
MultiQuant™ MD 3.0.3ソフトウェア

リファレンスガイド



本書はSCIEX機器をご購入され、実際に使用されるお客様にむけてのものです。本書の著作権は保護されています。本書および本書の一部分を複製することは、SCIEXが書面で合意した場合を除いて固く禁止されています。

本機器は研究専用です。診断手段としての使用は想定されていません。実験室用診断への使用を推奨します。保証は後述の通りです。

IVD

すべての国で販売されているわけではありません。このような使用はいかなる場合も、これらの製造業者による製品をSCIEXの供給機器として扱う場合に限り、その権利やライセンスの使用、またはその他の業者にこれらの製造業者名および製品名の商標利用を許可するものではありません。

SCIEXの保証は販売またはライセンス供与の時点で提供される明示的保証に限定されており、またSCIEXの唯一かつ独占的な表明、保証および義務とされています。SCIEXは、制定法若しくは別の形の法律、または取引の過程または商慣習から生じるかどうかに関わらず、特定の目的のための市場性または適合性の保証を含むがこれらに限定されず明示的・黙示的を問わず、いかなる種類の他の保証も行わない。そのすべては明示的に放棄されている。またAB Sciexは購買者による使用、またはそれから生じる逆境が原因の間接的または必然的な損害を含め、一切の責任または偶発債務を負わないものとします。

CE

実験室用診断への使用。

Rx only.

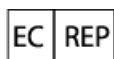
すべての国で販売されているわけではありません。詳細についてはSCIEX販売代理店にお問い合わせください。

AB SciexはSciexブランドの下で事業を行っています。

ここに示されているすべての商標は、AB Sciex Pte. Ltd. またはそれぞれの権利保有者の財産です。

AB SCIEX™ はライセンスの下で使用されています。

© 2017年 AB Sciex



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



AB Sciex Pte. Ltd.
Blk 33, #04-06
Marsiling Ind Estate Road 3
Woodlands Central Indus.Estate.
シンガポール 739256

内容

1	ソフトウェアについて.....	7
	ソフトウェアのヘルプ.....	7
	ファイルタイプ.....	8
	お問い合わせ先.....	8
	テクニカルサポート.....	8
2	File Menu.....	9
	定量化メソッドのインポート.....	10
	Exportサブメニュー.....	11
	Results Tableのエクスポート.....	11
	Results Tableのエクスポート-メトリック.....	13
	Transfer to LIMS.....	14
3	Edit Menu.....	16
	Modify Results Table Method.....	18
	Project Units & Calibration Defaults.....	19
	Project Secure Export Settings.....	19
4	Process Menu.....	20
	キャリブレーションのエクスポート.....	21
	Import External Calibration.....	21
5	Audit Trail Menu.....	23
	Audit Trail Viewer.....	23
	View the Audit Trail Results in the Audit Trail Viewer.....	24
	キーワード検索を実行する.....	25
	監査済みのイベントをフィルターする.....	25
	Audit Trail Viewerでエクスポートする.....	27
	Audit Trail Viewerの印刷.....	27
	Audit Trail Manager.....	27
	監査マップについて.....	28
	Audit Mapを作成する.....	28
	Audit Mapの変更.....	31
	Audit Mapの編集.....	32
	View the Embedded Audit Configuration.....	34
6	Help Menu.....	36
7	Results Tables.....	37
	Components & Groups List.....	38
	Results Table右クリックメニュー.....	39
	Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All.....	40
	Column Settings.....	41
	Sample Type Filter.....	42

非表示行の確認.....	43
Results Table Dialogs.....	43
Select Samples.....	43
Select Method.....	44
Select Representative Sample.....	45
Define Components.....	46
Define Integration.....	49
Outlier Settings.....	52
Results Table Columns.....	55
8 Peak Review.....	63
Manual Integration.....	63
Apply.....	64
ピークをレビューするためのヒント.....	64
Peak Review右クリックメニュー	65
Peak Review Optionsダイアログ: Appearanceタブ.....	66
Peak Review Optionsダイアログ: Zoomingタブ.....	68
Set Peak Review Title Format.....	70
Copy Parameters.....	71
Paste Parameters.....	71
Set Peak to 'Not Found'.....	72
Use Peak.....	72
Update Quantitation Method for Component.....	72
Update Quantitation Method for Group.....	72
Apply Integration Parameters to Sample Within Group.....	73
Revert Peak to Original Method.....	73
Revert All Peaks for Component.....	73
9 Side-by-side Sample Review.....	74
Side-by-Side Sample Reviewの実行.....	74
10 Calibration Pane.....	76
Regression Optionsダイアログ.....	76
Calibration Tips.....	77
Calibration右クリックメニュー	78
11 Statistics Tables.....	80
Statistics Tableのヒント.....	81
Statistics Table右クリックメニュー.....	82
12 Metric Plots.....	83
Generate a Metric Plot.....	83
Save Metric Plot Settings.....	83
Metric Plot Tips.....	83
Metric Plot右クリックメニュー.....	84
Regression Dialog.....	85
13 Quantitation Method Editor.....	87
Componentsタブ.....	87
Groups Submenu.....	88
内部標準サブメニュー	90
Integrationタブ	91
Highlight Componentsダイアログ	92

Update Retention Timeダイアログ.....	93
Outlier Settings Tab	93
14 Quantitation Analysis Workflow Tutorial.....	95
キャリブレーションカーブについて.....	95
前提条件.....	95
Modify the Columns Shown in the Results Table.....	95
SignalFinder™ Integration Algorithm.....	97
Set the Peak Integration Parameters.....	97
Results Tableの作成.....	98
ピークのレビュー.....	102
キャリブレーションカーブの修正.....	103
Review Sample Statistics.....	104
MQ4 Integration Algorithmによるデータ処理.....	105
Set the Peak Integration Parameters.....	105
Results Tableの作成.....	106
ピークのレビュー.....	110
キャリブレーションカーブの修正.....	111
Review Sample Statistics.....	112
Integration Algorithms.....	113
SignalFinder Integration Algorithmについて.....	114
SignalFinder™ Integration Algorithm Parameters.....	117
MQ4 Integration Algorithm Parameters.....	121
オプションのタスク.....	124
Create Metric Plots.....	124
Create Custom Columns.....	125
定量化メソッドファイルおよび組み込まれたメソッドについて.....	125
A Integration Algorithm Parameters.....	126
SignalFinder Integration Algorithm Parameters.....	126
MQ4 Integration Algorithm Parameters.....	129
B 回帰方程式.....	132
Weighting Factors.....	133
回帰.....	133
Linear.....	134
Linear Through Zero.....	134
平均応答係数.....	134
二次.....	135
Power.....	135
Wagner.....	135
Hill.....	136
最終濃度の算出.....	136
Linear.....	136
Linear Through Zero and Mean Response Factor.....	136
Quadratic.....	136
Power.....	136
Wagner.....	136
Hill.....	137
C Reports.....	138
Create Reports.....	138

内容

Create Custom Report Templates.....	139
Report Templates.....	141
Report Templateのタグ.....	142
D Relative Noise and Signal-to-Noise Calculations.....	156
SignalFinder Integration Algorithmを使用するときのシグナル対ノイズの注意事項.....	160
E ソフトウェアアイコン.....	161
F MultiQuant™ MD Software Access.....	169
Security Settings.....	172
改訂履歴.....	175

ソフトウェアについて

1

本書はMultiQuant™ MDソフトウェアにおける利用可能な機能について説明しています。

ソフトウェアへのアクセスは、Analyst® MDソフトウェアのユーザーに割り当てられた役割に基づいています。各ユーザーはソフトウェアに正しいアクセスが割り当てられていることを確認してください。

次のMicrosoftオペレーションシステムの英語版のみサポートしています。

- ・ Windows 7（32ビットおよび64ビット）SP1
- ・ Windows 10

注意：番号、通貨、日時の書式は英語（米国）に設定する必要があります。フォーマットに異なる値を設定すると、誤ったデータになる場合があります。

MultiQuant™ MDソフトウェアは監査証跡およびセキュリティ機能があるとともに、完全ライセンスを必要とし、Analyst® MDソフトウェアがインストールされます。

ソフトウェアから制御されるデータ出力方法は、Results Tablesのエクスポート、LISへの転送、およびレポーティングです。その他の出力データソース（Results Tableからのコピーや貼り付けなど）は制御されていません。ユーザーは、規制上これらの制御されていない出力メソッドを使用してはなりません。

注：MultiQuant™ MDソフトウェアはAnalyst® MDソフトウェアの画面ロック情報を使用します。MultiQuant™ MDソフトウェアに関する追加のセットアップは必要ありません。

注：ファイルおよびフォルダの構造はクロマトグラムを見ることができる状態を維持する必要があります。データを移動しなければならない場合、全プロジェクトを移動してファイル構造を維持します。

ソフトウェアのヘルプ

本ソフトウェアは、機能に関する追加の情報を提供するツールのヒントやエラーメッセージがあります。

- ・ フィールドが利用可能ではない場合、フィールド上でカーソルを動かすと、機能が使えない理由を説明するツールヒントが表示されます。追加の情報には、フィールドを有効にする方法またはフィールドを有効にするために必要なセキュリティ設定が含まれます。
- ・ エラーメッセージにはソフトウェアの機能を使用するために必要なセキュリティ設定に関する情報が含まれます。

ファイルタイプ

表 1-1 ソフトウェアのファイルタイプ

ファイルタイプ	説明
*.qsession	MultiQuantソフトウェアResults Table。定量監査証跡データを保持。
*.qmethod	MultiQuantソフトウェア定量化メソッド。
*.qmap	MultiQuantソフトウェア監査マップ。
*.mqcal	外部キャリブレーションファイル。
*.cset	列設定ファイル。

お問い合わせ先

SCIEXのサポート

- ・ sciex.com/contact-us
- ・ sciex.com/request-support

お客様のトレーニング

- ・ 北米 : NA.CustomerTraining@sciex.com
- ・ ヨーロッパ : Europe.CustomerTraining@sciex.com
- ・ EUおよび北米以外の連絡先については、sciex.com/educationを参照してください。

オンライン学習センター

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

SCIEX製品のサイバーセキュリティに関する最新のガイダンスについては、sciex.com/productsecurityを参照してください。

テクニカルサポート

SCIEXおよびその代理店は、十分に訓練を受けた保守/技術専門要員を世界中に配備しています。システムまたは起こり得る技術的問題に関するご質問にお答えします。詳しくは、SCIEXのウェブサイト (sciex.com) をご覧ください。

File Menu

2

表 2-1 File Menu Options

Menu Option	説明
New Results Table	データセットを定量化し、Results Tableを作成します。処理するデータファイルを選択し、適用する定量化メソッドを選択します。 Results Table Dialogs 該当ページ 43 を参照してください。
New Quantitation Method	サンプルを選択した後に、ブランクの定量化Method Editorを作成します。通常、New Results Tableウィザードの一部としてメソッドを作成します。このコマンドはユーザーがメソッドを作成しても、そのメソッドをResults Tableを作成するサンプルコレクションにすぐに適用しない場合に便利です。 <ul style="list-style-type: none">・ ナビゲーションペインは、選択したプロジェクトに対するDataフォルダに利用できるサブフォルダ、wiffファイル、およびサンプルを表示します。・ 個別のフォルダを展開し、サブフォルダやwiffファイルを確認します。wiffファイルを展開し、利用可能なサンプルを表示します。
Open Results Table	前回に保存したResults Tableを開きます。コマンドを選択した後、標準の Open ダイアログが開きます。 Results Tables 該当ページ 37 を参照してください。
Open Quantitation Method	前回に保存した定量化メソッドを開きます。コマンドを選択した後、標準の Open ダイアログが開きます。 Quantitation Method Editor 該当ページ 87 を参照してください。
Save	有効なResults TableまたはQuantitation Method Editorをファイルに保存します。Results TableまたはQuantitation Method Editorを一度も保存していない場合は、ユーザーはファイル名の保存を要求されます。そうしない場合、以前のバージョンが上書きされます。
Save As	有効なResults TableまたはQuantitation Method Editorを新しいファイルに保存します。
Recent Results Table	Results Tableで直近に使用したそれぞれのサブメニュー項目を含みます。項目の1つを選択し、一致するファイルを開きます。
Recent Quantitation Methods	定量化メソッドで直近に使用したそれぞれのサブメニュー項目を含みます。項目の1つを選択し、一致するファイルを開きます。

表 2-1 File Menu Options (続き)

Menu Option	説明
Import	テキストファイルから新しい定量化メソッドを作成します。通常、New Quantitation Methodコマンド (Quantitation Method Editor 該当ページ 87 を参照) を使用して手作業でメソッドを作成するか、新しい Results Tableを作成する処理 (Results Tables 該当ページ 37 を参照) の一部としてメソッドを作成します。ユーザーが定量化メソッドを作成または修正したい場合、このコマンドは便利です。その場合は、メソッドを手動で作成し Quantitation Method as Text コマンドを使用します。
Export	定量化メソッドを.qmethodまたは.txtファイルにエクスポートするコマンドがあります。 Exportサブメニュー 該当ページ 11 を参照してください。ソフトウェアから制御されるデータ出力方法は、Results Tablesのエクスポート、LIMSへの転送、およびレポーティングです。Results Tableからのコピーおよび貼り付けなどのその他の出力データソースは制御されていません。規制上これらの制御されていない出力メソッドを使用しないでください。
Transfer to LIMS	この機能を有効にするためにはLIMSライセンスファイルが必要です。 Transfer to LIMS 該当ページ 14 を参照してください。
Export and Save Results Table	Results Tableのエクスポートは、データ出力用に制御されたメソッドの1つです。
Create Report and Save Results Table	Reporterソフトウェアを使用してMicrosoft Wordでレポートを作成します。 Reports 該当ページ 138 を参照してください。カスタムテンプレートを作成する場合は、ユーザーの責任において、そのテンプレートを検証する必要があります。ユーザーはレポートテンプレートエディタでその数字のフォーマットを編集できます。その数字のフォーマットがテンプレートで指定されない場合、 Results Table Column Setting のフォーマットがレポートで使用されます。
Exit	プログラムを終了します。保存していないデータの保存を要求されます。

定量化メソッドのインポート

1. **File > Import > Quantitation Method from Text** をクリックします。
2. テキストファイルを選択します。
3. 代表サンプルを選択します。

Quantitation Method Editorを開きます。

4. *.qmethodフォーマットで保存します。これによりその後の新しいデータセットの定量に使用することができます。

Exportサブメニュー

ソフトウェアから制御されるデータ出力方法は、Results Tablesのエクスポート、LIMSへの転送、およびレポーティングです。その他の出力データソース（Results Tableからのコピーや貼り付けなど）は制御されていません。ユーザーは、規制上これらの制御されていない出力メソッドを使用してはなりません。

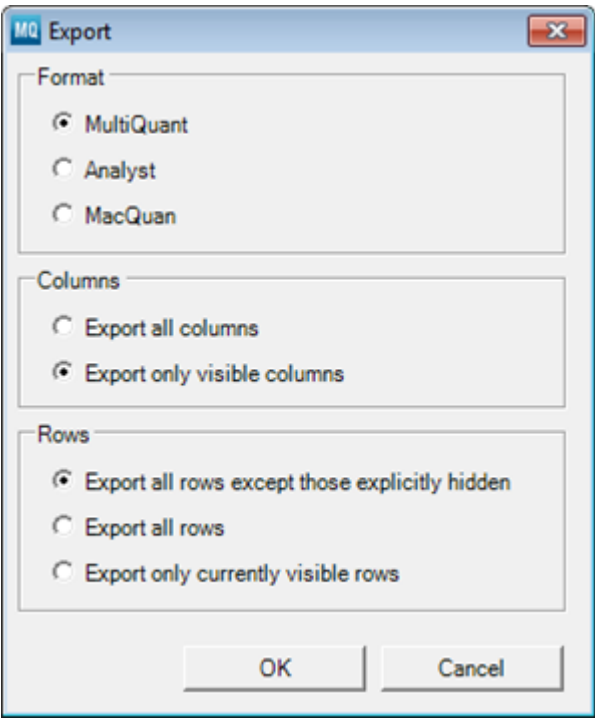
表 2-2 Export Menu Options

Menu Option	説明
Results Table-Metric	有効なResults Tableの情報を含むタブ区切りのテキストファイルを作成します。 Results Tableのエクスポート-メトリック 該当ページ 13 を参照してください。
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod	定量化メソッドを新しいファイルにエクスポートします。Results Tableが作成されたら、表を作成するための定量化メソッドのコピーが表の内部に保存されます。これは、元の定量化メソッドが削除または修正されて、ユーザーが新しいサンプルバッチのResults Tableを作成するときに元のメソッドを適用したい場合に便利です。
Results Table's Quantitation Method as Text	テキストフォーマットに結果表の定量化メソッドのコピーをエクスポートします。Results Tableが作成されたら、表を作成するための定量化メソッドのコピーが表の内部に保存されます。
Quantitation Method as Text	これらのファイルにはヘッダー行と各コンポーネント（分析試料や内部標準）の行を含んでいます。コンポーネント名、質量範囲、各積分パラメータ、などの列があります。定量化メソッドがMultiQuant™ MD積分パラメータを特定する列のヘッダー行が変更された場合、または列自体が削除された場合、積分パラメータに対するUser Integration Defaultsで指定したデフォルト値はすべてのコンポーネントに適用されることになります。いずれかの列のヘッダー行が変更または削除された場合は、メソッドはインポートされません。ユーザーはメソッドを開いて、必要な変更がすべてインポートした定量化メソッドにあることを確認してください。 表 2-1 を参照してください。

Results Tableのエクスポート

注：メーカーは、データがソフトウェアからエクスポートされた後の間接的または派生的な損害を含む偶発賠償責任に対して一切の責任を負いません。Results Tableは、列設定の番号フォーマットに関わらず、完全な精度でエクスポートされます。

図 2-1 Exportダイアログ



ラベル	説明
Format	
MultiQuant	完全な精度でエクスポートします。このフォーマットでは、テキストファイルは Results Table の表示と同じ列名を使用するヘッダー行があります。これは、 Results Tables をエクスポートするために推奨されるフォーマットです。
Analyst	列設定で定義した精度でエクスポートします。これは、Analyst [®] MDソフトウェアの定量 Results Tables でエクスポートされるのと同じフォーマットです。このフォーマットと以前のフォーマットとの違いは、場合によっては列のヘッダーの名前が少し異なり（Analyst [®] MDソフトウェアフォーマットに一致させるため）、キャリブレーションを説明する各分析試料の追加のヘッダー行があることです。
MacQuan	これは、列のヘッダー名がMacQuan定量パッケージで使用される名前に一致することを除き、Analyst [®] MDソフトウェアと同様のフォーマットです。
Columns	
Export all columns	選択すると、 Results Table で現在非表示の列を含め、すべてのフィールドがエクスポートされます。

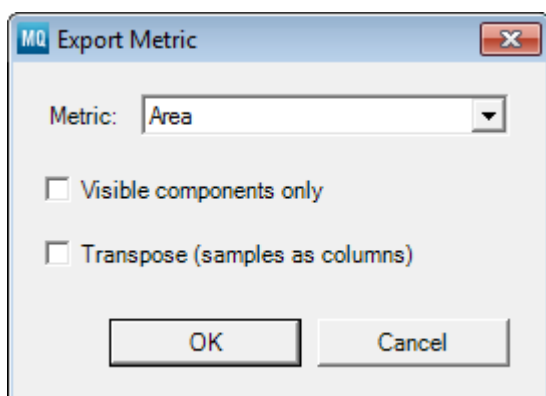
ラベル	説明
Export only visible columns	Results Table で現在表示されている列のみがエクスポートされます。 Results Table Column Settings コマンドを使用して表示させる列を選択することもできます。 Results Table右クリックメニュー 該当ページ 39 を参照してください。
Rows	
Export all rows except those explicitly hidden	選択すると、特定のフィルタリングによって非表示の行を除いてすべての行をエクスポートします。 ソフトウェアアイコン 該当ページ 161 を参照してください。 Sample Type フィルタリングまたは Component フィルタリングによって非表示の行をエクスポートします。
Export all rows	選択すると、すべての行をエクスポートできます（すなわち、全サンプルに対する全コンポーネント）。
Export only currently visible rows	選択すると、 Results Table で現在表示されている行のみがエクスポートされます。 Sample Type フィルタリングまたは Component フィルタリングによって非表示の行は含まれません。

Results Tableのエクスポート-メトリック

注：メーカーは、データがソフトウェアからエクスポートされた後の間接的または派生的な損害を含む偶発賠償責任に対して一切の責任を負いません。**Results Table**は、列設定の番号フォーマットに関わらず、完全な精度でエクスポートされます。

有効なResults Tableの情報を含むタブ区切りのテキストファイルを作成するために使用します。

図 2-2 Export Metricダイアログ



File Menu

ラベル	説明
Metric	エクスポートするフィールドを選択します。 Results Table Columns 該当ページ 55 を参照してください。
Visible components only	このオプションが選択された場合、少なくとも1つの対応する行が Results Tableで現在見えているそれらのコンポーネントのみがファイルにエクスポートされます。 このオプションが選択されていない場合、すべてのコンポーネントについて情報がエクスポートされます。
Transpose (samples as columns)	このオプションが選択されている場合、生成したファイルには各サンプルに対する列と、各コンポーネント（分析試料または内部標準）に対する行が作成されます。 このオプションが選択されていない場合、結果ファイルにはそれぞれのコンポーネントのための列とそれぞれのサンプルのための行があります。

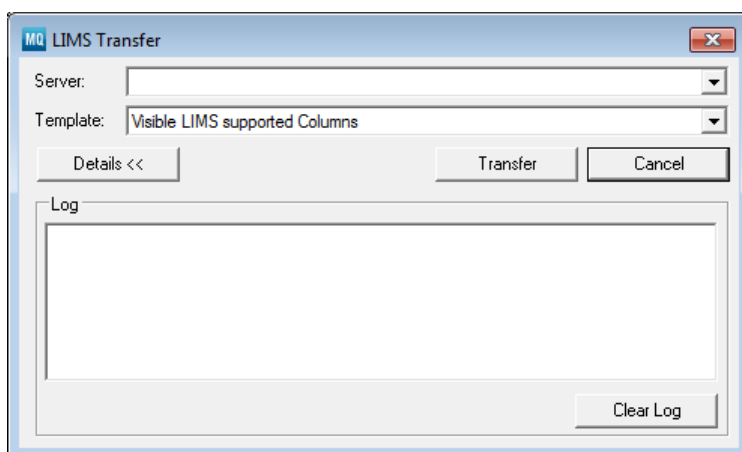
Transfer to LIMS

このコマンドは、Results Tableが開いているときにのみ利用可能です。この機能を有効にするためにはLIMSライセンスファイルが必要です。

ソフトウェアから制御されるデータ出力方法は、Results Tablesのエクスポート、LIMSへの転送、およびレポーティングです。その他の出力データソース（Results Tableからのコピーや貼り付けなど）は制御されていません。規制上これらの制御されていない出力メソッドを使用しないでください。

1. **Help > Install License**をクリックして、ライセンスを有効にします。

図 2-3 LIMS Transfer Dialog



2. 次のフォーマットにある**Server**フィールドにサーバー名を入力します：**http:\\server IP address;port number**

3. **Template**リストからテンプレートを選択します。
4. **Transfer**をクリックします。

Edit Menu

3

表 3-1 Edit Menu Options

Menu Option	説明
Clear	現在の選択をクリアします。このオプションは、 Quantitation Method Editor の Components タブに1つ以上の選択した行がある際に適用します。
Copy	Results Table が有効な場合、このコマンドは選択した表の部分をクリップボードにコピーします。 Peak Review または Calibration プロットが有効な場合、プロットの画像がコピーされます。
Paste	Results Table が編集可能な選択領域で有効な場合、このコマンドはクリップボードからセルまたは列を貼り付けます。
Copy Entire Table	Results Table または Statistics Table が有効な場合、このコマンドはすべてのデータをクリップボードにコピーします。 Results Table の場合、現在見えている行および列のみがコピーされます。
Fill Down	Results Table が編集可能な選択領域で有効な場合、このコマンドは最初に選択した行の情報を続いて選択したすべての行に複製します。
Select all Rows	現在有効な Results Table 、または Statistics Table にあるすべての行を選択します。選択した行で操作を行う Copy などのコマンドを後で適用したい場合に便利です。
Modify Results Table Method	<p>現在有効なResults Tableに関連した定量化メソッドを変更します。ユーザーがコンポーネントを追加するまたは削除したい場合に便利です。積分パラメータのみを修正する場合、Update Quantitation Method for Groupを使用します。Peak Review 該当ページ 63を参照してください。</p> <p>コマンドが選択されると、Quantitation Method Editorダイアログが開きます。データが再処理され、Results Tableが更新されてデータが表示されます。Quantitation Method Editor 該当ページ 87およびResults Table Dialogs 該当ページ 43を参照してください。</p> <p>Quantitation Methodを再適用すると、指定したコンポーネントを手動で修正したすべてのピークが上書きされ、Results TableのModified列のチェックボックスをクリアします。</p>

表 3-1 Edit Menu Options (続き)

Menu Option	説明
Project Integration Defaults	<p>定量化メソッドを作成する際に使用するデフォルトのピーク検出パラメータを設定します。コンポーネントが2、3個以上ある場合、クロマトグラフィーに基づいてデフォルト値を設定し、それらをすべてのコンポーネントで個別に調整する必要がないようにします。しかし、すべてのコンポーネントに対して理想的なパラメータが1つもない可能性があり、そのためにいくつかのコンポーネントに対するパラメータのいくつかを調整する必要がある場合があります。</p> <p>Integration Algorithm Parameters 該当ページ 126を参照してください。</p>
Project Units & Calibration Defaults	<p>定量化メソッドを作成する際に使用するデフォルトの濃度の単位と回帰パラメータを設定します。メソッドを作成するときにこれらのパラメータも設定できます。しかし、同じ設定を使用する場合、このコマンドを使ってからデフォルト値を設定する方が簡単です。Project Units & Calibration Defaults 該当ページ 19を参照してください。</p>
Project Secure Export Settings	<p>このオプションを選択した場合、テキストファイルのデータは、エクスポートの間暗号化されます。パスワードを設定して、暗号化を有効にします。Project Secure Export Settings 該当ページ 19を参照してください。</p>
Enable Project Modified Peak Warning	<p>デフォルトでは、このオプションは選択されません。選択した場合、ユーザーがResults Tableにあるクロマトグラムに変更を行い、次にその変更を保存すると、警告メッセージで変更が行われたことが示されます。ユーザーは、保存を続行するか、Results Tableに戻るかを選択できます。Modify Results Table Method 該当ページ 18を参照してください。</p>

表 3-1 Edit Menu Options (続き)

Menu Option	説明
Cache Chromatograms for Faster Peak Review	<p>この機能が有効化されると、抽出イオンクロマトグラム (XIC) が特定のサンプルとコンポーネントに対して計算されるたびに、関連するResults Tableが開いている間、その計算結果は今後の使用のために保存されます。</p> <p>例えば、この機能が有効なときにユーザーがResults Tableを作成した場合、Peak Reviewペインにあるクロマトグラムがすぐに表示されます。なぜならそれらは最初の積分プロセスの間にResults Tableを作成するためにすでにキャッシュされていて、wiffファイルの情報から再計算する必要がないためです。ユーザーが以前保存したResults Tableを開いた場合、個別のクロマトグラムは最初にPeak Reviewペインで表示されるときに計算されなければなりません。しかし、特定の以前のクロマトグラムへの戻りは、より早くなります。</p> <p>すべてのクロマトグラムをキャッシュするには、十分なコンピュータメモリが必要です。しかし、多くの分析試料がある非常に大きなサンプルセットでは、このオプションはメモリ不足のメッセージを避けるために無効にする必要があります。</p>
Cache all Chromatograms Now	<p>キャッシュChromatograms for Faster Peak Reviewコマンドが有効な場合、このコマンドは有効なResults Tableにすべてのクロマトグラムを算出してキャッシュするために使用します。容量の大きいデータには、このコマンドの実行に時間がかかる場合があります。しかし、一度完了すると、すべてのクロマトグラムはキャッシュされ、ピークレビュー処理は早くなります。必要に応じて、このコマンドは停止できます。</p> <p>多くのクロマトグラムを確認する場合、この操作を行ってください。Cache Chromatograms for Faster Peak Reviewオプションが初めから有効であった場合、クロマトグラムは既にキャッシュされているため、Results Tableを作成後はこのオプションを再び実行する必要はありません。このコマンドは、以前に保存したResults Tableを開いた後に便利です。</p>

Modify Results Table Method

現在有効なResults Tableに関連した定量化メソッドを変更します。ユーザーがコンポーネントを追加するまたは削除したい場合に便利です。積分パラメータのみを修正したい場合、**Update Quantitation Method for Group**を使用してください。[Update Quantitation Method for Group](#) 該当ページ 72を参照してください。

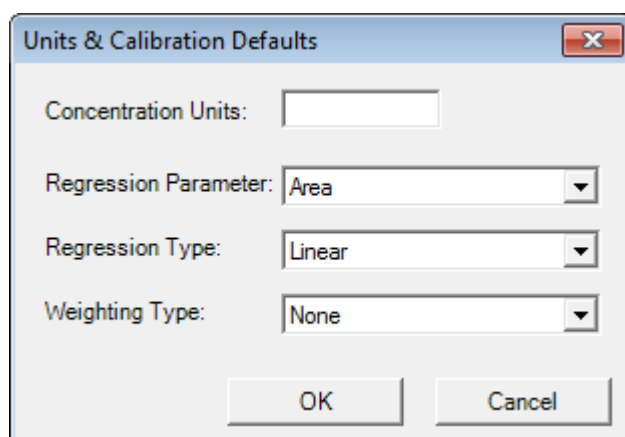
コマンドが選択されると、Quantitation Method Editorダイアログが開きます。データが再処理され、Results Tableが更新されて新しいデータが表示されます。[Quantitation Method Editor 該当ページ 87](#)を参照してください。

Quantitation Methodを再適用すると、指定したコンポーネントを手動で修正したすべてのピークが上書きされ、Results TableのModified列のチェックボックスをクリアします。

Project Units & Calibration Defaults

Concentration Units、**Regression Parameter**（AreaまたはHeight）、**Regression Type**および**Weighting Type**を設定します。さまざまな回帰の種類および重み付けの種類は[回帰方程式 該当ページ 132](#)で説明されています。

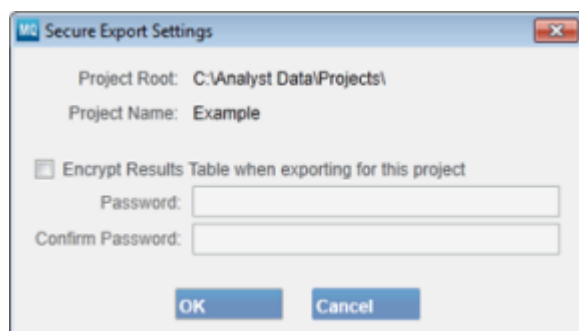
図 3-1 Units & Calibration Defaults



Project Secure Export Settings

テキストファイルにあるデータは、エクスポートの間は暗号化されます。パスワードを設定して、暗号化を有効にします。[図 3-2](#)を参照してください。

図 3-2 Secure Export Settingsダイアログ



Process Menu

4

表 4-1 Process Menu Options

Menu Option	説明
Add Samples	現在有効な Results Table に追加サンプルを加えます。 Select Samples 該当ページ 43 を参照してください。 新しいサンプルが積分され、既存の表に追加される間は、進行バーが表示されます。ユーザーはこのタスクを実行するために、 Add samples to Results Table の権限を有効にしなければなりません。
Remove Selected Samples	現在有効な Results Table から選択したサンプルを削除します。ユーザーはこのタスクを実行するために、 Remove samples from Results Table の権限を有効にしなければなりません。
Show Only Outliers	外れ値を含む行を表示します。 Process > Show Only Outliers をクリックします。 すべての行を表示するために、 Process > Show Only Outliers を再びクリックしてください。
Go to Next Outlier	Results Table の次の外れ値に進みます。 Process > Go to Next Outlier をクリックします。
Export Calibration and Save Results Table	有効な Results Table に関連付けられているすべての分析試料のキャリブレーション方程式のコピーを、外部ファイル（*.mqcal）に保存します。これにより、1セットの標準サンプルでのキャリブレーションが、同じ Results Table の一部ではないその他のサンプルに適用できるようになります。 キャリブレーションのエクスポート 該当ページ 21 を参照してください。
Import External Calibration	前回エクスポートしたキャリブレーションが、有効な Results Table に適用されます。このコマンドを使用するための別の方法として、 Define Integration 該当ページ 49 に説明されているように、 New Results Table ウィザードから外部のキャリブレーションファイルを指定します。 Import External Calibration 該当ページ 21 を参照してください。
Remove External Calibration	前回適用された外部キャリブレーションが、有効な Results Table から削除されます。

キャリブレーションのエクスポート

有効な**Results Table**に関連付けられているすべての分析試料のキャリブレーション方程式のコピーを、外部ファイル (*.mqcal) に保存します。これにより、1セットの標準サンプルでのキャリブレーションが、同じ**Results Table**の一部ではないその他のサンプルに適用できるようになります。

典型的なワークフロー：

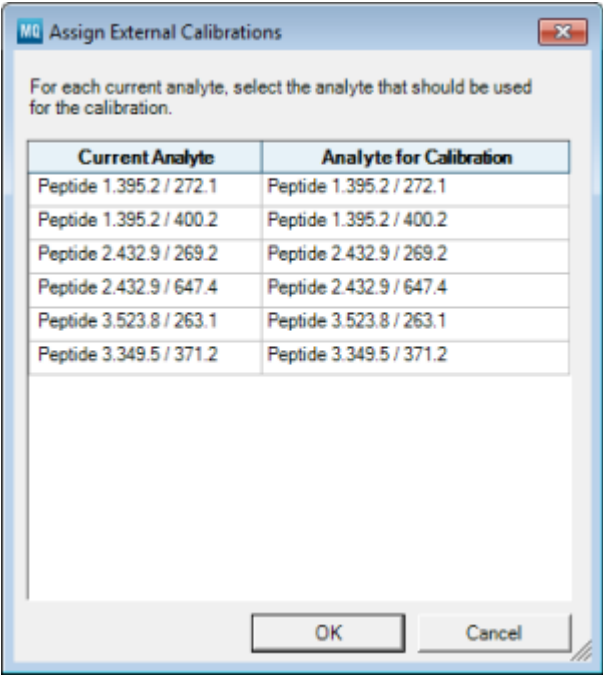
1. **Standard**のみを含む新しい**Results Table**を作成します。
2. **Peak Review**ペインを使用して、積分が成功したことを確認します。
3. **Export Calibration**コマンドを使用して、キャリブレーションのコピーを保存します。
4. 未知の濃度のサンプルを含む新しい**Results Table**を作成します。
5. **Import External Calibration**コマンドまたは指定したキャリブレーションファイルを使用して、前回にエクスポートしたキャリブレーションを新しい表に適用します。
6. 必要に応じて、ステップ4と5を繰り返します。

最初の**Results Table**（**Standard**サンプルを含む）を変更した場合、前回エクスポートしたキャリブレーションは自動的に更新されません。**Results Table**はもう一度エクスポートする必要があります。

Import External Calibration

現在の**Results Table**で、エクスポートしたキャリブレーションでと同じ分析試料が使用されている場合、ダイアログは自動的に完了し、ユーザーは**OK**をクリックできます。現在の**Results Table**にある分析試料が特定のグループに割り当てられていて、エクスポートしたキャリブレーションにある分析試料が同じ名前のグループに割り当てられている場合、ダイアログは自動的に完了します。分析試料が数個以上ある場合、両方に同じ分析試料名を使用するか、一致する**Group**名を使用します。

図 4-1 Assign External Calibrationsダイアログ



ラベル	説明
Current Analyte	現在のResults Tableの定量化メソッドにある各分析試料に対する入力内容を含みます。
Analyte for Calibration	外部キャリブレーションファイルにある利用可能なすべての分析試料の名前のリストを含みます。現在の分析試料のそれぞれについて、キャリブレーションが行われる対応する外部分析試料を選択します。

Audit Trail Menu

5

注：監査マップは、**Results Table**が初めて作成されたとき、セッションに追加されます。追加された後は変更することはできません。

表 5-1 Audit Trail Menu

Menu項目	説明
Audit Trail Viewer	Audit Trail Viewer を開きます。
Audit Map Manager	Audit Maps を選択、修正、有効化します。
View Session Audit Map	有効な Results Table の現在のマップを開きます。

Audit Trail Viewer

監査証跡ビューアはResults Tableの特定のサンプルの完全な履歴を表示します。Results Tableは、<drive>:\Analyst Data\Projects\<project name>\Results フォルダに保存されます。

注：

Results Tableは、別の動作をしている時に非表示にしないでください。例えば、監査証跡の保存時など。

Peak Reviewペインなど他のペインを最大限生かすために、データをよりよく表示し、ツールバーにある**Toggles tab mode**ボタンを使用します。

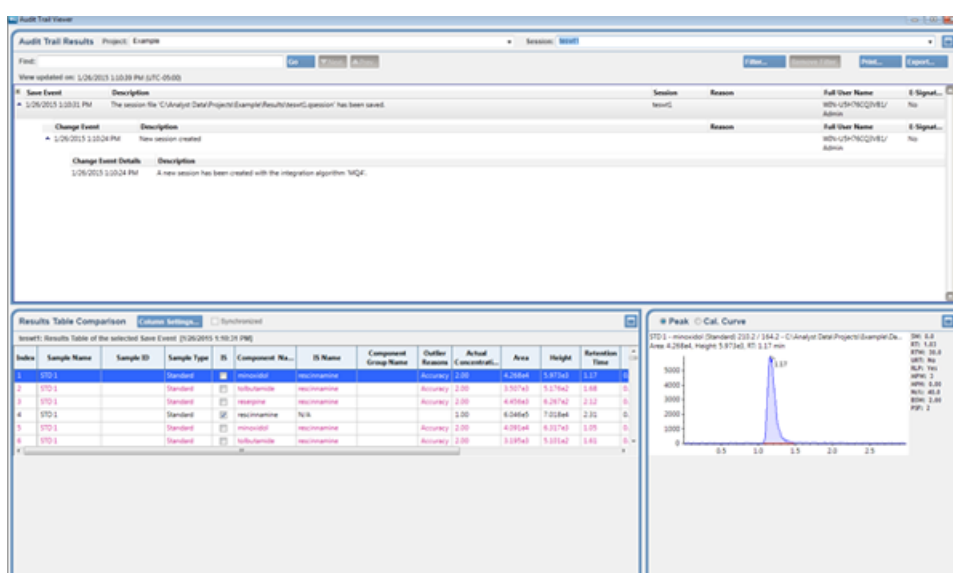
Audit Trail Viewerを使用して、以下のことができます。

- ・ 各**Results Table**の監査証跡の記録を見ることができます。
- ・ キーワード検索を行うことができ、テキスト内で一致するすべての単語が強調表示されます。
- ・ 指定された一連の基準に基づいて、ソフトウェアの監査証跡にある監査済みのイベントをフィルタリングできます。
- ・ テキストファイルに監査証跡記録をエクスポートします。エクスポートしたファイルは編集できます。
- ・ 保護されたPDFで印刷します。

View the Audit Trail Results in the Audit Trail Viewer

1. Results Tableを開きます。
2. **Audit Trail > Audit Trail Viewer**をクリックします。
3. プロジェクトを変更するには、**Projects**リストをクリックし、別のプロジェクトを選択します。
4. 別のセッションを表示するには、**Sessions**リストをクリックし、別のセッションを選択します。プロジェクトのすべてのセッションを同時に表示することもできます。

図 5-1 Audit Trail Viewer



ラベル	説明
Project	リストからプロジェクトを選択します。
Session	セッションファイルを選択します。
Find	フィルタリングなしでキーワード検索を実行します。テキスト内で一致するすべての単語が強調表示されます。
Go	クリックして検索を開始します。
Next	クリックして次のワードに移動します。
Prev	クリックして前のワードに移動します。
Filter	クリックして選択した基準に合うイベントのみを表示します。
Remove Filter	クリックしてフィルターを削除します。
Print	クリックして監査証跡を印刷します。

ラベル	説明
Export	クリックして監査証跡をエクスポートします。
Save Event	セッションファイルが保存される際、保存イベントが作成されます。保存イベントは、以前のイベント保存以降の変更および Results Table のすべての値をキャプチャします。
Description	変更イベントの詳細。
Session	セッションファイルの名前を表示します。
Reason	Results Table で行われた変更の理由を表示します。
Full User Name	Results Table に変更を行ったユーザー名を表示します。
E-Signature	Results Table への変更が承諾された場合に表示されます。
Column Settings	クリックして、 Results Table 列を表示または非表示にします。
Synchronized	選択すると、両方の Results Tables を水平に同時にスクロールします。
Previous version	選択したセッションファイルの以前のバージョンを表示します。
Peak	クリックして、選択したサンプルのピークを表示します。
Cal Curve	クリックして、選択したサンプルのキャリブレーションカーブを表示します。

キーワード検索を実行する

キーワード検索を実行することができ、テキスト内で一致するすべての単語が強調表示されます。

1. Results Tableを開きます。
2. **Audit Trail > Audit Trail Viewer**をクリックします。
3. **Find**フィールドに、検索対象の単語を入力し、**Go**をクリックします。

一致が見つかりると**Find**フィールドが緑色に変化し、一致数が表示されます。また、一致する単語が黄色で強調表示されます。一致が見つからない場合は、**Find**フィールドがピンク色に変化します。

