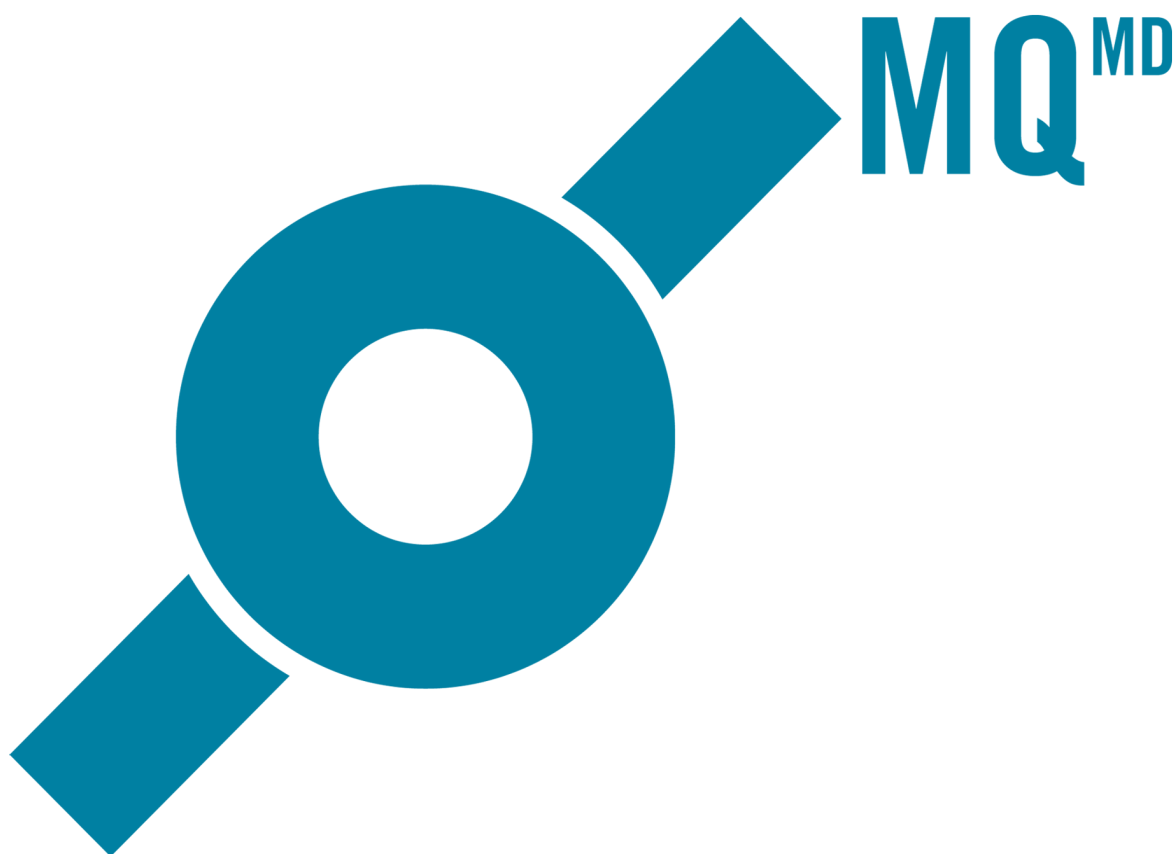


---

# Software MultiQuant™ MD 3.0.3

Guia de referência



Este documento é fornecido aos clientes que compraram um equipamento SCIEX para uso na operação de tal equipamento. Este documento é protegido por direitos autorais e qualquer reprodução deste documento ou qualquer parte do mesmo é estritamente proibida, exceto quando houver autorização por escrito da SCIEX.

IVD

O software que pode ser descrito neste documento é fornecido sob um contrato de licença. É contra a lei copiar, modificar ou distribuir o software em qualquer meio de comunicação, exceto se permitido especificamente no contrato de licença. Além disso, o contrato de licença pode proibir o software de ser desmontado, passar por engenharia reversa ou decompilado para qualquer finalidade. As garantias são conforme definidas em tal documento.

Partes deste documento podem fazer referência a outros fabricantes e/ou os seus produtos, que podem conter peças cujos nomes estão registrados como marcas registradas e/ou funcionam como marcas registradas dos seus respectivos proprietários. Qualquer uso é destinado apenas para designar estes produtos do fabricante como fornecidos pela SCIEX para incorporação em seu equipamento e não implica em qualquer direito e/ou licença para usar ou permitir que outros usem tais nomes de produto seus e/ou do fabricante como marcas registradas.

CE

As garantias da SCIEX estão limitadas a estas garantias expressas fornecidas no momento da venda ou licença de seus produtos e são representações, garantias e obrigações únicas e exclusivas da SCIEX. A SCIEX não oferece nenhuma outra garantia de nenhum tipo, expressa ou implícita, incluindo, entre outras, garantias de comercialização ou adequação para um propósito particular, decorrentes de um estatuto ou da lei, ou de uma negociação ou utilização comercial expressamente divulgada, e não assume nenhuma responsabilidade ou obrigação contingente, incluindo danos indiretos ou consequentes, para qualquer uso pelo comprador ou por quaisquer circunstâncias adversas decorrentes.

#### **Para uso em diagnóstico in vitro.**

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

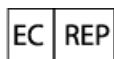
Não disponível em todos os países. Entre em contato com um representante da SCIEX para detalhes.

A AB Sciex está fazendo negócios como SCIEX.

As marcas registradas mencionadas aqui são propriedade da AB Sciex Pte. Ltd. ou seus respectivos proprietários.

AB SCIEX™ está sendo usada sob licença.

© 2017 AB Sciex



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



AB Sciex Pte. Ltd.  
Blk33, n.º 04-06 Marsiling Industrial Estate Road 3  
Woodlands Central Industrial Estate, Singapore 739256

# Conteúdo

---

<b>1 Introdução ao software.....</b>	<b>7</b>
Ajuda do software.....	7
Tipos de arquivos.....	8
Fale conosco.....	8
Suporte técnico.....	8
<b>2 Menu de arquivos.....</b>	<b>9</b>
Importar um método quantitativo.....	10
Submenu Export.....	11
Exportar tabela de resultados.....	11
Exportar tabela de resultados-métrica.....	13
Transferir para LIMS.....	14
<b>3 Menu editar.....</b>	<b>15</b>
Modificar método da tabela de resultados.....	17
Padrões de calibração e unidades do projeto.....	18
Configurações de exportação segura do projeto.....	18
<b>4 Menu do processo.....</b>	<b>19</b>
Exportar calibração.....	19
Importar calibração externa.....	20
<b>5 Menu Rastreamento de auditoria.....</b>	<b>22</b>
Visualizador de rastreamento de auditoria.....	22
Visualizar os resultados do rastreamento de auditoria no visualizador de rastreamento de auditoria.....	23
Realizar pesquisa por palavra-chave.....	24
Filtrar eventos auditados.....	24
Exportar o visualizador de rastreamento de auditoria.....	26
Imprimir o visualizador de rastreamento de auditoria.....	26
Gerente de Rastreamento de Auditoria.....	26
Sobre mapas de auditoria.....	27
Criar um mapa de auditoria.....	27
Mudar o mapa de auditoria.....	30
Editar o mapa de auditoria.....	31
Visualizar a Embedded Audit Configuration.....	34
<b>6 Menu Help.....</b>	<b>36</b>
<b>7 Tabelas de resultados.....</b>	<b>37</b>
Lista de componentes e grupos.....	38
Menu de contexto da tabela de resultados.....	39
Aplicar concentrações reais atuais para todos os analitos.....	40
Configurações da coluna.....	40
Filtro de tipo de amostra.....	42
Visualizar linhas ocultas.....	42

## Conteúdo

---

Caixa de diálogo Results Table.....	43
Selecionar amostras.....	43
Selecionar método.....	44
Selecionar amostra representativa.....	45
Definir componentes.....	46
Definir integração.....	48
Configurações de valor extremo.....	51
Colunas da tabela de resultados.....	53
<b>8 Revisão do Pico.....</b>	<b>61</b>
Integração manual.....	61
Aplicar.....	62
Dicas para revisar picos.....	62
Menu de contexto Revisão do pico .....	63
Caixa de diálogo Peak Review Options: Aba Appearance.....	63
Caixa de diálogo Peak Review Options: Aba Zooming.....	66
Ajustar formato de título da revisão de picos.....	67
Copiar parâmetros.....	68
Parâmetros de colagem.....	68
Definir pico como 'Não encontrado'.....	69
Usar pico.....	69
Atualizar método quantitativo para o componente.....	69
Atualizar método de quantificação para o grupo.....	69
Aplicar parâmetros de integração a amostra em grupo.....	70
Reverter pico para método original.....	70
Reverter todos os picos do componente.....	70
<b>9 Revisão de amostra lado a lado.....</b>	<b>71</b>
Realize uma revisão da amostra lado a lado.....	71
<b>10 Painel de calibração.....</b>	<b>73</b>
Caixa de diálogo Regression Options.....	73
Dicas de calibração.....	74
Menu do botão direito Calibration.....	74
<b>11 Tabelas de estatísticas.....</b>	<b>76</b>
Dicas da tabela de estatísticas.....	77
Menu do botão direito da Statistics Table.....	77
<b>12 Gráficos de métricas.....</b>	<b>78</b>
Gerar um gráfico de métricas.....	78
Salvar as configurações de Metric Plot.....	78
Dicas sobre o gráfico métrico.....	78
Menu do botão direito do Metric Plot.....	79
Caixa de diálogo Regression.....	80
<b>13 Editor de método quantitativo.....</b>	<b>82</b>
Guia Components.....	82
Submenu dos grupos.....	83
Submenu do padrão interno.....	85
Aba Integration .....	86
Caixa de diálogo Highlight Components.....	87
Caixa de diálogo Update Retention Time.....	87
Guia Outlier Settings .....	88

<b>14 Tutorial do fluxo de trabalho da análise quantitativa.....</b>	<b>90</b>
Sobre as curvas de calibração.....	90
Pré-requisitos.....	90
Modificar as colunas mostradas na tabelas de resultados.....	90
Processar dados usando o algoritmo de integração SignalFinder™.....	92
Configurar os parâmetros de integração de pico.....	92
Criar uma tabela de resultados.....	93
Revisão dos picos.....	97
Modificar a curva de calibração.....	98
Revisão das estatísticas de amostra.....	99
Processar dados usando o algoritmo de integração MQ4.....	100
Configurar os parâmetros de integração de pico.....	100
Criar uma tabela de resultados.....	101
Revisar picos.....	105
Modificar a curva de calibração.....	106
Revisar estatísticas de amostra.....	107
Algoritmos de integração.....	108
Sobre o algoritmo de integração SignalFinder.....	108
Parâmetros do algoritmo de integração SignalFinder™.....	111
Parâmetros do algoritmo de integração MQ4.....	115
Tarefas opcionais.....	118
Criar gráficos de métricas.....	118
Criar colunas personalizadas.....	118
Sobre os arquivos de método quantitativo e métodos incorporados.....	119
<b>A Parâmetros de algoritmos de integração.....</b>	<b>120</b>
Parâmetros de algoritmos de integração SignalFinder.....	120
Parâmetros do algoritmo de integração MQ4.....	123
<b>B Equações de regressão.....</b>	<b>126</b>
Fatores de ponderação.....	127
Regressões.....	127
Linear.....	128
Linear através do zero.....	128
Média de fator de resposta.....	128
Quadrática.....	129
Potência.....	129
Wagner.....	129
Hill.....	130
Calculando as concentrações finais.....	130
Linear.....	130
Linear através do zero e fator de resposta média.....	130
Quadrática.....	130
Potência.....	130
Wagner.....	130
Hill.....	131
<b>C Relatórios.....</b>	<b>132</b>
Criar relatórios.....	132
Criar modelos de relatório customizado.....	133
Modelos do relatório.....	134
Tags de modelo do relatório.....	136

## Conteúdo

---

<b>D Cálculos de ruído relativo e sinal/ruído.....</b>	<b>149</b>
Observação sobre o Signal-to-Noise quando usar o algoritmo de integração	
SignalFinder.....	153
<b>E Ícones do software.....</b>	<b>154</b>
<b>F Acesso ao software MultiQuant™ MD.....</b>	<b>161</b>
Configurações de segurança.....	164
<b>Histórico de revisão.....</b>	<b>167</b>

# Introdução ao software

---

# 1

Este documento descreve a funcionalidade disponível no software MultiQuant™ MD.

O acesso ao software é baseado no papel atribuído ao usuário no software Analyst® MD. Certifique-se de que cada usuário receba o acesso correto ao software.

Somente a versão em inglês dos sistemas operacionais da Microsoft a seguir é suportada:

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

---

**CUIDADO: O formato de números, moedas, datas e tempo deve ser configurado para inglês (Estados Unidos). Configurar o formato para um valor diferente pode resultar em dados errados.**

---

O software MultiQuant™ MD com rastreamento de auditoria e recursos de segurança necessita da licença completa e que o software Analyst® MD esteja instalado.

As maneiras controladas para saída de dados do software estão exportar tabelas de resultados, transferir ao LIMS e relatar. As outras fontes de saída de dados como copiar e colar a partir da tabela de resultados não são controladas. O usuários não devem usar esses métodos de saída não controlados para fins regulatórios.

---

**Nota:** O software MultiQuant™ MD usa as informações de bloqueio de tela do software Analyst® MD. Não é necessária configuração adicional para o software MultiQuant™ MD.

---

---

**Nota:** O arquivo e a estrutura de pasta devem ser mantidos para ser possível visualizar os cromatogramas. Se os dados tiverem de ser movidos, mova o projeto inteiro, mantendo a estrutura do arquivo.

---

## Ajuda do software

O software possui dicas de ferramenta e mensagens de erro que fornecem informações adicionais sobre a funcionalidade do software.

- Se um campo não estiver disponível, mova o cursor sobre o campo para exibir as dicas de ferramenta que explicam o motivo da funcionalidade não estar disponível. Informações adicionais incluem como habilitar o campo ou qual configuração de segurança é necessária para habilitar o campo.
- Mensagens de erro incluem as informações sobre as configurações de segurança necessárias para usar a funcionalidade.

## Tipos de arquivos

Tabela 1-1 Tipos de arquivos de software

Tipo de arquivo	Descrição
*.qsession	Tabela de resultados do software MultiQuant. Contém dados de rastreamento de auditoria de quantificação.
*.qmethod	Método quantitativo do software MultiQuant.
*.qmap	Mapa de auditoria do software MultiQuant.
*.mqcal	Arquivo de calibração externa.
*.cset	Arquivo de configurações de coluna.

## Fale conosco

### Suporte SCIEX

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

### Treinamento do consumidor

- Na América do Norte: [NA.CustomerTraining@sciex.com](mailto:NA.CustomerTraining@sciex.com)
- Na Europa: [Europe.CustomerTraining@sciex.com](mailto:Europe.CustomerTraining@sciex.com)
- Fora da União Europeia e da América do Norte, visite [sciex.com/education](https://sciex.com/education) para informações de contato.

### Centro de aprendizagem online

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

Para obter as orientações mais recentes sobre segurança cibernética para SCIEX produtos, acesse [sciex.com/productsecurity](https://sciex.com/productsecurity).

## Suporte técnico

A SCIEX e seus representantes mantêm uma equipe de atendimento totalmente treinada e especialistas técnicos localizados em todo o mundo. Eles podem responder perguntas sobre o sistema ou quaisquer problemas técnicos que possam surgir. Para mais informações, acesse o site da SCIEX em [sciex.com](https://sciex.com).



# Menu de arquivos

# 2

Tabela 2-1 Opções de menu Arquivo

Opção de menu	Descrição
New Results Table	Quantifica um conjunto de dados e, em seguida, cria uma tabela de resultados. Selecione os arquivos de dados para processar, assim como o método de quantificação a aplicar. Consulte <a href="#">Caixa de diálogo Results Table na página 43</a> .
New Quantitation Method	Um Editor Quantitation Method vazio é criado após a amostra ser selecionada. Geralmente, o usuário cria um método como parte do assistente Nova tabela de resultados. Entretanto, esse comando é útil se o usuário desejar criar um método, mas não desejar aplicá-lo imediatamente a uma coleção de amostras criando uma tabela de resultados. <ul style="list-style-type: none"><li>• O painel de navegação mostra as subpastas, arquivos wiff e amostras disponíveis na pasta <b>Data</b> para o projeto selecionado.</li><li>• Expanda pastas individuais para ver quaisquer subpastas ou arquivos wiff. Expanda o arquivo wiff para mostrar as amostras disponíveis.</li></ul>
Open Results Table	Abra uma tabela de resultados salva anteriormente. Após selecionar o comando, um diálogo <b>Open</b> padrão é aberto. Consulte <a href="#">Tabelas de resultados na página 37</a> .
Open Quantitation Method	Abre um método de quantificação salvo anteriormente. Após selecionar o comando, um diálogo <b>Open</b> padrão é aberto. Consulte <a href="#">Editor de método quantitativo na página 82</a> .
Save	Usado para salvar a tabela de resultados ativa ou Editor Quantitation Method em um arquivo. Se a tabela de resultados ou o Editor Quantitation Method nunca tiverem sido salvos, será solicitado o nome do arquivo ao usuário. Caso contrário, a versão anterior será substituída.
Save As	Usado para salvar a tabela de resultados ativa ou Editor Quantitation Method em um novo arquivo.
Recent Results Table	Contém itens de submenu para cada tabela de resultados usada recentemente. Selecione um dos itens para abrir o arquivo correspondente.
Recent Quantitation Methods	Contém itens de submenu para cada método de quantificação usado recentemente. Selecione um dos itens para abrir o arquivo correspondente.

Tabela 2-1 Opções de menu Arquivo (continuação)

Opção de menu	Descrição
Import	Cria um novo método de quantificação a partir de um arquivo de texto. Geralmente, o usuário cria um método manualmente usando o comando Novo método de quantificação (consulte <a href="#">Editor de método quantitativo na página 82</a> ) ou como parte do processo de criar uma nova tabela de resultados (consulte <a href="#">Tabelas de resultados na página 37</a> ). Esse comando é útil se o usuário desejar criar ou modificar um método de quantificação. Nesse caso, crie um método manualmente e, em seguida, use o comando <b>Quantitation Method as Text</b> .
Export	Contém comandos para exportar métodos de quantificação como arquivos .qmethod ou .txt. Consulte <a href="#">Submenu Export na página 11</a> . As maneiras controladas para saída de dados do software estão exportando Results Tables, transferindo ao LIMS e relatando. As outras fontes de dados de saída, como copiar e colar das tabelas de resultados, não são controladas. O usuários não devem usar estes métodos de saída não controlados por fins regulatórios.
Transfer to LIMS	Um arquivo de licença LIMS é necessário para ativar o recurso. Consulte <a href="#">Transferir para LIMS na página 14</a> .
Export and Save Results Table	Exportar tabelas de resultados é um dos métodos controlados para saída de dados.
Create Report and Save Results Table	Cria um relatório no Microsoft Word usando o software Reporter. Consulte <a href="#">Relatórios na página 132</a> . No caso de criar um modelo personalizado, o usuário é responsável por validar o modelo. O usuário pode editar o formato do número no relatório do editor de modelo. Se o formato de número não for especificado no modelo, o formato na <b>Results Table Column Setting</b> será usado no relatório.
Exit	Sai do programa. É solicitado que o usuário salve quaisquer dados não salvos.

## Importar um método quantitativo

1. Clique em **File > Import > Quantitation Method from Text**.
2. Selecione o arquivo de texto.
3. Selecione uma amostra representativa.

O Quantitation Method Editor se abre.

4. Salve o método no formato \*.qmethod para que ele possa ser subsequentemente usado para quantificar um novo conjunto de dados.

## Submenu Export

As maneiras controladas para saída de dados do software estão exportando tabelas de resultados, transferindo ao LIMS e relatando. As outras fontes de saída de dados como copiar e colar a partir da tabela de resultados não são controladas. O usuários não devem usar estes métodos de saída não controlados por fins regulatórios.

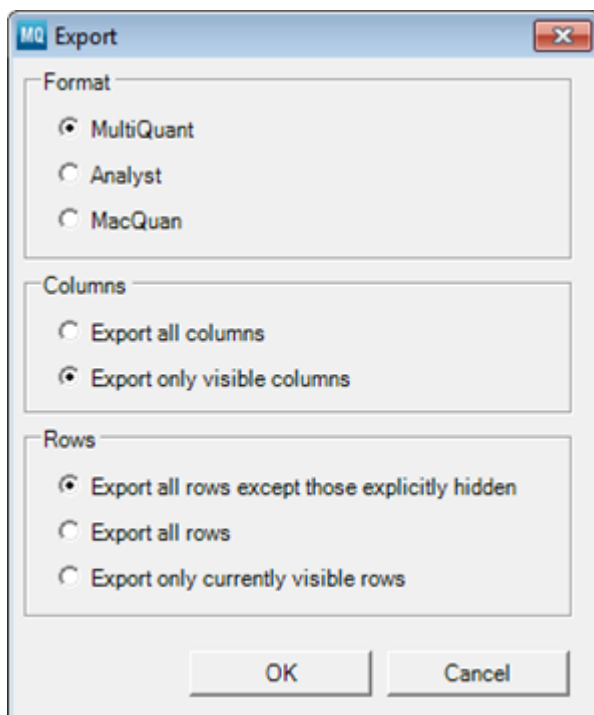
**Tabela 2-2 Opções de menu Export**

Opção de menu	Descrição
Results Table-Metric	Cria um arquivo de texto delimitado por guia contendo as informações da tabela de resultados ativa. Consulte <a href="#">Exportar tabela de resultados-métrica na página 13</a> .
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod	Exporta o método de quantificação para um novo arquivo. Quando uma tabela de resultados é criada, uma cópia do método de quantificação usado para gerar a tabela é salva internamente com a tabela. Isso é útil se o método de quantificação original foi excluído ou modificado e o usuário deseja aplicar o método de quantificação para um novo lote de amostras criando uma tabela de resultados.
Results Table's Quantitation Method as Text	Exporta uma cópia desse método em um formato de texto. Quando uma tabela de resultados é criada, uma cópia do método de quantificação usado para gerar a tabela é salva internamente com a tabela.
Quantitation Method as Text	Esses arquivos contêm uma linha de cabeçalho e uma linha para cada componente (analito ou padrão interno). Existe uma coluna para o nome do componente, o intervalo de massa, cada um dos parâmetros de integração e assim por diante. As linhas de cabeçalho não devem ser alteradas e as colunas não devem ser incluídas nem excluídas se o método de quantificação tiver que ser importado no software MultiQuant™ MD. Se a linha de cabeçalho para uma coluna que especifica um parâmetro de integração for alterada, ou a própria coluna for excluída, o valor padrão conforme especificado nos Padrões de integração do usuário para esse parâmetro de integração será aplicado a todos os componentes. Se a linha de cabeçalho para qualquer outra coluna for alterada ou excluída, o método não será importado. O usuário deve abrir o método e confirmar que todas as mudanças necessárias estejam presentes no método de quantificação importado. Consulte <a href="#">Tabela 2-1</a> .

## Exportar tabela de resultados

**Nota:** O fabricante não assume responsabilidade ou responsabilidade contingente incluindo danos indiretos ou de consequência, após os dados serem exportados do software. A tabela de resultados é exportada com precisão completa, independentemente do formato do número na configuração da coluna.

Figura 2-1 Caixa de diálogo Export



Rótulo	Descrição
<b>Formatar</b>	
MultiQuant	Selecione para exportar em precisão total. Neste formato, o arquivo de texto contém uma linha de cabeçalho que usa os mesmos nomes de coluna conforme exibido na <b>tabela de resultados</b> . Esse é o formato recomendado para exportar <b>tabela de resultados</b> .
Analyst	Selecione para exportar na precisão definida na configuração da coluna. Esse formato é o mesmo que exportado pelas tabelas de resultados de quantificação do software Analyst® MD. A diferença entre esse formato e o formato anterior é que os cabeçalhos da coluna usam nomes ligeiramente diferentes em alguns casos (para corresponder ao formato de software Analyst® MD) e há linhas de cabeçalhos adicionais para cada analito que descrevem a calibração.
MacQuan	Esse formato é semelhante ao software Analyst® MD, exceto que os nomes de cabeçalho da coluna correspondem aos usados pelo pacote de quantificação MacQuan.
<b>Colunas</b>	
Export all columns	Selecione para exportar todos os campos possíveis, incluindo aquelas colunas que estão ocultas atualmente na <b>tabela de resultados</b> .

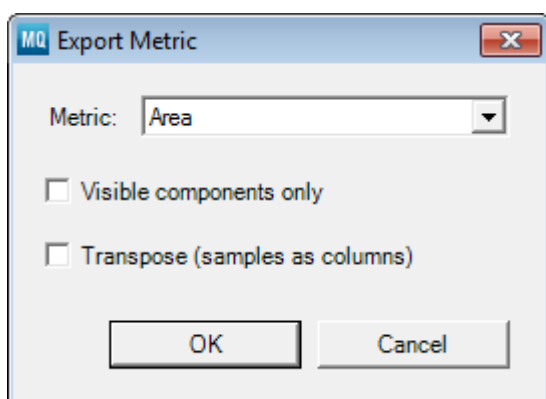
Rótulo	Descrição
Export only visible columns	Selecione para exportar somente aquelas colunas que estão atualmente sendo exibidas na <b>tabela de resultados</b> . O usuário também pode selecionar quais colunas estão visíveis usando o comando <b>Results Table Column Settings</b> . Consulte <a href="#">Menu de contexto da tabela de resultados na página 39</a> .
<b>Linhas</b>	
Export all rows except those explicitly hidden	Selecione para exportar todas as linhas, exceto aquelas ocultas devido a filtragem específica. Consulte <a href="#">Ícones do software na página 154</a> . As linhas que estão ocultas devido a filtragem <b>Sample Type</b> ou a filtragem <b>Component</b> são exportadas.
Export all rows	Selecione para exportar todas as linhas (ou seja, todos os componentes para todas as amostras).
Export only currently visible rows	Selecione para exportar somente aquelas linhas que são exibidas atualmente na <b>tabela de resultados</b> . As linhas que estão ocultas devido a filtragem <b>Sample Type</b> ou a filtragem <b>Component</b> não são incluídas.

## Exportar tabela de resultados-métrica

**Nota:** O fabricante não assume responsabilidade ou responsabilidade contingente incluindo danos indiretos ou de consequência, após os dados serem exportados do software. A **tabela de resultados** é exportada com precisão completa, independentemente do formato do número na configuração da coluna.

Usado para criar um arquivo de texto delimitado por guias que contém as informações da tabela de resultados ativa.

**Figura 2-2 Caixa de diálogo Export Metric**



## Menu de arquivos

Rótulo	Descrição
Metric	Selecione o campo para exportar. Consulte <a href="#">Colunas da tabela de resultados na página 53</a> .
Visible components only	Se essa opção estiver selecionada, somente aqueles componentes, para os quais pelo menos uma linha correspondente é visível no momento na tabela de resultados, são exportados para o arquivo. Se essa opção não for selecionada, as informações serão exportadas para todos os componentes.
Transpose (samples as columns)	Se essa opção estiver selecionada, então o arquivo de resultados terá uma coluna para cada amostra e uma linha para cada componente (analito ou padrão interno). Se essa opção não estiver selecionada, então haverá uma coluna para cada componente e uma linha para cada amostra.

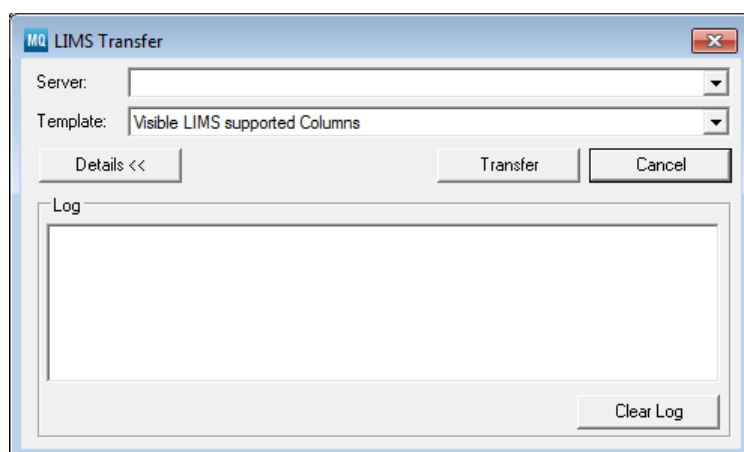
## Transferir para LIMS

Este comando só está disponível quando uma tabela de resultados é aberta. Um arquivo de licença LIMS é necessário para ativar o recurso.

As maneiras controladas para saída de dados do software estão exportando tabelas de resultados, transferindo ao LIMS e relatando. As outras fontes de saída de dados como copiar e colar a partir da tabela de resultados não são controladas. O usuário não deve usar estes métodos de saída não controlados por fins regulatórios.

1. Clique em **Help > Install License** para ativar uma licença.

**Figura 2-3** Diálogo Transferência de LIMS



2. Digite o nome do servidor no campo **Server** no formato a seguir: **http:\\endereço IP do servidor;número da porta**.
3. Selecione um modelo na lista **Template**.
4. Clique em **Transfer**.

Tabela 3-1 Opções do menu editar

Opção de menu	Descrição
Clear	Limpa a seleção atual. Isso se aplica quando a aba <b>Components</b> do <b>Quantitation Method Editor</b> possui uma ou mais linhas selecionadas.
Copy	Quando a <b>tabela de resultados</b> está ativa, este comando copia a porção selecionada da tabela para a área de transferência. Quando <b>Peak Review</b> ou o gráfico <b>Calibration</b> está ativo, uma figura do gráfico é copiada.
Paste	Quando a <b>tabela de resultados</b> está ativa com uma área editável selecionada, este comando cola as células ou colunas da área de transferência.
Copy Entire Table	Quando uma <b>tabela de resultados</b> ou <b>Statistics Table</b> está ativa, este comando copia todos os dados para a área de transferência. No caso de uma <b>tabela de resultados</b> , somente as linhas e colunas atualmente visíveis são copiadas.
Fill Down	Quando a <b>tabela de resultados</b> está ativa com uma área editável selecionada, este comando replica as informações na primeira linha selecionada para todas as linhas selecionadas subsequentemente.
Select all Rows	Seleciona todas as linhas na <b>tabela de resultados</b> atualmente ativa ou <b>Statistics Table</b> . Isso é útil quando o usuário quer aplicar um comando subsequente, como <b>Copy</b> , que operará nas linhas selecionadas.
Modify Results Table Method	Realiza alterações ao método quantitativo associado à <b>tabela de resultados</b> atualmente ativa. Isso é útil se o usuário quiser adicionar ou remover componentes. Para modificar somente os parâmetros de integração, use <b>Update Quantitation Method for Group</b> . Consulte <a href="#">Revisão do Pico na página 61</a> . Quando o comando está selecionado, a caixa de diálogo <b>Quantitation Method Editor</b> se abre. Os dados são processados novamente e a <b>tabela de resultados</b> atualiza para mostrar os dados. Consulte <a href="#">Editor de método quantitativo na página 82</a> e <a href="#">Caixa de diálogo Results Table na página 43</a> . Reaplicar o <b>Quantitation Method</b> sobrescreve todos os picos modificados manualmente para o componente especificado e então limpa as caixas de seleção na coluna <b>Modified</b> da tabela de resultados.

**Tabela 3-1 Opções do menu editar (continuação)**

Opção de menu	Descrição
Project Integration Defaults	Ajusta os parâmetros de configuração do pico padrão que serão usados na criação de um método quantitativo. Caso haja muitos componentes, ajuste os valores padrão baseando-se na cromatografia para que eles não precisem de ajustes individuais para cada componente. No entanto, nenhum grupo de parâmetros parece ser ideal para todos os dados, portanto, pode ser necessário ter que ajustar alguns dos parâmetros individualmente para alguns dos componentes. Consulte <a href="#">Parâmetros de algoritmos de integração na página 120</a> .
Project Units & Calibration Defaults	Ajusta os parâmetros de unidades de concentração e regressão padrão que serão usados na criação de um método quantitativo. O usuário também consegue ajustar esses parâmetros ao criar o próprio método. No entanto, se as mesmas configurações são usadas, é mais fácil ajustar os valores padrão após usar esse comando. Consulte <a href="#">Padrões de calibração e unidades do projeto na página 18</a> .
Project Secure Export Settings	Se selecionado, os dados no arquivo do texto são criptografados durante a exportação. Defina uma senha para habilitar a criptografia. Consulte <a href="#">Configurações de exportação segura do projeto na página 18</a> .
Enable Project Modified Peak Warning	Por padrão, não selecionada. Se selecionada, quando um usuário fizer uma alteração em um cromatograma na <b>tabela de resultados</b> e salvar as alterações, uma mensagem de alerta se abre, indicando que uma alteração foi feita. O usuário possui uma opção para continuar a salvar ou para retornar à <b>tabela de resultados</b> . Consulte <a href="#">Modificar método da tabela de resultados na página 17</a> .



Tabela 3-1 Opções do menu editar (continuação)

Opção de menu	Descrição
Cache Chromatograms for Faster Peak Review	<p>Quando esse recurso está habilitado, cada vez que um cromatograma de íon extraído (XIC) é calculado para uma amostra e componente específicos, ele é salvo para uso futuro enquanto a tabela de resultados associada permanecer aberta.</p> <p>Por exemplo, se o usuário criar uma <b>tabela de resultados</b> quando esse recurso for habilitado, os cromatogramas no painel <b>Peak Review</b> serão exibidos rapidamente porque eles foram armazenados anteriormente durante o processo de integração inicial para criar a <b>tabela de resultados</b> e não será necessário recalculá-los a partir das informações do arquivo .wiff. Se o usuário abrir uma <b>tabela de resultados</b> previamente salva, os cromatogramas individuais deverão ser recalculados na primeira vez que são exibidos no painel <b>Peak Review</b>. No entanto, retornar para um cromatograma anterior específico será mais rápido.</p> <p>O computador precisa de memória suficiente para armazenar todos os cromatogramas. No entanto, para conjuntos muito grandes de amostras com um número grande de analitos, essa opção deverá ser desabilitada para evitar mensagens de memória insuficiente.</p>
Cache all Chromatograms Now	<p>Quando o comando <b>Cache Chromatograms for Faster Peak Review</b> está habilitado, este comando é usado para calcular e depois armazenar todos os cromatogramas para a <b>tabela de resultados</b> ativa. Para um grande conjunto de dados, este comando pode levar algum tempo para ser executado. No entanto, após ser concluído, todos os cromatogramas são armazenados e o processo de revisão de picos fica mais rápido. O comando pode ser interrompido, se necessário.</p> <p>Execute esta operação se muitos cromatogramas serão revisados. Se a opção <b>Cache Chromatograms for Faster Peak Review</b> foi habilitada inicialmente, esta operação não precisa ser realizada novamente após a criação de uma <b>tabela de resultados</b>, pois os cromatogramas já estão armazenados. Este comando é útil após abrir uma <b>tabela de resultados</b> salva anteriormente.</p>

## Modificar método da tabela de resultados

Realiza alterações ao método quantitativo associado à tabela de resultados atualmente ativa. Isso é útil se o usuário quiser adicionar ou remover componentes. Para modificar somente os parâmetros de integração, use o comando **Update Quantitation Method for Group**. Consulte [Atualizar método de quantificação para o grupo na página 69](#).

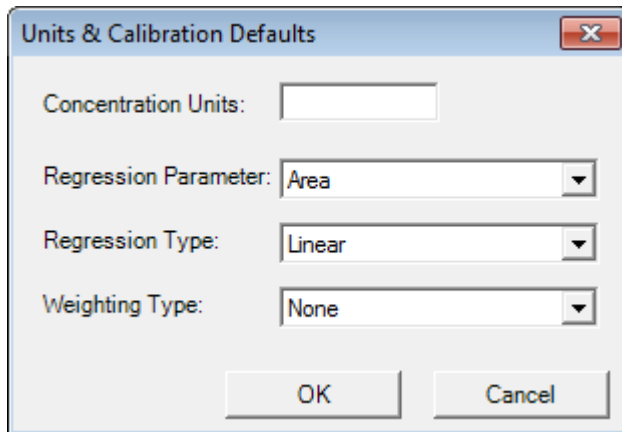
Quando o comando é selecionado, a caixa de diálogo Quantitation Method Editor se abre. Os dados são reprocessados e a tabela de resultados é atualizada para exibir os novos dados. Consulte [Editor de método quantitativo na página 82](#).

Reaplicar o Método quantitativo sobrescreve todos os picos modificados manualmente para o componente especificado e desmarca as caixas de seleção na coluna **Modified** na **tabela de resultados**.

## Padrões de calibração e unidades do projeto

Defina **Concentration Units**, **Regression Parameter** (Área ou Altura), **Regression Type** e **Weighting Type**. Os diversos tipos de regressão e ponderação estão descritos em [Equações de regressão na página 126](#).

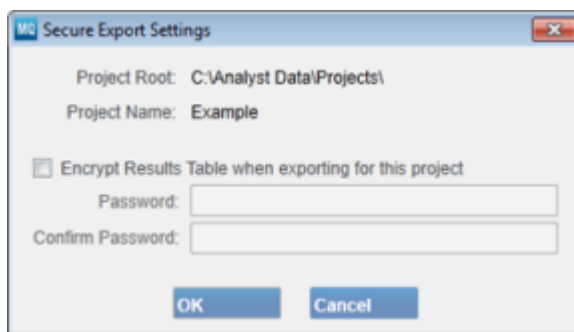
Figura 3-1 Padrões de calibração e unidades



## Configurações de exportação segura do projeto

Os dados no arquivo do texto são criptografados durante a exportação. Defina uma senha para habilitar a criptografia. Consulte [Figura 3-2](#).

Figura 3-2 Caixa de diálogo de configurações de exportação seguras



# Menu do processo

# 4

Tabela 4-1 Opções do menu do processo

Opção do menu	Descrição
Add Samples	Acrescenta amostras adicionais a uma <b>tabela de resultados</b> ativa atualmente. Consulte <a href="#">Selecionar amostras na página 43</a> .  Uma barra de progresso é exibida enquanto as novas amostras são integradas e adicionadas à tabela existente. O usuário deve ter a permissão <b>Add samples to Results Table</b> habilitada para executar essa tarefa.
Remove Selected Samples	Remove amostras selecionadas de uma <b>tabela de resultados</b> ativa atualmente. O usuário deve ter a permissão <b>Remove samples from tabela de resultados</b> habilitada para realizar esta tarefa.
Show Only Outliers	Mostra as linhas que contêm valores extremos. Clique em <b>Process &gt; Show Only Outliers</b> .  Para mostrar todas as linhas, clique novamente em <b>Process &gt; Show Only Outliers</b> .
Go to Next Outlier	Segue para o próximo valor extremo na <b>tabela de resultados</b> . Clique em <b>Process &gt; Go to Next Outlier</b> .
Export Calibration and Save Results Table	Salva uma cópia da equação de calibração para todos os analitos associados à <b>tabela de resultados</b> ativa em um arquivo externo (*.mqcal). Isso permite que a calibração de um conjunto de amostras padrão seja aplicada a outras amostras que não são parte da mesma <b>tabela de resultados</b> . Consulte <a href="#">Exportar calibração na página 19</a> .
Import External Calibration	Aplica uma calibração exportada anteriormente para a <b>tabela de resultados</b> ativa. Uma alternativa para usar este comando é especificar o arquivo de calibração externa do assistente <b>New Results Table</b> conforme descrito em <a href="#">Definir integração na página 48</a> . Consulte <a href="#">Importar calibração externa na página 20</a> .
Remove External Calibration	Remove uma calibração externa aplicada anteriormente de uma <b>tabela de resultados</b> ativa.

## Exportar calibração

Salva uma cópia da equação de calibração para todos os analitos associados à **tabela de resultados** para um arquivo externo (\*.mqcal). Isso permite a calibração de um conjunto de amostras padrão seja aplicada a outras amostras que não sejam parte da mesma **tabela de resultados**.

## Menu do processo

---

O fluxo de trabalho típico é:

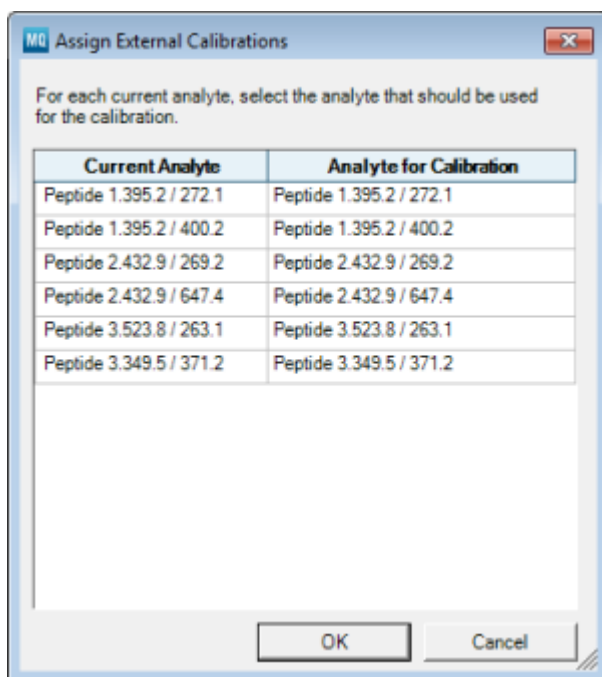
1. Crie uma nova **tabela de resultados** contendo somente o **Standard**.
2. Use o painel **Peak Review** para assegurar que essa integração tenha sido bem-sucedida.
3. Use o comando **Export Calibration** para salvar uma cópia da calibração.
4. Crie uma nova **tabela de resultados** que contenha amostras de uma concentração desconhecida.
5. Aplique a calibração exportada anteriormente para a nova tabela usando o comando **Import External Calibration** ou especificando o arquivo de calibração.
6. Repita as etapas 4 e 5 conforme necessário.

Se a **tabela de resultados** original (com as amostras **Standard**) for alterada, quaisquer calibrações exportadas anteriormente não serão atualizadas automaticamente. A **tabela de resultados** deve ser exportada novamente.

## Importar calibração externa

Se os mesmos nomes de analito são usados na **tabela de resultados** atual como na calibração exportada, então a caixa de diálogo é preenchida automaticamente e o usuário pode clicar em **OK**. Se os analitos na **tabela de resultados** atual estiverem designados para grupos específicos e se os analíticos na calibração exportada estiverem designados para grupos com os mesmos nomes, a caixa de diálogo será preenchida automaticamente. Se houver mais que apenas alguns analitos, use os mesmos nomes de analito em ambos os casos ou use nomes de **Group** consistentes.

Figura 4-1 Caixa de diálogo Assign External Calibrations



---

Rótulo	Descrição
Current Analyte	Contém uma entrada para cada analito no método quantitativo para a <b>tabela de resultados</b> atual.
Analyte for Calibration	Contém uma lista dos nomes de todos os analitos disponíveis no arquivo de calibração externa. Para cada um dos analitos atuais, selecione o analito externo correspondente ao qual a calibração é retirada.

# Menu Rastreamento de auditoria

# 5

**Nota:** O mapa de auditoria é incluído na sessão quando a **tabela de resultados** é criada pela primeira vez. Ele não pode ser alterado após ter sido incluído.

**Tabela 5-1 Menu Rastreamento de auditoria**

Item Menu	Descrição
Audit Trail Viewer	Abre o <b>Audit Trail Viewer</b> .
Audit Map Manager	Seleciona, modifica e ativa <b>Audit Maps</b> .
View Session Audit Map	Abra o mapa atual da <b>tabela de resultados</b> ativa.

## Visualizador de rastreamento de auditoria

O Visualizador de rastreamento de auditoria mostra o histórico completo de uma determinada amostra na tabela de resultados. As Tabelas de resultados são salvas na pasta <drive>:\Analyst Data\Projects\<project name>\Results.

**Nota:**

A tabela de resultados não deve ser oculta ao executar outras ações. Por exemplo, como salvar um Rastreamento de auditoria.

Para maximizar o painel, como o painel Revisão do pico, para visualizar os dados melhor, use o botão **Toggles tab mode** localizado na barra de ferramentas.

