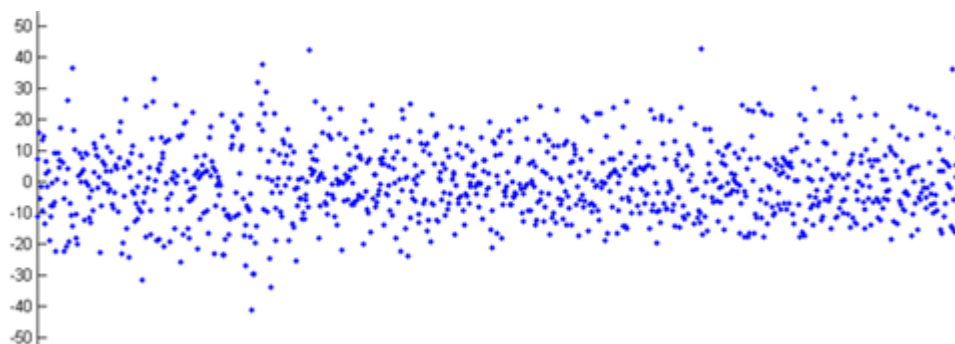
$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

---

**Nota:** Ciò riduce la grande variazione nel rumore delta e genera una serie di valori ben vincolati.

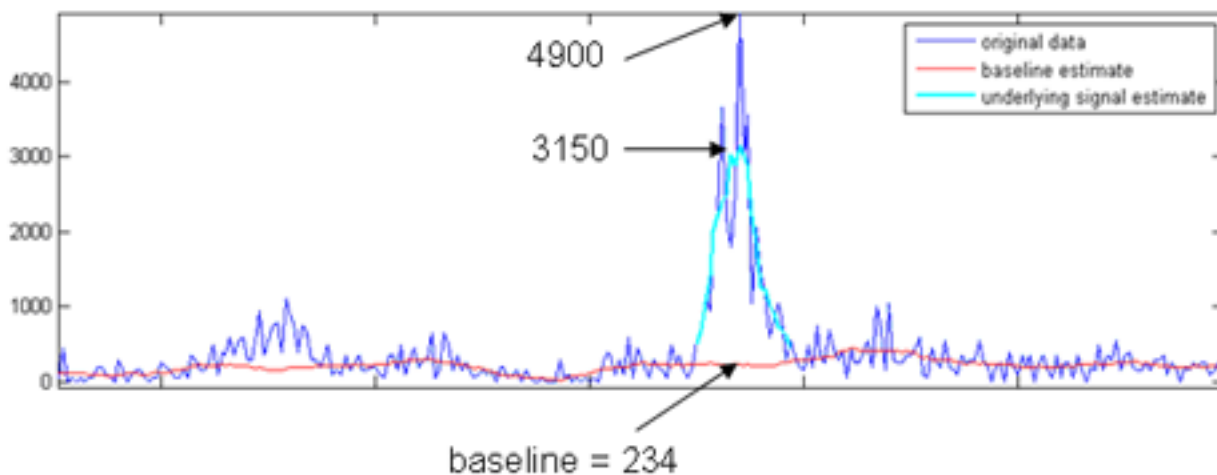
---

**Figura D-3 Modello di rumore**



- Calcolare la deviazione standard dei valori del rapporto. Questo è  $R_n$ , una stima del rapporto più probabile tra il rumore delta attuale e quello previsto dal modello. Nella [Figura D-3](#), si ottiene un valore pari a 9,5. La [Figura D-4](#) mostra un esempio di come è possibile usare il rumore relativo per il calcolo di S/N.

**Figura D-4 Sovrapposizione di dati grezzi, stime di segnale sottostante e stime di linea di base**



Come descritto in precedenza:

$$noise = R_n \times \sqrt{(baseline)}$$

in questo particolare esempio:

$$noise = 9.5 \times \sqrt{234} = 145$$

Se l'apice del picco viene usato come segnale, si ottiene un S/N di 34 ( $4.900/145$ ) e se viene usata l'altezza del segnale smussato, si ottiene un S/N di 22 ( $3.150/145$ ).

