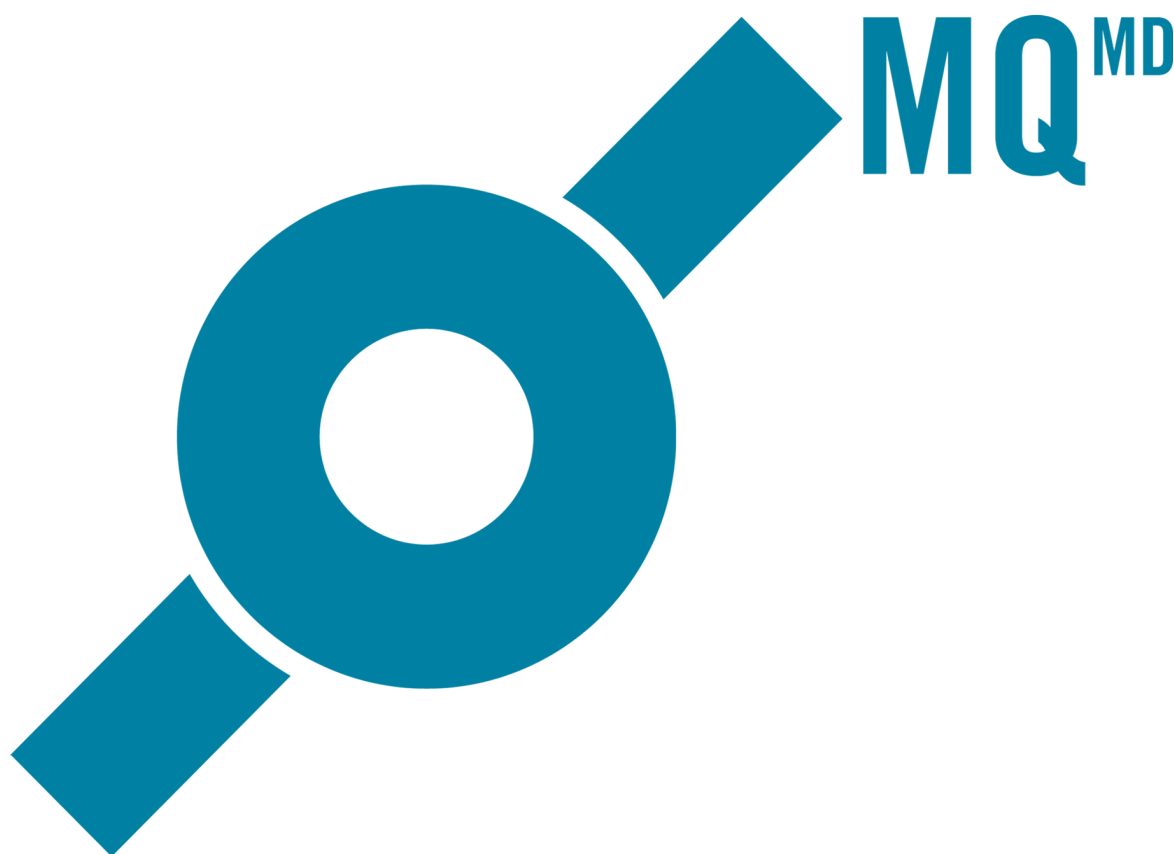

Logiciel MultiQuant™ MD 3.0.3

Guide de référence



Ce document est fourni aux clients qui ont acheté un équipement SCIEX afin de les informer sur le fonctionnement de leur équipement SCIEX. Ce document est protégé par les droits d'auteur et toute reproduction de tout ou partie de son contenu est strictement interdite, sauf autorisation écrite de SCIEX.

IVD

Le logiciel éventuellement décrit dans le présent document est fourni en vertu d'un accord de licence. Il est interdit de copier, modifier ou distribuer un logiciel sur tout support, sauf dans les cas expressément autorisés dans le contrat de licence. En outre, l'accord de licence peut interdire de décomposer un logiciel intégré, d'inverser sa conception ou de le décompiler à quelque fin que ce soit. Les garanties sont celles indiquées dans le présent document.