4. 各一致を移動するには、**Next**および**Prev**ボタンを使用します。

監査済みのイベントをフィルターする

ユーザーは、指定された一連の基準に基づいて、監査証跡にある監査済みのイベントをフィルタリングできます。

1. Results Tableを開きます。

Audit Trail Menu

- 2. **Audit Trail > Audit Trail Viewer**をクリックします。
- 3. **Filter**をクリックします。

図 5-2 Filter Audit Trail Eventsダイアログ

項目	説明
1	Results Table ファイルの名前。有効なプロジェクトの1つの Results Table ファイルまたはすべての Results Table をフィルタリングできます。
2	Description : イベントの種類の一部または全体を入力します。 Sample Name : サンプル名の一部または全体を入力します。 Full User Name : ユーザーの名前の一部または全体を入力します。 E-Signature : YesまたはNoを選択します。 Reason : 理由の一部または全体を入力します。
3	is : 特定の単語またはフレーズでフィルタリングできます。
4	contains : 部分的な単語またはフレーズでフィルタリングできます。
5	Date : 特定の日付と時刻に発生したイベントをフィルタリングします。

4. **Filter Audit Trail Events**ダイアログでは、リストを使ってフィルターの基準を選択します。

注：Results Tableは編集できません。

5. **Clear**をクリックして、フィルターの基準を**No filter**にリセットします。
6. **OK**をクリックして、イベントをフィルターします。

ヒント！ フィルターを削除するには、**Audit Trail Viewer**で**Remove Filter**をクリックします。

Audit Trail Viewerでエクスポートする

1. Results Tableを開きます。
2. **Export**をクリックし、ファイル名を入力します。

ファイルがタブ区切りテキストファイルとしてエクスポートされます。

注： 監査証跡ビューアの保存済みイベントの部分だけがエクスポートされます。

Audit Trail Viewerの印刷

1. Results Tableを開きます。
2. **Print**をクリックし、プリンターを選択します。

pdfFactoryを使って確実なPDFをプリントすることができます。

注： 監査証跡ビューアの保存済みイベントの部分だけが印刷されます。

Audit Trail Manager

定量監査したイベントを監査証跡にグループ化するソフトウェアです。監査証跡は監査したイベントの記録を保存するファイルです。監査証跡はwiffファイルなどのファイル、定量化メソッドおよび**Results Table**ファイルを組み合わせ、コンプライアンス目的に使用可能で有効な電子記録を構成します。

Audit Trail Managerソフトウェアは監査マップに規定されたすべてのイベントを維持します。このソフトウェアは電子署名およびユーザー、日付、変更の詳細などの情報を保存します。監査マップに従って、コメントなどの追加情報も記録します。

ヒント！セッションファイルは**Results Table**、定量化メソッドのコピー、監査マップ作成時のコピー、および全セッションの全監査証跡が含まれます。

ソフトウェアがqsessionファイルまたはqmethodファイルを作成あるいは修正する場合、そのイベントはAnalyst[®] MDソフトウェアのHistoryタブ上のProject Audit Trailに保存されます。次のイベントが保存されます。

- ・ 定量化メソッドファイルの作成時。
- ・ 定量化メソッドファイルの修正時。
- ・ 定量化**Results Table**の作成時。
- ・ 定量化**Results Table**の修正時。

E-signatureまたは**Reason Prompt**が定量化メソッドファイルを作成または修正するために選択されている場合、Analyst[®] MDソフトウェアで作成されたAudit TrailダイアログはMultiQuant[™] MDソフトウェアで開きます。

表 5-2 監査証跡

監査証跡	記録されるイベントの例
定量監査証跡（Results Tableごとに1つ）	以下のように変更されます。 <ul style="list-style-type: none">・ セッションファイルの作成および修正・ サンプル情報・ ピーク積分パラメータ

監査マップについて

MultiQuant[™] MDソフトウェアでは、定量結果に関連する処理設定情報への変更履歴がすべて維持されます。本ソフトウェアでは、アクティブプロジェクトの監査マップに従ってイベントがすべて監査され、すべての電子署名とリンクが該当する記録にキャプチャされます。

Audit Mapを作成する

ソフトウェアはさまざまな監査マップをインストールしています。1つ以上の監査マップの修正が、完全に新しいものを作成するよりも簡単かどうかを決定するために、監査マップを表示します。監査マップの作成または修正は、Analyst[®] MDソフトウェアプロジェクトの監査証跡にある監査されたイベントです。

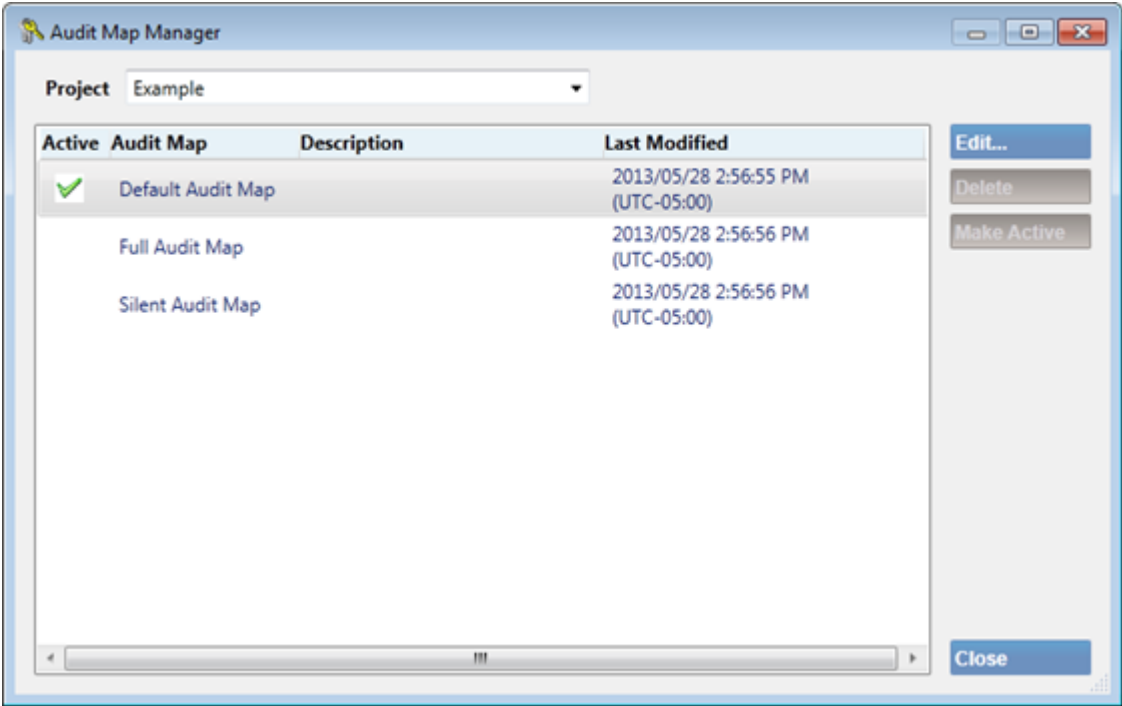
注意：二人のユーザーが同時に同じ監査マップを修正している場合、最後にファイルを保存したユーザーによって行われた変更のみが使用されます。

プロジェクトの有効な監査マップによって、作成されるすべてのResults Tablesの監査証跡にどのイベントが記録されているかを特定します。

注： Results Tableを保存した後、有効な監査マップはResults Tableと共に保存され監査マップは修正することはできません。

1. Audit Trail > Audit Map Managerをクリックします。

図 5-3 Audit Map Manager



ラベル	説明
Project	リストからプロジェクトを選択します。
Edit	クリックすると、有効な監査マップを編集します。
Delete	クリックすると、選択した監査マップを削除します。

2. Projectリストで監査マップを作成するためのプロジェクトを選択します。
3. 監査マップを選択し、Editをクリックします。

図 5-4 Audit Map Editor

Audit Map Editor

Audit Map: Default Audit Map

Description:

Check Uncheck Add Predefined Reasons...

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

Save Save As... Close

ラベル	説明
説明	監査マップの説明を入力します。
Check	クリックすると、チェックボックスを選択します。
Uncheck	クリックすると、チェックボックスをクリアします。
Add Predefined Reasons	クリックすると、事前規定した情報がリストに加わります。

4. 必要であれば、**Description**フィールドに監査マップの説明を入力します。
5. **Audit Map**表には、以下の各イベントが構成されています。
- ・ イベントを監査するには、**Audited**列のチェックボックスを選択してください。

ヒント！ 列中の連続したセルをチェックボックス値で埋めるには、**Ctrl**または**Shift**を押し、セルをクリックしてから**Check**をクリックします。

- ・オペレータがカスタム情報を入力または定義した理由を選択するには、**Reason Prompt**列にあるチェックボックスを選択してください。
- ・イベント発生時にオペレータが定義した変更の理由しか選択できないようにするには、**Reason Prompt**列および**Predefined Reasons Only**列のチェックボックスを選択してください。**Predefined Reason** _ 列では、最大10件の理由が選択できます。

ヒント！ 事前規定情報を加えるには、**Add Predefined Reasons**をクリックします。

- ・イベントの電子署名が必要な場合、**E-Sig**列のチェックボックスを選択します。

6. **Save As**をクリックし、**Save Audit Map As**ダイアログに名前を記入します。

7. **Save**をクリックします。

8. **Audit Map Editor**ダイアログの**Close**をクリックします。

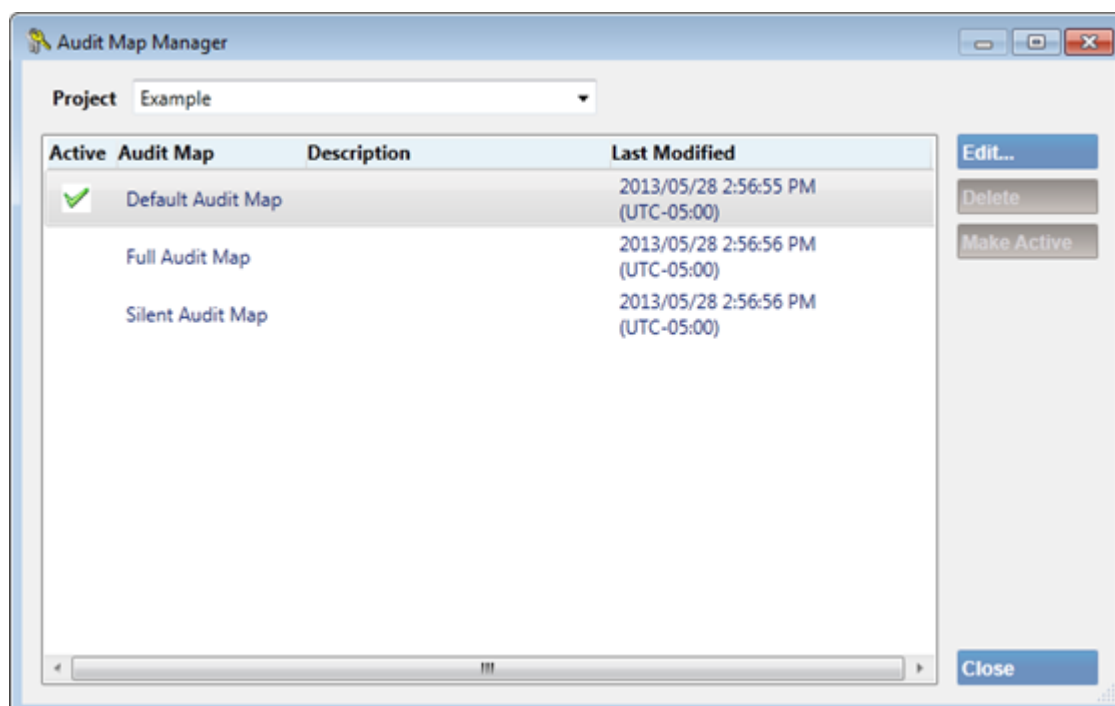
9. **Make Active**をクリックします。

監査マップが適用されると、監査マップは有効になります。有効な監査マップの監査証設定によって、どのイベントがこのポイントから監査証跡に記録されたかを特定します。

Audit Mapの変更

1. **Audit Trail > Audit Map Manager**をクリックします。

図 5-5 Audit Map Manager



Audit Trail Menu

ラベル	説明
Project	リストからプロジェクトを選択します。
Edit	クリックすると、有効な監査マップを編集します。
Delete	クリックすると、選択した監査マップを削除します。

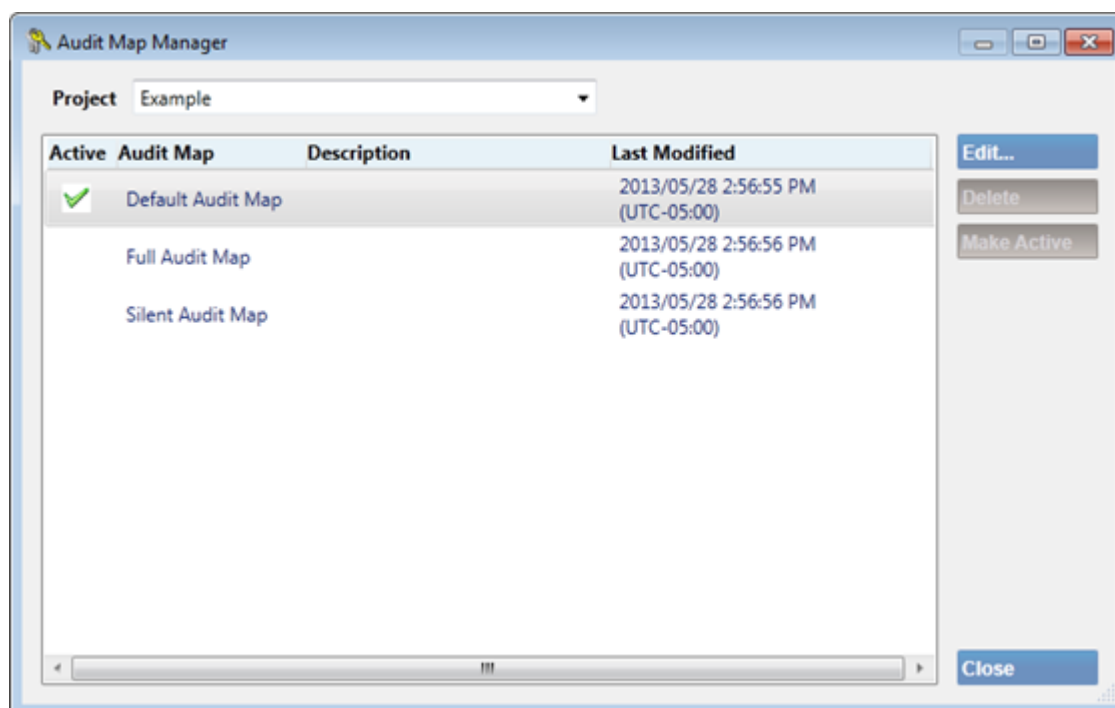
2. **Project** リストで監査マップを変更するためのプロジェクトを選択します。
3. 別のマップを選択し、**Make Active**をクリックします。
4. **Close**をクリックします。

Audit Mapの編集

次の監査イベントは常に記録されており、そのため**Audit Map Editor**に表示されません：Print Report、Export Results Table、Transfer to LIMS。

1. **Audit Trail > Audit Map Manager**をクリックします。

図 5-6 Audit Map Manager



ラベル	説明
Project	リストからプロジェクトを選択します。
Edit	クリックすると、有効な監査マップを編集します。
Delete	クリックすると、選択した監査マップを削除します。

2. 監査マップを選択し、**Edit**をクリックします。

図 5-7 Audit Map Editor

Audit Map: Default Audit Map
Description:

Check Uncheck Add Predefined Reasons...

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

Save Save As... Close

ラベル	説明
説明	監査マップの説明を入力します。
Check	クリックすると、チェックボックスを選択します。
Uncheck	クリックすると、チェックボックスをクリアします。
Add Predefined Reasons	クリックすると、事前規定した情報がリストに加わります。

3. 必要であれば、**Description**フィールドに監査マップの説明を入力します。

4. **Audit Map**表には、以下の各イベントが構成されています。

- ・ イベントを監査するには、**Audited**列のチェックボックスを選択してください。

ヒント！ 列中の連続したセルをチェックボックス値で埋めるには、**Ctrl**または**Shift**を押し、セルをクリックしてから**Check**をクリックします。

- ・ オペレータがカスタム情報を入力または定義した理由を選択するには、**Reason Prompt**列にあるチェックボックスを選択してください。
- ・ イベント発生時にオペレータが定義した変更の理由しか選択できないようにするには、**Reason Prompt**列および**Predefined Reasons Only**列のチェックボックスを選択してください。**Predefined Reason** _ 列では、最大10件の理由が選択できます。

ヒント！ 事前規定情報を加えるには、**Add Predefined Reasons**をクリックします。

- ・ イベントの電子署名が必要な場合、**E-Sig**列のチェックボックスを選択します。

5. **Save**をクリックします。

6. **Make Active**をクリックします。

監査マップが適用されると、監査マップは有効になります。有効な監査マップの監査証設定によって、どのイベントがこのポイントから監査証跡に記録されたかを特定します。

View the Embedded Audit Configuration

Results Tableに対して使用される監査証の設定は、Results Tableが作成されるときに、Results Table ファイルに組み込まれます。この設定は変更できません。監査マップ名の隣に表示されるタイムスタンプは、設定を埋め込むために使用した監査マップが最後に保存された時刻を示しています。

1. Results Tableを開きます。

2. **Audit Trail > View Session Audit Map**をクリックします。

☒ 5-8 Session Audit Map

Session Audit Map (ResultsTable1.qsession)

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

Description:

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

Close

Aboutの項目を除いて、このメニューは表 6-1 にリストされた項目が含まれます。これらのファイルは自動的にインストールされ、<drive>:\Program Files\AB SCIEX\MultiQuant 3\Help フォルダでも参照することができます。

ドキュメントまたはフォルダ（あるいはこれらに対するショートカット）は Help フォルダにコピーされ、メニューに自動的に表示されます。

表 6-1 Help Menu

Menu項目	説明
Install License	クリックしてMultiQuant™ MDActivationダイアログを開きます。
Verify Installation	クリックしてファイルを検証しインストールします。
Software Reference Guide	本ソフトウェアの特徴と機能について説明します。
ソフトウェアリリースノート	ソフトウェアおよびソフトウェアをインストールする手順について情報を提供します。
About	プログラムバージョン、著作権、およびその他のプログラム情報、インストールされたライセンス機能に関する情報を表示します。

Results Tables

7

Results Tableはデータ表示およびデータエクスポートのスタートポイントになります。**New Results Table**ウィザードを使用するか、**File > New Results Table**をクリックし、Results Tableを作成します。[Results Table Dialogs](#) 該当ページ 43を参照してください。

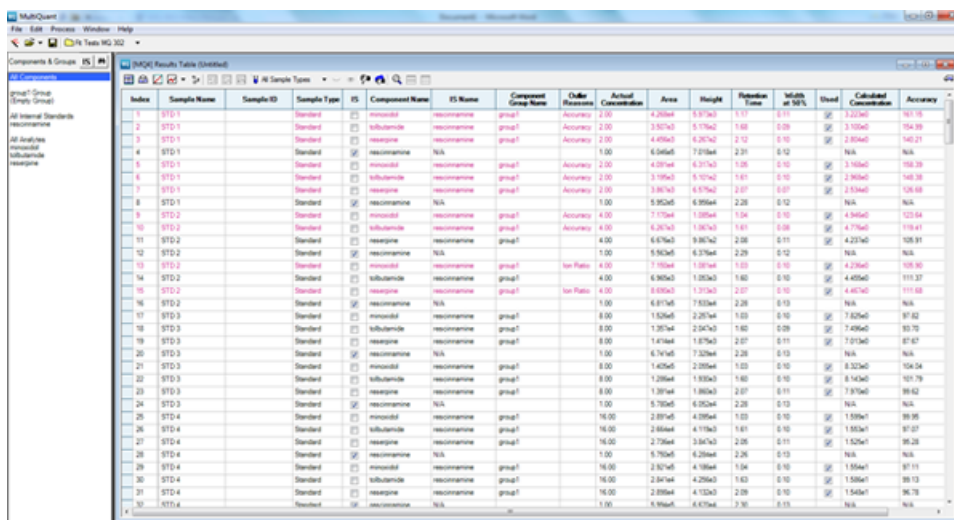
注： **Sample Name**および**Sample ID**列は\/: * ? " < > |=を含むことはできません。

Results Tableに対して使用される監査証の設定は、**Results Table**が作成されるときに、**Results Table**ファイルに組み込まれます。この設定は変更できません。監査マップ名の隣に表示されるタイムスタンプは、設定を埋め込むために使用した監査マップが最後に保存された時刻を示しています。

注： データを動かした場合、全プロジェクトを動かすことで、ファイル構造を維持します。ファイルおよびフォルダ構造が維持されていない場合、**Results Table**またはクロマトグラムは表示することができません。

最初に選択した各サンプルごとに各コンポーネントについて別の行に示されます。

図 7-1 Results Tableの例



- ・ **IS**、**Component Name**、および**IS Name**の列は分析試料に関する情報を含んでいます。
- ・ 選択したチェックボックスは、サンプルに対する内部標準を示しています。
- ・ **Column Settings**ダイアログを使用して**Results Table**のどの列を表示するかを選択します。[Column Settings](#) 該当ページ 41を参照してください。

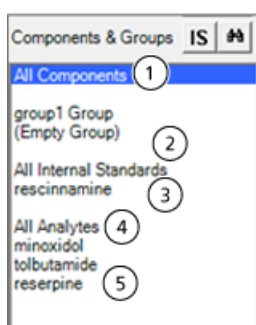
- ・ 2つの列見出しを分けている線をドラッグし、列の幅を変更します。この情報は自動的に保存され、ユーザーが前回に保存した**Results Tables**を開くときに適用されます。
- ・ 列ヘッダーをクリックして新しい位置にその列をドラッグすると列の順序を変更できます。この情報は自動的に保存され、ユーザーが前回に保存した**Results Tables**を開くときに適用されます。
- ・ ユーザーはResults Tableを制限できるため、特定の分析試料または内部標準に一致する行のみが表示されます。ツールバーを使って、表示するサンプルタイプを制限します。
[Components & Groups List 該当ページ 38](#)および[Sample Type Filter 該当ページ 42](#)を参照してください。
- ・ **Peak Review**ペインによる同期など、ある種の操作は現在選択した行に適用されます。行を選択するには、初めの列の左側をクリックします。

Components & Groups List

Results Tableが開くと、現在のコンポーネントとグループのリストがメインウィンドウの左側に表示されます。このリストを使用して、どのコンポーネントが**Results Table**およびリンクされた**Peak Review**ペインまたは**Calibration**プロットで表示するかの変更を行います。

コンポーネントは単一の遷移または質量範囲として定義されています。Groupはコンポーネントが属するグループ名として定義されています。

図 7-2 Components & Groups List



項目	ラベル	説明
1	All Components	クリックすると、関連する Peak Review と Calibration が表示されている場合は、それに加えて使用可能なすべての分析試料と内部標準が Results Table に表示されます。
2	All Internal Standards	クリックすると、すべての内部標準が表示され、すべての分析試料が非表示になります。内部標準の定義がない場合は表示されません。

項目	ラベル	説明
3	Specific Internal Standards	個別の各内部標準の名前は、リストに存在します。これらの項目の1つをクリックすると、内部標準が表示され、他のすべてのコンポーネントが非表示になります。
4	All Analytes	すべての分析試料が表示され、すべての内部標準が非表示になります。内部標準が定義されていない場合は表示されません。
5	Specific Analytes	個別の各分析試料の名前は、リストに存在します。これらの項目の1つをクリックすると、分析試料が表示され、他のすべてのコンポーネントが非表示になります。

リストにある個別の項目をクリックすると、その項目に対するコンポーネントのみが表示されます。**Shift**または**Ctrl**を押して、複数の項目を選択します。これは、例えば2つの特定の分析試料のみを表示する場合に便利です。リストが有効な場合、上下矢印キーを使用して項目を動かします。

ヒント！ ペインの右端を左右にドラッグして、リストの幅を広くまたは狭くします。

Results Tableの列の実際の順序は、フィルタリングには影響されません。Results Tableは、定量化メソッドに示された順序で、最初にサンプル、次にコンポーネントになるようにプリセットされています。しかし、表は[ソフトウェアアイコン 該当ページ 161](#)で説明されているように特定の順序に並べ替えることも可能です。

Results Table右クリックメニュー

Results Tableを右クリックし、コンテキストメニューにアクセスします。次のコマンドが用意されています。

表 7-1 Results Table右クリックメニューオプション

Menu Option	説明
Column Settings	このコマンドを使用して、 Results Table 列を編集します。この変更は、プロジェクトのデフォルトとして保存されない限り、現在の Results Table にのみ適用されます。
Add Custom Column	新しい編集可能な列を表に追加します。セルに直接入力するか内容を貼り付けて、列に入力します。コメント、カスタム算出の結果など、どのテキストも入力可能です。
Rename Custom Column	既存のカスタム列の名前を変更します。このコマンドを使用する前に、列ヘッダーをクリックし、カスタム列を選択します。

表 7-1 Results Table右クリックメニューオプション (続き)

Menu Option	説明
Remove Custom Column	既存のカスタム列を削除するために使用します。このコマンドを使用する前に、列ヘッダーをクリックし、カスタム列を選択します。
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	2つ以上の分析試料があり、すべての分析試料が同じ濃度でこれらのサンプルに存在する場合、サンプルタイプが Standard のすべての分析試料に対する Actual Concentration フィールドを設定するためにショートカットが作られます。 Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All 該当ページ 40を参照してください。
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	分析試料ではなく内部標準に適用されること以外は Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All の機能と同様です。
Set 'Used'	このコマンドを使用し、絶対定量を実行し、ある分析試料について、キャリブレーションカーブの計算で特定の Standard サンプルを使用すべきかどうかを判断します。 初めの2項目は、 Results Table で現在選択されている行に対して Used フィールドを選択またはクリアする目的で使用します。3つ目と4つ目の項目は、選択された行に対応する任意のサンプルにすべての分析試料を適用する操作を除き、同様の動作が実行されます。
Set Peaks to 'Not Found' for Selected Rows	このコマンドを使用して、現在選択されている行のピーク積分をクリアします。

Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All

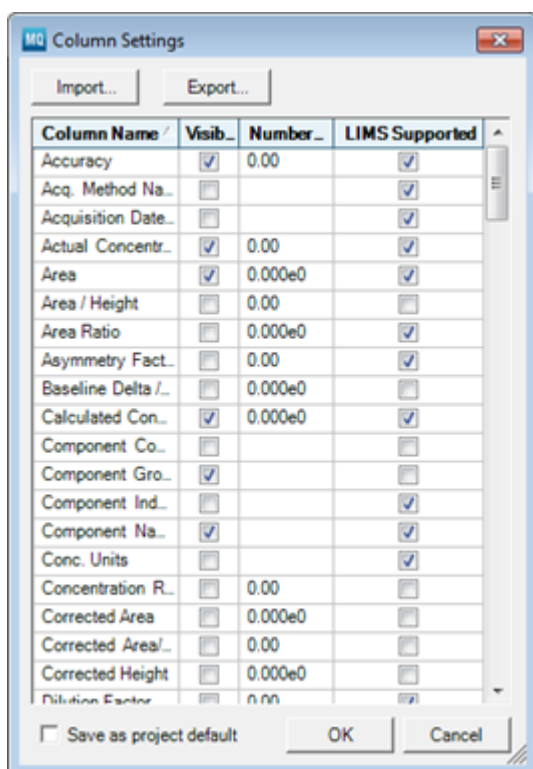
1. [Components & Groups List](#) 該当ページ 38を使用して、表の表示を特定の1つの分析試料だけに制限します。
2. オプションで**Sample Type Filter**を使用して、**Standard**サンプルだけを表示します。[Sample Type Filter](#) 該当ページ 42を参照してください。
3. 分析試料の実際の濃度を指定するには、セルに直接入力するか、またはテキストフォーマットで濃度が利用できる部分があれば列を選択して、**Paste**を選択します。
4. **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All**をクリックします。
5. 必要に応じて、全コンポーネントと全サンプルタイプの表示に戻ります。

Column Settings

列名が途中で切れている場合、フィールドの上にカーソルを移動させて、ツールチップに列名を表示させます。

数値フィールドでは、科学的ではない通知にはフォーマット0.00を使用し、科学的な通知にはフォーマット0.00e0を使用します。少数点を変更して、表示される数字の精度を示します。ピリオド「.」のみが小数点の記号として使用できます。桁の区切りには対応していません。

図 7-3 Column Settingsダイアログ



フィールド	説明
Import	クリックすると、 Export を使用して以前に保存した列設定ファイルを選択できます。ダイアログの各フィールドは、選択したファイルの情報を更新するために更新されます。
Export	クリックすると、現在の列設定をファイルに保存できます。これにより、ユーザーは異なる列設定を切り替えられます。
Column Name	列の名前はアルファベット順で表示されます。 Results Table Columns 該当ページ 55 を参照してください。
Visible	選択すると、列が表示されます。そうでないと、列が非表示になります。

Results Tables

フィールド	説明
Number Format	数値フィールドでは、科学的ではない通知にはフォーマット0.00を使用し、科学的な通知にはフォーマット0.00e0を使用します。精度を表示させるには、小数点を変更します。
LIMS Supported	LIMS Supported行の選択はLIMSによって事前定義されており、列選択は変更できません。
Save as project default	選択すると、今後のResults Tableで列設定を使用できます。

Sample Type Filter

表 7-2 Sample Type Filterの説明

フィルターの種類	説明
All Sample Types	すべてのサンプルのタイプが表示されます。
Unknowns	未知のサンプル（未知の濃度を持つ通常のサンプル）だけが表示されます。標準サンプルを使用すると、その濃度はキャリブレーションカーブから逆算され、算出濃度として結果表に報告されます。 回帰方程式 該当ページ 132 を参照してください。
Standards	既知の濃度を持つサンプルだけが表示されます。このようなサンプルは、キャリブレーションカーブの作成で使用されます。
Quality Controls	品質管理サンプルだけが表示されます。このようなサンプルは既知の濃度を持ち、キャリブレーションカーブの精度を確認する目的で使用されますが、カーブの実際の構築には影響しません。
Standards & QCs	標準と品質管理サンプルの両方が表示されます。
Unknowns, Standards & QCs	未知、標準、品質管理の各サンプルが表示されます。
Blanks	ブランクサンプルだけが表示されます。一般的には、内部標準化合物（使用されている場合）を含み、分析試料を含まないサンプルであり、通常のサンプル調製手順を通じて生成されたものです。このようなサンプルは、キャリブレーションカーブの構築では使用されません。これを含めるには、サンプルタイプとしてStandardを選択し、Actual Concentrationを0に設定します。
Double Blanks	ダブルブランクサンプルだけが表示されます。内部標準と分析試料のどちらも含まれていないサンプルです。

表 7-2 Sample Type Filterの説明 (続き)

フィルターの種類	説明
Solvents	Solventサンプルだけが表示されます。通常のサンプル調製手順を通じて生成されたものではないダブルブランクです。
Blanks, Double Blanks & Solvents	全種類のブランクサンプル（ブランク、ダブルブランク、溶媒の各サンプル）が表示されます。

非表示行の確認

Results Tableでは特定のコンポーネントについて、行の表示は対応するMRM遷移が利用できるサンプルだけに限られます。特定のサンプルに利用できない遷移を伴うコンポーネントでは、未使用の行が表中に存在しますが、デフォルトでは非表示になっています。

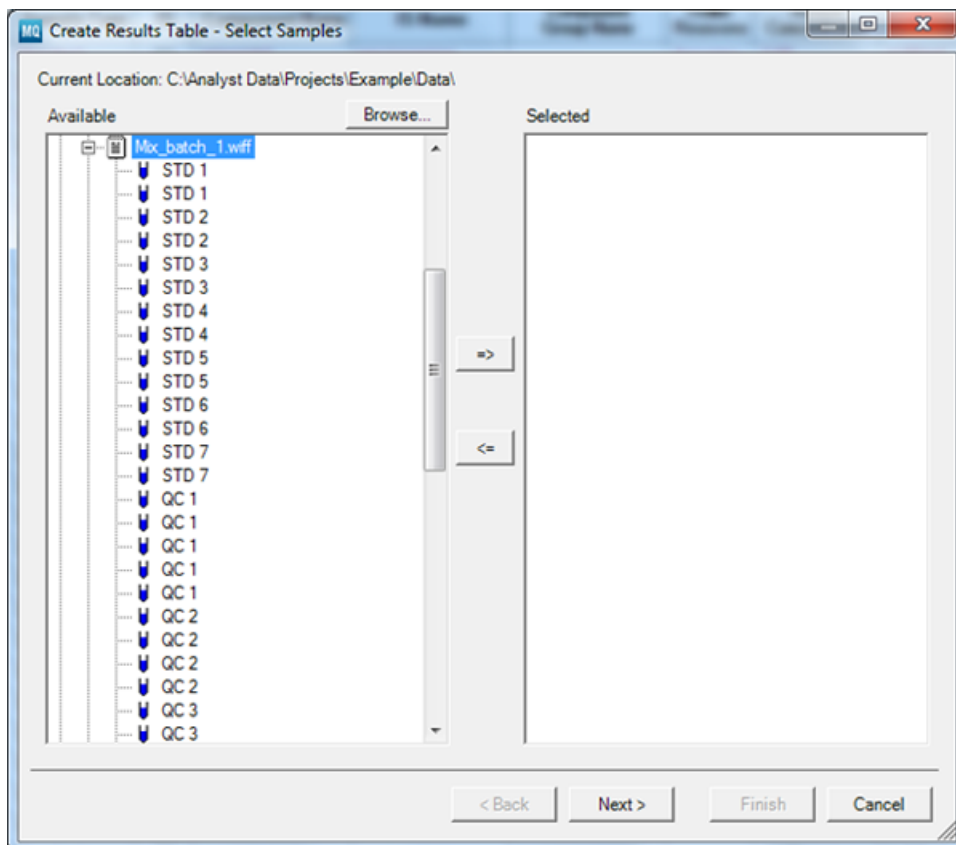
1. 表示されていない場合、**Results Table**の**Peak Comment**列を表示します。
2. この列を使って表を並べ替えます。
3. **Not Present**コメントを使って（隣接するようになった）行を選択します。
4. **Hide selected rows(s)**アイコンをクリックします。[ソフトウェアアイコン 該当ページ 161](#)を参照してください。

Results Table Dialogs

Select Samples

処理するwiffファイルからサンプルを選択します。

図 7-4 Create Results Table - Select Samplesページ

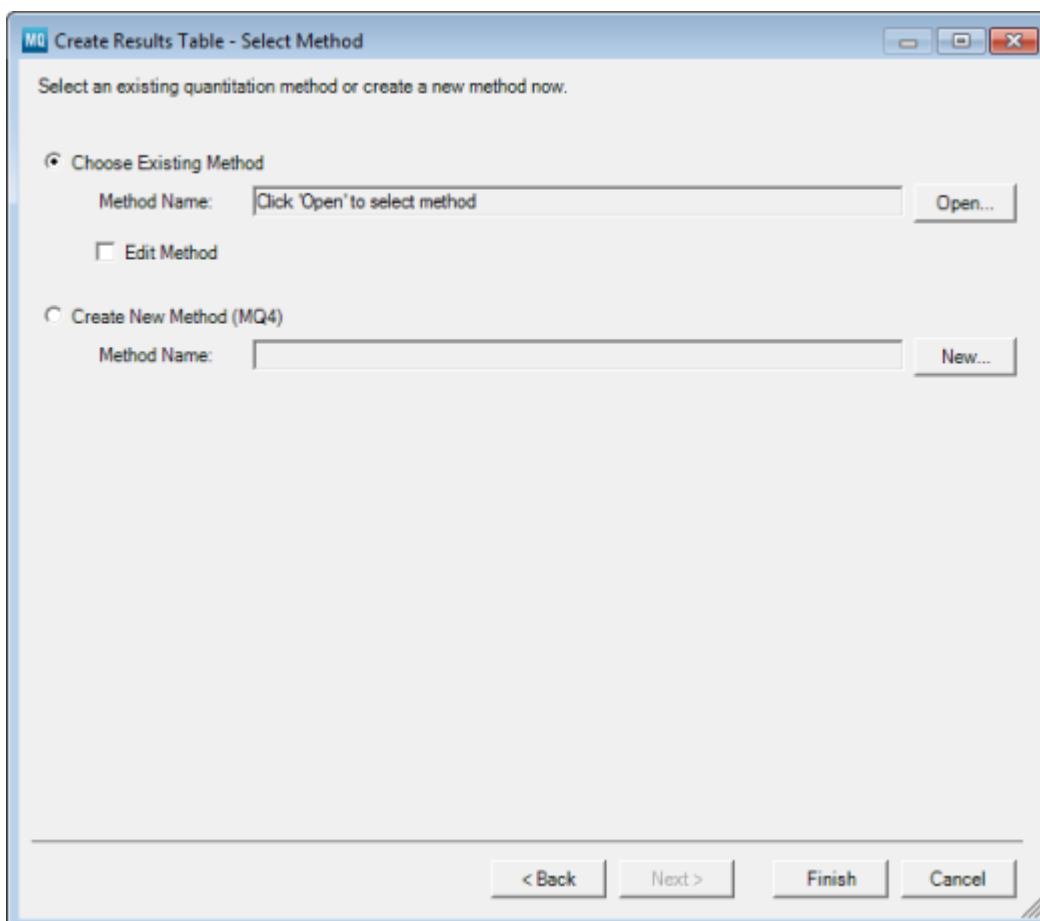


- ・ **Available**ペインは、選択したフォルダに対する**Data**フォルダで利用できるサブフォルダ、wiffファイル、およびサンプルを表示します。
- ・ 個別のフォルダを展開し、サブフォルダやwiffファイルを確認します。wiffファイルを展開した場合、ファイルを開くと利用できるサンプルが表示されます。
- ・ 矢印を使用して、サンプルの追加や削除を行います。
- ・ 個別のサンプルをダブルクリックする、サンプルまたはデータファイルを選択して「=>」ボタンをクリックする、または左側のペインから右側のペインにサンプルまたはデータファイルをドラッグすることで、サンプルを選択します。**Shift**または**Ctrl**を押して、複数のファイルまたはサンプルを、それらが移動される前に選択します。

Select Method

定量化メソッドを選択します。既存のメソッドを選択するが、編集しない場合は、進行バーが表示され選択されたサンプルが処理されます。このプロセスの最後に**Results Table**が作成されます。

図 7-5 Create Results Table - Select Method ページ



ラベル	説明
Choose Existing Method	Open をクリックし、既存の定量化メソッドを選択します。
Edit Method	コマンドを選択し、既存のメソッドを編集します。ウィザードの次のページは既存のメソッドからの情報が入力されており、必要な場合は修正できます。
Create New Method	New をクリックし、定量化メソッドを作成します。挿入されたアルゴリズムは Integration Defaults ダイアログで選択されたアルゴリズムです。

Select Representative Sample

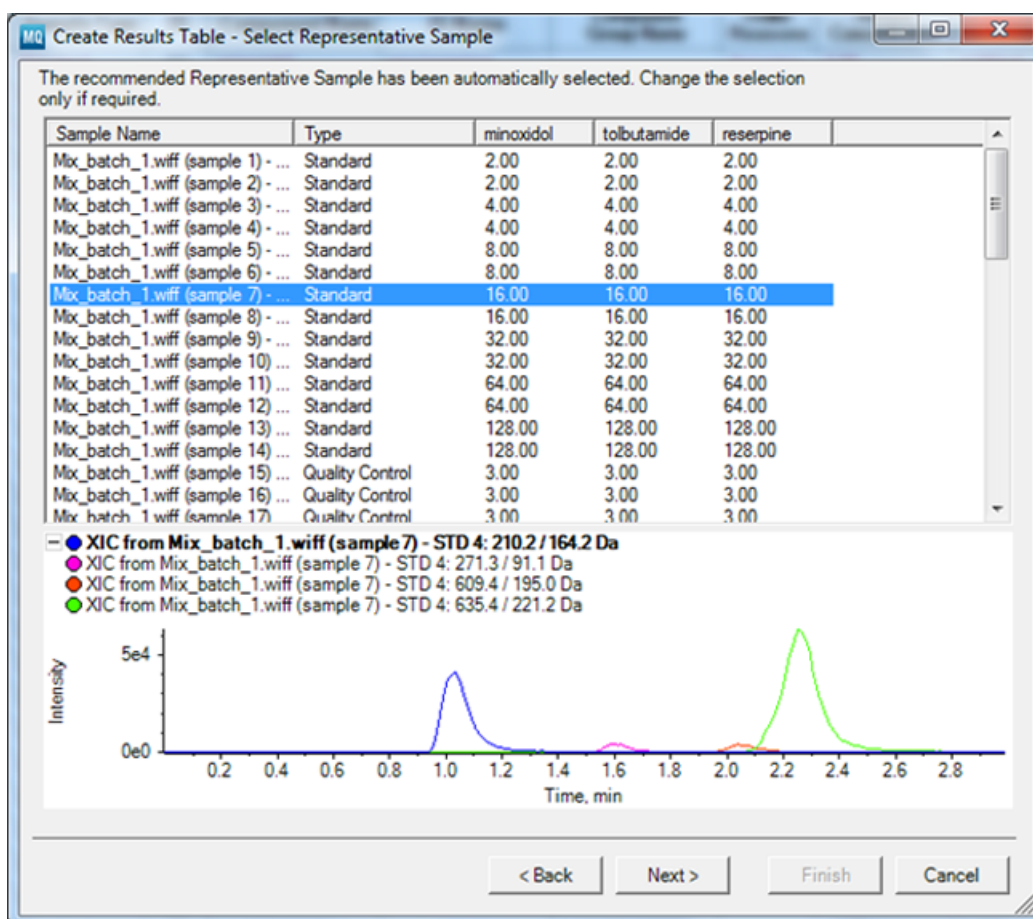
Select Representative Sample ページは、ピーク検出および積分パラメータを視覚的に設定する際に、クロマトグラムが表示される選択した代表サンプルを表示します。このサンプルは、定量化メソッドに含める化合物すべてを含んでいる必要があります。