Quando si crea un rapporto con S/N, l'algoritmo di integrazione MQ4 usa la procedura qui descritta e l'apice del picco come segnale. Poiché l'algoritmo di integrazione SignalFinder™ adatta un modello al picco, utilizza l'altezza del profilo adattato. Ciò produce un S/N più piccolo. Tuttavia, si tratta di un valore più preciso in quanto è meno influenzato da eventuali picchi di rumore. L'algoritmo di integrazione SignalFinder presenta inoltre un approccio più sofisticato alla stima della linea di base, quindi per questi due motivi i valori S/N riportati dai due algoritmi non sono identici anche se saranno generalmente simili.

Riepilogando, rispetto al solito approccio che prevede la stima del rumore come deviazione standard di un'area di fondo, l'approccio basato sul rumore relativo rispetto al calcolo di S/N presenta i seguenti vantaggi:

- È molto meno soggettivo poiché la regione di fondo non deve essere selezionata manualmente.
- Un valore S/N preciso può essere previsto anche se non esistono aree del cromatogramma prive di picchi.

- La linea di base e di conseguenza il rumore vengono valutati vicino al picco di interesse. Ciò può fare un'enorme differenza per il valore S/N riportato perché l'area di fondo selezionata per l'approccio tradizionale può essere molto più silenziosa rispetto al fondo vicino al picco. Come descritto precedentemente, il valore S/N calcolato usando l'approccio **Relative Noise** potrebbe fornire valori più piccoli rispetto all'approccio tradizionale. Tuttavia, si tratta di valori più precisi e utili. Fare riferimento alla [Figura D-4](#).

Per rendere visibile la colonna **Signal / Noise** nella **Results Table**, fare riferimento a [Modifica delle colonne mostrate nella Results Table a pagina 89](#).

## Nota sul rapporto segnale-rumore durante l'utilizzo dell'algoritmo di integrazione SignalFinder

Poiché l'algoritmo di integrazione SignalFinder™ calcola il valore segnale-rumore in modo più preciso (e quindi prevede i valori CV in modo più preciso), se si utilizza l'approccio segnale-rumore 1-sigma, considerare la diminuzione del valore segnale-rumore minimo accettabile su qualunque procedura operativa standard (SOP), sulla base di dati empirici provenienti dal laboratorio.












# Icone del software

# E




Viene attivato un solo riquadro per volta. I riquadri attivi presentano un bordo arancione; l'utente può attivare un riquadro facendo clic in un punto qualsiasi al suo interno. Molti comandi di menu agiscono sul riquadro attivo.

Le icone della barra degli strumenti descritte in questa sezione compaiono nella barra degli strumenti specifica per tutti i tipi di riquadri. Sono inoltre disponibili icone supplementari specifiche per ogni tipo di riquadro.