Certaines parties de ce document peuvent faire référence à d'autres fabricants ou à leurs produits, qui peuvent comprendre des pièces dont les noms sont des marques déposées ou fonctionnent comme des marques de commerce appartenant à leurs propriétaires respectifs. Cet usage est destiné uniquement à désigner les produits des fabricants tels que fournis par SCIEX intégrés dans ses équipements et n'induit pas implicitement le droit et/ou l'autorisation de tiers d'utiliser ces noms de produits comme des marques commerciales.

CE

Les garanties fournies par SCIEX se limitent aux garanties expressément offertes au moment de la vente ou de la cession de la licence de ses produits. Elles sont les uniques représentations, garanties et obligations exclusives de SCIEX. SCIEX ne fournit aucune autre garantie, quelle qu'elle soit, expresse ou implicite, notamment quant à leur qualité marchande ou à leur adéquation à un usage particulier, en vertu d'un texte législatif ou de la loi, ou découlant d'une conduite habituelle ou de l'usage du commerce, toutes étant expressément exclues, et ne prend en charge aucune responsabilité ou passif éventuel, y compris des dommages directs ou indirects, concernant une quelconque utilisation effectuée par l'acheteur ou toute conséquence néfaste en découlant.

Usage réservé au diagnostic in vitro.

Rx only.

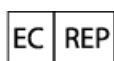
Non disponible dans certains pays. Contacter un représentant commercial SCIEX pour plus de détails.

AB Sciex faisant affaire sous le nom de SCIEX.

Les marques commerciales citées dans le présent document appartiennent à AB Sciex Pte. Ltd. ou à leurs propriétaires respectifs.

AB SCIEX™ est utilisé sous licence.

© 2017 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.
SINGAPORE 739256

Table des matières

1 Introduction au logiciel.....	7
Aide du logiciel.....	7
Types de fichier.....	8
Nous contacter.....	8
Assistance technique.....	8
2 Menu File.....	9
Importer une méthode de quantification.....	10
Sous-menu Export.....	11
Exporter des tableaux de résultats.....	11
Exporter la métrique du tableau de résultats.....	13
Transférer vers le LIMS.....	14
3 Menu Edit.....	15
Modifier la méthode du tableau de résultats.....	17
Unités et valeurs d'étalonnage par défaut du projet.....	18
Project Secure Export Settings.....	18
4 Menu Process.....	19
Exporter un étalonnage.....	19
Importer un étalonnage externe.....	20
5 Menu Audit Trail.....	22
Audit Trail Viewer.....	22
Afficher les résultats du registre d'audit dans la fenêtre Audit Trail Viewer.....	22
Effectuer une recherche par mot clé.....	24
Filtrer les événements audités.....	24
Exporter la visionneuse du registre d'audit.....	26
Imprimer la visionneuse du registre d'audit.....	26
Gestionnaire du registre d'audit.....	26
À propos des cartes d'audit.....	27
Créer une carte d'audit.....	27
Modifier la carte d'audit.....	30
Éditer la carte d'audit.....	31
Afficher la configuration de l'audit intégrée.....	33
6 Menu Help.....	35
7 Tableaux de résultats.....	36
Liste Components & Groups.....	37
Menu accessible par clic droit dans Results Table.....	38
Appliquer les concentrations réelles de l'analyte actuel à tous.....	39
Paramètres de colonne.....	40
Filtrer le type d'échantillon.....	41
Afficher les lignes masquées.....	42