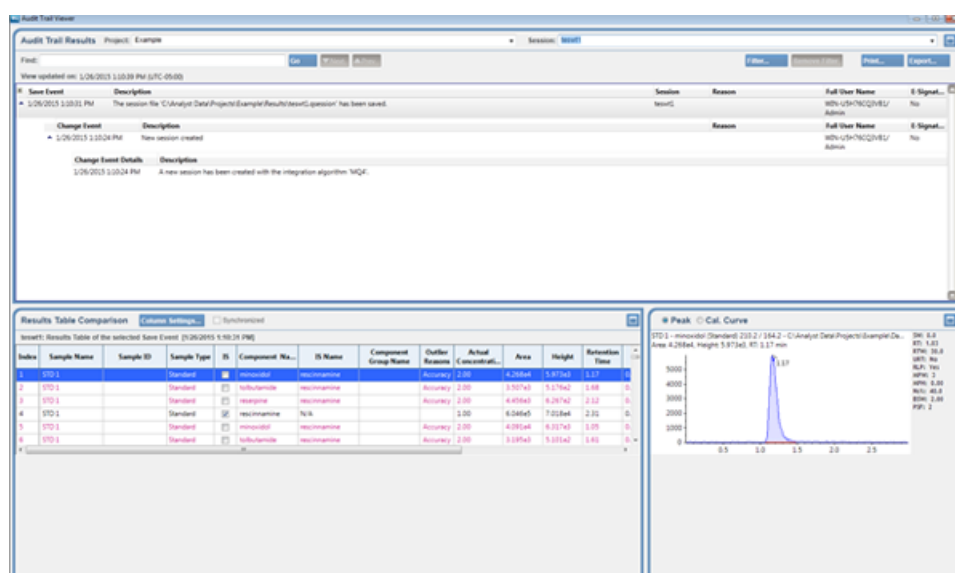
Usando o **Audit Trail Viewer**, os usuários podem:

- Visualize os registros de rastreamento de auditoria para cada **tabela de resultados**.
- Execute uma procura de palavra-chave, que destaca cada ocorrência do texto.
- Filtre os eventos auditados no rastreamento de auditoria do software com base em um conjunto de critérios especificados.
- Exporte os registros de rastreamento de auditoria para um arquivo txt. Arquivos exportados podem ser editados.
- Imprima em um PDF protegido.

## Visualizar os resultados do rastreamento de auditoria no visualizador de rastreamento de auditoria

1. Abre uma tabela de resultados.
2. Clique em **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. Para alterar projetos, clique na lista **Project** e selecione outro projeto.
4. Para visualizar outras sessões, clique na lista **Sessions** e selecione outra sessão. Os usuários também podem selecionar para visualizar todas as sessões no projeto ao mesmo tempo.

**Figura 5-1 Visualizador de rastreamento de auditoria**



Rótulo	Descrição
Project	Selecione um projeto da lista.
Session	Selecione um arquivo de sessão.
Find	Uma busca por palavra-chave sem filtros. Destaca cada ocorrência do texto.
Go	Clique para iniciar a busca.
Next	Clique para passar para a palavra seguinte.
Prev	Clique para passar para a palavra anterior.
Filter	Clique para mostrar somente os eventos que correspondem aos critérios selecionados.
Remove Filter	Clique para remover o filtro.
Print	Clique para imprimir o rastreamento de auditoria.
Export	Clique para exportar o rastreamento de auditoria.

Rótulo	Descrição
Save Event	Quando um arquivo de sessão é salvo, é criado um evento de salvamento. O evento de salvamento captura quaisquer mudanças feitas do evento de salvamento anterior, bem como todos os valores na <b>tabela de resultados</b> .
Description	Detalhes do evento de alteração.
Session	Mostra o nome do arquivo da sessão.
Reason	Mostra o motivo da alteração feita na <b>tabela de resultados</b> .
Full User Name	Exibe o nome do usuário que fez as alterações à <b>tabela de resultados</b> .
E-Signature	Indica se as alterações à <b>tabela de resultados</b> foram aceitas.
Column Settings	Clique para exibir ou ocultar colunas na <b>tabela de resultados</b> .
Synchronized	Selecione para fazer as duas <b>tabelas de resultados</b> rolarem horizontalmente de forma simultânea.
Previous version	Mostra a versão anterior do arquivo da sessão selecionado.
Peak	Clique para exibir o pico da amostra selecionada.
Cal Curve	Clique para exibir a curva de calibração da amostra selecionada.

## Realizar pesquisa por palavra-chave

Os usuários podem pesquisar por palavra-chave, que realça todas as ocorrências do texto.

1. Abre uma tabela de resultados.
2. Clique em **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. No campo **Find**, digite a palavra que será pesquisada e clique em **Go**.

Se houver correspondências, o campo **Find** ficará verde, o número de correspondências aparecerá e a palavra será realçada em amarelo. Se não houver correspondências, o campo **Find** ficará rosa.

4. Use os botões **Next** e **Prev** para passar pelas correspondências.

## Filtrar eventos auditados

Os usuários podem filtrar eventos auditados no rastreamento de auditoria conforme um conjunto de critérios especificados.

1. Abre uma tabela de resultados.
2. Clique em **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. Clique em **Filter**.



Figura 5-2 Caixa de diálogo Filter Audit Trail Events

Item	Descrição
1	Nome do arquivo da <b>tabela de resultados</b> . Um arquivo da <b>tabela de resultados</b> ou todos os arquivos de <b>tabela de resultados</b> para o projeto ativo podem ser filtrados.
2	<b>Descrição:</b> digite o tipo de evento parcial ou completo. <b>Nome da amostra:</b> digite o nome da amostra parcial ou completo. <b>Nome completo do usuário:</b> digite o nome do usuário parcial ou completo. <b>Assinatura eletrônica:</b> Selecione Yes ou No. <b>Motivo:</b> digite o motivo parcial ou completo.
3	<b>é:</b> use para filtrar uma palavra ou frase específica.
4	<b>contém:</b> use para filtrar uma palavra ou frase parcial.
5	<b>Data:</b> use para filtrar eventos que ocorreram em uma data e hora específicos.

4. Na caixa de diálogo **Filter Audit Trail Events**, use as listas para selecionar os critérios de filtro.

**Nota:** O campo Results Table não pode ser editado.

5. Clique em **Clear** para redefinir os critérios de filtro para **No filter**.

6. Clique em **OK** para filtrar os eventos.

---

**Dica!** Para remover o filtro, em **Audit Trail Viewer** clique em **Remove Filter**.

---

## Exportar o visualizador de rastreamento de auditoria

1. Abre uma tabela de resultados.
2. Clique em **Export** e digite um nome de arquivo.

O arquivo é exportado na forma de arquivo de texto delimitado por tabulação.

---

**Nota:** Somente a porção dos eventos salvos do Audit Trail Viewer é exportada.

---

## Imprimir o visualizador de rastreamento de auditoria

1. Abre uma tabela de resultados.
2. Clique em **Print** e selecione uma impressora.

Os usuários podem imprimir um PDF seguro usando pdfFactory.

---

**Nota:** É impressa somente a parte de eventos salvos do Visualizador de Rastreamento de Auditoria.

---

## Gerente de Rastreamento de Auditoria

O software agrupa eventos auditados de quantificação em rastreamentos de auditoria. Os rastreamentos de auditoria são arquivos que armazenam registros dos eventos auditados. Os rastreamentos de auditoria, combinados com arquivos como arquivos wiff, métodos de quantificação e arquivos da **tabela de resultados**, constituem registros eletrônicos que podem ser usados para fins de conformidade.

O software **Audit Trail Manager** mantém todos os eventos conforme definido no mapa de auditoria. O software captura as assinaturas eletrônicas e motivos, incluindo o usuário, a data e os detalhes das mudanças. Ele também registra informações adicionais, como comentários, de acordo com o mapa de auditoria.

---

**Dica!** Um arquivo de sessão contém a **tabela de resultados**, uma cópia do método de quantificação, uma cópia do Mapa de auditoria no momento da criação, assim como todo o rastreamento de auditoria de toda a sessão.

---

Quando o software cria ou modifica uma qsession ou arquivo qmethod, o evento é capturado no **Project Audit Trail** na guia **History** no software Analyst<sup>®</sup> MD. Os eventos a seguir são capturados:

- O arquivo do método de quantificação foi criado.
- O arquivo do método de quantificação foi modificado.
- A **tabela de resultados** de quantificação foi criada.

- A **tabela de resultados** de quantificação foi modificada.

Se a **E-signature** ou o **Reason Prompt** for selecionado para criar ou modificar o arquivo do método de quantificação, o diálogo **Audit Trail** gerado pelo software Analyst<sup>®</sup> MD se abrirá no software MultiQuant<sup>™</sup> MD.

**Tabela 5-2 Audit Trails (Rastreamentos de Auditoria)**

Rastreamento de auditoria	Exemplos de eventos registrados
Rastreamento de Auditoria de Quantificação (um por tabela de resultados)	Mudanças para: <ul style="list-style-type: none"><li>• Criação e modificação de arquivos de sessão.</li><li>• Informações de amostra.</li><li>• Parâmetros de integração de pico.</li></ul>

## Sobre mapas de auditoria

A documentação do software MultiQuant<sup>™</sup> MD mantém todo o histórico de mudança das informações de configurações de processamento associadas aos resultados de quantificação. O software audita todos os eventos de acordo com o mapa de auditoria do projeto ativo e captura todas as assinaturas eletrônicas e link aos respectivos registros.

### Criar um mapa de auditoria

O software instala vários mapas de auditoria. Visualize os mapas de auditoria para decidir se modificar ou não um ou mais deles seria mais fácil que criar um completamente novo. Criando ou modificando mapas de auditoria são eventos auditados no rastreamento de auditoria do projeto do software do Analyst<sup>®</sup> MD.

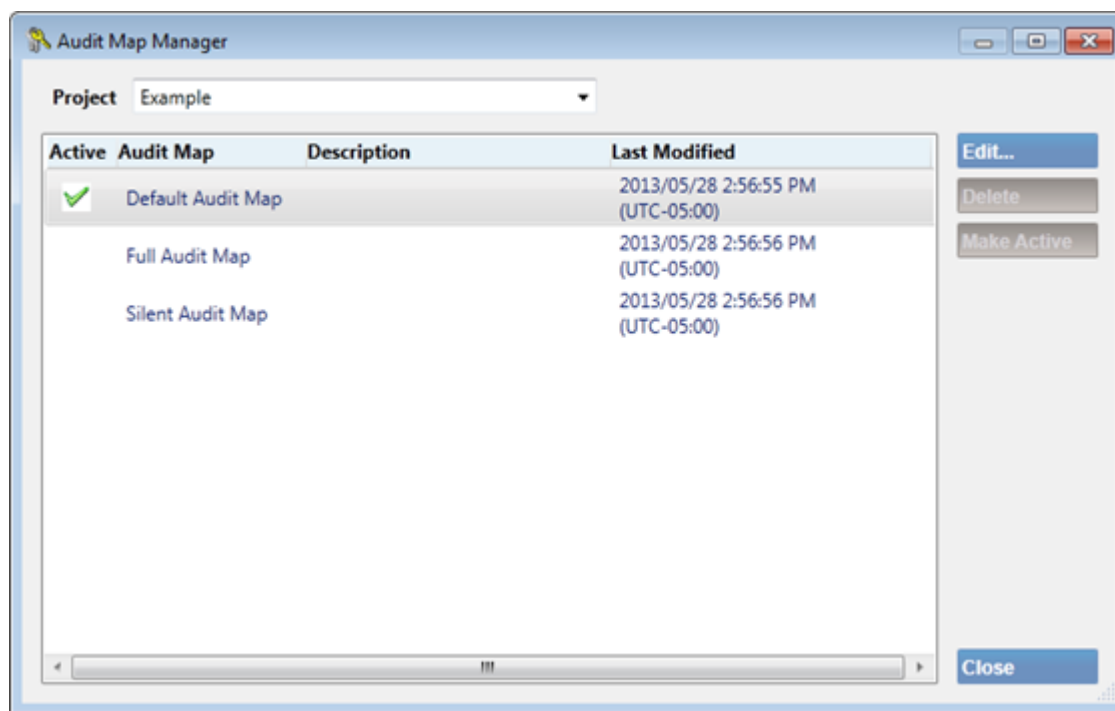
**CUIDADO:** Se dois usuários estiverem modificando o mesmo mapa de auditoria ao mesmo tempo, somente as mudanças feitas pelo usuário que salvo o arquivo serão usadas por último.

O mapa de auditoria ativo para o projeto determina quais eventos são registrado no rastreio de auditoria para quaisquer **tabelas de resultados** criadas.

**Nota:** Após uma **tabela de resultados** ser salva, o mapa de auditoria ativo é salvo com a **tabela de resultados** e o mapa de auditoria não pode ser modificado.

1. Clique em **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Figura 5-3 Gestor de mapa de auditoria



Rótulo	Descrição
Project	Selecione um projeto da lista.
Edit	Clique para editar o mapa de auditoria ativo.
Delete	Clique para excluir o mapa de auditoria selecionado.

2. Na lista **Project**, selecione um projeto para o qual criar um mapa de auditoria.
3. Selecione um mapa de auditoria e clique em **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"/>		

Rótulo	Descrição
Description	Digite uma descrição do mapa de auditoria.
Check	Clique para selecionar uma caixa de seleção.
Uncheck	Clique para desmarcar uma caixa de seleção.
Add Predefined Reasons	Clique para adicionar um motivo predefinido à lista.

4. Digite uma descrição do mapa de auditoria no campo **Description**, caso necessário.
5. Na tabela **Audit Map**, configure cada evento da seguinte maneira:

- Para auditar o evento, selecione a caixa de seleção na coluna **Audited**.

**Dica!** Para preencher células consecutivas em uma coluna com o valor da caixa de seleção, pressione **Ctrl** ou **Shift**, clique nas células, e clique em **Check**.

## Menu Rastreamento de auditoria

---

- Para que os operadores digitem um motivo personalizado ou escolham um motivo predefinido, selecione a caixa de seleção na coluna **Reason Prompt**.
- Para que os operadores selecionem apenas um motivo predefinido para a mudança quando um evento ocorrer, selecione as caixas de seleção nas colunas **Reason Prompt** e **Predefined Reasons Only**. Nas colunas **Predefined Reason** \_\_, selecione até dez motivos.

---

**Dica!** Para adicionar um motivo predefinido, clique em **Add Predefined Reasons**.

---

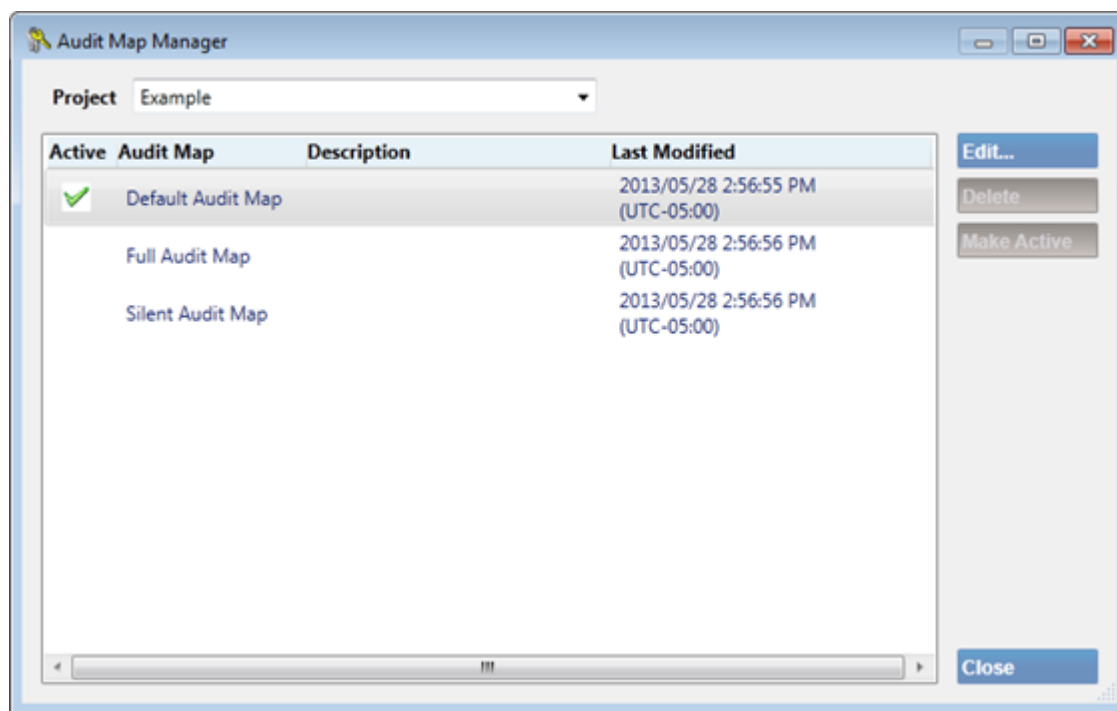
- Para solicitar assinaturas eletrônicas para o evento, selecione a caixa de seleção na coluna **E-Sig**.
6. Clique em **Save As** e, em seguida, digite um nome no diálogo **Save Audit Map As**.
  7. Clique em **Save**.
  8. Clique em **Close** no diálogo **Audit Map Editor**.
  9. Clique em **Make Active**.

Quando um mapa de auditoria é aplicado, ele se torna o mapa de auditoria ativo. A configuração de auditoria no mapa de auditoria ativo determina quais eventos são registrados nos rastreamentos de auditoria deste momento em diante.

## Mudar o mapa de auditoria

1. Clique em **Audit Trail (Rastreamento de auditoria) > Audit Map Manager (Gestor de mapa de auditoria)**.

Figura 5-5 Gestor de mapa de auditoria



Rótulo	Descrição
Project	Selecione um projeto da lista.
Edit	Clique para editar o mapa de auditoria ativo.
Delete	Clique para excluir o mapa de auditoria selecionado.

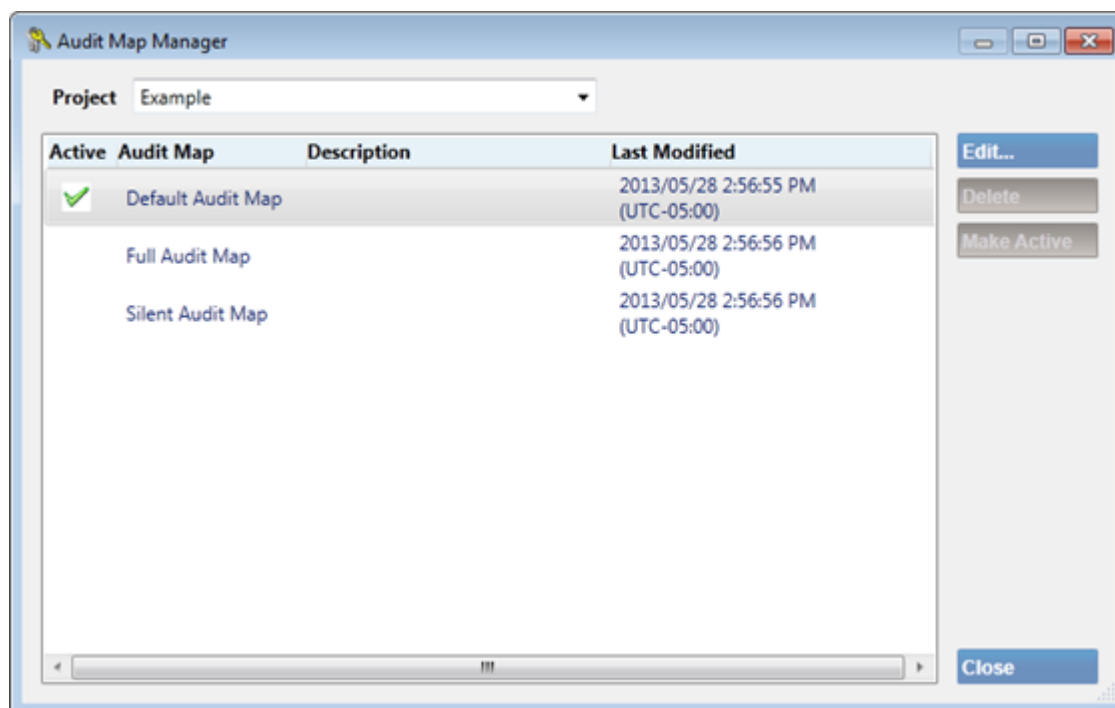
2. Na lista **Project**, selecione um projeto para o qual alterar o mapa de auditoria.
3. Selecione outro mapa e, em seguida, clique em **Make Active**.
4. Clique em **Close**.

## Editar o mapa de auditoria

Os seguintes eventos de auditoria são sempre registrados e, portanto, não são mostrados no **Audit Map Editor**: imprimir relatório, exportar tabela de resultados e transferir para LIMS.

1. Clique em **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Figura 5-6 Gestor de mapa de auditoria



Rótulo	Descrição
Project	Selecione um projeto da lista.
Edit	Clique para editar o mapa de auditoria ativo.
Delete	Clique para excluir o mapa de auditoria selecionado.

2. Selecione um mapa de auditoria e clique em **Edit**.



Figura 5-7 Editor de mapa de auditoria

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"/>		

Rótulo	Descrição
Description	Digite uma descrição do mapa de auditoria.
Check	Clique para selecionar uma caixa de seleção.
Uncheck	Clique para desmarcar uma caixa de seleção.
Add Predefined Reasons	Clique para adicionar um motivo predefinido à lista.

3. Digite uma descrição do mapa de auditoria no campo **Description**, caso necessário.
4. Na tabela **Audit Map**, configure cada evento da seguinte maneira:

- Para auditar o evento, selecione a caixa de seleção na coluna **Audited**.

**Dica!** Para preencher células consecutivas em uma coluna com o valor da caixa de seleção, pressione **Ctrl** ou **Shift**, clique nas células e clique em **Check**.

## Menu Rastreamento de auditoria

---

- Para que os operadores digitem um motivo personalizado ou escolham um motivo predefinido, selecione a caixa de seleção na coluna **Reason Prompt**.
- Para que os operadores selecionem apenas um motivo predefinido para a mudança quando um evento ocorrer, selecione as caixas de seleção nas colunas **Reason Prompt** e **Predefined Reasons Only**. Nas colunas **Predefined Reason** \_\_, selecione até dez motivos.

---

**Dica!** Para adicionar um motivo predefinido, clique em **Add Predefined Reasons**.

---

- Para solicitar assinaturas eletrônicas para o evento, selecione a caixa de seleção na coluna **E-Sig**.
5. Clique em **Save**.
  6. Clique em **Make Active**.

Quando um mapa de auditoria é aplicado, ele se torna o mapa de auditoria ativo. A configuração de auditoria no mapa de auditoria ativo determina quais eventos são registrados nos rastreamentos de auditoria deste momento em diante.

## Visualizar a Embedded Audit Configuration

A configuração de auditoria usada para uma tabela de resultados é integrada ao arquivo da tabela de resultados quando a tabela de resultados é criada. Essa configuração não pode ser alterada. O horário exibido próximo ao nome do mapa de auditoria indica quando o mapa de auditoria usado para integrar a configuração foi salvo por último.

1. Abre uma tabela de resultados.
2. Clique em **Audit Trail > View Session Audit Map**.

Figura 5-8 Mapa de auditoria de sessão

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

Com a exceção do item **About**, esse menu contém os itens listados em [Tabela 6-1](#). Esses arquivos são automaticamente instalados e também podem ser localizados na pasta <drive>:\Program Files\AB SCIE\MultiQuant 3\Help.

Documentos ou pastas (ou atalhos para eles) podem ser copiados nessa pasta Help para que apareçam automaticamente no menu.

**Tabela 6-1 Menu Help**

Item Menu	Descrição
Install License	Clique para abrir o diálogo MultiQuant™ MD Activation.
Verify Installation	Clique para verificar os arquivos e instalação.
Software Reference Guide	Descreve os recursos e funcionalidade do software.
Software Release Notes	Fornecer informações sobre o software, bem como procedimentos para instalação do software.
About	Mostra a versão do programa, copyright e outras informações do programa, junto com informações sobre quais recursos de licença são instalados.

# Tabelas de resultados

7

Uma **tabela de resultados** é o ponto inicial para revisão e exportação de dados. Use o **New Results Table wizard** ou clique em **File > New Results Table** para criar uma tabela de resultados. Consulte [Caixa de diálogo Results Table na página 43](#).

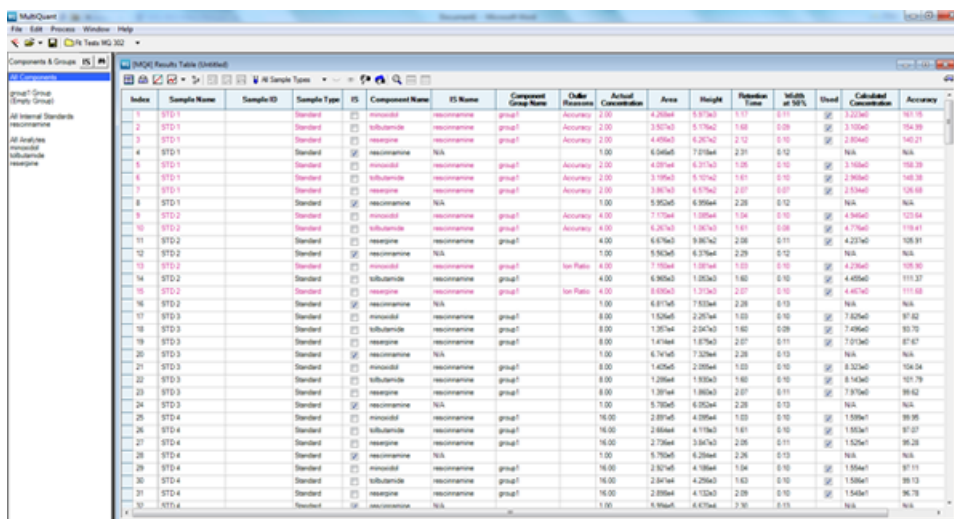
**Nota:** As colunas **Sample Name** e **Sample ID** não podem conter: \ / : \* ? " < > | =.

A configuração de auditoria usada para uma **tabela de resultados** é incorporada ao arquivo da **tabela de resultados** quando a **tabela de resultados** for criada. Essa configuração não pode ser alterada. O horário exibido ao lado do nome do mapa de auditoria indica quando o mapa de auditoria utilizado para adicionar a configuração foi salvo pela última vez.

**Nota:** Ao mover os dados, mova o projeto completo para manter a estrutura do arquivo. Se o arquivo e a estrutura de pastas não forem mantidos, uma **tabela de resultados** ou os cromatogramas não poderão ser visualizados.

Há uma linha separada para cada componente para cada uma das amostras selecionadas originalmente.

Figura 7-1 Exemplo de tabela de resultados



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	4.286e5	5.176e5	1.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.225e5	161.76
2	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.527e5	5.176e5	1.00	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.332e5	154.39
3	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.495e5	6.267e5	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.893e5	142.21
4	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.346e5	7.015e4	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	6.317e5	1.08	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.165e5	158.28
6	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.198e5	5.176e5	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.265e5	148.38
7	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.367e5	6.176e5	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.534e5	126.68
8	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.952e5	6.955e4	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	1.54	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.545e5	123.64
10	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.267e5	1.367e5	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.775e5	119.61
11	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	4.676e5	9.367e5	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.207e5	109.91
12	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.952e5	6.317e4	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	7.175e4	1.085e4	1.53	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.235e5	109.30
14	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.955e5	1.085e5	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.455e5	111.27
15	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	4.695e5	1.375e5	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.467e5	111.62
16	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.817e5	7.932e4	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	1.625e5	2.257e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.625e5	97.62
18	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.357e4	2.347e5	1.60	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	7.495e5	93.70
19	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.474e4	1.875e5	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.013e5	87.67
20	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.747e5	7.125e4	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	1.405e5	2.055e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.323e5	104.54
22	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.295e4	1.935e5	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.143e5	101.79
23	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.397e4	1.860e5	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.975e5	89.62
24	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.795e5	6.952e4	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	2.397e5	4.255e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.595e5	89.98
26	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.885e4	4.176e5	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.935e5	97.07
27	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.755e4	3.947e5	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.525e5	95.28
28	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.795e5	4.255e4	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	2.927e5	4.185e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.985e5	97.11
30	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.347e4	4.255e5	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.595e5	98.13
31	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.885e4	4.125e5	2.09	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.545e5	96.78
32	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.955e5	6.475e4	2.30	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

- As colunas **IS**, **Component Name** e **IS Name** contêm informações sobre os analitos.
- A caixa de seleção indica o padrão interno para a amostra.
- Selecione quais colunas são mostradas na **tabela de resultados** usando a caixa de diálogo **Column Settings**. Consulte [Configurações da coluna na página 40](#).

## Tabelas de resultados

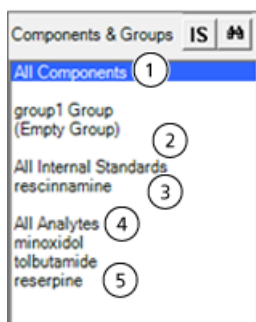
- Mude a largura das colunas arrastando a linha que separa os cabeçalhos das duas colunas. Essas informações são salvas automaticamente e são aplicadas quando o usuário abre **tabelas de resultados** salvas anteriormente.
- Mude a ordem das colunas clicando em um cabeçalho de coluna e arrastando-o para um novo local. Essas informações são salvas automaticamente e são aplicadas quando o usuário abre **tabelas de resultados** salvas anteriormente.
- Os usuários podem limitar a tabela de resultados para que mostre somente as linhas correspondentes a analitos ou padrões internos específicos. Use a barra de ferramentas para limitar os tipos de amostra exibidos. Consulte [Lista de componentes e grupos na página 38](#) e [Filtro de tipo de amostra na página 42](#).
- Determinadas operações, como a sincronização com o painel **Peak Review**, são aplicadas à linha ou às linhas selecionadas atualmente. Selecione linhas ao clicar na área à esquerda da primeira coluna.

## Lista de componentes e grupos

Quando uma **tabela de resultados** é aberta, uma lista dos componentes e grupos atuais é exibida no lado esquerdo da janela principal. Use esta lista para alterar quais componentes ficam visíveis na **tabela de resultados** bem como qualquer painel **Peak Review** ou gráfico **Calibration** vinculado.

Os componentes são definidos na forma de uma transição única ou faixa de massas. Um Grupo é definido como o nome do grupo ao qual o componente pertence.

Figura 7-2 Lista de componentes e grupos



Item	Rótulo	Descrição
1	Todos os componentes	Clique para visualizar todos os analitos e padrões internos disponíveis na <b>tabela de resultados</b> , bem como o <b>Peak Review</b> e <b>Calibration</b> relacionados, se exibidos.
2	Todos os padrões internos	Clique para visualizar todos os padrões internos e ocultar todos os analitos. Este item não aparece quando não há padrões internos definidos.
3	Padrões internos específicos	O nome de cada padrão interno separado está incluído na lista. Clique em um desses itens para visualizar esse padrão interno e ocultar todos os outros componentes.

Item	Rótulo	Descrição
4	Todos os analitos	Clique para visualizar todos os analitos e ocultar todos os padrões internos. Este item não é incluído quando não há padrões internos definidos.
5	Analitos específicos	O nome de cada analito separado está incluído na lista. Clique em um desses itens para visualizar esse analito e ocultar todos os outros componentes.

Clique em um item individual na lista para exibir somente os componentes daquele item. Pressione **Shift** ou **Ctrl** para selecionar múltiplos itens. Isso é útil para exibir, por exemplo, apenas dois analitos específicos. Use as setas para cima e para baixo quando a lista está ativa para mover pelos itens.

**Dica!** Alargue ou estreite a lista arrastando a margem direita do painel para a esquerda ou direita.

A ordem atual das linhas na tabela de resultados não é afetada pelo filtro. A tabela de resultados é predefinida para ser ordenada primeiro pela amostra e depois pelo componente, seguindo a ordem indicada no método quantitativo. No entanto, a tabela pode também ser ordenada em uma ordem específica, conforme descrito em [Ícones do software na página 154](#).

## Menu de contexto da tabela de resultados

Clique com o botão direito na tabela de resultados para acessar um menu de contexto. Os comandos a seguir estão disponíveis.

**Tabela 7-1 Opções de Menu ativo com o botão direito da tabela de resultados**

Opção de menu	Descrição
Column Settings	Use esse comando para editar as colunas da <b>tabela de resultados</b> . As mudanças só são aplicadas à <b>tabela de resultados</b> atual a menos que seja salvo como padrão do projeto.
Add Custom Column	Inclui uma nova coluna editável na tabela. Preencha a coluna digitando diretamente nas células ou colando o conteúdo. Qualquer texto pode ser inserido, como comentários ou os resultados de cálculos personalizados.
Rename Custom Column	Renomeia uma coluna personalizada existente. Antes de usar esse comando, clique no cabeçalho personalizado para selecionar a coluna personalizada.
Remove Custom Column	Use para excluir uma coluna personalizada existente. Antes de usar esse comando, clique no cabeçalho da coluna para selecionar a coluna personalizada.
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	Fornece um atalho para configurar o campo <b>Actual Concentration</b> para todos os analitos para amostras do tipo <b>Standard</b> se mais de um analito e todos os analitos estiverem presentes nessas amostras na mesma concentração. Consulte <a href="#">Aplicar concentrações reais atuais para todos os analitos na página 40</a> .

**Tabela 7-1 Opções de Menu ativo com o botão direito da tabela de resultados (continuação)**

Opção de menu	Descrição
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	Semelhante a <b>Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All</b> exceto que se aplica a padrões internos em vez de analitos.
Set 'Used'	Use esse comando para executar a quantificação absoluta para determinar se uma determinada amostra <b>Standard</b> deve ser usada no cálculo da curva de calibração para um analito fornecido.  Os dois primeiros itens são usados para selecionar ou limpar o campo <b>Used</b> para as linhas selecionadas atualmente na <b>tabela de resultados</b> . O terceiro e quarto itens são parecidos, exceto pelo fato de a operação se aplicar a todos os analitos de todas as amostras correspondentes a uma linha selecionada.
Set Peaks to 'Not Found' for Selected Rows	Use esse comando para limpar a integração de pico para as linhas selecionadas atualmente.

## Aplicar concentrações reais atuais para todos os analitos

1. Use [Lista de componentes e grupos na página 38](#) para limitar a tabela para somente exibir um analito específico.
2. Use opcionalmente **Sample Type Filter** para visualizar apenas amostras **Standard**. Consulte [Filtro de tipo de amostra na página 42](#).
3. Especifique as concentrações atuais para o analito, digitando diretamente nas células ou selecionando a coluna e selecionando **Paste** se as concentrações estiverem disponíveis em outro lugar em um formato de texto.
4. Clique em **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All**.
5. Retorne para visualizar todos os componentes e todos os tipos de amostra, conforme solicitado.

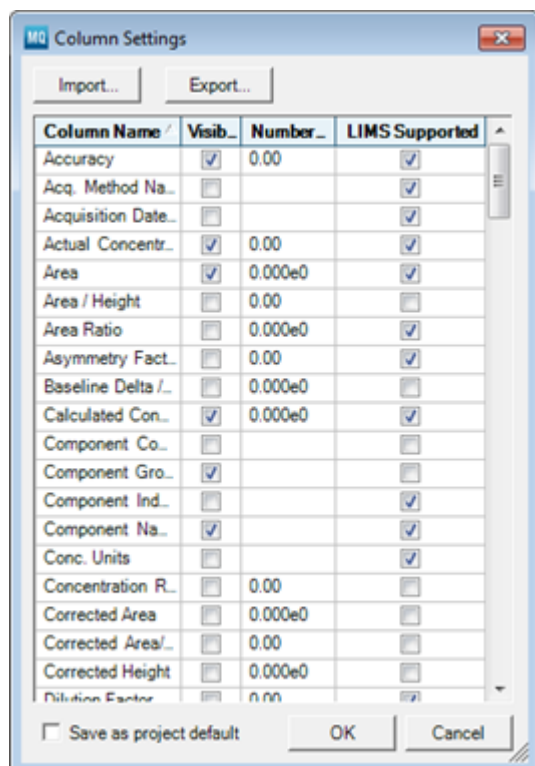
## Configurações da coluna

Se os nomes das colunas estiverem cortados, mova o cursor sobre o campo para exibir o nome da coluna em uma dica de ferramenta.

Para campos numéricos, utilize o formato 0.00 para observações não científicas e utilize o formato 0.00e0 para observações científicas. Altere os pontos decimais para indicar a precisão dos números que serão exibidos. Somente um ponto final (.) pode ser usado como um separador decimal. O agrupamento de dígitos não é compatível.



Figura 7-3 Caixa de diálogo Column Settings



Campo	Descrição
Import	Clique para selecionar um arquivo de configurações de coluna salvo anteriormente usando <b>Export</b> . Os campos da caixa de diálogo serão atualizados para utilizar as informações do arquivo selecionado.
Export	Clique para salvar as configurações da caixa de diálogo atual em um arquivo. Isso permite que o usuário alterne entre diferentes configurações de coluna.
Column Name	Exibe o nome das colunas em ordem alfabética. Consulte <a href="#">Colunas da tabela de resultados na página 53</a> .
Visible	Selecione para tornar a coluna visível. Caso contrário a coluna é ocultada.
Number Format	Para campos numéricos, utilize o formato 0.00 para observações não científicas e utilize o formato 0.00e0 para observações científicas. Para a precisão exibida, mude as casas decimais.
LIMS Supported	As linhas que mostram LIMS Supported selecionado são predefinidas pelo LIMS e as seleções da coluna não podem ser alteradas.
Save as project default	Selecione para utilizar as configurações de coluna na tabela de resultados futura.

## Filtro de tipo de amostra

Tabela 7-2 Descrições do filtro de tipo de amostra

Tipo de filtro	Descrição
All Sample Types	Mostra todos os tipos de amostra.
Unknowns	Exibe apenas amostras Unknown, que são amostras normais de concentração desconhecida. Quando amostras Padrão são usadas, sua concentração é inversamente calculada a partir da curva de calibração e reportada na tabela de resultados como Concentração calculada. Consulte <a href="#">Equações de regressão na página 126</a> .
Standard	Mostra apenas as amostras de concentração conhecida. Essas amostras são usadas para a criação da curva de calibração.
Quality Controls	Mostra apenas as amostras de Controle de Qualidade. Essas amostras de concentração conhecida são usadas para verificar a precisão da curva de calibração, mas não influenciam a construção real.
Quality Controls	Mostra as amostras Padrão e de Controle de qualidade.
Unknowns, Standards & QC	Mostra as amostras Unknown, Standard e de Quality Control.
Blank	Mostra apenas as amostras do Branco. Geralmente, são amostras que contêm os compostos de padrão interno, quando usados, mas nenhum analito, e que passaram pelo procedimento normal de preparação de amostra. Essas amostras não são usadas na construção da curva de calibração. Para incluí-las, selecione o tipo de amostra Padrão e defina a Actual Concentration para 0.
Double Blank	Mostra apenas as amostras do Duplo Branco. São amostras sem padrões internos nem analitos.
Solvent	Mostra apenas as amostras de Solvente. São duplos brancos que não passaram pelo procedimento normal de preparo de amostra.
Blanks, Double Blanks & Solvents	Mostra todos os tipos de amostras em branco: Em branco, Duplo Branco e Solvente.

## Visualizar linhas ocultas

Na **tabela de resultados**, para qualquer componente fornecido, as linhas são vistas somente para aquelas amostras para as quais a transição MRM correspondente está disponível. As linhas não usadas, componentes com transições não disponíveis para uma amostra fornecida, estão presentes na tabela, mas elas são ocultas por padrão.

1. Mostre a coluna **Peak Comment** na **tabela de resultados**, se ainda não estiver visível.
2. Classifique a tabela usando essa coluna.

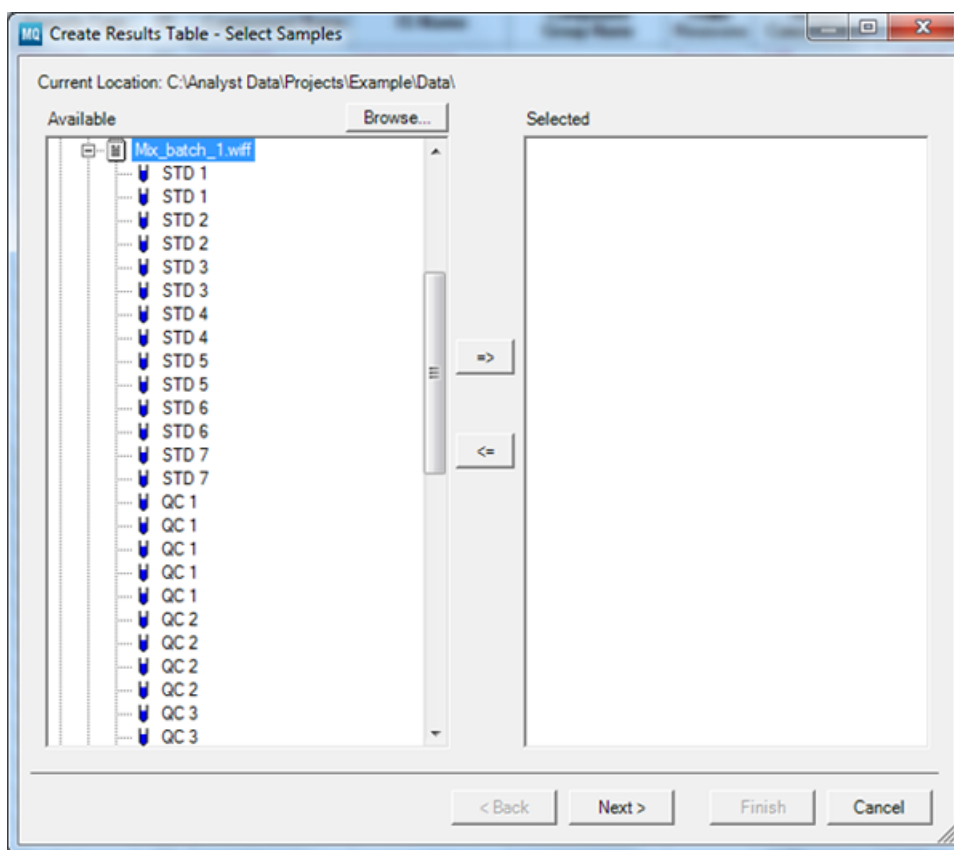
3. Selecione as linhas (agora adjacentes) com o comentário **Not Present**.
4. Clique no ícone **Hide selected rows(s)**. Consulte [Ícones do software na página 154](#).

## Caixa de diálogo Results Table

### Selecionar amostras

Selecione amostras dos arquivos wiff a serem processados.