**Tabella E-1** Icone della barra degli strumenti

Icona	Nome	Descrizione
	New Results Table	Apri la <b>New Results Table wizard</b> .
	Open	Apri una <b>Results Table</b> .
	Save	Salva qualsiasi file aperto.
	Select Analyst Project	Seleziona una cartella del progetto.
	Screen Lock	Blocca lo schermo. Questa funzione è disponibile solo quando il software Analyst <sup>®</sup> MD è in modalità Mixed e la funzione blocco schermo è abilitata.
	Show Internal Standard with Analyte	Mostra le righe della <b>Results Table</b> per l'analita correntemente selezionato e il relativo standard interno. Quando si seleziona questa opzione, fare clic sul nome dell'analita e visualizzarlo insieme al relativo standard interno. Equivale a fare clic sull'analita e a selezionare successivamente lo standard interno premendo <b>Ctrl</b> (in modo che entrambi siano selezionati).
	Find Component or Group	Seleziona le voci dell'elenco che corrispondono al testo specificato.
	Arranging Panes	Modifica le posizioni relative dei riquadri. Fare clic sull'icona in un riquadro e poi trascinarlo nella parte superiore, inferiore, sinistra o destra di un secondo riquadro. In base alla posizione in cui viene rilasciato il cursore, il primo riquadro cambia di posizione rispetto al secondo. Mentre si trascina il cursore, un lato del secondo riquadro viene evidenziato in rosso per indicare il punto in cui verrà disegnato il primo riquadro.
	Delete Pane	Cancella il riquadro. Se viene eliminata una <b>Results Table</b> , verranno cancellati anche gli altri riquadri correlati ( <b>Peak Review</b> e <b>Calibration</b> ) e l'intera finestra verrà chiusa.





**Tabella E-1 Icone della barra degli strumenti (continua)**

Icona	Nome	Descrizione
	Toggles tab mode	Ingrandisce il riquadro per riempire l'intera finestra (o viceversa). Questa opzione è utile nel caso in cui nella finestra siano presenti diversi riquadri; l'utente può così concentrarsi temporaneamente su uno solo di essi.  Nella modalità con zoom, nella finestra in alto di ogni riquadro viene visualizzata una scheda separata. Per passare da un riquadro all'altro, fare clic sull'apposita scheda. Dalla modalità con zoom, ritornare alla vista originale che mostra tutti i riquadri facendo clic una seconda volta sul riquadro <b>Zoom</b> . Fare clic sull'icona per passare da uno stato all'altro.
	Hide Pane	Nasconde il riquadro in modo che altri riquadri riempiano lo spazio disponibile nella finestra.
	Show Hidden Panes	Mostra tutti i riquadri che sono stati precedentemente nascosti.

**Tabella E-2 Icone della barra degli strumenti della verifica dei picchi**

Icona	Nome	Descrizione
	Display Previous Page	Visualizza il set di cromatogrammi precedente. Equivale a premere il tasto freccia su o sinistra, oppure a fare clic sulla freccia in alto nella barra di scorrimento.
	Display Next Page	Visualizza il set di cromatogrammi successivo. Equivale a premere il tasto freccia giù o destra, oppure a fare clic sulla freccia in basso nella barra di scorrimento.
	Display Previous Sample	Scorre il riquadro <b>Peak Review</b> all'indietro. Equivale a fare clic sulla freccia in alto nella barra di scorrimento fino a visualizzare il primo campione diverso dal primo cromatogramma correntemente visibile.
	Display Next Sample	Scorre al campione successivo.
	Starts Slide Show Peak Review mode	Avvia la visualizzazione delle diapositive. Al primo utilizzo, si aprirà la finestra di dialogo <b>Slide Show Options</b> . Impostare il tempo di ritardo in secondi tra i picchi. Per evitare la riapertura della finestra di dialogo, selezionare la casella di controllo <b>Only show this dialog again if the shift key is down</b> . Per interrompere la visualizzazione delle diapositive, fare clic in un punto qualsiasi del riquadro <b>Peak Review</b> .
	Peak Magnifier	Ingrandisce il picco selezionato.