Table des matières

Boîtes de dialogue Results Table.....	42
Sélectionner les échantillons.....	42
Sélectionner la méthode.....	43
Sélectionner un échantillon représentatif.....	44
Définir les composants.....	45
Définir l'intégration.....	48
Paramètres de la valeur aberrante.....	51
Colonnes du tableau de résultats.....	53
8 Examen des pics.....	61
Intégration manuelle.....	61
Appliquer.....	62
Conseils pour examiner les pics.....	62
Menu accessible par clic droit dans Peak Review	63
Boîte de dialogue Peak Review Options : Onglet Appearance.....	63
Boîte de dialogue Peak Review Options : Onglet Zooming.....	66
Définir le format du titre de l'examen de pic.....	68
Copier les paramètres.....	68
Coller les paramètres.....	68
Définir le pic sur « Not Found ».....	69
Utiliser le pic.....	69
Mettre à jour la méthode de quantification pour le composant.....	69
Mettre à jour la méthode de quantification pour le groupe.....	69
Appliquer les paramètres d'intégration à l'échantillon au sein du groupe.....	70
Restaurer le pic à la méthode d'origine.....	70
Restaurer tous les pics pour le composant.....	70
9 Examen des échantillons côte à côte.....	71
Effectuer un examen des échantillons côte à côte.....	71
10 Volet Calibration.....	73
Boîte de dialogue Regression Options.....	73
Conseils d'étalonnage.....	74
Menu accessible par clic droit dans Calibration.....	74
11 Tableaux de statistiques.....	76
Conseils relatifs au tableau de statistiques.....	77
Menu accessible par clic droit dans Statistics Table.....	78
12 Tracés métriques.....	79
Générer un tracé métrique.....	79
Save Metric Plot Settings.....	79
Conseils relatifs aux tracés métriques.....	79
Menu accessible par clic droit dans Metric Plot.....	80
Boîte de dialogue Regression.....	81
13 Quantitation Method Editor.....	83
Onglet Components.....	83
Sous-menu Groups.....	84
Sous-menu Internal Standards.....	86
Onglet Integration	87
Boîte de dialogue Highlight Components.....	88
Boîte de dialogue Update Retention Time.....	88
Onglet Outlier Settings	89

14 Tutoriel sur le flux de travail de l'analyse de quantification.....	91
À propos des courbes d'étalonnage.....	91
Conditions préalables.....	91
Modifier les colonnes affichées dans le tableau de résultats.....	91
Traiter des données avec l'algorithme d'intégration SignalFinder™.....	93
Définir les paramètres d'intégration des pics.....	93
Créer un tableau de résultats.....	94
Examiner les pics.....	98
Modifier la courbe d'étalonnage.....	99
Examiner les statistiques des échantillons.....	100
Traiter les données à l'aide de l'algorithme d'intégration MQ4.....	101
Définir les paramètres d'intégration des pics.....	101
Créer un tableau de résultats.....	102
Examiner les pics.....	106
Modifier la courbe d'étalonnage.....	107
Examiner les statistiques des échantillons.....	108
Algorithmes d'intégration.....	109
À propos de l'algorithme d'intégration SignalFinder.....	109
SignalFinderParamètres de l'algorithme d'intégration™.....	112
Paramètres de l'algorithme d'intégration MQ4.....	116
Tâches facultatives.....	119
Créer des tracés métriques.....	119
Créer des colonnes personnalisées.....	119
À propos des fichiers des méthodes de quantification et des méthodes intégrées.....	120
A Paramètres des algorithmes d'intégration.....	121
Paramètres de l'algorithme d'intégration SignalFinder.....	121
Paramètres de l'algorithme d'intégration MQ4.....	124
B Équations de régression.....	127
Facteurs de pondération.....	128
Régressions.....	128
Linear.....	129
Linear Through Zero.....	129
Mean Response Factor.....	129
Quadratic.....	130
Power.....	130
Wagner.....	130
Hill.....	131
Calcul des concentrations finales.....	131
Linear.....	131
Linear Through Zero and Mean Response Factor.....	131
Quadratic.....	131
Power.....	131
Wagner.....	131
Hill.....	132
C Rapports.....	133
Créer des rapports.....	133
Créer des modèles de rapport personnalisés.....	134
Modèles de rapports.....	136
Balises de modèles de rapport.....	137

Table des matières

D Bruit relatif et calculs du ratio signal sur bruit.....151
Remarque sur le ratio signal sur bruit en cas d'utilisation de
l'algorithme d'intégration SignalFinder.....155

E Icônes du logiciel.....156

F Accès au logiciel MultiQuant™ MD.....163
Paramètres de sécurité.....166

Historique des révisions.....169

Introduction au logiciel

1

Ce document décrit la fonctionnalité disponible dans le logiciel MultiQuant™ MD.