Results Tables

サンプルを測定する前に、Analyst[®] MDソフトウェアBatch Editorでサンプルの種類および分析試料濃度を選択した場合、この情報は追加列として表示されます。

ソフトウェアはデフォルトでサンプルを選択します。選択したサンプルが適切ではない場合、別の代表サンプルを選択します。SignalFinder[™]アルゴリズムが選択されている場合、不正確な解析モデルを生成しないように、TICレベルが全サンプルで1.0e6を超えるときはソフトウェアによって推奨される代表サンプルはありません。ユーザーはこの場合、代表サンプルを手動で選択することができます。

図 7-6 Create Results Table - Select Representative Sampleページ



Define Components

Define Componentsページでは各分析試料および内部標準の行が示されます。使用するときには、分析試料および内部標準の名前を選択します。Define Components右クリックメニューオプション 該当ページ 48を参照してください。

図 7-7 Create Results Table - Define Componentsページ

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

Experiment: MRM (4 transitions)

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

< Back Next > Finish Cancel

ラベル	説明
Experiment	リストから処理する実験を選択してください。複数期間または複数実験のデータがある場合には、処理すべき実験をそれぞれ選択し、対応する実験のコンポーネントの表を記入します。
Row	現在の行番号を示します。
IS	行に規定したコンポーネントが分析試料（未選択）か内部標準（選択済み）かどうかを示します。
Name	コンポーネントの名前を示します。MRM実験には、 Q1/Q3 トランジション質量を使用して自動的に入力されます。さらに特定の名前をつけるには、フィールドに名前を入力します。

Results Tables

ラベル	説明
Group	行のコンポーネントが属するグループ名を示します。お互いに関連する分析試料または内部標準が同じグループにある場合、確認と操作を同時に行いやすくなります。これは、お互いに同じ保持時間であるもの、例えば同じ化合物に対して異なるMRM遷移を示すものに当てはまります。 グループ名を入力または自動でそれらが追加されます。 Define Components 右クリックメニューオプション 該当ページ 48 を参照してください。
IS Name	行に対して規定した分析試料に使用するべきオプションの内部標準の名前を示します。このフィールドは内部標準自体には適用されません。
Mass Info	MRM実験には、この列は Q1/Q3 が与えられており、行に対して規定したコンポーネントの質量ペアを示します。実験のために利用可能な遷移すべてを示すリストから必要なトランジションを選択します。通常、この列は利用可能なトランジションによって自動的に初期化されています。 プロファイル（スキャン）実験には、この列は Start - Stop が与えられており、行に対して規定したコンポーネントのXIC（抽出済みのイオンクロマトグラム）を算出するために使用した質量範囲を示します。ハイフンを使って別々の2つの質量の質量範囲を記入します。例えば、200-201や200-1など。後者のオプションでは、質量範囲は199.5-200.5になります。

Define Components右クリックメニューオプション

Define Componentsページを右クリックし、コンテキストメニューにアクセスします。次のコマンドが用意されています。

表 7-3 Define Components右クリックメニューオプション

Menu Option	説明
Clear	選択した行または列のコンテンツをクリアします。行番号の前の領域をクリックまたはドラッグして行を選択します。
Copy	選択した行または列をクリップボードにコピーします。
Paste	クリップボードのコンテンツを貼り付けます。

表 7-3 Define Components右クリックメニューオプション (続き)

Menu Option	説明
Find Component by Name	Name が文字列に一致するコンポーネントを選択します。一致するコンポーネントを見つけるために正確な文字列は必要ありません。これは、多くのコンポーネントがある場合、特定のコンポーネントを選択するために有効です。 スプレッドシートで初めに行を選択していない場合、検索は初めの行から始まります。そうでない場合、検索は選択した行の後ろに続く行から開始され、初めに戻ります。これは Name にその文字列を含む、2つ以上のコンポーネントがある場合に役に立ちます。初めの検索でコンポーネントを見つけられない場合、選択した初めのコンポーネントを残し、再び検索するとその表で別の一致が示されます。
Insert Row Above	現在選択している行のすぐ上に空白の行を1行挿入します。
Delete Selected Rows	現在選択している行を表から削除します。
Sum Multiple Ions	複数のMRM遷移またはフルスキャンの質量範囲に対するクロマトグラムの和です。コマンドを選択した後に、追加の質量列が Components 表に追加されます。特定の行で選択した質量は、対応する分析試料または内部標準について合計したXICの構築に使用されます。この機能を常に選択しておくことが推奨されます。
Groups	Groups Submenu 該当ページ 88を参照してください。
Internal Standards	内部標準サブメニュー 該当ページ 90を参照してください。

Define Integration

各コンポーネントの予測保持時間およびその他のピーク検出パラメータを選択します。

左側のリストはウィザードの前ページで規定した各コンポーネントの登録を示しています。代表サンプルに一致するクロマトグラムおよび現在の解析を表示するには特定の行をクリックします。上下の矢印キーまたはスクロールホイールを使ってリストをスクロールします。一般的に、すべてのコンポーネントを解析の正確性を示すために表示することが推奨されます。しかし、多くのコンポーネントがある場合、**Highlight Components with Uncertain RT** コマンドを使い、表示する数を制限します。

注：2、3個以上あるコンポーネントの場合、ピーク検出パラメータが妥当なデフォルトに設定されていることを確認してからウィザードの実行を行い、各コンポーネントのパラメータを調整しないようにしてください。

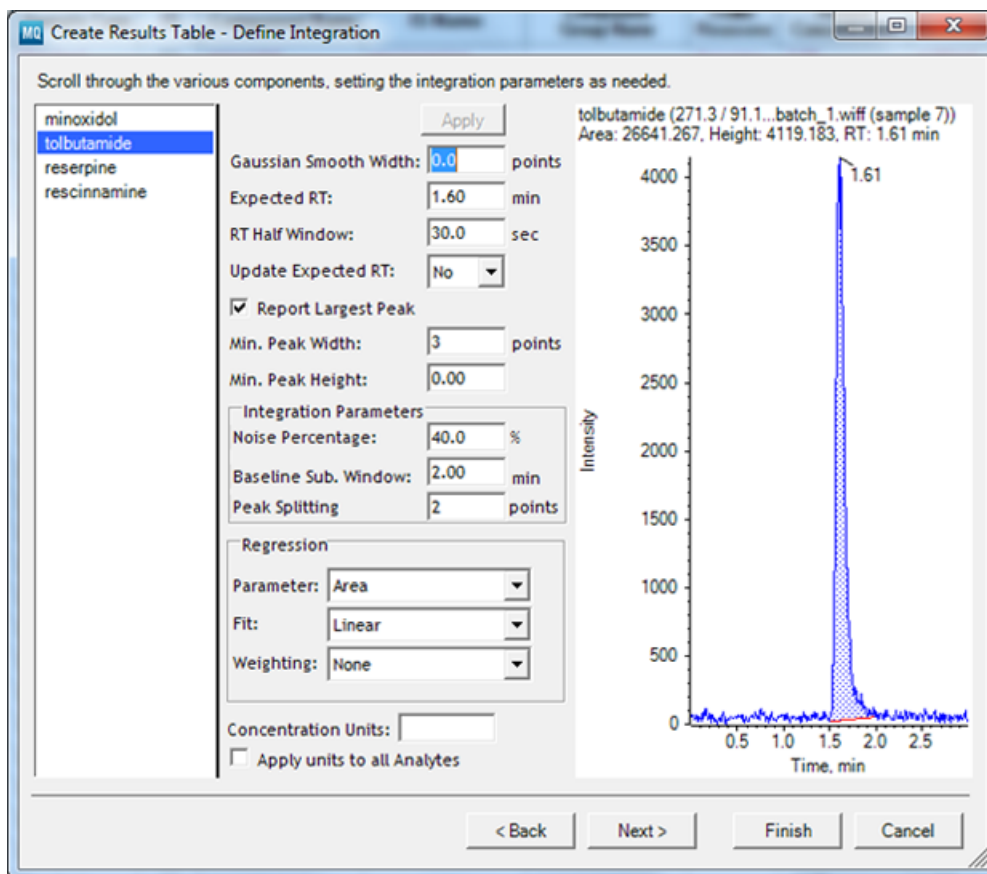
右クリックで利用できるコマンドを表示します。[Define Integration右クリックメニュー](#) 該当ページ 51を参照してください。

Results Tables

Regressionグループでは、Results Tableを作成してからすべてまたは選択したコンポーネントのキャリブレーションオプションを変更してください。デフォルトの濃度の単位および回帰パラメータを設定することで、これらを毎回調整する必要がなくなります。

ヒント！ズームをするには、グラフのX軸またはY軸の領域をドラッグします。あらかじめ設定したビューに戻るには、コンテキストメニュー（**Home Graph Axes**）または軸の領域でダブルクリックします。

図 7-8 Create Results Table - Define Integrationページ



ラベル	説明
Apply	必要であれば、任意のコンポーネントに対するピーク検出パラメータを調整します。新しいResults Tableを作成する場合、任意のコンポーネントの指定のパラメータは、データが解析される際にすべてのサンプルのコンポーネントに適用されます。 Integration Algorithm Parameters 該当ページ 126 を参照してください。
Expected RT	初めは、クロマトグラムの最大強度のポイントの保持時間に設定します。通常、この設定は必要とするピークです。しかし、異性体が存在する場合、この値の調整が必要な場合があります。値を調整するためには、 Expected RT フィールドに新しい値を入れ、 Apply をクリックします。代替の方法として、グラフをクリックし、目的のピークの上をドラッグします。グラフ内でカーソルを間違えてドラッグしないでください。予測保持時間が調整される可能性があります。
Parameter	Area または Height を選択。
Fit	さまざまなフィットの種類については、 回帰方程式 該当ページ 132 で説明されています。
Weighting	重み付けの種類については、 Weighting Factors 該当ページ 133 で説明されています。
Concentration Units	分析試料および内部標準に対して使用する濃度の単位を入力します。相対的定量を行う場合、この欄はブランクのままにします。ウィザードは、同じ単位がすべてのコンポーネントに対して使用されるとみなします。この場合に当てはまらない場合は、 Quantitation Method Editor を使用します。
Apply units to all Analytes	ユーザーは各コンポーネントに対する濃度の単位を記入することができます。同じ単位をすべてのコンポーネントに適用するには、このチェックボックスを選択します。この情報は Concentration Units と一致していなければなりません。

Define Integration右クリックメニュー

Define Integrationページを右クリックし、コンテキストメニューにアクセスします。次のコマンドが用意されています。

表 7-4 Define Integration右クリックメニューオプション

Menu Option	説明
Find Component by Name	Components スプレッドシートの行を選択する代わりにコンポーネントリストの個々の項目を選択するという違いはありますが、 Define Components ページから利用できるコマンドと同じです。
Highlight Components with Uncertain RT	デフォルトの予測保持時間（各クロマトグラムの最大強度を有するピークのRT）が不正確なコンポーネントを強調するために使われます。数個のコンポーネントのみの場合、個別にそれぞれを確認し、このコマンドを使用しないでください。一方で、多くのコンポーネントがある場合、このコマンドを使用してクロマトグラムに2つ以上の重要なピークが存在するコンポーネントだけを視覚的に確認します。 Highlight Componentsダイアログ 該当ページ 92 を参照してください。
Home Graph Axes	拡大したグラフをすべてのデータが見えるホームビューに戻します。
Overlay Other Components for Group	<p>さまざまなコンポーネントが複数のグループに割り当てられており、特定のグループに割り当てられたコンポーネントが同じ保持時間を有すると予測される場合、このコマンドを使用して、クロマトグラムをオーバーレイします。例として、コンポーネントが同じ実在の化合物について異なるMRM遷移を表す場合があげられます。</p> <p>選択した場合、積分パラメータが定義されている現在のコンポーネントのクロマトグラムは実線の青色トレースを使用して描かれ、解析されたピーク領域が表示されます。同じグループの別のコンポーネントについて、解析されたピーク領域にないクロマトグラムは、点線を使って重ねて表示されます。</p>
Update Retention Times	<p>前回作成した定量化メソッドの予測保持時間をリセットするために使用します。既存の定量化メソッドが開いており、Set New Typical Sampleが選択されている場合、表示されているクロマトグラムは新しいサンプルに対応しますが、予測保持時間はそのまま変更されません。</p> <p>各コンポーネントについて、その予測保持時間は、指定した幅のウィンドウ内で元の予測保持時間を中心とした最大強度のピーク保持時間に一致するように更新されます。</p> <p>Update Retention Timeダイアログ 該当ページ 93を参照してください。</p>

Outlier Settings

Standards、**QCs**、**Ion Ratio**、および**Calculated Concentration**の精度に関する外れ値にフラグをつけることができます。次のコマンドが用意されています。

図 7-9 Outlier Settingsダイアログ

MQ Create Results Table - Outlier Settings

Set criteria for flagging outliers.

☒ Accuracy for Standards

Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std): 20 %

Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ: 15 %

☒ Accuracy for QCs

Max. Accuracy Tolerance for QC: 15 %

☒ 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

ラベル	説明
Accuracy for Standards	Standard サンプルの許容精度を編集します。
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	検査室の標準操作手順と一致する値から Standard サンプルの許容精度を編集します。
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	検査室の標準作業手順がこの Standard に対して異なる許容精度を示す場合、一番低い濃度の Standard の許容精度を編集します。
Accuracy for QCs	Quality Control サンプルの許容精度を編集します。
Max. Accuracy Tolerance for QC%	検査室の標準操作手順と一致する値から Quality Control サンプルの許容精度を編集します。
Ion Ratio	コンポーネントがグループに割り当てられている場合のみ利用可能です。ピーク領域またはピーク高さのイオン比を使用するために選択します。ピーク領域またはピーク高さは、定量化メソッドの展開中に回帰パラメータを選択する際に設定されます。

Results Tables

ラベル	説明
Calculated Concentration	既知の濃度の Standard サンプルを使用する場合、キャリブレーションカーブから濃度を逆算したものです。回帰方程式は、様々な回帰の種類と重み付けについて回帰がどのように行われるかを表します。
Component	全サンプルの分析試料または内部標準。
IS	選択した内部標準。 Ion Ratio チェックボックスが選択されている場合にのみ利用可能です。
Group	同じ保持時間を有するコンポーネント（すなわち、同じ化合物の異なる遷移）はグループ化することができます。 Ion Ratio チェックボックスが選択されている場合にのみ利用可能です。
Ion Ratio Tolerance (%)	デフォルト設定を使用するか、検査室の標準操作手順に従ってこの設定を編集します。 Ion Ratio チェックボックスが選択されている場合にのみ利用可能です。
Lower Limit of Calculated Concentration	許容される濃度範囲の下限值を入力します。この値よりも低い Calculated Concentration のあるサンプルは、濃度外れ値としてフラグが立てられます。
Upper Limit of Calculated Concentration	許容される濃度範囲の上限値を入力します。この値よりも高い Calculated Concentration のあるサンプルは、濃度外れ値としてフラグが立てられます。

Outlier Settingsページを右クリックし、コンテキストメニューにアクセスします。

表 7-5 **Outlier Settings**右クリックメニューオプション

ラベル	説明
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	すべての分析試料が同じ基準を有するのであれば、算出濃度の下限值をすべての分析試料に適用します。
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	すべての分析試料が同じ基準を有するのであれば、算出濃度の上限値をすべての分析試料に適用します。

Results Table Columns

注： **Sample Name**や**Sample ID**などのサンプル情報の重要な列がいくつかあり、ユーザーが**Results Table**列の設定をカスタマイズする際にこれらの列は隠れないようにしなければいけません。

数値フィールドでは、科学的ではない通知にはフォーマット0.00を使用し、科学的な通知にはフォーマット0.00e0を使用します。少数点を変更して、表示される数字の精度を示します。ピリオド「.」のみが小数点の記号として使用できます。桁の区切りには対応していません。

表 7-6 Results Table Columns

ラベル	説明
Accuracy	既知濃度の Standard サンプルを使用する場合、 Standard サンプルと Quality Control サンプルは以下のように定義されます。 $100\% \times (\text{算出濃度}) / (\text{実際の濃度})$ その他のサンプルタイプでは、値はN/Aとなります。
Acq. Method Name	サンプルを測定するために使用される測定メソッドの名前。
Acquisition Date & Time	wiffサンプルを測定した日付と時刻。
Actual Concentration	Standard サンプルと Quality Control サンプルについて、予測される既知の濃度を示します。
Area	検出されたピーク領域。ピークが検出されていない場合、値はN/Aとなります。
Area / Height	高さで割った検出されたピーク領域。ピークが検出されていない場合、値はN/Aとなります。
Area Ratio	内部標準を使用する分析試料について、 Area 対 IS Area の比を示します。内部標準、または内部標準を加えていない分析試料については、値はN/Aとなります。
Asymmetry Factor	ピークの中心線からバックスロープまでの距離をピークの中心線からフロントスロープまでの距離で割った値で、最大ピークの高さの10%で行われたすべての測定を使用したもの。
Baseline Delta / Height	実際のピークの高さに対するベースラインの高さの差（ピークの開始地点と終了地点）の絶対値を表示します。値がおよそ0.1を超える場合は、ベースラインが正しく積分されていない可能性があるため、ピークをレビューする必要があります。

Results Tables

表 7-6 Results Table Columns (続き)

ラベル	説明
Calculated Concentration	既知の濃度の Standard サンプルを使用する場合、キャリブレーションカーブから濃度を逆算したものです。回帰式が、様々な回帰タイプと重み付けをどのように実行するかについては、 回帰方程式 該当ページ 132 を参照してください。
Component Comment	すべてのサンプルに対する分析試料または内部標準で適用される任意のコメント。
Component Group Name	分析試料または内部標準に関連付けられているグループ名（ある場合）。
Component Index	元の定量化メソッドにある分析試料または内部標準のインデックス。このフィールドを基準にして表を並べ替えるために便利です。
Component Name	分析試料または内部標準の名前。
Conc. Units	濃度の単位。
Concentration Ratio	内部標準を使用する分析試料について、 Actual Concentration 対 IS Actual Concentration の比を示します。内部標準、または内部標準を加えていない分析試料については、値はN/Aとなります。
Corrected Area	検出されたピーク領域。ピークが検出されていない場合、値はN/Aとなります。
Corrected Area / Height	高さで割った検出されたピーク領域。ピークが検出されていない場合、値はN/Aとなります。
Corrected Height	検出されたピークの高さ。ピークが検出されていない場合、値はN/Aとなります。
Dilution Factor	サンプルを希釈するときの係数。この係数はキャリブレーションカーブの計算に使用されます。 回帰方程式 該当ページ 132 を参照してください。
End Time	検出されたピークの分単位の終了保持時間。
End Time at 10%	強度がピーク高さの10%のところでピークの裏側に沿った分単位の時間。
End Time at 5%	強度がピーク高さの5%のところでピークの裏側に沿った分単位の時間。
Expected Ion Ratio	すべてのサンプルに対する予測されるイオン比。
Expected RT	定量化メソッドでの元の予測される分単位の保持時間。
Height	検出されたピークの高さ。ピークが検出されていない場合、値はN/Aとなります。

表 7-6 Results Table Columns (続き)

ラベル	説明
Height Ratio	内部標準を使用する分析試料について、 Height 対 IS Height の比を示します。内部標準、または内部標準を加えていない分析試料については、値はN/Aとなります。
Index	これは、元の並べ替えられていない順序での行のインデックスです。表が別の列に基づいて並べ替えられている場合、表はこの列を並べ替えて元の順序に戻すことができます。
Injection Volume	オートサンプラーによってmL単位で注入されるサンプル量です。
Integration Type	<ul style="list-style-type: none">・ Baselineの値は、スタンドアローンのピークが通常の方法で積分されたことを示します。・ Valleyの値は、2つの隣接したピークがあり、信号がそれらの間にあるベースラインに戻らなかったことを示します。・ Manualの値は、ピークが手動で積分されたことを示します。・ N/Aの値は、ピークが検出されなかったことを示します。

表 7-6 Results Table Columns (続き)

ラベル	説明
Ion Ratio	<ul style="list-style-type: none"> ・ Ion Ratiosは、1つの分析試料から少なくとも2つのMRM遷移が1つのグループに収集されたときに特定されます。 ・ サブグループにある最初のコンポーネントは、Quantifierイオンとして使用されます。残りのコンポーネントは、Qualifierイオンとして使用されます。 ・ イオン比 = (クオリファイアのピーク面積または高さ) / (クオンティファイアのピーク面積または高さ) ・ サブグループ <ul style="list-style-type: none"> ・ グループのすべての分析試料は、Analyteサブグループを構成します。 ・ グループのすべての内部標準は、ISサブグループを構成します。 ・ コンポーネントがグループのメンバーではない場合は、Ion RatioはN/Aとなります。 ・ ピークが見つからない場合は、Ion RatioはN/Aとなります。 ・ AnalyteおよびISサブグループの両方にあるすべてのコンポーネントに適用され、Quantifierは、それ自体がQualifierに対応しています。 ・ QuantifierまたはQualifierのピークのどちらかで積分値が変わった場合、Ion Ratioが再度計算されます。 ・ ピーク領域またはピーク高さのどちらかについて計算できます。Results Tableにある最初のコンポーネント（コンポーネントのインデックスが1）について.qmethodの回帰部分でAreaが使用されている場合、Results Table全体のIon Ratioの計算ではピーク領域が使用されます。Heightが最初のコンポーネントの回帰に使用される場合、ピーク高さが計算のために使用されます。
IS	チェックボックスが選択されている場合は、行のコンポーネントが分析試料ではなく内部標準であることを示します。
IS Actual Concentration	現在の分析試料と関連した内部標準の実際の濃度、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Area	現在の分析試料と関連した内部標準の領域、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Area / Height	現在の分析試料と関連した内部標準の Area 対 Height 比、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。

表 7-6 Results Table Columns (続き)

ラベル	説明
IS Baseline Delta / Height	現在の分析試料と関連した内部標準の Baseline Delta / Height 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Comment	現在の分析試料と関連した内部標準への任意のコメント、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Corrected Area	現在の分析試料と関連した内部標準の補正領域、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Corrected Area / Height	現在の分析試料と関連した内部標準の Corrected Area / Corrected Height 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Corrected Height	現在の分析試料と関連した内部標準の Corrected Height 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS End Time	現在の分析試料と関連した内部標準の End Time 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Expected RT	現在の分析試料と関連した内部標準の Expected RT 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Height	現在の分析試料と関連した内部標準の Height 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Integration Type	現在の分析試料と関連した内部標準の Integration Type 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Mass Info	現在の分析試料と関連した内部標準の Mass Info 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Name	現在の分析試料と関連した内部標準の Component Name 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Peak Comment	現在の分析試料と関連した内部標準への Peak Comment 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Quality	現在の分析試料と関連した内部標準の質、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Region Height	現在の分析試料と関連した内部標準の質メトリック、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Retention Time	現在の分析試料と関連した内部標準の Retention Time 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。

Results Tables

表 7-6 Results Table Columns (続き)

ラベル	説明
IS Signal / Noise	現在の分析試料と関連した内部標準の Signal / Noise 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Start Time	現在の分析試料と関連した内部標準の Start Time 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Total Width	現在の分析試料と関連した内部標準の Total Width 、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
IS Width at 50%	現在の分析試料と関連した内部標準の50%幅、あるいは内部標準または内部標準を加えていない分析試料についてはN/A。
Mass Info	コンポーネントと関連する質量情報。MRM実験では Q1/Q3 、プロファイル（フルスキャン）実験では Start - Stop を示します。
Modified	チェックマークは、ピーク検出パラメータが、 Peak Review ペインを使用して定量化メソッドで示される元の値から修正されたことを示します。
Operator Name	サンプルを測定した機器のオペレータの名前。
Original Filename	wiffファイル名。
Outlier Reasons	<p>外れ値の基準が定量化メソッドで設定されている場合、この列にはコンポーネントの事前設定した許容範囲外にあると検出された基準が示されます。</p> <p>Outlier Reasons列は、定量化メソッドにあるOutlier Settingsにのみリンクしていて、Results Tableの事前設定した列の1つです。</p> <p>外れ値にフラグが立てられる理由：</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ Accuracy ・ Concentration ・ Ion Ratio クオリファイアではなくクオンティファイアのピークがある場合、イオン比は両方のコンポーネントについてフラグが立てられます。クオンティファイアではなくクオリファイアのピークがある場合、イオン比は両方のコンポーネントについてフラグが立てられます。どちらにもピークがない場合、いずれのコンポーネントでもフラグは立てられません。 ・ 予測されるイオン比を計算できない。
Peak Comment	行の任意のコメント。

表 7-6 Results Table Columns (続き)

ラベル	説明
Plate Number	データの取得で使した Batch Editor で元々指定されているオートサンプラーのプレート番号。
Points Across Baseline	ピークの開始から終了までのスキンの数。
Points Across Half Height	高さの約50%でピークを横切るスキンの数。
Quality	このメトリックは解析されたピークの質を示します。 <ul style="list-style-type: none"> ・ ゼロに近い値は、ピークがほぼ解析されなかった（または実在のピークが存在しなかった）ことを示します。 ・ 1.0に近い値は、ピークがうまく解析され確認する必要がないことを示します。
Rack Number	データの取得で使した Batch Editor で元々指定されているオートサンプラーのラック番号。
Region Height	実際に検出したピーク付近で最大のピークを示すピークの高さ。 Quality フィールドとの接合に便利。妥当な Region Height を示す低品質のピークは確認する必要があります。 Region Height が小さい場合、有意なピークが存在したとは言えません。
Relative RT	内部標準を使用している分析試料について、これは Retention Time 対 IS Retention Time の比を示します。内部標準、または内部標準を加えていない分析試料については、値はN/Aとなります。
Retention Time	検出されたピークの分単位の実際の保持時間。
Sample Comment	サンプルについての任意のコメント。
Sample ID	サンプルについての任意のID。これは、データを取得するために使用された Batch Editor で元々指定された値から初期化されたものです。
Sample Index	現在のサンプルのインデックス。
Sample Name	サンプルの任意の名前。これは、データを取得するために使用された Batch Editor で元々指定された値から初期化されたものです。
Sample Type	サンプルのタイプ。 Sample Type Filter 該当ページ 42 を参照してください。

表 7-6 Results Table Columns (続き)

ラベル	説明
Signal / Noise	<p>検出されたピークのピーク高さ対クロマトグラムに存在するノイズ比の推定。</p> <p>SignalFinder積分アルゴリズムを使用する場合、ノイズは計算による相対ノイズおよびピークの頂点位置でのベースラインを使用して推定されます。MQ4積分アルゴリズムでも同様のアプローチが使用されますが、ベースラインはクロマトグラム全体を使用して推定されることは除きます。</p> <p>Relative Noise and Signal-to-Noise Calculations 該当ページ 156を参照してください。</p>
Slope of Baseline	ベースラインのドリフトを示します。
Start Time	検出されたピークの分単位の開始保持時間。
Start Time at 10%	強度がピーク高さの10%のところでピークの表側に沿った分単位の時間。
Start Time at 5%	強度がピーク高さの5%のところでピークの表側に沿った分単位の時間。
Tailing Factor	ピークのフロントスロープからバックスロープまでの距離をピークの中心線からフロントスロープまでの距離の2倍で割った値で、最大ピーク高さの5%で行われたすべての測定を使用したもの。
Total Width	ベースラインでのクロマトグラムの分単位のピーク幅。
Used	<p>Standardサンプルでは、チェックマークは対応する分析試料がキャリブレーションカーブの構築に現在使用されていることを示します。</p> <p>Quality Controlサンプルでは、チェックマークは分析試料がQC統計の計算に使用されていることを示します。その他のサンプルタイプでは、このフィールドは情報目的のみに使用されます。</p>
Vial Number	データの取得で使用したBatch Editorで元々指定されているオートサンプラーのバイアル番号。
Width at 10%	ピーク高さの10%で測定されたピークの幅。
Width at 5%	ピーク高さの5%で測定されたピークの幅。
Width at 50%	頂点の強度の半分で測定された検出ピークの分単位のクロマトグラムのピーク幅。

Peak Review

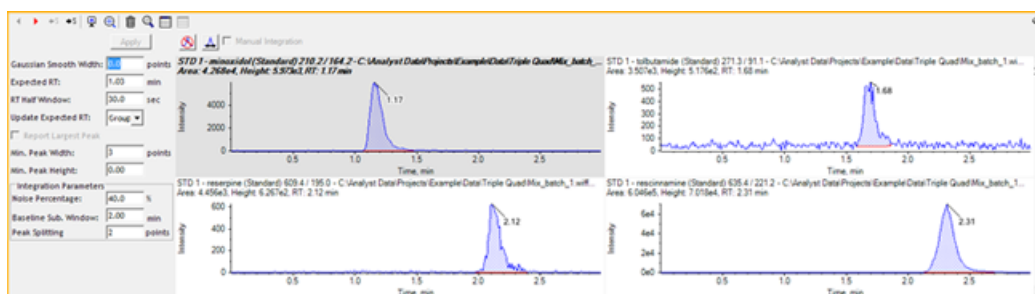
8

Peak Reviewペインを使用して、生のクロマトグラムを視覚的に検査し、それによりピーク検出プロセスの質を判定できます。**Results Table**が有効な場合、**Results Table**ツールバーの**Show Peak Review**アイコンをクリックし、**Peak Review**ペインを開きます。レビューは、自身の標準操作手順書（SOP）にあるピーク積分およびデータの合否の基準に従って定量的データをレビューする必要があります。

数字のグルーピングには対応していません。テキストボックス（例えば、積分パラメータ）およびグリッド（例えば、**Results Tables**）にある番号をグループ化しないでください。

増加した**Peak Review**は、オーバーレイしたクロマトグラムの**Ion Ratio**の合否を示しています。ユーザーは1個のクロマトグラムを拡大することもできます。

図 8-1 Peak Review Pane



Peak Reviewペインを使用して、ピーク検出パラメータを調整、または解析のために開始点と終点を手動で選択するかのいずれかによって適切に積分されなかったクロマトグラムを補正します。クロマトグラムが積分された後、**Results Table**が新しいピーク領域とその他のパラメータを使用して自動的に更新されます。

定量化メソッドには、積分用に選択したピークを定量するために使用される基準が含まれています。レビューは、ピーク積分および自身のSOP内のデータ合否基準に従って、定量データのレビューを行う必要があります。

Manual Integration

特定のクロマトグラムのピークを手動で解析した後にこのチェックボックスを選択すると、クロマトグラムが手動で解析されていることが表示されます。この状態の場合、ユーザーがチェックボックスをクリアすると、ピークの手動解析がキャンセルされ、ピークはメソッドパラメータによって自動的に再解析されます。

このチェックボックスと**Enable Manual Integration Mode**ボタンとの違いは、チェックボックスは現在のピーク状態を反映するのに対し、ボタンはクロマトグラムをドラッグする際の挙動を指定します。

注：手動解析モードを有効にすると、クリアするまですべてのペインでそのモードは有効のままとなります。

Apply

ユーザーがピーク検出パラメータのいずれかを調整した場合、**Apply**ボタンが有効になります。ボタンをクリックし、修正されたピーク検出パラメータを有効なクロマトグラムに適用します。

手動積分モードの場合以外は、クロマトグラムの特定のピークの上をドラッグすることは、**Expected RT**パラメータを調整して次に**Apply**をクリックすることと同じです。

注：ピーク検出パラメータを修正し、**Apply**をクリックせずに別のクロマトグラムを有効にすると、パラメータは適用されず、変更が失われます。

ピークをレビューするためのヒント

- ・ 特定の列で**Results Table**を並べ替え、表の一番上または下に並ぶクロマトグラムのみを確認します。
- ・ **Peak Review**ペインは対応する**Results Table**と常に同期し、**Results Table**にあるような、同じピークのクロマトグラムを同じ順番で表示します。**Results Table**を作成するためのどのような変更（行の並び方、サンプルタイプのフィルタリング、またはコンポーネントの選択など）も**Peak Review**ペインに自動的に反映されます。
- ・ クロマトグラムの番号を選択し、一度に表示します。
- ・ 利用できるクロマトグラムをスクロールするには、ペインの右側にあるスクロールバーを使用します。**Peak Review**ペインが有効な場合、キーボードの上下キーを使用するか、スクロールウィールを使ってクロマトグラムを動かします。
- ・ どの場合でも、特定の1つのクロマトグラムは有効であることを考慮し、太字でタイトルが表示されます。クロマトグラムの中の任意の場所をクリックして、特定のクロマトグラムを有効にします。
- ・ クロマトグラムが有効になると、ペインの左側に表示される積分パラメータが更新され、新しい有効なクロマトグラムが反映されます。ユーザーがピーク積分パラメータを調整してから**Apply**をクリックする場合、これは現在の有効なクロマトグラムに影響します。

- ・ 初めの列の左側にあるグレー領域をクリックして**Results Table**の行を選択すると、**Peak Review**ペインにある対応するピークを示します。**Peak Review**ペインの特定のクロマトグラムにスクロールすると、**Results Table**が対応する行を強調するためそれをビュー内にスクロールします。
- ・ クロマトグラムの特定のピーク上をドラッグすると、**Expected RT**積分パラメータが実際のピークの保持時間とともに更新されます。その後、新しい保持時間が自動的に適用されそのピークが再び解析され、**Results Table**を更新します。
- ・ 手動積分モードでピークを表示している場合、ピーク上をドラッグすると選択したピークを手動で解析することになります。
- ・ ピークレビュー処理は前回算出したクロマトグラムのキャッシュによって迅速に行われます。[Edit Menu 該当ページ 16](#)を参照してください。

Peak Review右クリックメニュー

この機能は、クロマトグラムの左側に表示されている積分パラメータの外観を制御します。**Peak Review**ペインを右クリックして、コンテキストメニューにアクセスします。次のコマンドが用意されています。

表 8-1 Peak Review Parameters

Task	コマンド
Peak Review の外観を変更します。	Peak Review Optionsダイアログ: Appearanceタブ 該当ページ 66 または Peak Review Optionsダイアログ: Zoomingタブ 該当ページ 68 。
ピークレビューのタイトルフォーマットを設定します。	Set Peak Review Title Format 該当ページ 70 。
個々のパラメータの記述名を使用してパラメータを表示します。	デフォルトでは、 Show Parameters-Normal Width が常に設定されています。
パラメータをコピーします。	Copy Parameters 該当ページ 71 。
パラメータを貼り付けます。	Paste Parameters 該当ページ 71 。
ピークを「Not Found」に設定します。	Set Peak to 'Not Found' 該当ページ 72 。
ピークを使用します。	Use Peak 該当ページ 72 。
コンポーネントに対する定量化メソッドを更新します。	Update Quantitation Method for Component 該当ページ 72 。
グループに対する定量化メソッドを更新します。	Update Quantitation Method for Group 該当ページ 72 。

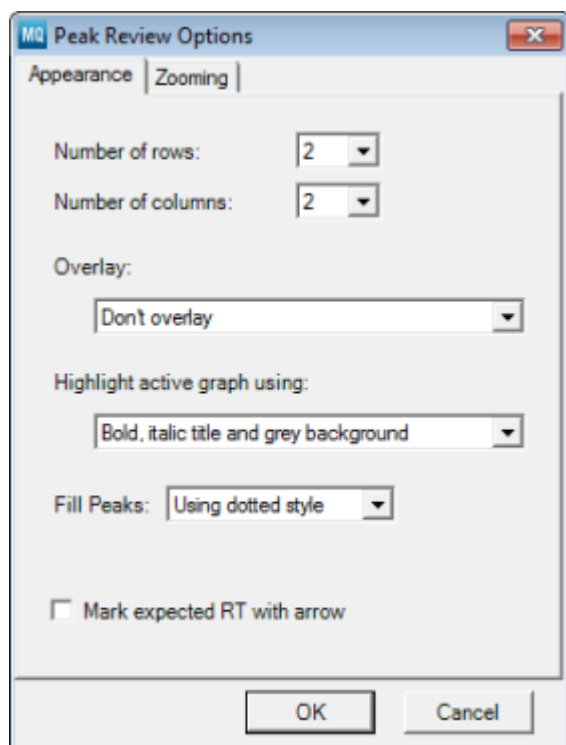
表 8-1 Peak Review Parameters (続き)

Task	コマンド
積分パラメータをグループ内のサンプルに適用します。	Apply Integration Parameters to Sample Within Group 該当ページ 73。
ピークを元のメソッドに戻します。	Revert Peak to Original Method 該当ページ 73。
コンポーネントに対するすべてのピークを元に戻します。	Revert All Peaks for Component 該当ページ 73。

Peak Review Optionsダイアログ: Appearanceタブ

Peak Reviewペインを右クリックして選択すると、Peak Reviewペインの外観に影響するオプションを調整できます。4つの行および4つの列を超えないで設定することを推奨します。

図 8-2 Peak Review Optionsダイアログ: Appearanceタブ



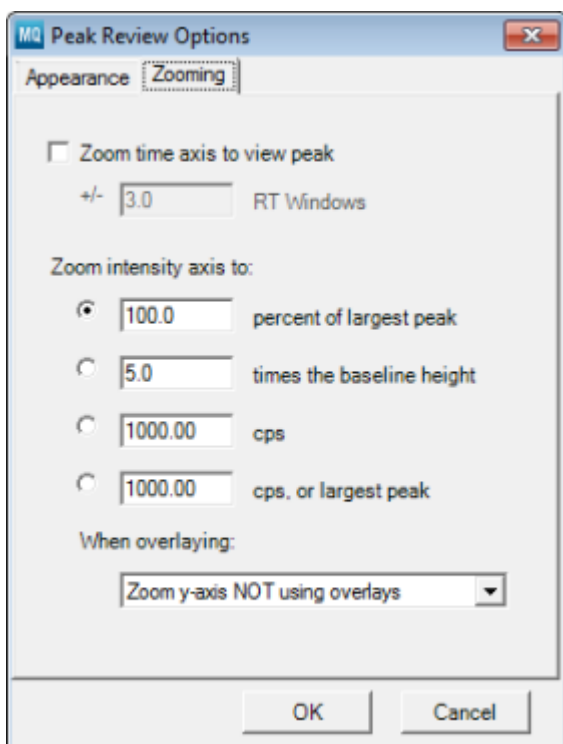
ラベル	説明
Number of rows and Number of columns	同時に表示されるクロマトグラム数を管理します。クロマトグラムがすでにキャッシュされていない限り、多くのクロマトグラムが表示されている場合、ページ間をスクロールするのにより長い時間がかかります。 Edit Menu 該当ページ 16 を参照してください。
Overlay	<p>サブペインのそれぞれにあるメインのクロマトグラム上にその他のクロマトグラムを重ねて表示する必要があるかどうかを判断します。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ Don't Overlay : 他のクロマトグラムのオーバーレイを防ぎます。 ・ All components for group : 同じグループからのコンポーネントに対してすべてのクロマトグラムをメインコンポーネントとして重ねて表示します（現在のサンプル）。 ・ Analytes and IS' s separately for group : 前述のオプションと同様ですが、同じグループからのすべてのコンポーネントを重ねて表示するのではなく、分析試料と内部標準が別々に保たれます。 ・ Internal Standard with Analyte : 分析試料について、使用された内部標準を分析試料ごとに重ねて表示します（内部標準のクロマトグラムは他のオーバーレイがありません）。 ・ Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines : イオン比ラインを表示します。このオプションを選択すると、Results Tableでイオン比の合否が見えるようになります。 ユーザーは、定量化メソッドで定義されたグループがある場合、イオン比の合否を見ることができます。しかし、Ion Ratio Linesは合否を示すだけのものであり、最終結果を示すものではありません。ラインはクロマトグラムではピークの高さとして表示されますが、定量化メソッドで定義された設定に応じて、ピーク領域または高さに基づいて計算されます。高さと面積に不一致がある場合、ユーザーはResults TableのIon Ratio外れ値を確認しなければなりません。
Highlight active graph using :	現在有効なクロマトグラムをどのように表示するかを示します。太字、イタリックのタイトル、グレーバックグラウンドに設定します。

ラベル	説明
Fill peaks	<p>ピークの積分された領域をどのように表示するかを示します。次の選択肢があります。</p> <ul style="list-style-type: none">・ 本書のスクリーンキャプチャで使用されているような点線を使用する。・ 実線を使用する。・ 塗りつぶしを使用しない。すべてのケースで、ピークのベースラインも描かれます（赤）。 <p>3つ目のオプションを使用した場合、ベースラインのみが描かれ、ピークは塗りつぶされません。</p>
Mark expected RT with arrow	<p>時間軸の下に描かれる青の矢印でExpected Retention Timeを示します。これは、積分したピークが予測RTの近くにあるかどうかを判断するために役立ちます。</p>

Peak Review Optionsダイアログ: Zoomingタブ

Peak Reviewペインを右クリックして選択すると、**Peak Review**ペインの外観に影響するオプションを調整できます。**Zoom intensity axis to**機能は、クロマトグラムのY軸を自動的に調整するために使用されます。