Figura 7-4 Página Create Results Table - Select Samples

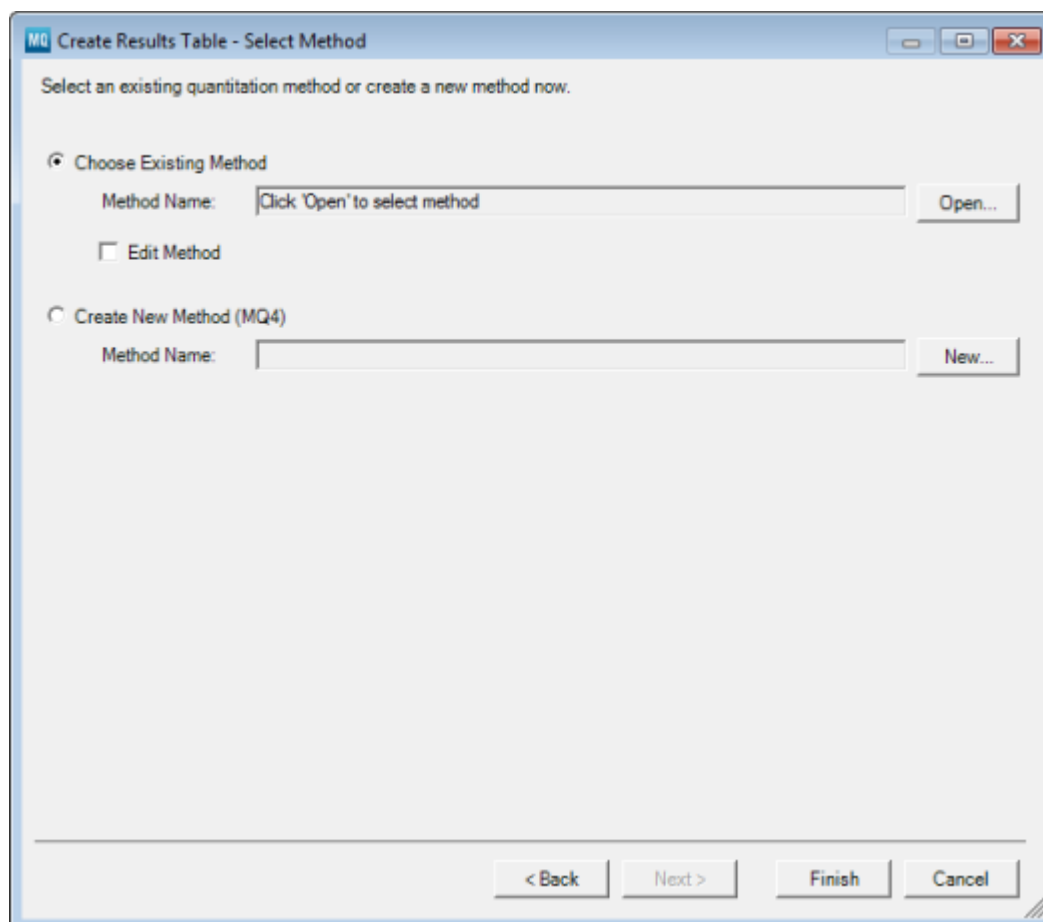


- O painel **Available** mostra as subpastas, arquivos wiff e amostras disponíveis na pasta **Data** para a pasta selecionada.
- Expanda pastas individuais para ver quaisquer subpastas ou arquivos wiff. Se o arquivo wiff for expandido, ele se abre para mostrar as amostras disponíveis.
- Utilize as setas para adicionar ou remover amostras.
- Selecione as amostras ao clicar duas vezes em uma amostra individual através da seleção de uma amostra ou arquivo de dados e, então, clicando no botão =>, ou arrastando uma amostra ou arquivo de dados do painel esquerdo para o direito. Pressione **Shift** ou **Ctrl** para selecionar amostras ou arquivos múltiplos antes de movê-los.

## Selecionar método

Selecione o método quantitativo. Se um método existente for selecionado, porém não editado, uma barra de progresso é exibida enquanto as amostras selecionadas são processadas. No final desse processo, uma **tabela de resultados** é criada.

Figura 7-5 Página Create Results Table - Select Method



Rótulo	Descrição
Choose Existing Method	Clique em <b>Open</b> para selecionar um método quantitativo existente.
Edit Method	Selecione este comando para editar um método existente. As páginas subsequentes do assistente são preenchidas com informações do método existente que podem ser modificadas conforme necessário.
Create New Method	Clique em <b>New</b> para criar um método quantitativo. O algoritmo entre parênteses é o algoritmo selecionado na caixa de diálogo <b>Integration Defaults</b> .

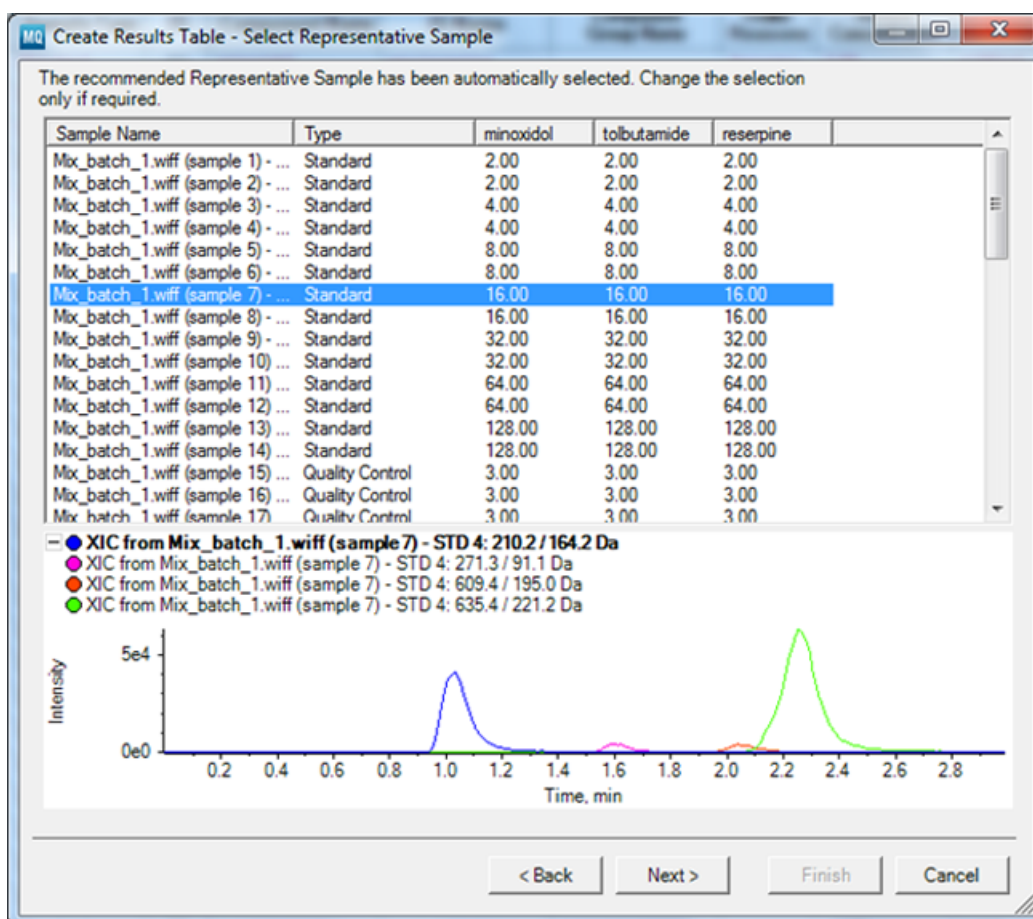
## Selecionar amostra representativa

A página **Select Representative Sample** mostra a amostra representativa selecionada para a qual os cromatogramas são exibidos ao configurar visualmente os parâmetros de confirmação do pico e integração. Essa amostra deve conter todos os compostos que serão incluídos no método de quantificação.

Se os tipos de amostra e concentrações de analitos foram selecionados usando o Editor de lote do software Analyst<sup>®</sup> MD antes de as amostras serem adquiridas, essas informações serão exibidas como colunas adicionais.

O software seleciona uma amostra por padrão. Se a amostra selecionada não for apropriada, selecione outra amostra representativa. Se o algoritmo SignalFinder<sup>™</sup> for selecionado, para evitar gerar um modelo de integração incorreto, nenhuma amostra representativa será recomendada pelo software se o nível TIC estiver acima de 1.0e6 em todas amostras. Os usuários podem selecionar uma amostra representativa manualmente neste cenário.

Figura 7-6 Página Create Results Table - Select Representative Sample



## Definir componentes

A página **Define Components** contém uma linha para cada analito ou padrão interno. Seleciona os nomes dos analitos e padrões internos, se usados. Consulte [Menu do botão direito de Define Components na página 47](#).

Figura 7-7 Página Create Results Table - Define Components

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"/>				

Rótulo	Descrição
Experiment	Selecione um experimento para processar a partir da lista. Para dados multiperíodo ou multiexperimento, selecione cada um dos experimentos que devem ser processados e preencha a tabela com os componentes para o experimento correspondente.
Row	Contém o número da linha atual.
IS	Indica se o componente definido para a linha é um analito (não selecionado) ou um padrão interno (selecionado).
Name	Contém o nome do componente. Para experimentos de MRM, o nome é preenchido automaticamente usando as massas de transição <b>Q1/Q3</b> . Para um nome mais específico, digite um nome no campo.

Rótulo	Descrição
Group	<p>Contém o nome do grupo ao qual o componente da linha pertence. Se os analitos ou padrões internos que são relacionados uns aos outros forem colocados no mesmo grupo, eles podem ser revisados e manipulados em conjunto mais facilmente. Isso é verdade para entidades que possuem o mesmo tempo de retenção que a outra, por exemplo, transições de MRM diferentes para o mesmo composto.</p> <p>Digite os nomes de grupos ou insira-os automaticamente. Consulte <a href="#">Menu do botão direito de Define Components na página 47</a>.</p>
IS Name	Contém o nome do padrão interno opcional que deveria ser usado para o analito definido para a linha. Este campo não é aplicável aos próprios padrões internos.
Mass Info	<p>Para experimentos de MRM, esta coluna é intitulada <b>Q1/Q3</b> e contém o par de massa para o componente definido para a linha. Selecione a transição necessária a partir da lista que mostra todas as transições disponíveis para o experimento. Geralmente, a coluna é inicializada automaticamente com as transições disponíveis.</p> <p>Para os experimentos de perfil (varredura), esta coluna é intitulada <b>Start - Stop</b> e contém a faixa de massas usada para calcular um XIC (cromatograma de íon extraído) para o componente definido para a linha. Digite a faixa de massas com um hífen que separe as duas massas. Por exemplo, 200-201 ou 200-1. Para a última opção, a faixa de massa é 199,5-200,5</p>

### Menu do botão direito de Define Components

Clique com o botão direito na página **Define Components** para acessar um menu de contexto. Os comandos a seguir estão disponíveis.

**Tabela 7-3 Opções do menu do botão direito de Define Components**

Opção do menu	Descrição
Clear	Limpa o conteúdo de quaisquer linhas ou colunas selecionadas. As linhas são selecionadas ao clicar ou arrastar na área antes dos números de linha.
Copy	Copia quaisquer linhas ou colunas selecionadas para a área de transferência.
Paste	Cola o conteúdo da área de transferência.
Find Component by Name	<p>Seleciona o componente cujo <b>Name</b> corresponde ao texto. O texto exato não é necessário para encontrar uma correspondência. Isso é útil para selecionar um componente específico, se houver muitos componentes.</p> <p>Se nenhuma linha é selecionada inicialmente na planilha, a busca começa da primeira linha. Caso contrário, a busca começa a partir da linha seguinte à linha selecionada e retorna para o começo. Isso é útil se houver mais que um componente cujo <b>Name</b> contém o texto. Se a primeira pesquisa não encontrar o componente, pesquise novamente, deixando o primeiro componente selecionado, para localizar outra correspondência na tabela.</p>
Insert Row Above	Insere uma única linha em branco imediatamente acima da linha selecionada atualmente.

**Tabela 7-3 Opções do menu do botão direito de Define Components (continuação)**

Opção do menu	Descrição
Delete Selected Rows	Remove as linhas selecionadas atualmente da tabela.
Sum Multiple Ions	Soma cromatogramas para múltiplas transições de MRM ou faixas de massas de varredura completa. Após o comando ser selecionado, colunas de massa adicionais são adicionadas à tabela <b>Components</b> . Quaisquer massas selecionadas para uma determinada linha são usadas na construção do XIC resumido para o analito ou padrão interno correspondente. É recomendado que esse recurso seja sempre selecionado.
Groups	Consulte <a href="#">Submenu dos grupos na página 83</a> .
Internal Standards	Consulte <a href="#">Submenu do padrão interno na página 85</a> .

## Definir integração

Selecione o tempo de retenção esperado e outros parâmetros de confirmação do pico para cada um dos componentes.

A lista à esquerda mostra uma entrada para cada componente definido na página anterior do assistente. Clique em uma linha específica para visualizar o cromatograma correspondente e a integração atual para a amostra representativa. Role pela lista usando as setas para cima e para baixo ou usando a roda de rolagem do mouse. Em geral, recomenda-se que todos os componentes sejam revisados para a exatidão da integração. No entanto, se houver muitos componentes, use o comando **Highlight Components with Uncertain RT** para limitar o número a ser revisado.

**Nota:** Se houver mais que alguns componentes, certifique-se de que os parâmetros de confirmação do pico estejam configurados com padrões razoáveis antes de executar o assistente para evitar o ajuste dos parâmetros para cada componente.

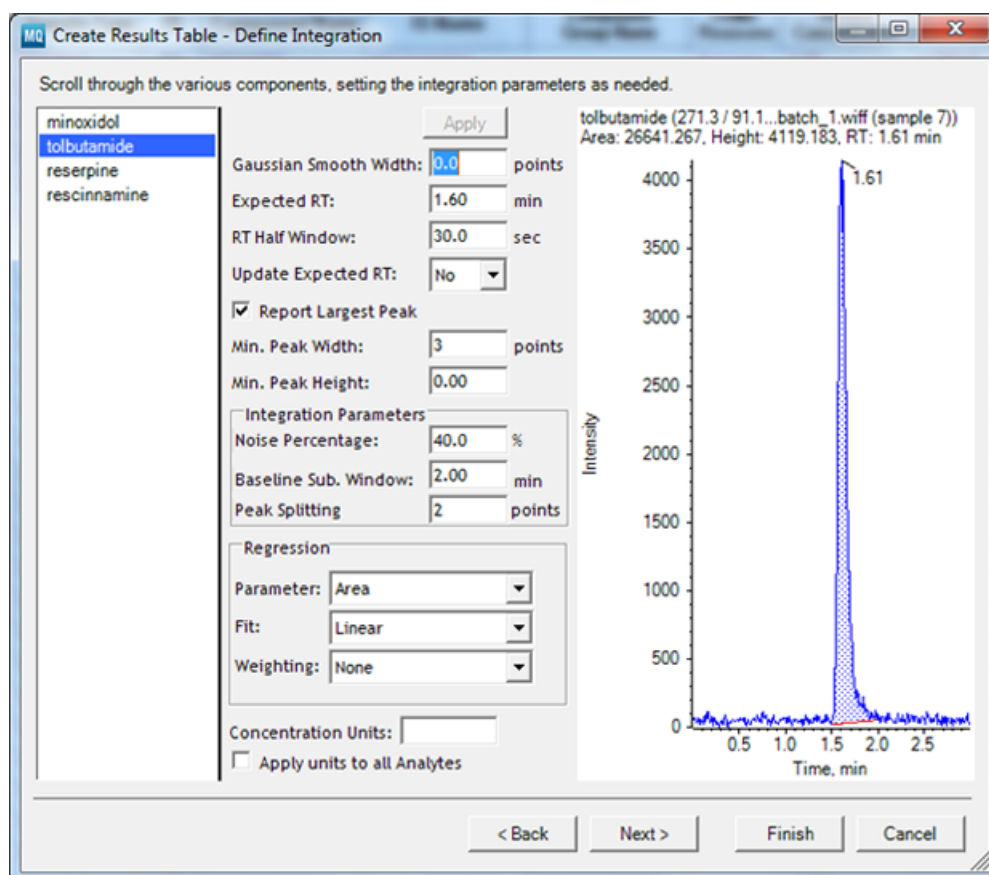
Clique com o botão direito na página para visualizar os comandos disponíveis. Consulte [Menu do botão direito de Define Integration na página 50](#).

No grupo **Regression**, altere as opções de calibração para todos ou para os componentes selecionados após a tabela de resultados ser criada. Configure as unidades de concentração padrão e os parâmetros de regressão de modo que eles não precisem ser ajustados toda vez.

**Dica!** Amplie o gráfico arrastando as regiões do eixo x ou y. Retorne para a visualização pré-configurada usando o menu de contexto (**Home Graph Axes**) ou clicando duas vezes na região do eixo.



Figura 7-8 Página Create Results Table - Define Integration



Rótulo	Descrição
Apply	Ajusta os parâmetros de confirmação do pico, se necessário, para um determinado componente. Ao criar a nova tabela de resultados, os parâmetros especificados para um determinado componente são aplicados para esse componente para todas as amostras quando os dados são integrados. Consulte <a href="#">Parâmetros de algoritmos de integração na página 120</a> .
Expected RT	Inicialmente configurado como o tempo de retenção do ponto com a maior intensidade para o cromatograma. Geralmente, esse é o pico exigido. No entanto, se isômeros estiverem presentes, esse valor pode precisar ser ajustado. Para ajustar o valor, digite um novo valor no campo <b>Expected RT</b> e clique em <b>Apply</b> . Alternativamente, clique no gráfico e arraste até o pico de interesse. Tome cuidado para não arrastar o cursor acidentalmente no gráfico e ajustar o tempo de retenção esperado.
Parameter	Selecione <b>Area</b> ou <b>Height</b> .
Fit	Os diversos tipos de ajuste estão descritos em <a href="#">Equações de regressão na página 126</a> .
Weighting	Os diversos tipos de ponderação estão descritos em <a href="#">Fatores de ponderação na página 127</a> .

## Tabelas de resultados

Rótulo	Descrição
Concentration Units	Digite as unidades de concentração usadas para os analitos e quaisquer padrões internos. Se uma quantificação relativa for realizada, deixe este campo em branco. O assistente assume que as mesmas unidades são usadas para todos os componentes. Se este não for o caso, use o <b>Quantitation Method Editor</b> .
Apply units to all Analytes	Os usuários podem digitar uma unidade de concentração para componentes individuais. Para aplicar a mesma unidade a todos os componentes, selecione esta caixa de seleção. As informações devem ser consistentes com as <b>Concentration Units</b> .

### Menu do botão direito de Define Integration

Clique com o botão direito na página **Define Integration** para acessar o menu de contexto. Os comandos a seguir estão disponíveis.

**Tabela 7-4 Opções do menu do botão direito de Define Integration**

Opção do menu	Descrição
Find Component by Name	Semelhante ao comando disponível na página <b>Define Components</b> , exceto que a diferença é que em vez de selecionar linhas da planilha <b>Components</b> , itens individuais na lista de componentes são selecionados.
Highlight Components with Uncertain RT	Usado para realçar os componentes para os quais o tempo de retenção esperado padrão (definido como o RT do pico com a maior intensidade para cada cromatograma) está incorreto. Se houver somente alguns componentes, revise cada um individualmente e não use este comando. No entanto, se houver muitos componentes, use este comando para verificar visualmente apenas aqueles para os quais há mais de um pico significativo presente no cromatograma. Consulte <a href="#">Caixa de diálogo Highlight Components na página 87</a> .
Home Graph Axes	Retorna o gráfico ampliado para sua visualização original, onde todos os dados ficam visíveis.

Tabela 7-4 Opções do menu do botão direito de Define Integration (continuação)

Opção do menu	Descrição
Overlay Other Components for Group	<p>Use este comando para sobrepor os cromatogramas se diversos componentes foram atribuídos a grupos e se for esperado que os componentes atribuídos a qualquer grupo tenham o mesmo tempo de retenção. Por exemplo, se eles representam diferentes transições de MRM do mesmo composto real.</p> <p>Ao ser selecionado, o cromatograma para o componente atual, cujos parâmetros de integração estão sendo definidos, é desenhado usando um traço azul sólido e a área do pico integrado é exibida. Os cromatogramas, e não a área do pico integrado, para os outros componentes no mesmo grupo são sobrepostos usando um estilo de linha tracejada.</p>
Update Retention Times	<p>Usado para redefinir os tempos de retenção esperados para um método quantitativo criado anteriormente. Se um método quantitativo existente é aberto e a opção <b>Set New Typical Sample</b> for selecionada, os cromatogramas mostrados correspondem à nova amostra, mas os tempos de retenção esperados são mantidos inalterados.</p> <p>Para cada componente, o tempo de retenção previsto é atualizado para corresponder ao tempo de retenção do pico com a maior intensidade dentro de uma janela da largura especificada centrada no tempo de retenção original previsto.</p> <p>Consulte <a href="#">Caixa de diálogo Update Retention Time na página 87</a>.</p>

## Configurações de valor extremo

Os usuários podem sinalizar os valores extremos da acurácia para **Standards**, **QCs**, **Ion Ratio** e **Calculated Concentration**. Os comandos a seguir estão disponíveis.

Figura 7-9 Caixa de diálogo 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

Rótulo	Descrição
Accuracy for Standards	Edita a tolerância de acurácia das amostras <b>Standard</b> .
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Edita a tolerância da acurácia para as amostras <b>Standard</b> com um valor que é consistente com os procedimentos operacionais padrão do laboratório.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Edita a tolerância da acurácia para a concentração mais baixa <b>Standard</b> se o procedimento operacional padrão do laboratório indicar uma tolerância diferente para esse <b>Standard</b> .
Accuracy for QCs	Edita a tolerância da acurácia das amostras de <b>Quality Control</b> .
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Edita a tolerância da acurácia para as amostras de <b>Quality Control</b> com um valor que é consistente com os procedimentos operacionais padrão do laboratório.
Ion Ratio	Somente disponível se os componentes forem atribuídos a grupos. Selecione para usar a razão de íons da área do pico ou altura do pico. A área do pico ou altura do pico é definida ao selecionar o parâmetro de regressão durante o desenvolvimento do método quantitativo.

Rótulo	Descrição
Calculated Concentration	Ao usar amostras <b>Standard</b> de concentração conhecida, esta é a concentração calculada de volta, a partir da curva de calibração. Equações de regressão descrevem como uma regressão é realizada pelos vários tipos e ponderação de regressão.
Component	Os analitos ou padrões internos para todas as amostras.
IS	O padrão interno selecionado. Somente disponível se a caixa de seleção <b>Ion Ratio</b> estiver selecionada.
Group	Componentes que possuem o mesmo tempo de retenção (ou seja, diferentes transições para o mesmo composto) podem ser agrupados. Somente disponível se a caixa de seleção <b>Ion Ratio</b> estiver selecionada.
Ion Ratio Tolerance (%)	Use a configuração padrão ou edite essa configuração de acordo com os procedimentos operacionais padrão do laboratório. Somente disponível se a caixa de seleção <b>Ion Ratio</b> estiver selecionada.
Lower Limit of Calculated Concentration	Digite o limite inferior da faixa de concentração aceitável. Qualquer amostra com <b>Calculated Concentration</b> menor que esse valor é sinalizada como um valor extremo de concentração.
Upper Limit of Calculated Concentration	Digite o limite superior da faixa de concentração aceitável. Qualquer amostra com <b>Calculated Concentration</b> maior que esse valor é sinalizada como um valor extremo de concentração.

Clique com o botão direito na página **Outlier Settings** para acessar um menu de contexto.

**Tabela 7-5 Opções do menu do botão direito de Outlier Settings**

Rótulo	Descrição
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Aplica o limite inferior da concentração calculada para todos os analitos, se todos os analitos possuírem os mesmos critérios.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Aplica o limite superior da concentração calculada para todos os analitos, se todos os analitos possuírem os mesmos critérios.

## Colunas da tabela de resultados

**Nota:** Algumas colunas críticas das informações da amostra como **Sample Name**, **Sample ID** e assim por diante, não deverão ser ocultas quando o usuário customizar as configurações da coluna da **tabela de resultados**.

## Tabelas de resultados

Para campos numéricos, utilize o formato 0.00 para observações não científicas e utilize o formato 0.00e0 para observações científicas. Altere os pontos decimais para indicar a precisão dos números que serão exibidos. Somente um ponto final (.) pode ser usado como um separador decimal. O agrupamento de dígitos não é compatível.

**Tabela 7-6 Colunas da tabela de resultados**

Rótulo	Descrição
Accuracy	Ao usar amostras <b>padrões</b> de concentração conhecida para amostras <b>padrão</b> e amostras de <b>controle de qualidade</b> , isso é definido como: $100\% * (\text{Concentração calculada})/(\text{Concentração real})$ Para outro tipos de amostras, o valor é N/A.
Acq. Method Name	O nome do método de aquisição usado para obter a amostra.
Acquisition Date & Time	A data e a hora nas quais a amostra wiff foi adquirida.
Actual Concentration	Para amostras <b>padrão</b> e amostras de <b>controle de qualidade</b> , essa é a concentração conhecida esperada.
Area	A área do pico detectada. Se nenhum pico foi detectado, o valor será N/A.
Area / Height	A área do pico detectada dividida pela altura. Se nenhum pico foi detectado, o valor será N/A.
Area Ratio	Para analitos usando um padrão interno, essa é a proporção da <b>Area</b> para a <b>IS Area</b> . Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é N/A.
Asymmetry Factor	A distância da linha de centro do pico para a inclinação de volta dividida pela distância da linha de centro do pico para a inclinação de ida, com todas as medições feitas até 10% da altura do pico máximo.
Baseline Delta/Height	O valor absoluto da diferença de altura da linha de base (no início do pico e no fim do pico) até a altura de pico real. Valores superiores a aproximadamente 0,1 indicam que a linha de base pode não ter sido integrada corretamente e que o pico deve ser revisado.
Calculated Concentration	Ao usar amostras <b>padrão</b> de concentração conhecida, esta é a concentração calculada de volta, a partir da curva de calibração. Consulte <a href="#">Equações de regressão na página 126</a> para obter informações sobre como a regressão é executada para os vários tipos de regressão e ponderação.
Component Comment	Um comentário arbitrário que se aplica ao analito ou ao padrão interno para todas as amostras.
Component Group Name	O nome do grupo (se houver) associado com um analito ou padrão interno.
Component Index	O índice do analito ou padrão interno no método de quantificação original. Pode ser útil para classificar a tabela baseada nesse campo.
Component Name	O nome do analito ou padrão interno.

Tabela 7-6 Colunas da tabela de resultados (continuação)

Rótulo	Descrição
Conc. Units	As unidades de concentração.
Concentration Ratio	Para analitos que usam um padrão interno, essa é a proporção entre <b>concentração real</b> e a <b>concentração real do padrão interno</b> . Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é N/A.
Corrected Area	A área do pico detectada. Se nenhum pico foi detectado, o valor será N/A.
Corrected Area/Height	A área do pico detectada dividida pela altura. Se nenhum pico foi detectado, o valor será N/A.
Corrected Height	A altura do pico detectada. Se nenhum pico foi detectado, o valor será N/A.
Dilution Factor	O fator pelo qual a amostra foi diluída. Esse fator é usado no cálculo da curva de calibração. Consulte <a href="#">Equações de regressão na página 126</a> .
End Time	O tempo de retenção final do pico detectado, em minutos.
End Time at 10%	O tempo em minutos juntamente com o verso do pico onde a intensidade está em 10% da altura do pico.
End Time at 5%	O tempo em minutos juntamente com o verso do pico onde a intensidade está em 5% da altura do pico.
Expected Ion Ratio	A proporção de íon esperada para todos os tipos de amostras.
Expected RT	O tempo de retenção previsto original do método de quantificação em minutos.
Height	A altura do pico detectada. Se nenhum pico foi detectado, o valor será N/A.
Height Ratio	Para analitos que usam um padrão interno, essa é a proporção da <b>altura</b> para a <b>altura do padrão interno</b> . Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é N/A.
Index	Esse é o índice da linha no original, de forma não ordenada. Se uma tabela for ordenada baseada em outra coluna, então ela poderá retornar à forma original ao ser ordenada nessa coluna.
Injection Volume	O volume da amostra injetada pelo autoamostrador, em mL.
Integration Type	<ul style="list-style-type: none"> <li>O valor de <b>Baseline</b> indica que um pico independente foi integrado da maneira habitual.</li> <li>O valor de <b>Valley</b> indica que houve dois picos adjacentes e que o sinal não retornou para o valor da linha de base entre eles.</li> <li>Um valor de <b>Manual</b> indica que nenhum pico foi detectado.</li> <li>Um valor de <b>N/A</b> indica que nenhum pico foi detectado.</li> </ul>

Tabela 7-6 Colunas da tabela de resultados (continuação)

Rótulo	Descrição
Ion Ratio	<ul style="list-style-type: none"> <li><b>Proporções de íons</b> são determinadas quando pelo menos duas transições MRM de um único analito foram coletadas para um grupo.</li> <li>O primeiro componente em um subgrupo será usado como íons do <b>quantificador</b>. O restante dos componentes no subgrupo será usado como íons do <b>qualificador</b>.</li> <li>Razão do íon = (Área do pico ou altura do qualificador) / (Área do pico ou altura do quantificador)</li> <li>Subgrupos <ul style="list-style-type: none"> <li>Todos os analitos de um grupo constituem um subgrupo <b>Analyte</b>.</li> <li>Todos os padrões internos de um grupo constituem um subgrupo <b>IS</b>.</li> </ul> </li> <li>Se um componente não é um membro do grupo, então o <b>Ion Ratio</b> é N/A.</li> <li>Se o pico não é encontrado, então o <b>Ion Ratio</b> é N/A.</li> <li>Aplicado a todos os componentes em ambos os subgrupos <b>Analyte</b> e <b>IS</b>, para o <b>quantificador</b>, o <b>qualificador</b> é ele mesmo.</li> <li>Se a integração alterar para ambos os picos <b>quantificador</b> ou <b>qualificador</b>, então a <b>proporção de íon</b> é recalculada.</li> <li>Pode ser calculado tanto para a área do pico como para a altura do pico. Se a <b>Area</b> for usada na parte da regressão de um .qmethod para o primeiro (Component Index é 1) na <b>tabela de resultados</b>, a área do pico é usada para o cálculo da <b>Ion Ratio</b> para toda a <b>tabela de resultados</b>. Se a <b>Height</b> é usada na regressão do primeiro componente, então a altura do pico é usada para cálculo.</li> </ul>
IS	Uma caixa de seleção marcada indica que o componente para a linha é um padrão interno, não um analito.
IS Actual Concentration	A concentração real para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Area	Área para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Area / Height	A proporção entre a <b>área</b> e a <b>altura</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Baseline Delta/Height	<b>Razão básica Delta/Altura</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Comment	Um comentário arbitrário para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Corrected Area	Área corrigida para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.



Tabela 7-6 Colunas da tabela de resultados (continuação)

Rótulo	Descrição
IS Corrected Area/Height	<b>Razão área corrigida/altura corrigida</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Corrected Height	<b>Altura corrigida</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS End Time	<b>Tempo final</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Expected RT	<b>TR Esperado</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Height	<b>Altura</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Integration Type	<b>Tipo de integração</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Mass Info	<b>Informações de massa</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Name	<b>Nome do componente</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Peak Comment	<b>Comentário do Pico</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Quality	Qualidade para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Region Height	Métrica de qualidade para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Retention Time	<b>Tempo de retenção</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Signal / Noise	<b>Sinal/Ruído</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Start Time	<b>Tempo de início</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Total Width	<b>Largura total</b> para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
IS Width at 50%	Largura em 50% para o padrão interno associado ao analito atual ou N/A para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno.
Mass Info	Informações de massa associadas com o componente. Para experimentos MRM, é <b>Q1/Q3</b> e para experimentos de perfil (varredura completa), é <b>Start - Stop</b> .

Tabela 7-6 Colunas da tabela de resultados (continuação)

Rótulo	Descrição
Modified	Uma marca de verificação indica que os parâmetros de confirmação do pico foram modificados, usando o painel <b>Peak Review</b> , de seus valores originais indicados no método de quantificação.
Operator Name	O nome do operador do instrumento que adquiriu a amostra.
Original Filename	O nome do arquivo wiff.
Outlier Reasons	<p>Quando o critério de anexo foi definido no método de quantificação, essa coluna indica qual critério foi encontrado por estar fora dos limites predeterminados pelo componente.</p> <p>A coluna <b>Outlier Reasons</b> somente é conectada à <b>Outlier Settings</b> no método de quantificação e é uma coluna predefinida na <b>tabela de resultados</b>.</p> <p>O motivo pelo qual o anexo é sinalizado:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Accuracy</b></li><li>• <b>Concentration</b></li><li>• <b>Ion Ratio</b> Se houver um pico para o quantificador, mas não o qualificador, a proporção de íons será sinalizada para ambos os componentes. Se houver um pico para o qualificador, mas não o quantificador, a proporção de íons será sinalizada para ambos os componentes. Se nenhum dos dois possui picos, então não há sinalizações para nenhum componente.</li><li>• <b>Não pode calcular a Proporção de íon prevista.</b></li></ul>
Peak Comment	Um comentário arbitrário para a linha.
Plate Number	Número de placa do autoamostrador, como especificado originalmente no <b>Batch Editor</b> usado para adquirir os dados.
Points Across Baseline	O número de análises do início ao fim do pico.
Points Across Half Height	O número de análises entre o pico em aproximadamente 50% da altura.
Quality	<p>Esta métrica tenta indicar a qualidade do pico integrado.</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• Valores próximo de zero indicam que o pico foi pouco integrado (ou que nenhum pico real está presente).</li><li>• Valores próximos de 1,0 indicam que o pico foi bem integrado e não precisa ser revisado.</li></ul>
Rack Number	Número de prateleira do autoamostrador, como especificado originalmente no <b>Batch Editor</b> usado para adquirir os dados.

Tabela 7-6 Colunas da tabela de resultados (continuação)

Rótulo	Descrição
Region Height	A altura de pico do pico mais alto na proximidade do pico detectado real. Isso é útil em conjunto com o campo <b>Quality</b> . Picos com uma baixa qualidade que também têm uma <b>Region Height</b> razoável precisam ser revisados. Se a <b>altura da região</b> for pequena, não haverá pico presente significativo.
Relative RT	Para analitos que estejam usando um padrão interno, essa é a proporção entre o <b>tempo de retenção</b> e o <b>tempo de retenção IS</b> . Para padrões internos ou para analitos sem um padrão interno, o valor é N/A.
Retention Time	O tempo de retenção real do pico detectado, em minutos.
Sample Comment	Um comentário arbitrário para a amostra.
Sample ID	Um identificador arbitrário para a amostra. É inicializado do valor originalmente especificado no <b>Batch Editor</b> usado para adquirir os dados.
Sample Index	O índice da amostra atual.
Sample Name	Um nome arbitrário para a amostra. É inicializado do valor originalmente especificado no <b>Batch Editor</b> usado para adquirir os dados.
Sample Type	O tipo para a amostra. Consulte <a href="#">Filtro de tipo de amostra na página 42</a> .
Signal / Noise	Uma estimativa da proporção da altura do pico para o pico detectado ao ruído apresentado no cromatograma.  Ao usar o algoritmo de integração SignalFinder, o ruído será estimado usando o ruído relativo calculado e a linha de base na posição ápice do pico. O algoritmo de integração MQ4 usa uma abordagem semelhante, exceto que a linha de base é estimada usando todo o cromatograma.  Consulte <a href="#">Cálculos de ruído relativo e sinal/ruído na página 149</a> .
Slope of Baseline	Indica o desvio da linha de base.
Start Time	O tempo de retenção inicial do pico detectado, em minutos.
Start Time at 10%	O tempo em minutos juntamente com a frente do pico onde a intensidade está em 10% da altura do pico.
Start Time at 5%	O tempo em minutos juntamente com a frente do pico onde a intensidade está em 5% da altura do pico.
Tailing Factor	A distância da inclinação da frente do pico para a inclinação do verso, dividida por duas vezes a distância da linha de centro do pico para a inclinação da frente, com todas as medições feitas em 5% da altura do pico máximo.
Total Width	A largura do pico cromatográfico, em minutos, na linha base.

**Tabela 7-6 Colunas da tabela de resultados (continuação)**

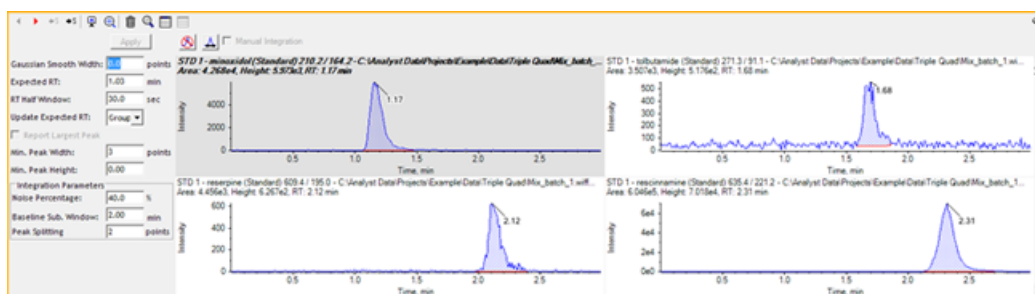
Rótulo	Descrição
Used	Para amostras <b>padrão</b> , uma marca de verificação indica que o analito correspondente é usado atualmente para construção da curva de calibração. Para amostras de <b>controle de qualidade</b> , uma marca de verificação que o analito é usado para o cálculo das estatísticas <b>QC</b> . Para outros tipos de amostra, este campo é apenas para fins informativos.
Vial Number	Número do frasco do autoamostrador conforme originalmente especificado em <b>Batch Editor</b> usado para adquirir dados.
Width at 10%	A largura do pico mensurado em 10% da altura do pico.
Width at 5%	A largura do pico mensurado em 5% da altura do pico.
Width at 50%	A largura do pico cromatográfico, em minutos, do pico detectado mensurado em metade de sua intensidade do ápice.

Use o painel **Peak Review** para inspecionar visualmente os cromatogramas brutos para que a qualidade do processo de confirmação do pico possa ser determinada. Quando uma **tabela de resultados** estiver ativa, clique no ícone **Show Peak Review** na barra de ferramentas tabela de resultados para abrir o painel Peak Review. Revisores devem revisar os dados quantitativos de acordo com os critérios de integração do pico e aceitação dos dados em seus próprios standard operating procedures (SOPs - procedimentos de operação padrão).

O agrupamento de números não é suportado. Os usuários não devem agrupar números em qualquer caixa de texto (por exemplo, parâmetros de integração) e grade (por exemplo, **Results Tables**).

O **Peak Review** aprimorado indica a aceitação de **Ion Ratio** em um cromatograma sobreposto. Os usuários também podem aumentar o zoom de um cromatograma único.

**Figura 8-1 Painel de Revisão do Pico**



Use o painel **Peak Review** para corrigir cromatogramas que não se integraram adequadamente ajustando os parâmetros de confirmação do pico ou selecionando manualmente os pontos iniciais e finais para integração. Após um cromatograma ser reintegrado, a **tabela de resultados** é atualizada automaticamente com a nova área do pico e outros parâmetros

Métodos quantitativos incluem os critérios usados para quantificar os picos de seleção para integração. Os revisores devem rever os dados quantitativos de acordo com o critério de integração do pico e aceitação dos dados em seus próprios SOPs (standard operating procedures - procedimentos de operação padrão).

## Integração manual

Após um pico em um cromatograma em particular ser integrado manualmente, marque esta caixa de seleção para indicar que o cromatograma foi integrado manualmente. Quando estiver neste estado, se o usuário desmarcar a caixa de seleção, a integração manual para o pico é cancelada e o pico é automaticamente reintegrado usando os parâmetros do método.

A diferença entre esta caixa de seleção e o botão **Enable Manual Integration Mode** é que a caixa de seleção reflete o estado do pico atual, enquanto o botão especifica o comportamento ao arrastar um cromatograma.

---

**Nota:** Após o modo de integração manual ser habilitado, ele permanece habilitado para todos os painéis até que seja desmarcado.

---

## Aplicar

Se o usuário tiver ajustado qualquer um dos parâmetros de confirmação do pico, o botão **Apply** será ativado. Clique no botão para aplicar os parâmetros de confirmação do pico modificados para o cromatograma ativo.

Com exceção de quando no modo de integração manual, arrastando por um pico em particular em um cromatograma é equivalente ao ajustar o parâmetro **Expected RT** e então clique em **Apply**.

---

**Nota:** Se o usuário modificar um parâmetro de confirmação do pico e ativar um cromatograma diferente sem ter clicado em **Apply**, os parâmetros não serão aplicados e as alterações serão perdidas.

---

## Dicas para revisar picos

- Ordene a **tabela de resultados** em uma coluna específica e revise somente os cromatogramas que são ordenados no topo ou na base da tabela.
- O painel **Peak Review** sempre está sincronizado com sua **tabela de resultados** correspondente e mostra os cromatogramas para os mesmos picos, na mesma ordem, como na **tabela de resultados**. Quaisquer alterações (como ordenar linhas, filtrar tipos de amostra ou selecionar quaisquer componentes) feitas à **tabela de resultados** são refletidas automaticamente no painel **Peak Review**.
- Selecione o número de cromatogramas para visualizar de uma vez.
- Use a barra de rolagem à direita do painel para rolar pelos cromatogramas disponíveis. Quando o painel **Peak Review** está ativo, use as setas para cima e para baixo no teclado ou a roda de rolagem do mouse para mover pelos cromatogramas.
- A qualquer momento, um cromatograma específico é considerado ativo e é indicado pelo título em negrito. Ative um cromatograma específico clicando em qualquer lugar dentro dele.
- Quando um cromatograma torna-se ativo, os parâmetros de integração exibidos à esquerda do painel são atualizados para refletir o cromatograma ativo recentemente. Se o usuário ajustar os parâmetros de integração do pico e clicar em **Apply**, isso afeta o cromatograma ativo atualmente.
- Selecione uma linha na **tabela de resultados** clicando na região cinza à esquerda da primeira coluna para mostrar o pico correspondente no painel **Peak Review**. Se o usuário rolar para um cromatograma específico no painel **Peak Review**, a **tabela de resultados** realça a linha correspondente e desce/sobe para torná-la visível.
- Se o usuário arrastar um pico específico em um cromatograma, o parâmetro de integração **Expected RT** é atualizado com o tempo de retenção real do pico. O novo tempo de retenção é automaticamente aplicado e o pico é integrado novamente, atualizando a **tabela de resultados**.
- Se o usuário estiver revisando picos no modo de integração manual, arrastar entre o pico integrará manualmente o pico selecionado.

- O processo de revisão de picos pode ser feito mais rapidamente ao fazer o cache dos cromatogramas calculados anteriormente. Consulte [Menu editar na página 15](#).

## Menu de contexto Revisão do pico

Esses recursos controlam a aparência dos parâmetros de integração que são exibidos à esquerda dos cromatogramas. Clique com o botão direito no painel **Peak Review** para acessar um menu de contexto. Os comandos a seguir estão disponíveis.

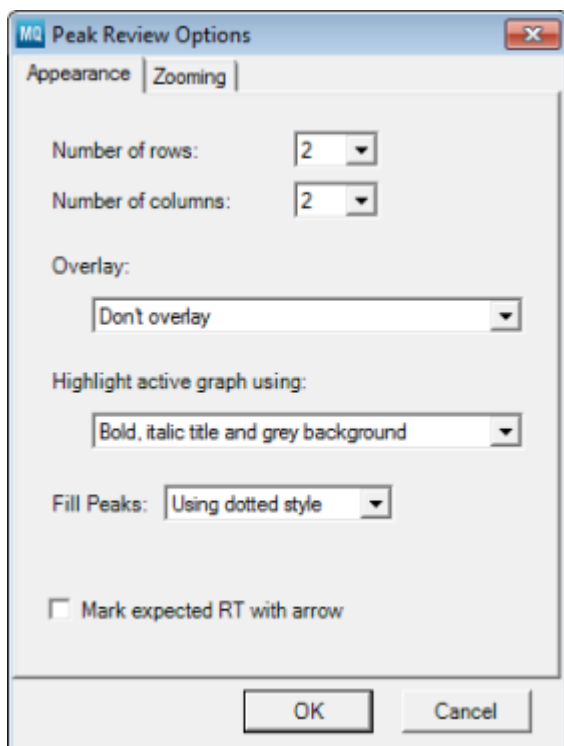
**Tabela 8-1 Parâmetros de revisão de pico**

Tarefa	Comandos
Altere a aparência do painel <b>Peak Review</b> .	<a href="#">Caixa de diálogo Peak Review Options: Aba Appearance na página 63</a> ou <a href="#">Caixa de diálogo Peak Review Options: Aba Zooming na página 66</a> .
Configure o formato do título de revisão de pico.	<a href="#">Ajustar formato de título da revisão de picos na página 67</a> .
Mostre os parâmetros usando nomes descritivos para os parâmetros individuais.	Por padrão, o <b>Show Parameters-Normal Width</b> é sempre configurado.
Copie os parâmetros.	<a href="#">Copiar parâmetros na página 68</a> .
Cole os parâmetros.	<a href="#">Parâmetros de colagem na página 68</a> .
Configure o pico como 'Not Found'.	<a href="#">Definir pico como 'Não encontrado' na página 69</a> .
Use o pico.	<a href="#">Usar pico na página 69</a> .
Atualize o método de quantificação para o componente.	<a href="#">Atualizar método quantitativo para o componente na página 69</a> .
Atualize o método de quantificação para o grupo.	<a href="#">Atualizar método de quantificação para o grupo na página 69</a> .
Aplice os parâmetros de integração a uma amostra dentro do grupo.	<a href="#">Aplicar parâmetros de integração a amostra em grupo na página 70</a> .
Reverta o pico para o método original.	<a href="#">Reverter pico para método original na página 70</a> .
Reverta todos os picos para o componente.	<a href="#">Reverter todos os picos do componente na página 70</a> .