L'accès au logiciel est basé sur le rôle attribué à l'utilisateur dans le logiciel Analyst® MD. S'assurer que chaque utilisateur se voit attribuer l'accès approprié au logiciel.

Seule la version anglaise des systèmes d'exploitation Microsoft suivants est prise en charge :

- Windows 7 SP1 (32 bits et 64 bits)
- Windows 10

ATTENTION : Le format des nombres, des monnaies, des dates et de l'heure doit être configuré en anglais (États-Unis). La définition du format sur une valeur différente peut produire des données erronées.

Le logiciel MultiQuant™ MD, doté des fonctions de registre d'audit et de sécurité, nécessite une licence complète et l'installation du logiciel Analyst® MD.

Les méthodes contrôlées de sortie des données depuis le logiciel consistent à exporter les tableaux de résultats, à les transférer sur le LIS et à établir un rapport. Les autres moyens d'extraction de données, telles que la copie et le collage des tableaux de résultats, ne sont pas contrôlés. Les utilisateurs ne doivent pas utiliser ces méthodes d'extraction non contrôlées dans un but réglementaire.

Remarque : Le logiciel MultiQuant™ MD utilise les informations de verrouillage de l'écran du logiciel Analyst® MD. Aucune configuration supplémentaire n'est requise pour le logiciel MultiQuant™ MD.

Remarque : La structure des fichiers et des dossiers doit être conservée pour pouvoir afficher les chromatogrammes. Si des données doivent être déplacées, déplacer alors le projet entier en conservant la structure des fichiers.

Aide du logiciel

Le logiciel dispose d'infobulles et de messages d'erreur qui fournissent des informations supplémentaires sur la fonctionnalité du logiciel.

- Si un champ n'est pas disponible, déplacer alors le curseur sur le champ pour afficher des infobulles expliquant la raison pour laquelle la fonctionnalité n'est pas disponible. Les informations supplémentaires portent sur le mode d'activation du champ ou sur le paramètre de sécurité requis pour activer le champ.
- Les messages d'erreur comprennent des informations sur les paramètres de sécurité requis pour utiliser la fonctionnalité.

Types de fichier

Tableau 1-1 Types de fichier du logiciel

Type de fichier	Description
*.qsession	Tableau de résultats du logiciel MultiQuant. Contient les données du registre d'audit de quantification.
*.qmethod	Méthode de quantification du logiciel MultiQuant.
*.qmap	Carte d'audit du logiciel MultiQuant.
*.mqcal	Fichier d'étalonnage externe.
*.cset	Fichier des paramètres de colonne.

Nous contacter

Assistance SCIEX

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

Formation destinée aux clients

- En Amérique du Nord : NA.CustomerTraining@sciex.com
- En Europe : Europe.CustomerTraining@sciex.com
- En dehors des États-Unis et de l'Amérique du Nord, visitez le site sciex.com/education pour obtenir les coordonnées.

Centre d'apprentissage en ligne

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

Pour connaître les dernières consignes relatives à la cybersécurité des produits SCIEX, visitez le site sciex.com/productsecurity.

Assistance technique

SCIEX et ses représentants maintiennent un personnel et des techniciens dûment formés installés dans le monde entier. Ils peuvent répondre aux questions sur le système ou tout problème technique qui pourrait survenir. Pour plus d'informations, visiter le site Web SCIEX à l'adresse sciex.com.