図 8-3 Peak Review Optionsダイアログ: Zoomingタブ



ラベル	説明
Zoom time axis to view peak	このオプションを選択した場合、クロマトグラムのX軸を自動的に調整して、ラン全体の一部のみが見えるようになります。これは、長時間のLCランで、興味のある領域をよりはっきりと見えるようにするのに便利です。ウィンドウの幅は、複数のRT Window積分パラメータを使用して表されます。ズームされた領域の全幅は、複数のRT Windowの指定された数の2倍になります。
Zoom intensity axis to percent of largest peak	クロマトグラムのY軸を自動的に調整するために使用します。見ることができるクロマトグラムのX範囲内に、最大ピークの指定されたパーセントにY軸のスケールを合わせます。Zoom time axis to view peak機能が使用される場合、これはLCランの合計の長さより小さくなります。
Zoom intensity axis to times the baseline height	クロマトグラムのY軸を自動的に調整するために使用します。ベースライン領域に焦点を合わせるために使用します。
Zoom intensity axis to cps	指定された値に直接Y軸のスケールを合わせます。
Zoom intensity axis to cps, or largest peak	指定された値より小さい値または最大ピークにY軸のスケールを合わせます。

Peak Review

ラベル	説明
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays	メインデータセットのみを使用し、セクションに強度軸をズームの設定を維持します。この設定では、オーバーレイがメインデータセットより強度が高い場合、それらを部分的にのみ見えるようにできます。
When overlaying Zoom y-axis using overlays	メインデータセットとすべてのオーバーレイを使用し、最大の全体Y値を使用します。この機能では、常にオーバーレイが見えるように保持されます。
When overlaying Use a percentage y-axis	パーセントスケールを使用して、メインデータセットとオーバーレイのスケールを別々に合わせます。これにより各トレースが、最大で利用できる高さを使用するようになります。しかし、相対的ピーク高さは視覚的に直接比較できなくなります。

ヒント！ Y軸をダブルクリックし、全体のデータセット内の最も強度の強いピークに軸のスケールを合わせます。

選択された場合、現在レビューされているピークのためのクロマトグラムが実線の青色トレースを使用して描かれ、その積分されたピーク領域が表示されます。その他のコンポーネント（同一サンプル用）のためのクロマトグラム（積分されたピーク領域ではない）が点線を使って重ねて表示されます。

グラフがこのようにオーバーレイを表示しているときに、タイトルエリアの任意の場所をダブルクリックすると、すべてのクロマトグラムのタイトルを表示するか、有効なクロマトグラムのタイトルだけを表示するかを切り替えることができます。

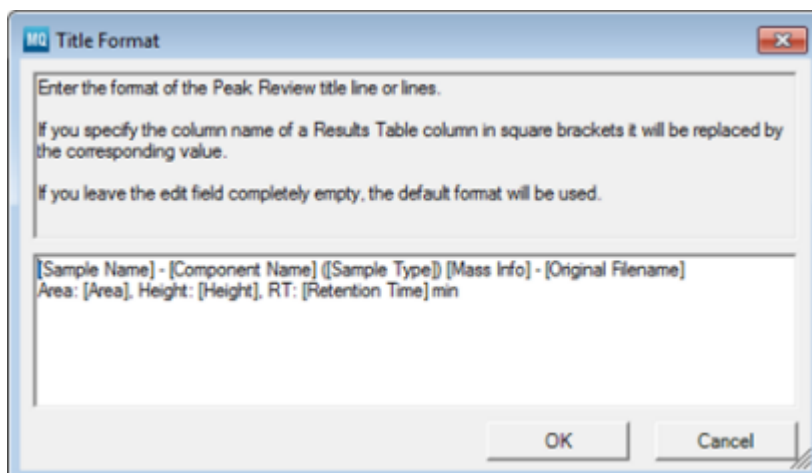
ヒント！ X軸内でダブルクリックすると、すべてのデータが表示される初期表示にグラフを戻します。軸内をドラッグしてズームすると、時間範囲を選択します。

Set Peak Review Title Format

クロマトグラムのそれぞれのグラフタイトルに表示される情報をカスタマイズするためにこのダイアログを使用します。**Results Table**の列名を角括弧内に入力すると、現在のサンプルとコンポーネントでフィールド値が置き換えられます。そのままの状態追加のテキストを入力することもできます。ピークレビュータイトルにサンプル名「SampleName」を含めることが推奨されます。

- ・ **Peak Review**ペインを右クリックし、**Set Peak Review Title Format**をクリックします。

図 8-4 Title Formatダイアログ



Copy Parameters

Peak Reviewペインを右クリックして、このコマンドにアクセスします。このコマンドを **Paste Parameters**と併せて使用し、1つのクロマトグラムから別のクロマトグラムにピーク検出パラメータをコピーします。このコマンドは、複数のクロマトグラムに同じパラメータの調整を行う必要がある場合に使用できます。

1. 有効なクロマトグラムが開いたグラフを右クリックし、次に**Copy Parameters**をクリックします。
2. **Update Quantitation Method for Component**コマンドを使用して、コンポーネントに対するすべてのクロマトグラムに変更を適用します。

Paste Parameters

1. 有効なクロマトグラムが開いたグラフを右クリックし、次に**Copy Parameters**をクリックします。
2. 別のクロマトグラムを右クリックし、**Paste Parameters**をクリックします。

先にコピーしたパラメータが、新しいクロマトグラムに適用されます。

Set Peak to 'Not Found'

- ・ 有効なクロマトグラムが開いたグラフを右クリックし、次に**Set Peak to 'Not Found'**をクリックし、選択したクロマトグラムから解析を削除します。

Use Peak

- ・ 有効なクロマトグラムが開いたグラフを右クリックし、次に**Use Peak**をクリックし、キャリブレーションカーブから有効なピークを含めるまたは除外します。

Update Quantitation Method for Component

特定のクロマトグラムに合わせてピーク検出パラメータを調整した後、この機能を選択して、Results Tableで保存した定量化メソッドのコピーを調整し、そのようなパラメータをコンポーネントに対して使用します。

- ・ ピーク検出パラメータを調整し、右クリックして**Update Quantitation Method for Component**を選択します。

特定のコンポーネントについては、すべてのサンプルが新しいパラメータを使用するように自動的に解析され、**Peak Review**ペインと**Results Table**が更新されます。手動で積分したピークが存在する場合は、再積分をすべてのピークに適用するか、手動で積分されていないピークだけに適用するかを選択します。

Update Quantitation Method for Group

現在有効なクロマトグラムのコンポーネントと同じグループに属するすべてのコンポーネントにこの解析が適用されること以外は、**Update Quantitation Method for Component**コマンドと同じです。ユーザーがさまざまなコンポーネントをグループに割り当て、特定のグループに割り当てられたコンポーネントが同じ保持時間を持つと予測される場合はこの機能が有効です。これは、予測保持時間などのパラメータをすべてのグループのすべてのコンポーネ

ントについて一度にリセットできるためです。そのため、グループのコンポーネントの保持時間が異なる場合は、有用とはいえません。

- ・ ピーク検出パラメータを調整し、右クリックして**Update Quantitation Method for Group**を選択します。

Apply Integration Parameters to Sample Within Group

特定のクロマトグラムのためにピーク検出パラメータを調整した後、この機能を使用して、**Results Table**で保存した定量化メソッドのコピーから元のパラメータをそのクロマトグラムに適用します。

- ・ 特定のクロマトグラムに対してピーク検出パラメータを調整した後、右クリックして、次に**Apply Integration Parameters to Sample Within Group**をクリックします。

Revert Peak to Original Method

特定のクロマトグラムのためにピーク検出パラメータを調整した後、この機能を使用して、**Results Table**で保存した定量化メソッドのコピーから元のパラメータをそのクロマトグラムに適用します。

- ・ 右クリックして**Revert Peak to Original Method**を選択します。

Revert All Peaks for Component

特定のクロマトグラムに合わせてピーク検出パラメータを調整した後、この機能を使用すると、**Results Table**で保存した定量化メソッドのコピーから、有効なクロマトグラムと同じコンポーネントをすべてのクロマトグラムに対して元のパラメータを適用できます。手動で積分したピークが存在する場合は、再積分をすべてのピークに適用するか、手動で積分されていないピークだけに適用するかを選択します。

- ・ 右クリックし、**Revert All Peaks for Component**をクリックします。

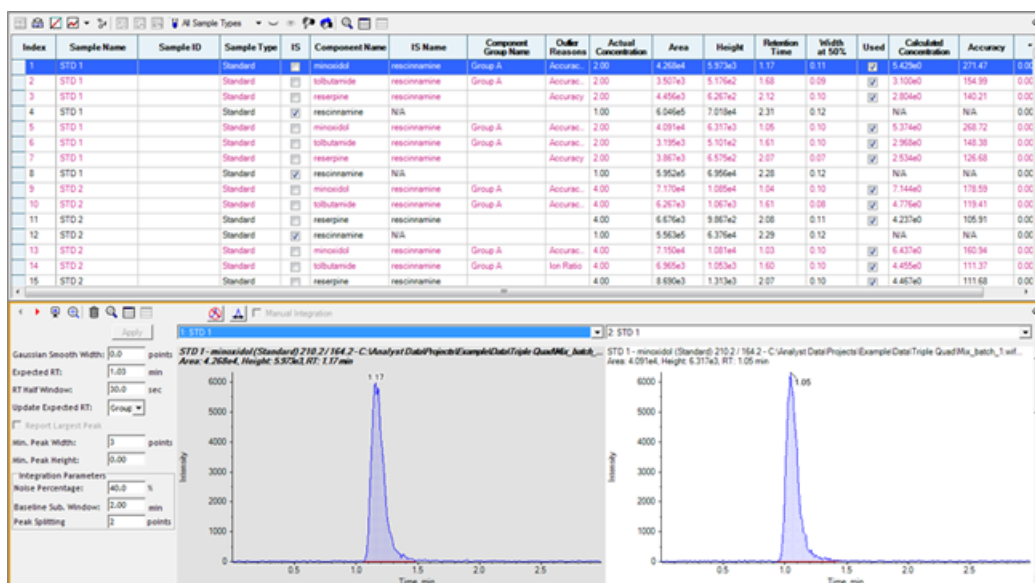
Side-by-side Sample Review

9

Side-by-side Sample Review機能を使って、特定のターゲット化合物に対してスクリーニングします。最大6個のサンプルを選択でき、サンプル間のピークレスポンスを比較することができます。レビューは、自身の標準操作手順書（SOP）にあるピーク積分およびデータの合否の基準に従って定量的データをレビューする必要があります。

Results Tableが有効な場合、**Results Table**ツールバーの**Side by Side Sample Review**アイコンをクリックし、**Side by Side Sample Review**ペインを開きます。

図 9-1 Side by Side Sample Review Pane



定量化メソッドには、積分用に選択したピークを定量化するために使用される基準が含まれています。レビューは、ピーク積分および自身のSOP内のデータ合否基準に従って、定量データのレビューを行う必要があります。

Side-by-Side Sample Reviewの実行

1. Results Tableを開きます。
2. **Side by Side Sample Review**アイコンをクリックします。
3. **Side by Side Sample Review**ペインのリストからサンプルを選択します。

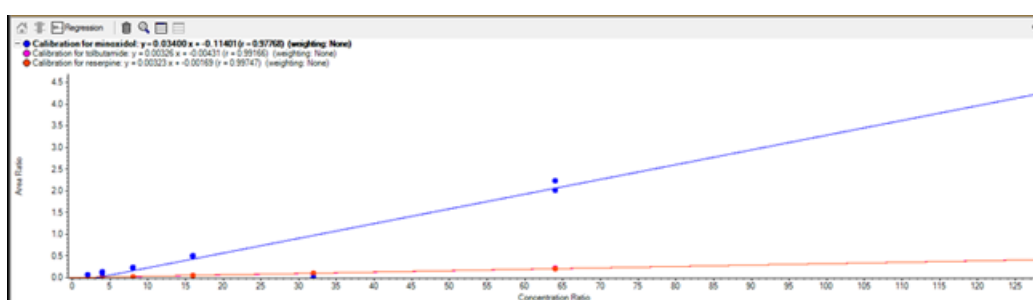
積分パラメータが表示されます。

ヒント！ **Side by Side Sample Review**ペインを右クリックし、**Options**をクリックして、並べて表示した行または列番号を変更します。

4. 他のリストから別のサンプルを選択します。

既知濃度の**Standard**サンプルを使用する場合、**Calibration**ペインを使用して、各分析試料に対する回帰を視覚的に調べます。ユーザーが相対的定量を行い、**Standard**サンプルがない場合、このペインは該当しません。**Results Table**が有効な場合、ツールバーにある**Show Calibration**をクリックします。

図 10-1 Calibration Pane

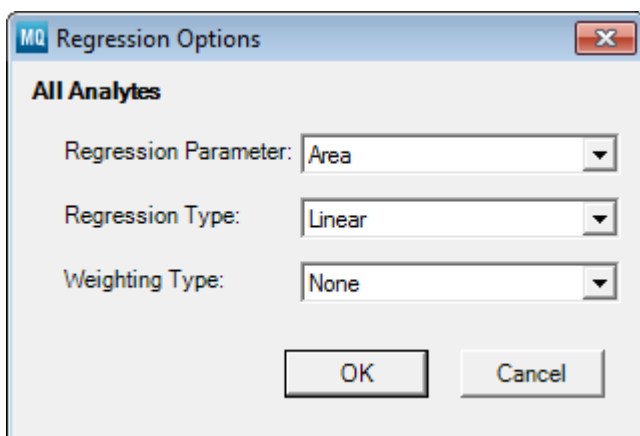


回帰を調べるのと同時に、**Standard**サンプルを除外して回帰に使用しないようにすることも可能です。調節を行った後、新しい回帰が自動的に算出され、**Calculated Concentration**および**Accuracy**などのパラメータが分析試料の全サンプルに対して再計算されます。[回帰方程式 該当ページ 132](#)を参照してください。

Regression Optionsダイアログ

多くの分析試料がある場合、変更を適用するには**Regression Options**ダイアログを使用する方が、回帰パラメータを1つずつ変更するよりも簡単です。

図 10-2 Regression Optionsダイアログ



Calibration Tips

- ・ 関連する内部標準がない分析試料では、Y軸は定量化メソッドで選択したようなピークAreaまたはHeightになります。内部標準のある分析試料では、Y軸はピークAreaまたはHeight比率になります（内部標準に対する分析試料の比）。
- ・ 関連する内部標準がない分析試料では、X軸はActual Concentrationとなります。そうでない場合、Actual Concentration比率になります（内部標準に対する分析試料の比）。
- ・ Components & Groups Listから2つ以上の分析試料が選択されている場合、すべての分析試料のキャリブレーションが重ねて表示されます。そうでない場合、選択した分析試料のキャリブレーションが表示されます。
- ・ このタイトル領域には、有効な分析試料の名前および相関関係係数のある関連した回帰方程式が示されます。その回帰が算出されていない場合、例えばStandardサンプルのない場合、タイトルはこれを示します。複数の分析試料のキャリブレーションが重なっている場合は、タイトルを切り替えると、すべての分析試料に関する情報が表示されます。また、タイトル領域の任意の場所をダブルクリックして、有効な分析試料の情報だけを表示することもできます。多くの重なった分析試料がある場合、すべての情報を表示することは難しい場合があります。この場合、分析試料中でドラッグしてタイトルをスクロールします。
- ・ 使用中のStandardサンプルに対するデータポイントは、これらのポイントを使用するキャリブレーションの方程式と同様に常にプロットされます。StandardサンプルまたはQuality Controlサンプルを除外するためにオプションでデータポイントを表示することができます。
- ・ データポイントをクリックした場合、Results Tableに対応する行が自動的に選択され、ビューにスクロールされます。これにより、これまで隠れていた行は現在の表に表示されます。

Calibration右クリックメニュー

Calibrationペインを右クリックし、コンテキストメニューにアクセスします。次のコマンドが用意されています。

表 10-1 Calibration Paneの右クリックメニューオプション

Menu Option	説明
Exclude (or Include)	ユーザーは除外しなかった標準のデータポイント上で直接右クリックをする場合、このオプションは回帰計算からサンプルを除外するために使用されます（クリックしたデータポイントに対するサンプルおよび分析試料に使用）。サンプルが既に除外されている場合、メニュー項目のテキストは Include を読み込み、選択するそのポイントを含むことになります。選択後、回帰計算が行われ、 Results Table が更新されます。この機能は、対応する行に対してResults Tableで Used チェックボックスをクリアまたは選択することと同じです。
Exclude - All Analytes (or Include - All Analytes)	選択したデータポイントに一致する分析試料だけでなく、すべての分析試料を除外または含みます。
Show Excluded Standards	このオプションを選択すると、除外された標準のデータポイント（ある場合）が白丸で描かれます。クリアすると、除外された標準は表示されなくなります。
Show QCs	このオプションを選択すると、 Quality Control (QC) サンプルのデータポイントが白ダイヤモンドで描かれます。クリアするとQCサンプルは表示されなくなります。
Show Legend	<p>このオプションを選択すると、様々なサンプルタイプ（標準サンプル用の黒丸、除外したStandardサンプル用の白丸、およびQuality Controlサンプル用の白ダイヤモンド）のポイントシンボルの表示が凡例の右側に描かれます。</p> <p>注：ユーザーが特定のサンプルタイプを見ることができない場合、例えば、Show QCsオプションが選択されていない場合、これらのサンプルタイプの登録内容は存在していません。QCサンプルと除外した標準サンプルのどちらも表示されない場合、このオプションは利用できず、凡例は描かれません。</p>

表 10-1 Calibration Paneの右クリックメニューオプション (続き)

Menu Option	説明
Use Percent Y-Axis	<p>このオプションを選択しない場合、プロットのY軸は絶対ピークAreaまたは絶対Heightの単位（または内部標準が使用されている場合はピークAreaまたはHeightの比率）となります。このオプションを選択すると、Y軸は分析試料ごとに最大のY値が付いたデータポイントのパーセント値として独立して表されます。</p> <p>2つ以上の分析試料が重ねて表示され、それらの絶対レスポンスが非常に異なる場合、パーセント軸の使用は便利です。なぜならそれにより、各トレースがスケール化され、利用可能な全垂直領域を使用できるためです。そうしない場合、低いレスポンスの分析試料はX軸の近くに位置するため、詳細を見るためにプロットを拡大しなければなりません。</p>
Log-Log Plot	Area対ConcentrationのプロットのビューとLog(Area)対Log(Concentration)のプロットのビューとが切り替わります。

Statistics Tableを使って、解析の再現性に関連する情報を確認します。表の各行には、関連するピークグループの平均と標準偏差などの情報（理想的には同じ反応を持つものと予期される同じ分析試料からの情報）がまとめられています。

図 11-1 Statistics Pane

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	miconidol	2.00	2 of 2	5.422e0	3.034e-2	0.72	270.09	5.422e0	5.374e0
2	miconidol	4.00	2 of 2	6.791e0	4.393e-1	7.35	169.76	7.144e0	6.437e0
3	miconidol	8.00	2 of 2	1.085e1	3.300e-1	3.41	128.21	1.081e1	1.090e1
4	miconidol	16.00	2 of 2	1.791e1	3.109e-1	1.79	111.94	1.814e1	1.760e1
5	miconidol	32.00	1 of 2	3.356e0	N/A	N/A	10.49	N/A	3.356e0
6	miconidol	64.00	2 of 2	6.580e1	4.679e0	7.11	102.82	6.911e1	6.290e1
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	4.575e-1	5.86	97.74	7.495e0	8.143e0
11	tolbutamide	16.00	2 of 2	1.570e1	2.324e-1	1.48	98.10	1.593e1	1.586e1
12	tolbutamide	32.00	2 of 2	2.986e1	1.109e0	3.68	93.32	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	reserpine	2.00	2 of 2	2.603e0	1.912e-1	7.16	133.44	2.804e0	2.534e0
16	reserpine	4.00	2 of 2	4.352e0	1.633e-1	3.75	108.80	4.237e0	4.467e0
17	reserpine	8.00	2 of 2	7.491e0	6.761e-1	9.03	93.64	7.013e0	7.970e0
18	reserpine	16.00	2 of 2	1.535e1	1.693e-1	1.10	96.03	1.525e1	1.545e1

ラベル	説明
Row	行番号。別の列のヘッダーの1つをクリックすると、表をソートします。表を最初の表示に戻すには、このヘッダーをクリックします。
Component Name	分析試料の名前。
Actual Concentration (or Sample Name)	サンプルを実際の濃度でグループ化している場合、この列には濃度が表示されます。サンプル名でグループ化している場合、列の標題は変更され、サンプル名が表示されます。
Num.Values	「m of n」の形式で表示され、nは特定の実際の濃度を持つサンプルの合計数（または同じサンプル名を持つサンプルの合計数）を表します。mは、そのようなサンプルの中で計算に使用されているサンプルの数を表します。対応するピークを積分できなかった場合、またはUsedフィールドが手動でクリアされている場合、サンプルは使用されません。
Mean	使用されているサンプルの平均。
Standard Deviation	使用されているサンプルの標準偏差。
Percent CV	パーセントで表した変動係数：100 * (Standard Deviation) /Mean。

ラベル	説明
Accuracy	平均値を実際の濃度で除算し、パーセントで表した値：100 * 平均 / (実際の濃度)。このフィールドは、実際の濃度を基準としてグループ化している場合のみ表示され、サンプル名を基準としてグループ化している場合は表示されません。
Values	追加列に表示されるサンプルの個別の値。対応するサンプルを積分できなかった場合、N/Aと表示されます。 Used フィールドが手動でクリアされている場合、値は取り消し線付きで表示されます。

Statistics Tableのヒント

- Statistics TableはComponents & Groups Listとリンクしており、選択した分析試料に対応する行を表示します。**All Components**項目、または**All Analytes**項目が選択されている場合、すべての分析試料の名前があります。個々の分析試料が選択されている場合、その分析試料のみのエントリーがあります。個々の内部標準がリストから選択されている場合、Statistics Tableは空白です。[Components & Groups List 該当ページ 38](#)を参照してください。
- Valueセルの1つをクリックすると、分析試料およびサンプルのResults Tableに対応する行が選択され、現在のStatistics Tableの行に表示されます。Results TableにあるUnknownサンプルのみが表示されます。Statistics TableがStandardサンプルに関する情報を含んでいる場合、対応する行はResults Tableで表示されません。Peak Reviewペインが表示されている場合、そのペインはResults Tableにリンクしており、セルをクリックすると更新されます。
- 列のヘッダーの1つをクリックすると、Statistics Tableを並べ替えます。
- Statistics Table全体または目的の行だけのいずれかをコピーすることができます。
 - 表全体をコピーするには、**Edit > Copy**をクリックします。
 - 目的の行のみをコピーするには、手動でその行を選択し、**Edit > Copy**をクリックします。
- 列幅を調節する場合、これらの幅は次回Statistics Tableを表示させる時に再保存されます。
- フォーマットおよび精度はResults Tableのものと同じです。
- Group by Concentration for Standards and QCsはDisplayed Actual Concentrationに基づいており、Results Tableに保存したActual Concentrationではありません。Std 1濃度が0.001、Std 2濃度が0.005で、表示フォーマットが0の場合、両方とも0として扱われるため、Std 1とStd 2は一緒にグループ化されます。これらを別々にしてグループにするために、Column Settingsダイアログ中で、Analyte Concentrationの精度を0.000に設定してください。Std 1が0.500、Std 2が0.499である場合、それらをまとめてグループにするためには、精度を0.001に設定してください。

Statistics Table右クリックメニュー

Statistics Tableを右クリックし、**Use Peak**コマンドにアクセスします。このコマンドを使用して、**Value**列の1つにある選択したセルに一致するサンプルおよび分析試料の**Used**フィールドを設定します。**Value**列の1つの適当なセルをクリックし選択してから、メニューを得るために右クリックします。

メトリックプロットを使用して、行番号または別の列のいずれかに対して、Results Tableの列に値をプロットします。これらのプロットは、特に、Peak Reviewペインを使ってすべてのクロマトグラムを手動で表示させたくない場合、視覚的なデータレビューに非常に役立ちます。

Generate a Metric Plot

1. **Results Table**の1つまたは2つの列を選択します。
2. **Show Metric Plot**をクリックします。

1つの列が選択された場合は、結果のプロットは表の行番号の関数として列の値を表示します。2つの列が選択された場合、それらの列の値は互いにプロットされます。選択される2つの列の最初はx値を含み、2列目はy値を含みます。

Save Metric Plot Settings

1. 列を選択してメトリックプロットを開き、**Show Metric Plot**をクリックします。
2. プロットを右クリックし、**Save Setting**をクリックします。

これにより、対応する列を毎回選択する必要がなくなるため、頻繁に使用する**Metric Plots**を迅速に生成することができます。

Metric Plot Tips

- ・ データポイントを左クリックすると、Results Tableの対応する行が自動的に選択され、ビューまでスクロールします。また、Peak Reviewペインが開いている場合は、対応するクロマトグラムを表示するように更新されます。これは、外れ値のピークレビューを実行する場合に便利です。
- ・ Components & Groupsリストで複数の化合物が選択されている場合は、すべての化合物のトレースが重ねて表示されます。複数の化合物が選択されていない場合は、1種類の化合物のトレースだけが表示されます。

- ・ タイトル領域には、常にアクティブなトレースの名前が表示されます。複数のコンポーネントのトレースが重なっている場合は、タイトルを切り替えると、すべてのトレースについて情報が表示されます。また、タイトル領域の任意の場所をダブルクリックして、アクティブなトレースの情報だけを表示することもできます。特定のトレースをアクティブにするには、対応するタイトルの左側にあるカラースポットをクリックします。
- ・ メトリックプロットの設定を保存し、再度使用できるようにしておきます。メトリックプロットで右クリックして、**Save Settings As**をクリックします。

Metric Plot右クリックメニュー

Metric Plotを右クリックしてコンテキストメニューにアクセスします。次のコマンドが用意されています。

表 12-1 Metric Plotの右クリックメニューオプション

Menu Option	説明
Regression	メトリックプロットで回帰線を示します。 <ul style="list-style-type: none">・ Regression Type・ Weighting Type・ Include standard deviation lines and Multiplier Regression Dialog 該当ページ 85 を参照してください。
Display “N/A” as 0.0	このオプションを選択すると、数値ではない値のy値としてゼロを使用してプロットします。選択していない場合、このようなポイントはプロットから省略されます。たとえば、解析できなかったピークについては、 Retention Time がN/Aと報告されます。この機能を使用すると、そのようなピークにもポイントが存在することになるため、ユーザーは問題の可能性があるサンプルを見つけ、ポイントをクリックして Peak Review ペインにリンクすることができます。
Show Legend	各種サンプルに対して使用されているポイント記号に注釈を付ける凡例の表示を切り替えます。
Label Active Series (using sample names)	Results Table の Sample Name フィールドのテキストを使用して、データポイントにラベル付けするかどうかを切り替えます。重なっているトレースが複数存在する場合は、現在アクティブなトレースだけがラベル付けされます。

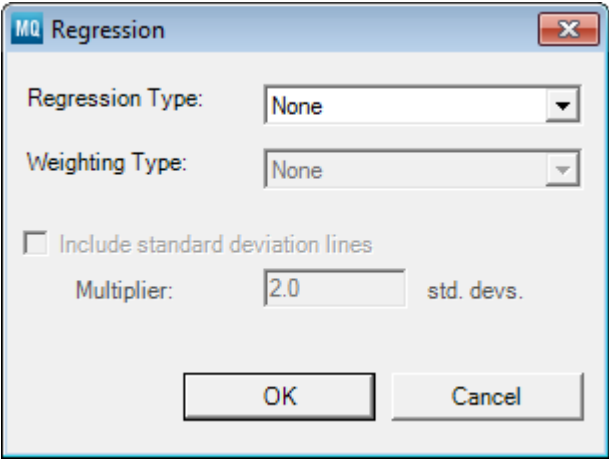
表 12-1 Metric Plotの右クリックメニューオプション (続き)

Menu Option	説明
Use Percent Y-Axis	Y軸で絶対単位を使用するのか、最大Y値に対するパーセントを使用するのかを切り替えます。パーセントを使用する場合、パーセント値は重なっているトレースごとに独立して計算されます。この機能は複数の化合物について重なっているトレースをプロットする目的で利用できるため、コンポーネントのメトリックに対する反応は大幅に異なります。
Start Y-Axis at Zero	Y軸をy=0で開始するか、プロットに必要な最小Y値で開始するかを切り替えます。
Connect Points With Lines	データポイントを線で接続するかどうかを切り替えます。
Save Setting	現在のプロットが設定に関連する場合、この機能を使用すると現在の設定が保存されます。関連付けられていない場合、この機能は Save Setting As 機能と同じように動作します。
Save Setting As	同じ列を頻繁にプロットする場合は、プロットのオプションを設定として保存することができます。これにより、必要な列が現在は Results Table に表示されていない場合でも、迅速にプロットを生成することができます。列だけでなく、さまざまなプロットオプションも保存されます。設定を保存すると、その名前は Metric Plot メニューに表示されます。
Delete Setting	現在のプロットが設定に関連する場合、この機能を使用すると設定が削除されます。

Regression Dialog

クリックすると、メトリックプロットで回帰線を示します。

図 12-1 Regression Dialog



ラベル	説明
Regression Type	さまざまな回帰の種類（線形、二次など）があります。 Mean 回帰タイプは、すべてのデータポイントに対するy値の平均値の位置で水平線になり、 Median 回帰タイプでは、ポイントに対するy値の中央値の位置で水平線になります。また、以前の回帰を削除する None という機能も用意されています。
Weighting Type	重み付けの種類については、 Weighting Factors 該当ページ 133 で説明されています。
Include standard deviation lines and Multiplier	このオプションは、回帰の種類として Mean または Median が選択されている場合に使用できます。どちらかを選択すると、追加の破線水平線がプロットに追加され、指定した数の標準偏差が主線の上下に表示されます。このオプションを使用して、例えば、平均値+2SDまたは平均値+3SDの標準偏差にあたるポイントを確認できます。

Quantitation Method Editorを使用して、定量化メソッドを作成または、既存の定量化メソッドを編集します。

一般的なワークフローはNew Results Table wizardを使って定量化メソッドを作成します。Quantitation Method Editorを使用しても、必要に応じて使用する定量化メソッドを作成できます。

Componentsタブ

Componentsタブを右クリックしてコンテキストメニューにアクセスします。次のコマンドが用意されています。

表 13-1 コンポーネントの右クリックメニューオプション

Menu Option	説明
Find Component by Name	Name が文字列に一致するコンポーネントの選択に使用します。一致するコンポーネントを見つけるために正確な文字列は必要ありません。これは、多くのコンポーネントがある場合、特定のコンポーネントを選択するために有効です。 スプレッドシートに初めに行が選択されていない場合、初めの行から検索が開始されます。そうでない場合、検索は選択した行の後ろに続く行から開始され、初めに戻ります。これは Name にその文字列を含む、2つ以上のコンポーネントがある場合に役に立ちます。初めの検索でコンポーネントを見つけられない場合、選択した初めのコンポーネントを残し、再び検索するとその表で別の一致が示されます。
Insert Row Above	現在選択している行のすぐ上に空の行を1つ挿入します。
Delete Selected Rows	現在選択している行を表から削除します。
Sum Multiple Ions	複数のMRM遷移またはフルスキャンの質量範囲に対するクロマトグラムの和です。コマンドを選択してから、追加の質量列が Components 表に追加されます。特定の行で選択した質量は、対応する分析試料または内部標準について合計したXICの構築に使用されます。この機能を常に選択しておくことが推奨されます。

表 13-1 コンポーネントの右クリックメニューオプション (続き)

Menu Option	説明
Groups	Groups Submenu 該当ページ 88を参照してください。
Internal Standards	内部標準サブメニュー 該当ページ 90を参照してください。

Groups Submenu

表 13-2 Groups Menu Options

Menu Option	説明
Using Constant Group Size	Set Automatic Groupsダイアログを開きます。このダイアログは、各グループが同じ数のコンポーネントを含むと仮定して、各グループの最初のコンポーネントの名前を使用してGroup列に自動的に追加をするために使用されます。 Set Automatic Groupsダイアログ 該当ページ 89を参照してください。
By Filling Down Existing Groups	多数の連続するコンポーネントのための同じグループ名を自動的に完了させます。 このコマンドを使用するには、それぞれ別々のグループの最初のコンポーネントにグループ名を手動で指定し、次にそのコマンドを選択します。指定されたグループ名は、グループ名が空白の後に続くコンポーネントのすべてに下方向にコピーされます。Nameが入力されている行のみが考慮されます。
Using Q1 Masses	MRM実験でのみ利用可能。Q1質量を使用してグループ列に追加をするために使用されます。これは、同じQ1質量が同じ化合物の複数のランジションに指定され、異なるフラグメントが観察された場合に便利です。多くのコンポーネントがある場合や、同じQ1質量を偶然共有するものがある場合、それらは同じグループに割り当てられます。
Using Q3 Masses	MRM実験でのみ利用可能。Q3質量を使用してグループ列に追加をするために使用されます。これは、化合物の異なる同位体形（異なるQ1質量を持つ）が観察されたが、一定のQ3質量が観察された場合に便利です。多くのコンポーネントがある場合や、同じQ3質量を偶然共有するものがある場合、それらは同じグループに割り当てられます。
Using (Q1 - Q3) Mass Differences	Q1質量とQ3質量との差を使用して、Group列に追加をするために使用されます（MRM実験でのみ利用可能）。これは、化合物の異なる同位体形（異なるQ1質量を持つ）が観察されたが、すべての修正されたアイソトープを含む一貫性のあるQ3フラグメントが観察された場合に便利です。多くのコンポーネントがある場合や、同じ質量差を偶然共有するものがある場合、それらは同じグループに割り当てられます。

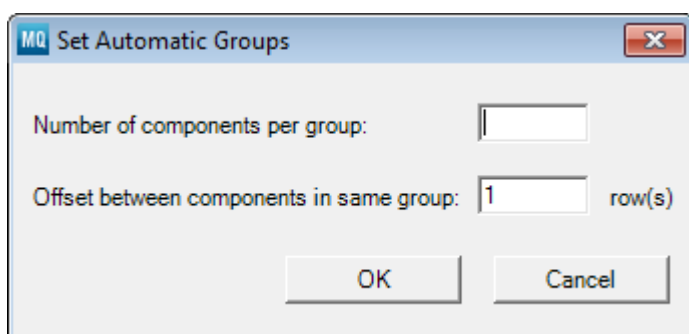
表 13-2 Groups Menu Options (続き)

Menu Option	説明
Add Group to Start of Component Name	グループ名を分析試料または内部標準の名前の最初に付け加えます。これは、最初の名前が固有ではない場合に便利です。
Remove Group from Start of Component Name	グループ名がある場合は、分析試料または内部標準の名前の最初からグループ名を削除します。
Append Summed Ions for Groups	Sum Multiple Ionsオプションが有効な場合、このコマンドはグループの合計クロマトグラムを使用する各グループのための新しいコンポーネントを付け加えます。グループの分析試料と内部標準が規定されている場合、それらに対して別々のコンポーネントを追加します。新しい分析試料の名前は、グループ名がデフォルトとなり、内部標準の名前は.ISが付いたグループ名がデフォルトとなります。合計コンポーネントが必要で元の1つの質量のコンポーネントではない場合、後者は削除できます。

Set Automatic Groupsダイアログ

各グループが同じ数のコンポーネントを含むと仮定し、各グループに対する初めのコンポーネントの名前を使用してGroup列に自動で記入します。

図 13-1 Set Automatic Groupsダイアログ



ラベル	説明
Number of components per group	各グループのコンポーネントの総数。
Offset between components in same group	同じグループの連続したコンポーネント間の行で補正。この値は通常は1ですが、グループに対するコンポーネントが隣接する行にない場合、値は大きくなる可能性があります。

内部標準サブメニュー

表 13-3 内部標準Menu Options

Menu Option	説明
Set IS for All Analytes	IS Name フィールドをすべての分析試料の行に設定します。1つの内部標準が定義されている場合、その名前が使用されます。そうでない場合、必要な内部標準を、開いているダイアログから選択します。
Set IS for Selected Analytes	2つ以上の分析試料で同じ内部標準が使用されている場合、各分析試料に1つずつ別々に内部標準を設定するショートカットが作成されます。 Set IS for Selected Analytes 該当ページ 90 を参照してください。
Set Last Component of Group as IS	様々なコンポーネントがグループに割り当てられている場合は、手動、またはSet Groupsサブメニューの項目の使用のいずれかによりこのコマンドを使用します。それぞれのグループについて最後のコンポーネントのISチェックボックスを選択し、そのグループの分析試料と想定するその他すべてのコンポーネントは、その最後のコンポーネントを内部標準として使用するように設定されます。
Set for All Groups as for Selected Group	現在選択されている行に対応するグループの内部標準の配列を、その他すべてのグループに対称的な方法でコピーするために使用されます。これは、グループそれぞれに2つ以上の内部標準がある場合に役立ちます。 Set for All Groups as for Selected Group 該当ページ 90 を参照してください。

Set IS for Selected Analytes

1. 必要な内部標準が定義されていることを確認してください（NameおよびISチェックボックスが選択されている）。
2. 内部標準を使うために分析試料の行を選択します。
3. メニュー項目を選択します。

2つ以上の定義された内部標準がある場合、ダイアログが開き必要な1つを選択するように要求されます。

Set for All Groups as for Selected Group

1. グループを割り当てます。
2. 手作業で、初めのグループの初めの列にあるボックスを選択して、どのコンポーネントが内部標準かを示します。

3. 手作業で初めのグループの各分析試料の内部標準をIS Name列のコンボボックスから選択して示します。
4. 初めのグループに一致するすべての行を選択します。
5. **Set for All Groups as for Selected Group**をクリックします。

Integrationタブ

Integrationタブを右クリックしてコンテキストメニューにアクセスします。次のコマンドが用意されています。

表 13-4 Integration & Regressionタブの右クリックメニューオプション

Menu Option	説明
Find Component by Name	Components スプレッドシートの行を選択する代わりにコンポーネントリストの個々の項目を選択するという違いはありますが、 Components タブから利用できるコマンドと同じです。
Highlight Components with Uncertain RT	デフォルトの予測保持時間（各クロマトグラムの最大強度を有するピークのRT）が不正確なコンポーネントを強調するために使われます。数個のコンポーネントのみの場合、個別にそれぞれを確認し、このコマンドを使用しないでください。一方で、多くのコンポーネントがある場合、このコマンドを使用してクロマトグラムに2つ以上の重要なピークが存在するコンポーネントだけを視覚的に確認します。 Highlight Componentsダイアログ 該当ページ 92 を参照してください。
Home Graph Axes	拡大したグラフをすべてのデータが見えるホームビューに戻します。
Overlay Other Components for Group	<p>さまざまなコンポーネントが複数のグループに割り当てられており、特定のグループに割り当てられたコンポーネントが同じ保持時間を有すると予測される場合、このコマンドを使用して、クロマトグラムをオーバーレイします。例として、コンポーネントが同じ実在の化合物について異なるMRM遷移を表す場合があげられます。</p> <p>選択した場合、積分パラメータが定義されている現在のコンポーネントのクロマトグラムは実線の青色トレースを使用して描かれ、解析されたピーク領域が表示されます。同じグループの別のコンポーネントについて、解析されたピーク領域にないクロマトグラムは、点線を使って重ねて表示されます。</p>

表 13-4 Integration & Regressionタブの右クリックメニューオプション (続き)

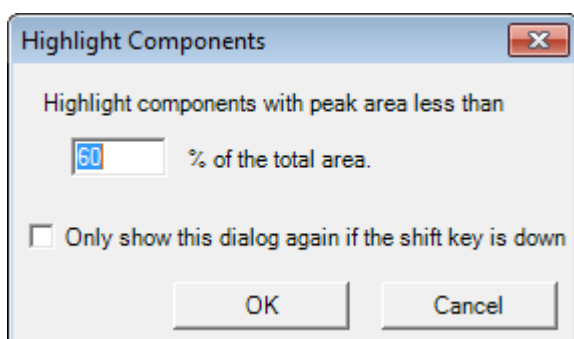
Menu Option	説明
Update Retention Times	<p>前回作成した定量化メソッドの予測保持時間をリセットするために使用します。既存の定量化メソッドが開いており、Set New Typical Sampleが選択されている場合、表示されているクロマトグラムは新しいサンプルに対応しますが、予測保持時間はそのまま変更されません。</p> <p>各コンポーネントについて、その予測保持時間は、指定した幅のウィンドウ内で元の予測保持時間を中心とした最大強度のピーク保持時間に一致するように更新されます。Update Retention Timeダイアログ 該当ページ 93を参照してください。</p>
Set New Typical Sample	<p>代表サンプルにメソッドを関連付けるために使用します。Q1/Q3列 (MRM実験用) またはStart - Stop列 (プロファイリング実験用) から利用できる選択に影響する可能性があります。Integrationタブに表示されるクロマトグラムにも影響します。</p>

Highlight Componentsダイアログ

自動的に選択されるピークが少なくともクロマトグラムの全ピーク領域の指定のパーセンテージの割合を占めないコンポーネントの名前が太字で示されます。例えば図 13-2では、デフォルトの選択されたピークが全面積の70%~100%の割合を占める場合、それはフラグが立てられません。これらのピークのみを、コンポーネントリストから選択してレビューします。

Only show this dialog again if the shift key is downチェックボックスが選択された場合、ユーザーが**Shift**を押さない限り、コマンドが次回選択されたときにダイアログは開きません。前回指定した全面積パーセンテージパラメータが、自動的に使用されます。

図 13-2 Highlight Componentsダイアログ



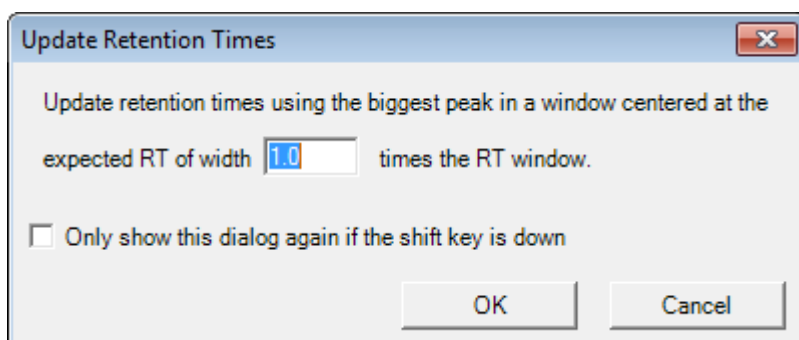
Update Retention Timeダイアログ

前回作成した定量処理メソッドの予測保持時間をリセットするために使用します。既存の定量処理メソッドが開いており、Set New Typical Sampleが選択されている場合、表示されているクロマトグラムは新しいサンプルに一致しますが、予測保持時間は変更されません。