**Tabella E-2 Icone della barra degli strumenti della verifica dei picchi (continua)**

Icona	Nome	Descrizione
	Peak Demagnifier	Riporta il picco ingrandito alle sue dimensioni originali.
	Set Peak to 'Not Found'	<p>Fare clic per indicare che non ci sono picchi presenti nel cromatogramma attivo. In alcuni casi quando non sono presenti picchi significativi, è possibile integrare e registrare piccoli picchi di rumore. Fare clic su questa icona per ignorare tale comportamento. L'area del picco viene visualizzata nella <b>Results Table</b> come N/A.</p> <p>Una volta che l'utente contrassegna il picco come <b>Not Found</b>, i parametri di ricerca picchi a sinistra del riquadro non saranno disponibili per il cromatogramma in quanto inutilizzati. Fare nuovamente clic sull'icona per ritornare alla modalità automatica.</p>
	Enable Manual Integration Mode	<p>Fare clic per accedere alla modalità di integrazione manuale. Se il software si trova nella modalità di integrazione manuale, trascinare un tracciato del cromatogramma per specificare la regione da integrare. L'integrazione parte dal punto (tempo, intensità) in cui il cursore viene cliccato per la prima volta e procede fino al punto in cui il cursore viene rilasciato. Fare clic nuovamente sull'icona per uscire dalla modalità di integrazione manuale.</p> <p>Una volta che l'utente integra manualmente il picco, i parametri di ricerca a sinistra del riquadro non saranno disponibili per il cromatogramma in quanto inutilizzati. Fare nuovamente clic sull'icona per ritornare alla modalità automatica.</p>
	Recalculate Peak Model	Ricalcola il modello del picco tramite il cromatogramma attivo e lo applica a tale cromatogramma (solo algoritmo di integrazione SignalFinder™).

**Tabella E-3 Icone della barra degli strumenti di calibrazione**

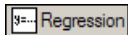



Icona	Nome	Description
	Edit Regression and Weighting	Opzione utilizzata per cambiare i parametri di calibrazione. Comprende sia il parametro attuale utilizzato per la regressione (Area o Height) che il tipo di regressione e la pesatura. Fare riferimento a <a href="#">Equazioni di regressione a pagina 125</a> .

Tabella E-4 Icone della barra degli strumenti delle statistiche

Icona	Nome	Descrizione
	Remove Trailing Index from Sample Name	La <b>Statistics Table</b> può essere disposta in modo che i campioni (per un determinato analita) vengano raggruppati in base alla concentrazione effettiva o al nome del campione. Se il raggruppamento avviene in base al nome del campione, l'opzione <b>Remove Trailing Index from Sample Name</b> controlla se i nomi dei campioni devono corrispondere perfettamente per poter essere raggruppati oppure se è necessario rimuovere un indice numerico progressivo dopo un trattino (-). Ad esempio, selezionando questa opzione, i due campioni con il nome Sample 1 - 001 e Sample 1 - 002 verranno raggruppati insieme, ma non viceversa.
	Sample Grouping	Le voci di questo elenco specificano il modo in cui il campione per un determinato analita deve essere raggruppati per il calcolo delle statistiche. Sono disponibili le seguenti opzioni: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Group by Concentration for Standards:</b> i campioni <b>Standard</b> vengono raggruppati in base all'effettiva concentrazione.</li> <li>• <b>Group by Concentration for QCs:</b> i campioni <b>Quality Control</b> vengono raggruppati in base all'effettiva concentrazione.</li> <li>• <b>Group by Sample Name for Standards:</b> i campioni replicati <b>Standard</b> vengono raggruppati in funzione del campo <b>Sample Name</b>. Come precedentemente descritto, se non si utilizza l'opzione <b>Remove Trailing Index from Sample Name</b>, i nomi dei campioni devono corrispondere perfettamente. In caso contrario, i nomi possono differire per il numero progressivo (dopo un trattino).</li> <li>• <b>Group by Sample Name for QCs:</b> simile all'opzione precedente, con l'unica eccezione che vengono utilizzati solo i campioni <b>Quality Control</b>.</li> <li>• <b>Group by Sample Name for All Samples:</b> simile all'opzione precedente, con l'unica eccezione che vengono utilizzati tutti i campioni.</li> </ul>