Tableau 2-1 Options du menu File

Option de menu	Description
New Results Table	Quantifie un ensemble de données, puis crée un tableau de résultats. Sélectionner les fichiers de données à traiter ainsi que la méthode de quantification à appliquer. Voir Boîtes de dialogue Results Table à la page 42 .
New Quantitation Method	Un éditeur de méthodes de quantification vide est créé après la sélection de l'échantillon. L'utilisateur crée généralement une méthode dans le cadre de l'assistant New Results Table. Cette commande est toutefois utile si l'utilisateur veut créer une méthode sans l'appliquer immédiatement à un ensemble d'échantillons en créant un tableau de résultats. <ul style="list-style-type: none"> Le volet de navigation comprend les sous-dossiers, les fichiers wiff et les échantillons disponibles dans le dossier Data pour le projet sélectionné. Développer les dossiers individuels pour afficher les sous-dossiers ou les fichiers wiff. Développer le fichier wiff pour afficher les échantillons disponibles.
Open Results Table	Ouvre un tableau de résultats précédemment enregistré. Après avoir sélectionné la commande, une boîte de dialogue Open standard s'ouvre. Voir Tableaux de résultats à la page 36 .
Open Quantitation Method	Ouvre une méthode de quantification précédemment enregistrée. Après avoir sélectionné la commande, une boîte de dialogue Open standard s'ouvre. Voir Quantitation Method Editor à la page 83 .
Save	Permet d'enregistrer le tableau de résultats actif ou l'éditeur de méthodes de quantification dans un fichier. Si le tableau de résultats ou l'éditeur de méthodes de quantification n'a jamais été enregistré, l'utilisateur est alors invité à indiquer le nom de fichier. Sinon, la version précédente est écrasée.
Save As	Permet d'enregistrer le tableau de résultats actif ou l'éditeur de méthodes de quantification dans un nouveau fichier.
Recent Results Table	Contient des éléments de sous-menu pour chaque tableau de résultats récemment utilisé. Sélectionner l'un des éléments pour ouvrir le fichier correspondant.
Recent Quantitation Methods	Contient des éléments de sous-menu pour chaque méthode de quantification récemment utilisée. Sélectionner l'un des éléments pour ouvrir le fichier correspondant.

Tableau 2-1 Options du menu File (Suite)

Option de menu	Description
Import	Crée une nouvelle méthode de quantification à partir d'un fichier texte. L'utilisateur crée généralement une méthode manuellement en utilisant la commande New Quantitation Method (voir Quantitation Method Editor à la page 83) ou dans le cadre du processus de création d'un nouveau tableau de résultats (voir Tableaux de résultats à la page 36). Cette commande est utile si l'utilisateur veut créer ou modifier une méthode de quantification. Dans ce cas, créer une méthode manuellement, puis utiliser la commande Quantitation Method as Text .
Export	Contient des commandes pour l'exportation des méthodes de quantification sous la forme de fichiers .qmethod ou .txt. Voir Sous-menu Export à la page 11 . Les méthodes contrôlées de sortie des données depuis le logiciel consistent à exporter les tableaux de résultats, à les transférer sur le LIMS et à établir un rapport. Les autres sources de sortie des données, telles que la copie et le collage à partir des tableaux de résultats, ne sont pas contrôlées. Les utilisateurs ne doivent pas utiliser ces méthodes de sortie non contrôlées dans un but réglementaire.
Transfer to LIMS	Un fichier de licence du LIMS est requis pour activer la fonction. Voir Transférer vers le LIMS à la page 14 .
Export and Save Results Table	L'exportation de tableaux de résultats est l'une des méthodes contrôlées de sortie de données.
Create Report and Save Results Table	Crée un rapport dans Microsoft Word en utilisant le logiciel Reporter. Voir Rapports à la page 133 . En cas de création d'un modèle personnalisé, il incombe à l'utilisateur de valider le modèle. L'utilisateur peut modifier le format des nombres dans l'éditeur de modèle de rapport. Si le format des nombres n'est pas spécifié dans le modèle, le format indiqué dans Results Table Column Settings est alors utilisé dans le rapport.
Exit	Quitte le programme. L'utilisateur est invité à enregistrer les données non enregistrées.