各コンポーネントについて、その予測保持時間は、指定した幅のウィンドウ内で元の予測保持時間を中心とした最大強度のピーク保持時間に一致するように更新されます。

Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスが選択された場合、ユーザーがShiftを押さない限り、コマンドが次回選択されたときにダイアログは開きません。前回指定した保持時間が、自動的に使用されます。

図 13-3 Highlight Componentsダイアログ



Outlier Settings Tab

Outlier Settings タブを右クリックし、コンテキストメニューにアクセスします。次のコマンドが用意されています。

ラベル	説明
Accuracy for Standards	Standard サンプルの許容精度を編集します。
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	検査室の標準操作手順と一致する値から Standard サンプルの許容精度を編集します。
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	検査室の標準作業手順がこの Standard に対して異なる許容精度を示す場合、一番低い濃度の Standard の許容精度を編集します。
Accuracy for QCs	Quality Control サンプルの許容精度を編集します。
Max. Accuracy Tolerance for QC%	検査室の標準操作手順と一致する値から Quality Control サンプルの許容精度を編集します。

ラベル	説明
Ion Ratio	コンポーネントがグループに割り当てられている場合のみ利用可能です。ピーク領域またはピーク高さのイオン比を使用するために選択します。ピーク領域またはピーク高さは、定量化メソッドの展開中に回帰パラメータを選択する際に設定されます。
Calculated Concentration	既知の濃度の Standard サンプルを使用する場合、キャリブレーションカーブから濃度を逆算したものです。回帰方程式は、様々な回帰の種類と重み付けについて回帰がどのように行われるかを表します。
Component	全サンプルの分析試料または内部標準。
IS	選択した内部標準。 Ion Ratio チェックボックスが選択されている場合にのみ利用可能です。
Group	同じ保持時間を有するコンポーネント（すなわち、同じ化合物の異なる遷移）はグループ化することができます。 Ion Ratio チェックボックスが選択されている場合にのみ利用可能です。
Ion Ratio Tolerance (%)	デフォルト設定を使用するか、検査室の標準操作手順に従ってこの設定を編集します。 Ion Ratio チェックボックスが選択されている場合にのみ利用可能です。
Lower Limit of Calculated Concentration	許容される濃度範囲の下限值を入力します。この値よりも低い Calculated Concentration のあるサンプルは、濃度外れ値としてフラグが立てられます。
Upper Limit of Calculated Concentration	許容される濃度範囲の上限値を入力します。この値よりも高い Calculated Concentration のあるサンプルは、濃度外れ値としてフラグが立てられます。

表 13-5 Outlier Settings右クリックメニューオプション

ラベル	説明
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	すべての分析試料が同じ基準を有するのであれば、算出濃度の下限值をすべての分析試料に適用します。
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	すべての分析試料が同じ基準を有するのであれば、算出濃度の上限値をすべての分析試料に適用します。

Quantitation Analysis Workflow Tutorial

14

目標：

- ・ SignalFinder™アルゴリズムを使ってデータの処理方法を学びます。
- ・ MQ4積分アルゴリズムを使ってデータの処理方法を学びます。
- ・ MQ4およびSignalFinder™積分アルゴリズムパラメータの使用方法を学びます。

定量化メソッドには、積分用に選択したピークを定量化するための一連の説明が記されています。このチュートリアルでは、定量化メソッドはResults Tableと同時に作成されます。

Results Tableにあるデータを操作するために使用できる追加のタスク、および利用可能なソフトウェアアイコンに関する情報も含まれます。

注：Audit Trail and Security版のユーザーはAnalyst Dataフォルダ構造の使用に制限があります。ユーザーはAnalyst® MDソフトウェアファイル構造にあるデータファイルのみを処理できます。ファイルおよびフォルダ構造が維持されていない場合、ユーザーはクロマトグラムを表示させることができない場合があります。

キャリブレーションカーブについて

キャリブレーションカーブは、標準濃度カーブとも呼ばれ、Unknownサンプルと濃度が分かっているStandardサンプルを比較することにより、Unknownサンプル内の物質濃度を決定する方法です。キャリブレーションカーブは、装置が分析試料（測定が行われる物質）の濃度の変化にどう反応するか（分析信号）に関するプロットです。ユーザーは、Unknownサンプル内の分析試料の予想濃度に近い濃度範囲の一連のStandardサンプルを準備します。

前提条件

Analyst® MDソフトウェアでは、Exampleプロジェクトを選択します。

Mix_batch_1.WiffファイルはAnalystのData\Projects\Example\Data\Triple Quad folderで見つけることができます。

Modify the Columns Shown in the Results Table

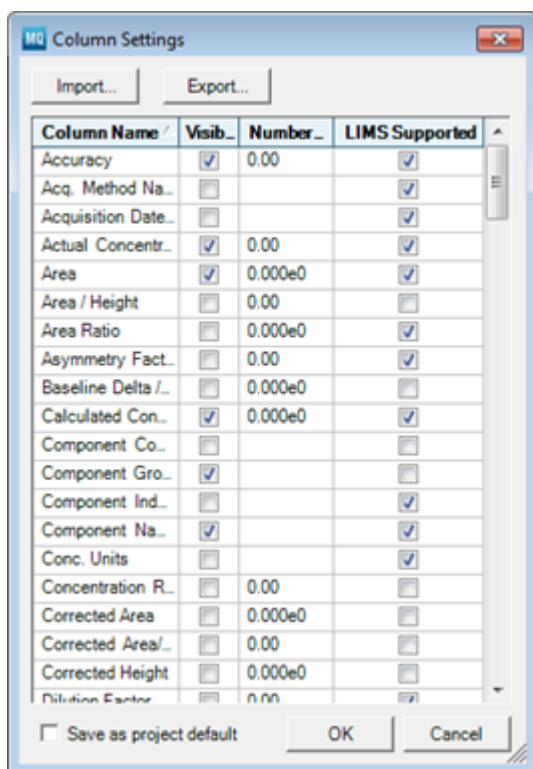
この方法を使って、Results Tableの列を表示または非表示にする、またはその数字のフォーマットの精度を変更します。数値フィールドでは、科学的ではない通知にはフォーマット0.00を使用し、科学的な通知にはフォーマット0.00e0を使用します。少数点を変更して、表示さ

れる数字の精度を示します。ピリオド「.」のみが小数点の記号として使用できます。桁の区切りには対応していません。

注： **Sample Name**や**Sample ID**などのサンプル情報の重要な列がいくつかあり、ユーザーが**Results Table**列の設定をカスタマイズする際にこれらの列は隠れないようにしなければいけません。

1. **Results Table**を右クリックし、**Column Settings**をクリックします。

図 14-1 Column Settingsダイアログ



2. 必要に応じて、**Visible**列にあるチェックボックスを選択またはクリアします。
3. **Number Format**列で、フォーマットを整数または科学的通知に変更します。表示する小数点以下の桁数も変更できます。

ヒント！ 列設定をプロジェクトにあるすべての**Results Tables**に適用するには、**Save as project default**チェックボックスを選択します。

4. **OK**をクリックします。

SignalFinder™ Integration Algorithm

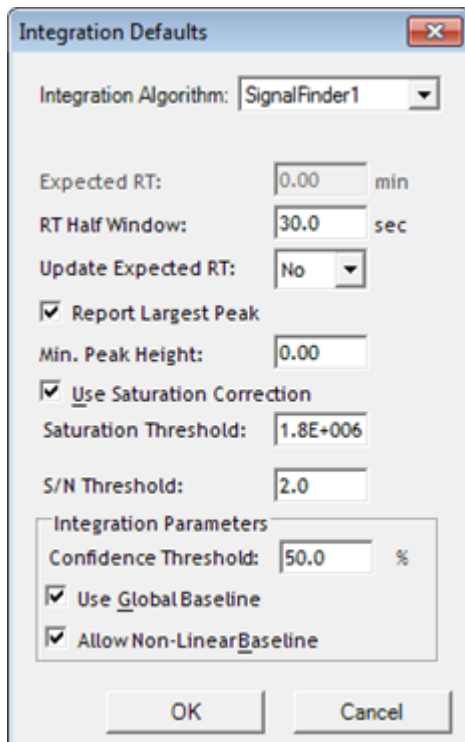
MQ4積分アルゴリズムまたはAnalyst® MDソフトウェアで利用できるアルゴリズムと違い、SignalFinder™は、定量化メソッド作成時に選択したサンプルを使ってピークモデルを作り上げます。このモデルは、アルゴリズムによって使用される選択したピークの形を表します。解析時、SignalFinder積分アルゴリズムはこのモデルを他のサンプルに適用し、サンプルを引き延ばすか歪曲させます。これにより、複数のサンプルの特定の分析試料または内部標準に対し、ピークの形が類似するけれども同じではないことが可能になります。

Set the Peak Integration Parameters

次の手順に従って、データの積分アルゴリズム処理を確認または設定してください。[SignalFinder Integration Algorithm](#)について [該当ページ 114](#)を参照してください。

1. Analyst® MDソフトウェアで、**Navigation**バーの**Companion Software**の下**MultiQuant 3.0.3**をダブルクリックします。
2. **Edit > Project Integration Defaults**をクリックします。
3. **Integration Defaults**ダイアログ中の、**Integration Algorithm** リストから**SignalFinder1**を選択してください。
4. **Use Saturation Correction**チェックボックスを選択し、**Saturation Threshold**を**1.8E+006**に設定してください。

図 14-2 Integration Defaultsダイアログ



注： **Saturation Threshold**よりも上のピークは飽和しているものとみなします。この値は検出器に依存します。

5. **OK**をクリックします。

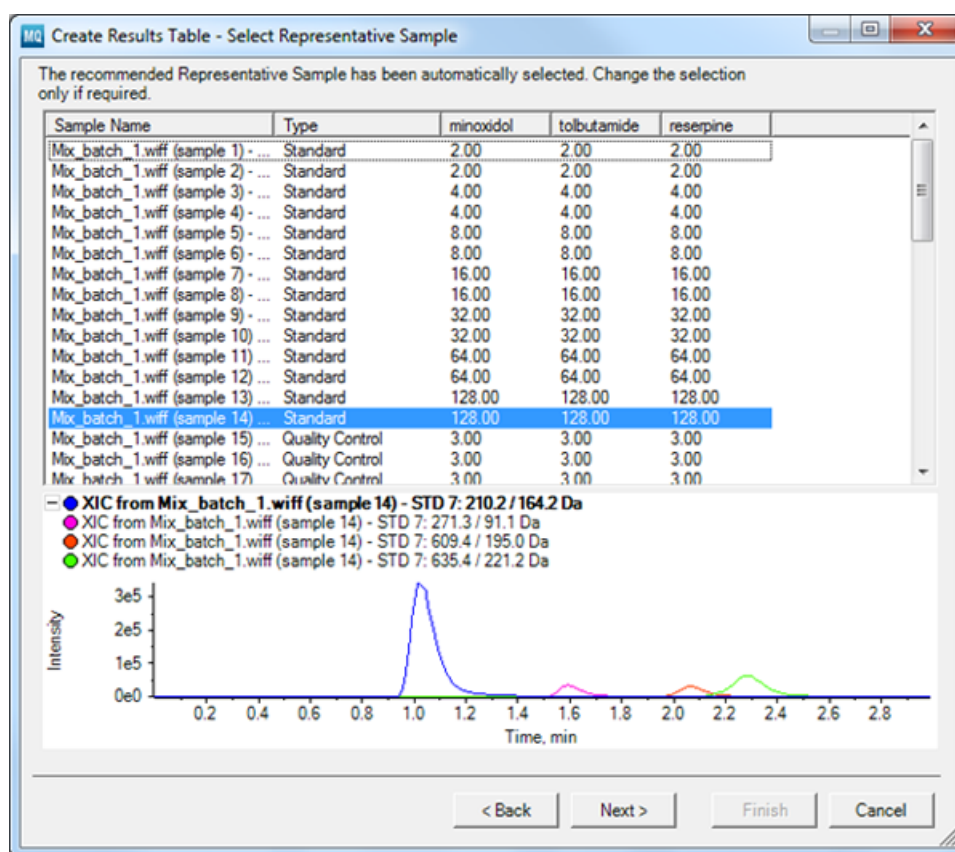
Results Tableの作成

1. **File > New Results Table**をクリックします。
2. **Create Results Table - Select Samples**ページで、**Example Data**フォルダを展開し、**Mix_batch_1.wiff**ファイルを**Selected**ペインにドラッグします。
3. **Next**をクリックします。
4. **Create New Method (SignalFinder1)** オプションをクリックします。
5. **New**をクリックします。
6. **Save Quantitation Method As**ダイアログのメソッドの名称を入力し、**Save**をクリックします。
7. **Next**をクリックします。

Create Results Table - Select Representative Sampleページ上で代表サンプルが選択されています。ソフトウェアは、クロマトグラムの選択に基づいた代表サンプルを推奨しており、これにより全体のバッチを合わせる積分パラメータを選択するための一番の条件が得られます。飽和しておらず、高濃度の標準溶液またはQCサンプル（TICは1E+006 cpsよりも低い値）を選択することを推奨しています。

ヒント！ ピークレビューの間、ピークモデルを作る対象となる別のサンプルをこの間に選択することができます。

図 14-3 Create Results Table - Select Representative Sampleページ



8. **Create Results Table - Define Components**ページで、分析試料と内部標準を確認します。
9. **Next**をクリックします。

図 14-4 Create Results Table - Define Componentsページ

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

Experiment: MRM (4 transitions)

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

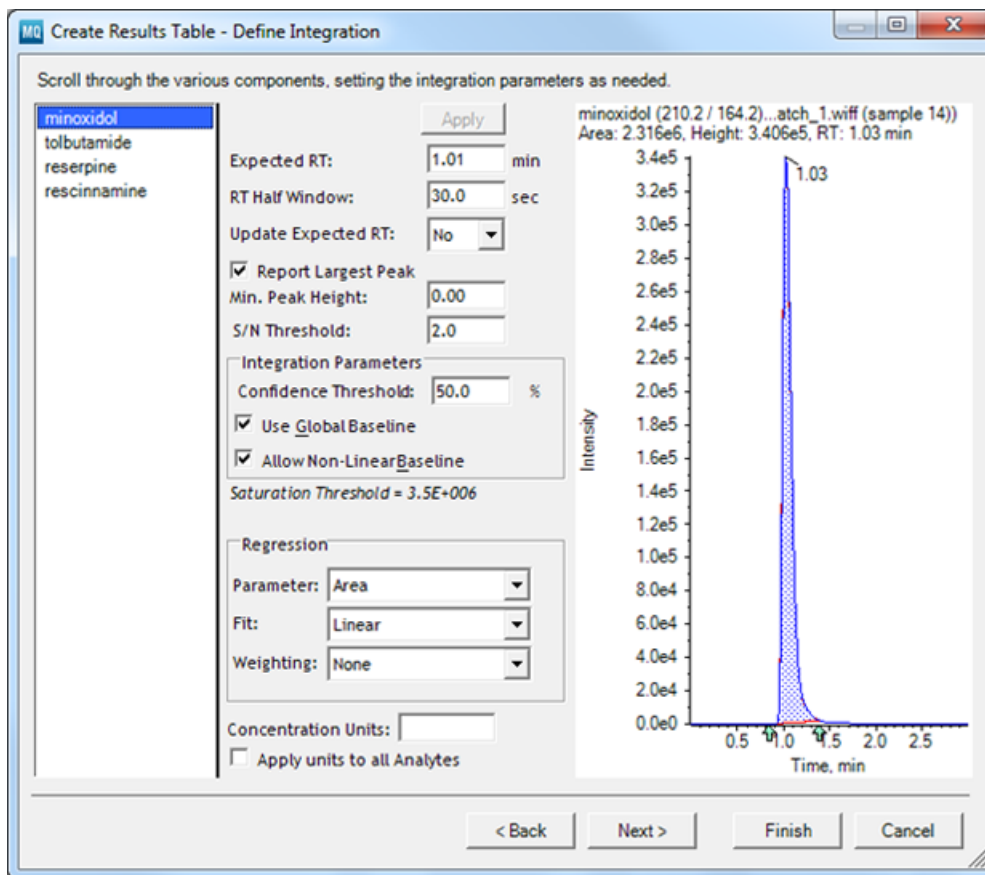
< Back Next > Finish Cancel

注：測定メソッドを作成する際、コンポーネント名が質量範囲表のID列に含まれている場合、その名前は**Define Components**ページに自動的に追加されます。コンポーネント名が含まれていない場合、手動でコンポーネント名を付けて表を更新します。

Create Results Table - Define Integrationページで、分析試料と内部標準が左側に表示されます。現在の積分パラメータは代表サンプルに適用され、クロマトグラムが現れます。

事前に選択した代表サンプルのコンポーネントは**Integration**ペインに表示されます。代表サンプルのピークが検出され、**Integration Defaults**ダイアログに設定されたパラメータで解析されます。

図 14-5 Create Results Table - Define Integrationページ



必要に応じて、ピーク検出パラメータおよび緑の矢印の位置をクロマトグラムのX軸で調整します。これによって、ピーク積分の始点と終点に必要な位置をさらに正確に設定できます。定量化メソッドで保存され、解析されるべきすべてのピークに適用された2つのピーク検出パラメータを調整する視覚的で効率的な方法です。ソフトウェアは、ピークの大きさに対する合理的な制限を考慮する範囲内でこれらのパラメータの制限を制約しています。

クロマトグラムに2つ以上のピークがあり、正しいピークが自動的に選択されなかった場合は、ピークをドラッグして予測保持時間を設定します。実際のピークの出発点から終点までをドラッグし、非常に広い領域や狭い領域を選択しないようにします。理由は、選択した中に1つのピークのみがあるとアルゴリズムが推測するためです。例えば、ピークが1つしか存在しない時に、データのノイズが多く、アルゴリズムが2つの合わさったピークを見つけた場合には、両方のピークを含む領域を選択すると、アルゴリズムが内部パラメータを調節して1つだけピークが発見されます。または、2つ以上の隣り合うピークが存在すると考えられる際に、アルゴリズムがピークを1つ見つけた場合、目的のピークだけに広がる領域を選択します。

10. **Integration Parameters**グループで**Global Baseline**のチェックボックスを選択し、ベースラインとして全体のクロマトグラムを使用します。

このオプションを選択しない場合、ソフトウェアが目的のピーク周辺の狭い範囲のみを対象とします。

11. **Allow Non-Linear Baseline**のチェックボックスを選択し、線形ベースラインまたは非線形ベースラインを選択します。非線形ベースラインは各ピークの下のベースラインを推測します。線形ベースラインはピークの特定のグループの始点と終点にあるポイント間にラインを適合させます。
12. 左側のペインにあるコンポーネント名をクリックして、各コンポーネントのピーク積分を確認してください。積分パラメータを調整し、適切に解析された代表ピークを取得してください。
13. コンポーネントの**Minoxidol**、**Tolbutamide**、および**Reserpine**には、**Regression**グループパラメータを使用して次のように設定し**Apply**をクリックします。
 - ・ **Parameter** : Area
 - ・ **Fit** : Linear
 - ・ **Weighting**: None
14. **Concentration Units**をng/mLに設定し、**Apply units to all Analytes**チェックボックスを選択します。
15. **Apply**をクリックします。
16. **Finish**をクリックします。

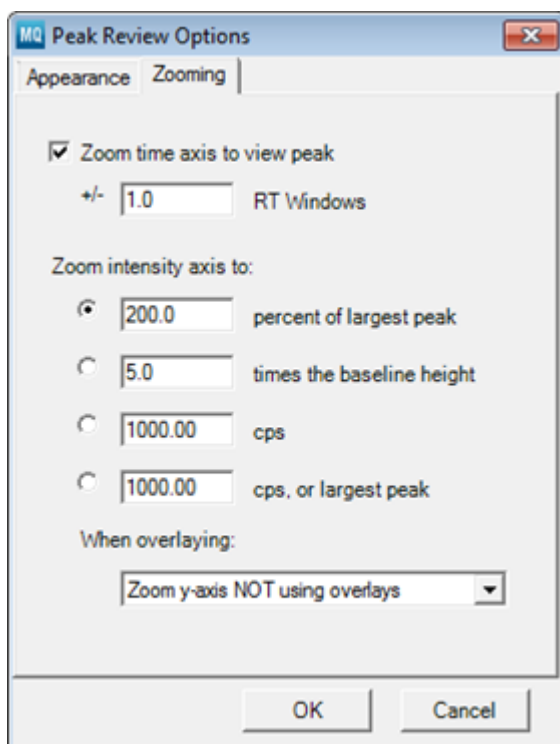
サンプルファイルは自動的に解析され、**Results Table**が生成されます。

Results Tableのデータを管理するために、[ピークのレビュー 該当ページ 102](#)を参照してください。レポート作成に関する詳細は[Reports 該当ページ 138](#)を参照してください。

ピークのレビュー

1. **Peak Review**アイコンをクリックします。
2. テーブルを右クリックし、**Column Settings**をクリックします。
3. **SF Saturated**列が表示されるようにします。
4. **Peak Review**ペインを右クリックし**Options**をクリックします。
5. **Zooming**タブでは、**Zoom time axis to view peak**を1に変更します。
6. **Zoom intensity axis**を**200 percent of largest peak**に設定します。

図 14-6 Peak Review Options



7. 赤矢印を使って、ピークをスクロールします。

検出器が飽和している場合、ピークは通常よりも平らになって現れます。例えば、このピークがピーク周囲で赤いプロファイルでありYesがSF Saturated列に現れることがあります。これはピーク強度が1.8⁶ cpsの飽和閾値よりも上にあるためです。

注： 代表サンプルはすべてのコンポーネントに適切であるとはいえない場合があります。新しい代表サンプルは、ピークレビュー中および新しいモデルを作成中に選択することができます。

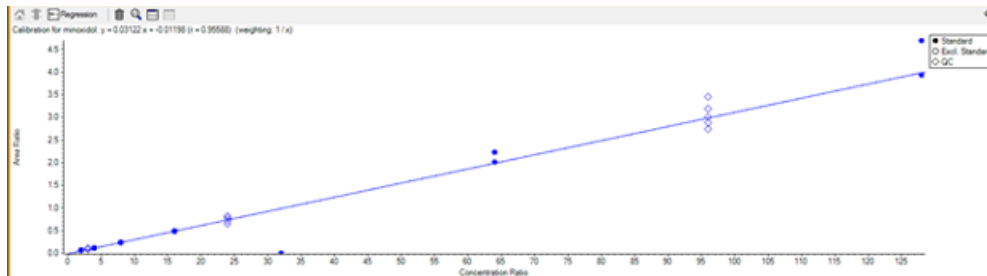
8. 新しいモデルを作成するために、新しいピークを選択しUpdate Peak Modelアイコンをクリックします。他のピークの形と類似し、飽和していないピークを選択します。
9. 右クリックをしてUpdate Quantitation Method for Componentをクリックし、コンポーネント中のすべてのサンプルに変更を適用します。

キャリブレーションカーブの修正

1. Show Calibration Curveアイコンをクリックし、キャリブレーションカーブを表示します。

2. 凡例を追加するには、**Calibration**ペインを右クリックし、**Show Legend**をクリックします。

図 14-7 キャリブレーションカーブ



3. QCを曲線に追加するために、**Calibration**ペインを右クリックし、**Show QCs**をクリックします。

ヒント！ 曲線からポイントを除外するために、カーブのポイントをクリックし、**Exclude**をクリックします。

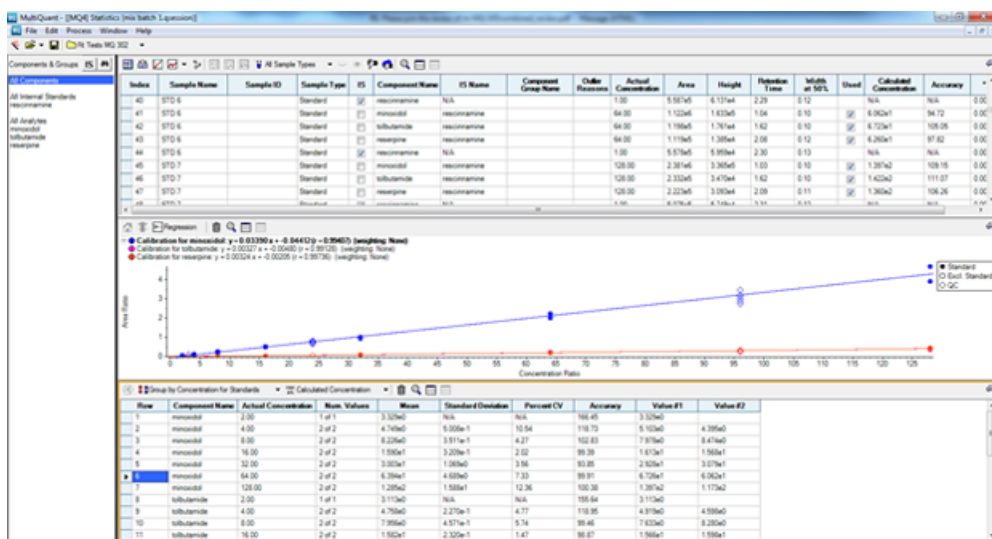
4. 個々の分析試料に対する回帰パラメータを確認または編集するために、**Components and Group**リストの分析試料を選択し、ツールバー上の**Regression**ボタンをクリックします。

Review Sample Statistics

ユーザーはひとつのResults Tableの統計に対してレビューできます。反復プロセスによって、ピーク積分、キャリブレーションカーブ、サンプル統計を確認します。

1. Results Tableが開いている状態で**Show Statistics Table**アイコンをクリックします。
2. **Sample Grouping**リストより、（特定の分析試料について）サンプルをどのようにグループ化するかを指定するための項目をクリックします。

図 14-8 Statistics Pane



3. **Metric**リストから項目をクリックし、統計計算に使用する実際のメトリックを指定します。
4. **Value**列を確認してください。取り消されたポイントは除外したデータポイントを示します。

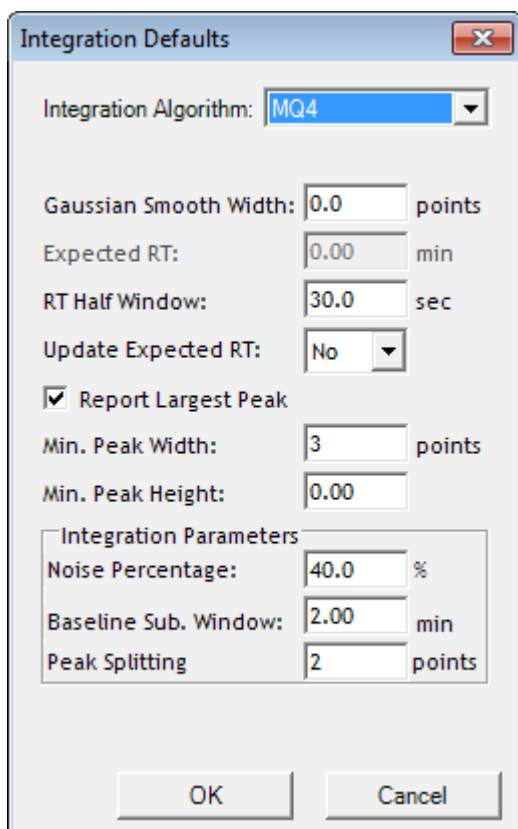
MQ4 Integration Algorithmによるデータ処理

Set the Peak Integration Parameters

次の手順に従って、データを処理する前に積分アルゴリズムを確認または設定してください。
[MQ4 Integration Algorithm Parameters](#) 該当ページ 121を参照してください。

1. Analyst® MDソフトウェアで、**Navigation**バーの**Companion Software**の下に**MultiQuant 3.0.3**をダブルクリックします。
2. **Edit > Project Integration Defaults**をクリックします。
3. **Integration Defaults**ダイアログの**Integration Algorithm**リストから、**MQ4**を選択してください。

図 14-9 Integration Defaultsダイアログ



4. 必要に応じて、プロジェクトのパラメータを変更しOKをクリックします。

MQ4積分アルゴリズムおよびパラメータ設定は、この**Example**プロジェクトフォルダに作られるすべての新しいメソッドに使われます。これらはプロジェクト中心のデフォルト設定です。他のプロジェクトのデフォルト設定を変更するには、選択したプロジェクトにこの方法を繰り返します。

Results Tableの作成

1. **File > New Results Table**をクリックします。
2. **Create Results Table - Select Samples**ページで、**Example Data**フォルダを展開し、**Mix_batch_1.wiff**ファイルを**Selected**ペインにドラッグします。
3. **Next**をクリックします。
4. **Create New Method (MQ4)**オプションをクリックします。
5. **New**をクリックします。

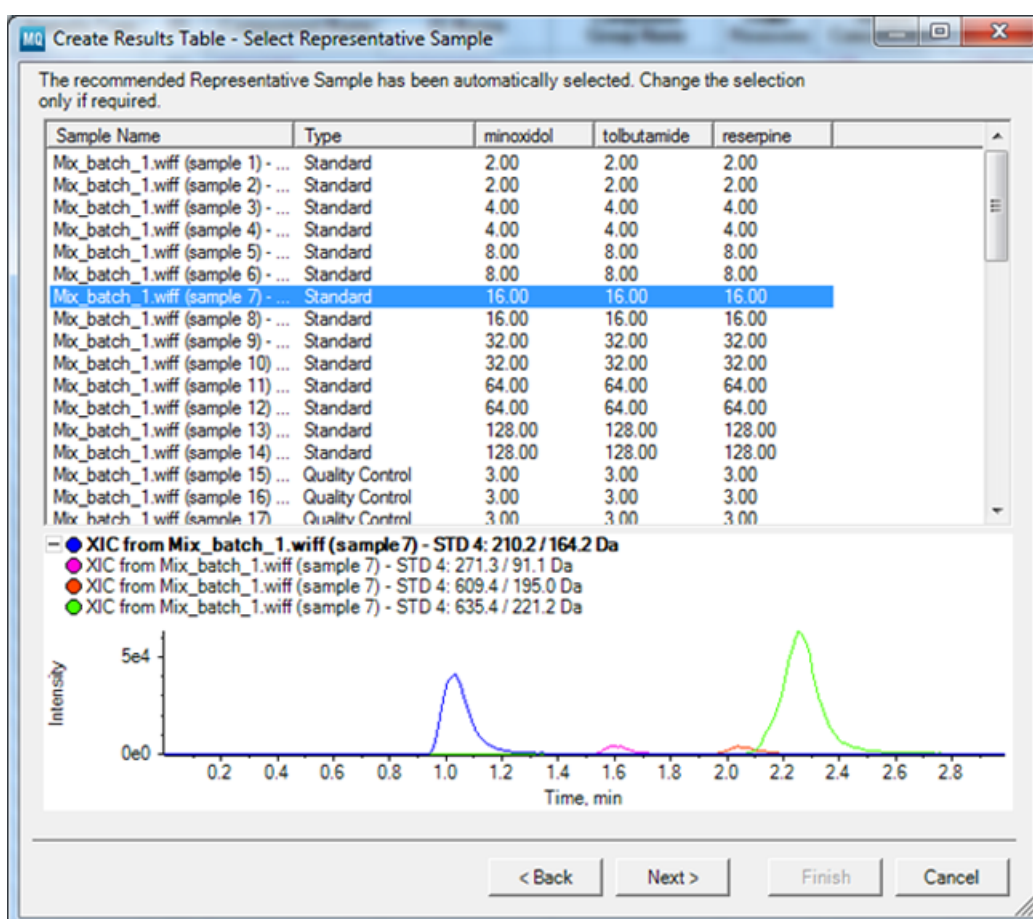
6. **Save Quantitation Method As**ダイアログのメソッドの名称を入力し、**Save**をクリックします。

このチュートリアルでは、メソッドを作成します。メソッドを作成することで、データ積分のための異なるパラメータを確認し適用する機会が得られます。

既存のメソッドがある場合、**Choose Existing Method**オプションを選択し、**Edit Method**チェックボックスを選択するとそのメソッドのさまざまなパラメータを確認し適用できます。**Edit Method**チェックボックスが選択されていない場合、ウィザードによって既存のメソッドを使用して**Results Table**が作成されます。

7. **Create Results Table - Select Representative Sample**ページでは、代表サンプルが推奨されており、選択できます。

図 14-10 Create Results Table - Select Representative Sampleページ



8. **Next**をクリックします。

ソフトウェアは、クロマトグラムの選択に基づいた代表サンプルを推奨しており、これにより全体のバッチを合わせる積分パラメータを選択するための一番の条件が得られます。分析試料濃度情報が.wiffファイルに組み込まれている場合、MQ4積分アルゴリズムの2番目

に低い濃度の標準物質またはQCサンプルの選択が推奨されます。例えば、濃度幅が1から8までである場合、2番目に低いものが2にあたります。デフォルトの代表サンプルの強度が十分でない場合、ウィザードの**Back**ボタンをクリックして別の代表サンプルを選択し、他のサンプルを選択してください。他のサンプルはピークレビュー中に選択できます。[ピークのレビュー 該当ページ 110](#)を参照してください。

9. **Create Results Table - Define Components**ページで、分析試料と内部標準を確認します。

図 14-11 Create Results Table - Define Componentsページ

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

Experiment: **MRM (4 transitions)**

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

< Back Next > Finish Cancel

10. **Next**をクリックします。

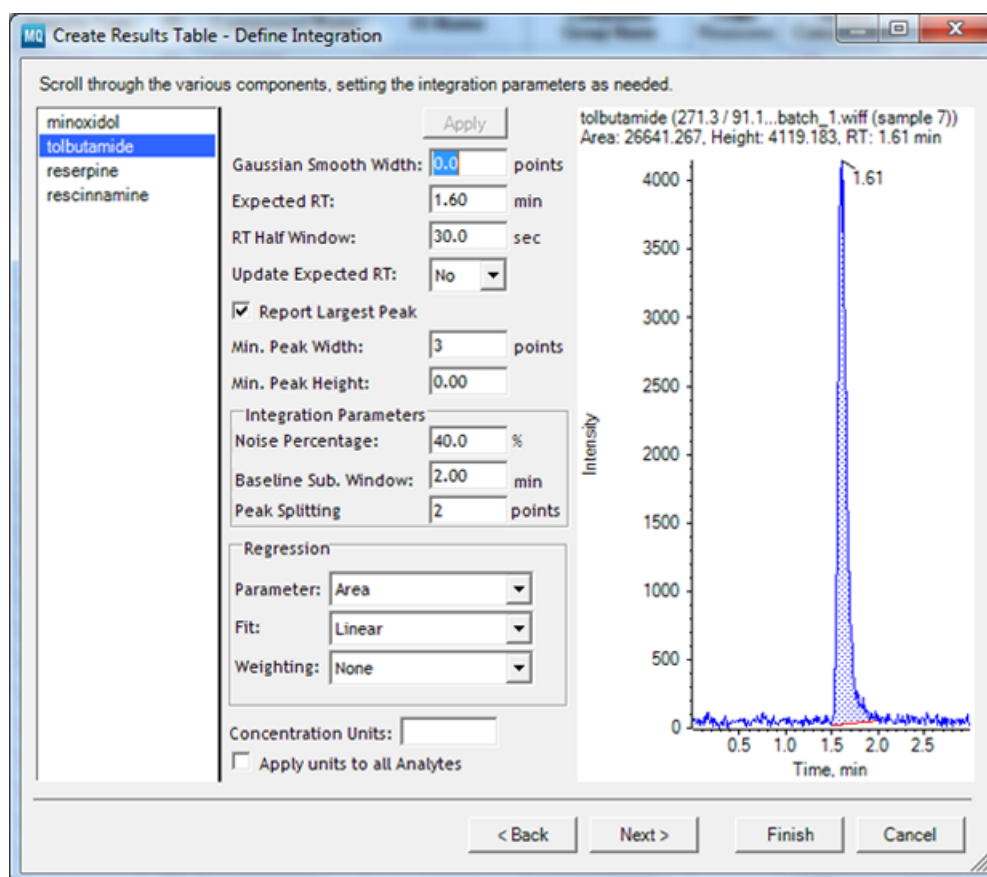
注：測定メソッドを作成する際、コンポーネント名が質量範囲表のID列に含まれている場合、その名前は**Define Components**ページに自動的に追加されます。コンポーネント名が含まれていない場合、手動でコンポーネント名を付けて表を更新します。IS拡張子がコンポーネント名に追加される場合、ソフトウェアは内部標準としてコンポーネントを認識し、内部標準としてISコンポーネントを適合する分析試料に割り当てます。

Create Results Table - Define Integrationページで、分析試料と内部標準が左側に表示されます。現在の積分パラメータは代表サンプルに適用され、クロマトグラムが現れます。

事前に選択した代表サンプルのコンポーネントは**Integration**ペインに表示されます。代表サンプルのピークが検出され、**Integration Defaults**ダイアログに設定されたパラメータで解析されます。

11. 左側のペインにあるコンポーネント名をクリックして、各コンポーネントのピーク積分を確認してください。積分パラメータを調整し、適切に解析された代表ピークを取得してください。[Set the Peak Integration Parameters](#) 該当ページ 105を参照してください。

図 14-12 Create Results Table - Define Integrationページ

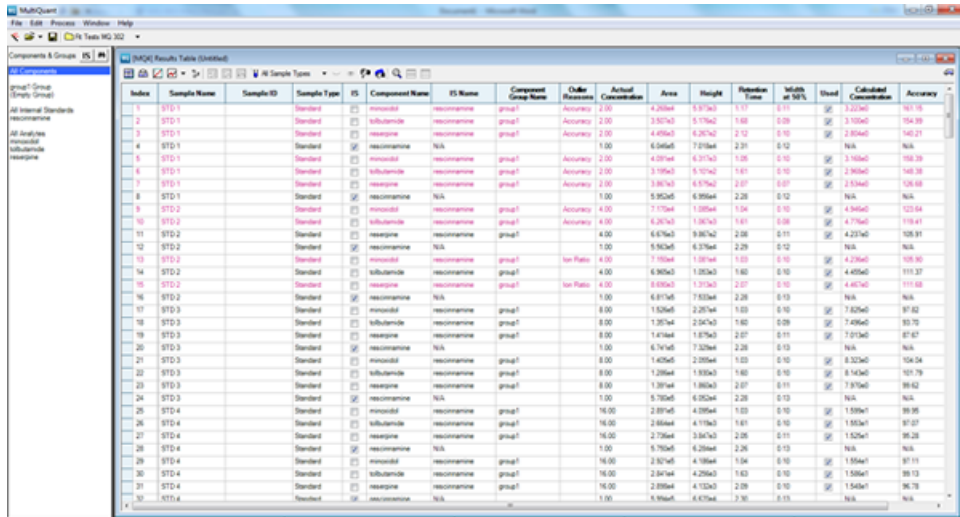


12. コンポーネントのMinoxidol、Tolbutamide、およびReserpineには、**Regression**グループパラメータを使用して次のように設定し**Apply**をクリックします。
 - ・ **Parameter** : Area
 - ・ **Fit** : Linear
 - ・ **Weighting**: None
13. **Concentration Units**をng/mLに設定し、**Apply units to all Analytes**チェックボックスを選択します。
14. **Apply**をクリックします。