## Caixa de diálogo Peak Review Options: Aba Appearance

Clique com o botão direito no painel **Peak Review** para selecionar as opções de ajuste que afetam a aparência do painel **Peak Review**. É recomendado que não mais que quatro linhas e quatro colunas sejam configuradas.

Figura 8-2 Caixa de diálogo Peak Review Options: Aba Appearance



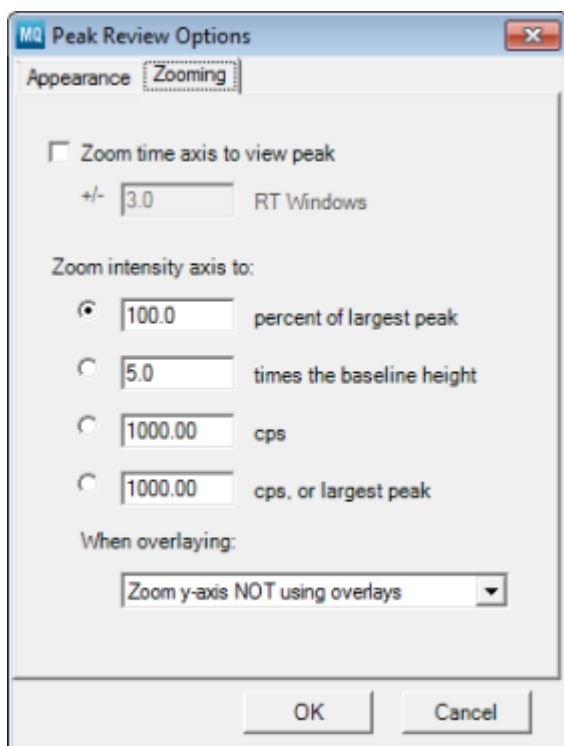


Rótulo	Descrição
Number of rows and Number of columns	Controla o número de cromatogramas que são visíveis simultaneamente. A menos que cromatogramas já tenham sido armazenados em cache, levará mais tempo para rolar entre páginas se muitos cromatogramas forem exibidos. Consulte <a href="#">Menu editar na página 15</a> .
Overlay	<p>Determina se outros cromatogramas devem ser sobrepostos sobre o cromatograma principal em cada um dos subpainéis.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Don't Overlay:</b> impede a sobreposição de outros cromatogramas.</li> <li>• <b>All components for group:</b> sobrepõe todos os cromatogramas para componentes do mesmo grupo que o componente principal (para a amostra atual).</li> <li>• <b>Analytes and IS's separately for group:</b> semelhante à opção anterior, exceto que em vez de sobrepor todos os componentes do mesmo grupo, analitos e padrões internos são mantidos separados.</li> <li>• <b>Internal Standard with Analyte:</b> para analitos, sobrepõe o padrão interno usado pelo analito (cromatogramas de padrão interno não têm outras sobreposições).</li> <li>• <b>Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines:</b> mostra as linhas de proporção de íons. Selecione essa opção para visualizar a aceitação de proporção de íon na <b>tabela de resultados</b>. Usuários podem visualizar a aceitação de proporção do íon quando há grupos definidos no método de quantificação. Entretanto, as <b>Ion Ratio Lines</b> são somente uma indicação da aceitação e não o resultado final. As linhas são exibidas no cromatograma como a altura do pico, mas as linhas são calculadas com base na área ou altura do pico dependendo das configurações definidas no método de quantificação. Se houver uma discrepância entre a altura e a área, o usuário deverá confirmar o anexo <b>Ion Ratio</b> na <b>tabela de resultados</b>.</li> </ul>
Highlight active graph using:	Indica como o cromatograma atualmente ativo deve ser exibido. Configure o título negrito e itálico e o plano de fundo cinza.
Fill peaks	<p>Indica como uma área integrada para picos deverá ser exibida. As opções são:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Use um estilo pontilhado como usado nas capturas de tela neste documento.</li> <li>• Utilize um estilo sólido.</li> <li>• Não utilize preenchimento. Em todos os casos, a linha de base para o pico também é projetada (em vermelho).</li> </ul> <p>Ao usar a terceira opção, somente a linha de base é projetada e o pico não é preenchido.</p>
Mark expected RT with arrow	Indica o <b>Expected Retention Time</b> com uma seta azul desenhada abaixo do eixo de tempo. Isso pode ser útil para determinar se o pico integrado está próximo do RT esperado.

## Caixa de diálogo Peak Review Options: Aba Zooming

Clique com o botão direito no painel **Peak Review** para selecionar as opções de ajuste que afetam a aparência do painel **Peak Review**. O **Zoom intensity axis** para os recursos é usado para ajustar automaticamente o eixo y dos cromatogramas.

Figura 8-3 Caixa de diálogo Peak Review Options: Aba Zooming



Rótulo	Descrição
Zoom time axis to view peak	Quando selecionado, o eixo x dos cromatogramas é automaticamente ajustado para que apenas uma porção de toda a execução fique visível. Isso é vantajoso para longas execuções LC para que a região de interesse possa ser vista claramente. A largura da janela é expressa em termos de um múltiplo do parâmetro de integração da RT Window. A largura total da região com zoom aumentado é o dobro do número especificado de múltiplos da <b>RT Window</b> .
Zoom intensity axis to percent of largest peak	Usado para ajustar automaticamente o eixo y dos cromatogramas. Mede o eixo y para a porcentagem especificada do maior pico dentro da variação de x visível no cromatograma. Isso será menor que a duração total da execução de LC se o recurso Eixo de tempo de Zoom para visualizar o pico for usado.
Zoom intensity axis to times the baseline height	Usado para ajustar automaticamente o eixo y dos cromatogramas. Usado para focar na própria região da linha de base.
Zoom intensity axis to cps	Mede o eixo y diretamente para o valor especificado.

Rótulo	Descrição
Zoom intensity axis to cps, or largest peak	Mede o eixo y para o menor do valor especificado ou o maior pico.
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays	Mantém as configurações do eixo de intensidade do zoom para a seção usando somente o conjunto de dados principais. Essa configurações podem causar as sobreposições para ser apenas parcialmente visível se eles estão mais intensos do que o conjuntos de dados principais.
When overlaying Zoom y-axis using overlays	Utiliza o conjunto de dados principal e todas as sobreposições e usa o maior valor y geral. Esse recurso sempre mantém as sobreposições visíveis.
When overlaying Use a percentage y-axis	Mede o conjunto de dados principais e as sobreposições separadamente usando uma escala de porcentagem. O que provoca cada traço a usar a altura total disponível. No entanto, as alturas de pico relativas não podem ser visualmente comparadas diretamente.

**Dica!** Clique duas vezes no eixo y para medir o eixo no pico mais intenso dentro de todo o conjunto de dados.

Ao ser selecionado, o cromatograma do atual pico em revisão é projetado usando um traço azul sólido e sua área de pico integrada é exibida. Os cromatogramas (e não a área de pico integrada) dos outros componentes (da mesma amostra) são sobrepostos usando uma linha tracejada.

Quando o gráfico estiver mostrando sobreposições dessa forma, clique duas vezes em qualquer lugar na área de título para alternar entre exibir os títulos para todos os cromatogramas ou somente para o que estiver ativo.

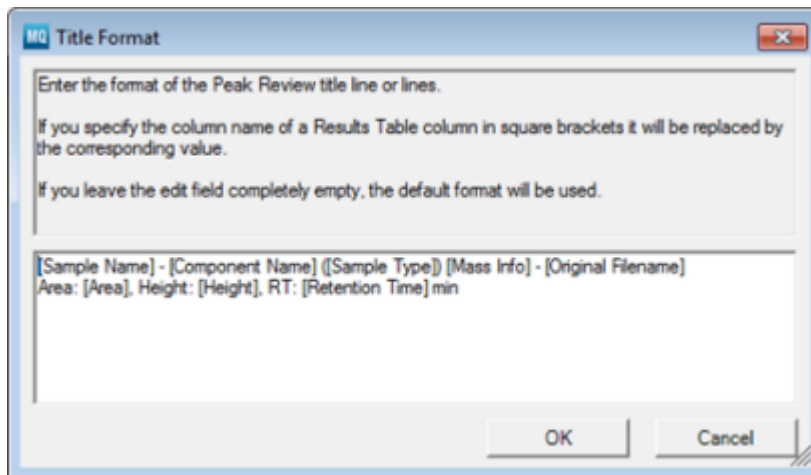
**Dica!** Clique duas vezes no eixo x para retornar o gráfico à sua exibição original em que todos os dados ficam visíveis. Aumente o zoom arrastando o eixo para selecionar um intervalo de tempo.

## Ajustar formato de título da revisão de picos

Use a caixa de diálogo para personalizar as informações que aparecem no título do gráfico para cada um dos cromatogramas. Se o usuário digita um nome de coluna na **tabela de resultados** entre colchetes, é então substituído pelo valor do campo para a amostra e o componente atuais. O usuário também pode digitar qualquer texto adicional que seja deixado inalterado. É recomendado que o nome da amostra [Sample Name] seja incluído no título da revisão de picos.

- Clique com o botão direito no painel **Peak Review** e clique em **Set Peak Review Title Format**

Figura 8-4 Caixa de diálogo Title Format



## Copiar parâmetros

Clique com o botão direito no painel **Peak Review** para acessar esse comando. Use esse comando em conjunto com **Paste Parameters** para copiar os parâmetros de confirmação do pico de um cromatograma para outro. Esse comando pode ser usado se o mesmo ajuste para os parâmetros precisar ser feito por diversos cromatogramas.

1. Em um gráfico com um cromatograma ativo aberto, clique com o botão direito e, em seguida, clique em **Copy Parameters**.
2. Use o comando **Update Quantitation Method for Component** para aplicar a mudança em todos os cromatogramas para o componente.

## Parâmetros de colagem

1. Em um gráfico com um cromatograma ativo aberto, clique com o botão direito e, em seguida, clique em **Copy Parameters**.
2. Clique com o botão direito em um cromatograma diferente e, em seguida, clique em **Paste Parameters**.

Os parâmetros copiados anteriormente serão aplicados ao novo cromatograma.

## Definir pico como 'Não encontrado'

- Em um gráfico com um cromatograma ativo aberto, clique com o botão direito e em **Set Peak to 'Not Found'** para remover a integração do cromatograma selecionado.

## Usar pico

- Em um gráfico com um cromatograma ativo aberto, clique com o botão direito e clique em **Use Peak** para incluir ou excluir o pico ativo da curva de calibração.

## Atualizar método quantitativo para o componente

Depois de ajustar os parâmetros de confirmação de pico para um cromatograma específico, selecione este recurso para ajustar a cópia do método quantitativo salvo na tabela de resultados para usar esses parâmetros para o componente.

- Ajuste os parâmetros de confirmação do pico clicando com o botão direito e depois clicando em **Update Quantitation Method for Component**.

Para o componente particular, todas as amostras são automaticamente integradas para usar os novos parâmetros e o painel **Peak Review** e a **tabela de resultados** são atualizados. Se algum pico tiver sido manualmente integrado, o usuário deverá informar se a nova integração se aplica a todos os picos ou apenas aos que foram manualmente integrados.

## Atualizar método de quantificação para o grupo

Semelhante ao comando **Update Quantitation Method for Component**, exceto que a integração se aplica a todos os componentes que pertencem ao mesmo grupo que o componente para o cromatograma ativo atualmente. Se o usuário tiver designado vários componentes a grupos e se os componentes designados a qualquer grupo fornecido precisarem ter o mesmo tempo de retenção, esse recurso será útil para que o usuário possa reconfigurar os parâmetros, incluindo o tempo de retenção esperado, para todos os componentes

para o grupo de uma vez. Esse recurso não é útil se os componentes dos grupos não tiverem os mesmos tempos de retenção.

- Ajuste os parâmetros de confirmação do pico, clique com o botão direito e, em seguida, clique em **Update Quantitation Method for Group**.

## Aplicar parâmetros de integração a amostra em grupo

Após ajustar os parâmetros de confirmação do pico para um cromatograma específico, utilize esse recurso para aplicar os parâmetros originais de uma cópia de método de quantificação salva com a tabela de resultados no cromatograma.

- Após ajustar os parâmetros de confirmação do pico para um cromatograma específico, clique com o botão direito e depois em **Apply Integration Parameters to Sample Within Group**.

## Reverter pico para método original

Após ajustar os parâmetros de confirmação do pico para um cromatograma específico, use esse recurso para aplicar os parâmetros originais da cópia do método de quantificação salvo com a **tabela de resultados** no cromatograma.

- Clique com o botão direito e, em seguida, clique em **Revert Peak to Original Method**.

## Reverter todos os picos do componente

Após ajustar os parâmetros de confirmação do pico para alguns cromatogramas, utilize esse recurso para aplicar os parâmetros originais da cópia do método quantitativo salva na **tabela de resultados** a todos os cromatogramas do mesmo componente como o cromatograma ativo. Se algum pico tiver sido manualmente integrado, o usuário deverá informar se a nova integração se aplica a todos os picos ou apenas aos que foram manualmente integrados.

- Clique com o botão direito e clique em **Revert All Peaks for Component**.

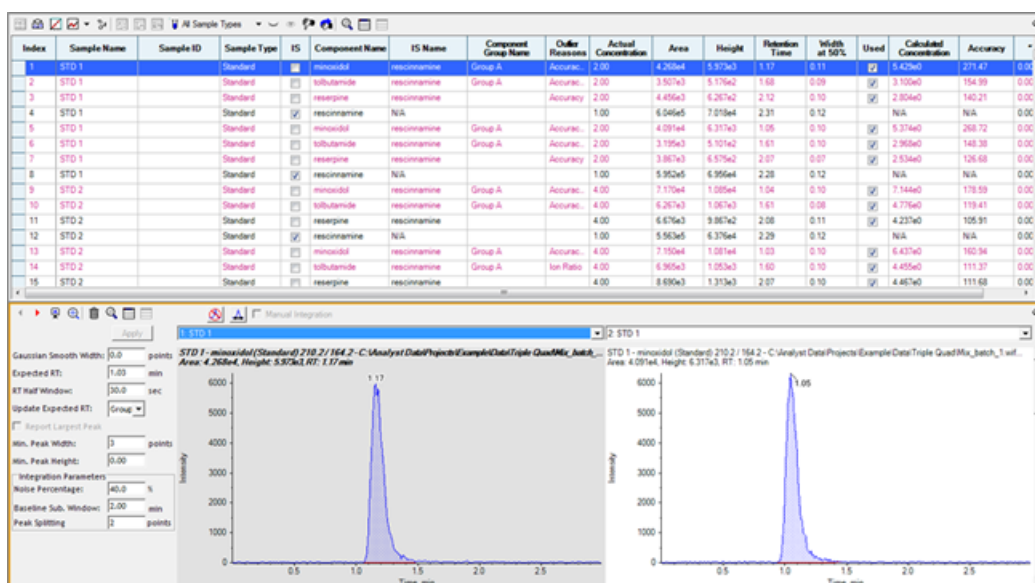
# Revisão de amostra lado a lado

# 9

Use o recurso **Side-by-side Sample Review** para procurar por compostos-alvo específicos. Os usuários podem selecionar até seis amostras para comparar as respostas do pico nas amostras. Revisores devem revisar os dados quantitativos de acordo com os critérios de integração do pico e aceitação dos dados em seus próprios procedimentos operacionais padrão (POPs).

Quando uma **tabela de resultados** está ativa, clique no ícone **Side by Side Sample Review** na barra de ferramentas da **tabela de resultados** para abrir o painel **Side by Side Sample Review**.

Figura 9-1 Painel Side by Side Sample Review



Métodos quantitativos incluem os critérios usados para quantificar os picos de seleção para integração. Os revisores devem rever os dados quantitativos de acordo com o critério de integração do pico e aceitação dos dados em seus próprios POPs.

## Realize uma revisão da amostra lado a lado

1. Abre uma tabela de resultados.
2. Clique no ícone **Side by Side Sample Review**.
3. Selecione uma amostra na lista no painel **Side by Side Sample Review**.

Os parâmetros de integração são exibidos.

## Revisão de amostra lado a lado

---

---

**Dica!** Clique com o botão direito no painel **Side by Side Sample Review** e, em seguida, clique em **Options** para alterar o número de linhas ou colunas na revisão de lado a lado.

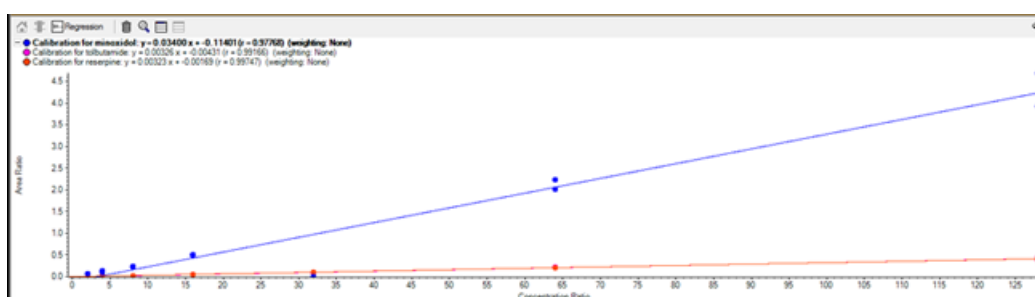
---

4. Selecione outra amostra na outra lista.



Use o painel **Calibration** para inspecionar visualmente a regressão para cada analito, se as amostras **Standard** de uma concentração conhecida forem usadas. Este painel não é aplicável se o usuário estiver realizando a quantificação relativa e não possuir amostras **Standard**. Quando uma **tabela de resultados** está ativa, clique em **Show Calibration** na barra de ferramentas.

Figura 10-1 Painel de calibração

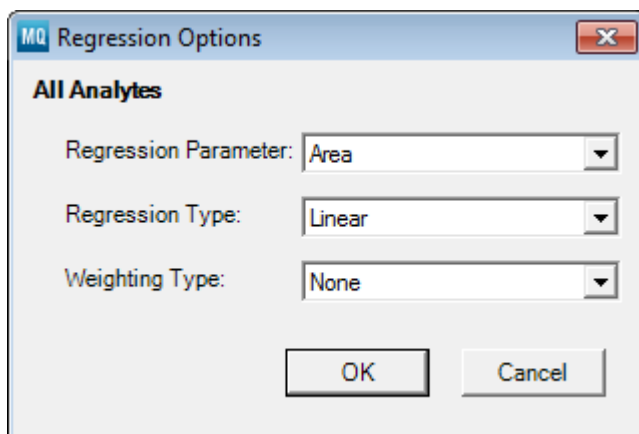


Da mesma forma que na inspeção da regressão, o usuário pode excluir amostras **Standard** para que elas não sejam usadas para a regressão. Após os ajustes serem feitos, uma nova regressão é calculada automaticamente e parâmetros como **Calculated Concentration** e **Accuracy** são recalculadas para todas as amostras do analito. Consulte [Equações de regressão na página 126](#).

## Caixa de diálogo Regression Options

Caso haja muitos analitos, será mais fácil aplicar alterações usando a caixa de diálogo **Regression Options** do que alterar os parâmetros de regressão um a um.

Figura 10-2 Caixa de diálogo Regression Options



## Dicas de calibração

- Para analitos sem um padrão interno associado, o eixo y é o pico **Area** ou **Height** conforme selecionado no método de quantificação. Para analitos com um padrão interno, o eixo y é o pico **Area** ou a proporção **Height** (do analito para o padrão interno).
- Para analitos sem um padrão interno associado, o eixo x é **Actual Concentration**. Caso contrário, é a proporção **Actual Concentration** (do analito para o padrão interno).
- Se mais de um analito de **Components & Groups List** for selecionado, as calibrações para todos os analitos serão sobrepostas. Caso contrário, a calibração para o analito selecionado será mostrada.
- A região do título sempre mostra o nome do analito ativo e a equação de regressão associada com o coeficiente de correlação. Se a regressão não pôde ser calculada, por exemplo, se não houver amostras **Standard**, o título indicará isso. Se as calibrações para múltiplos analitos forem sobrepostas, alterne o título entre mostrar informações para todos os analitos ou apenas o ativo clicando duas vezes em qualquer lugar dentro da região do título. Se houver muitos analitos sobrepostos, talvez não seja possível exibir todas as informações. Neste caso, role o título arrastando dentro dele.
- Os pontos de dados para as amostras **Standard** que estão em uso são sempre representados em gráficos assim como a equação da calibração que usa esses pontos. O usuário pode opcionalmente mostrar pontos de dados para amostras **Standard** excluídas e para amostras **Quality Control**.
- Se o usuário clicar em um ponto de dados, a linha correspondente na **tabela de resultados** será automaticamente selecionada e rolada na visualização, contanto que a linha esteja atualmente visível em algum lugar na tabela e não tenha sido oculta.

## Menu do botão direito Calibration

Clique com o botão direito no painel **Calibration** para acessar um menu de contexto. Os comandos a seguir estão disponíveis.

Tabela 10-1 Opções de menu direito do painel Calibration

Opção de menu	Descrição
Exclude (or Include)	Se o usuário clicar com o botão direito diretamente em um ponto de dados para um padrão que não tenha sido excluído, essa opção será usada para excluir a amostra do cálculo de regressão (para a amostra e o analito para o ponto de dados clicado). Se a amostra já tiver sido excluída, o texto do item do menu será <b>Include</b> e sua seleção incluirá esse ponto. Após a seleção, a regressão é calculada e a <b>tabela de resultados</b> é atualizada. Essa funcionalidade é equivalente a desmarcar ou selecionar a caixa de seleção <b>Used</b> na tabela de resultados para a linha correspondente.
Exclude – All Analytes (or Include – All Analytes)	Exclui ou inclui todos os analitos, não apenas o analito correspondente a um ponto de dados selecionado.

Tabela 10-1 Opções de menu direito do painel Calibration (continuação)

Opção de menu	Descrição
Show Excluded Standards	Quando selecionados, os pontos de dados para padrões excluídos (se houver) são desenhados usando círculos abertos. Quando eliminados, os padrões excluídos não são exibidos.
Show QCs	Quando selecionados, os pontos de dados para amostras <b>Quality Control</b> (QC) são desenhados usando um losango aberto. Quando eliminadas, as amostras <b>QC</b> não são exibidas.
Show Legend	<p>Quando selecionada, uma legenda é desenhada à direita do gráfico que mostra os símbolos de ponto para os vários tipos de amostras (círculos fechados para amostras <b>Standard</b>, círculos abertos para Padrões excluídos e losangos abertos para amostras <b>Quality Control</b>).</p> <hr/> <p><b>Nota:</b> Se o usuário não estiver visualizando certos tipos de amostra, por exemplo, se a opção <b>Show QCs</b> não for selecionada, a entrada para esses tipos de amostra não estará presente. Se nenhuma das amostras <b>QC</b> nem padrões excluídos forem exibidos, essa opção não estará disponível e nenhuma legenda será desenhada.</p> <hr/>
Use Percent Y-Axis	<p>Quando não selecionado, o eixo y para o gráfico está em unidades do pico absoluto <b>Area</b> ou <b>Height</b> (ou a proporção de <b>Area</b> ou <b>Height</b> do pico se um padrão interno estiver sendo usado). Quando selecionado, o eixo y é expresso como uma porcentagem do ponto de dados com o mais alto valor y para cada analito independentemente.</p> <p>Usar um eixo de porcentagem é útil se mais de um analito estiver sobreposto e suas respostas absolutas forem relativamente diferentes, pois permite que cada rastreio possa ser medido para usar toda a área vertical disponível. Caso contrário, analitos com baixa resposta se encontram próximos do eixo x e o gráfico precisa ser aumentado para vê-los em detalhes.</p>
Log-log plot	Usado para alternar a visualização entre a representação gráfica de <b>Area</b> versus <b>Concentration</b> e <b>Log(Area)</b> versus <b>Log(Concentration)</b> .

# Tabelas de estatísticas

11

Use a **Statistics Table** para visualizar informações relacionadas à reprodutibilidade de uma análise. Cada linha da tabela resume informações como a média e o desvio padrão para um grupo de picos relacionados do mesmo analito que idealmente espera-se que tenham a mesma resposta.

Figura 11-1 Painel de estatísticas

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	miconidol	2.00	2 of 2	5.402e0	3.884e-2	0.72	270.59	5.429e0	5.374e0
2	miconidol	4.00	2 of 2	6.791e0	4.955e-1	7.35	169.76	7.144e0	6.437e0
3	miconidol	8.00	2 of 2	1.026e1	3.505e-1	3.41	128.21	1.001e1	1.050e1
4	miconidol	16.00	2 of 2	1.797e1	3.199e-1	1.79	111.94	1.875e1	1.762e1
5	miconidol	32.00	1 of 2	3.366e0	N/A	N/A	10.49	N/A	3.396e0
6	miconidol	64.00	2 of 2	6.580e1	4.679e0	7.11	102.82	6.911e1	6.250e1
7	miconidol	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	1.189e0	3.98	90.30	2.902e1	3.070e1
13	tolbutamide	64.00	2 of 2	6.485e1	3.313e0	5.11	101.33	6.251e1	6.719e1
14	tolbutamide	128.00	2 of 2	1.281e2	2.000e1	15.61	100.10	1.423e2	1.140e2
15	nifedipine	2.00	2 of 2	2.683e0	1.912e-1	7.16	133.44	2.804e0	2.534e0
16	nifedipine	4.00	2 of 2	4.352e0	1.633e-1	3.75	108.80	4.237e0	4.467e0
17	nifedipine	8.00	2 of 2	7.491e0	6.761e-1	9.03	93.64	7.013e0	7.970e0
18	nifedipine	16.00	2 of 2	1.535e1	1.693e-1	1.10	96.03	1.525e1	1.548e1

Rótulo	Descrição
Row	O número da linha. Clique em um dos outros cabeçalhos de coluna para ordenar a tabela. Retorne a tabela para a visualização original ao clicar neste cabeçalho.
Component Name	O nome do analito.
Actual Concentration (ou Sample Name)	Se agrupar pela concentração real, esta coluna mostra a concentração. Se agrupar pelo nome da amostra, o título da coluna muda e o nome da amostra é exibido.
Num. Values	Mostra m de n, em que n é o número total de amostras na concentração real (ou com o mesmo nome da amostra) e m é o número dessas amostras usadas para os cálculos. As amostras não são usadas quando o pico correspondente não pôde ser integrado ou quando o campo <b>Used</b> foi apagado manualmente.
Mean	A média das amostras usadas.
Standard Deviation	O desvio padrão das amostras usadas.
Percent CV	O coeficiente de variação expresso como porcentagem: 100 * (Desvio Padrão)/ Média.
Accuracy	O valor médio dividido pela concentração real, expresso como porcentagem: 100 * Média/(Concentração Real). Este campo é mostrado apenas ao agrupar por concentração real, não por nome da amostra.
Values	Os valores individuais das amostras aparecem em colunas adicionais. Se a amostra correspondente não puder ser integrada, o valor é N/A. Se o campo <b>Used</b> foi limpo manualmente, o valor é mostrado com uma linha tachada.

## Dicas da tabela de estatísticas

- A **Statistics Table** se vincula a **Components & Groups List** para mostrar as linhas correspondentes aos analitos selecionados. Se os itens **All Components** ou **All Analytes** estiverem selecionados, há entradas para todos os analitos. Se um analito individual é selecionado, há entradas somente para esse analito. Se um padrão interno individual é selecionado na lista, a **Statistics Table** fica em branco. Consulte [Lista de componentes e grupos na página 38](#).
- Se o usuário clica em uma das células **Value**, a linha correspondente na **tabela de resultados** para o analito e a amostra é selecionada, desde que a linha esteja atualmente visível na **Statistics Table**. Somente amostras **Unknown** na **tabela de resultados** são exibidas. Se a **Statistics Table** contiver informações sobre as amostras **Standard**, as linhas correspondentes não ficam mais visíveis na **tabela de resultados**. Se o painel **Peak Review** estiver visível, ele se liga à **tabela de resultados** e é atualizado quando se clica na célula.
- Clique em um dos títulos de coluna para ordenar a **Statistics Table**.
- O usuário pode copiar a **Statistics Table** inteira ou apenas as linhas de interesse.
  - Para copiar a tabela inteira, clique em **Edit > Copy**.
  - Para copiar apenas as linhas de interesse, selecione manualmente as linhas e clique em **Edit > Copy**.
- Se as larguras de coluna estiverem ajustadas, elas são restauradas na próxima vez que a **Statistics Table** é exibida.
- O formato e a precisão são os mesmos que na **tabela de resultados**.
- O **Group by Concentration for Standards and QCs** é baseado em **Displayed Actual Concentration**, não em **Actual Concentration** armazenada na **tabela de resultados**. Se a concentração Std 1 é 0,001, a concentração Std 2 é 0,005 e o formato de exibição é 0, então, Std 1 e Std 2 são agrupados juntos, pois ambos são tratados como 0. Para agrupá-los separadamente, na caixa de diálogo **Column Settings**, configure a precisão de **Analyte Concentration** para 0,000. Se Std 1 for 0,500 e Std 2 for 0,499, configure a precisão para 0,00 para agrupá-los juntos.

## Menu do botão direito da Statistics Table

Clique com o botão direito na **Statistics Table** para acessar o comando **Use Peak**. Use esse comando para configurar o campo **Used** para a amostra e o analito correspondente à célula selecionada em uma das colunas **Value**. Antes de clicar com o botão direito para obter o menu, clique na célula apropriada em uma das colunas **Value** para selecioná-la.

Use um Metric Plot para plotar os valores em uma coluna da tabela de resultados em comparação com o número da linha ou uma outra coluna. Esses gráficos são um auxílio valioso para a revisão de dados visual, especialmente se os usuários não quiserem revisar manualmente cada cromatograma usando o painel Peak Review.

## Gerar um gráfico de métricas

1. Selecione uma ou duas colunas na **tabela de resultados**.
2. Clique em **Show Metric Plot**.

Se uma coluna for selecionada, o gráfico resultante mostra os valores da coluna em função do número de linha na tabela. Se duas colunas são selecionadas, então os valores das colunas são representados graficamente um em relação ao outro. A primeira das duas colunas a serem selecionadas contém o valor x e a segunda contém o valor y.

## Salvar as configurações de Metric Plot

1. Abra um gráfico de métrica selecionando uma coluna e, em seguida, clique em **Show Metric Plot**.
2. Clique com o botão direito no gráfico e depois em **Save Setting**.

Isso permite que o usuário gere rapidamente **Metric Plots** que sejam usados com frequência sem ter que selecionar a coluna correspondente toda vez.

## Dicas sobre o gráfico métrico

- Se os usuários clicarem com o botão esquerdo em um ponto de dados, a linha correspondente da tabela de resultados será automaticamente selecionada e aparecerá na rolagem da visualização. Se o painel Peak Review estiver aberto, ele também será atualizado para mostrar o cromatograma correspondente. Essa é uma forma conveniente de fazer uma revisão de pico para os valores discrepantes.
- Se for selecionado mais de um componente da lista Components & Groups, os traços de todos os componentes serão sobrepostos. Senão, o traço de um componente selecionado aparecerá.
- A região do título sempre exibe o nome do traço ativo. Se os traços de diversos componentes forem sobrepostos, alterne o título entre mostrar as informações de todos os traços ou apenas o ativo, clicando duas vezes em qualquer lugar da região do título. Ative um traço particular clicando no ponto colorido à esquerda do título correspondente.

- Salve as configurações do gráfico de Métrica para usar novamente. Clique com o botão direito no gráfico de Métrica, depois clique em **Save Settings As**.

## Menu do botão direito do Metric Plot

Clique com o botão direito no Metric Plot para acessar um menu de contexto. Os comandos a seguir estão disponíveis.

**Tabela 12-1 Opções do menu de contexto Metric Plot**

Opção de menu	Descrição
Regression	Mostra uma linha de regressão no gráfico da métrica. <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> Consulte <a href="#">Caixa de diálogo Regression na página 80</a> .
Display "N/A" as 0.0	Quando esta opção é selecionada, os valores dos gráficos que não são numéricos usam um valor y de zero. Senão, esses pontos são omitidos no gráfico. Por exemplo, o <b>Retention Time</b> é reportado como N/A para picos que não podem ser integrados. Para esse recurso, um ponto fica presente para esses picos, assim o usuário consegue ver essas amostras possivelmente problemáticas e vinculá-las ao painel <b>Peak Review</b> , clicando no ponto.
Show Legend	Altera a legenda que identifica os símbolos de ponto usados nos diversos tipos de amostra.
Label Active Series (using sample names)	Altera se os pontos de dados são rotulados com o texto do campo <b>Sample Name</b> da <b>tabela de resultados</b> . Se houver mais de um traço sobreposto, apenas o traço ativo será rotulado.
Use Percent Y-Axis	Altera se o eixo Y usa unidades absolutas ou uma porcentagem do valor Y máximo. Quando se usa o recurso de porcentagem, ela é calculada de forma independente para cada traço sobreposto. Esse recurso pode ser usado para ilustrar traços sobrepostos de diversos componentes, e a resposta da métrica dos componentes é bem diferente.
Start Y-Axis at Zero	Altera se o eixo Y começa em y=0 ou no valor Y mínimo que precisa ser representado graficamente.
Connect Points With Lines	Altera se os pontos de dados são conectados por linhas.
Save Setting	Se o gráfico estiver associado a uma configuração, esse recurso salvará os recursos atuais. Senão, esse recurso se comportará como <b>Save Setting As</b> .

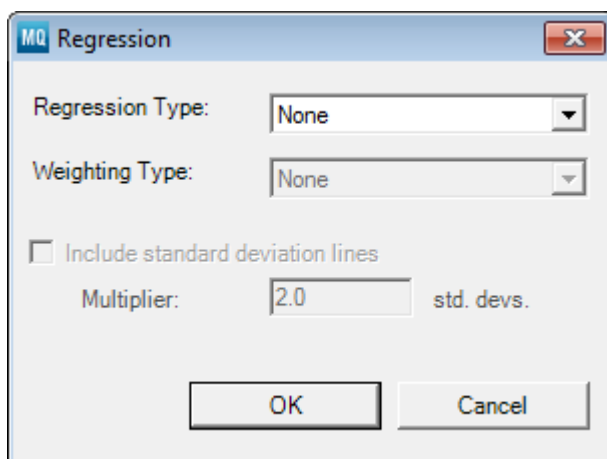
**Tabela 12-1 Opções do menu de contexto Metric Plot (continuação)**

Opção de menu	Descrição
Save Setting As	Se as mesmas colunas forem sempre representadas graficamente, o usuário poderá salvar as opções de gráfico como uma configuração. Assim o usuário consegue gerar rapidamente um gráfico, mesmo que as colunas necessárias não estejam visíveis na <b>tabela de resultados</b> . Além das colunas, são salvas também as diversas opções de representação gráfica. Depois que uma configuração é salva, o nome aparece no menu <b>Metric Plot</b> .
Delete Setting	Se o gráfico em questão estiver associado a uma configuração, use esse recurso para excluir a configuração.

## Caixa de diálogo Regression

Clique para mostrar a linha de regressão no gráfico de métricas.

**Figura 12-1 Caixa de diálogo Regression**





Rótulo	Descrição
Regression Type	Contém os diversos tipos de regressão (linear, quadrático e assim por diante). O tipo de regressão <b>Mean</b> resulta em uma linha horizontal no local do valor y médio para todos os pontos de dados e o tipo de regressão <b>Median</b> resulta em uma linha horizontal no local do valor y mediano para os pontos. Além disso, existe o recurso <b>None</b> , que remove todas as regressões anteriores.
Weighting Type	Os diversos tipos de ponderação estão descritos em <a href="#">Fatores de ponderação na página 127</a> .
Include standard deviation lines e Multiplier	Essas opções estão disponíveis quando o tipo de regressão <b>Mean</b> ou <b>Median</b> é selecionado. Quando selecionado, outras linhas horizontais tracejadas são adicionadas ao gráfico com o número especificado de desvios padrão acima e abaixo da linha principal. Use esta opção para visualizar os pontos que estão, por exemplo, a mais de dois ou três desvios padrão em relação à média.

Use o **Quantitation Method Editor** para criar um método quantitativo ou para editar um já existente.

O fluxo de trabalho típico é criar métodos quantitativos usando o **New Results Table wizard**. No entanto, o usuário pode usar o **Quantitation Method Editor** para criar um método quantitativo que pode ser usado conforme necessário.

## Guia Components

Clique com o botão direito na guia **Components** para acessar um menu de contexto. Os comandos a seguir estão disponíveis.

**Tabela 13-1 Opções do menu do botão direito de Components**

Opção do menu	Descrição
Find Component by Name	Usado para selecionar o componente cujo <b>Name</b> corresponde ao texto. O texto exato não é necessário para encontrar uma correspondência. Isso é útil para selecionar um componente específico, se houver muitos componentes.  Se nenhuma linha é selecionada inicialmente na planilha, a busca começa da primeira linha. Caso contrário, a busca começa a partir da linha seguinte à linha selecionada e retorna para o começo. Isso é útil se houver mais que um componente cujo <b>Name</b> contém o texto. Se a primeira pesquisa não encontrar o componente, pesquise novamente, deixando o primeiro componente selecionado, para localizar outra correspondência na tabela.
Insert Row Above	Insere uma única linha vazia imediatamente acima da linha selecionada atualmente.
Delete Selected Rows	Remove as linhas selecionadas atualmente da tabela.
Sum Multiple Ions	Soma cromatogramas para múltiplas transições de MRM ou faixas de massas de varredura completa. Após o comando ser selecionado, colunas de massa adicionais são adicionadas à tabela <b>Components</b> . Quaisquer massas selecionadas para uma determinada linha são usadas na construção do XIC resumido para o analito ou padrão interno correspondente. É recomendado que esse recurso seja sempre selecionado.
Groups	Consulte <a href="#">Submenu dos grupos na página 83</a> .
Internal Standards	Consulte <a href="#">Submenu do padrão interno na página 85</a> .

## Submenu dos grupos

Tabela 13-2 Opções de menu dos grupos

Opção de menu	Descrição
Using Constant Group Size	Abre a caixa de diálogo Set Automatic Groups, que é usada para preencher automaticamente a coluna Group usando o nome do primeiro componente de cada grupo, considerando que cada grupo contenha o mesmo número de componentes. Consulte <a href="#">Caixa de diálogo Set Automatic Groups na página 84</a> .
By Filling Down Existing Groups	Completa automaticamente os mesmos nomes de grupo para um número de componentes sequenciais.  Para utilizar esse comando, especifique manualmente o nome do grupo ao primeiro componente para cada grupo separado e selecione o comando. Os nomes dos grupos especificados são preenchidos para quaisquer componentes subsequentes para aquele grupo que o nome está em branco. Somente linhas para as quais o Name foi preenchido são consideradas.
Using Q1 Masses	Só está disponível para experimentos MRM. Usado para preencher a coluna Group usando a massa Q1. Isso é vantajoso se a mesma massa Q1 foi especificada por transações múltiplas para o mesmo composto e fragmentos diferentes foram monitorados. Se há muitos componentes, e alguns coincidentemente compartilham a mesma massa Q1, então eles serão designados para o mesmo grupo.
Using Q3 Masses	Só está disponível para experimentos MRM. Usado para preencher a coluna Group usando a massa Q3. Isso é vantajoso se formas de isotópico diferente de um composto foram monitoradas (com uma massa Q1 diferente), mas uma massa constante Q3 foi monitorada. Se há muitos componentes, e alguns coincidentemente compartilham a mesma massa Q3, então eles serão designados para o mesmo grupo.
Using (Q1 – Q3) Mass Differences	Usado para preencher a coluna Group usando a diferença entre as massas Q1 e Q3 (só está disponível para os experimentos MRM). Isso é vantajoso se formas de isotópico diferente de um composto foram monitoradas (com uma massa Q1 diferente), mas uma massa constante Q3 foi monitorada. Se há muitos componentes, e alguns coincidentemente compartilham a mesma diferença de massa, então eles serão designados para o mesmo grupo.
Add Group to Start of Component Name	Anexa o nome do grupo ao início do analito ou padrão interno. Isso pode ser vantajoso se os nomes iniciais não são únicos.

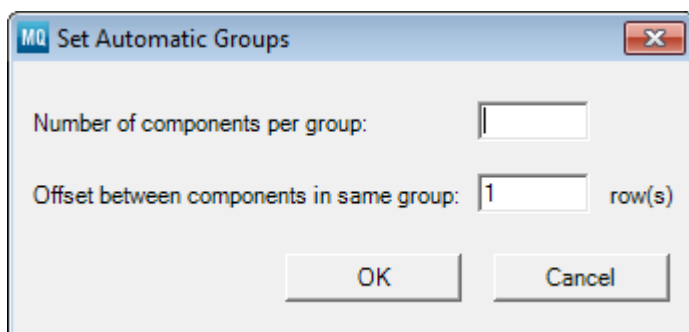
**Tabela 13-2 Opções de menu dos grupos (continuação)**

Opção de menu	Descrição
Remove Group from Start of Component Name	Remove o nome do grupo, se exibido, do início do analito ou do nome de padrão interno.
Append Summed Ions for Groups	Ao habilitar a opção Sum Multiple Ions, esse comando anexa um novo componente a cada grupo que usa o cromatograma somado para o grupo. Componentes separados são adicionados por analitos ou padrões internos aos grupos, se ambos estão definidos. O nome para os novos analitos padroniza o nome do grupo e para padrões internos o nome do grupo com IS anexado. Se os componentes somados são requeridos, mas não os componentes de massa única originais, então o último poderá ser excluído.

### Caixa de diálogo Set Automatic Groups

Preenche automaticamente a coluna Group usando o nome do primeiro componente de cada grupo, assumindo que cada grupo contém o mesmo número de componentes.

**Figura 13-1 Caixa de diálogo Set Automatic Groups**



Rótulo	Descrição
Number of components per group	O número total de componentes de cada grupo.
Offset between components in same group	A compensação nas linhas entre os componentes sequenciais de um mesmo grupo. Esse valor é geralmente 1, mas pode ser maior se os componentes para o grupo não estiverem em linhas adjacentes.

## Submenu do padrão interno

Tabela 13-3 Opções de menu de padrões internos

Opção de menu	Descrição
Set IS for All Analytes	Define o campo do nome IS para todos as linhas de analitos. Se um padrão interno foi definido, então seu nome será usado. Caso contrário, selecione o padrão interno requerido da caixa de diálogo que irá abrir.
Set IS for Selected Analytes	Se o mesmo padrão interno for usado para mais de um analito, forneça um atalho para configurar o padrão interno separadamente para cada analito, um a um. Consulte <a href="#">Definir IS para Selected Analytes na página 85</a> .
Set Last Component of Group as IS	Utilize esse comando se vários componentes forem designados para Groups, manualmente ou usando os itens do submenu Set Groups. A caixa de seleção IS para o último componente para cada grupo é selecionada e todos os outros componentes para o grupo, que são assumidos como analitos, estão configurados para usar esse último componente como um padrão interno.
Set for All Groups as for Selected Group	Usado para copiar o arranjo de padrões internos para o grupo correspondente à linha atualmente selecionada para todos os outros grupos, de forma simétrica. Isso é útil se houver mais de um padrão interno para cada um dos grupos. Consulte <a href="#">Definir para todos os grupos assim como para grupo selecionado na página 85</a> .

### Definir IS para Selected Analytes

1. Certifique-se de que o padrão interno necessário seja definido (ambas as caixas de seleção **Name** e **IS** estejam selecionadas).
2. Selecione as linhas para os analitos para os quais usar o padrão interno.
3. Selecione o item do menu.

Se houver mais de um padrão interno definido, um diálogo se abrirá solicitando que o usuário selecione o necessário.

### Definir para todos os grupos assim como para grupo selecionado

1. Atribua grupos.
2. Indique manualmente quais componentes são padrões internos ao selecionar a caixa na primeira coluna para o primeiro grupo.
3. Indique manualmente o padrão interno para cada analito para o primeiro grupo ao selecionar a caixa de combinação na coluna **IS Name**.
4. Selecione qualquer linha única correspondente ao primeiro grupo.
5. Clique em **Set for All Groups as for Selected Group**.