Importer une méthode de quantification

1. Cliquer sur **File > Import > Quantitation Method from Text**.
2. Sélectionner le fichier texte.
3. Sélectionner un échantillon représentatif.

La fenêtre Quantitation Method Editor s'ouvre.

4. Enregistrer la méthode au format *.qmethod pour qu'elle puisse être utilisée par la suite pour quantifier un nouvel ensemble de données.

Sous-menu Export

Les méthodes contrôlées de sortie des données depuis le logiciel consistent à exporter les tableaux de résultats, à les transférer sur le LIMS et à établir un rapport. Les autres moyens d'extraction de données tels que la copie et le collage des tableaux de résultats ne sont pas contrôlés. Les utilisateurs ne doivent pas utiliser ces méthodes d'extraction non contrôlées dans un but réglementaire.

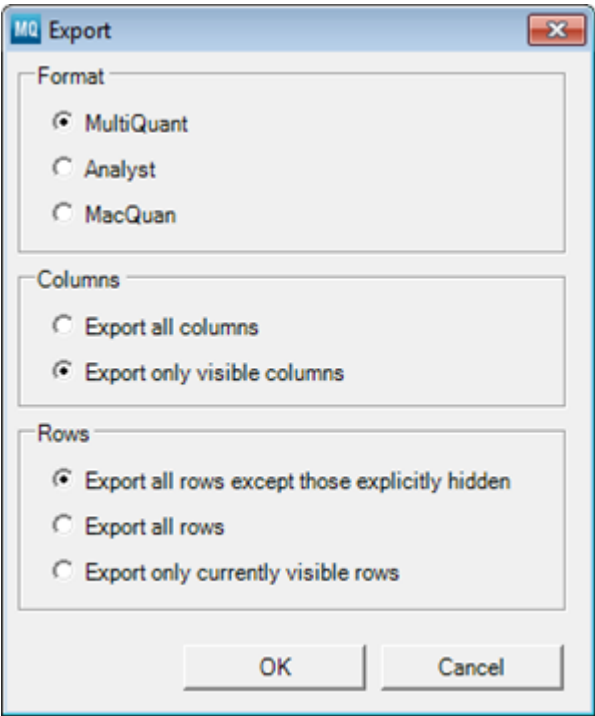
Tableau 2-2 Options du menu Export

Option de menu	Description
Results Table-Metric	Crée un fichier texte délimité par des tabulations contenant les informations du tableau de résultats actif. Voir Exporter la métrique du tableau de résultats à la page 13 .
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod	Exporte la méthode de quantification dans un nouveau fichier. Lorsqu'un tableau de résultats est créé, une copie de la méthode de quantification utilisée pour générer le tableau est enregistrée en interne avec le tableau. Cela est utile si la méthode de quantification d'origine a été supprimée ou modifiée et que l'utilisateur veut appliquer la méthode d'origine à un nouveau lot d'échantillons en créant un tableau de résultats.
Results Table's Quantitation Method as Text	Exporte une copie de cette méthode au format texte. Lorsqu'un tableau de résultats est créé, une copie de la méthode de quantification utilisée pour générer le tableau est enregistrée en interne avec le tableau.
Quantitation Method as Text	Ces fichiers contiennent une ligne d'en-tête et une ligne pour chaque composant (analyte ou étalon interne). Il y a une colonne pour le nom du composant, la gamme de masses, chacun des paramètres d'intégration, etc. Les lignes d'en-tête ne doivent pas être modifiées et des colonnes ne doivent pas être ajoutées ni supprimées si la méthode de quantification doit être importée dans le logiciel MultiQuant™ MD. Si la ligne d'en-tête d'une colonne qui spécifie un paramètre d'intégration est modifiée ou si la colonne est supprimée, la valeur par défaut spécifiée dans User Integration Defaults pour ce paramètre d'intégration sera appliquée pour tous les composants. Si la ligne d'en-tête d'une autre colonne est modifiée ou supprimée, la méthode ne sera pas importée. L'utilisateur doit ouvrir la méthode et vérifier que toutes les modifications requises sont présentes dans la méthode de quantification importée. Voir Tableau 2-1 .