**Tabella E-4 Icone della barra degli strumenti delle statistiche (continua)**

Icona	Nome	Descrizione
	Metric	<p>Le voci di questo elenco specificano la metrica correntemente utilizzata per il calcolo delle statistiche. Sono disponibili le seguenti opzioni:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Calculated Concentration:</b> viene utilizzato il campo <b>Calculated Concentration</b> della <b>Results Table</b>.</li> <li>• <b>Area:</b> viene utilizzato il campo <b>Area</b> della <b>Results Table</b>.</li> <li>• <b>Height:</b> viene utilizzato il campo <b>Height</b> della <b>Results Table</b>.</li> <li>• <b>Calibration Y-Value:</b> viene utilizzato il parametro di regressione specificato per l'analita. Si tratta di <b>Area</b> o <b>Height</b> di un analita che non dispone di uno standard interno corrispondente, oppure di <b>Area Ratio</b> o <b>Height Ratio</b> di un analita che utilizza uno standard interno.</li> </ul>

**Tabella E-5 Icone della barra degli strumenti della Results Table**






Icona	Suggerimento	Descrizione
	Displays the peak review	Mostra il riquadro <b>Peak Review</b> in modo che la qualità delle integrazioni di picco possa essere controllata e modificata secondo necessità.
	Displays the side by side sample review	Mostra due elenchi di campioni in modo che gli utenti possano selezionare fino a sei campioni, al fine di confrontare le risposte dei picchi attraverso i campioni.
	Displays the calibration curve	Mostra la curva di calibrazione (applicabile solo se si utilizzano i campioni <b>Standard</b> con una concentrazione conosciuta). Questo riquadro consente all'utente di controllare la calibrazione e regolare il tipo di regressione e la pesatura.
	Creates a metric plot	Mostra un Metric Plot per la colonna o le colonne correntemente selezionate. Questi diagrammi possono rivelarsi molto utili per trovare i valori anomali. Il menu alla destra del tasto elenca tutte le impostazioni dei tracciati salvate.
	Displays the statistics pane	Mostra il riquadro <b>Statistics</b> . Questa tabella mostra la concentrazione media calcolata, la deviazione standard e il valore CV per ogni livello di concentrazione.

Tabella E-5 Icone della barra degli strumenti della Results Table (continua)




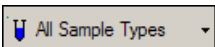






Icona	Suggerimento	Descrizione
	Sort selected column from smallest to largest	Ordina la <b>Results Table</b> in modo che i valori nella colonna selezionata vengano visualizzati in ordine ascendente. Questa icona è disponibile solo dopo che l'utente ha fatto clic sull'intestazione della colonna.
	Sort selected column from largest to smallest	Ordina la <b>Results Table</b> in modo che i valori nella colonna selezionata vengano visualizzati in ordine discendente. Questa icona è disponibile solo dopo che l'utente ha fatto clic sull'intestazione della colonna.
	Removes any previous sorting	Una volta ordinata la tabella, ripristina la <b>Results Table</b> all'ordine predefinito.
	Shows only the selected sample type(s)	Filtra la <b>Results Table</b> in modo da rendere visibili solo i campioni di un tipo specifico. Questa funzione è utile solo se ci sono campioni <b>Standard</b> con una concentrazione nota e se non tutti i campioni sono <b>Unknowns</b> .
	Hide selected row(s)	Nasconde le righe selezionate nella <b>Results Table</b> . Selezionare le righe da nascondere, quindi fare clic sull'icona.  Poiché il riquadro <b>Peak Review</b> si sincronizza con la <b>Results Table</b> , se si nascondono le righe per quei picchi che non è necessario verificare, il processo di verifica è più veloce. Ad esempio, l'utente può ordinare la tabella con la colonna <b>Quality</b> e nascondere tutte le righe con una qualità superiore a qualche valore (ad esempio 0,8). Dopodiché, è possibile ordinare la tabella con la colonna <b>Region Height</b> , nascondendo tutte le righe con un valore basso (per nascondere le righe per cui il picco è del tutto assente). Ne consegue che sono presenti solo i picchi con una qualità bassa, ma per i quali è realmente presente un picco. L'utente può quindi passare attraverso queste righe visibili dal riquadro <b>Peak Review</b> impiegando meno tempo rispetto a quello impiegato per verificare tutti i picchi possibili.
	Show previously hidden row(s)	Mostra tutte le righe. Le righe visualizzate potrebbero essere ancora vincolate dalla selezione <b>Sample Type Filter</b> e <b>Components &amp; Groups List</b> .
	Show only outliers	Mostra le righe che contengono valori anomali.
	Go to next outlier	Passa al valore anomalo successivo nella <b>Results Table</b> .