## Aba Integration

Clique com o botão direito na aba **Integration** para acessar um menu de contexto. Os comandos a seguir estão disponíveis.

**Tabela 13-4 Opções do menu do botão direito da aba Integration & Regression**

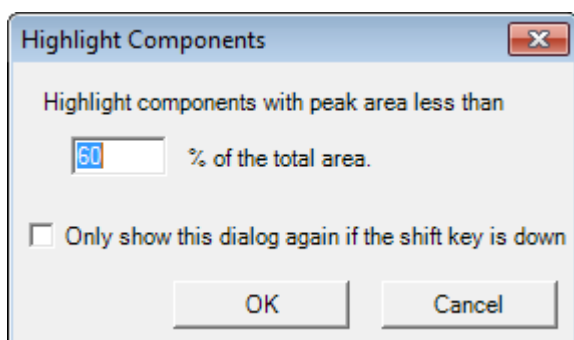
Opção do menu	Descrição
Find Component by Name	Semelhante ao comando disponível na aba <b>Components</b> , exceto que a diferença é que em vez de selecionar linhas da planilha <b>Components</b> , itens individuais na lista de componentes são selecionados.
Highlight Components with Uncertain RT	Usado para realçar os componentes para os quais o tempo de retenção esperado padrão (definido como o RT do pico com a maior intensidade para cada cromatograma) está incorreto. Se houver somente alguns componentes, revise cada um individualmente e não use este comando. No entanto, se houver muitos componentes, use este comando para verificar visualmente apenas aqueles para os quais há mais de um pico significativo presente no cromatograma. Consulte <a href="#">Caixa de diálogo Highlight Components na página 87</a> .
Home Graph Axes	Retorna o gráfico ampliado para sua visualização original, onde todos os dados ficam visíveis.
Overlay Other Components for Group	<p>Use este comando para sobrepor os cromatogramas se diversos componentes foram atribuídos a grupos e se for esperado que os componentes atribuídos a qualquer grupo tenham o mesmo tempo de retenção. Por exemplo, se eles representam diferentes transições de MRM do mesmo composto real.</p> <p>Ao ser selecionado, o cromatograma para o componente atual, cujos parâmetros de integração estão sendo definidos, é desenhado usando um traço azul sólido e a área do pico integrado é exibida. Os cromatogramas, e não a área do pico integrado, para os outros componentes no mesmo grupo são sobrepostos usando um estilo de linha tracejada.</p>
Update Retention Times	<p>Usado para redefinir os tempos de retenção esperados para um método quantitativo criado anteriormente. Se um método quantitativo existente é aberto e a opção <b>Set New Typical Sample</b> for selecionada, os cromatogramas mostrados correspondem à nova amostra, mas os tempos de retenção esperados são mantidos inalterados.</p> <p>Para cada componente, o tempo de retenção esperado é atualizado para corresponder ao tempo de retenção do pico com a maior intensidade dentro de uma janela da largura especificada centrada no tempo de retenção esperado original. Consulte <a href="#">Caixa de diálogo Update Retention Time na página 87</a>.</p>
Set New Typical Sample	Usado para associar uma amostra representativa ao método. Isso potencialmente afeta as seleções disponíveis da coluna <b>Q1/Q3</b> (para experimentos de MRM) ou da coluna <b>Start - Stop</b> (para experimentos de perfil). Também afeta cromatogramas que são exibidos na aba <b>Integration</b> .

## Caixa de diálogo Highlight Components

Os nomes de quaisquer componentes para os quais o pico selecionado automaticamente não considera pelo menos a porcentagem especificada da área de pico total no cromatograma são indicados em negrito. Por exemplo, em [Figura 13-2](#), se o pico selecionado padrão considera de 70% a 100% da área total, então ele não é sinalizado. Revise somente esses picos ao selecioná-los na lista de componentes

Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver selecionada, então a caixa de diálogo não abrirá da próxima vez em que o comando for selecionado, a não ser que o usuário pressione **Shift**. O parâmetro de porcentagem de área total especificado anteriormente é usado automaticamente.

Figura 13-2 Caixa de diálogo Highlight Components



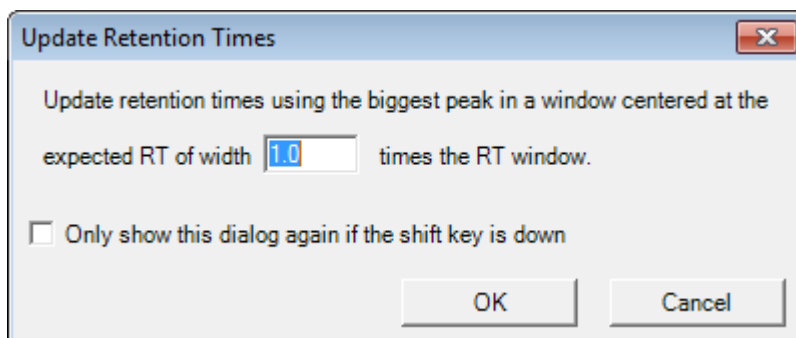
## Caixa de diálogo Update Retention Time

Usada para redefinir os tempos de retenção necessários de um método de processamento criado anteriormente. Se um método de processamento estiver aberto e Set New Typical Sample estiver selecionada, os cromatogramas mostrados correspondem à nova amostra, mas os tempos de retenção previstos são mantidos inalterados.

Para cada componente, o tempo de retenção previsto é atualizado para corresponder ao tempo de retenção do pico com a maior intensidade dentro de uma janela da largura especificada centrada no tempo de retenção original previsto.

Se a caixa de seleção **Only show this dialog again if the shift key is down** estiver selecionada, então a caixa de diálogo não abrirá da próxima vez em que o comando for selecionado, a não ser que o usuário pressione **Shift**. O tempo de retenção especificado anteriormente é automaticamente usado.

Figura 13-3 Caixa de diálogo Highlight Components



## Guia Outlier Settings

Clique com o botão direito na guia **Outlier Settings** para acessar um menu de contexto. Os comandos a seguir estão disponíveis.

Rótulo	Descrição
Accuracy for Standards	Edita a tolerância de acurácia das amostras <b>Standard</b> .
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Edita a tolerância da acurácia para as amostras <b>Standard</b> com um valor que é consistente com os procedimentos operacionais padrão do laboratório.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Edita a tolerância da acurácia para a concentração mais baixa <b>Standard</b> se o procedimento operacional padrão do laboratório indicar uma tolerância diferente para esse <b>Standard</b> .
Accuracy for QCs	Edita a tolerância da acurácia das amostras de <b>Quality Control</b> .
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Edita a tolerância da acurácia para as amostras de <b>Quality Control</b> com um valor que é consistente com os procedimentos operacionais padrão do laboratório.
Ion Ratio	Somente disponível se os componentes forem atribuídos a grupos. Selecione para usar a razão de íons da área do pico ou altura do pico. A área do pico ou altura do pico é definida ao selecionar o parâmetro de regressão durante o desenvolvimento do método quantitativo.
Calculated Concentration	Ao usar amostras <b>Standard</b> de concentração conhecida, esta é a concentração calculada de volta, a partir da curva de calibração. Equações de regressão descrevem como uma regressão é realizada pelos vários tipos e ponderação de regressão.
Component	Os analitos ou padrões internos para todas as amostras.
IS	O padrão interno selecionado. Somente disponível se a caixa de seleção <b>Ion Ratio</b> estiver selecionada.



Rótulo	Descrição
Group	Componentes que possuem o mesmo tempo de retenção (ou seja, diferentes transições para o mesmo composto) podem ser agrupados. Somente disponível se a caixa de seleção <b>Ion Ratio</b> estiver selecionada.
Ion Ratio Tolerance (%)	Use a configuração padrão ou edite essa configuração de acordo com os procedimentos operacionais padrão do laboratório. Somente disponível se a caixa de seleção <b>Ion Ratio</b> estiver selecionada.
Lower Limit of Calculated Concentration	Digite o limite inferior da faixa de concentração aceitável. Qualquer amostra com <b>Calculated Concentration</b> menor que esse valor é sinalizada como um valor extremo de concentração.
Upper Limit of Calculated Concentration	Digite o limite superior da faixa de concentração aceitável. Qualquer amostra com <b>Calculated Concentration</b> maior que esse valor é sinalizada como um valor extremo de concentração.

Tabela 13-5 Opções do menu do botão direito de Outlier Settings

Rótulo	Descrição
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Aplica o limite inferior da concentração calculada para todos os analitos, se todos os analitos possuírem os mesmos critérios.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Aplica o limite superior da concentração calculada para todos os analitos, se todos os analitos possuírem os mesmos critérios.

Objetivos:

- Aprenda como processar dados usando o algoritmo SignalFinder™.
- Aprenda como processar dados usando o algoritmo de integração MQ4.
- Aprenda como usar os parâmetros de algoritmo de integração de MQ4 e SignalFinder™.

Os métodos quantitativos incluem um conjunto de instruções sobre como quantificar os picos selecionados para integração. Nesse tutorial, um método de quantificação é criado ao mesmo tempo em que a tabela de resultados.

Também incluídas estão as tarefas adicionais que podem ser usadas para manipular os dados na **tabela de resultados**, bem como informações sobre ícones de software disponíveis.

---

**Nota:** Os usuários da edição Audit Trail and Security estão restritos ao uso da estrutura de pastas Data do Analyst. Os usuários só podem processar arquivos de dados que estejam na estrutura de arquivos do software Analyst® MD. Se a estrutura de arquivos e pastas não for mantida, talvez o usuário não consiga visualizar os cromatogramas.

---

## Sobre as curvas de calibração

Uma curva de calibração (também conhecida como curva de concentração padrão) é um método para determinar a concentração de uma substância em uma amostra **Unknown** comparando a amostra **Unknown** com um conjunto de amostras **Standard** de concentração conhecida. A curva de calibração é um gráfico que mostra como o instrumento responde (o sinal analítico) às variações na concentração do analito (a substância a ser mensurada). O usuário prepara uma série de amostras **Standard** em uma faixa de concentrações próxima à concentração esperada do analito na amostra **Unknown**.

## Pré-requisitos

No software Analyst® MD, selecione o projeto **Example**.

O Mix\_batch\_1. O arquivo wiff pode ser encontrado na pasta Analyst Data\Projects\Example\Data\Triple Quad.

## Modificar as colunas mostradas na tabelas de resultados

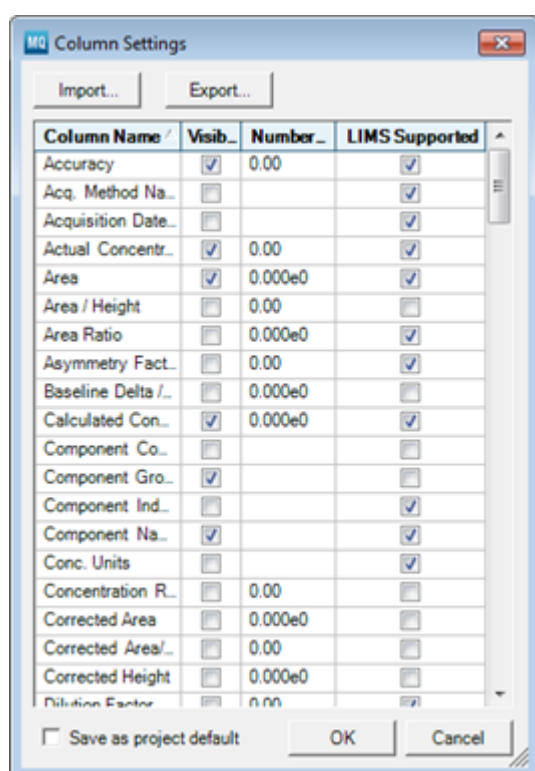
Use este procedimento para mostrar ou ocultar colunas na **tabela de resultados** ou alterar a precisão do formato de número. Para campos numéricos, utilize o formato 0.00 para observações não científicas e utilize

o formato 0.00e0 para observações científicas. Altere os pontos decimais para indicar a precisão dos números que serão exibidos. Somente um ponto final (.) pode ser usado como um separador decimal. O grupo de dígitos não é compatível.

**Nota:** Algumas colunas críticas das informações da amostra como **Sample Name**, **Sample ID**, e assim por diante, não deverão ser ocultas quando o usuário customizar as configurações da coluna da **tabela de resultados**.

1. Clique com o botão direito na **tabela de resultados** e, em seguida, clique em **Column Settings**.

**Figura 14-1** Caixa de diálogo Column Settings



2. Selecione ou desmarque a caixa de seleção na coluna **Visible** como solicitado.
3. Na coluna **Number Format**, altere o formato para número inteiro ou notação científica. O número de pontos decimais a ser exibido também pode ser mudado.

**Dica!** Para aplicar as configurações de coluna a todas as **tabelas de resultados** no projeto, selecione a caixa de seleção **Save as project default**.

4. Clique em **OK**.

## Processar dados usando o algoritmo de integração SignalFinder™

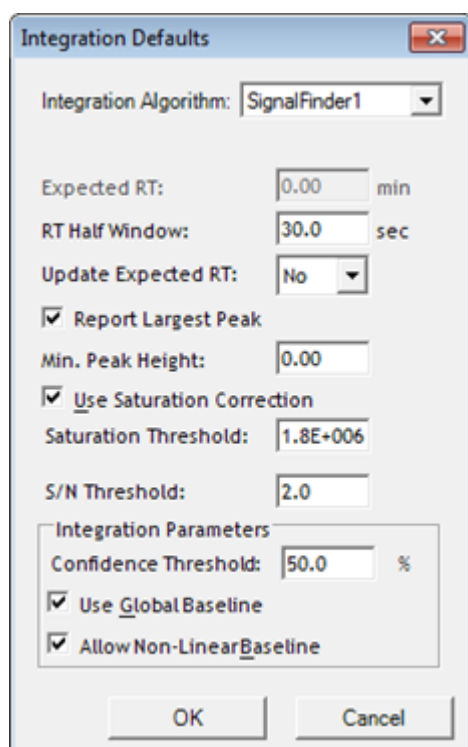
Diferente do algoritmo de integração MQ4 ou dos algoritmos disponíveis no software Analyst® MD, o SignalFinder™ constrói um modelo de pico usando a amostra selecionada ao criar um método quantitativo. Esse modelo descreve o formato do pico selecionado usado pelo algoritmo. No tempo de integração, o algoritmo de integração SignalFinder aplica este modelo para as outras amostras, alongando ou inclinando a amostra. Isso permite o fato de que o formato de pico é semelhante, mas não idêntico, para um determinado analito ou padrão interno para diversas amostras.

### Configurar os parâmetros de integração de pico

Use o procedimento a seguir para verificar ou configurar o algoritmo de integração processando os dados. Consulte [Sobre o algoritmo de integração SignalFinder na página 108](#).

1. No software Analyst® MD, na barra **Navigation**, em **Companion Software**, clique duas vezes em **MultiQuant 3.0.3**.
2. Clique em **Edit > Project Integration Defaults**.
3. No diálogo **Integration Defaults**, selecione **SignalFinder1** na lista **Integration Algorithm**.
4. Selecione a caixa de seleção **Use Saturation Correction** e, em seguida, configure o **Saturation Threshold** como **1.8E+006**.

Figura 14-2 Caixa de diálogo Integration Defaults



---

**Nota:** Os picos acima do **limiar de saturação** são considerados saturados. Esse valor é dependente do detector.

---

5. Clique em **OK**.

### Criar uma tabela de resultados

1. Clique em **File > New Results Table**.
2. Na página **Create Results Table - Select Samples**, expanda a pasta **Example Data** e arraste o arquivo **Mix\_batch\_1.wiff** para dentro do painel **Selected**.
3. Clique em **Next**.
4. Clique na opção **Create New Method (SignalFinder1)**.
5. Clique em **New**.
6. Digite um nome para o método na caixa de diálogo **Save Quantitation Method As** e clique em **Save**.
7. Clique em **Next**.

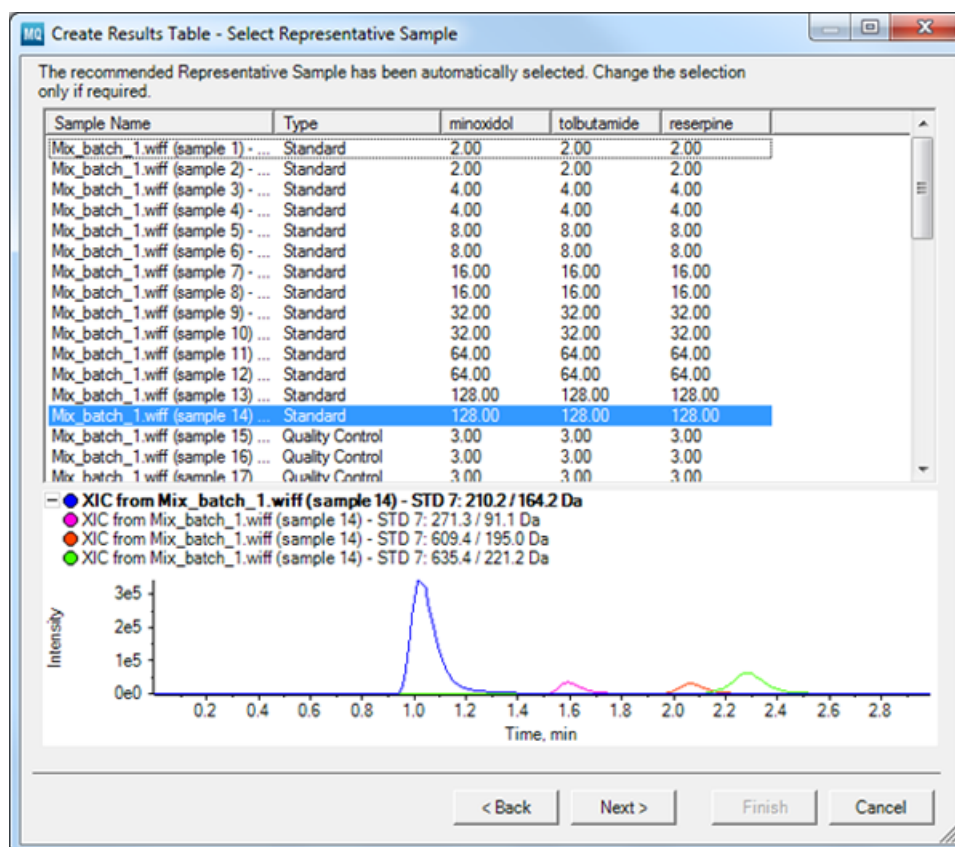
Na página **Create Results Table - Select Representative Sample**, uma amostra representativa foi selecionada. O software recomenda uma amostra representativa com base na seleção de um cromatograma que fornece a melhor oportunidade para selecionar parâmetros de integração que são adequados para todo o lote. Recomenda-se selecionar uma amostra de **QC** ou padrão de concentração alta, não saturada (TIC abaixo de 1E+006 cps).

---

**Dica!** Durante a revisão de picos, outra amostra da qual será construído um modelo de pico durante a revisão de picos pode ser selecionada.

---

Figura 14-3 Página Create Results Table - Select Representative Sample



8. Na página **Create Results Table - Define Components**, confirme os analitos e padrões internos.
9. Clique em **Next**.

Figura 14-4 Página Create Results Table - Define Components

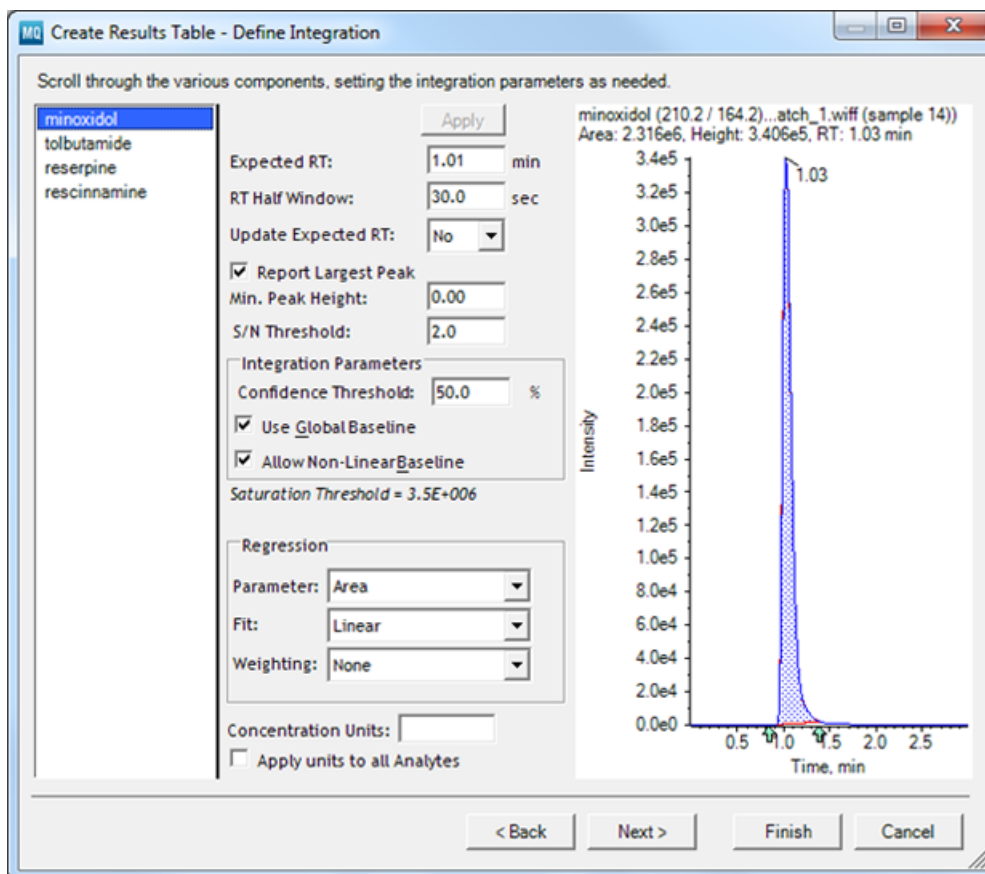
Row	IS	Name	Group	IS Name	Q1 / Q3
1	<input type="checkbox"/>	minoxidol	Group A	rescinnamine	210.2 / 164.2
2	<input type="checkbox"/>	tolbutamide	Group A	rescinnamine	271.3 / 91.1
3	<input type="checkbox"/>	reserpine		rescinnamine	609.4 / 195.0
4	<input checked="" type="checkbox"/>	rescinnamine			635.4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

**Nota:** Quando um método de aquisição é criado, se o nome do componente estiver incluso na coluna **ID** na tabela de faixas de massas, esse nome será automaticamente preenchido na página **Define Components**. Se o nome do componente não estiver incluso, atualize manualmente a tabela com o nome do componente.

Na página **Create Results Table - Define Integration**, os analitos e padrões internos são exibidos no lado esquerdo. Os parâmetros de integração atuais foram aplicados à amostra representativa e o cromatograma é exibido.

Os componentes da amostra representativa anteriormente selecionados são exibidos no painel **Integration**. Os picos nessa amostra representativa são encontrados e integrados usando os parâmetros que foram definidos na caixa de diálogo **Integration Defaults**.

Figura 14-5 Página Create Results Table - Define Integration



Caso necessário, ajuste os parâmetros de obtenção do pico e as posições das setas verdes no eixo x dos cromatogramas. Isso permite que o usuário defina mais precisamente a posição de início e fim necessária de integração do pico. Efetivamente, essa é uma forma visual de ajustar dois parâmetros de obtenção do pico que são salvos com o método quantitativo e aplicados para todos os picos a serem integrados. O software restringe os limites desses parâmetros dentro do que considera limites razoáveis para a extensão do pico.

Se houver mais de um pico no cromatograma e o pico correto não foi selecionado automaticamente, arraste um pico para definir o tempo de retenção esperado. Arraste do início real ao fim real do pico e não selecione uma região muito ampla ou muito estreita. O motivo é que esse algoritmo assume que há apenas um pico dentro da seleção. Por exemplo, se o conjunto de dados possui ruídos e o algoritmo encontra dois picos fundidos quando há apenas um pico presente, selecione uma região que contenha ambos os picos para fazer o algoritmo ajustar seus parâmetros internos de modo que somente um pico seja encontrado. De forma alternativa, se o algoritmo encontrou um pico quando acredita-se que há dois ou mais picos adjacentes presentes, selecione uma região que contenha apenas o pico de interesse.

10. No grupo **Integration Parameters**, selecione a caixa de seleção **Global Baseline** para usar o cromatograma inteiro como referência.

Se essa opção não estiver selecionada, o software considera somente uma área estreita em torno do pico de interesse.



11. Selecione a caixa de seleção **Allow Non-Linear Baseline** entre uma referência linear ou não linear. Uma referência não linear estima a referência abaixo de cada pico. Uma referência linear coloca uma linha entre os pontos no começo e fim do grupo de picos específico.
12. Revise a integração de pico para cada componente clicando no nome do componente no painel esquerdo. Ajuste os parâmetros de integração para deixar o pico representativo integrado adequadamente.
13. Para os componentes **Minoxidol**, **Tolbutamide** e **Reserpine**, use os parâmetros de grupo **Regression** nas seguintes definições e clique em **Apply**:
  - **Parameter**: Area
  - **Fit**: Linear
  - **Weighting**: None
14. Configure **Concentration Units** para **ng/mL** e selecione a caixa **Apply units to all Analytes**.
15. Clique em **Apply**.
16. Clique em **Finish**.

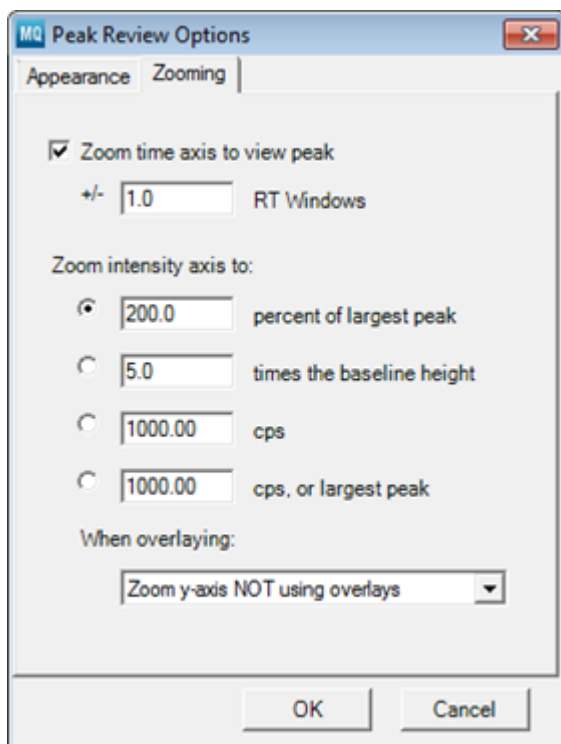
Os arquivos de amostra são automaticamente integrados e uma **tabela de resultados** é gerada.

Consulte [Revisão dos picos na página 97](#) para gerenciar os dados na **tabela de resultados**. Consulte [Relatórios na página 132](#) para informações sobre a criação de relatórios.

## Revisão dos picos

1. Clique no ícone **Peak Review**.
2. Clique com o botão direito na tabela e depois clique em **Column Settings**.
3. Torne a coluna **SF Saturated** visível.
4. Clique com o botão direito no painel **Peak Review** e depois clique em **Options**.
5. Na guia **Zooming**, altere **Zoom time axis to view peak** para **1**.
6. Configure o **Zoom intensity axis** como **200 percent of largest peak**.

Figura 14-6 Opções de revisão do pico



7. Use as setas vermelhas para rolar pelos picos.

Se o detector estiver saturado, o pico aparecerá mais horizontal que o normal. Por exemplo, esse pico teria um perfil vermelho em torno do pico e **Yes** aparece na coluna **SF Saturated** porque a intensidade do pico está acima do limite de saturação de 1.8<sup>6</sup> cps.

---

**Nota:** A amostra representativa pode não ser adequada a todos os componentes. Uma nova amostra representativa pode ser selecionada durante a revisão de pico e um novo modelo, gerado.

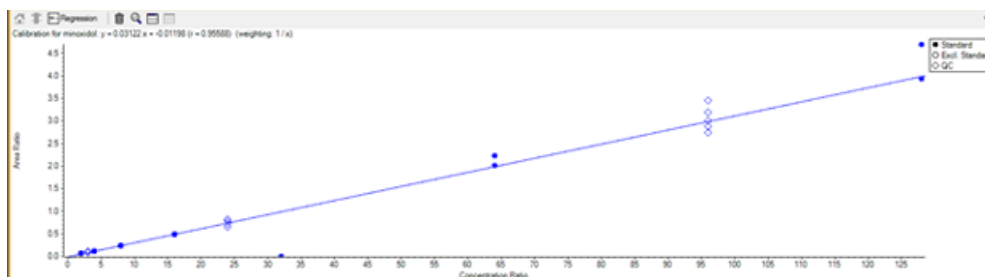
---

8. Para criar um novo modelo, selecione um novo pico e, em seguida, clique no ícone **Update Peak Model**. Selecione um pico que seja semelhante no formato aos outros picos e não esteja saturado.
9. Clique com o botão direito e, em seguida, clique em **Update Quantitation Method for Component** para aplicar mudanças a todas as amostras no componente.

## Modificar a curva de calibração

1. Clique no ícone **Show Calibration Curve** para visualizar a curva de calibração.
2. Para adicionar uma legenda, clique com o botão direito no painel **Calibration** e clique em **Show Legend**.

Figura 14-7 Curva de calibração



- Para adicionar os QCs à curva, clique com o botão direito no painel **Calibration** e clique em **Show QCs**.

**Dica!** Para excluir um ponto da curva, clique com o botão direito em um ponto na curva e clique em **Exclude**.

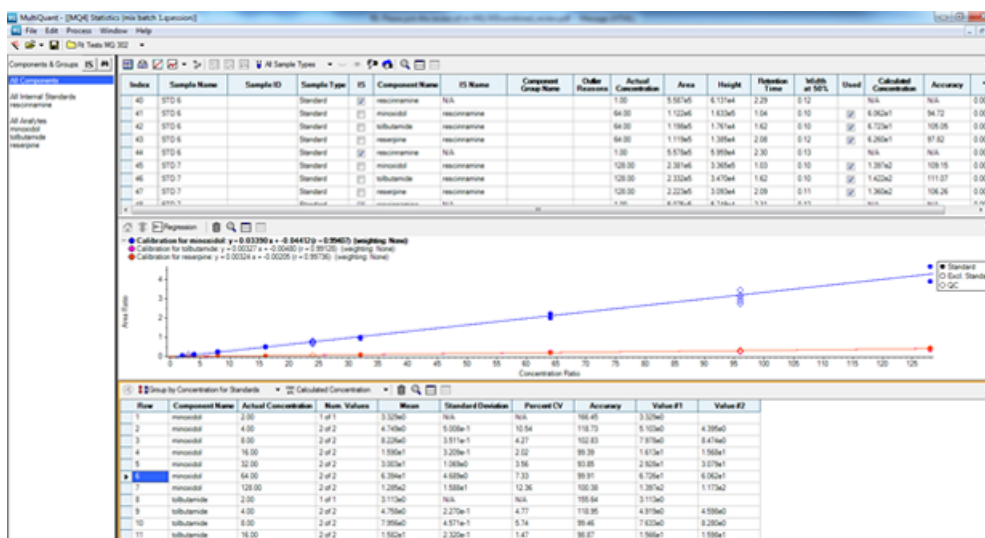
- Para confirmar ou editar os parâmetros de regressão para um analito individual, selecione o analito na lista **Components and Group** e, em seguida, clique no botão **Regression** na barra de ferramentas.

## Revisão das estatísticas de amostra

Os usuários podem revisar as estatísticas para uma única tabela de resultados. Revisar a integração de pico, a curva de calibração, e as estatísticas de amostra é um processo iterativo.

- Com uma tabela de resultados aberta, clique no ícone **Show Statistics Table**.
- Na lista **Sample Grouping**, clique em um item para especificar como a amostra (para um analito fornecido) deve ser agrupada para o cálculo das estatísticas.

Figura 14-8 Painel de estatísticas



3. Na lista **Metric**, clique em um item para especificar a métrica real que é usada para o cálculo das estatísticas.
4. Revise as colunas de **Value**. Os pontos inutilizados indicam os pontos de dados excluídos.

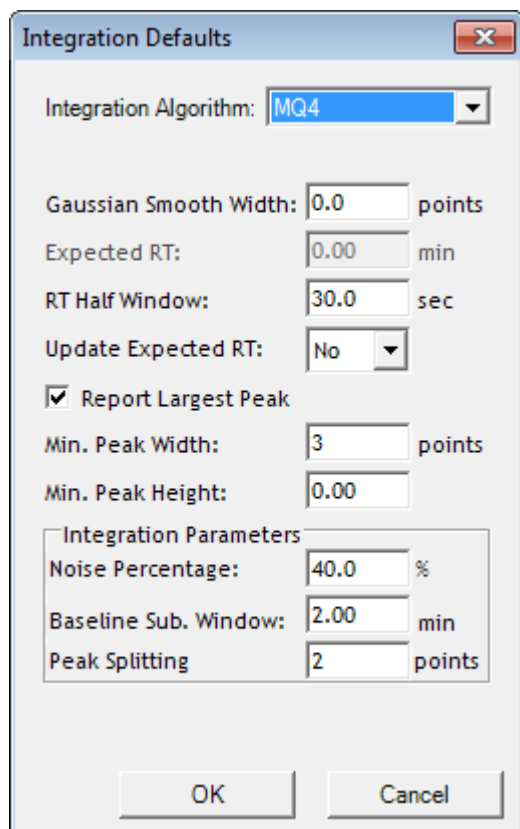
# Processar dados usando o algoritmo de integração MQ4

## Configurar os parâmetros de integração de pico

Use o seguinte procedimento para verificar ou definir o algoritmo de integração antes de processar os dados. Consulte [Parâmetros do algoritmo de integração MQ4 na página 115](#).

1. No software Analyst<sup>®</sup> MD, na barra **Navigation**, em **Companion Software**, clique duas vezes em **MultiQuant 3.0.3**.
2. Clique em **Edit > Project Integration Defaults**.
3. Na caixa de diálogo **Integration Defaults**, na lista **Integration Algorithm**, selecione **MQ4**.

**Figura 14-9** Caixa de diálogo Integration Defaults



4. Se necessário, altere os parâmetros para o projeto e clique em **OK**.

O algoritmo de integração MQ4 e as configurações de parâmetro são usadas para quaisquer novos métodos criados nesta pasta de projeto **Example**. Essas configurações padrão são baseadas em projetos. Para alterar as configurações padrão para outros projetos, repita este procedimento para o projeto selecionado.

### Criar uma tabela de resultados

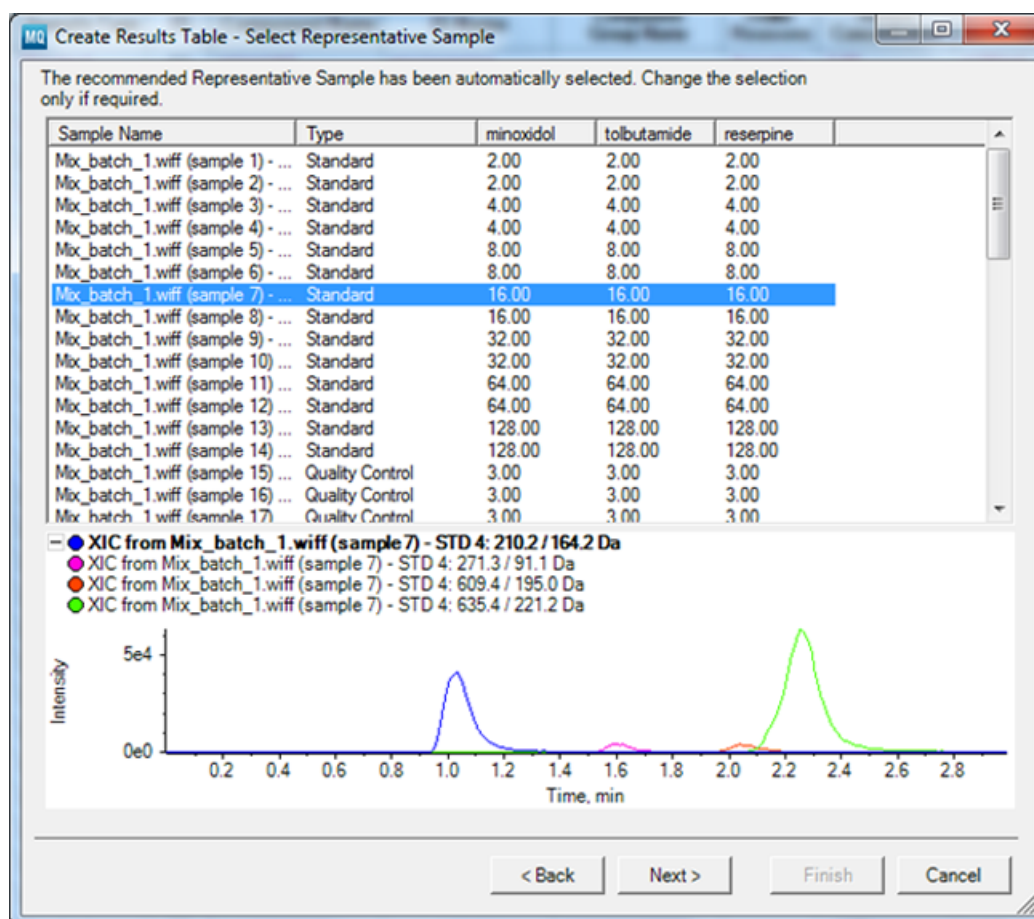
1. Clique em **File > New Results Table**.
2. Na página **Create Results Table - Select Samples**, expanda a pasta **Example Data** e arraste o arquivo **Mix\_batch\_1.wiff** para dentro do painel **Selected**.
3. Clique em **Next**.
4. Clique na opção **Create New Method (MQ4)**.
5. Clique em **New**.
6. Digite um nome para o método na caixa de diálogo **Save Quantitation Method As** e clique em **Save**.

Neste tutorial, um método é criado. Criar métodos oferece uma oportunidade para revisar e aplicar parâmetros diferentes para a integração dos dados.

Se houver um método existente, selecione a opção **Choose Existing Method** e selecione a caixa **Edit Method** para revisar e aplicar diferentes parâmetros para o método. Se a caixa **Edit Method** não estiver selecionada, o assistente criará uma **tabela de resultados** usando o método existente.

7. Na página **Create Results Table - Select Representative Sample**, uma amostra representativa foi recomendada e está selecionada.

**Figura 14-10** Página Create Results Table - Select Representative Sample



8. Clique em **Next**.

O software recomenda uma amostra representativa com base na seleção de um cromatograma que fornece a melhor oportunidade para selecionar parâmetros de integração que são adequados para todo o lote. Recomenda-se que a segundo padrão de concentração mais baixo ou amostra de QC para o algoritmo de integração MQ4 esteja selecionado, caso as informações de concentração do analito estejam incorporadas no arquivo .wiff. Por exemplo, caso a faixa de concentração seja de um a oito, o segundo mais baixo é dois. Se a amostra representativa padrão não for intensa o suficiente, selecione outra amostra representativa clicando no botão **Back** no assistente e selecionando outra amostra. Outra amostra pode ser selecionada durante a revisão de picos. Consulte [Revisar picos na página 105](#).

9. Na página **Create Results Table - Define Components**, confirme os analitos e padrões internos.

Figura 14-11 Página Create Results Table - Define Components

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"/>				

10. Clique em **Next**.

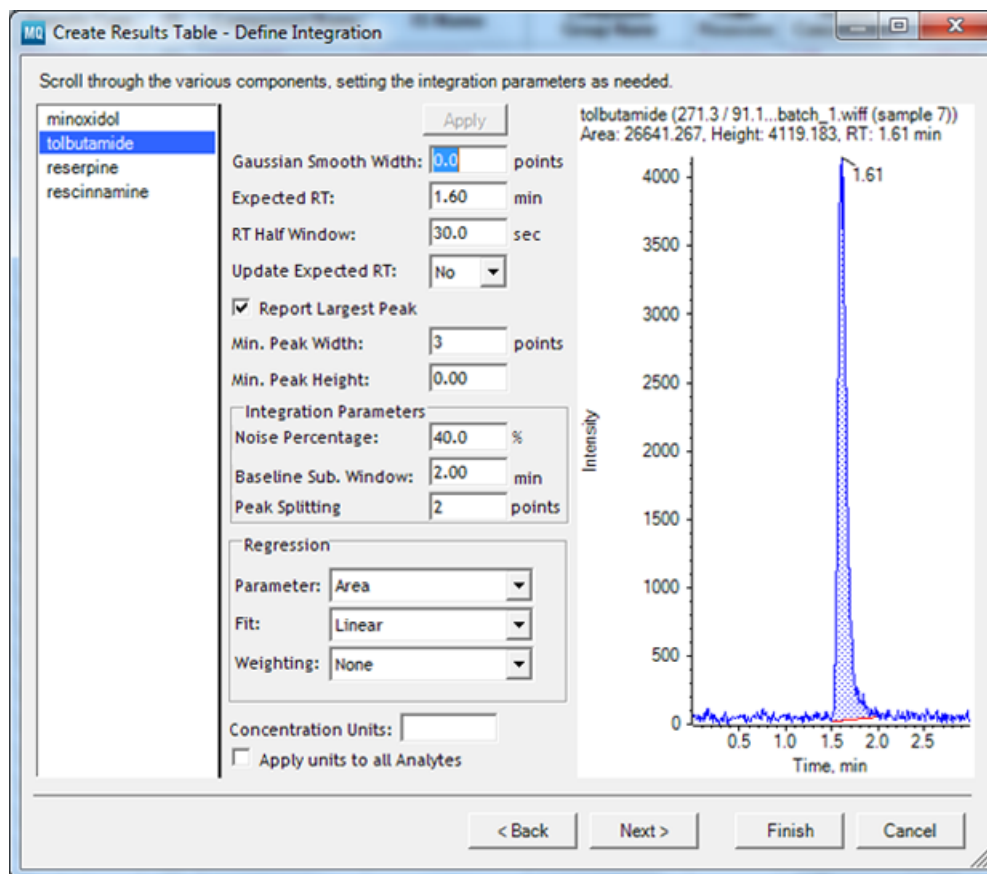
**Nota:** Quando um método de aquisição é criado, se o nome do componente estiver incluso na coluna **ID** na tabela de faixas de massas, esse nome será automaticamente preenchido na página **Define Components**. Se o nome do componente não estiver incluso, atualize manualmente a tabela com o nome do componente. Caso uma extensão .IS seja adicionada a um nome de componente, o software identifica o componente como um padrão interno e atribui o componente .IS como o padrão interno de seu analito correspondente.

Na página **Create Results Table - Define Integration**, os analitos e padrões internos são exibidos no lado esquerdo. Os parâmetros de integração atuais foram aplicados à amostra representativa e o cromatograma é exibido.

Os componentes da amostra representativa anteriormente selecionados são exibidos no painel **Integration**. Os picos nessa amostra representativa são encontrados e integrados usando os parâmetros que foram definidos na caixa de diálogo **Integration Defaults**.

11. Revise a integração de pico para cada componente clicando no nome do componente no painel esquerdo. Ajuste os parâmetros de integração para deixar o pico representativo integrado adequadamente. Consulte [Configurar os parâmetros de integração de pico na página 100](#).

Figura 14-12 Página Create Results Table - Define Integration



12. Para os componentes **Minoxidol**, **Tolbutamide** e **Reserpine**, use os parâmetros de grupo **Regression** nas seguintes definições e clique em **Apply**:

- **Parameter:** Area
- **Fit:** Linear
- **Weighting:** None

13. Configure **Concentration Units** para **ng/mL** e selecione a caixa **Apply units to all Analytes**.

14. Clique em **Apply**.

15. Clique em **Finish**.

Os arquivos de amostra são automaticamente integrados e uma tabela de resultados é gerada.