Exporter des tableaux de résultats

Remarque : Le fabricant décline toute responsabilité ou responsabilité conjointe, notamment pour tout dommage indirect ou consécutif, après l'exportation des données du logiciel. Le tableau de résultats est exporté avec une grande précision indépendamment du format des nombres dans le paramètre de colonne.

Figure 2-1 Boîte de dialogue Export



Étiquette	Description
Format	
MultiQuant	Sélectionner pour exporter avec une grande précision. Dans ce format, le fichier texte contient une ligne d'en-tête qui utilise les mêmes noms de colonne que ceux qui sont affichés dans le tableau de résultats . Il s'agit du format recommandé pour l'exportation des tableaux de résultats .
Analyst	Sélectionner pour exporter avec la précision définie dans le paramètre de colonne. Ce format est le même que celui utilisé par le logiciel Analyst [®] MD pour l'exportation des tableaux de résultats de quantification. La différence entre ce format et le format précédent réside dans le fait que les en-têtes de colonne utilisent des noms légèrement différents dans certains cas (pour correspondre au format du logiciel Analyst [®] MD) et qu'il y a des lignes d'en-tête supplémentaires décrivant la calibration pour chaque analyte.
MacQuan	Ce format est similaire à celui du logiciel Analyst [®] MD, sauf que les noms d'en-tête de colonne correspondent à ceux utilisés par le progiciel de quantification MacQuan.
Columns	
Export all columns	Sélectionner pour exporter tous les champs possibles, y compris les colonnes qui sont actuellement masquées dans le tableau de résultats .

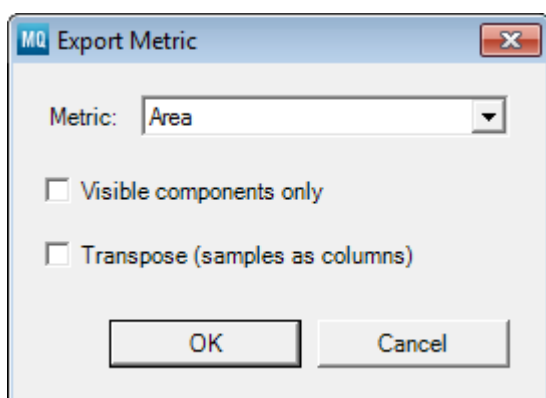
Étiquette	Description
Export only visible columns	Sélectionner pour exporter uniquement les colonnes qui sont actuellement affichées dans le tableau de résultats . L'utilisateur peut également sélectionner les colonnes qui sont visibles à l'aide de la commande Results Table Column Settings . Voir Menu accessible par clic droit dans Results Table à la page 38 .
Rows	
Export all rows except those explicitly hidden	Sélectionner pour exporter toutes les lignes à l'exception de celles qui sont masquées en raison d'un filtrage spécifique. Se reporter à Icônes du logiciel à la page 156 . Les lignes qui sont masquées en raison d'un filtrage par type d'échantillon ou d'un filtrage par composant sont exportées.
Export all rows	Sélectionner cette option pour exporter toutes les lignes (c'est-à-dire, tous les composants pour tous les échantillons).
Export only currently visible rows	Sélectionner pour exporter uniquement les lignes qui sont actuellement affichées dans le tableau de résultats . Les lignes qui sont masquées en raison d'un filtrage par type d'échantillon ou d'un filtrage par composant ne sont pas incluses.

Exporter la métrique du tableau de résultats

Remarque : Le fabricant décline toute responsabilité ou responsabilité conjointe, notamment pour tout dommage indirect ou consécutif, après l'exportation des données du logiciel. Le **tableau de résultats** est exporté avec une grande précision indépendamment du format des nombres dans le paramètre de colonne.