Tabella E-5 Icone della barra degli strumenti della Results Table (continua)

Icona	Suggerimento	Descrizione
	Lock and Save	Blocca la <b>Results Table</b> dopo averla salvata. Le modifiche alla <b>Results Table</b> non vengono salvate, a meno che il file non venga sbloccato.
	Review and Save	Fare clic per salvare la <b>Results Table</b> dopo averla controllata. Questa icona non è disponibile se la <b>Results Table</b> è di sola lettura.

# Accesso al software MultiQuant™ MD

# F

**Nota:** Quando il software MultiQuant™ MD viene rimosso, gli elementi di sicurezza del software MultiQuant™ MD nel software Analyst® MD rimangono. I permessi di sicurezza si trovano nella scheda **Roles** all'interno della finestra di dialogo **Security Configuration**.

Accesso predefinito	Descrizione
Create session file	Consente di creare una <b>Results Table</b> .
Create quantitation method	Consente di creare i metodi di quantificazione.
Modify quantitation method files	Consente di modificare i metodi di quantificazione contenuti nella cartella <b>Quantitation Methods</b> all'interno della cartella <b>Analyst Data</b> .
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Consente all'utente di esportare o creare rapporti di <b>Results Table</b> sbloccate.
Replace existing Results Table when saved	Consente di aggiornare le <b>Results Table</b> esistenti, ma non di creare una nuova <b>Results Table</b> usando un nome di <b>Results Table</b> esistente. Ad esempio, se si crea una <b>Results Table</b> chiamata RT1, l'utente può aggiornarla ma non può creare una nuova <b>Results Table</b> usando lo stesso nome RT1. L'utente non può assegnare a una <b>Results Table</b> senza nome il nome di una <b>Results Table</b> esistente.
Change default quantitation method integration algorithm	Nella finestra di dialogo <b>Integration Default</b> , consente all'utente di modificare l'algoritmo. Fare clic su <b>Edit &gt; Project Integration Defaults</b> .
Change default quantitation method integration parameters	Nella finestra di dialogo <b>Integration Default</b> , consente di modificare i parametri predefiniti dell'algoritmo. Fare clic su <b>Edit &gt; Project Integration Defaults</b> .
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Consente di attivare o disattivare il flag che abilita l'opzione <b>Project Modified Peak Warning</b> nel menu <b>Edit</b> .
Allow Project Secure Export Settings	Se l'opzione è abilitata, i dati nel file di testo vengono crittografati durante l'esportazione. Impostare una password per abilitare la crittografia.
Add samples to Results Table	Consente di aggiungere dei campioni. Fare clic su <b>Process &gt; Add Samples</b> .
Remove samples from Results Table	Consente di rimuovere i campioni selezionati. Fare clic su <b>Process &gt; Remove Selected Samples</b> .