15. Finishをクリックします。

サンプルファイルは自動的に解析され、Results Tableが生成されます。

図 14-13 Results Table



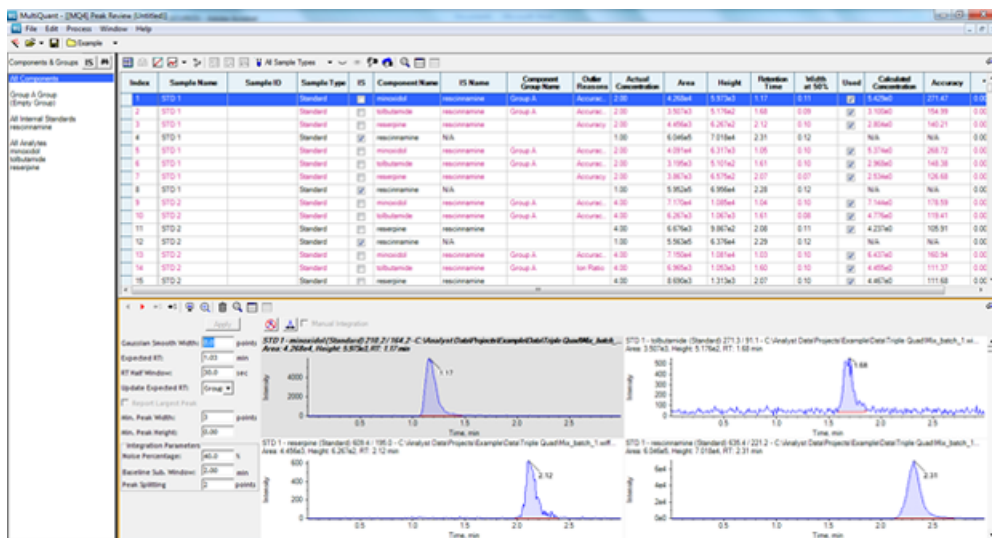
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Other Name	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD-1		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.20e4	5.17e3	1.17	0.11	☑	5.17e3	101.16
2	STD-1		Standard	☑	influenza	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.57e3	5.17e3	1.88	0.09	☑	3.10e3	154.99
3	STD-1		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.49e3	6.26e3	2.12	0.10	☑	2.85e3	140.21
4	STD-1		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	6.04e3	7.01e3	2.31	0.12	☑	N/A	N/A
5	STD-1		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.03e3	6.31e3	1.05	0.10	☑	3.10e3	154.99
6	STD-1		Standard	☑	influenza	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.10e3	5.17e3	1.61	0.10	☑	2.96e3	148.38
7	STD-1		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.87e3	6.57e3	2.07	0.07	☑	2.53e3	126.68
8	STD-1		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	5.92e3	6.95e3	2.28	0.12	☑	N/A	N/A
9	STD-2		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	7.17e3	1.08e4	1.04	0.10	☑	4.94e3	123.84
10	STD-2		Standard	☑	influenza	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.26e3	1.06e3	1.61	0.08	☑	4.47e3	119.41
11	STD-2		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.67e3	9.86e3	2.08	0.11	☑	4.23e3	108.91
12	STD-2		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	5.92e3	6.57e3	2.28	0.12	☑	N/A	N/A
13	STD-2		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	7.10e3	1.08e4	1.03	0.10	☑	4.29e3	108.90
14	STD-2		Standard	☑	influenza	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.90e3	1.06e3	1.60	0.10	☑	4.47e3	111.68
15	STD-2		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.67e3	7.03e3	2.28	0.10	☑	N/A	N/A
16	STD-2		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	6.04e3	7.01e3	2.31	0.12	☑	N/A	N/A
17	STD-3		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.02e4	2.20e4	1.03	0.10	☑	7.62e3	97.62
18	STD-3		Standard	☑	influenza	recombinant	group1		8.00	1.30e4	2.04e3	1.60	0.09	☑	7.49e3	93.70
19	STD-3		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.47e4	1.87e3	2.07	0.11	☑	7.97e3	97.62
20	STD-3		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	6.70e3	7.32e3	2.28	0.10	☑	N/A	N/A
21	STD-3		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.42e3	2.20e4	1.03	0.10	☑	8.32e3	104.04
22	STD-3		Standard	☑	influenza	recombinant	group1		8.00	1.28e4	1.83e3	1.60	0.10	☑	8.14e3	101.79
23	STD-3		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1		8.00	1.30e4	1.86e3	2.07	0.11	☑	7.97e3	99.62
24	STD-3		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	5.70e3	6.25e3	2.28	0.10	☑	N/A	N/A
25	STD-4		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.01e4	4.39e4	1.03	0.10	☑	1.55e4	99.95
26	STD-4		Standard	☑	influenza	recombinant	group1		16.00	2.05e4	4.11e3	1.61	0.10	☑	1.55e4	97.07
27	STD-4		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.73e4	3.84e3	2.08	0.11	☑	1.52e4	95.28
28	STD-4		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	5.70e3	6.25e3	2.28	0.10	☑	N/A	N/A
29	STD-4		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.92e4	4.18e3	1.54	0.10	☑	1.55e4	97.11
30	STD-4		Standard	☑	influenza	recombinant	group1		16.00	2.94e4	4.29e3	1.63	0.10	☑	1.55e4	99.13
31	STD-4		Standard	☑	recombinant	recombinant	group1		16.00	2.89e4	4.13e3	2.09	0.10	☑	1.54e4	96.78
32	STD-4		Standard	☑	recombinant	N/A			1.00	5.70e3	6.25e3	2.28	0.10	☑	N/A	N/A

Results Tableのデータを管理するために、ピークのレビュー 該当ページ102を参照してください。レポート作成に関する詳細はReports 該当ページ138を参照してください。

ピークのレビュー

1. Peak Reviewアイコンをクリックします。

図 14-14 Peak Review Pane



2. テーブルを右クリックし、**Column Settings**をクリックします。
3. **Peak Review**ペインを右クリックし**Options**をクリックします。
4. **Zooming**タブでは、**Zoom time axis to view peak**を**3 RT Windows**に変更します。
5. クロマトグラムに複数のピークが含まれ、不適切なピークが積分された場合は、正しいピークの上をドラッグして、新しい**Expected RT**を設定します。必要に応じて、ピーク検出パラメータと積分パラメータを調整します。[Integration Algorithms 該当ページ 113](#)を参照してください。
6. 新しいパラメータをその他すべてのサンプルに適用するには、同じコンポーネントについては、クロマトグラムの中を右クリックし、**Update Quantitation Method for Component**をクリックします。
7. **Edit > Modify Results Table Method**をクリックして**Results Table**を表示しながら、組み込まれている定量化メソッドを修正できます。ユーザーは、積分パラメータの回帰オプションと各コンポーネントに対するコンポーネントの情報を変更できます。

積分パラメータ回帰オプションおよび各コンポーネントに対するコンポーネント情報を変更した場合、**Results Table**に組み込まれた定量化メソッドのみが修正されます。**Results Table**の作成に使用する実際の定量化メソッドは修正されません。このような組み込まれた定量化メソッドを使用して他のデータファイル进行处理の場合は、**Export**機能を使用して、組み込まれたメソッドをメソッドファイルにエクスポートします。

注： **Set Peak to Not Found**をクリックして積分をクリアし、手動でピークを積分する前の生データを見てください。

8. 手動積分モードを使用するには、**Peak Review**ペインの**Enable Manual Integration Mode**アイコンをクリックします。目的のピークの一方のベースからもう一方のベースまでカーソルをドラッグします。これでピークが手動で積分され、前回使用した積分パラメータは利用できなくなります。

ヒント！ ピークが修正されたばかりである場合、ピークを右クリックして元のメソッドに回復させ、次に**Revert Peak to Original Method**をクリックします。

注： **Results Table**内の**Calculated Concentration**フィールドは、曲線を標準点に合わせた結果の変更を反映しています。

キャリブレーションカーブの修正

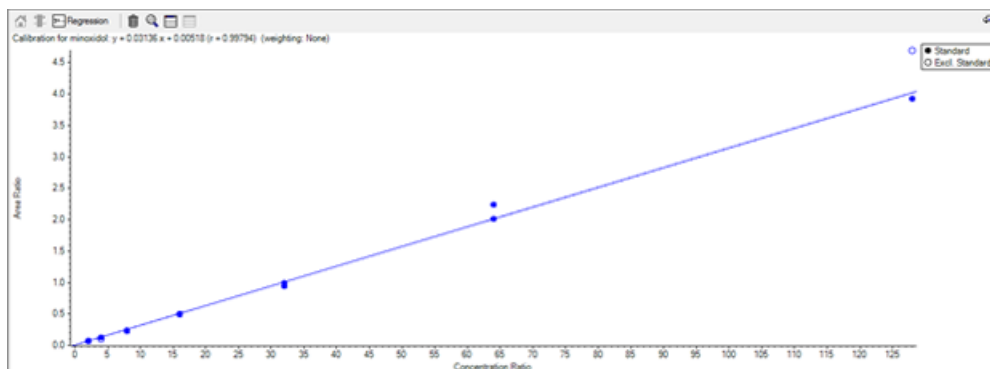
1. **Show Calibration Curve**アイコンをクリックし、キャリブレーションカーブを表示します。
2. 凡例を追加するには、**Calibration**ペインを右クリックし、**Show Legend**をクリックします。

- QCを曲線に追加するために、**Calibration**ペインを右クリックし、**Show QCs**をクリックします。

ヒント！ 曲線からポイントを除外するために、カーブのポイントを右クリックし、**Exclude**をクリックします。

- 個々の分析試料に対する回帰パラメータを確認または編集するために、**Components and Group**ペインの分析試料を選択し、ツールバー上の**Regression**ボタンをクリックします。
- キャリブレーションカーブフィットをよくするために、2番目のSTD 2サンプル（4.00 ng/mL濃度）、および初めのSTD 7サンプル（128.00 ng/mL濃度）を除外します。この操作を実行するために、**Actual Concentration**列および**Used**列を使って、サンプルを削除します。Used列のチェックボックスをクリアし、曲線からポイントを削除します。キャリブレーションカーブは図 14-15に示された図のように見えるはずです。

図 14-15 除外サンプルによるキャリブレーションカーブ



Review Sample Statistics

ユーザーはひとつのResults Tableの統計に対してレビューできます。反復プロセスによって、ピーク積分、キャリブレーションカーブ、サンプル統計を確認します。

- Results Tableが開いている状態で**Show Statistics Table**アイコンをクリックします。

14-16 Statistics Table

MultiQuant (MQ4) Statistics (Untitled) [File Edit Process Window Help]

Components & Groups IS #

Group A Group
Group A Group

Internal Standards
recognition

Analysis
recognition

recognition

Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Order Reason	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
2	STD 1		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Accuracy	2.00	3.767e3	5.716e2	1.68	0.08		2.427e0	121.33
6	STD 1		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	2.00	3.105e3	5.107e2	1.61	0.10		2.250e0	114.59
10	STD 2		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	4.00	6.267e3	1.067e3	1.61	0.08		4.107e0	103.43
14	STD 2		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	4.00	6.905e3	1.053e3	1.60	0.10		3.809e0	95.23
18	STD 3		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	8.00	1.261e4	2.047e3	1.60	0.09		6.912e0	86.40
22	STD 3		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	8.00	1.285e4	1.930e3	1.60	0.10		7.979e0	94.65
26	STD 4		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	16.00	2.654e4	4.176e3	1.61	0.10		1.511e1	96.44
30	STD 4		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	16.00	2.841e4	4.295e3	1.63	0.10		1.545e1	96.54
34	STD 5		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	32.00	5.828e4	8.427e3	1.61	0.09		2.881e1	90.23
38	STD 5		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	32.00	5.517e4	8.437e3	1.62	0.09		3.095e1	95.59
42	STD 6		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	64.00	1.115e5	1.702e4	1.61	0.09		6.304e1	98.50
46	STD 6		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	64.00	1.108e5	1.707e4	1.62	0.10		6.782e1	108.97
50	STD 7		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	128.00	2.332e5	3.475e4	1.62	0.10		1.444e2	112.83
54	STD 7		Standard		ibuprofen	recognition	Group A	Ion Ratio	128.00	2.295e5	3.485e4	1.60	0.09		1.196e2	90.38
58	QC 1		Quality Control		ibuprofen	recognition	Group A	Accuracy	3.00	5.759e3	8.789e2	1.60	0.09		3.795e0	125.10

Group by Concentration for Standards

Calculated Concentration

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	ibuprofen	2.00	2 of 2	2.355e0	9.541e-2	4.04	117.96	2.427e0	2.250e0
2	ibuprofen	4.00	2 of 2	3.979e0	2.320e-1	5.84	99.33	4.107e0	3.809e0
3	ibuprofen	8.00	2 of 2	7.342e0	4.470e-1	6.45	99.52	6.912e0	7.979e0
4	ibuprofen	16.00	2 of 2	1.523e1	2.371e-1	1.55	95.49	1.511e1	1.545e1
5	ibuprofen	32.00	2 of 2	2.973e1	1.213e0	4.08	92.91	2.881e1	3.095e1
6	ibuprofen	64.00	2 of 2	6.543e1	3.385e0	5.17	102.23	6.304e1	6.782e1
7	ibuprofen	128.00	2 of 2	1.300e2	2.541e1	19.70	101.98	1.444e2	1.196e2

2. **Sample Grouping** リストより、（特定の分析試料について）サンプルをどのようにグループ化するかを指定するための項目をクリックします。
3. **Value #1**列をクリックします。

注： **Group by Concentration for Standards and QCs**は**Displayed Actual Concentration**に基づいており、Results Tableに保存された**Actual Concentration**に基づいていません。Std 1濃度が0.001、Std 2濃度が0.005で、表示フォーマットが0の場合、Std 1とStd 2は一緒にグループ化されます。理由は両方とも0として扱われるためです。これらを別々にしてグループにするために、**Column Settings**ダイアログ中で、**Analyte Concentration**の精度を0.000に設定してください。Std 1が0.500、Std 2が0.499である場合、それらをまとめてグループにするためには、精度を0.00に設定してください。 [Modify the Columns Shown in the Results Table 該当ページ 95](#)を参照してください。

4. **Metric**リストから項目をクリックし、統計計算に使用する実際のメトリックを特定します。
5. **Value**列を確認してください。取り消されたポイントは除外したデータポイントを示します。

Integration Algorithms

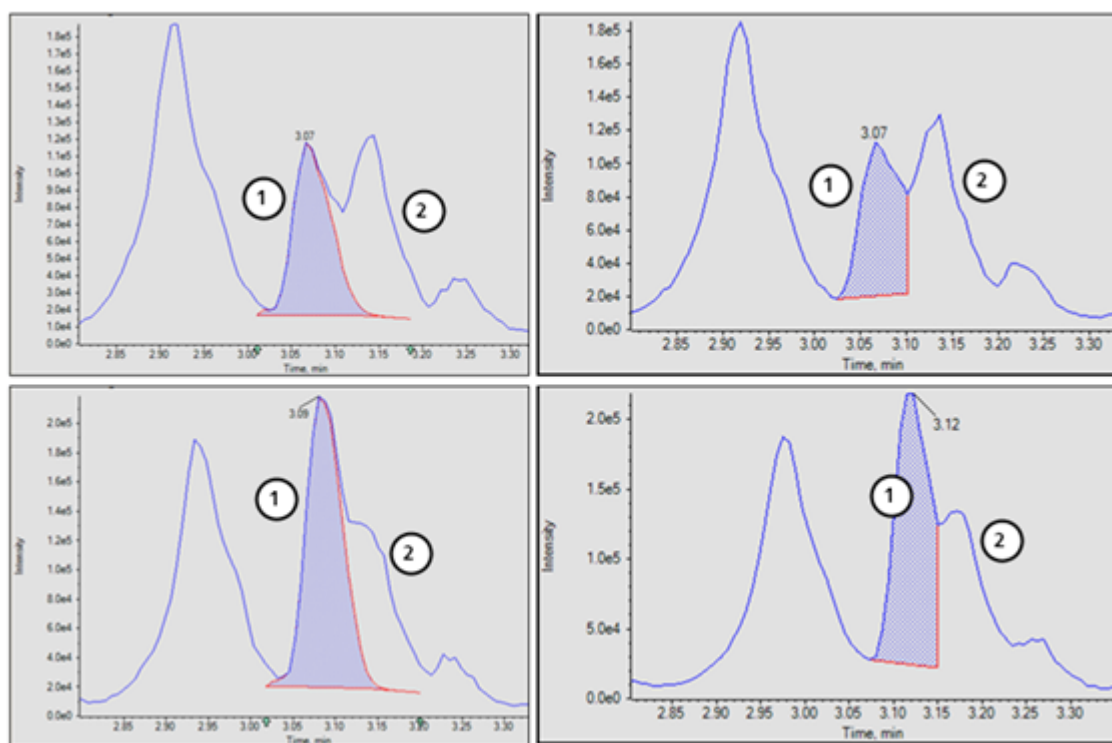
このセクションでは各アルゴリズムで利用可能なさまざまなパラメータについて説明します。

SignalFinder Integration Algorithmについて

Closely Eluting Peaks

SignalFinder™によって、近接した溶出ピークのピーク領域に関するさらに精度の高い表現が得られます。図 14-17は、MQ4（グラフの右側）およびSignalFinder（グラフの左側）の積分アルゴリズムによる近接した溶出ピークの対処方法の例を示しています。この例では、バックグラウンドピーク（項目2）は目的のピーク（項目1）を干渉しています。干渉ピークはLCまたはマトリックスのいずれかから生じるため、全体のバッチを通してほぼ一定です。しかし、分析試料のピーク強度は分析試料の濃度の増加と共に増強し、これにより組み合わさったピークの形は劇的に変化することになります。SignalFinder積分アルゴリズムは、ユーザーが定義したピークモデルを基にしており、すべての濃度レベルで目的のピークを常に同定できますが、MQ4積分アルゴリズムは、ピークの谷からベースラインまで垂直線を引くことしかできません。これは、部分的なピークのみを解析し、ピーク領域にエラーをもたらします。

図 14-17 Closely Eluting Peaks



項目	説明
1	対象のピーク
2	共溶出バックグラウンドピーク

Tailing Peaks

テールリングピークについて、前述のアルゴリズムはピークが終了した保持時間を選択することで一貫性がなくなることがよくあります。この領域における実際のノイズの性質に応じて、同じように見える2つのピークが、別々に報告されるピークエンドとなる場合があります。通常、ピーク検出パラメータを調整することで解析をもっと一定にすることができます。しかし、これには時間と努力が必要です。モデル化アプローチによりモデルが閾値よりも下になる場合、解析はカットオフされるため、ノイズによる影響がかなり減少します。

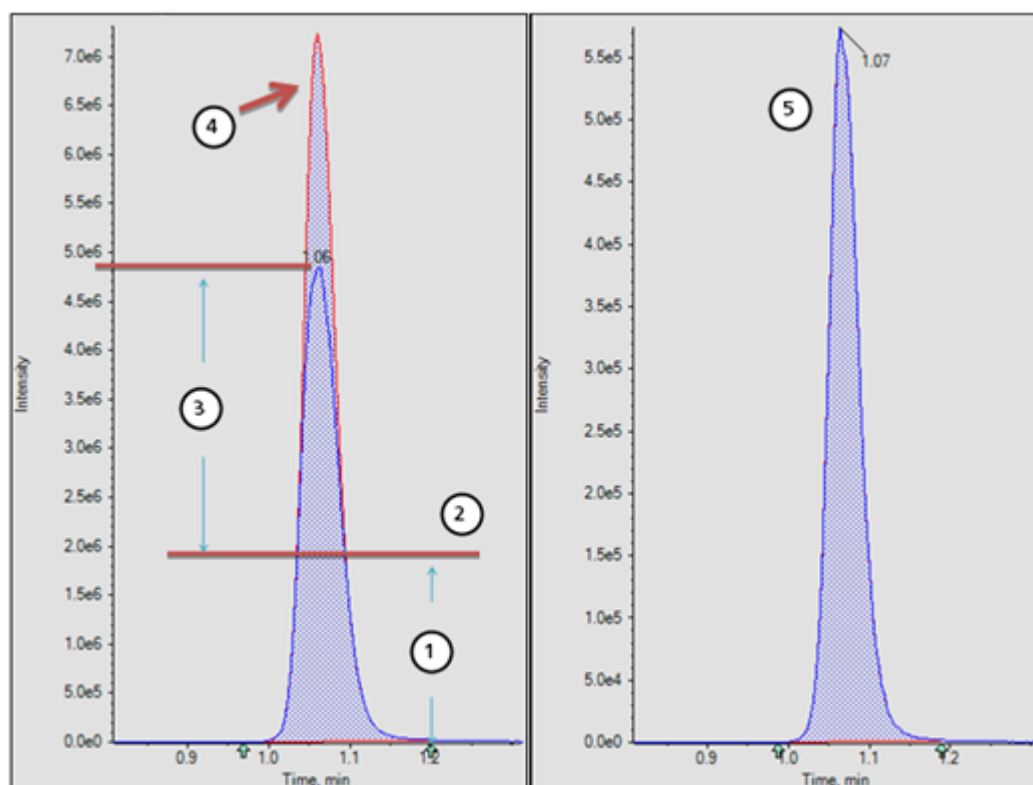
Saturated Peaks

アルゴリズムによってピークの飽和が検出されると、検出器が飽和しない場合はピークがどのように見えるかを予測するモデルを使用します。この予測ピークは、ピークの上に広がる赤いプロファイルとして表示され、検出器が飽和しなかった場合に得られたはずのおおよその反応を示します。この機能は検出器の飽和を補正するだけであり、イオン源の飽和またはカラムの飽和を補正しません。[図 14-18](#)は飽和補正の例を示しています。

SignalFinder™アルゴリズムを使用する前に、ピークモデルを作り上げるために使用する飽和していないサンプルを選択し、検出器に対して適した値に飽和閾値を設定します。この例では、 $1.8\text{E}+006$ cpsの飽和閾値が使用されています。このアルゴリズムは、 $1.8\text{E}+006$ cpsよりも下にあるピークの飽和していない部分をピークモデルに適合します。その後、アルゴリズムは、選択したピークモデルに基づいて赤いトレースで示したピークの残りを予測します。

注：飽和閾値は、検出器の種類、検出器の使用年数、目的の化合物など多くの要因に依存します。最適な結果のために、飽和閾値は適切に調整する必要があります。

図 14-18 検出器飽和補正



項目	説明
1	飽和していない部分（ピークモデルに適合）
2	閾値は1.8e6 cps
3	飽和位置
4	補正したピークプロファイル
5	ピークモデル

Notes on Use

いくつかのワークフローは、目的のコンポーネントすべてを含む典型的なサンプルではありません。例えば、創薬研究では、親薬物のQ1質量に+16を、またはQ3質量に+0か+16を加えて、酸化代謝物の検索を行う場合があります。これらの代謝物は通常いくつかのサンプルに存在しますが、定量化メソッドを作成するために使用するモデルとしてサンプルを選択する必要はありません。このような、特定のMRMトランジションに対して、妥当なピークが標準的なサンプルに存在しない場合、SignalFinder™アルゴリズムはデフォルトモデルを使用することになります。多くの場合、このデフォルトモデルは十分な精度を示します。しかし、目的のピークが実際に含まれるサンプルを使用して後続のピークレビューの際に、新しいモデルを作成することも可能です。

SignalFinder™ Integration Algorithm Parameters

以下の各パラメータは、目的のピークを同定および報告するために使用します。使用可能なパラメータの全リストについては、[Integration Algorithm Parameters 該当ページ 126](#)を参照してください。

Use Saturation Correction

このオプションを使用できるのは、全体的なアルゴリズムのデフォルト値を設定するときのみで、定量化メソッドの作成時や個別のピークレビュー時は使用できません。これは、一部のピークだけに対応した設定では、この設定を使用しても便利ではないためです。

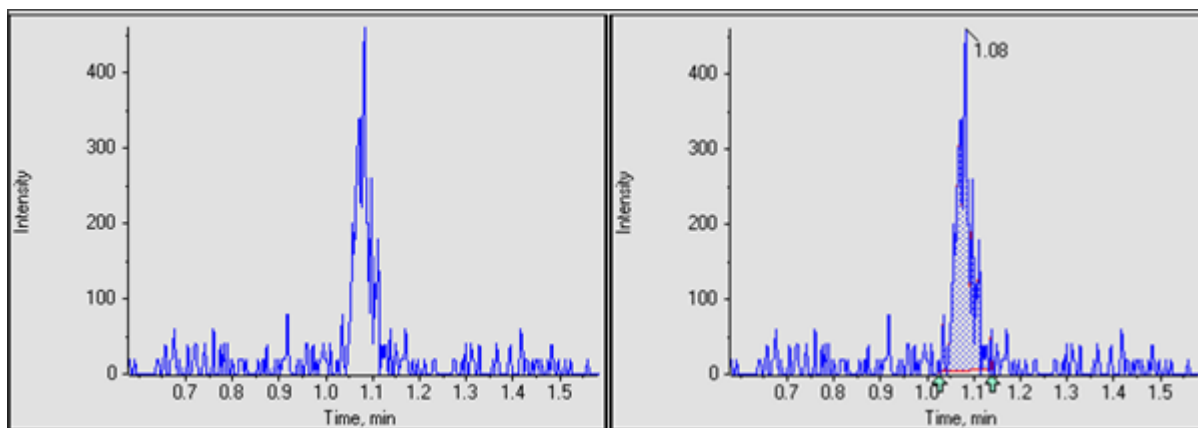
Saturation Threshold

この閾値よりも上のピークは飽和しているとみなします。この値は検出器に依存します。

S/N Threshold

図 14-19 では、S/N 閾値が7に設定されている場合（グラフの左側）、ピークはレポートされません。S/N 閾値が2に設定されている場合（グラフの右側）、ピークはレポートされます。このパラメータは解析に影響しません。

図 14-19 S/N Threshold



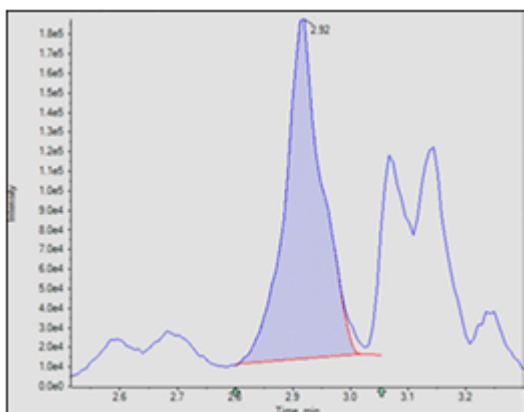
Confidence Threshold

このパラメータは、偽陽性の電位ピークを除去するために使用されます。デフォルト値は50%であり、ほとんどの場合適合します。値を大きくすることで、非常にノイズが大きいデータ、またはピーク幅がサンプルごとにより変動したデータに使用することができます。

図 14-20 および 図 14-21 では **Confidence Threshold** が識別したピーク数にどのように影響を与えるかを示しています。**Confidence Threshold** を50%に設定する場合、小さな肩ピークは1つのピークとして同定されます。**Confidence Threshold** が16%よりも低い場合、SignalFinder™ アルゴリズムは2つのピークを検出します。2つのピーク領域上でドラッグし、2つのピークを表示します。

この単一のピークに潜在的に存在する他のピークを特定するために、正確な**Confidence Threshold**がわからなければ、**Ctrl**を押し目的のピーク領域上でドラッグしてください。これにより、**Confidence Threshold**が自動的に下がり目的の2番目のピークが現れます。これは、**Confidence Threshold**が50%に設定されている場合、現れないピークです。

図 14-20 50%信頼度



16%の信頼度では、2つのピークが検出されます。ピーク領域上でドラッグし、2つのピークを特定します。

図 14-21 16%信頼度

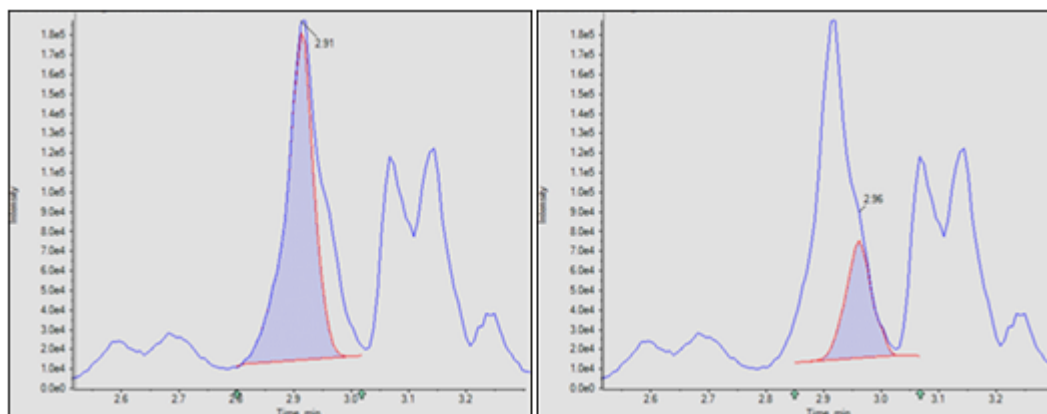
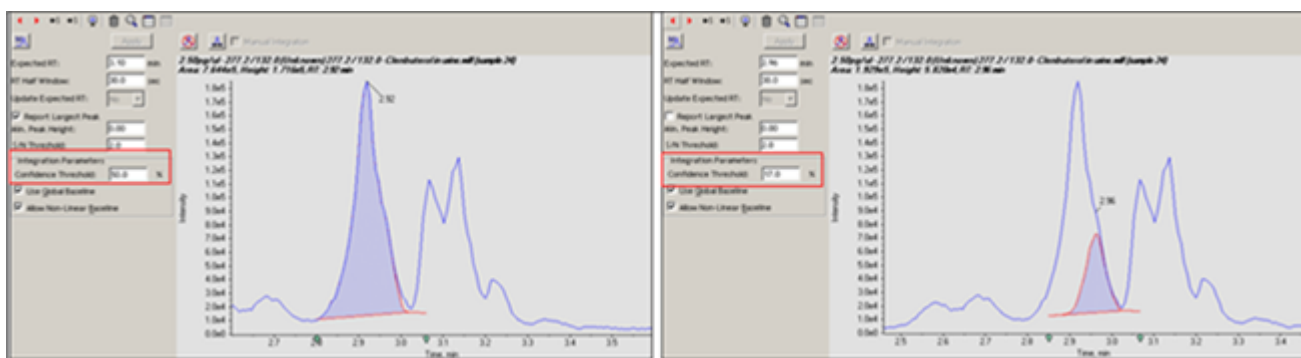


図 14-22 Confidence Thresholdパラメータ

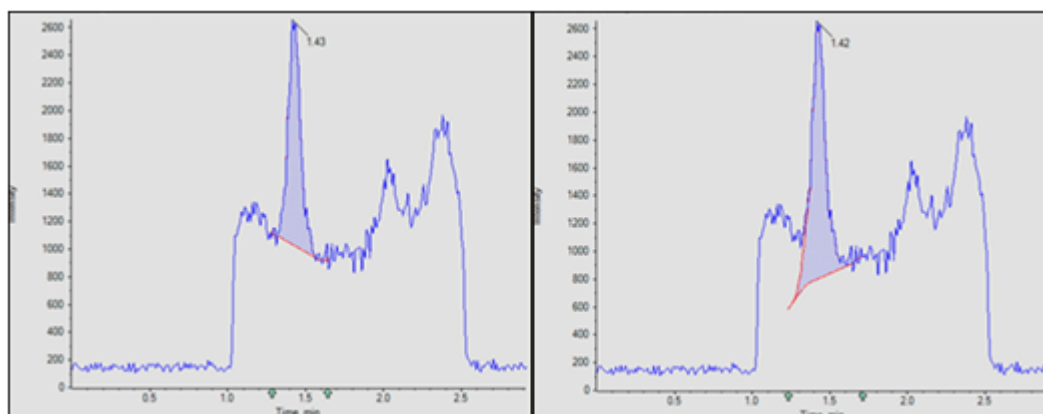


Use Global Baseline

このオプションを選択すると、ベースラインとして全体のクロマトグラムを使用できます。このオプションが選択されていない場合、定量ソフトウェアは局所的なベースラインに対する変化を評価します。図 14-23は、局所ベースラインを使う必要のある例を示しています。

左側のグラフは局所ベースラインを使って適切に積分されたクロマトグラムを表示しています。右側のグラフは全体のベースラインを使って不適切に積分された同じクロマトグラムを表示しています。

図 14-23 Use Global Baseline



Allow Non-Linear Baseline

このオプションを使用すると、線形または非線形ベースラインを選択できます。非線形ベースラインは各ピークの下ベースラインを推測します。線形オプションはピークの特定のグループの始点と終点にあるポイント間にラインを適合させます。図 14-24および図 14-25は共溶出ピークに対する線形および非線形ベースラインの例を表示しています。項目1から4はピークを畳み込み積分したものです。

非線形ベースラインは複数ピークに対して推奨されています。単一のピークには、線形と非線形間の違いは重要ではありません。

図 14-24 線形ベースラインの例

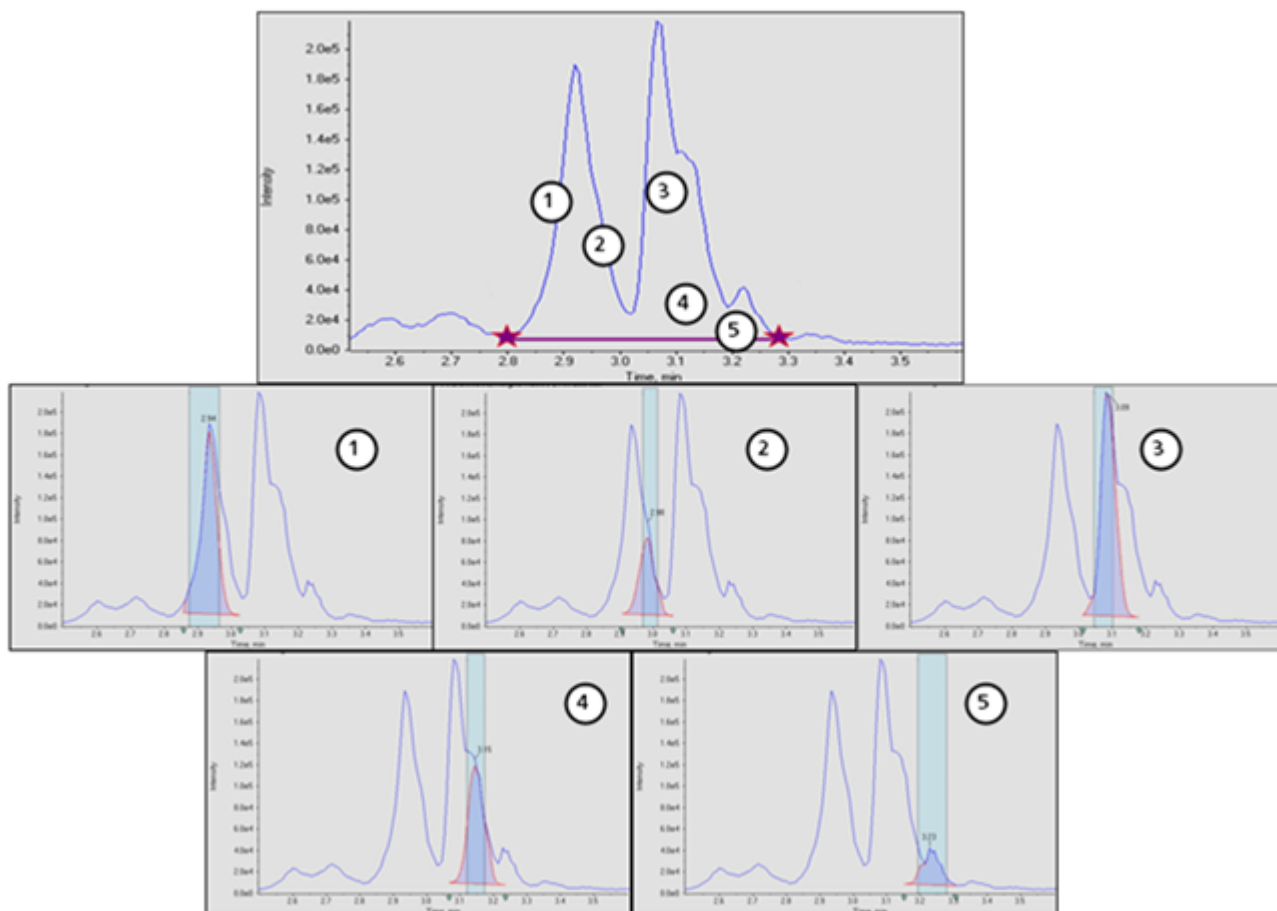
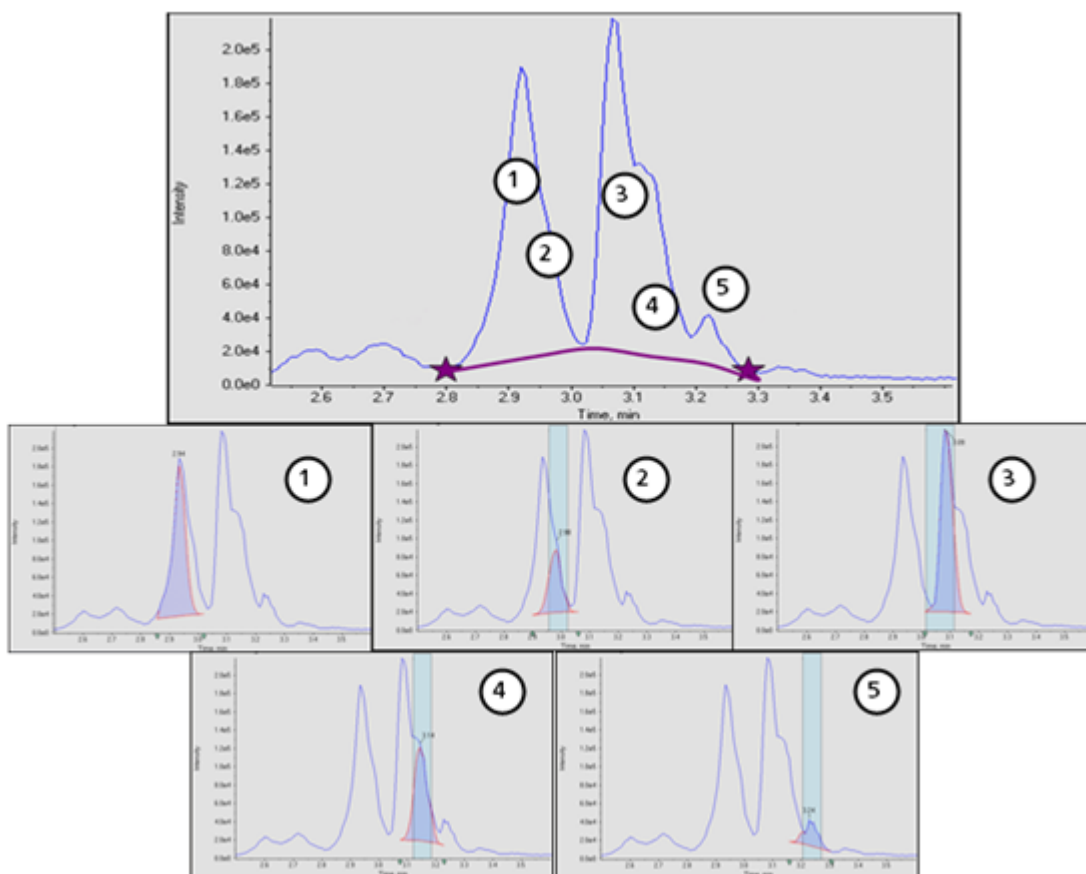


図 14-25 非線形ベースラインの例



SignalFinder™ Integration Algorithmを使うためのヒント

- ・ 2つのピークを合わせる：時に、SignalFinder積分アルゴリズムは2つのピークを検出します。2つのピークを合わせるには、**Ctrl**を押し、2つのピーク上でドラッグします。ソフトウェアは、2つのピークがあまりにも離れすぎでない限り、畳み込みの感度を下げてピークを合わせようとします。
- ・ ピークの開始および終了時間を変更： **Results Table**を作成またはピークレビューの間、ピークの開始または終了時間を変更するには、ピークの開始および終了の矢印をドラッグします。

注： ユーザーは、妥当な範囲内の開始および終了の矢印のみを変更できます。

MQ4 Integration Algorithm Parameters

以下の各パラメータは、目的のピークを同定および報告するために使用します。使用可能なパラメータの全リストについては、[Integration Algorithm Parameters 該当ページ 126](#)を参照してください。

Noise Percentage

このパラメータは、クロマトグラムのノイズレベルを推定する目的で使用します。最小の強度を持つ指定した割合のデータポイントがノイズとみなされます。

通常は、20%~60%の値を指定します。大きなピークが存在する状況で小さなピークが検出されていない場合は、ノイズ率を下げる必要があります。図14-26は、極端に大きなピークが存在する状況における小さなピークの例を示したものです。ノイズ率を90%に設定している場合、このピークは検出されませんが、ノイズ率を40%に設定すると検出されます。

図 14-26 対象のピーク

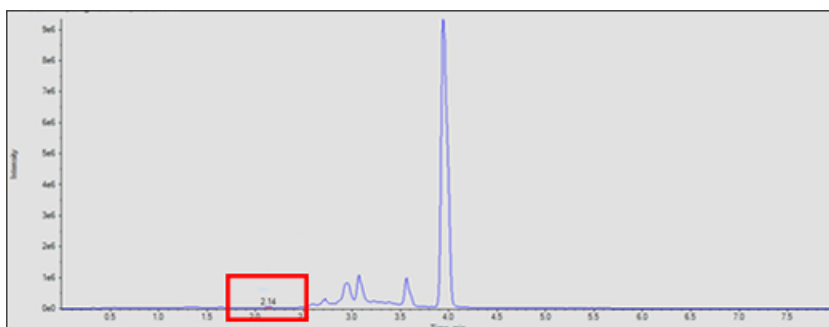
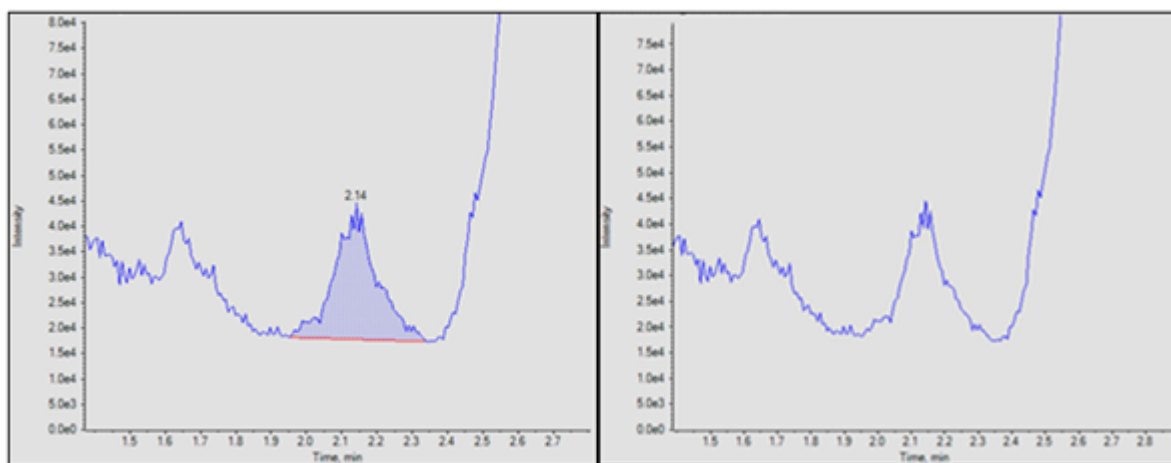