Figura 14-13 Tabela de resultados

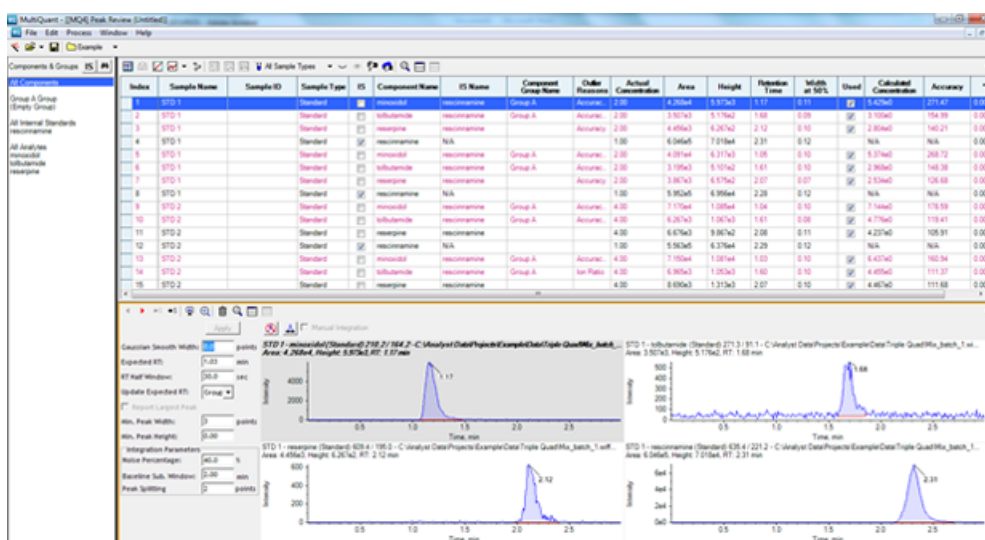
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Other Reasons	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Eluent	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	4.20e4	5.37e4	1.17	0.11	IS	2.00e4	101.16
2	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	3.50e4	5.17e4	1.68	0.09	IS	3.10e4	154.99
3	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	4.49e4	6.26e4	2.12	0.10	IS	2.80e4	140.21
4	STD-1		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.04e4	7.21e4	2.31	0.12	N/A	N/A	N/A
5	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	4.09e4	6.31e4	1.05	0.10	IS	3.10e4	154.99
6	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	3.10e4	5.10e4	1.61	0.10	IS	2.90e4	140.26
7	STD-1		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	3.80e4	6.57e4	2.07	0.07	IS	2.50e4	126.68
8	STD-1		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	5.90e4	6.99e4	2.28	0.12	N/A	N/A	N/A
9	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	7.17e4	1.08e4	1.04	0.10	IS	4.94e4	123.64
10	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	6.30e4	1.06e4	1.61	0.08	IS	4.19e4	119.41
11	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	6.67e4	9.96e4	2.08	0.11	IS	4.23e4	108.91
12	STD-2		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	5.90e4	6.57e4	2.29	0.12	N/A	N/A	N/A
13	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Ion Ratio	4.00	7.10e4	1.08e4	1.03	0.10	IS	4.29e4	108.90
14	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1	Ion Ratio	4.00	6.90e4	1.08e4	1.62	0.10	IS	4.49e4	111.37
15	STD-2		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		4.00	6.00e4	1.31e4	2.07	0.10	IS	4.40e4	111.68
16	STD-2		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.01e4	7.03e4	2.28	0.13	N/A	N/A	N/A
17	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.02e4	2.20e4	1.03	0.10	IS	7.62e4	97.62
18	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.30e4	2.04e4	1.60	0.09	IS	7.49e4	93.70
19	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.40e4	1.80e4	2.07	0.11	IS	7.97e4	97.67
20	STD-3		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.70e4	7.32e4	2.28	0.13	N/A	N/A	N/A
21	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.40e4	2.00e4	1.03	0.10	IS	8.32e4	104.34
22	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.20e4	1.80e4	1.60	0.10	IS	8.14e4	101.79
23	STD-3		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		8.00	1.30e4	1.80e4	2.07	0.11	IS	7.97e4	98.62
24	STD-3		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.70e4	6.92e4	2.28	0.13	N/A	N/A	N/A
25	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.80e4	4.39e4	1.03	0.10	IS	1.89e4	99.95
26	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.80e4	4.11e4	1.61	0.10	IS	1.95e4	97.07
27	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.70e4	3.84e4	2.08	0.11	IS	1.92e4	98.28
28	STD-4		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.70e4	6.92e4	2.29	0.13	N/A	N/A	N/A
29	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.80e4	4.18e4	1.04	0.10	IS	1.95e4	97.11
30	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.80e4	4.29e4	1.63	0.10	IS	1.98e4	99.13
31	STD-4		Standard	IS	recombinant	recombinant	group 1		16.00	2.80e4	4.13e4	2.09	0.10	IS	1.94e4	96.78
32	STD-4		Standard	IS	recombinant	N/A			1.00	6.70e4	6.92e4	2.30	0.13	N/A	N/A	N/A

Consulte [Revisão dos picos na página 97](#) para gerenciar os dados na tabela de resultados. Consulte [Relatórios na página 132](#) para informações sobre a criação de relatórios.

## Revisar picos

1. Clique no ícone **Peak Review**.

Figura 14-14 Painel de revisão de picos



2. Clique com o botão direito na tabela e depois clique em **Column Settings**.
3. Clique com o botão direito no painel **Peak Review** e depois clique em **Options**.

4. Na aba **Zooming**, mude o **Zoom time axis to view peak** para **3 RT Windows**.
5. Se um cromatograma que contém picos múltiplos e um pico incorreto for integrado, então arraste através do pico correto para definir um novo **Expected RT**. Se necessário, ajuste os parâmetros de confirmação e integração do pico. Consulte [Algoritmos de integração na página 108](#).
6. Para aplicar os novos parâmetros a todas as outras amostras, para o mesmo componente, clique com o botão direito do mouse no cromatograma e depois clique em **Update Quantitation Method for Component**.
7. O método quantitativo incorporado pode ser modificado durante a visualização da **tabela de resultados** clicando em **Edit > Modify Results Table Method**. O usuário poderá alterar as opções de regressão do parâmetro de integração e as informações de componente para cada componente.

Se as opções de regressão do parâmetro de integração e as informações de componente de cada componente forem alteradas, somente o método quantitativo incorporado na **tabela de resultados** é modificado. O arquivo do método quantitativo real usado para criar a **tabela de resultados** não será modificado. Para usar esse método quantitativo incorporado para processar outros arquivos de dados, exporte esse método incorporado para um arquivo de método usando a função **Export**.

---

**Nota:** Limpe a integração clicando em **Set Peak to Not Found** para visualizar os dados brutos antes de integrar o pico manualmente.

---

8. Para usar o modo de integração manual, clique no ícone **Enable Manual Integration Mode** no painel **Peak Review**. Arraste o cursor da base de um lado para o pico de interesse para o outro. O pico é integrado manualmente agora e os parâmetros de integração usados anteriormente não estão disponíveis.

---

**Dica!** Se o pico foi recém-modificado, então o reverta para o método original clicando com o botão direito e em seguida em **Revert Peak to Original Method**.

---

---

**Nota:** O campo **Calculated Concentration** na **tabela de resultados** reflete quaisquer alterações resultando do ajuste da curva aos pontos do padrão.

---

## Modificar a curva de calibração

1. Clique no ícone **Show Calibration Curve** para visualizar a curva de calibração.
2. Para adicionar uma legenda, clique com o botão direito no painel **Calibration** e clique em **Show Legend**.
3. Para adicionar os QCs à curva, clique com o botão direito no painel **Calibration** e clique em **Show QCs**.

---

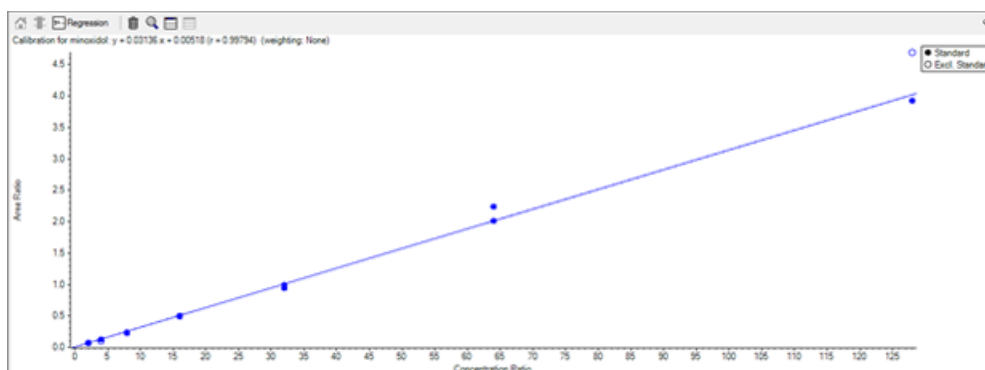
**Dica!** Para excluir um ponto da curva, clique com o botão direito em um ponto da curva e clique em **Exclude**.

---

4. Para confirmar ou editar os parâmetros de regressão para um analito individual, selecione o analito no painel **Components and Group** e clique no botão **Regression** na barra de ferramentas.

- Para fazer a curva de calibração se adequar melhor, exclua a segunda amostra STD 2 (concentração 4,00 ng/mL) e a primeira amostra STD 7 (concentração 128,00 ng/mL). Para fazer isso, use a coluna **Actual Concentration** e a coluna **Used** para remover as amostras. Desmarque a caixa de seleção na coluna **Used** para remover o ponto da curva. A curva de calibração deve parecer agora como a mostrada na [Figura 14-15](#).

**Figura 14-15** Curva de calibração com amostras excluídas



## Revisar estatísticas de amostra

Os usuários podem revisar as estatísticas para uma única tabela de resultados. Revisar a integração de pico, a curva de calibração, e as estatísticas de amostra é um processo iterativo.

- Com uma tabela de resultados aberta, clique no ícone **Show Statistics Table**.

**Figura 14-16** Tabela de estatísticas

Índice	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Outer Reason	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
2	STD 1		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	2.00	3.307e3	5.17e4	1.60	0.10		2.42e4	101.33
6	STD 1		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	2.00	3.195e3	5.107e4	1.61	0.10		2.250e4	114.59
10	STD 2		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	4.00	6.207e3	1.007e5	1.61	0.10		4.137e4	103.43
14	STD 2		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	4.00	6.905e3	1.003e5	1.60	0.10		3.809e4	95.23
18	STD 3		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	8.00	1.207e4	2.047e5	1.60	0.10		6.912e4	95.40
22	STD 3		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	8.00	1.208e4	1.930e5	1.60	0.10		7.970e4	94.65
26	STD 4		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	16.00	2.488e4	4.170e5	1.61	0.10		1.517e5	94.44
30	STD 4		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	16.00	2.581e4	4.295e5	1.63	0.10		1.545e5	98.54
34	STD 5		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	32.00	5.602e4	8.427e5	1.61	0.10		2.887e5	95.23
38	STD 5		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	32.00	5.517e4	8.437e5	1.62	0.10		3.058e5	95.89
42	STD 6		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	64.00	1.115e5	1.702e6	1.61	0.10		6.304e5	95.50
46	STD 6		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	64.00	1.106e5	1.707e6	1.62	0.10		6.782e5	108.97
50	STD 7		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	128.00	2.330e5	3.470e6	1.62	0.10		1.444e6	112.83
54	STD 7		Standard		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	128.00	2.205e5	3.408e6	1.60	0.10		1.196e6	95.28
58	QC 1		Quality Control		Isobutamide	Isobutamide	Group A	Isobutamide	1.00	5.750e3	9.305e4	1.60	0.10		3.705e4	105.10

Row	Component Name	Actual Concentration	Mean Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	Isobutamide	2.00	2 of 2	2.350e0	9.547e-2	4.04	117.96	2.427e0	2.250e0
2	Isobutamide	4.00	2 of 2	3.973e0	2.330e-1	5.84	99.39	4.137e0	3.809e0
3	Isobutamide	8.00	2 of 2	7.342e0	4.470e-1	6.05	95.52	6.912e0	7.970e0
4	Isobutamide	16.00	2 of 2	1.520e1	2.371e-1	1.55	95.49	1.511e1	1.545e1
5	Isobutamide	32.00	2 of 2	2.973e1	1.213e0	4.08	92.91	2.887e1	3.058e1
6	Isobutamide	64.00	2 of 2	6.543e1	3.385e0	5.17	102.23	6.304e1	6.782e1
7	Isobutamide	128.00	2 of 2	1.300e2	2.947e1	15.70	101.55	1.444e2	1.196e2

- A partir da lista **Sample Grouping**, clique em um item para especificar como a amostra (para um determinado analito) deve ser agrupada para o cálculo das estatísticas

3. Clique na coluna **Value #1**.

---

**Nota:** O **Group by Concentration for Standards and QCs** é, na verdade, baseado em **Displayed Actual Concentration**, não em **Actual Concentration** armazenada na tabela de resultados. Se a concentração Std 1 é 0,001, a concentração Std 2 é 0,005 e o formato de exibição é 0, então, Std 1 e Std 2 são agrupados juntos, pois ambos são tratados como 0. Para agrupá-los separadamente, na caixa de diálogo **Column Settings**, configure a precisão da **Analyte Concentration** para 0,000. Se Std 1 for 0,500 e Std 2 for 0,499, configure a precisão para 0,00 para agrupá-los juntos. Consulte [Modificar as colunas mostradas na tabelas de resultados na página 90](#).

---

4. Clique em um item da lista **Metric** para especificar a métrica atual que é usada para os cálculos das estatísticas.
5. Revise as colunas de **Value**. Os pontos inutilizados indicam os pontos de dados excluídos.

## Algoritmos de integração

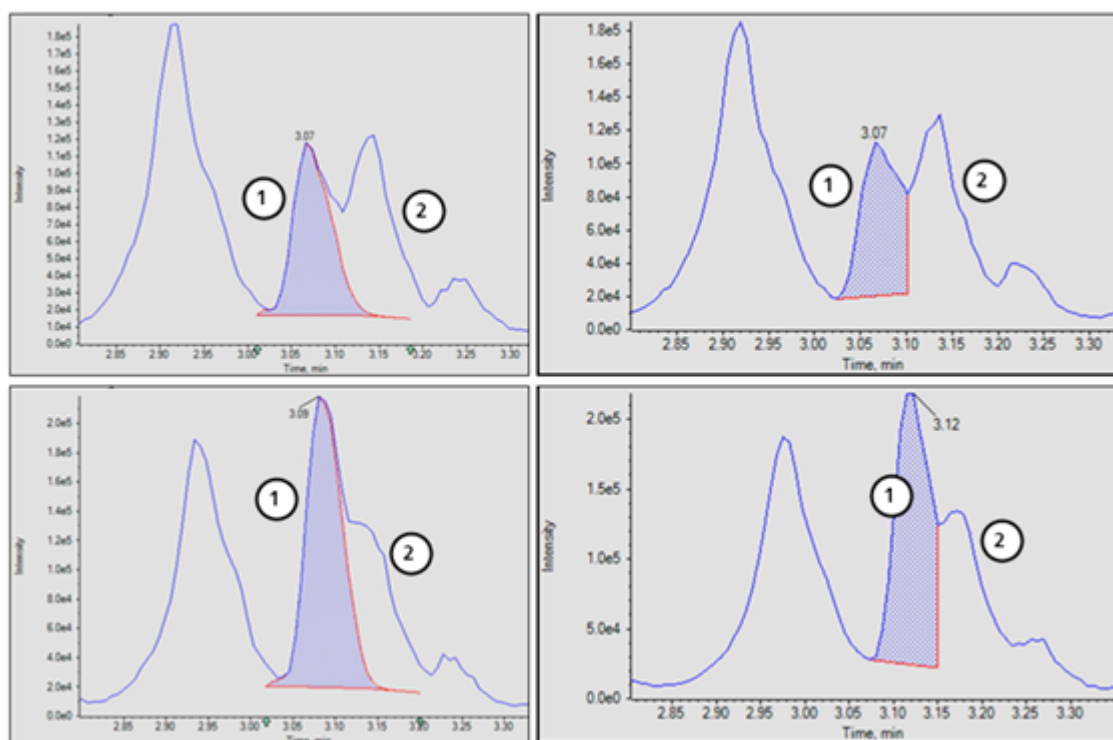
Esta seção descreve os diferentes parâmetros disponíveis para cada algoritmo.

### Sobre o algoritmo de integração SignalFinder

#### Picos de eluição imediata

O algoritmo SignalFinder™ fornece uma representação mais precisa da área de pico dos picos de eluição imediata. [Figura 14-17](#) mostra um exemplo de como os algoritmos de integração MQ4 (gráfico à direita) e SignalFinder (gráfico à esquerda) manipulam picos de eluição imediata. Nesse exemplo, o pico de plano de fundo (item 2) está interferindo com o pico de interesse (item 1). Como o pico de interferência vem do LC ou da matriz, é relativamente constante em todo o lote. Entretanto, a intensidade do pico do analito aumenta conforme a concentração de analitos aumenta, o que resulta nas formas de pico combinadas mudando radicalmente. O algoritmo de integração SignalFinder, com base em um modelo de pico que é definido pelo usuário, pode identificar consistentemente o pico de interesse em todos os níveis de concentração enquanto o algoritmo de integração MQ4 só pode desenhar uma linha vertical do vale para a linha de base. Isso só integra um pico parcial, que apresenta erros na área de pico.

Figura 14-17 Picos de eluição imediata



Item	Descrição
1	Pico de interesse
2	Pico de plano de fundo de coeluição

## Picos com cauda

Para picos com cauda, algoritmos anteriores geralmente são inconsistentes na seleção do tempo de retenção no qual o pico termina. Dependendo da natureza exata do ruído nesta região, dois picos que parecem semelhante podem ter diferentes fins de picos relatados. Normalmente, pode-se tornar a integração mais consistente ajustando os parâmetros de confirmação do pico. Entretanto, isso exige tempo e esforço. Com uma abordagem de modelação, a integração é cortada quando o modelo cai abaixo de um limite, portanto, é muito menos afetado pelo ruído.

## Picos saturados

Quando o algoritmo detecta que um pico está saturado, ele usa um modelo para prever como o pico pode parecer se o detector não estiver saturado. Isso é exibido como um perfil vermelho que se estende acima do pico para aproximar a resposta que teria sido obtida se o detector não estivesse saturado. Este recurso corrige somente a saturação do detector e não a saturação da fonte de íons ou a saturação da coluna. [Figura 14-18](#) mostra um exemplo de correção da saturação.

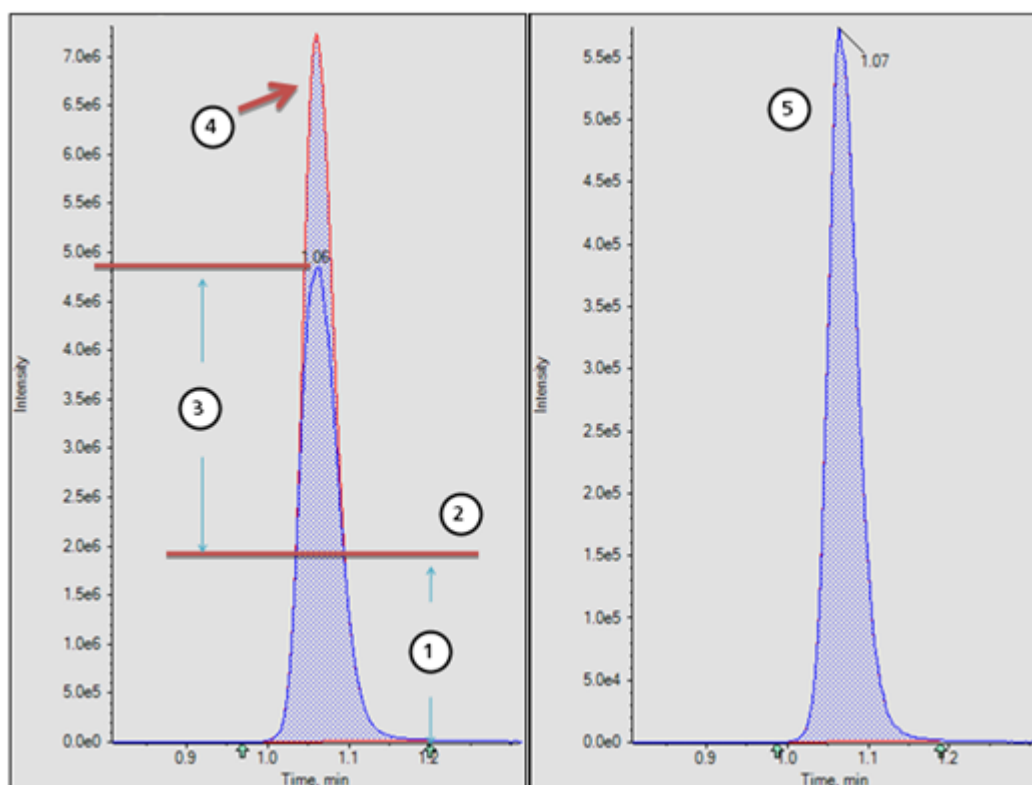
Antes de usar o algoritmo SignalFinder™, selecione uma amostra insaturada para usar na construção do modelo de pico e, então, selecione o limite de saturação para um valor que seja adequado ao detector. Neste

## Tutorial do fluxo de trabalho da análise quantitativa

exemplo, um limite de saturação de  $1.8\text{E}+006$  cps é usado. O algoritmo corresponde a porção insaturada do pico restante, o pico abaixo de  $1.8\text{E}+006$  cps, ao modelo do pico. O algoritmo prevê o restante do pico indicado pelo traço vermelho com base no modelo do pico selecionado.

**Nota:** O limite de saturação é dependente de diversos fatores, incluindo o tipo de detector, a idade do detector e o composto de interesse. Para resultados ideais, o limite de saturação deve ser ajustado adequadamente.

**Figura 14-18 Correção de saturação do detector**



Item	Descrição
1	Porção insaturada (corresponde ao modelo do pico)
2	Limite $1.8\text{e}6$ cps
3	Porção saturada
4	Perfil do pico corrigido
5	Modelo do pico

### Observações sobre o uso

Alguns fluxos de trabalho não possuem uma amostra típica que contém todos os componentes de interesse. Por exemplo, no trabalho de descoberta da droga, os usuários podem procurar por metabólitos incluindo +16

na massa Q1 da droga pai e +0 ou +16 na massa Q3. Esses metabólitos geralmente estão presentes para algumas amostras, mas não necessariamente na amostra escolhida como o modelo usado para criar o método de quantificação. Nessa situação, o algoritmo SignalFinder™ usará um modelo padrão e, para uma transição MRM fornecida, um pico razoável não existirá na amostra típica. Em muitos casos, esse modelo padrão será suficientemente preciso. Entretanto, também é possível criar um novo modelo durante a revisão de pico subsequente usando uma amostra que contém o pico de interesse.

## Parâmetros do algoritmo de integração SignalFinder™

Os seguintes parâmetros são usados para identificar e reportar o pico de interesse. Consulte [Parâmetros de algoritmos de integração na página 120](#) para ver uma lista completa dos parâmetros disponíveis.

### Usar correção de saturação

Essa opção só fica disponível ao definir os valores padrão gerais de algoritmo e não durante a criação do método quantitativo ou revisão do pico individual, pois não é útil usar essa configuração para poucos picos.

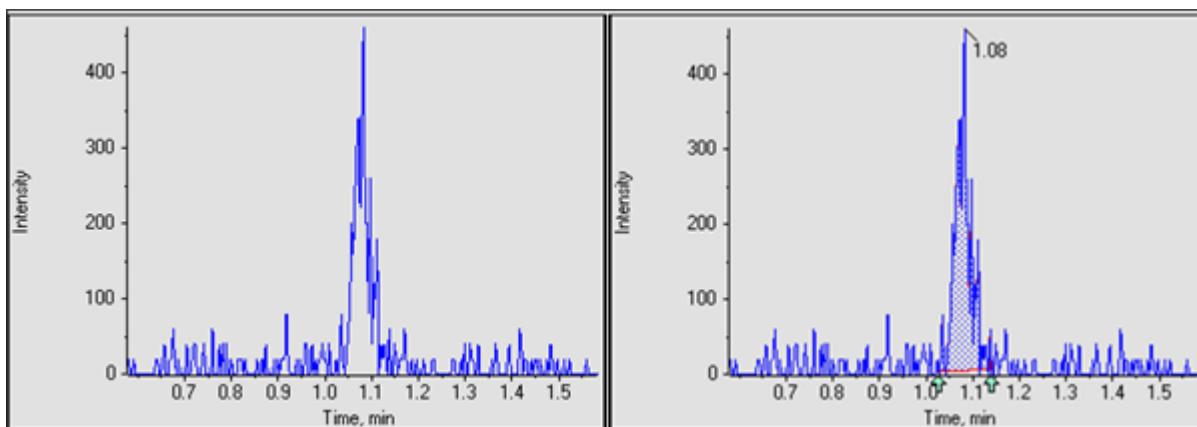
### Saturation Threshold

Os picos acima deste limite são considerados saturados. Esse valor é dependente do detector.

### Limite S/N

Em [Figura 14-19](#), se o Limite S/N estiver configurado como sete (o gráfico à esquerda), o pico não será relatado. Se o Limite S/N estiver configurado como dois (o gráfico à direita), o pico será relatado. Esse parâmetro não afeta a integração.

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



### Limite de confiança

Esse parâmetro é usado para filtrar picos potenciais que são falsos positivos. O valor padrão é 50%, que é geralmente adequado. No entanto, o usuário pode querer usar um valor maior para os dados ruidosos ou para dados para os quais a largura do pico possui uma variação considerável de amostra para amostra.

[Figura 14-20](#) e [Figura 14-21](#) mostram como **Confidence Threshold** afeta o número de picos identificados. Quando o **Confidence Threshold** é configurado como 50%, o pico com um pequeno sub-pico é identificado



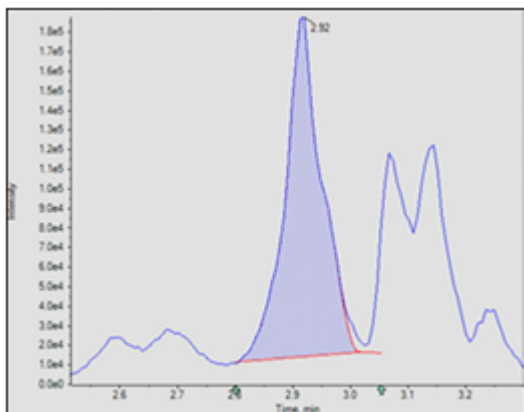
## Tutorial do fluxo de trabalho da análise quantitativa

---

como um único pico. Quando o **Confidence Threshold** é abaixado para 16%, o algoritmo SignalFinder™ encontra dois picos. Arraste entre duas regiões de picos para visualizar os dois picos.

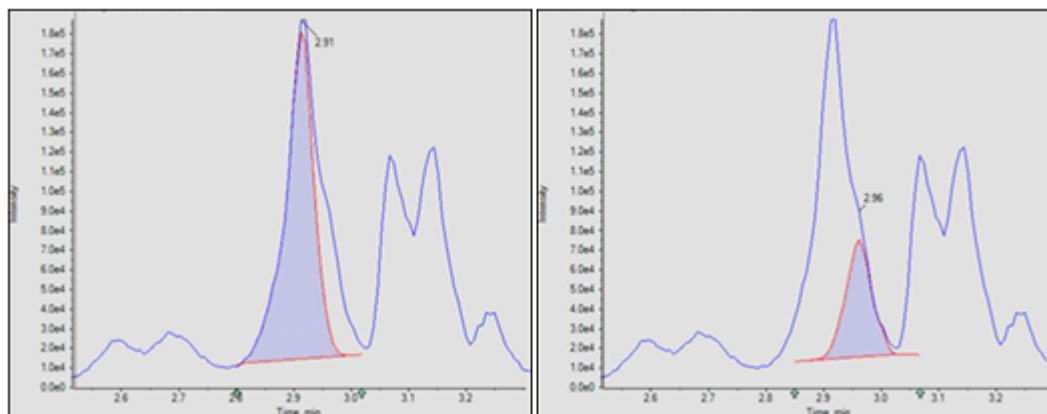
Para determinar quais outros picos estão potencialmente presentes neste único pico, e se o **Confidence Threshold** correto não é conhecido, pressione **Ctrl** e arraste entre a região de interesse do pico. Isso abaixa automaticamente o **Confidence Threshold** para revelar o segundo pico de interesse que não está presente quando o **Confidence Threshold** é configurado para 50%.

**Figura 14-20** Confiança de 50%



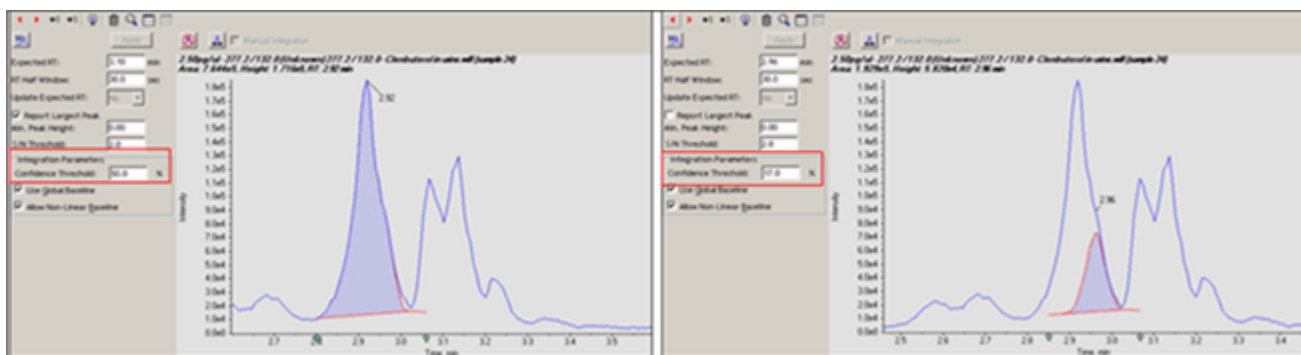
Na confiança de 16%, dois picos são encontrados. Arraste entre a área de pico para identificar os dois picos

**Figura 14-21** Confiança de 16%





**Figura 14-22 Parâmetro do limite de confiança**

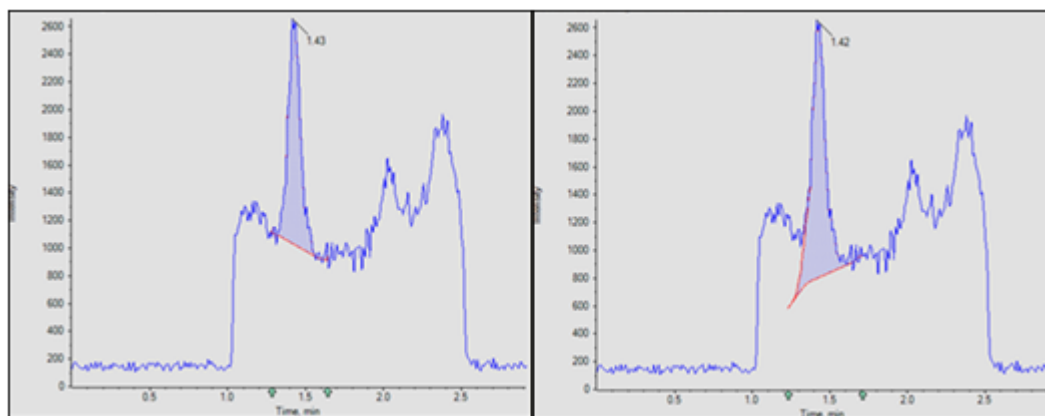


## Use referência global

Selecione essa opção para usar todo o cromatograma como a linha de base. Se a opção não for selecionada, o software de quantificação avaliará mudanças na linha de base localmente. [Figura 14-23](#) mostra um exemplo de quando a linha de base local deve ser usada.

O gráfico esquerdo mostra um cromatograma que foi integrado adequadamente usando a linha de base local. O gráfico direito mostra o mesmo cromatograma, integrado inadequadamente usando a linha de base global.

**Figura 14-23 Use referência global**



## Permitir referência não linear

Use esta opção para selecionar entre uma referência linear ou não linear. Uma referência não linear estima a referência abaixo de cada pico. A opção linear coloca uma linha entre os pontos no começo e fim do grupo de picos específico. [Figura 14-24](#) e [Figura 14-25](#) mostram exemplos de referências lineares e não lineares para picos de coeluição. Os itens 1 a 4 são picos convolvidos.

Uma referência não linear é recomendada para múltiplos picos. Para um único pico, a diferença entre linear e não linear é insignificante.

Figura 14-24 Exemplo de uma referência linear

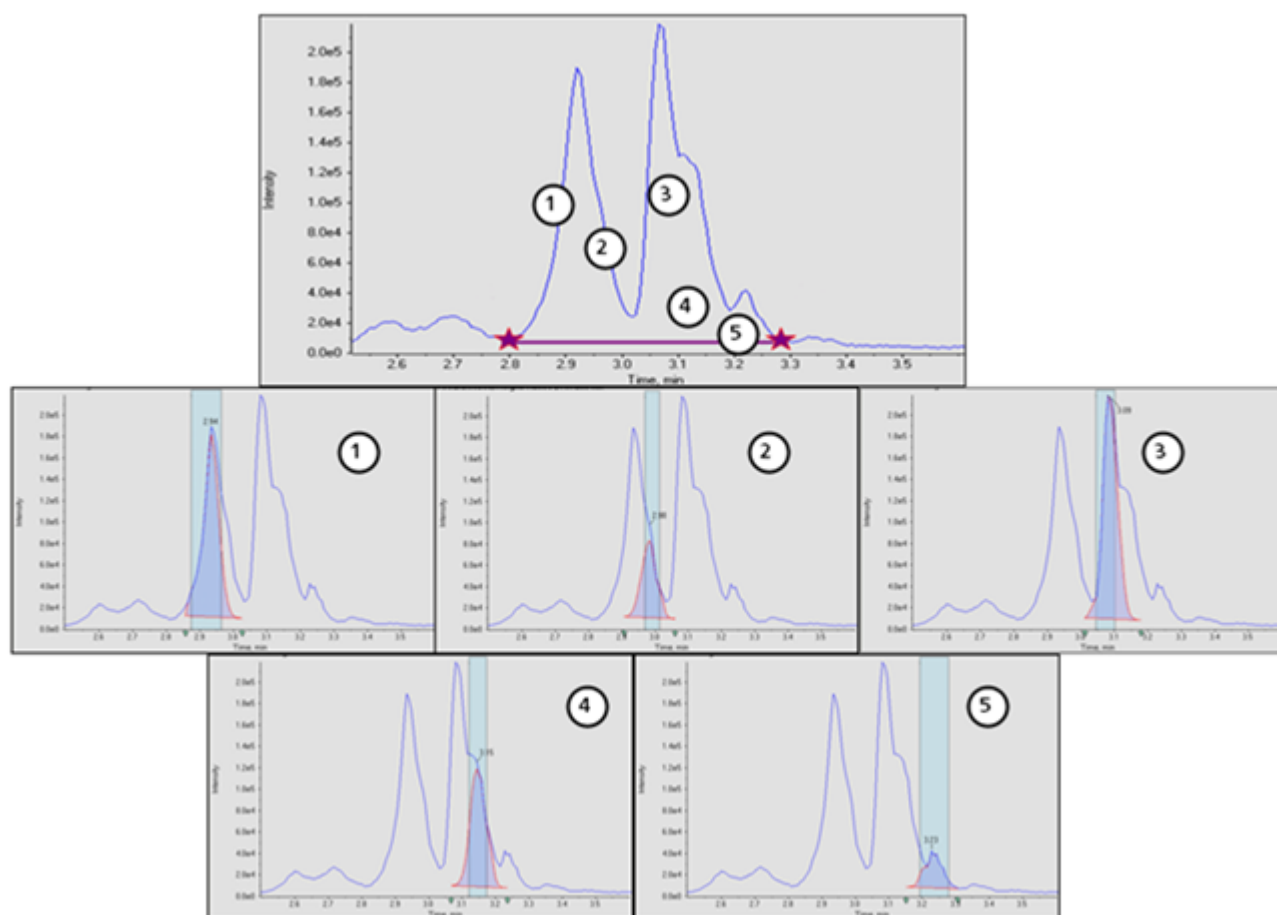
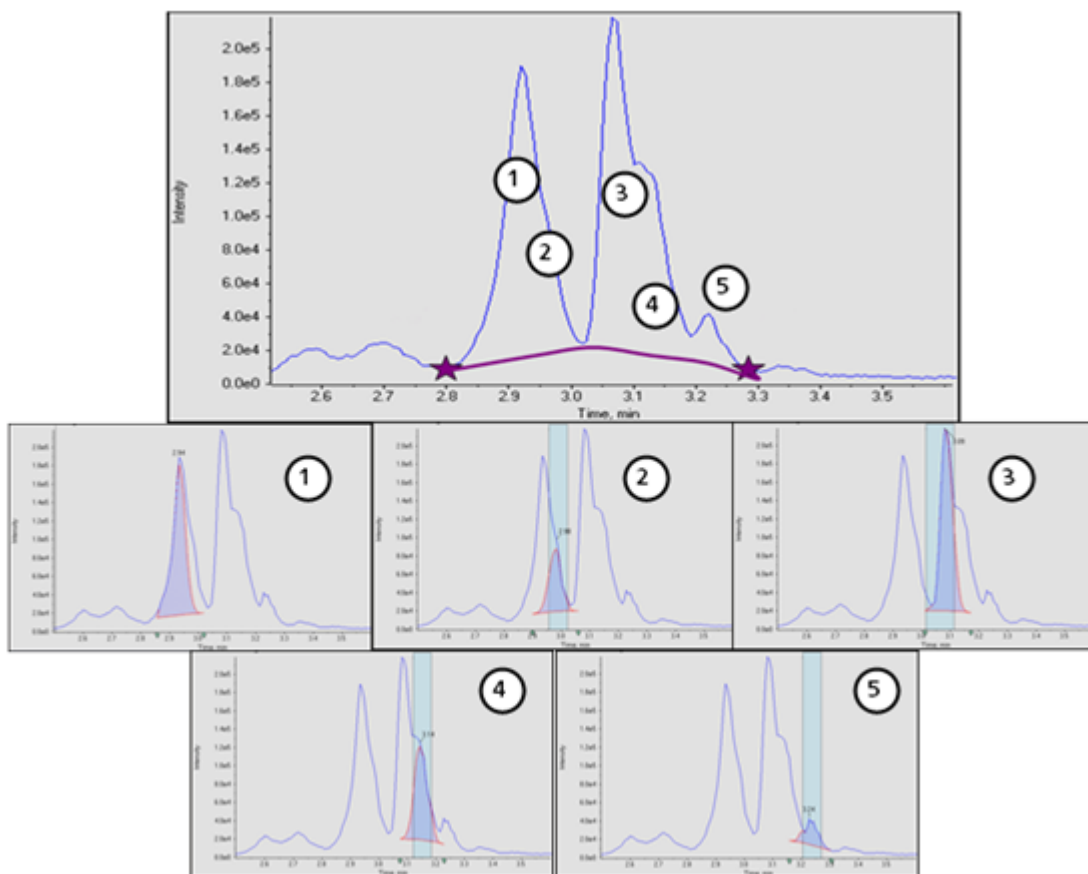


Figura 14-25 Exemplo de uma referência não linear



### Dicas para usar o algoritmo de integração SignalFinder™

- Fundir dois picos: ocasionalmente, o algoritmo de integração SignalFinder detecta dois picos. Para fundir os dois picos, pressione **Ctrl** e arraste entre os dois picos. O software tenta fundir os picos reduzindo a sensibilidade da convolução a menos que os dois picos estejam muito longes um do outro.
- Mudança dos tempos de início e fim do pico: para mudar os tempos de início e fim do pico durante a criação de uma **tabela de resultados** ou durante a revisão de picos, arraste as setas de início e fim do pico.

**Nota:** O usuário somente pode alterar as setas de início e fim dentro dos limites razoáveis.

### Parâmetros do algoritmo de integração MQ4

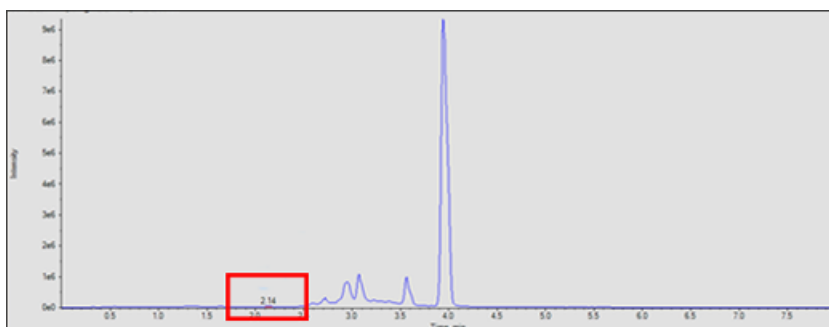
Os seguintes parâmetros são usados para identificar e reportar o pico de interesse. Consulte [Parâmetros de algoritmos de integração na página 120](#) para ver uma lista completa dos parâmetros disponíveis.

### Percentual de ruído

Este parâmetro é usado para estimar o nível de ruído nos cromatogramas. O percentual especificado dos pontos de dados com a menor intensidade é considerado ruído.

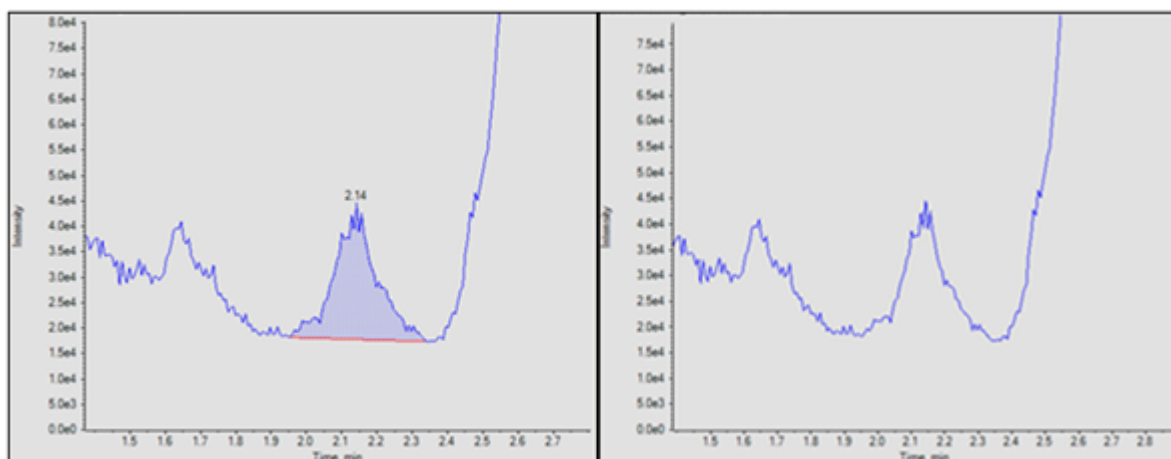
Os valores típicos variam de 20% a 60%. Se pequenos picos na presença de grandes picos não forem encontrados, o percentual de ruído deverá ser menor. [Figura 14-26](#) é um exemplo de um pequeno pico na presença de um pico extremamente grande. Esse pico não é encontrado quando o percentual de ruído é definido em 90%, mas é encontrado quando o percentual de ruído é definido em 40%.

**Figura 14-26 Pico de interesse**



Na [Figura 14-27](#), o gráfico à esquerda mostra o percentual de ruído definido em 40%. O gráfico à direita é definido em 90%.