Accesso predefinito	Descrizione
Export, Import o Remove External Calibration	Consente di esportare, importare o rimuovere una calibrazione esterna tramite una delle seguenti opzioni: <ul style="list-style-type: none"> <li>Fare clic su <b>Process &gt; Export Calibration</b>.</li> <li>Fare clic su <b>Process &gt; Import External Calibration</b>.</li> <li>Fare clic su <b>Process &gt; Remove External Calibration</b>.</li> </ul>
Change Audit Map settings	Consente di modificare la mappa di audit del progetto e di modificare la definizione di mappa di audit. Fare clic su <b>Audit Trail &gt; Audit Map Manager</b> .
Modify Sample Name	Consente di modificare il nome del campione nella <b>Results Table</b> .
Modify Sample Type	Consente di modificare il tipo di campione ( <b>Standard, QC, Unknown</b> ) nella <b>Results Table</b> .
Modify Sample ID	Consente di modificare l' <b>ID</b> del campione nella <b>Results Table</b> .
Modify Actual Concentration	Consente di modificare la concentrazione effettiva di <b>Standard</b> e <b>QC</b> nella <b>Results Table</b> .
Modify Dilution Factor	Consente di modificare il fattore di diluizione nella <b>Results Table</b> .
Modify Comment Fields	Consente di modificare i campi dei commenti: <ul style="list-style-type: none"> <li><b>Component Comment</b></li> <li><b>IS Comment</b></li> <li><b>IS Peak Comment</b></li> <li><b>Peak Comment</b></li> <li><b>Sample Comments</b></li> </ul>
Allow manual integration	Consente di abilitare la modalità di integrazione manuale nel riquadro <b>Peak Review</b> . Se si abilita tale permesso, si dovrà abilitare anche il permesso <b>Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram</b> . Il comando <b>Allow manual integration</b> può essere disattivato se è abilitato il permesso <b>Modify Results Table integration parameters</b> .
Allow set to Peak Not Found	Consente di usare <b>Set peak to not found</b> . Per eseguire questa azione, fare clic con il tasto destro del mouse sul riquadro <b>Peak Review</b> .
Include or exclude a peak from the Results Table	Consente di includere o escludere i picchi dalle <b>Results Table, Statistics Table</b> e dalle curve di calibrazione.
Modify regression settings for fit and weight	Consente di modificare le impostazioni di regressione nel riquadro della curva di calibrazione quando si usano la funzione <b>Modify Results Table Method</b> e la procedura guidata <b>New Quantitation Method wizard</b> .

Accesso predefinito	Descrizione
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Consente di modificare un singolo cromatogramma.
Modify quantitation method for the Results Table component	Consente di applicare le modifiche dai singoli cromatogrammi al componente. L'utente deve attivare questo permesso e il permesso <b>Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram</b> per poter aggiornare e applicare le singole modifiche ai componenti.
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Consente di creare e usare i metric plot nella <b>Results Table</b> (pulsante <b>Metric Plot</b> abilitato) o di esportare i metric plot. Fare clic su <b>File &gt; Export</b> .
Set Peak Review Title Format	Consente di modificare <b>Peak Review Title Format in Peak Review</b> . Per eseguire questa azione, fare clic con il tasto destro del mouse sul riquadro <b>Peak Review</b> .
Add, Rename, or Modify custom column	Consente di aggiungere, rinominare o modificare una colonna personalizzata. Anche senza questo permesso, l'utente può eseguire delle query che permetteranno di creare automaticamente le colonne personalizzate. Se tale permesso è disabilitato, dovrà essere disabilitato anche il permesso <b>Remove custom column</b> . L'opzione <b>Remove custom column</b> può essere disattivata se è abilitato il permesso <b>Add, Rename, or Modify custom column</b> .
Remove custom column	Consente di eliminare una colonna personalizzata nella <b>Results Table</b> .
Modify Results Table column settings	Consente di modificare le impostazioni di colonna della <b>Results Table</b> all'interno di una <b>Results Table</b> .
Save Column Settings as Project Default	Consente di applicare le impostazioni di colonna al progetto.
Lock and save Results Table	Consente di bloccare e salvare una <b>Results Table</b> .
Unlock and save Results Table	Consente di sbloccare e salvare una <b>Results Table</b> .
Review and save Results Table	Consente di rivedere e salvare una <b>Results Table</b> .
Edit Report Template	Consente di modificare i modelli di rapporto.
Trasferimento a LIMS	Consente di trasferire le <b>Results Table</b> salvate e bloccate a un LIMS. L'evento viene registrato nell'audit trail.