図14-27の左側は、ノイズ率が40%のグラフです。また、右側は90%に設定した場合です。

図 14-27 ノイズレベル

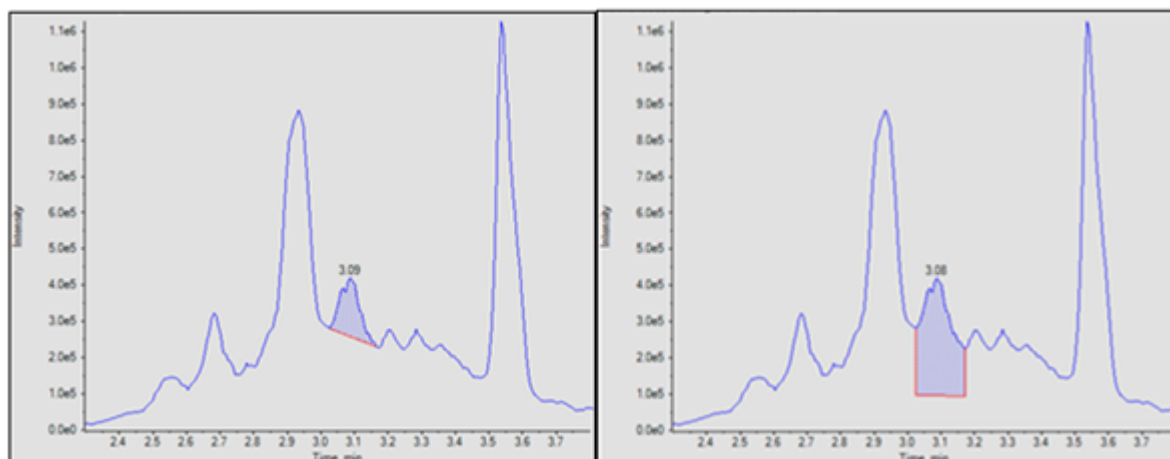


Baseline Sub. Window

スムージング後であっても、その他の処理の実行前は、突出データを排除するためにクロマトグラムがベースライン補正されます。各データポイントについて、ベースラインは、最小の強度（補正ウィンドウの範囲内）を持つ現在のポイントの左右両側にあるデータポイントを使用して計算されます。

予測されるピーク幅より少なくとも数倍大きく設定されている場合、このパラメータの正確な値は重要ではありません。

図 14-28 ベースライン補正ウィンドウ



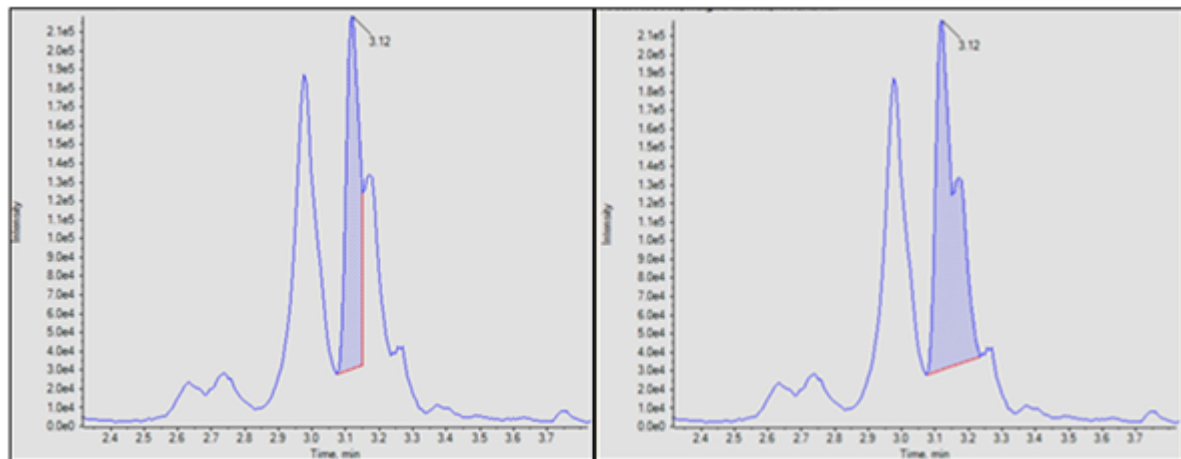
Peak Splitting

このパラメータでは、ノイズが発生する可能性のあるピークを単一のピークとして検出するか、2つ（またはそれ以上）の個別のピークとして検出するのを制御します。2つの電位ピーク間の下落が指定した値未満の場合は、単一のピークとして検出されます。そうでない場合は2つのピークとして検出されます。

このパラメータを大きな値に設定すると、ノイズの多いピークがスプリットされず、2つの独立したピークとして検出されなくなります。ただし、2つの溶出する（重複する）明確なピークが近接して存在する場合は、小さい方の値を使用する必要があります。

左側のグラフでは、2つのポイントにピークスプリットが設定されています。また右側のグラフでは、3つのポイントにピークスプリットが設定されています。

図 14-29 Peak Splitting



オプションのタスク

このセクションではデータ解析を強化するために使用することができるオプションのタスクを含んでいます。

Create Metric Plots

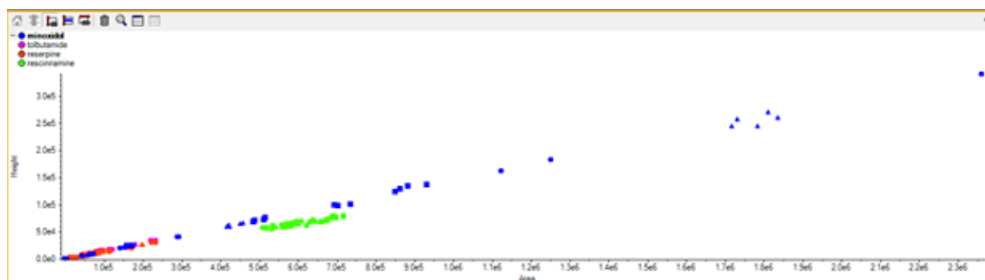
Metric Plotを使用して、行番号または別の列のいずれかに対する**Results Table**の列に値をプロットします。これらのプロットは、特に、**Peak Review**ペインを使ってすべてのクロマトグラムを手動で表示させたくない場合、視覚的なデータレビューに非常に役立ちます。

注：メトリックプロットはキャリブレーションカーブと同じ回帰方程式を使用します。メトリックプロットには、平均と中央値の2つの方程式が追加されます。

1. **Results Table**を開きます。
2. 1つまたは2つの列を選択し、**Metric Plot**アイコンをクリックします。この例では、**IS Area**列を選択します。

1つの列が選択されている場合は、結果のプロットは表の行番号の関数として列の値を表示します。2つの列が選択された場合、それらの列の値は互いにプロットされます。選択される2つの列の最初はx値を含み、2列目はy値を含みます。
3. プロットペインを右クリックし、**Show Legend**をクリックすると、プロットで使用されているシンボルについての説明が表示されます。

図 14-30 Metric Plot



Create Custom Columns

1. **Results Table**が開いており、有効になっている状態で、右クリックして**Add Custom Column**をクリックします。

表の末端に列が追加されます。

2. **Custom Column Name**ダイアログに列名を入力します。
3. **OK**をクリックします。

定量化メソッドファイルおよび組み込まれたメソッドについて

定量化メソッドは次のオプションのいずれかを使って作成できます。

- ・ **Quantitation wizard**を使用。
- ・ 選択した**Edit**チェックボックスにより**Quantitation wizard**内の既存のメソッドを編集。
- ・ 既存の定量化メソッドを開いて編集。

定量化メソッドは**Quantitation Method**フォルダに保存されます。

Results Tableが作成される際、**Results Table**を作成するために使用した定量化メソッドは**Results Table**に組み込まれます。組み込まれた定量化メソッドを編集しても、定量化メソッドのどのような変更もメソッドを組み込んだ**Results Table**にのみ適用され、**Quantitation Method**フォルダのメソッドには適用されません。

ヒント！ この組み込まれた修正済みのメソッドは今後使用するためにエクスポートできます。

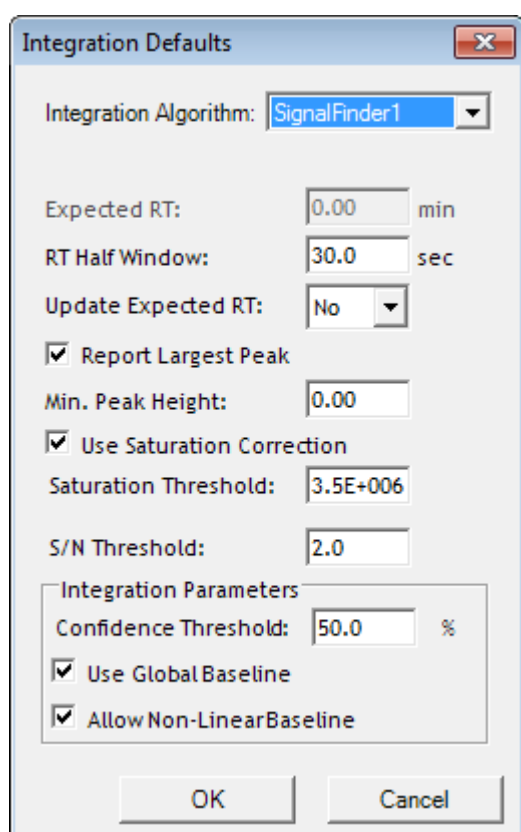
Integration Algorithm Parameters

A

SignalFinder Integration Algorithm Parameters

SignalFinder™積分アルゴリズムは、新しい定量化メソッドを作成した場合、選択したサンプルを使用してピークモデルを作り上げます。このモデルは、アルゴリズムを学習させるために使用される選択したピークの形を表します。

図 A-1 Integration Defaultsダイアログ



The image shows a dialog box titled "Integration Defaults" with a close button (X) in the top right corner. The dialog contains the following settings:

- Integration Algorithm: SignalFinder1 (dropdown menu)
- Expected RT: 0.00 min
- RT Half Window: 30.0 sec
- Update Expected RT: No (dropdown menu)
- ☒ Report Largest Peak
- Min. Peak Height: 0.00
- ☒ Use Saturation Correction
- Saturation Threshold: 3.5E+006
- S/N Threshold: 2.0
- Integration Parameters section:
 - Confidence Threshold: 50.0 %
 - ☒ Use Global Baseline
 - ☒ Allow Non-Linear Baseline

At the bottom of the dialog are two buttons: "OK" and "Cancel".

ラベル	説明
Integration Algorithm	選択済みの積分アルゴリズム。
Expected RT	予測保持時間は分単位です。これは、代表サンプルのクロマトグラムの最大ピークの保持時間のために初期設定されており、定量化メソッドを作るために使用されます。このフィールドは編集できません。定量化メソッドの化合物に依存して更新されます。
RT Half Window	半分の総保持時間ウィンドウは秒単位です。ピークが検出されレポートされるために、頂点および予測保持時間との差がこの値以下になる必要があります。
Update Expected RT	<p>このパラメータは、予測保持時間がその他のコンポーネントを使用することで稼働中に調整されるべきかどうかを示します。サンプル間の保持時間の変動を補正するために追加情報を使用します。次の選択肢があります。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ No : 現在の予測保持時間をそのまま使用する。 ・ Group : 同じ保持時間があるコンポーネントはグループ化でき（すなわち同じ化合物に対する異なるトランジション）、そのグループに割り当てられたコンポーネントに適用。予測保持時間は、RTウィンドウ内の（特定のサンプルに対する）グループの個々のクロマトグラムが最大限にオーバーラップするポジションを使用して更新されます。これにより、予測RT（各クロマトグラムにピークがあると予測される）を実際の目的のコンポーネントの推定RTに設定することになります。 <p>グループに定義された内部標準が少なくとも2つある場合、そのクロマトグラムのみを使用して新規保持時間を決定します。そうではない場合、グループのすべてのクロマトグラムが使用されます。コンポーネントが妥当なレベルで存在する可能性が最も高いクロマトグラムのみを使用することを意図しています。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ IS : 内部標準を使用する分析試料の場合、（対応するサンプルの）内部標準のピークの実際の保持時間が最初に決定されます。分析試料の予測RTは、指定した予測RTを内部標準の予測RTに対する正味比率で乗算することによって決定されます。このオプションは、相対保持時間と呼ばれることもあります。 <hr/> <p>注：このオプションは、内部標準や、内部標準を使用しない分析試料には適用されません。</p>

Integration Algorithm Parameters

ラベル	説明
Report Largest Peak	<p>クロマトグラムに1つ以上のピークがあり、保持時間ウィンドウ内および最小の幅と高さを満たしている場合、このパラメータはどのピークをレポートするかを制御します。チェックボックスを選択した場合、最大面積のあるピークがレポートされます。チェックボックスがクリアされると予測時間に最も近い保持時間のあるピークがレポートされます。</p> <p>保持時間の再現可能性が高くない場合に限りこのオプションを許可することが推奨されます。</p>
Min. Peak Height	<p>このパラメータは解析に影響しません。レポートिंगのみに使用されます。この値よりも低い強度の電位ピークは目的のピークではないとみなされ使用されません。</p>
Use Saturation Correction	<p>アルゴリズムによってピークの飽和が検出されると、検出器が飽和しない場合はピークがどのようにになっていたのかを予測するモデルを使用します。これによりプロファイルがピークの最上部を超えて拡大され、検出器が飽和しなかった場合に得られるおおよその反応が見積もられます。また、キャリブレーションカーブの線形動的範囲が拡大される場合があります。このオプションを使用できるのは、全体的なアルゴリズムのデフォルト値を設定するときのみで、定量化メソッドの作成時や個別のピークレビュー時は使用できません。これは、一部のピークだけに対応した設定では、この設定を使用しても便利ではないためです。</p>
Saturation Threshold	<p>この閾値よりも上のピークは飽和しているとみなします。この値は検出器に依存します。</p>
S/N Threshold	<p>このパラメータは解析に影響しません。レポートिंगのみに使用されます。閾値よりも下のピークはレポートされません。</p>
Confidence Threshold	<p>偽陽性の電位ピークを除去するために使用されます。デフォルト値は50%であり、ほとんどの場合適合します。値を大きくすることで、非常にノイズが大きいデータ、またはピーク幅がサンプルごとにかなり変動したデータに対して使用することができます。</p>
Use Global Baseline	<p>選択すると、ベースラインとしての全体のクロマトグラムを使用できます。チェックボックスが選択されていない場合、ソフトウェアは局所的なベースラインに対する変化を評価します。</p>
Allow Non-Linear Baseline	<p>線形または非線形ベースラインを選択します。非線形ベースラインは各ピークの下ベースラインを推測します。線形ベースラインはピークの特定のグループの始点と終点にあるポイント間にラインを適合させます。</p>

MQ4 Integration Algorithm Parameters

図 A-2 Integration Defaultsダイアログ

The dialog box titled "Integration Defaults" contains the following settings:

- Integration Algorithm: MQ4 (selected from a dropdown)
- Gaussian Smooth Width: 0.0 points
- Expected RT: 0.00 min
- RT Half Window: 30.0 sec
- Update Expected RT: No (selected from a dropdown)
- ☒ Report Largest Peak
- Min. Peak Width: 3 points
- Min. Peak Height: 0.00
- Integration Parameters section:
 - Noise Percentage: 40.0 %
 - Baseline Sub. Window: 2.00 min
 - Peak Splitting: 2 points

Buttons: OK, Cancel

ラベル	説明
Integration Algorithm	選択済みの積分アルゴリズム。
Gaussian Smoothing Width	特定の値（ポイント内）に等しい半値幅を使用する標準のガウシアンスムーズアルゴリズムが適用されています。ノイズの多いクロマトグラムに対しては、実際のピーク幅（半分の高さ）に近い値を選択するとよいでしょう。ノイズの少ないデータに対しては、小さな値を使用することができます。
Expected RT	予測保持時間は分単位です。これは、代表サンプルのクロマトグラムの最大ピーク保持時間のために初期設定されており、定量化メソッドを作るために使用されます。
RT Half Window	半分の総保持時間ウィンドウは秒単位です。ピークが検出されレポートされるために、頂点および予測保持時間との差がこの値以下になる必要があります。

Integration Algorithm Parameters

ラベル	説明
Update Expected RT	<p>このパラメータは、予測保持時間がその他のコンポーネントを使用することで稼働中に調整されるべきかどうかを示します。サンプル間の保持時間の変動を補正するために追加情報を使用します。次の選択肢があります。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ No : 現在の予測保持時間をそのまま使用する。 ・ Group : 同じ保持時間があるコンポーネントはグループ化でき（すなわち同じ化合物に対する異なるトランジション）、そのグループに割り当てられたコンポーネントに適用。予測保持時間は、RTウィンドウ内の（特定のサンプルに対する）グループの個々のクロマトグラムが最大限にオーバーラップするポジションを使用して更新されます。これにより、予測RT（各クロマトグラムにピークがあると予測される）を実際の目的のコンポーネントの推定RTに設定することになります。 <p>グループに定義された内部標準が少なくとも2つある場合、そのクロマトグラムのみを使用して新規保持時間を決定します。そうではない場合、グループのすべてのクロマトグラムが使用されます。コンポーネントが妥当なレベルで存在する可能性が最も高いクロマトグラムのみを使用することを意図しています。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ IS : 内部標準を使用する分析試料の場合、（対応するサンプルの）内部標準のピークの実際の保持時間が最初に決定されます。分析試料の予測RTは、指定した予測RTを内部標準の予測RTに対する正味比率で乗算することによって決定されます。このオプションは、相対保持時間と呼ばれることもあります。
Report Largest Peak	<p>クロマトグラムに1つ以上のピークがあり、保持時間ウィンドウ内および最小の幅と高さを満たしている場合、このパラメータはどのピークをレポートするかを制御します。チェックボックスを選択した場合、最大面積のあるピークがレポートされます。チェックボックスがクリアされると予測時間に最も近い保持時間のあるピークがレポートされます。</p> <p>保持時間の再現可能性が高くない場合に限りこのオプションを許可することが推奨されます。</p>
Min. Peak Height	<p>このパラメータは解析に影響しません。レポートिंगのみに使用されます。この値よりも低い強度の電位ピークは目的のピークではないとみなされ使用されません。</p>
Min. Peak Width	<p>この値よりも幅の狭い電位ピークはノイズとみなされ使用されません。</p>

ラベル	説明
Noise Percentage	<p>このパラメータは、クロマトグラムのノイズレベルを推定する目的で使用します。最小の強度を持つ指定した割合のデータポイントがノイズとみなされます。</p> <p>通常は、20%～60%の値を指定します。大きなピークが存在する状況で小さなピークが検出されていない場合は、この値を下げる必要があります。</p>
Baseline Sub. Window	<p>スムージング後であっても、その他の処理の実行前は、突出データを排除するためにクロマトグラムがベースライン補正されます。各データポイントについて、ベースラインは、最小の強度（補正ウィンドウの範囲内）を持つ現在のポイントの左右両側にあるデータポイントを使用して計算されます。</p> <p>予測されるピーク幅より少なくとも数倍大きく設定されている場合、このパラメータの正確な値は重要ではありません。</p>
Peak Splitting	<p>このパラメータでは、ノイズが発生する可能性のあるピークを単一のピークとして検出するか、2つ（またはそれ以上）の個別のピークとして検出するのを制御します。2つの電位ピーク間の下落が指定した値未満の場合は、単一のピークとして検出されます。そうでない場合は2つのピークとして検出されます。</p> <p>このパラメータを大きな値に設定すると、ノイズの多いピークがスプリットされず、2つの独立したピークとして検出されなくなります。ただし、2つの溶出する（重複する）明確なピークが近接して存在する場合は、小さい方の値を使用する必要があります。</p>

回帰方程式

B

このセクションでは、回帰曲線の計算に使用する式について説明します。以下の各式では、 x は**Standard**（標準）サンプルにおける分析物濃度を表し、 y は対応するピークの面積または高さを表します。回帰に使用する正確な変数は、[表 B-1](#)に示すように、内部標準が使用されているかどうか、およびピーク面積とピーク高さのどちらが使用されているかによって異なります。

表 B-1 回帰変数

内部標準の使用	面積の使用	x	y
はい	はい	$C_a / C_{is} / DF$	A_a / A_{is}
はい	いいえ	$C_a / C_{is} / DF$	H_a / H_{is}
いいえ	はい	C_a / DF	A_a
いいえ	いいえ	C_a / DF	H_a

各値の意味：

- ・ C_a = 実際の分析物濃度
- ・ C_{is} = 内部標準の濃度
- ・ DF = 希釈係数
- ・ A_a = 分析物のピーク面積
- ・ A_{is} = 内部標準のピーク面積
- ・ H_a = 分析物のピーク高さ
- ・ H_{is} = 内部標準のピーク高さ

Weighting Factors

表 B-2は、7種類ある重み付けの重み付け係数（式にあるw）をそれぞれ計算する方法を示します。

表 B-2 Weighting Factors

Weighting Type	Weight (w)
なし	常に1.0
$1/x$	$ x < 10^{-5}$ の場合、 $w = 10^5$ そうでない場合、 $w = 1/ x $
$1/x^2$	$ x < 10^{-5}$ の場合、 $w = 10^{10}$ そうでない場合、 $w = 1/x^2$
$1/y$	$ y < 10^{-8}$ の場合、 $w = 10^8$ そうでない場合、 $w = 1/ y $
$1/y^2$	$ y < 10^{-8}$ の場合、 $w = 10^{16}$ そうでない場合、 $w = 1/y^2$
$\ln x$	$x < 0$ の場合、エラーが生成 $x < 10^{-5}$ の場合、 $w = \ln 10^5$ そうでない場合、 $w = \ln x $
$\ln y$	$y < 0$ の場合、エラーが生成 $y < 10^{-8}$ の場合、 $w = \ln 10^8$ そうでない場合、 $w = \ln y $

回帰

このセクションでは各回帰の種類に対する方程式を紹介します。次の方程式では、x、y、およびwは前述に規定したとおりです。総合計は、非使用とマークした**Standard**サンプル以外の**Standard**サンプルすべてを算出します。

相関関係係数は次のように計算します。

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

ここでは：

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

y_c = 下の相応しい方程式を使って算出したy値

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

Linear

線形キャリブレーション方程式：

$$y = mx + b$$

傾きおよび切片は以下のように計算されます：

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

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

ここでは：

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

Linear Through Zero

ゼロ点を通る線形キャリブレーション方程式：

$$y = mx$$

傾きは以下のように計算されます：

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

平均応答係数

平均応答係数キャリブレーション：

$$y = mx$$

これは、ゼロ点を通る線形用方程式と同じものです。しかし、以下の通り、傾きは別個に算出されます：

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

応答係数の標準偏差：

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

ここで：

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

注：xの値が0であるポイントは、合計から除外されます。

ポイントの線に直線性および湾曲が見られる場合、それらの間で線を作成する際に線形回帰または二次回帰の代わりに指数回帰を使用してください。

二次

二次キャリブレーション方程式：

$$y = a_2 x^2 + a_1 x + a_0$$

多項式係数は以下のように計算されます：

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

$$a_1 = b_5/b_3 - a_2 b_4/b_3$$

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

ここでは：

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

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

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

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

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

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

Power

べき関数キャリブレーション方程式：

$$y = a x^p$$

線形キャリブレーション用の方程式が上記の説明に従って使用され、傾き（m）および切片（b）の計算が行われます。ただし、この方程式中のxはln xに、yはln yに置き換えられます。この場合、aおよびpは以下のように計算されます：

$$a = e^b$$

$$p = m$$

x または y の値のいずれかが負の数、またはゼロである場合、エラーが報告されます。

Wagner

ワグナーキャリブレーション方程式：

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

二次キャリブレーション用の方程式が上記の説明に従って使用され、 a_0 、 a_1 、および a_2 の計算が行われます。ただし、この方程式中のxはln xに、yはln yに置き換えられます。

x または y の値のいずれかが負の数、またはゼロである場合、エラーが報告されます。

Hill

ヒルキヤリブレーション方程式：

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

a、b、c、およびnについて解くための解析関数を提供することはできません。その代わりに、レーベンバーグ・マーカート反復法を使って係数が決定されます。

最終濃度の算出

このセクションでは、IS濃度およびオリジナル濃度で使用した希釈係数を使用し、回帰方程式の結果から最終濃度を算出する方法を説明します。

Linear

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

Linear Through Zero and Mean Response Factor

$$x = y / m$$

Quadratic

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

- ・ 標準の範囲内にプラスとマイナス両方のルートがある場合、一意解がないためにエラーが生じます。
- ・ 2つのルートうちの1つだけが標準の濃度範囲内にある場合、その値がレポートされます。
- ・ 両方のルートが一番低い標準濃度を下回る場合、プラスルートが報告されます。
- ・ 両方のルートが一番高い標準濃度を上回る場合、マイナスルートが報告されます。
- ・ マイナスルートが最も低い標準を下回り、プラスルートが最も高い標準を上回る場合、マイナスルートと最も低い標準濃度との差が、プラスルートと最も高い濃度との差よりも少ない場合、マイナスルートが報告されます。そうでない場合、プラスルートが報告されます。

Power

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

Wagner

二次事象に対して同じ方程式が主要な計算に使用されますが、xはln x、yはln yに置き換えられます。

Hill

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

このセクションでは、**Results Tables**からフォーマット化されたレポートを作成するためのソフトウェアの機能的なレポート方法を説明します。

Create Reports

本ソフトウェアは定義されたテンプレートとしてMicrosoft Wordドキュメントを使用します。レポートが生成される際、値の抽出は最も直近のResults Tableおよび関連ファイルから行われます。

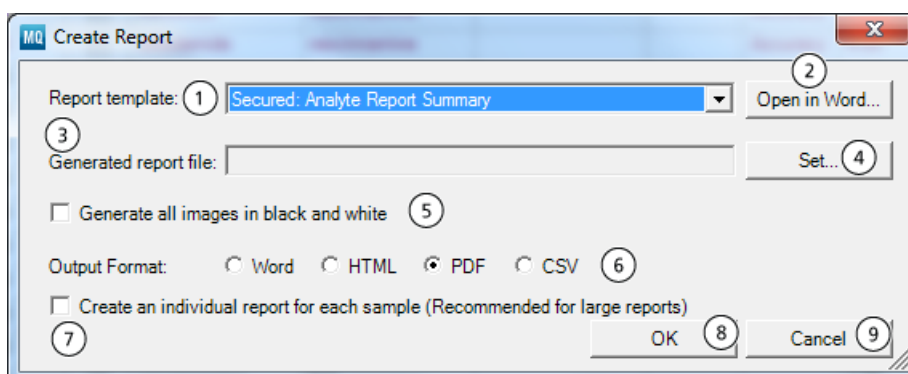
ユーザーはカスタムテンプレートの検証を行う必要があります。ユーザーはレポートテンプレートエディタでその数字のフォーマットを編集できます。その数字のフォーマットがテンプレートで指定されていない場合、**Results Table Column Setting**のフォーマットがレポートで使用されています。必ず正しい小数点以下の桁数を使用してください。

ソフトウェアから制御されるデータ出力方法は、**Results Tables**のエクスポート、LIMSへの転送、およびレポートです。**Results Tables**からのコピーおよび貼り付けなどのその他の出力データソースは制御されていません。規制上これらの制御されていない出力メソッドを使用しないでください。

データにアクセスおよび保存するためにすべてのフォルダを参照します。テンプレートを開いてレポートを保存した前回の場所がデフォルトで開きます。

1. **Results Table**を開きます。
2. **File > Create Report and Save Results Table**をクリックします。

図 C-1 Create Reportダイアログ



項目	説明
1	Report template : リストからテンプレートを選択します。
2	Open in Word : クリックすると、Microsoft Wordで指定したレポートテンプレートが直接開き、レポートを評価または編集します。
3	Generated report file : レポートファイルの名前を表示します。
4	Set : クリックして作成するレポートのファイル名を指定します。
5	Generate all images in black and white : チェックボックスを選択すると、白黒で印刷されます。
6	Output Format : Word、HTML、PDF、またはCSVを選択します。PDFはレポートを編集することができないため、最も保護された出力方法です。
7	各サンプルに対する個別レポートを作成します（大量のレポートにお勧めします）。
8	OK をクリックし、レポートを印刷します。
9	Cancel をクリックすると、レポートを作成せずにダイアログが閉じます。

3. Report templateリストからテンプレートを選択します。レポートテンプレートは次の場所に保存されます。

- Windows 7およびWindows 10 : C:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter

テンプレートの説明については[Report Templates 該当ページ 141](#)を参照してください。

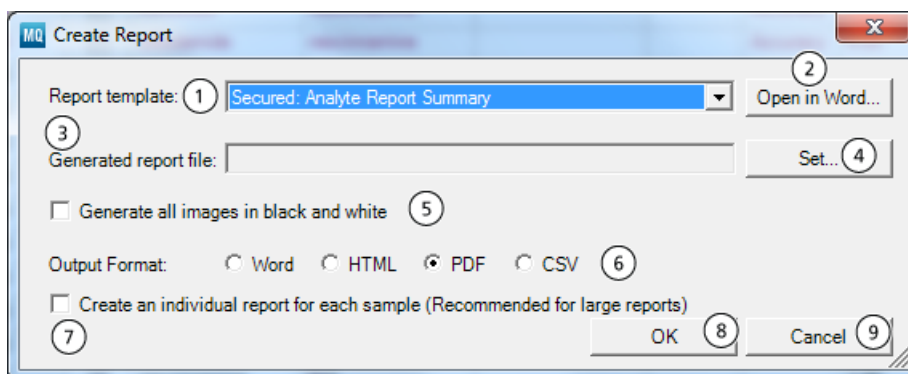
4. **Set**をクリックし、レポートの名前と場所を作成します。
5. **OK**をクリックし、レポートを生成します。

Create Custom Report Templates

ソフトウェアから制御されるデータ出力方法は、**Results Tables**のエクスポート、LIMSへの転送、およびレポートリングです。**Results Tables**からのコピーおよび貼り付けなどのその他の出力データソースは制御されていません。規制上これらの制御されていない出力メソッドを使用しないでください。

1. **Results Table**を開くまたは作成します。
2. **File > Create Report and Save Results Table**をクリックします。

図 C-2 Create Reportダイアログ



項目	説明
1	Report template : リストからテンプレートを選択します。
2	Open in Word : クリックすると、Microsoft Wordで指定したレポートテンプレートが直接開き、レポートを評価または編集します。
3	Generated report file : レポートファイルの名前を表示します。
4	Set : クリックして作成するレポートのファイル名を指定します。
5	Generate all images in black and white : チェックボックスを選択すると、白黒で印刷されます。
6	Output Format : Word、HTML、PDF、またはCSVを選択します。PDFはレポートを編集することができないため、最も保護された出力方法です。
7	各サンプルに対する個別レポートを作成します（大量のレポートにお勧めします）。
8	OKをクリックし、レポートを印刷します。
9	Cancelをクリックすると、レポートを作成せずにダイアログが閉じます。

3. **Report template** リストからテンプレートを選択します。

4. **Open in Word** をクリックします。

docxテンプレートが開き、右側にReporterテンプレートエディタが表示されます。テンプレートエディタには、自動的にタグ情報が入力されています。

5. 必要に応じて、テンプレートを編集します。

6. テンプレートを保存します。

Report Templates

次の表は<drive>:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporterで見つかる利用可能なテンプレートについて説明しています。

カスタムテンプレートを作成する場合は、ユーザーの責任において、そのテンプレートを検証する必要があります。ユーザーはReport Templateエディタでその数字のフォーマットを編集できます。その数字のフォーマットがテンプレートで指定されていない場合、**Results Table Column Settings**ダイアログがレポートで使用されることになります。カスタムのレポートテンプレートは、ユーザーの責任で検証してください。

レポートテンプレートにはクエリを使用するものもあります。レポートのResults Tableのデータを評価、操作、および提示するために、Microsoft Excelの式を使用してクエリを作成することができます。レポートテンプレートのMetafieldタグは、使用すべきクエリファイルの名前をレポートに示します。クエリを使用するには、クエリファイルの名前がレポートテンプレートのMetafieldタグで指定される必要があります。クエリには、クエリとして認識されるために.queryの拡張子が付いている必要があります。クエリは、レポートテンプレートが保存されているReporterフォルダに保存される必要があります。

Reporterテンプレートが使用された際、特にクエリがテンプレートで使用された際に、生成された結果をユーザーが検証することを推奨します。検証後にレポートテンプレートに修正が行われた場合、レポートテンプレートを再検証する必要があります。レポートテンプレートへの変更には、レポータータグまたはクエリへの修正も含まれます。

表 C-1 Report Templateの説明

テンプレート	説明
Analyte Report Summary	各分析試料について、Samples Summary表が表示される保護されたレポートです。このレポートテンプレートは、グループが定義されているResults Tableに適しています。
Calibration Curves Template	分析試料について、ファイル情報、統計表（標準）およびキャリブレーションカーブを示すレポートで、分析試料当たり1ページ。
Metric Plot_IS Area	各内部標準について、ファイル情報およびISピーク領域のメトリックプロットのあるセクションを示す保護されたレポート。
Per Analyte Ion Ratio Report	各分析試料について、各分析試料に対するファイル情報、Results Table、キャリブレーションカーブ、およびISと各分析試料のクロマトグラムのあるセクションを示す保護されたレポート。このテンプレートは、グループが定義されているResults Tableに適しています。
Per Analyte Report	各分析試料について、各分析試料に対するファイル情報、Results Table、キャリブレーションカーブ、およびISと各分析試料のクロマトグラムのあるセクションを示す保護されたレポート。このテンプレートは、グループが定義されていないResults Tableに適しています。

表 C-1 Report Templateの説明 (続き)

テンプレート	説明
Per Sample Ion Ratio Report	各サンプルについて、各分析試料に対するファイル情報、サンプル情報、分析試料Results Table、キャリブレーションカーブ、およびISと各分析試料のクロマトグラムのあるセクションを示す保護されたレポート。このテンプレートは、グループが定義されているResults Tableに適しています。
Per Sample Report	各サンプルについて、各分析試料に対するファイル情報、サンプル情報、分析試料Results Table、キャリブレーションカーブ、およびISと各分析試料のクロマトグラムのあるセクションを示す保護されたレポート。このテンプレートは、グループが定義されていないResults Tableに適しています。
Sample Report Summary	各サンプルについて、分析試料概要表が表示される保護されたレポート。このレポートテンプレートは、グループが定義されているResults Tableに適しています。
Sample Report with Concentration Threshold.docx	未知の各サンプルに対するファイル情報、サンプル情報、および結果概要表が表示されるレポート。結果概要表には分析試料に特異的な濃度閾値を含みます。濃度が閾値を超える場合、分析試料は陽性としてフラグが立てられます。このテンプレートはSample Report With Concentration Threshold.queryを参照します。ユーザーはクエリファイルを編集し、分析試料名、分析試料グループ（例、化合物のクラス）、および分析試料濃度閾値を指定できます。

Report Templateのタグ

表 C-2 Report Templateのタグ

種類	フィールドタイプ	タグの説明
Analyst [®] MDソフトウェアデータ提供スキーマからのタグ		
Analyte	ForEach	Results Tableに定義された順に、すべての分析試料をループします。

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
AnalyteGroup	ForEach	様々な分析試料グループのみをループします。 TextFieldまたはPictureFieldタグは、クオンティファイアイオンの数値を取得します。 この種類のタグが、Ratiolons属性を指定する追加のFor_Eachタグを含む場合、内側ループは、現在のグループの一部であるクオリファイアイオン用のみとなります。
InternalStandard	ForEach	すべての内部標準をループします。
QCStatistics	ForEach	すべての品質管理統計をループします。
Ratiolons	ForEach	AnalyteGroupを参照します。
Sample	ForEach	各個別サンプルをループします。これは例えば、Sample Nameを入れるためのTextFieldタグ設定と併せて使用されます。
Statistics	ForEach	すべての標準統計をループします。
MQ_Group	ForEach	ISグループやサブグループを含む様々なグループをループします。 TextFieldまたはPictureFieldタグは、クオンティファイアイオンの数値を取得します。 この種類のタグが、Ratiolons属性を指定する追加のFor_Eachタグを含む場合、内側ループは、現在のグループの一部であるクオリファイアイオン用のみとなります。
MQ_AnalyteRatiolons	ForEach	分析試料クオリファイアのためのMQ_Groupを参照します。
MQ_ISRatiolons	ForEach	ISクオリファイアのためのMQ_Groupを参照します。

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
AnalyteRatio	PictureField	次を示します：分析試料サブグループのクオンティファイアおよびクオリファイアのクロマトグラムのオーバーレイ 次を示します：中央の実線が予測イオン比中央線=クオンティファイアのピーク高さ x 予測イオン比。 次を示します：点線付きの許容イオン比範囲の下限・上限 下限 = クオンティファイアのピーク高さ x 予測イオン比 x ((100-許容値)/100)。 上限 = クオンティファイアのピーク高さ x 予測イオン比 x ((100+許容値)/100)。
AnalyteRatioNoLines	PictureField	次を示します：分析試料サブグループのクオンティファイアおよびクオリファイアのクロマトグラムのオーバーレイを線無し
キャリブレーション	PictureField	次を示します：分析試料のキャリブレーションカーブ
IS_AnalyteRatio	PictureField	次を示します：内部標準サブグループのクオンティファイアおよびクオリファイアのクロマトグラムのオーバーレイ 次を示します：中央の実線が予測イオン比中央線=クオンティファイアのピーク高さ x 予測イオン比。 次を示します：点線付きの許容イオン比範囲の下限・上限。 下限 = クオンティファイアのピーク高さ x 予測イオン比 x ((100-許容値)/100) 上限 = クオンティファイアのピーク高さ x 予測イオン比 x ((100+許容値)/100)
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField	次を示します：内部標準サブグループのクオンティファイアおよびクオリファイアのクロマトグラムのオーバーレイを線無し
IS_PeakReview	PictureField	次を示します：内部標準のクロマトグラム
Overlay_All_XIC	PictureField	次を示します：サンプル内の全分析試料のクロマトグラムのオーバーレイ

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
Overlay_All_XIC_with_IntStd	PictureField	次を示します：サンプル内の全分析試料と内部標準のクロマトグラムのオーバーレイ
Overlay_All_XIC_with_IntStd_NoLegend	PictureField	次を示します：サンプル内の全分析試料と内部標準のクロマトグラムのオーバーレイを凡例無し
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField	次を示します：サンプル内の全分析試料のクロマトグラムのオーバーレイを凡例無し
PeakReview	PictureField	次を示します：分析試料のクロマトグラム
TIC	PictureField	次を示します：サンプルのTIC
Acquisition_Date	TextField	サンプルが取得されたデータ。 次を示します：「Acquisition Date & Time」
Acquisition_Duration_Minutes	TextField	次を示します：分単位で報告された、サンプルのデータ取得の期間
Acquisition_Method	TextField	サンプルデータ取得に使用された測定メソッド。 次を示します：「Acq. Method Name」
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField	次を示します：「Component Comment」
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField	次を示します：回帰値R
Analyte_AnalyteRegression	TextField	次を示します：R値と重量を含む回帰方程式
Analyte_Concentration	TextField	Results Tableでユーザーが定義した分析試料の実際の濃度。 次を示します：「Actual Concentration」
Analyte_Expected_RT	TextField	分単位の特分析試料の予測保持時間。 次を示します：「Expected RT」

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
Analyte_Integration_Type	TextField	<p>特定分析試料のピーク時に使用された積分のタイプ。ピーク値は手動で積分するか、または利用できるパラメータを使用して積分することができます。</p> <p>次を示します：「Integration Type」</p>
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField	<p>分析試料のピーク領域と内部標準溶液のピーク領域の比率。Analyte Peak Area / IS Peak Areaとして算出されます。</p> <p>次を示します：「Area Ratio」</p>
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField	<p>分析試料のピーク高さの秒当たりカウント（cps）と内部標準溶液からのピーク高さの比率。Analyte Peak Height / IS Peak Heightとして算出されます。</p> <p>次を示します：「Height Ratio」</p>
Analyte_Mass_Ranges	TextField	<p>使用される測定メソッドで定義される、ユーザー定義の分析試料のMRMトランジション。</p> <p>次を示します：「Mass Info」</p>
Analyte_Peak_Area	TextField	<p>クロマトグラムの分析試料のピーク領域。</p> <p>次を示します：「Area」</p>
Analyte_Peak_Height	TextField	<p>秒当たりカウント（cps）の分析試料ピークの高さ。</p> <p>次を示します："Height".</p>
Analyte_Peak_Name	TextField	<p>Results Table作成時に特定サンプルに指定されたユーザー定義の名称。</p> <p>次を示します：「Component Name」</p>
Analyte_Peak_Width	TextField	<p>分単位の分析試料ピークの幅。</p> <p>次を示します：「Total Width」</p>
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	<p>分単位の分析試料ピークの高さの50%における幅。</p> <p>次を示します：「Width at 50%」</p>

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
AnalyteQuantPeak_info	TextField	次を示します：アルゴリズムとパラメータを含む積分情報。
Analyte_QTY	TextField	分析試料の算出濃度と重量対容積の比率（例、サンプルのグラム毎の分析試料のng）から算出された分析試料の数量。 次を示します：「Quality」
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField	グループ内の最初の分析試料。
Analyte_Processing_Algo	TextField	次を示します：積分アルゴリズム
Analyte_Retention_Time	TextField	Results Tableの作成に使用されたクロマトグラム内の分析試料の実際の保持時間。 次を示します： "Retention Time"
Analyte_R_Squared	TextField	次を示します： R^2 回帰値。
Analyte_RT_Window	TextField	分析試料のピークが表れると予測される秒単位の時間範囲。この範囲の中心が分析試料の予測保持時間です。 次を示します：積分パラメータの「RT Half Window」の値。
Analyte_Signal_To_Noise	TextField	特定分析試料のピークのシグナル対ノイズ比率。 次を示します：「Signal/Noise」
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField	%Intensity/分で測定された分析試料のベースラインの勾配。 次を示します：分析試料の「Slope of Baseline」
Analyte_Start_Scan	TextField	分析試料開始スキャン。
Analyte_Start_Time	TextField	分単位の分析試料のピークが始まる時間。 次を示します：「Start Time」
Analyte_Stop_Scan	TextField	分析試料停止スキャン。