**Figura 14-27 Níveis de ruído**

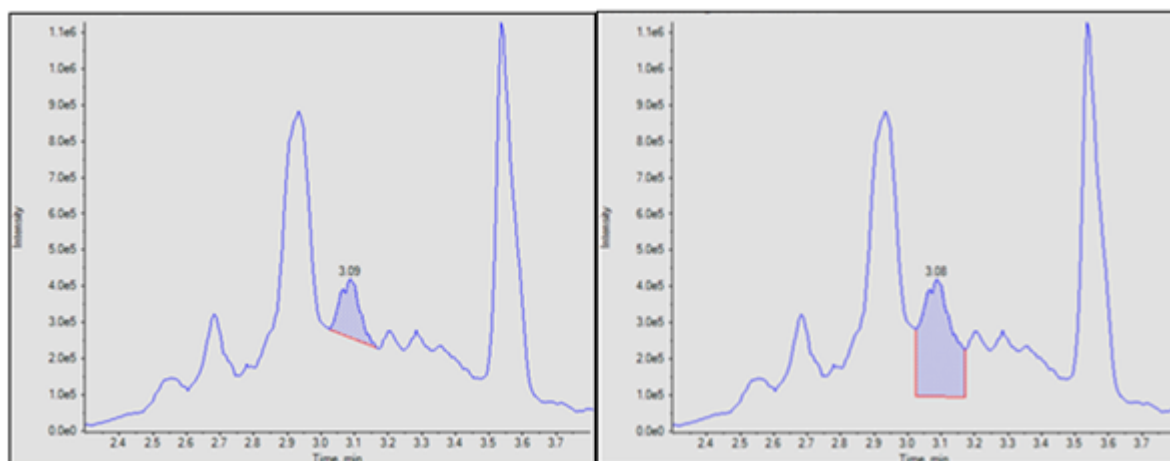


### Janela de subtração da linha de base

Depois da suavização, mas antes de qualquer outro processamento, os cromatogramas são subtraídos da linha de base para diminuir oscilações nos dados. Para cada ponto, a linha de base é calculada usando os pontos de dados dos lados esquerdo e direito do ponto atual com intensidade mínima (dentro da janela de subtração).

O valor exato deste parâmetro não é importante, desde que seja definido pelo menos como um pouco a mais da largura de pico esperada.

**Figura 14-28 Janela de subtração da linha de base**



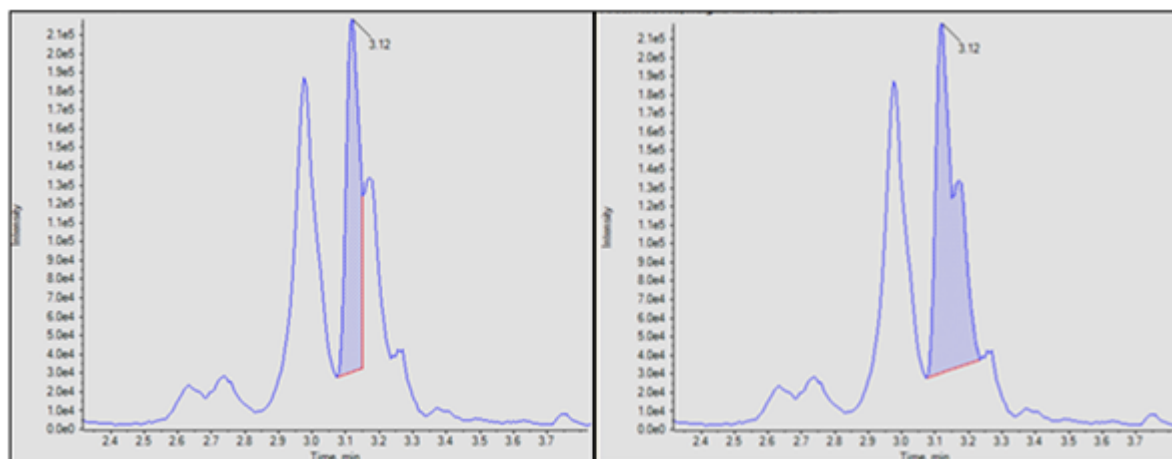
### Divisão de picos

Este parâmetro controla se um pico possivelmente ruidoso é considerado como um pico individual ou dois (ou mais) picos separados. Se a inclinação entre os dois picos potenciais for inferior ao valor especificado, será considerado um pico individual. Senão, dois picos serão encontrados.

Definir este parâmetro como um valor mais amplo evita que picos ruidosos sejam divididos e encontrados como dois picos separados. No entanto, um valor menor deve ser usado caso haja dois picos distintos com eluição (sobreposição) aproximada.

O gráfico à esquerda mostra divisão de picos definida como dois pontos. O gráfico à direita mostra divisão de picos definida como três pontos.

**Figura 14-29 Divisão de picos**



## Tarefas opcionais

Esta seção contém tarefas opcionais que podem ser usadas para aprimorar análise de dados.

### Criar gráficos de métricas

Use um **Metric Plot** para representar graficamente os valores em uma coluna da **tabela de resultados** em relação ao número da linha ou uma outra coluna. Esses gráficos são uma ajuda valiosa para a revisão de dados visual, especialmente se cada cromatograma não precisar ser revisto manualmente usando o painel **Peak Review**.

---

**Nota:** Gráficos de métricas usam as mesmas fórmulas de regressão que as curvas de calibração. Para os gráficos de métricas, há duas fórmulas adicionais, média e mediana.

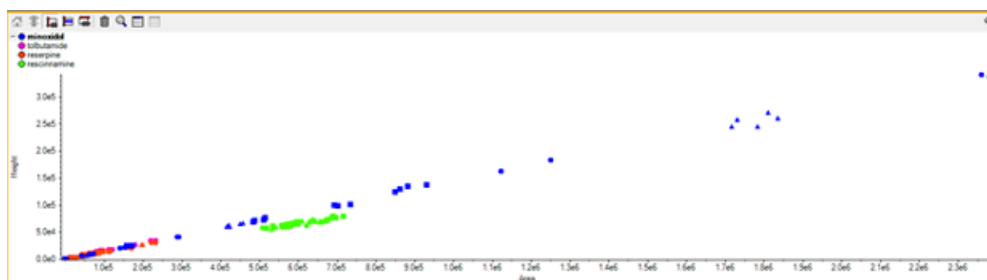
---

1. Abra uma **tabela de resultados**.
2. Selecione uma ou duas colunas e clique no ícone **Metric Plot**. Para este exemplo, selecione a coluna **IS Area**.

Se uma coluna for selecionada, o gráfico resultante exibe os valores da coluna como uma função do número da linha na tabela. Se duas colunas são selecionadas, então os valores das colunas são representados graficamente um em relação ao outro. A primeira das duas colunas a serem selecionadas contém o valor x e a segunda contém o valor y.

3. Clique com o botão direito no painel do gráfico e depois clique em **Show Legend** para ver uma explicação dos símbolos usados no gráfico.

Figura 14-30 Gráfico de métricas



### Criar colunas personalizadas

1. Com uma **tabela de resultados** aberta e ativa, clique com o botão direito e, em seguida, clique em **Add Custom Column**.

Uma coluna é adicionada ao final da tabela.

2. Digite o nome da coluna na caixa de diálogo **Custom Column Name**.
3. Clique em **OK**.

## Sobre os arquivos de método quantitativo e métodos incorporados

Métodos quantitativos podem ser criados usando uma das seguintes opções:

- Use o **Quantitation wizard**.
- Edite um método existente no **Quantitation wizard** com a caixa de seleção **Edit** selecionada.
- Abra e edite um método quantitativo existente.

Os métodos quantitativos são salvos na pasta **Quantitation Method**.

Quando uma **tabela de resultados** é criada, o método quantitativo usado para criar a **tabela de resultados** é incorporado na **tabela de resultados**. Edite o método quantitativo incorporado, no entanto, quaisquer alterações ao método quantitativo se aplicam somente ao método incorporado à **tabela de resultados** e não aos métodos na pasta **Quantitation Method**.

---

**Dica!** Esse método incorporado modificado pode ser exportado para uso futuro.

---

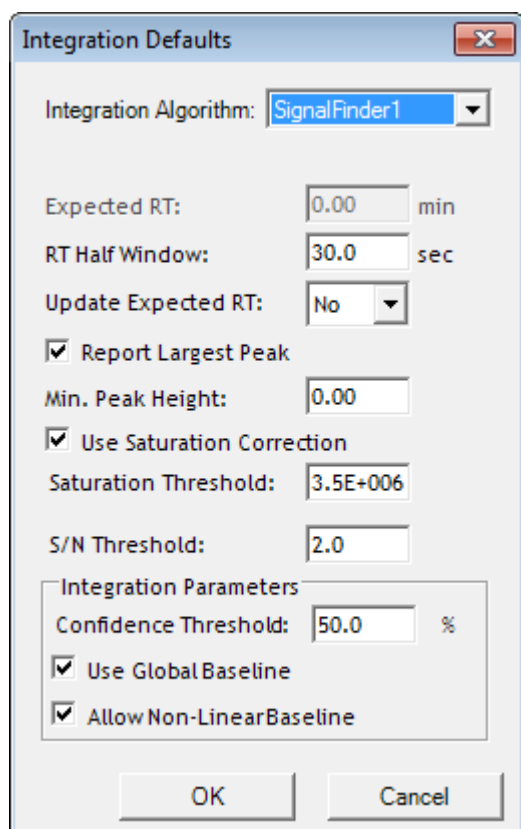
# Parâmetros de algoritmos de integração

# A

## Parâmetros de algoritmos de integração SignalFinder

O algoritmo de integração SignalFinder™ constrói um modelo de pico usando a amostra selecionada ao criar um novo método de quantificação. Esse modelo descreve a forma do pico selecionado usado para treinar o algoritmo.

Figura A-1 Caixa de diálogo Integration Defaults





## Parâmetros de algoritmos de integração

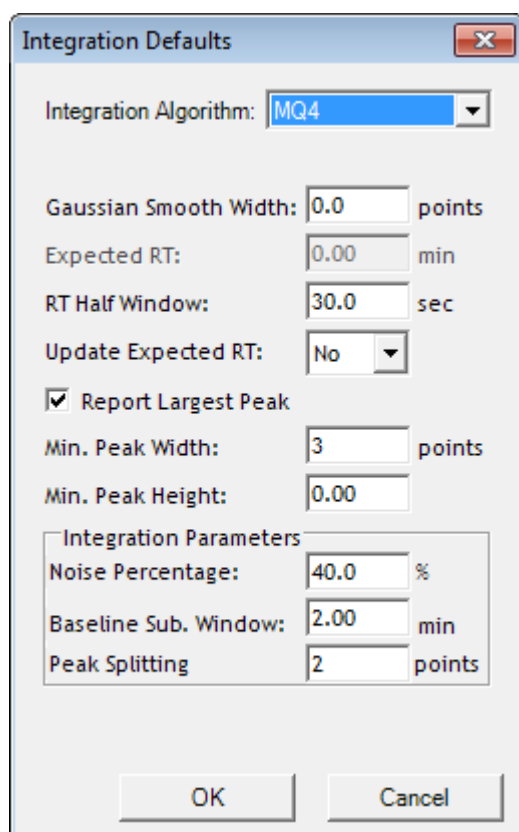
Rótulo	Descrição
Integration Algorithm	O algoritmo de integração selecionado.
Expected RT	O tempo de retenção esperado em minutos. Isso é configurado inicialmente para o tempo de retenção do maior pico no cromatograma para a amostra representativa usada para construir o método de quantificação. Esse campo não é editável. Ele é atualizado dependendo do composto no método de quantificação.
RT Half Window	Metade de toda a janela de tempo de retenção em segundos. Para que um pico seja detectado e relatado, a diferença entre o ápice e o tempo de retenção esperado deve ser menos que ou igual a esse valor.
Update Expected RT	<p>Indique se o tempo de retenção necessário deve ser ajustado enquanto funciona usando outros componentes. Usa informações adicionais para compensar as mudanças no tempo de retenção de amostra para amostra. As opções são:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Não:</b> O tempo de retenção esperado é usado como indicado.</li> <li>• <b>Grupo:</b> Aplicado para componentes que foram designados para grupos para os quais todos os componentes de um dado grupo possuem o mesmo tempo de retenção (ou seja, transições diferentes para o mesmo composto). O tempo de retenção esperado é atualizado usando a posição de sobreposição máxima dos cromatogramas individuais para o grupo (para uma dada amostra) dentro da janela RT. A ideia é configurar RT esperado com o RT provável para o componente real de interesse (onde é esperado ter um pico em cada cromatograma).</li> </ul> <p>Se houver ao menos dois padrões internos definidos para um grupo, apenas seus cromatogramas são usados para determinar o novo tempo de retenção. Caso contrário, todos os cromatogramas para o grupo são usados. A intenção é apenas usar aqueles cromatogramas para os quais mais provavelmente o componente estará presente em um nível razoável.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>IS:</b> Para analitos usando um padrão interno, o tempo de retenção real do pico do padrão interno (para a amostra correspondente) é determinado primeiro. O RT esperado para o analito é determinado pela multiplicação do RT esperado especificado pela razão do RT real com o RT esperado para o padrão interno. Esta opção é, as vezes, referida como tempo de retenção relativo.</li> </ul> <hr/> <p><b>Nota:</b> Essa opção não se aplica aos padrões internos nem aos analitos que não usam um padrão interno.</p>
Report Largest Peak	<p>Se mais de um pico for confirmado em um cromatograma, dentro da janela de tempo de retenção e que satisfaça a largura e altura máximas, esse parâmetro controlará qual pico é relatado. Quando a caixa de seleção está selecionada, o pico com a maior área é relatado. Quando a caixa de seleção está limpa, o pico com o tempo de retenção mais próximo do tempo esperado é relatado.</p> <p>Habilitar esta opção é recomendada a menos que os tempos de retenção são muito reproduzíveis.</p>

## Parâmetros de algoritmos de integração

Rótulo	Descrição
Min. Peak Height	Esse parâmetro não afeta a integração. É usado somente para relatórios. Presume-se que quaisquer picos potenciais que são menos intensos que esse valor não sejam de interesse e não são usados.
Use Saturation Correction	Quando o algoritmo detecta que um pico está saturado, ele usa o modelo para prever como o pico pode se parecer se o detector não estiver saturado. Isso faz com que o perfil se estenda sobre o topo do pico para aproximar a resposta que seria obtida se o detector não estivesse saturado. Isso pode estender o intervalo dinâmico linear das curvas de calibração. Essa opção só fica disponível ao definir os valores gerais de algoritmo, e não durante a criação do método de quantificação ou revisão do pico individual, pois não é útil usar essa configuração para poucos picos.
Saturation Threshold	Os pico acima deste limiar são considerados saturados. Esse valor é dependente do detector.
S/N Threshold	Esse parâmetro não afeta a integração. É usado somente para relatórios. Os picos que estão abaixo do limite não são relatados.
Confidence Threshold	Usado para filtrar picos em potencial que são falsos positivos. O valor padrão é 50%, que é geralmente adequado. Entretanto, um valor maior pode ser usado para cada dado com muito ruído ou para dados para os quais a largura do pico possui variação considerável de amostra para amostra.
Use Global Baseline	Selecione para usar o cromatograma todo como a linha de base. Se a caixa de seleção não for selecionada, o software avaliará mudanças na linha de base localmente.
Allow Non-Linear Baseline	Selecione entre uma linha de base linear ou não linear. Uma referência não linear estima a referência abaixo de cada pico. Uma referência linear coloca uma linha entre os pontos no começo e fim do grupo de picos específico.

## Parâmetros do algoritmo de integração MQ4

Figura A-2 Caixa de diálogo Integration Defaults



Rótulo	Descrição
Integration Algorithm	O algoritmo de integração selecionado.
Gaussian Smoothing Width	Um algoritmo de suavização gaussiana com uma meia largura igual ao valor especificado (em pontos) é aplicado. Para cromatogramas com muito ruído, um valor próximo da largura do pico atual (na metade da altura) é uma boa escolha. Para dados menos ruidosos, um valor menor pode ser usado.
Expected RT	O tempo de retenção esperado em minutos. Isso é configurado inicialmente para o tempo de retenção do maior pico no cromatograma para a amostra representativa usada para construir o método quantitativo.
RT Half Window	Metade de toda a janela de tempo de retenção em segundos. Para que um pico seja detectado e relatado, a diferença entre o ápice e o tempo de retenção esperado deve ser menos que ou igual a esse valor.

## Parâmetros de algoritmos de integração

Rótulo	Descrição
Update Expected RT	<p>Indique se o tempo de retenção necessário deve ser ajustado enquanto funciona usando outros componentes. Usa informações adicionais para compensar as mudanças no tempo de retenção de amostra para amostra. As opções são:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>Não:</b> O tempo de retenção esperado é usado como indicado.</li><li>• <b>Grupo:</b> Aplicado para componentes que foram designados para grupos para os quais todos os componentes de um dado grupo possuem o mesmo tempo de retenção (ou seja, transições diferentes para o mesmo composto). O tempo de retenção esperado é atualizado usando a posição de sobreposição máxima dos cromatogramas individuais para o grupo (para uma dada amostra) dentro da janela RT. A ideia é configurar RT esperado com o RT provável para o componente real de interesse (onde é esperado ter um pico em cada cromatograma).</li></ul> <p>Se houver ao menos dois padrões internos definidos para um grupo, apenas seus cromatogramas são usados para determinar o novo tempo de retenção. Caso contrário, todos os cromatogramas para o grupo são usados. A intenção é apenas usar aqueles cromatogramas para os quais mais provavelmente o componente estará presente em um nível razoável.</p> <ul style="list-style-type: none"><li>• <b>IS:</b> para analitos usando um padrão interno, o tempo de retenção real do pico do padrão interno (para a amostra correspondente) é determinado primeiro. O RT esperado para o analito é determinado pela multiplicação do RT esperado especificado pela razão do RT real com o RT esperado para o padrão interno. Esta opção é, as vezes, referida como tempo de retenção relativo.</li></ul>
Report Largest Peak	<p>Se mais de um pico for confirmado em um cromatograma, dentro da janela de tempo de retenção e que satisfaça a largura e altura mínimas, o parâmetro controla qual pico é relatado. Quando a caixa de seleção está selecionada, o pico com a maior área é relatado. Quando a caixa de seleção está limpa, o pico com o tempo de retenção mais próximo do tempo previsto é relatado.</p> <p>Habilitar esta opção é recomendada a menos que os tempos de retenção são muito reproduzíveis.</p>
Min. Peak Height	<p>Esse parâmetro não afeta a integração. É usado somente para relatórios. Presume-se que quaisquer picos potenciais que são menos intensos que esse valor não sejam de interesse e não são usados.</p>
Min. Peak Width	<p>Presume-se que quaisquer picos potenciais que são mais estreitos que esse valor sejam ruídos e não são usados.</p>
Noise Percentage	<p>Este parâmetro é usado para estimar o nível de ruído nos cromatogramas. O percentual especificado dos pontos de dados com a menor intensidade é considerado ruído.</p> <p>Os valores típicos variam de 20% a 60%. Se pequenos picos na presença de grandes picos não forem encontrados, este valor deverá ser menor.</p>

Rótulo	Descrição
Baseline Sub. Window	<p>Depois da suavização, mas antes de qualquer outro processamento, os cromatogramas são subtraídos da linha de base para diminuir oscilações nos dados. Para cada ponto, a linha de base é calculada usando os pontos de dados dos lados esquerdo e direito do ponto atual com intensidade mínima (dentro da janela de subtração).</p> <p>O valor exato deste parâmetro não é importante, desde que seja definido pelo menos como um pouco a mais da largura de pico esperada.</p>
Peak Splitting	<p>Este parâmetro controla se um pico possivelmente ruidoso é considerado como um pico individual ou dois (ou mais) picos separados. Se a inclinação entre os dois picos potenciais for inferior ao valor especificado, será considerado um pico individual. Senão, dois picos serão encontrados.</p> <p>Definir este parâmetro como um valor mais amplo evitará que picos ruidosos sejam divididos e encontrados como dois picos separados. No entanto, um valor menor deve ser usado caso haja dois picos distintos com eluição (sobreposição) aproximada.</p>

# Equações de regressão

## B

Esta seção descreve as equações para calcular as curvas de regressão. Nas equações que seguem, o X representa a concentração do analito nas amostras **Standard** e o Y representa a área ou altura de pico correspondente. As variáveis exatas usadas para a regressão dependem se um padrão interno está sendo usado e se a área do pico e a altura de pico são usadas conforme mostrado na [Tabela B-1](#).

**Tabela B-1 Variáveis de regressão**

Padrão interno usado?	Área usada?	x	y
Sim	Sim	$C_a / C_{is} / DF$	$A_a / A_{is}$
Sim	Não	$C_a / C_{is} / DF$	$H_a / H_{is}$
Não	Sim	$C_a / DF$	$A_a$
Não	Não	$C_a / DF$	$H_a$

em que:

- $C_a$  = concentração real do analito
- $C_{is}$  = concentração do padrão interno
- DF = fator de diluição
- $A_a$  = área do pico do analito
- $A_{is}$  = área do pico do padrão interno
- $H_a$  = altura do pico do analito
- $H_{is}$  = altura do pico do padrão interno

## Fatores de ponderação

Tabela B-2 mostra como o fator de ponderação ( $w$  nas equações) é calculado para cada um dos sete tipos de ponderação.

Tabela B-2 Fatores de ponderação

Tipo de ponderação	Peso ( $w$ )
Nenhum	Sempre 1,0.
$1 / x$	Se $ x  < 10^{-5}$ , então $w = 10^5$ . Caso contrário, $w = 1 /  x $ .
$1 / x^2$	Se $ x  < 10^{-5}$ , então $w = 10^{10}$ . Caso contrário, $w = 1 / x^2$ .
$1 / y$	Se $ y  < 10^{-8}$ , então $w = 10^8$ . Caso contrário, $w = 1 /  y $ .
$1 / y^2$	Se $ y  < 10^{-8}$ , então $w = 10^{16}$ . Caso contrário, $w = 1 / y^2$ .
$\ln x$	Se $x < 0$ , então um erro é gerado. Se $x < 10^{-5}$ , então $w = \ln 10^5$ . Caso contrário, $w =  \ln x $ .
$\ln y$	Se $y < 0$ , então um erro é gerado. Se $y < 10^{-8}$ , então $w = \ln 10^8$ . Caso contrário, $w =  \ln y $ .

## Regressões

Esta seção fornece as equações para cada um dos tipos de regressão. Nas equações a seguir,  $x$ ,  $y$  e  $w$  estão conforme definidos anteriormente. Todas as somas são calculadas sobre todas as amostras **Standard**, exceto as amostras **Standard** marcadas como não usadas.

O coeficiente de correlação é calculado como:

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

onde:

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

$y_c$  = valor  $y$  calculado usando a equação apropriada abaixo

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

### Linear

A equação de calibração linear é a seguinte:

$$y = mx + b$$

O coeficiente angular e o coeficiente linear são calculados das seguintes formas:

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

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

onde:

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

### Linear através do zero

A equação de calibração linear através do zero é a seguinte:

$$y = mx$$

O coeficiente angular é calculado da seguinte forma:

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

### Média de fator de resposta

A calibração do fator de resposta média é:

$$y = mx$$

Essa é a mesma equação usada no caso da equação linear através do zero. Entretanto, o coeficiente angular é calculado de maneira diferente:

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

e o desvio padrão do fator de resposta é:

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

onde:

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

---

**Nota:** Os pontos cujo valor do x for zero serão excluídos das somas.

---

Se houver alguma linearidade e alguma curvatura na linha dos pontos, use então regressão de potência em vez de regressão quadrática ou linear para produzir uma linha em algum lugar entre os ajustes.



## Quadrática

A equação de calibração quadrática é a seguinte:

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

Os coeficientes polinomiais são calculados das seguintes maneiras:

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

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

$$a_0 = (\sum wy - a_1\sum wx - a_2\sum wx^2) / \sum w$$

onde:

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

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

$$b_2 = \sum wx / \sum w - \sum wxy / \sum wx$$

$$b_3 = \sum wx^2 / \sum wx - \sum wx^3 / \sum wx^2$$

$$b_4 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_5 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2y / \sum wx^2$$

## Potência

A equação de calibração da função de potência é:

$$y = ax^p$$

As equações para calibração linear são usadas como descritas acima para calcular o coeficiente angular (m) e coeficiente linear (b) exceto pelo x, que nessas equações é substituído pelo ln x e y é substituído por ln y. Quando estiver terminado, a e p são calculados da seguinte forma:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Se algum dos valores de x ou y for negativo ou zero, um erro será relatado.

## Wagner

A equação da calibração Wagner é:

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

As equações para calibração quadrática são usadas como descritas acima para calcular  $a_0$ ,  $a_1$ , e  $a_2$ , exceto pelo x que nessas equações é substituído pelo ln x e y é substituído por ln y.

Se algum dos valores de x ou y for negativo ou zero, um erro será relatado.

### Hill

A equação da calibração Hill é:

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

Não é possível fornecer uma função analítica para resolução de a, b, c e n. Em vez disso, os coeficientes são determinados usando o método Levenberg-Marquardt iterativo.

## Calculando as concentrações finais

Esta seção explica como calcular a concentração final das equações de regressão resultantes, usando a concentração e o fator de diluição do IS usados na concentração original.

### Linear

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

### Linear através do zero e fator de resposta média

$$x = y/m$$

### Quadrática

$$x = (-a_1 \pm (a_1^2 - 4 \times a_2 \times (a_0 - y))^{0.5}) / (2 \times a_2)$$

- Se ambas as raízes + e - estiverem dentro do intervalo dos padrões, um erro será gerado uma vez que não haja uma solução exclusiva.
- Se exatamente uma das duas raízes estiver dentro do intervalo de concentração dos padrões, esse valor será relatado.
- Se ambas as raízes estiverem abaixo do menor padrão de concentração, a raiz + será relatada.
- Se ambas as raízes estiverem acima do maior padrão de concentração, a raiz - será relatada.
- Se a raiz - estiver abaixo do menor padrão e a raiz + estiver acima do maior padrão, a raiz - será relatada se a diferença do menor padrão de concentração for menor que a diferença da raiz + da mais alta concentração. Caso contrário, a raiz + será relatada.

### Potência

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

### Wagner

A mesma equação para o caso quadrático é usada para o cálculo principal, exceto que x é substituído por ln x, e y é substituído por ln y.

## Hill

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

Esta seção descreve como usar a funcionalidade de relatório no software para criar relatórios formatados de **tabelas de resultados**.

## Criar relatórios

Este software usa documentos do Microsoft Word como modelos predefinidos. Quando um relatório é criado, os valores são extraídos da tabela de resultados mais recente e de arquivos associados.

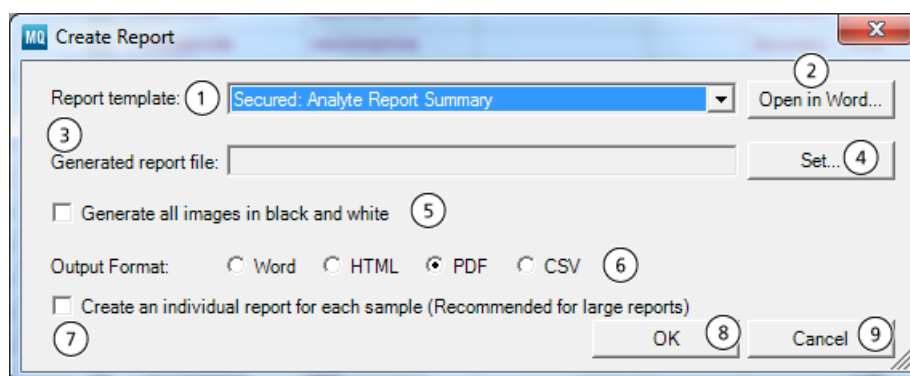
Os usuários são responsáveis por validar modelos personalizados. O usuário pode editar o formato do número no editor de modelo de relatório. Se o formato do número não for especificado no modelo, o formato em **tabela de resultados Column Setting** é usado no relatório. Certifique-se de que o número correto de casas decimais seja usado.

As maneiras controladas para saída de dados do software são exportar **tabelas de resultados**, transferir ao LIMS e relatar. As outras fontes de saída de dados como copiar e colar das **tabelas de resultados** não são controladas. Os usuários não devem usar esses métodos de saída não controlados para fins regulatórios.

Navegue para qualquer pasta para acessar e armazenar dados. Os locais anteriores de onde modelos foram abertos e os relatórios salvos são abertos por padrão.

1. Abra uma **tabela de resultados**.
2. Clique em **File > Create Report and Save Results Table**.

**Figura C-1 Caixa de diálogo Create Report**



Item	Descrição
1	Modelo de relatório: Selecione um modelo da lista.
2	Abrir no Word: Clique para abrir o modelo de relatório especificado diretamente no Microsoft Word para verificá-lo ou editá-lo.

Item	Descrição
3	Arquivo do relatório gerado: Mostra o nome do arquivo de relatório.
4	Definir: Clique para especificar o nome de arquivo do relatório a ser gerado.
5	Gerar todas as imagens em preto e branco: Selecione a caixa de seleção para imprimir em preto e branco.
6	Formato de Saída: Word, HTML, PDF, ou CSV. PDF é o método de saída mais seguro, pois o relatório não pode ser editado.
7	Criar um relatório individual para cada amostra (Recomendado para grandes relatórios)
8	Clique em <b>OK</b> para imprimir o relatório.
9	Clique em <b>Cancel</b> para fechar a caixa de diálogo sem criar um relatório.

3. Selecione um modelo da lista de modelo de relatório. Os modelos de relatório são armazenados nos seguintes locais:

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

Consulte [Modelos do relatório na página 134](#) para uma descrição dos modelos.

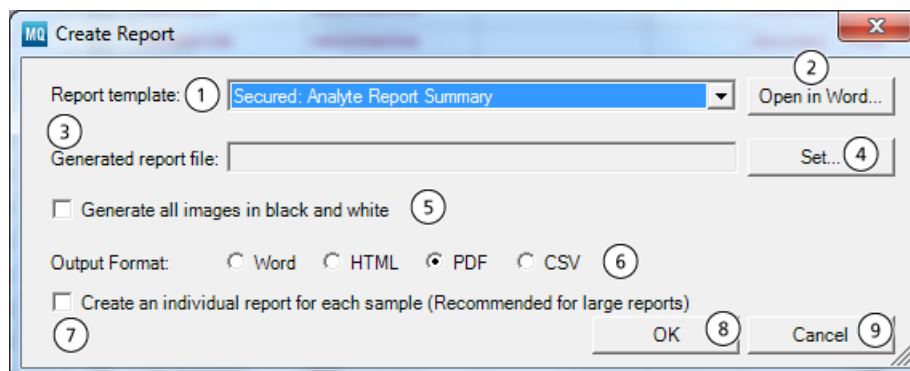
4. Clique em **Set** para criar o nome e o local do relatório.
5. Clique em **OK** para gerar o relatório.

## Criar modelos de relatório customizado

As maneiras controladas para saída de dados do software estão exportando **tabelas de resultados**, transferindo ao LIMS e relatando. As outras fontes de saída de dados como copiando e colando das **tabelas de resultados** não são controlados. O usuários não devem usar estes métodos de saída não controlados por fins regulatórios.

1. Abra ou crie uma **tabela de resultados**.
2. Clique em **File > Create Report and Save Results Table**.

**Figura C-2 Caixa de diálogo Create Report**



Item	Descrição
1	Modelo de relatório: Selecione um modelo da lista.
2	Abrir no Word: Clique para abrir o modelo de relatório especificado diretamente no Microsoft Word para verificá-lo ou editá-lo.
3	Arquivo do relatório gerado: Mostra o nome do arquivo de relatório.
4	Definir: Clique para especificar o nome de arquivo do relatório a ser gerado.
5	Gerar todas as imagens em preto e branco: Selecione a caixa de seleção para imprimir em preto e branco.
6	Formato de Saída: Word, HTML, PDF, ou CSV. PDF é o método de saída mais seguro, pois o relatório não pode ser editado.
7	Criar um relatório individual para cada amostra (Recomendado para grandes relatórios)
8	Clique em <b>OK</b> para imprimir o relatório.
9	Clique em <b>Cancel</b> para fechar a caixa de diálogo sem criar um relatório.

3. Selecione um modelo na lista **Report template**.
4. Clique em **Open in Word**.

O modelo docx se abre e o editor de modelo Reporter é exibido à direita. O editor de modelo é automaticamente preenchido com as informações da etiqueta.

5. Edite o modelo conforme necessário.
6. Salve o modelo.

## Modelos do relatório

A tabela a seguir descreve os modelos disponíveis localizados em <drive>:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

No caso de criar um modelo personalizado, o usuário é responsável por validar o modelo. O usuário pode editar o formato do número no editor Modelo do relatório. Se o formato de número não for especificado no modelo, o formato no diálogo **Results Table Column Settings** será usado no relatório. O usuário tem a responsabilidade de validar o modelo de relatório personalizado.

Alguns modelos de relatório usam consultas. Os usuários podem criar consultas usando a fórmula baseada no Microsoft Excel para avaliar, manipular e apresentar os dados da tabela de resultados em um relatório. A tag Metafield no modelo de relatório informa ao relatório o nome do arquivo de consulta que ele deve usar. Para usar consultas, o nome do arquivo de consulta deve ser especificado na tag MetaField no modelo de relatório. As consultas também devem ter a extensão ".query" para ser reconhecida como uma consulta. As consultas devem ser armazenadas na pasta Reporter em que os modelos de relatório estão armazenados.

Recomenda-se que o usuário valide os resultados gerados quando um modelo Reporter for usado, especialmente quando consultas forem usadas em um modelo. Se quaisquer modificações forem feitas no modelo de relatório após a validação, o modelo de relatório deverá ser revalidado. Mudanças no modelo de relatório incluem qualquer modificação a rótulos ou consultas do relator.

**Tabela C-1 Descrições de modelos de relatórios**

Modelo	Descrição
Analyte Report Summary	Relatório seguro que mostra uma tabela de resumo de amostras para cada analito. Esse modelo de relatório é adequado para uma tabela de resultados com grupos definidos.
Calibration Curves Template	Relatório que mostra Informações sobre o arquivo, tabela de estatísticas (padrões) e curva de calibração para analitos, uma página por analito.
Metric Plot_IS Area	Relatório seguro que mostra, para cada padrão interno, uma seção que inclui as Informações sobre o arquivo e um gráfico métrico da área do pico do padrão interno.
Per Analyte Ion Ratio Report	Relatório seguro que mostra, para cada analito, uma seção que inclui Informações sobre o arquivo, tabela de resultados, curvas de calibração para cada analito e cromatogramas, incluindo o padrão interno e cada analito. Esse modelo é adequado para uma tabela de resultados com grupos definidos.
Per Analyte Report	Relatório seguro que mostra, para cada analito, uma seção que inclui Informações sobre o arquivo, tabela de resultados, curvas de calibração para cada analito e cromatogramas, incluindo o padrão interno e cada analito. Esse modelo é adequado para uma tabela de resultados sem grupos definidos.
Per Sample Ion Ratio Report	Relatório seguro que mostra, para cada amostra, uma seção que inclui Informações sobre o arquivo, informações de amostra, tabela de resultados de analito, curvas de calibração para cada analito e cromatogramas, incluindo o padrão interno e cada analito. Esse modelo é adequado para uma tabela de resultados com grupos definidos.

Tabela C-1 Descrições de modelos de relatórios (continuação)

Modelo	Descrição
Per Sample Report	Relatório seguro que mostra, para cada amostra, uma seção que inclui Informações sobre o arquivo, informações de amostra, tabela de resultados de analito, curvas de calibração para cada analito e cromatogramas, incluindo o padrão interno e cada analito. Esse modelo é adequado para uma tabela de resultados sem grupos definidos.
Sample Report Summary	Relatório seguro que mostra uma tabela de resumo de analitos para cada amostra. Esse modelo de relatório é adequado para uma tabela de resultados com grupos definidos.
Sample Report with Concentration Threshold.docx	Relatório que mostra Informações de arquivo, informações de amostra e tabela de resumo de resultados para cada amostra desconhecida. A tabela de resumo de resultados inclui limites de concentração específicos ao analito. Os analitos são sinalizados como positivos se a concentração estiver acima do limite. Esse modelo faz referência ao arquivo de consulta Relatório de amostra com limite de concentração. O usuário pode editar o arquivo de consulta para especificar os nomes de analitos, grupos de analitos (por exemplo, classe composta) e limites de concentração de analito.

## Tags de modelo do relatório

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
Tags do esquema do provedor de dados do software Analyst <sup>®</sup> MD		
Analyte	ForEach	Examina todos os analitos, para que eles sejam definidos na tabela de resultados.
AnalyteGroup	ForEach	Examina somente os variados grupos de analito. As tags TextField ou PictureField restauram os valores para o íon quantificador. Se as tags desse tipo contêm uma tag adicional For_Each especificando o atributo Ratiolons, o loop interno é somente para íons qualificadores que são parte do grupo atual.
InternalStandard	ForEach	Examina todos os padrões internos.
QCStatistics	ForEach	Examina todas as estatísticas de Controle de Qualidade.
Ratiolons	ForEach	Consulte AnalyteGroup.



Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
Sample	ForEach	Examina cada uma das amostras individuais. É usada, por exemplo, em conjunto com a configuração da tag TextField para inserir o Nome da Amostra.
Statistics	ForEach	Examina todas as estatísticas Padrão.
MQ_Group	ForEach	Examina os grupos variados, incluindo os grupos IS ou subgrupos. As tags TextField ou PictureField restauram os valores para o íon quantificador. Se as tags desse tipo contêm uma tag adicional For_Each especificando o atributo Ratiolons, o loop interno é somente para íons qualificadores que são parte do grupo atual.
MQ_AnalyteRatiolons	ForEach	Consulte MQ_Group para qualificador de Analito somente.
MQ_ISRatiolons	ForEach	Consulte MQ_Group para qualificador de IS somente.
AnalyteRatio	PictureField	Mostra o sobreposições de cromatogramas de Quantificador e Qualificador do subgrupo do analito. Mostra o linha sólida no meio para indicar a Proporção de íon prevista. A linha do meio = a altura do pico para o Quantificador x Proporção de íon prevista. Mostra o limites inferiores e superiores da faixa de proporção de íon aceitável com linhas pontilhadas. Limite inferior = Altura do pico do quantificador x Proporção de íon prevista x ((100-tolerância)/100). Limite superior = Altura do pico do quantificador x Proporção de íon prevista x ((100+tolerância)/100).
AnalyteRatioNoLines	PictureField	Mostra o sobreposições de cromatogramas de Quantificador e Qualificador do subgrupo do analito sem as linhas.
Calibration	PictureField	Mostra o curva de calibração do analito.

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
IS_AnalyteRatio	PictureField	Mostra o sobreposições de cromatogramas de Quantificador e Qualificador do subgrupo do padrão interno. Mostra o linha sólida no meio para indicar a Proporção de íon prevista. A linha do meio = a altura do pico para o Quantificador x Proporção de íon prevista. Mostra o limites inferiores e superiores da faixa de proporção de íon aceitável com linhas pontilhadas. Limite inferior = Altura do pico do quantificador x Proporção de íon prevista x ((100-tolerância)/100) Limite superior = Altura do pico do quantificador x Proporção de íon prevista x ((100+tolerância)/100)
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField	Mostra o sobreposições de cromatogramas do Quantificador e Qualificador do subgrupo do padrão interno sem as linhas.
IS_PeakReview	PictureField	Mostra o cromatograma do padrão interno.
Overlay_All_XIC	PictureField	Mostra o sobreposição dos cromatogramas de todos os analitos na amostra.
Overlay_All_XIC_with_IntStd	PictureField	Mostra o sobreposição dos cromatogramas de todos os analitos e padrões internos na amostra.
Overlay_All_XIC_with_IntStd_NoLegend	PictureField	Mostra o sobreposição dos cromatogramas de todos os analitos e padrões internos na amostra, sem a legenda.
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField	Mostra o sobreposição dos cromatogramas de todos os analitos na amostra, sem a legenda.
PeakReview	PictureField	Mostra o cromatograma do analito.
TIC	PictureField	Mostra o TIC da amostra.
Acquisition_Date	TextField	A data em que a amostra foi adquirida. Mostra o "Acquisition Date & Time".
Acquisition_Duration_Minutes	TextField	Mostra o período de tempo dos dados adquiridos da amostra, reportado em minutos.
Acquisition_Method	TextField	O método de aquisição que foi usado para adquirir dados da amostra. Mostra o "Acq. Method Name".
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField	Mostra o "Component Comment".

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField	Mostra o valor R de regressão.
Analyte_AnalyteRegression	TextField	Mostra o equação de regressão, incluindo o valor R e ponderação.
Analyte_Concentration	TextField	A concentração real do analito, conforme definido pelo usuário na tabela de resultados. Mostra o "Actual Concentration".
Analyte_Expected_RT	TextField	O tempo de retenção esperado para um analito específico, em minutos. Mostra o "RT esperado".
Analyte_Integration_Type	TextField	O tipo de integração usado para picos específicos do analito. Os picos podem ser integrados manualmente ou podem ser integrados usando os parâmetros disponíveis. Mostra o "Integration Type".
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField	A proporção entre a área do pico do analito e a área do pico de uma solução de padrão interno. Calculado como Área do pico do analito / Área do pico IS. Mostra o "Area Ratio".
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField	A proporção entre a altura em contagens por segundo (cps) do pico do analito e a altura do pico de uma solução de padrão interno. Calculado como Altura do pico do analito / Altura do pico IS. Mostra o "Height Ratio".
Analyte_Mass_Ranges	TextField	A transição MRM definida pelo usuário para um analito, definido no método de aquisição utilizado. Mostra o "Mass Info".
Analyte_Peak_Area	TextField	A área do pico para um analito em um cromatograma. Mostra o "Área".
Analyte_Peak_Height	TextField	A altura para o pico do analito, em contagens por segundo (cps). Mostra o "Altura".

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
Analyte_Peak_Name	TextField	O nome definido pelo usuário atribuído a amostras específicas ao criar a tabela de resultados.  Mostra o "Nome do componente".
Analyte_Peak_Width	TextField	A largura do pico do analito, em minutos.  Mostra o "Total Width".
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	A largura em 50% da altura do pico para um pico do analito, em minutos.  Mostra o "Width at 50%".
AnalyteQuantPeak_info	TextField	Mostra o informações da integração incluindo algoritmo e parâmetros.
Analyte_QTY	TextField	A Quantidade de Analitos, calculada da concentração calculada de analitos e a proporção entre peso e volume (por exemplo, ng do analito por grama da amostra).  Mostra o "Quality".
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField	É o primeiro analito no grupo.
Analyte_Processing_Algorithm	TextField	Mostra o algoritmo de integração.
Analyte_Retention_Time	TextField	O tempo de retenção real para um analito em um cromatograma usado para gerar uma tabela de resultados.  Mostra o "Retention Time".
Analyte_R_Squared	TextField	Mostra o valor $R^2$ de regressão.
Analyte_RT_Window	TextField	A faixa de tempo, em segundos, onde se espera que um pico de analito apareça. O centro dessa faixa é o tempo de retenção esperado para o analito.  Mostra o valor de "RT Half Window" dos parâmetros de integração.
Analyte_Signal_To_Noise	TextField	A razão entre sinal e ruído para um pico do analito específico.  Mostra o "Signal/Noise".

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField	O declínio da linha de base para um analito, feito em termos de % intensidade/minutos. Mostra o "Slope of Baseline" para o analito.
Analyte_Start_Scan	TextField	Iniciar análise do analito.
Analyte_Start_Time	TextField	O tempo onde começa o pico do analito, em minutos. Mostra o "Start Time".
Analyte_Stop_Scan	TextField	Parar a análise do analito.
Analyte_Stop_Time	TextField	O tempo onde termina o pico do analito, em minutos. Mostra o "End Time".
Analyte_Unit	TextField	As unidades usadas para representar a concentração para analitos. A unidade padrão para tabelas de resultados em ng/mL. Mostra o "Conc. Units".
Analyte_Use_Record	TextField	Uma caixa de seleção que determina se um registro específico será usado para análise subsequente, como curvas de calibração. Mostra o "Used".
Analyte_Count	TextField	Mostra o número total de analitos.
Analyte_Index	TextField	Mostra o número da ordem do analito na amostra, começando do 0.
Calculated_Accuracy	TextField	A precisão para o pico do analito, derivada da comparação entre a concentração do analito real e a concentração do analito calculada. Mostra o "Accuracy".
Calculated_Concentration	TextField	A concentração calculada para o pico do analito realizada pelo software Analyst <sup>®</sup> MD usando a área de pico. Mostra o "Calculated Concentration".
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField	O tempo de retenção de um registro específico para um analito ou padrão interno em uma tabela de resultados. Mostra o "Relative RT".