## Impostazioni di sicurezza

La [Tabella F-1](#) contiene le impostazioni di sicurezza consigliate per i ruoli utente.

**Tabella F-1 Impostazioni di sicurezza basate sui ruoli utente**

<b>Impostazione di sicurezza</b>	<b>Administrator</b>	<b>Supervisor</b>	<b>Analyst</b>	<b>Reviewer</b>
Create session file	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso
Create quantitation methods	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Modify quantitation method files	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Replace existing Results Table when saved	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Accesso
Change default quantitation method integration algorithm	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Change default quantitation method integration parameters	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Allow Project Secure Export Settings	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Add samples to Results Table	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso
Remove samples from Results Table	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso
Modify Sample Name	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Modify Sample Type	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso
Modify Sample ID	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Modify Actual Concentration	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso
Modify Dilution Factor	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso
Modify Comment Fields	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Allow manual integration	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso

**Tabella F-1 Impostazioni di sicurezza basate sui ruoli utente (continua)**

<b>Impostazione di sicurezza</b>	<b>Administrator</b>	<b>Supervisor</b>	<b>Analyst</b>	<b>Reviewer</b>
Allow set to Peak Not Found	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso
Include or exclude a peak from the Results Table	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso
Modify regression settings for fit and weight	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso
Modify quantitation method for the Results Table component	Accesso	Accesso	Accesso	Nessun accesso
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Accesso	Accesso	Accesso	Accesso
Set Peak Review Title Format	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Add, Rename, or Modify custom column	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Remove custom column	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Modify Results Table column settings	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Save Column Settings as Project Default	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Lock and save Results Table	Accesso	Accesso	Accesso	Accesso
Unlock and save Results Table	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Review and save Results Table	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Accesso
Modify Report Template	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso

**Tabella F-1 Impostazioni di sicurezza basate sui ruoli utente (continua)**

<b>Impostazione di sicurezza</b>	<b>Administrator</b>	<b>Supervisor</b>	<b>Analyst</b>	<b>Reviewer</b>
Transfer to LIMS (Controls Initiate Transfer to Watson LIMS as well)	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Accesso
Export, Import o Remove External Calibration	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso
Change Audit Map Setting	Accesso	Accesso	Nessun accesso	Nessun accesso

# Cronologia delle revisioni

---

Revisione	Motivazione della modifica	Data
A	Prima versione del documento.	Settembre 2013
B	Aggiornata la sezione Menu File. Aggiornata la sezione Menu Audit Trail. Aggiornata la tabella Colonne della Results Table. Aggiornata la sezione Report.	Gennaio 2015
C	Modificato il logo nella pagina di copertina da AB SCIEX a SCIEX Diagnostics. Aggiornata la pagina del copyright e modificato AB Sciex in SCIEX dove necessario. Aggiunto Windows 10 nel capitolo Introduzione al software. Aggiornata la sezione Per contattarci. Modificato il titolo dell'argomento Gestione delle mappe di audit in Informazioni sulle mappe di audit. Aggiornata la descrizione dell'opzione di menu Set Last Component of Group as IS nella sezione Sottomenu Internal Standards. Sostituito "parametro di percentuale dell'area totale" con "tempo di ritenzione" nella sezione Finestra di dialogo Update Retention Time. Aggiornata la descrizione di RT previsto nella sezione Parametri dell'algoritmo di integrazione SignalFinder. Aggiunto Windows 10 nella sezione Creazione di rapporti. Aggiornato il contenuto della sezione Tag dei modelli di rapporto. Modificata la schermata nella Figura 7-3. I nuovi modelli sono stati applicati ai contenuti, pertanto i contenuti riportano alcune modifiche. Eliminati tutti i riferimenti a Windows XP.	Giugno 2017