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
Analyte_Stop_Time	TextField	分単位の分析試料のピーク値が終わる時間。 次を示します：「End Time」
Analyte_Unit	TextField	分析試料の濃度の表示に使用される単位。Results Tableの標準単位はng/mLです。 次を示します：「Conc. Units」
Analyte_Use_Record	TextField	特定記録を、キャリブレーションカーブなどの後続の分析に使用するかを定める特定の選択ボックス。 次を示します：「Used」
Analyte_Count	TextField	次を示します：分析試料の合計数。
Analyte_Index	TextField	次を示します：0から始まる、サンプル内の分析試料のオーダー番号。
Calculated_Accuracy	TextField	実際の分析試料の濃度と算出された分析試料の濃度を比較して得られた分析試料のピークの精度。 次を示します：「Accuracy」
Calculated_Concentration	TextField	ピーク領域を使用してAnalyst [®] MDソフトウェアで実施した分析試料のピークに対する算出濃度。 次を示します：「Calculated Concentration」
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField	分析試料またはResults Tableの内部標準の特定記録の保持時間。 次を示します：「Relative RT」
IS_Concentration	TextField	Results Table内でユーザーに定義された内部標準の実際の濃度。 次を示します：「IS Actual Concentration」
IS_Expected_RT	TextField	内部標準ピークの予測された分単位の保持時間。 次を示します：「IS Expected RT」

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
IS_Integration_Type	TextField	特定内部標準のピークに使用された積分タイプ。ピーク値は手動で積分するか、または利用できるパラメータを使用して積分することができます。 次を示します：「IS Integration Type」
IS_Mass_Ranges	TextField	使用される測定メソッドで定義される、ユーザー定義の内部標準のMRMトランジション。 次を示します：「IS Mass Info」
IS_Peak_Area	TextField	内部標準のピーク領域。 次を示します：「IS Area」
IS_Peak_Height	TextField	秒当たりカウント（cps）の内部標準のピーク高さ。 次を示します：「IS Height」
IS_Peak_Name	TextField	Results Tableの作成時に、特定の内部標準に付けられた、ユーザー定義の名称。 次を示します：「IS Name」
IS_Peak_Width	TextField	分単位の分析試料ピークの幅。 次を示します：「IS Total Width」
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	内部標準ピークの高さ半分での秒当たりカウント（cps）の分単位のピーク幅。 次を示します：「IS Width at 50%」
IS_Retention_Time	TextField	内部標準の実際の保持期間。 次を示します：「IS Retention Time」
IS_RT_Window	TextField	内部標準のピークが表れると予測される、秒単位の時間範囲。この範囲の中心は、内部標準の予測される保持時間です。 次を示します：IS用の積分パラメータの「RT Half Window」の値。

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
ISQuantPeak_Info	TextField	次を示します：アルゴリズムとパラメータを含む積分情報。
IS_Signal_To_Noise	TextField	内部標準ピークのシグナル対ノイズ比率。 次を示します：「IS Signal/Noise」
IS_Slope_of_Baseline	TextField	%Intensity/分で測定された内部標準のベースラインの勾配。 次を示します：内部標準の「Slope of Baseline」
IS_Start_Scan	TextField	内部標準スキャン開始。
IS_Start_Time	TextField	分単位の内部標準のピークが始まる時間。 次を示します：「IS Start Time」
IS_Stop_Scan	TextField	内部標準停止時間。
IS_Stop_Time	TextField	分単位の内部標準のピークが終わる時間。 次を示します：「IS End Time」
IS_Units	TextField	内部標準の濃度の表示に使用される単位。Results Tableの標準単位はng/mLです。 次を示します：「Conc. Units」
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField	次を示します：定量化メソッドの外れ値設定ダイアログのLLOQの許容精度最高値。
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField	次を示します：定量化メソッドの外れ値設定ダイアログの標準の許容精度最高値。
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField	次を示します：定量化メソッドの外れ値設定ダイアログのQCの許容精度最高値。
MQ_Analyte_Group_Name	TextField	次を示します：分析試料のグループ名。
MQ_Created_With	TextField	次を示します：レポート作成に使用されたプロダクトの名称。

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField	次を示します : 「Expected Ion Ratio」
MQ_Group_Index	TextField	次を示します : 1から始まる、サンプル内グループのオーダー番号。ForEach MQ_Groupループと使用。
MQ_Group_Name	TextField	次を示します : グループ名。ForEach MQ_Groupループと使用。
MQ_Ion_Ratio	TextField	次を示します : 「Ion Ratio」
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField	次を示します : 定量化メソッドの外れ値設定ダイアログの分析試料の許容イオン比率最高値。
MQ_IS_Group_Name	TextField	次を示します : 内部標準グループ名。
MQ_IsRowHidden	TextField	次を示します : Results Tableで非表示の行。
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField	次を示します : 定量化メソッドの外れ値設定ダイアログで算出濃度の下限值。
MQ_Outlier_Reasons	TextField	次を示します : 「Outlier Reasons」
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField	次を示します : 「Asymmetry Factor」
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField	次を示します : 「Baseline Delta/Height」
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField	次を示します : 「End Time at 10%」
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField	次を示します : 「End Time at 5%」
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField	次を示します : 「Points Across Baseline」
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField	次を示します : 「Points Across Half Height」
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField	次を示します : 「Start Time at 10%」
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField	次を示します : 「Start Time at 5%」
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField	次を示します : 「Tailing Factor」
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField	次を示します : 「Width at 10%」
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField	次を示します : 「Width at 5%」
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField	次を示します : 分析試料グループ内クオンティファイアの「Mass Range」

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField	次を示します：分析試料グループ内クオンティファイアの「Area」
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField	次を示します：分析試料グループ内クオンティファイアの「Calculated Concentration」
MQ_Report_Generation_Date	TextField	次を示します：ソフトウェアからのカルチャー設定を反映させたレポート作成の日時。
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField	次を示します：定量化メソッドの外れ値設定ダイアログで算出濃度の上限値。
Query_Name	TextField	レポートテンプレートでクエリ名について言及します（該当する場合）。
Record_Modified	TextField	次を示します：「Modified」
Reporter_Template_Name	TextField	レポート作成に使用されるレポートテンプレート名。
ResultTbl_CreateDate	TextField	次を示します：Results Tableが作成された日付。
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField	次を示します：（例：Analyst Classic、IntelliQuan）（例：MQ4、SignalFinder1）
ResultTbl_Name	TextField	次を示します：Results Tableのファイル名。
ResultTbl_ProjName	TextField	次を示します：Results Tableが保存されたプロジェクト名。
Sample_Comment	TextField	サンプルに関連したコメント。 次を示します：「Sample Comment」
Sample_Dilution_Factor	TextField	サンプルが溶解した単位体積の合計数。 次を示します：「Dilution Factor」
Sample_File_Name	TextField	特定サンプルのローデータが保存されたデータファイルの名称。 次を示します：「Original Filename」

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
Sample_ID	TextField	Results Tableの各サンプルまたは分析試料の特定IDリストに対するユーザー定義の値。 次を示します：「Sample ID」
Sample_Index	TextField	次を示します：「Index」
Sample_Count	TextField	次を示します：分析試料の合計数。
Sample_InjectionVolume	TextField	測定メソッドに定義された、オリジナルサンプルが注入された時のオートサンプラーに使用された注入量。 次を示します：「Injection Volume」
Sample_Instrument	TextField	次を示します：wiffファイルから抽出された、サンプル取得のために使用された機器の種類。
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField	次を示します：wiffファイルから抽出された、サンプル取得のために使用された機器のシリアルナンバー。
Sample_Name	TextField	Results Tableの作成時に特定サンプルに割り当てられたユーザー定義の名称。 次を示します：「Sample Name」
Sample_Operator	TextField	取得時のログインユーザー。 次を示します：「Operator Name」
Sample_Plate_Number	TextField	サンプル取得時に使用したオートサンプラーのサンプルプレートの位置。 次を示します：「Plate Number」
Sample_Rack_Number	TextField	サンプル取得時に使用したオートサンプラーのサンプルラックの位置。 次を示します：「Rack Number」
Sample_Type	TextField	各特定の注入がどの種類のサンプルから取得されるかを示す、ユーザー定義の値。例えば、空白、標準など。 次を示します：「Sample Type」

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
Sample_Vial_Position	TextField	どのバイアルがサンプルを保持しているかを判断するためにオートサンプラーで使用された取得バッチで定義されたバイアル位置。 次を示します：「Vial Number」
Sample_File_Full_Name	TextField	次を示します：フルパス付のファイル名。
Sample_Index_In_Wiff	TextField	次を示します：0から始まる、wiffファイルにあるサンプルのオーダー番号。
Sta_Accuracy	TextField	実際の分析試料の濃度と算出された分析試料の濃度を比較して得られた分析試料ピークの精度。 次を示します：「Accuracy」
Sta_CV	TextField	次を示します：算出濃度値が、濃度の平均値から何パーセント近くに、または遠くに分散するかを決定する条件付き分散パーセンテージ。標準偏差/平均値による算出。
Sta_ExpectedConcent	TextField	ピーク領域を使用して、Analyst® MDソフトウェアにより算出された分析試料の予測濃度。 次を示します：「Actual Concentration」
Sta_Mean	TextField	次を示します：はAnalyst® MDソフトウェアによって得られた算出濃度の中央値（平均）。
Sta_NumVal	TextField	次を示します：統計を作成する値の数。平均が実行される時に考慮されるサンプル数。
Sta_QCAccuracy	TextField	予測される濃度と品質管理サンプルの実際の濃度を比較して得られる、サンプルタイプの列でユーザーにより定義された精度。 次を示します：「Accuracy」

表 C-2 Report Templateのタグ (続き)

種類	フィールド タイプ	タグの説明
Sta_QCCV	TextField	次を示します：算出濃度値が、濃度の平均値から何パーセント近くに、または遠くに分散するかを決定する条件付き分散パーセンテージ。標準偏差/平均値による算出。品質管理サンプルへの適用。
Sta_QCExpectedConcent	TextField	ユーザー定義による品質管理サンプルの予測された濃度。 次を示します：品質管理サンプルの「Actual Concentration」。
Sta_QCMean	TextField	次を示します：はAnalyst [®] MDソフトウェアによって得られた算出濃度の中央値（平均）。
Sta_QCNumVal	TextField	次を示します：平均が実行される時に考慮される品質管理サンプルの濃度平均の値の数。
Sta_QCStdDev	TextField	次を示します：各サンプルの濃度値の標準偏差。標準偏差は、平均値から値のセットが分散する基準を示します。
Sta_StdDev	TextField	次を示します：標準サンプルの標準偏差。標準偏差は、平均値から値のセットが分散する基準を示します。
カスタム	TextField	次を示します：Results Tableのカスタム列の値。

Relative Noise and Signal-to-Noise Calculations

D

定量的な質量分析データ処理を実行する際、特定のピークが重要かどうかを特定しておくことは重要であり、ここでの「重要な」とは一般的に、「このシグナルはバックグラウンドノイズを超えているか」を意味しています。

通常、ピークの高さは、ピークのない領域で測定したバックグラウンドノイズと比較しており、このノイズは一般的に、ピークのない領域のデータポイントの標準偏差の1または3倍として見積もられています。このアプローチは次のような理由で理想的とは言えません。

- ・ ノイズ領域の選択は手動で行うため、主観的である。
- ・ ピークのないバックグラウンド領域は存在しない、またはその領域がノイズの正確な見積もりのためにはあまりにも狭い可能性がある。
- ・ ピーク位置のノイズは、選択したノイズ領域におけるものと全く異なっている可能性がある。
- ・ 「1または3」ということも主観的であり、さまざまな権威のある人たちが異なる推奨を行っている。
- ・ ノイズの出現は、データが前処理されていた場合、変わる可能性がある。例えば、スムージングや閾値があげられる。

Relative Noise (Rn) (相対ノイズ) コンセプトを使用することで、データのどのポイントでも予測されるノイズを算出し、測定したシグナルと比較するための単純な方法を開発することは簡単です。これは優れた客観的なメトリックで、シグナルノイズ (S/N) を算出し、機器とアッセイの性能を評価し比較するために使うことができます。相対ノイズコンセプトを応用したものが多くあり、そのうちの一つはS/Nの算出です。

基本的なアルゴリズムは次のように機能します。

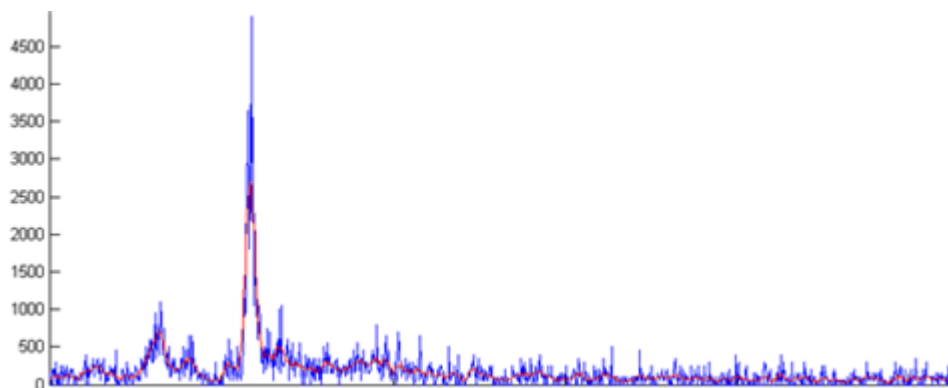
1. あるポイントの根底にあるシグナルのレベルを前提として、データ記録のすべてのポイントの予測ノイズを算出できるノイズモデルを考案。

このノイズモデルは、論理的考察から決定する、または特定のシステムに対する現実の測定値からモデル化することができます。パルスカウンタ検出器では、シグナルの標準偏差、そこから予測されるノイズは、シグナルの平方根に比例するため、シグナルと共に変動します。他のシステムでは、一定の「ホワイトノイズ」コンポーネントがあり、強度依存的なコンポーネントと組み合わさっている可能性があります。

2. 測定したシグナルから根底のシグナルを推測。

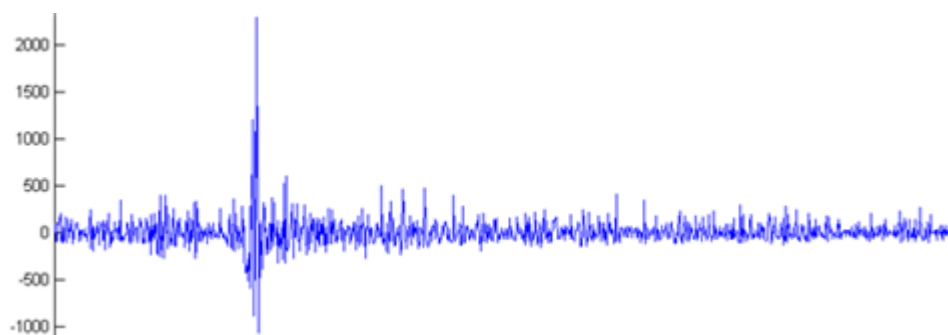
これは多くの方法で実現できますが、最も簡単なものは、[図 D-1](#)に示したようなデータをスムーズ化したものを作成することです。

図 D-1 生データおよびスムーズ化したデータのオーバーレイ



3. 全ポイント（ピークおよびバックグラウンド）を使ってデータ内の実際のノイズを測定。これは、もとのシグナルからスムーズ化したシグナルを引き算したデータの各ポイントで、推測したシグナルから根底にあるシグナルの推定値を引き算して得られます。これはデルタノイズとして知られています。デルタノイズの領域は、ほぼ一定ですが、大きなピークは当てはまりません。というのも、ノイズはシグナルに依存するため、シグナルが大きくなればノイズも大きくなるためです。[図 D-2](#)を参照してください。

図 D-2 各データポイントのデルタノイズ値のプロット



Relative Noise and Signal-to-Noise Calculations

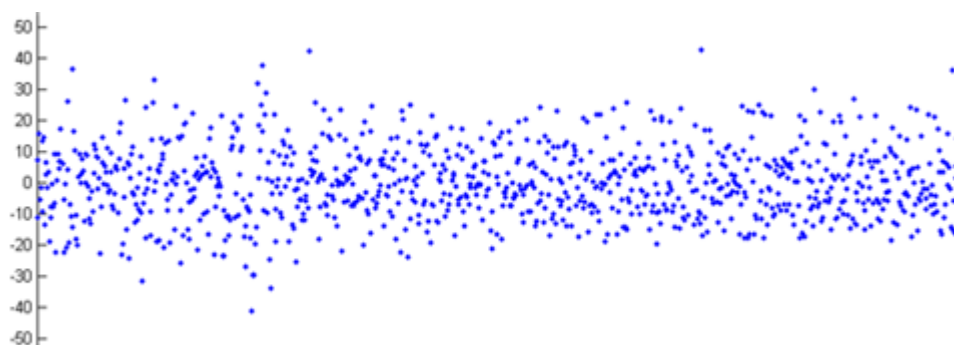
4. 各データポイントで、予測ノイズに対する測定ノイズの割合を算出します。

これにより、すべてのデータポイントで、ステップ3で測定したノイズを、ノイズモデルが予測する値（この場合、強度の平方根）で割ります。ノイズモデルが良好であれば、[図 D-3](#)に示すように特定の範囲に大部分は囲まれている一連の値を生成します。[図 D-3](#)は、次の式のプロットも示しています。

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

注：これはデルタノイズの大きな変動を軽減し、一連の値が十分制約されることとなります。

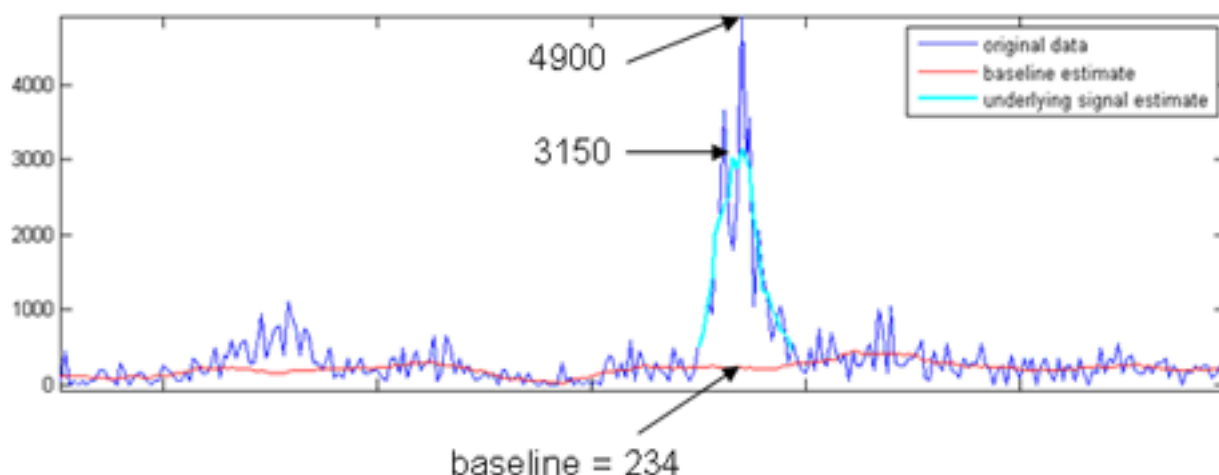
図 D-3 ノイズモデル



5. 割合値の標準偏差を算出します。これが R_n であり、実際のデルタノイズとモデルから予測したノイズの間の最も可能性の高い関係を推定した値になります。図 D-3 では、 R_n の値は 9.5 となります。

図 D-4 は、相対ノイズを使用してどのように S/N を算出できるか例を示しています。

図 D-4 生データ、根底にある推測シグナル、推測ベースラインのオーバーレイ



前述のようにノイズは以下のように求められます。

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

今回の例では以下のように当てはまります。

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

ピークの頂点をシグナルとして使用する場合、34 (4900/145) の S/N となり、スムーズ化したシグナルの高さを使用した場合、22 (3150/145) の S/N となります。

S/N をレポートする際、MQ4 積分アルゴリズムはここで説明した方法を使用し、ピークの頂点をシグナルとして使用しています。SignalFinder™ 積分アルゴリズムはピークに適合するモデルなので、適合したプロファイルの高さを使用します。これは、小さな S/N 値をレポートすることになります。しかし、潜在的なノイズスパイクによって影響を受けることがほとんどないので、これはより精度の高い値なのです。SignalFinder 積分アルゴリズムはベースライン予測に洗練されたアプローチでもあり、これら 2 つの理由から 2 つのアルゴリズムによって報告される S/N 値は同一ではありませんが、たいいていの場合よく似たものになります。

まとめると、バックグラウンド領域の標準偏差としてノイズを推測する通常の方法と比較して、S/N を算出する相対ノイズ法は次のような利点があります。

- ・ バックグラウンド領域は手動で選択する必要がないため、主観性がはるかに少ない。
- ・ クロマトグラムのピークのない領域が存在しない場合でも正確な S/N が予測できる。

- ・ ベースラインからなるノイズは目的のピークの近くに推定される。これは報告されたS/N値とかなり異なる場合があります。というのも、通常の方法に対して選択したバックグラウンド領域は、ピーク近くのバックグラウンドよりもはるかに緩やかなためです。すでに説明したように、**Relative Noise**法によって算出したS/N値は通常の方法よりも小さい値になる場合があります。しかし、ここで述べた方法はより正確で有用性の高い値となります。[図 D-4](#)を参照してください。

Results Tableで**Signal / Noise**列を表示させたい場合は、[Modify the Columns Shown in the Results Table](#) [該当ページ 95](#)を参照してください。

SignalFinder Integration Algorithmを使用するときのシグナル対ノイズの注意事項

SignalFinder™積分アルゴリズムはシグナルノイズを高精度に算出するため（そのため、予測CVの精度がさらに高まる）、1シグマのシグナルノイズ法を使用する場合、研究室の実験的なデータに基づいて、シグナルノイズ値を最小の許容範囲に低下させる標準操作手順書（SOP）を検討してください。

ソフトウェアアイコン

E

一度に1つのペインのみ、有効になります。有効なペインにはオレンジ色の境界線があり、ユーザーは、その中の任意の場所をクリックして、ペインを有効にすることができます。メニューコマンドを使って、有効なペインを操作することができます。

このセクションで説明するツールバーのアイコンは、すべてのペイン種類に対してペイン固有のツールバーに表示されます。各ペイン種類に固有の追加アイコンも利用可能です。

表 E-1 ツールバーアイコン









アイコン	名称	説明
	New Results Table	New Results Table ウィザードを開きます。
	Open	Results Table を開きます。
	Save	開いているファイルをすべて保存します。
	Select Analyst Project	プロジェクトフォルダを選択します。
	Screen Lock	画面をロックします。Analyst [®] MDソフトウェアがMixed Modeで、画面ロック機能が有効になっている時にのみ、この機能は利用可能です。
	Show Internal Standard with Analyte	現在選択されている分析試料と対応する内部標準の両方に関して、 Results Table にある行を示します。このオプションでは、分析試料名をクリックするとそれに対応する内部標準を表示することができます。これは Ctrl を押しながら分析試料をクリックし、内部標準をクリックする操作と同じです（この方法でも両方を選択することができます）。
	Find Component or Group	指定されたテキストと一致するリスト内の項目を選択します。
	Arranging Panes	ペインの相対的な位置を変更します。1つのペインのアイコンをクリックして、第2のペインの上、下、左、または右側部分にドラッグします。カーソルが解放された場所に応じて、最初のペインは、第2のペインに関連して位置が変更されます。カーソルがドラッグされると、第2のペインの1辺は、最初のペインが描画される場所を示すために赤で強調表示されます。

表 E-1 ツールバーアイコン (続き)





アイコン	名称	説明
	Delete Pane	ペインを削除します。 Results Table が削除された場合、他の関連ペイン (Peak Review および Calibration) も削除され、全体のウィンドウが閉じられます。
	Toggles tab mode	ウィンドウ全体を埋めるためにペインを最大化します (またはその逆)。ウィンドウにいくつかのペインがあり、そのうち1つのペインを集中して見たい場合に便利です。 ズームモードでは、各ペインのウィンドウの上部に別のタブが表示されます。適切なタブをクリックしてペインを切り替えます。ズームモードから Zoom Pane を2度クリックすると、すべてのペインを表示する元のビューに戻ります。アイコンをクリックして2つのステータス間を切り替えます。
	Hide Pane	ウィンドウ内の他のペインが利用可能なスペースを埋めるように、ペインを隠します。
	Show Hidden Panes	非表示にしていたすべてのペインが表示されます。

表 E-2 Peak Review ツールバーアイコン





アイコン	名称	説明
	Display Previous Page	クロマトグラムの前のセットが表示されます。これは、上または左矢印キーを押したり、スクロールバーの上矢印をクリックしたりする操作と同じです。
	Display Next Page	クロマトグラムの次のセットが表示されます。これは、下または右矢印キーを押したり、スクロールバーの下矢印をクリックしたりする操作と同じです。
	Display Previous Sample	Peak Review ペインで後方にスクロールします。この機能は、現在表示されている最初のクロマトグラムとは異なる最初のサンプルが表示されるまでスクロールバーの上矢印をクリックする操作と同じです。
	Display Next Sample	次のサンプルまでスクロールします。

表 E-2 Peak Review ツールバーアイコン (続き)







アイコン	名称	説明
	Starts Slide Show Peak Review mode	スライドショーを開始します。初めて使用する場合は、 Slide Show Options ダイアログが開きます。ピーク間の遅延時間を秒単位で設定してください。ダイアログが再表示されないようにするには、 Only show this dialog again if the shift key is down チェックボックスを選択します。 Peak Review ペインの任意の場所をクリックすると、スライドショーが停止します。
	Peak Magnifier	選択したピークを拡大します。
	Peak Demagnifier	拡大したピークを元のサイズに戻します。
	Set Peak to 'Not Found'	<p>クリックして、アクティブなクロマトグラムにピークが存在しないことを示します。実際には顕著なピークが存在しない場合でも、小さなノイズピークが解析されて報告されてしまう場合があります。そのような動作を上書きする場合は、このアイコンをクリックします。Results Table ではピーク領域がN/Aと表示されます。</p> <p>ピークをNot Found とマークするとピーク検出パラメータが使用されなくなるため、ペインの左側でクロマトグラムに対して使用できなくなります。自動モードに戻すには、もう一度アイコンをクリックします。</p>
	Enable Manual Integration Mode	<p>クリックして、手動積分モードに移行します。ソフトウェアが手動積分モードの場合は、クロマトグラムのプロットでドラッグして、積分する正確な領域を指定します。積分は、カーソルを最初にクリックした（時間、強度）のポイントから開始され、カーソルを離れたポイントに向かって進行します。手動積分モードを終了するには、もう一度アイコンをクリックします。</p> <p>ピークを手動で積分するとピーク検出パラメータが使用されなくなるため、ペインの左側でクロマトグラムに対して使用できなくなります。自動モードに戻すには、もう一度アイコンをクリックします。</p>
	Recalculate Peak Model	有効なクロマトグラムを使用してピークモデルを再計算し、そのクロマトグラムに適用します（SignalFinder™ 積分アルゴリズムの場合のみ）。

表 E-3 キャリブレーションツールバーアイコン

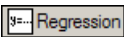
アイコン	Name	説明
	Edit Regression and Weighting	キャリブレーションパラメータを変更するために使用します。これには回帰（AreaまたはHeight）および、回帰の種類と重み付けに使用される実際のパラメータを含みます。 回帰方程式 該当ページ 132 を参照してください。

表 E-4 Statisticsツールバーアイコン

アイコン	名称	説明
	Remove Trailing Index from Sample Name	Statistics Table は並べ替えることができるため、（特定の分析試料の）サンプルを実際の濃度またはサンプル名でグループ化できます。サンプル名を基準としてグループ化している場合は、 Remove Trailing Index from Sample Name オプションは、グループ化する場合にサンプル名が正確に一致している必要があるかどうか、またはダッシュ（-）に続く後続の数値インデックスを除外するかどうかを制御します。例えば、このオプションが選択されている場合はSample 1 - 001とSample 1 - 002という2つのサンプル名がグループ化されますが、選択されていない場合はグループ化されません。
	Sample Grouping	このリストの項目では、統計の計算で（特定の分析試料について）サンプルをどのようにグループ化するかを指定します。以下の選択肢が用意されています。 <ul style="list-style-type: none"> ・ Group by Concentration for Standards : Standard のサンプルを実際の濃度別にグループ化します。 ・ Group by Concentration for QCs : Quality Control のサンプルを実際の濃度別にグループ化します。 ・ Group by Sample Name for Standards : Standard の複製サンプルをSample Nameフィールドを基準にしてグループ化します。すでに説明したように、Remove Trailing Index from Sample Nameオプションが使用されていない場合は、サンプル名が正確に一致している必要があります。一致していない場合、後続の数値（ダッシュの後の数値）の違いにより、異なる名前として扱われる可能性があります。 ・ Group by Sample Name for QCs : Quality Control サンプルだけが使用される点を除き、前に説明したオプションと同じです。 ・ Group by Sample Name for All Samples : すべてのサンプルが使用される点を除き、前に説明したオプションと同じです。

表 E-4 Statistics ツールバーアイコン (続き)


アイコン	名称	説明
	Metric	<p>このリストの項目では、統計の計算に使用する実際のメトリックを指定します。以下の選択肢が用意されています。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ Calculated Concentration : Results Tableの Calculated Concentration フィールドが使用されます。 ・ Area : Results Tableの Area フィールドが使用されます。 ・ Height : Results Tableの Height フィールドが使用されます。 ・ Calibration Y-Value : 分析試料に対して指定されている回帰パラメータが使用されます。対応する内部標準を持たない分析試料の場合は Area または Height のいずれかとなり、内部標準を使用する分析試料の場合は Area Ratio または Height Ratio のいずれかになります。

表 E-5 Results Table ツールバーアイコン




アイコン	ツールのヒント	説明
	Displays the peak review	Peak Review ペインを表示することで、必要に応じてこのピーク積分の質の確認と修正ができます。
	Displays the side by side sample review	2つのサンプルリストを表示することで最大6つのサンプルを選択でき、サンプル間のピークレスポンスを比較します。
	Displays the calibration curve	キャリブレーションカーブを表示します（既知濃度の Standard サンプルが使用された場合のみ利用できます）。このペインを使用してキャリブレーションを確認し、回帰の種類と重み付けを調整することができます。

表 E-5 Results Table ツールバーアイコン (続き)






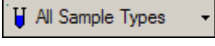






アイコン	ツールのヒント	説明
	Creates a metric plot	現在選択されている列（複数の列を含む）のメトリックプロットを表示します。これらのプロットは外れ値の検出にとても役立ちます。ボタンの右側にあるメニューには、保存されているプロット設定のリストが表示されます。
	Displays the statistics pane	Statistics ペインを表示します。この表には、各濃度レベルに対する平均算出濃度、標準偏差、CVなどが表示されます。
	小さい値から大きい値に選択した列を並べ替えます。	選択した列の値が昇順になるように Results Table を並べ替えます。このアイコンは、ユーザーが列ヘッダーをクリックした場合のみ使用できます。
	大きい値から小さい値に選択した列を並べ替えます。	選択した列の値が降順になるように Results Table を並べ替えます。このアイコンは、ユーザーが列ヘッダーをクリックした場合のみ使用できます。
	Removes any previous sorting	表が並べ替えられている場合は、 Results Table をデフォルトの並び順に戻します。
	Shows only the selected sample type(s)	特定の種類のサンプルだけが表示されるように Results Table をフィルタリングします。この機能が便利なのは、既知の濃度を持つ Standard サンプルが存在し、すべてのサンプルが Unknowns というわけではない場合のみです。

表 E-5 Results Table ツールバーアイコン (続き)

アイコン	ツールのヒント	説明
	Hide selected row(s)	<p>Results Tableの選択した行を表示しない。非表示にする行を選択して、アイコンをクリックします。</p> <p>Peak ReviewペインはResults Tableに同期するため、確認する必要のないピークの行を非表示にすることで、レビュープロセスを迅速に行うことができます。例えば、Quality列にある表を並べ替え、ある値（例えば0.8）よりも優れた質を示すすべての行を非表示にできます。この表は、Region Height列および非表示にした低値を示すすべての行（ピークが明らかに存在しない行を非表示にするため）を並べ替えることができます。これにより、質は低くても実際に存在するピークだけを表示することになります。ユーザーは、すべての潜在的なピークを確認するために費やす時間よりも少ない時間で、Peak Reviewペインからこれらを表示している行の確認に移ることができます。</p>
	Show previously hidden row(s)	すべての行を表示します。表示された行は Sample Type Filter および Components & Groups List 選択によってさらに制約されている場合があります。
	Show only outliers	外れ値を含む行を表示します。
	Go to next outlier	Results Table の次の外れ値に進みます。
	Lock and Save	Results Table を保存してからロックします。ファイルのロックを解除しない限り、 Results Table に対する変更は保存されません。
	Review and Save	Results Table をレビューしてから保存します。 Results Table が読み取り専用の場合、このアイコンは使用できません。

MultiQuant™ MD Software

Access

F

注：MultiQuant™ MDソフトウェアを削除した場合、MultiQuant™ MDソフトウェア内のAnalyst® MDソフトウェアのセキュリティ項目は残ります。セキュリティ権限は、**Security Configuration**ダイアログの**Roles**タブにあります。

事前規定アクセス	説明
Create session file	ユーザーは Results Table を作成できます。
Create quantitation method	ユーザーは定量化メソッドを作成できます。
Modify quantitation method files	Analyst Data フォルダ内の Quantitation Methods フォルダにある定量化メソッドを修正できます。
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	ロック解除された Results Tables のエクスポートとレポートの作成が可能です。
Replace existing Results Table when saved	ユーザーは既存の Results Tables を更新できますが、既存の Results Table 名を使って新しい Results Table を作成することはできません。例えば、RT1と呼ばれる Results Table を作成した場合、ユーザーはこれを更新することはできますが、RT1の名前を使って新しい Results Table を作成することはできません。ユーザーは既存の Results Table の名前で無題の Results Table に名前を付けることはできません。
Change default quantitation method integration algorithm	Integration Default ダイアログで、アルゴリズムを変更することができます。 Edit > Project Integration Defaults をクリックします。
Change default quantitation method integration parameters	Integration Default ダイアログで、アルゴリズムのデフォルトパラメータを変更することができます。 Edit > Project Integration Defaults
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Edit メニューで Project Modified Peak Warning オプションが可能になるフラグを有効または無効にできます。
Allow Project Secure Export Settings	有効であれば、テキストファイルにあるデータは、エクスポートの間は暗号化されます。パスワードを設定して、暗号化を有効にします。
Add samples to Results Table	ユーザーはサンプルを追加することが可能です。 Process > Add Samples をクリックします。

事前規定アクセス	説明
Remove samples from Results Table	ユーザーが選択したサンプルを削除できます。 Process > Remove Selected Samples をクリックします。
Export, import, or remove External Calibration	次のオプションを1つ使って、外部キャリブレーションをエクスポート、インポートまたは削除できます。 <ul style="list-style-type: none"> ・ Process > Export Calibrationをクリックします。 ・ Process > Import External Calibrationをクリックします。 ・ Process > Remove External Calibrationをクリックします。
Change Audit Map settings	プロジェクトの監査マップおよび監査マップ定義を修正できます。 Audit Trail > Audit Map Manager をクリックします。
Modify Sample Name	Results Table でサンプル名の変更ができます。
Modify Sample Type	Results Table でサンプルタイプ (Standard 、 QC 、 Unknown)を変更できます。
Modify Sample ID	Results Table でサンプルIDを変更できます。
Modify Actual Concentration	Results Table で Standard および QC の実際の濃度を変更できます。
Modify Dilution Factor	Results Table で希釈係数を変更できます。
Modify Comment Fields	コメントフィールドを修正できます。 <ul style="list-style-type: none"> ・ Component Comment ・ IS Comment ・ IS Peak Comment ・ Peak Comment ・ Sample Comments
Allow manual integration	Peak Review ペインで手動積分モードにすることが可能です。この権限が有効である場合、 Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram の権限も有効になります。 Modify Results Table integration parameters の権限が有効な場合、 Allow manual integration コマンドは無効です。
Allow set to Peak Not Found	Set peak to not found 機能を使うことが可能です。このアクションを実行するには、 Peak Review ペインを右クリックします。
Include or exclude a peak from the Results Table	Results Tables 、 Statistics Tables 、およびキャリブレーションカーブのピークを含めるまたは除外できます。

事前規定アクセス	説明
Modify regression settings for fit and weight	Modify Results Table Method 機能、および New Quantitation Method wizard を使用した場合、キャリブレーションカーブペインで回帰設定を変更できます。
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	単一のクロマトグラムを変更できます。
Modify quantitation method for the Results Table component	単一のクロマトグラムの修正をコンポーネントに適用できます。 更新して単一の変更をコンポーネントに適用したい場合、ユーザーはこの権限があるため、単一のクロマトグラムに対する Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram の権限が有効になります。
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Results Table （ Metric Plot ボタンが有効）でメトリックプロットを作成または使用でき、メトリックプロットをエクスポートすることが可能です。 File > Export をクリックします。
Set Peak Review Title Format	Peak Review Title Format in Peak Review を変更することが可能です。このアクションを実行するには、 Peak Review ペインを右クリックします。
Add, Rename, or Modify custom column	カスタム列の追加、名前の変更、または修正が可能です。この権限がない場合でも、自動的にカスタム列を作成するクエリを実行することができます。 この権限が無効の場合、 Remove custom column 権限も無効です。 Add, Rename, or Modify custom column 権限が有効の場合、 Remove custom column を無効にできます。
Remove custom column	Results Table でカスタム列を削除できます。
Modify Results Table column settings	Results Table 内の Results Table 列の設定を変更できます。
Save Column Settings as Project Default	列の設定をプロジェクトに適用できます。
Lock and save Results Table	Results Table をロックして保存できます。
Unlock and save Results Table	Results Table を解除して保存できます。
Review and save Results Table	Results Table をレビューして保存できます。
Edit Report Template	Report templatesを編集できます。
Transfer to LIMS	保存してロックした Results Table をLIMSに転送できます。イベントは監査証跡に記録されます。

Security Settings

表 F-1はユーザーが担う推奨されるセキュリティ設定を含みます。

表 F-1 ユーザーの役割によるセキュリティ設定

セキュリティ設置	管理者	監督者	Analyst	レビューア
Create session file	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし
Create quantitation methods	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Modify quantitation method files	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Replace existing Results Table when saved	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセス
Change default quantitation method integration algorithm	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Change default quantitation method integration parameters	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Allow Enable Project Modified Peak Warning	アクセス	アクセスなし	アクセスなし	アクセスなし
Allow Project Secure Export Settings	アクセス	アクセスなし	アクセスなし	アクセスなし
Add samples to Results Table	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし
Remove samples from Results Table	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし
Modify Sample Name	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Modify Sample Type	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし
Modify Sample ID	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Modify Actual Concentration	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし

表 F-1 ユーザーの役割によるセキュリティ設定 (続き)

セキュリティ設置	管理者	監督者	Analyst	レビューア
Modify Dilution Factor	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし
Modify Comment Fields	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Allow manual integration	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし
Allow set to Peak Not Found	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし
Include or exclude a peak from the Results Table	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし
Modify regression settings for fit and weight	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし
Modify quantitation method for the Results Table component	アクセス	アクセス	アクセス	アクセスなし
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	アクセス	アクセス	アクセス	アクセス
Set Peak Review Title Format	アクセス	アクセスなし	アクセスなし	アクセスなし
Add, Rename, or Modify custom column	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Remove custom column	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Modify Results Table column settings	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Save Column Settings as Project Default	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Lock and save Results Table	アクセス	アクセス	アクセス	アクセス
Unlock and save Results Table	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし

表 F-1 ユーザーの役割によるセキュリティ設定 (続き)

セキュリティ設置	管理者	監督者	Analyst	レビューア
Review and save Results Table	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセス
Modify Report Template	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Transfer to LIMS (Controls Initiate Transfer to Watson LIMS as well)	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセス
Export, import, or remove External Calibration	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし
Change Audit Map Setting	アクセス	アクセス	アクセスなし	アクセスなし

改訂履歴

改訂	変更の理由	日付
A	文書の初版	2013年9月
B	ファイルメニューのセクションを更新。監査証跡メニューのセクションを更新。結果表列の表を更新。Reportsのセクションを更新。	2015年1月
C	表紙のAB SCIEXロゴをSCIEX Diagnosticsに変更。著作権ページを更新し、必要であればAB SciexをSCIEXに変更。Windows 10をソフトウェア章の初めに加える。連絡先セクションを更新。トピックタイトルの監査マップマネージャを監査マップについてに変更。内部標準サブメニューセクションのSet Last Component of Group as ISメニューオプションの説明を更新。保持時間更新ダイアログのセクションで「全領域パーセントパラメータ」を「保持時間」に置き換え。SignalFinder積分アルゴリズムパラメータセクションの予測RTの説明を更新。Windows 10をCreate Reportsの項に追加。Report Templateのタグセクションのコンテンツを更新。Figure 7-3のスクリーンショットを変更。新たなテンプレートがコンテンツに適用されたことで、コンテンツ編集において一部変更が必要となった。Windows XPに関するすべての参考資料を削除。	2017年6月