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
IS_Concentration	TextField	A concentração real de um padrão interno, conforme definido pelo usuário na tabela de resultados. Mostra o "IS Actual Concentration".
IS_Expected_RT	TextField	O tempo de retenção esperado do pico de um padrão interno, em minutos. Mostra o "IS Expected RT".
IS_Integration_Type	TextField	O tipo de integração usado para picos de padrão interno específicos. Os picos podem ser integrados manualmente ou podem ser integrados usando os parâmetros disponíveis. Mostra o "IS Integration Type".
IS_Mass_Ranges	TextField	A transição MRM definida pelo usuário para um padrão interno, definido no método de aquisição utilizado. Mostra o "IS Mass Info".
IS_Peak_Area	TextField	A área do pico para um padrão interno. Mostra o "IS Area".
IS_Peak_Height	TextField	A altura para o pico do padrão interno, em contagens por segundo (cps). Mostra o "IS Height".
IS_Peak_Name	TextField	O nome definido pelo usuário dado a um padrão interno específico ao criar a tabela de resultados. Mostra o "IS Name".
IS_Peak_Width	TextField	A largura do pico do analito, em minutos. Mostra o "IS Total Width".
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	A largura do pico em minutos, para um pico de padrão interno na metade da sua altura, em contagens por segundo (cps). Mostra o "IS Width at 50%".
IS_Retention_Time	TextField	O tempo de retenção real para um padrão interno. Mostra o "IS Retention Time".

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
IS_RT_Window	TextField	A faixa de tempo, em segundos, onde se espera que um pico de padrão interno apareça. O centro dessa faixa é o tempo de retenção esperado para o padrão interno.  Mostra o valor de "RT Half Window" dos parâmetros de integração para IS.
ISQuantPeak_Info	TextField	Mostra o informações da integração incluindo algoritmo e parâmetros.
IS_Signal_To_Noise	TextField	A razão entre sinal e ruído para um pico de padrão interno.  Mostra o "IS Signal / Noise".
IS_Slope_of_Baseline	TextField	O declínio da linha de base para um padrão interno, feito em termos de % intensidade/ minutos.  Mostra o "Slope of Baseline" para o padrão interno.
IS_Start_Scan	TextField	Iniciar análise do padrão interno.
IS_Start_Time	TextField	O tempo onde começa o pico do padrão interno, em minutos.  Mostra o "IS Start Time".
IS_Stop_Scan	TextField	Tempo de término do padrão interno.
IS_Stop_Time	TextField	O tempo onde termina o pico do padrão interno, em minutos.  Mostra o "IS End Time".
IS_Units	TextField	As unidades usadas para representar a concentração para padrões internos. A unidade padrão para tabelas de resultados em ng/mL.  Mostra o "Conc. Units" para IS.
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField	Mostra o valor máximo. Tolerância da precisão para LLOQ na caixa de diálogo Outlier Setting do Método Quantitativo.
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField	Mostra o valor máximo. Tolerância da precisão para padrões na caixa de diálogo Outlier Setting do Método Quantitativo.

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField	Mostra o valor máximo. Tolerância da precisão para QCs na caixa de diálogo Outlier Setting do Método Quantitativo.
MQ_Analyte_Group_Name	TextField	Mostra o nome do grupo de analito.
MQ_Created_With	TextField	Mostra o nome do produto que é usado para gerar o relatório.
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField	Mostra o "Expected Ion Ratio".
MQ_Group_Index	TextField	Mostra o número da ordem do grupo na amostra, começando do 1. Uso com o loop MQ_Grupo do ForEach.
MQ_Group_Name	TextField	Mostra o nome do grupo. Uso com o loop MQ_Grupo do ForEach.
MQ_Ion_Ratio	TextField	Mostra o "Ion Ratio".
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField	Mostra o valor máximo. Tolerância da proporção de íon para o analito na caixa de diálogo Outlier Setting do Método Quantitativo.
MQ_IS_Group_Name	TextField	Mostra o nome do grupo do padrão interno.
MQ_IsRowHidden	TextField	Mostra o linhas ocultas na tabela de resultados.
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField	Mostra o valor do Limite mínimo da concentração calculada na caixa de diálogo Outlier Setting do Método Quantitativo.
MQ_Outlier_Reasons	TextField	Mostra o "Outlier Reasons".
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField	Mostra o "Asymmetry Factor".
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField	Mostra o "Baseline Delta/Height".
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField	Mostra o "End Time at 10%".
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField	Mostra o "End Time at 5%".
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField	Mostra o "Points Across Baseline".
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField	Mostra o "Points Across Half Height".
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField	Mostra o "Start Time at 10%".
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField	Mostra o "Start Time at 5%".
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField	Mostra o "Tailing Factor".
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField	Mostra o "Width at 10%".



Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField	Mostra o "Width at 5%".
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField	Mostra o "Mass Range" para o quantificador no grupo do analito.
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField	Mostra o "Area" para o quantificador no grupo do analito.
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField	Mostra o "Calculated Concentration" para o quantificador no grupo do analito.
MQ_Report_Generation_Date	TextField	Mostra o data em que o relatório foi gerado, refletindo as configurações da cultura do software.
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField	Mostra o valor do Limite máximo da concentração calculada na caixa de diálogo Outlier Setting do Método Quantitativo.
Query_Name	TextField	O nome da busca mencionada no modelo de relatório (se aplicável).
Record_Modified	TextField	Mostra o "Modified".
Reporter_Template_Name	TextField	O nome do modelo de relatório usado para criar o relatório.
ResultTbl_CreateDate	TextField	Mostra o data em que a tabela de resultados foi criada.
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField	Mostra o o algoritmo de processamento usado para processar a tabela de resultados (por exemplo, MQ4, SignalFinder1).
ResultTbl_Name	TextField	Mostra o nome do arquivo para a tabela de resultados.
ResultTbl_ProjName	TextField	Mostra o nome do projeto em que a tabela de resultados foi salva.
Sample_Comment	TextField	Um comentário relacionado à amostra. Mostra o "Sample Comment".
Sample_Dilution_Factor	TextField	O número total de volumes de unidade em que a amostra é dissolvida. Mostra o "Dilution Factor".

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
Sample_File_Name	TextField	O nome do arquivo de dados onde os dados brutos para a amostra específica são armazenados. Mostra o "Original Filename".
Sample_ID	TextField	Um valor definido pelo usuário para listar IDs específicos para cada amostra ou analito na tabela de resultados. Mostra o "Sample ID".
Sample_Index	TextField	Mostra o "Index".
Sample_Count	TextField	Mostra o o número total de analitos.
Sample_InjectionVolume	TextField	O volume de injeção usado no amostrador automático usado quando a amostra original foi injetada, como definido no método de aquisição. Mostra o "Injection Volume".
Sample_Instrument	TextField	Mostra o tipo de instrumento usado para adquirir a amostra, que é extraída do arquivo wiff.
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField	Mostra o número de série do instrumento usado para adquirir a amostra, que é extraída do arquivo wiff.
Sample_Name	TextField	O nome definido pelo usuário atribuído à amostra específica ao criar a tabela de resultados. Mostra o "Sample Name".
Sample_Operator	TextField	O usuário logado no momento da aquisição. Mostra o "Operator Name".
Sample_Plate_Number	TextField	A posição da placa da amostra no amostrador automático usado ao adquirir as amostras. Mostra o "Plate Number".
Sample_Rack_Number	TextField	A posição do rack de amostras no amostrador automático usado ao adquirir as amostras. Mostra o "Rack Number".

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
Sample_Type	TextField	O valor definido pelo usuário indicando qual é o tipo amostra de cada injeção específica. Por exemplo, Em branco, Padrão e assim por diante. Mostra o "Sample Type".
Sample_Vial_Position	TextField	A posição do frasco definida no lote de aquisição usado no amostrador automático para determinar qual frasco segura a amostra. Mostra o "Vial Number".
Sample_File_Full_Name	TextField	Mostra o o nome do arquivo com o caminho completo.
Sample_Index_In_Wiff	TextField	Mostra o número da ordem da amostra no arquivo wiff, começando do 0.
Sta_Accuracy	TextField	A precisão para o pico do analito, determinada pela comparação entre a concentração do analito real e a concentração do analito calculada. Mostra o "Accuracy".
Sta_CV	TextField	Mostra o porcentagem de variação condicional que dita o distanciamento, em termos de porcentagem, com que o valor da concentração calculada se desvia do valor médio de concentração. Calculado pelo desvio padrão/ média.
Sta_ExpectedConcent	TextField	A concentração esperada para um analito calculada pelo software Analyst <sup>®</sup> MD, usando a área de pico. Mostra o "Actual Concentration".
Sta_Mean	TextField	Mostra o valor médio (média) para as concentrações calculadas que são calculadas pelo software Analyst <sup>®</sup> MD.
Sta_NumVal	TextField	Mostra o número de valores que compõem a estatística. Quantas amostras são consideradas quando uma média é realizada.

Tabela C-2 Tags de modelo do relatório (continuação)

Tipo	Tipo do campo	Descrição da tag
Sta_QCAccuracy	TextField	A precisão determinada pela comparação entre a concentração esperada e a concentração real para uma amostra de controle de qualidade, definida pelo usuário na coluna tipo de amostra.  Mostra o "Accuracy".
Sta_QCCV	TextField	Mostra o porcentagem de variação condicional que dita o distanciamento, em termos de porcentagem, com que o valor da concentração calculada se desvia do valor médio de concentração. Calculado pelo desvio padrão/média. Aplica-se a uma amostra de controle de qualidade
Sta_QCExpectedConcent	TextField	A concentração esperada para uma amostra de Controle de Qualidade, conforme definido pelo usuário.  Mostra o "Actual Concentration" para a amostra de Controle de Qualidade.
Sta_QCMean	TextField	Mostra o valor médio (média) para as concentrações calculadas que são calculadas pelo software Analyst <sup>®</sup> MD para uma amostra de Controle de Qualidade.
Sta_QCNumVal	TextField	Mostra o número de valores considerados para uma média de concentração da amostra de controle de qualidade ao realizar a média.
Sta_QCStdDev	TextField	Mostra o desvio padrão para os valores de concentração para cada amostra. O desvio padrão representa uma medida da propagação de um conjunto de valores do valor médio.
Sta_StdDev	TextField	Mostra o desvio padrão para uma amostra padrão. O desvio padrão representa uma medida da propagação de um conjunto de valores do valor médio.
CUSTOM	TextField	Mostra o valor das colunas personalizadas da tabela de resultados.

# Cálculos de ruído relativo e sinal/ruído

## D

Ao realizar o processamento de dados quantitativo de espectrometria de massas, é importante determinar se um determinado pico é significativo ou não, onde "significativo" geralmente significa "este sinal excede o ruído de fundo?"

Geralmente, a altura do pico é comparada ao ruído de fundo medido em uma região livre de picos, onde o ruído é tipicamente estimado como uma ou três vezes o desvio padrão dos pontos de dados nessa faixa. Essa abordagem está longe de ser ideal pelos seguintes motivos:

- Ela é subjetiva, uma vez que a região de ruído é selecionada manualmente.
- Uma região de fundo sem um pico pode não existir ou a região pode ser muito estreita para uma estimativa acurada do ruído.
- O ruído na posição do pico pode ser bem diferente daquele na região de ruído selecionada.
- O fator de "um ou três" também é subjetivo e diferentes autoridades possuem diferentes recomendações.
- O ruído aparente pode ser alterado se os dados foram pré-processados. Por exemplo, suavizados ou limitados.

Ao usar o conceito de Ruído relativo ( $R_n$ ), é fácil desenvolver um método simples para calcular o ruído esperado em qualquer ponto nos dados, para comparar com o sinal mensurado. Esta é uma métrica objetiva e robusta que pode ser usada para calcular o sinal/ruído ( $S/N$ ) e para avaliar e comparar o desempenho do instrumento e do ensaio. Há muitas aplicações do conceito de ruído relativo, uma das quais é o cálculo de  $S/N$ .

O algoritmo básico funciona da seguinte forma:

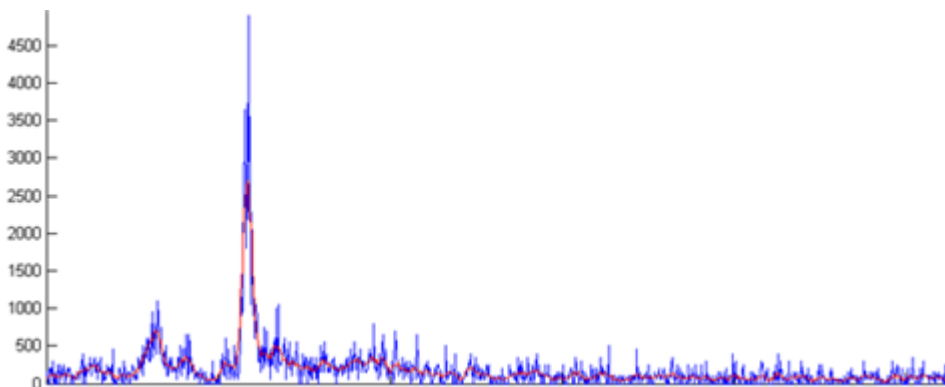
1. Elabora um modelo de ruído que permitirá ao usuário calcular o ruído esperado em qualquer ponto no registro de dados, considerando o nível do sinal subjacente nesse ponto.

O modelo de ruído pode ser determinado a partir de considerações teóricas ou pode ser modelado de medidas reais para um sistema específico. Para detectores de contagem de pulso, o desvio padrão de um sinal  $e$ , portanto, o ruído esperado, é proporcional à raiz quadrada do sinal  $e$ , desse modo, varia com o sinal. Em outros sistemas, haverá um componente de "ruído branco" constante, possivelmente combinado com um componente dependente de intensidade.

2. Estima o sinal subjacente a partir do sinal medido.

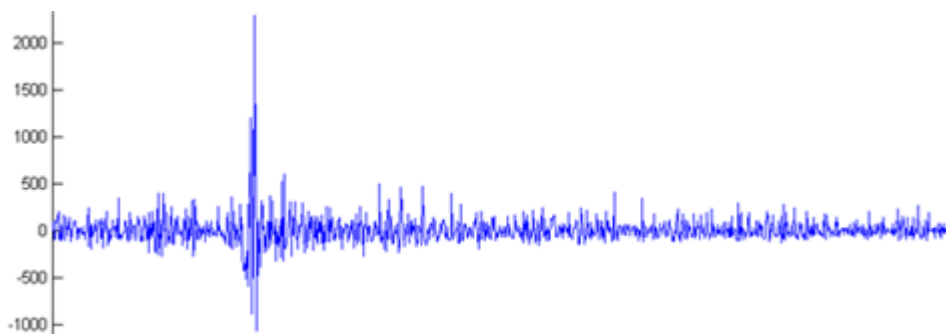
Isso pode ser atingido de muitas formas, mas a mais simples é gerar uma versão suavizada dos dados, conforme mostrado na [Figura D-1](#).

**Figura D-1 Sobreposição de dados brutos e suavizados**



3. Mede o ruído real entre os dados usando todos os pontos (picos e fundo).  
Isso é atingido ao subtrair a estimativa do sinal subjacente a partir do sinal medido em cada ponto nos dados onde o sinal suavizado foi subtraído do original. Isso é conhecido como ruído delta. A faixa do ruído delta é razoavelmente constante, exceto onde há grandes picos, pois o ruído é dependente do sinal e, portanto, maior onde o sinal é maior. Consulte [Figura D-2](#).

**Figura D-2 Gráfico de valores de ruído delta para cada ponto de dados**



4. Em cada ponto de dados, calcula a razão do ruído medido em relação ao ruído esperado.

Ou seja, em cada ponto de dados, dividimos o ruído medido na etapa 3 pelo valor que nosso modelo de ruído prevê (em nosso caso, a raiz quadrada da intensidade). Se o modelo de ruído é bom, ele gera uma série de valores que permanecem em sua maioria ligados por alguns limites, conforme mostra [Figura D-3](#). [Figura D-3](#) também mostra o gráfico de

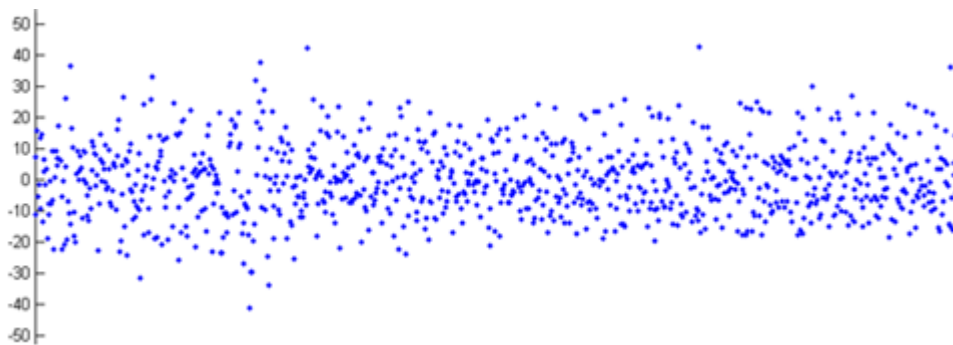
$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

---

**Nota:** Isso reduz a grande variação no ruído delta e os resultados em um conjunto bem restrito de valores.

---

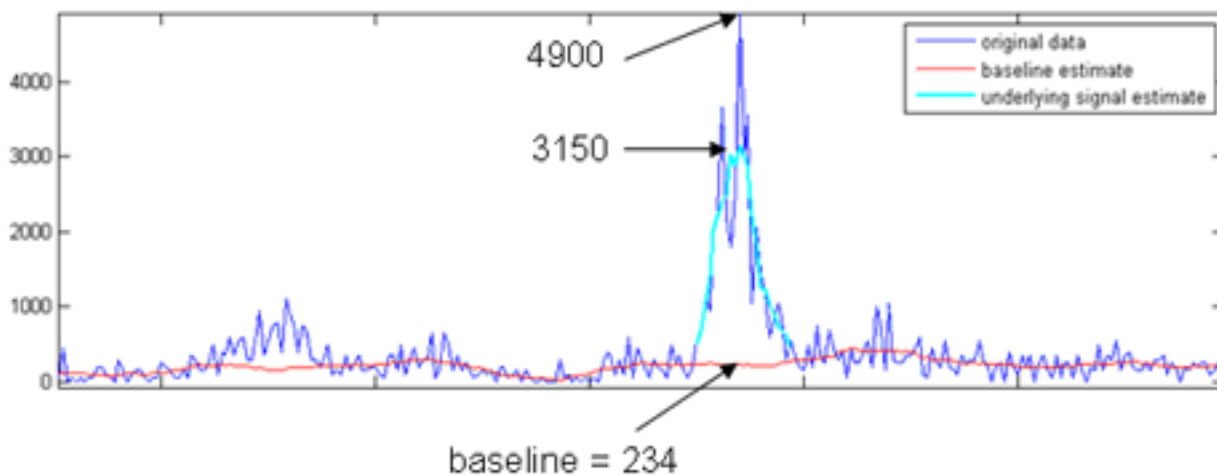
**Figura D-3 Modelo de ruído**



5. Calcula o desvio padrão dos valores de razão. Este é o  $R_n$ , uma estimativa da relação mais provável entre o ruído delta real e o previsto pelo modelo. Na [Figura D-3](#), isso resulta em um valor de 9,5.

[Figura D-4](#) mostra um exemplo de como o ruído relativo pode ser usado para calcular o S/N.

**Figura D-4 Sobreposição de dados brutos, estimativas de sinal subjacente e estimativas de referência**



Conforme descrito anteriormente:

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

neste exemplo específico:

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

Se o ápice do pico é usado como o sinal, isso dá um S/N de 34 (4900/145) e se a altura do sinal suavizado é usada, isso dá um S/N de 22 (3150/145).

Ao relatar o S/N, o algoritmo de integração MQ4 usa o procedimento descrito aqui e o ápice do pico como o sinal. Como o algoritmo de integração do SignalFinder™ está ajustando um modelo ao pico, ele usa a altura do perfil ajustado. Isso resulta em um S/N relatado menor. No entanto, este é um valor mais acurado, pois é menos afetado por possíveis picos de ruído. O algoritmo de integração do SignalFinder também possui uma abordagem mais sofisticada para a previsão de referência, portanto, por esses dois motivos, os valores de S/N relatados pelos dois algoritmos não são idênticos, embora eles serão geralmente similares.

Em resumo, comparado à abordagem usual de previsão de ruído como o desvio padrão de uma região de fundo, a abordagem de ruído relativo para calcular o S/N possui as seguintes vantagens:

- Ela é muito menos subjetiva, pois uma região de fundo não precisa ser selecionada manualmente.
- Um S/N acurado pode ser previsto mesmo se nenhuma região sem picos do cromatograma existir.



- A referência e, portanto, o ruído, é estimada próxima do pico de interesse. Isso pode fazer uma grande diferença para o valor S/N relatado, pois a região de fundo selecionada para a abordagem usual pode ser muito mais quieta que o fundo próximo ao pico. Conforme descrito anteriormente, o S/N calculado usando a abordagem de **Relative Noise** pode fornecer valores menores que a abordagem usual. No entanto, eles são valores mais acurados e úteis. Consulte [Figura D-4](#).

Para tornar a coluna **Signal / Noise** visível na **tabela de resultados**, consulte [Modificar as colunas mostradas na tabelas de resultados na página 90](#).

## Observação sobre o Signal-to-Noise quando usar o algoritmo de integração SignalFinder

Como o algoritmo de integração do SignalFinder™ calcula o sinal para ruído mais precisamente (e, portanto, prevê mais precisamente CVs), se a abordagem de sinal para ruído 1-sigma for usada, considere diminuir o valor de sinal para ruído aceitável mínimo em quaisquer procedimentos operacionais padrão (SOPs), com base nos dados empíricos do laboratório.

# Ícones do software

# E

Apenas um painel fica ativo de cada vez. Os painéis ativos apresentam uma borda laranja e o usuário pode ativar um painel clicando em qualquer lugar dentro dele. Muitos comandos do menu operam no painel ativo.

Os ícones na barra de ferramentas nesta seção aparecem na barra de ferramentas específica do painel para todos os tipos de painéis. Os ícones adicionais específicos de cada tipo de painel também estão disponíveis.

**Tabela E-1 Ícones da Barra de Ferramentas**










Ícone	Nome	Descrição
	New Results Table	Abre o assistente <b>New Results Table</b> .
	Open	Abre uma <b>tabela de resultados</b> .
	Save	Salva quaisquer arquivos abertos.
	Select Analyst Project	Selecione uma pasta de projeto.
	Screen Lock	Bloqueia a tela. Este recurso está disponível apenas quando o software Analyst <sup>®</sup> MD está no Modo de Mistura e o recurso de bloqueio de tela está ativado.
	Show Internal Standard with Analyte	Mostra as linhas na <b>tabela de resultados</b> para ambos analito atualmente selecionado e o padrão interno correspondente. Quando esta opção está selecionada, o usuário pode clicar no nome do analito e visualizar o mesmo com o padrão interno. Isto equivale a clicar no analito e depois clicar no padrão interno enquanto pressiona a tecla <b>Ctrl</b> (de forma que ambos são selecionados).
	Find Component or Group	Selecione os itens da lista que correspondem com o texto específico.
	Arranging Panes	Altera as posições relativas dos painéis. Clique no ícone em um painel e arraste-o para a parte superior, inferior, esquerda ou direita de um segundo painel. Dependendo de onde o cursor for liberado, o primeiro painel muda a posição em relação ao segundo. Conforme o cursor é arrastado, um lado do segundo painel é demarcado em vermelho para indicar onde o primeiro painel será colocado.
	Delete Pane	Exclui um painel. Se uma <b>tabela de resultados</b> for excluída, então os outros painéis relatados ( <b>Peak Review</b> e <b>Calibration</b> ) também são excluídos e a janela inteira é fechada.

Tabela E-1 Ícones da Barra de Ferramentas (continuação)




Ícone	Nome	Descrição
	Toggles tab mode	Maximiza o painel para preencher a janela inteira (ou vice versa). É útil se houver diversos painéis na janela, de forma que o usuário pode focar temporariamente em um.  No modo de aumento, uma aba separada aparece no topo da janela para cada painel. Altere entre os painéis clicando na aba apropriada. A partir do modo aumentado, retorne para a visualização original mostrando todos os painéis clicando em <b>Zoom Pane</b> uma segunda vez. Clicando no ícone alterna entre os dois estados.
	Hide Pane	Esconde o painel de forma que outros painéis na janela preencham o espaço disponível.
	Show Hidden Panes	Mostra todos os painéis que foram previamente escondidos.

Tabela E-2 Ícones da barra de ferramentas de revisão de pico







Ícone	Nome	Descrição
	Display Previous Page	Mostra o conjunto anterior de cromatogramas. Isso é equivalente a pressionar a tecla de seta para cima ou para esquerda ou clicar na seta superior na barra de rolagem.
	Display Next Page	Mostra o próximo conjunto de cromatogramas. Isso é equivalente a pressionar a tecla de seta para baixo ou para direita ou clicar na seta inferior na barra de rolagem.
	Display Previous Sample	Volta a rolagem no painel <b>Peak Review</b> . É equivalente a clicar na seta para cima na barra de rolagem até que a primeira amostra, que é diferente do primeiro cromatograma visível atual, apareça.
	Display Next Sample	Vai para a próxima amostra.
	Starts Slide Show Peak Review mode	Inicia a apresentação de slides. Ao usar pela primeira vez, a caixa de diálogo <b>Slide Show Options</b> aparece. Defina o atraso em segundos entre os picos. Para evitar que a caixa de diálogo abra novamente, marque a caixa de seleção <b>Only show this dialog again if the shift key is down</b> (Somente mostrar essa caixa de diálogo novamente se a tecla shift estiver pressionada). Clique em qualquer lugar no painel <b>Peak Review</b> para parar a apresentação de slides.
	Peak Magnifier	Aumenta o pico selecionado.

Tabela E-2 Ícones da barra de ferramentas de revisão de pico (continuação)





Ícone	Nome	Descrição
	Peak Demagnifier	Retorna o pico aumentado para seu tamanho original.
	Set Peak to 'Not Found'	<p>Clique para indicar que nenhum pico está presente no cromatograma ativo. Em alguns casos, quando nenhum pico significativo está realmente presente, pequenos picos de ruído podem ser integrados e relatados. Clique nesse ícone para substituir esse comportamento. A área de pico aparece na <b>tabela de resultados</b> como N/A.</p> <p>Depois que o usuário marca o pico como <b>Not Found</b>, os parâmetros de constatação do pico à esquerda do painel não ficam disponíveis, pois não estão sendo usados. Clique novamente no ícone para retornar ao modo automático.</p>
	Enable Manual Integration Mode	<p>Clique para entrar no modo de integração manual. Quando o software estiver no modo de integração manual, arraste um gráfico de cromatograma para especificar a região exata a ser integrada. A integração começa pelo ponto (tempo, intensidade) em que o cursor é clicado pela primeira vez e continua até o ponto em que o cursor é liberado. Clique novamente no ícone para sair do modo de integração manual.</p> <p>Depois que o usuário integra manualmente o pico, os parâmetros de constatação do pico à esquerda do painel não ficam disponíveis, pois não estão sendo usados. Clique novamente no ícone para retornar ao modo automático.</p>
	Recalculate Peak Model	Recalcula o modelo de pico usando o cromatograma ativo e aplica-o a esse cromatograma (algoritmo de integração do SignalFinder™ apenas).

Tabela E-3 Ícones da barra de ferramentas de calibração

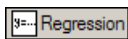
Ícone	Nome	Descrição
	Edit Regression and Weighting	Usado para alterar os parâmetros de calibração. Isso inclui o parâmetro real usado para a regressão (Área ou Altura), bem como o tipo de regressão e ponderação. Consulte <a href="#">Equações de regressão na página 126</a> .

Tabela E-4 Ícones da barra de ferramentas de estatísticas



Ícone	Nome	Descrição
	Remove Trailing Index from Sample Name	A <b>Statistics Table</b> pode ser organizada de modo que as amostras (para um analito fornecido) sejam agrupadas pela concentração real ou por nome de amostra. Ao agrupar pelo nome de amostra, a opção <b>Remove Trailing Index from Sample Name</b> controla se os nomes de amostra devem corresponder exatamente a fim de serem agrupados ou se um índice numérico final após um traço (-) deve ser removido. Por exemplo, duas amostras com nomes da Amostra 1 - 001 e da Amostra 1 - 002 seriam agrupadas juntas se essa opção fosse selecionada, mas não de outro jeito.
	Sample Grouping	Os itens nesta lista especificam como a amostra de determinado analito deve ser agrupada para o cálculo estatístico. As seguintes opções estão disponíveis: <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Group by Concentration for Standards:</b> as amostras <b>Standard</b> são agrupadas pela concentração real.</li> <li>• <b>Group by Concentration for QCs:</b> as amostras <b>Quality Control</b> são agrupadas pela concentração real.</li> <li>• <b>Group by Sample Name for Standards:</b> amostras <b>Standard</b> replicadas são agrupadas pelo campo <b>Sample Name</b>. Conforme mencionado, se a opção <b>Remove Trailing Index from Sample Name</b> não for usado, os nomes das amostras deverão coincidir exatamente. Caso contrário, os nomes podem diferir por um número final (seguido de um traço).</li> <li>• <b>Group by Sample Name for QCs:</b> semelhante à opção anterior, exceto que somente as amostras <b>Quality Control</b> são usadas.</li> <li>• <b>Group by Sample Name for All Samples:</b> semelhante à opção anterior, exceto que todas as amostras são usadas.</li> </ul>

Tabela E-4 Ícones da barra de ferramentas de estatísticas (continuação)


Ícone	Nome	Descrição
	Metric	<p>Os itens nesta lista especificam a métrica atual usada no cálculo estatístico. As seguintes opções estão disponíveis:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>Calculated Concentration:</b> o campo <b>Calculated Concentration</b> da <b>tabela de resultados</b> é usado.</li> <li>• <b>Area:</b> o campo <b>Area</b> da <b>tabela de resultados</b> é usado.</li> <li>• <b>Height:</b> o campo <b>Height</b> da <b>tabela de resultados</b> é usado.</li> <li>• <b>Calibration Y-Value (Valor Y da Calibração):</b> o parâmetro de regressão especificado para o analito é usado. É <b>Area</b> ou <b>Height</b> para um analito que não possui um padrão interno correspondente ou <b>Area Ratio</b> ou <b>Height Ratio</b> para um analito que usa um padrão interno.</li> </ul>

Tabela E-5 Ícones da barra de ferramentas da tabela de resultados









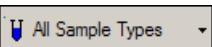






Ícone	Dica da ferramenta	Descrição
	Displays the peak review	Mostra o painel <b>Peak Review</b> de modo que a qualidade das integrações de pico possam ser verificadas e modificadas conforme necessário.
	Displays the side by side sample review	Exibe duas listas de amostras para que os usuários possam selecionar até seis amostras para comparar as respostas do pico entre as amostras.
	Displays the calibration curve	Mostra a curva de calibração (isso se aplica somente se as amostras <b>padrão</b> de concentração conhecida são usadas). Este painel habilita o usuário a revisar a calibração e ajustar o tipo de regressão e a ponderação.
	Creates a metric plot	Mostra um gráfico de métrica para as colunas selecionadas no momento. Esses gráficos podem ser muito úteis para encontrar valores extremos. O menu logo à direita do botão lista todas as configurações salvas do gráfico.
	Displays the statistics pane	Mostra o painel <b>Statistics</b> . Esta tabela mostra a concentração calculada média, o desvio padrão, o CV de cada nível de concentração.

Tabela E-5 Ícones da barra de ferramentas da tabela de resultados (continuação)

Ícone	Dica da ferramenta	Descrição
	Sort selected column from smallest to largest	Classifica a <b>tabela de resultados</b> para que os valores na coluna selecionada apareçam na ordem crescente. O ícone está disponível somente após clicar no cabeçalho da coluna.
	Sort selected column from largest to smallest	Classifica a <b>tabela de resultados</b> para que os valores na coluna selecionada apareçam na ordem decrescente. Este ícone está disponível somente após clicar no cabeçalho da coluna.
	Removes any previous sorting	Caso a tabela tenha sido ordenada, ele retorna a <b>tabela de resultados</b> à ordem padrão.
	Shows only the selected sample type(s)	Filtra a <b>tabela de resultados</b> para que somente amostras de um tipo específico fiquem visíveis. Este recurso é útil apenas se houver amostras <b>Standard</b> de concentração conhecida e nem todas as amostras são <b>Unknown</b> .
	Hide selected row(s)	Ocultas as linhas selecionadas na <b>tabela de resultados</b> . Selecione as linhas a ocultar e, em seguida, clique no ícone.  Em razão do painel <b>Peak Review</b> sincronizar com a <b>tabela de resultados</b> , ocultar linhas para esses picos que não precisam ser revisados torna o processo de revisão mais rápido. Por exemplo, o usuário pode ordenar a tabela na coluna <b>Quality</b> e oculta todas as linhas com uma qualidade maior que algum valor (por exemplo, 0,8). A tabela pode ser ordenada na coluna <b>Region Height</b> e todas as linhas com um valor baixo oculto (para ocultar linhas para as quais o pico definitivamente não está presente). O resultado é que somente picos com uma qualidade baixa, porém para os quais um pico está de fato presente, ficam visíveis. O usuário pode então passar por essas linhas visíveis do painel <b>Peak Review</b> em menos tempo do que levaria para revisar todos os picos possíveis.
	Show previously hidden row(s)	Exibe todas as linhas. As linhas exibidas podem ainda estar restritas pelo <b>Sample Type Filter</b> e pela seleção <b>Components &amp; Groups List</b> .
	Show only outliers	Mostra as linhas que contêm valores discrepantes.
	Go to next outlier	Segue para o próximo valor extremo na <b>tabela de resultados</b> .

**Tabela E-5 Ícones da barra de ferramentas da tabela de resultados (continuação)**

Ícone	Dica da ferramenta	Descrição
	Lock and Save	Bloqueia a <b>tabela de resultados</b> depois de ela ter sido salva. As alterações na <b>tabela de resultados</b> não são salvas a menos que o arquivo esteja desbloqueado.
	Review and Save	Clique para salvar a <b>tabela de resultados</b> após ela ter sido revisada. O ícone fica indisponível se a <b>tabela de resultados</b> for somente leitura.



# Acesso ao software MultiQuant™ MD

# F

**Nota:** Quando o software MultiQuant™ MD é removido, os itens de segurança do software MultiQuant™ MD no software Analyst® MD são mantidos. As permissões de segurança são encontradas na aba **Roles** na caixa de diálogo **Security Configuration**.

Acesso predefinido	Descrição
Create session file	Permite que os usuários criem uma <b>tabela de resultados</b> .
Create quantitation method	Permite que os usuários criem métodos quantitativos.
Modify quantitation method files	Permite que os usuários modifiquem os métodos quantitativos localizados na pasta <b>Quantitation Methods</b> na pasta <b>Analyst Data</b> .
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Permite que os usuários exportem ou criem relatórios de <b>tabelas de resultados</b> desbloqueadas.
Replace existing Results Table when saved	Permite que os usuários atualizem <b>tabelas de resultados</b> existentes, mas não permite a criação de uma nova <b>tabela de resultados</b> usando um nome de <b>tabela de resultados</b> existente. Por exemplo, se uma <b>tabela de resultados</b> chamada RT1 for criada, os usuários podem atualizá-la, mas não podem criar uma nova <b>tabela de resultados</b> usando o nome RT1. Os usuários não podem nomear uma <b>tabela de resultados</b> não intitulada usando um nome de <b>tabela de resultados</b> existente.
Change default quantitation method integration algorithm	Na caixa de diálogo <b>Integration Default</b> , permite que os usuários mudem o algoritmo. Clique em <b>Edit &gt; Project Integration Defaults</b> .
Change default quantitation method integration parameters	Na caixa de diálogo <b>Integration Default</b> , permite que os usuários alterem os parâmetros padrão do algoritmo. <b>Edit &gt; Project Integration Defaults</b> .
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Permite que os usuários ativem ou desativem a sinalização que habilita a opção <b>Project Modified Peak Warning</b> no menu <b>Edit</b> .
Allow Project Secure Export Settings	Se habilitada, os dados no arquivo do texto são criptografados durante a exportação. Defina uma senha para habilitar a criptografia.
Add samples to Results Table	Permite que os usuários adicionem amostras. Clique em <b>Process &gt; Add Samples</b> .
Remove samples from Results Table	Permite que os usuários removam as amostras selecionadas. Clique em <b>Process &gt; Remove Selected Samples</b> .

Acesso predefinido	Descrição
Export, import or remove External Calibration	Permite que os usuários exportem, importem ou removam a calibração externa usando uma das seguintes opções: <ul style="list-style-type: none"> <li>• Clique em <b>Process &gt; Export Calibration</b>.</li> <li>• Clique em <b>Process &gt; Import External Calibration</b>.</li> <li>• Clique em <b>Process &gt; Remove External Calibration</b>.</li> </ul>
Change Audit Map settings	Permite que os usuários modifiquem o mapa de auditoria do projeto e modifiquem a definição do mapa de auditoria. Clique em <b>Audit Trail &gt; Audit Map Manager</b> .
Modify Sample Name	Permite que os usuários modifiquem o nome da amostra na <b>tabela de resultados</b> .
Modify Sample Type	Permite que os usuários modifiquem o tipo de amostra ( <b>Standard, QC, Unknown</b> ) na <b>tabela de resultados</b> .
Modify Sample ID	Permite que os usuários modifiquem o <b>ID</b> da amostra na <b>tabela de resultados</b> .
Modify Actual Concentration	Permite que os usuários modifiquem a concentração atual do <b>Standard</b> e <b>QC</b> na <b>tabela de resultados</b> .
Modify Dilution Factor	Permite que os usuários modifiquem o fator de diluição na tabela de resultados.
Modify Comment Fields	Permite que os usuários modifiquem os campos de comentário: <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	Permite que os usuários habilitem o modo de integração manual no painel <b>Peak Review</b> . Se essa permissão for habilitada, a permissão <b>Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram</b> também deve ser habilitada. O comando <b>Allow manual integration</b> pode ser desabilitado se <b>Modify Results Table integration parameters</b> for habilitada.
Allow set to Peak Not Found	Permite que os usuários usem a <b>Set peak to not found</b> . Para realizar esta ação, clique com o botão direito no painel <b>Peak Review</b> .
Include or exclude a peak from the Results Table	Permite que os usuários incluam ou excluam picos da <b>tabelas de resultados, Statistics Tables</b> e curvas de calibração.

Acesso predefinido	Descrição
Modify regression settings for fit and weight	Permite que o usuário modifique as configurações de regressão no painel da curva de calibração ao usar a funcionalidade <b>Modify Results Table Method</b> e ao usar o <b>New Quantitation Method wizard</b> .
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Permite que o usuário modifique um único cromatograma.
Modify quantitation method for the Results Table component	Permite que os usuários apliquem as modificações de cromatogramas únicos ao componente.  Os usuários devem ter habilitadas essa permissão e a permissão <b>Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram</b> se eles quiserem atualizar e então aplicar modificações únicas a componentes.
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Permite aos usuários que criem e usem gráficos de métricas na <b>tabela de resultados</b> (o botão <b>Metric Plot</b> é habilitado) ou exportem gráficos de métricas. Clique em <b>File &gt; Export</b> .
Set Peak Review Title Format	Permite que os usuários modifiquem o <b>Peak Review Title Format in Peak Review</b> . Para realizar esta ação, clique com o botão direito no painel <b>Peak Review</b> .
Add, Rename, or Modify custom column	Permite que os usuários adicionem, renomeiem ou modifiquem uma coluna personalizada. Mesmo sem essa permissão, os usuários podem realizar buscas que automaticamente criarão colunas personalizadas.  Se essa permissão está desabilitada, a permissão <b>Remove custom column</b> também deve estar desabilitada. A <b>Remove custom column</b> pode ser desabilitada se a permissão <b>Add, Rename, or Modify custom column</b> estiver habilitada.
Remove custom column	Permite que os usuários excluam uma coluna personalizada na <b>tabela de resultados</b> .
Modify Results Table column settings	Permite que os usuários modifiquem as configurações da coluna da <b>tabela de resultados</b> dentro de uma <b>tabela de resultados</b> .
Save Column Settings as Project Default	Permite que os usuários apliquem as configurações de coluna ao projeto.
Lock and save Results Table	Permite que os usuários bloqueiem e salvem uma <b>tabela de resultados</b> .
Unlock and save Results Table	Permite que os usuários desbloqueiem e salvem uma <b>tabela de resultados</b> .
Review and save Results Table	Permite que os usuários revisem e salvem uma <b>tabela de resultados</b> .

Acesso predefinido	Descrição
Edit Report Template	Permite que os usuários editem modelos de relatório.
Transferir para LIMS	Permite que os usuários transfiram a <b>tabela de resultados</b> salva e bloqueada para um LIMS. O evento é registrado no rastreamento de auditoria.

## Configurações de segurança

**Tabela F-1** contém as configurações de segurança recomendadas para funções do usuário.

**Tabela F-1 Configurações de segurança baseadas em funções do usuário**

Configuração de segurança	Administrador	Supervisor	Analyst	Revisor
Create session file	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso
Create quantitation method	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Modify quantitation method files	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Replace existing Results Table when saved	Acesso	Acesso	Sem acesso	Acesso
Change default quantitation method integration algorithm	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Change default quantitation method integration parameters	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Acesso	Sem acesso	Sem acesso	Sem acesso
Allow Project Secure Export Settings	Acesso	Sem acesso	Sem acesso	Sem acesso
Add samples to Results Table	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso
Remove samples from Results Table	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso

Tabela F-1 Configurações de segurança baseadas em funções do usuário (continuação)

Configuração de segurança	Administrador	Supervisor	Analyst	Revisor
Modify Sample Name	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Modify Sample Type	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso
Modify Sample ID	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Modify Actual Concentration	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso
Modify Dilution Factor	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso
Modify Comment Fields	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Allow manual integration	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso
Allow set to Peak Not Found	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso
Include or exclude a peak from the Results Table	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso
Modify regression settings for fit and weight	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso
Modify quantitation method for the Results Table component	Acesso	Acesso	Acesso	Sem acesso
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Acesso	Acesso	Acesso	Acesso
Set Peak Review Title Format	Acesso	Sem acesso	Sem acesso	Sem acesso
Add, Rename, or Modify custom column	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Remove custom column	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Modify Results Table column settings	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso

**Tabela F-1 Configurações de segurança baseadas em funções do usuário (continuação)**

<b>Configuração de segurança</b>	<b>Administrador</b>	<b>Supervisor</b>	<b>Analyst</b>	<b>Revisor</b>
Save Column Settings as Project Default	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Lock and save Results Table	Acesso	Acesso	Acesso	Acesso
Unlock and save Results Table	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Review and save Results Table	Acesso	Acesso	Sem acesso	Acesso
Modify Report Template	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Transfer to LIMS (Controls Initiate Transfer to Watson LIMS as well)	Acesso	Acesso	Sem acesso	Acesso
Export, import, or remove External Calibration	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso
Change Audit Map Setting	Acesso	Acesso	Sem acesso	Sem acesso

# Histórico de revisão

---

Revisão	Motivo da Mudança	Data
A	Primeira versão do documento.	setembro de 2013
B	Seção Menu Arquivo atualizada. Seção Menu Rastreamento de auditoria atualizada. Tabela Colunas da tabela de resultados atualizada. Seção Relatórios atualizados.	janeiro de 2015
C	Alterado o logotipo AB SCIEX para SCIEX Diagnostics na primeira página. Página de direitos autorais atualizada e AB Sciex alterado para SCIEX onde necessário. Windows 10 incluído no capítulo Introdução ao software. Seção Entre em contato conosco atualizada. Título do tópico Gestor de mapa de auditoria alterado para Sobre mapas de auditoria. Descrição da opção de menu Configurar último componente do grupo como IS atualizada na seção Submenu Padrões Internos. "Parâmetro de porcentagem de área total" substituído pelo "tempo de retenção" na seção Diálogo Atualizar tempo de retenção. Descrição de RT esperado atualizada na seção Parâmetros de algoritmos de integração SignalFinder. Windows 10 incluído na seção Criar Relatórios. Conteúdo atualizado na seção Tags de Modelo do Relatório. Alterado para a captura instantânea na Figura 7-3. Novos modelos foram aplicados ao conteúdo, que levaram a algumas alterações de edição no conteúdo. Todas as referências a Windows XP removidas.	junho de 2017