Permet de créer un fichier texte délimité par des tabulations contenant les informations du tableau de résultats actif.

Figure 2-2 Boîte de dialogue Export Metric



Étiquette	Description
Metric	Sélectionner le champ à exporter. Voir Colonnes du tableau de résultats à la page 53 .
Visible components only	Si cette option est sélectionnée, seuls les composants pour lesquels au moins une ligne correspondante est actuellement visible dans le tableau de résultats sont alors exportés dans le fichier. Si cette option n'est pas sélectionnée, les informations sont alors exportées pour tous les composants.
Transpose (samples as columns)	Si cette option est sélectionnée, le fichier obtenu contient alors une colonne pour chaque échantillon et une ligne pour chaque composant (analyte ou étalon interne). Si cette option n'est pas sélectionnée, il existe alors une colonne pour chaque composant et une ligne pour chaque échantillon.

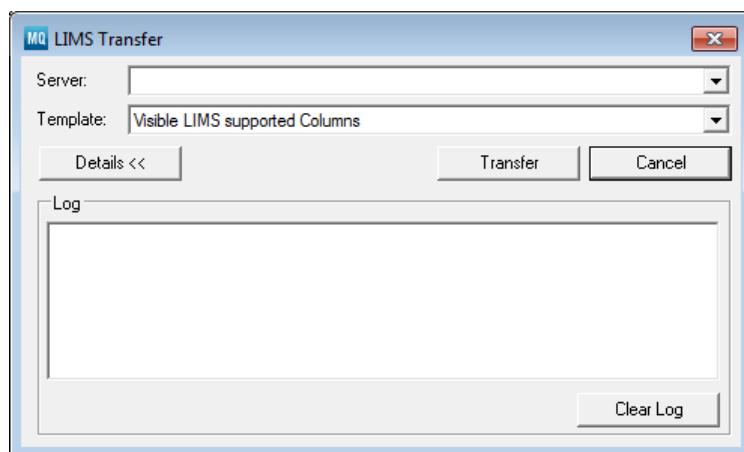
Transférer vers le LIMS

Cette commande est disponible uniquement lorsqu'un tableau de résultats est ouvert. Un fichier de licence du LIMS est requis pour activer la fonction.

Les méthodes contrôlées de sortie des données depuis le logiciel consistent à exporter les tableaux de résultats, à les transférer sur le LIMS et à établir un rapport. Les autres moyens d'extraction de données, telles que la copie et le collage des tableaux de résultats, ne sont pas contrôlés. Les utilisateurs ne doivent pas utiliser ces méthodes de sortie non contrôlées dans un but réglementaire.

1. Cliquer sur **Help > Install License** pour activer une licence.

Figure 2-3 Boîte de dialogue LIMS Transfer



2. Entrer le nom du serveur dans le champ **Server** au format suivant : **http:\\adresse IP du serveur;numéro de port**.
3. Sélectionner un modèle dans la liste **Template**.
4. Cliquez sur **Transfer**.

Tableau 3-1 Options du menu Edit

Option de menu	Description
Clear	Efface la sélection actuelle. Cela s'applique lorsque l'onglet Components de Quantitation Method Editor comporte une ou plusieurs lignes sélectionnées.
Copy	Lorsque le tableau de résultats est actif, cette commande copie la partie sélectionnée du tableau dans le presse-papiers. Lorsque le tracé Peak Review ou Calibration est actif, une image du tracé est copiée.
Paste	Lorsque le tableau de résultats est actif avec une zone sélectionnée modifiable, cette commande colle les cellules ou les colonnes depuis le presse-papiers.
Copy Entire Table	Lorsqu'un tableau de résultats ou un tableau de statistiques est actif, cette commande copie toutes les données dans le presse-papiers. Dans le cas d'un tableau de résultats , seules les lignes et les colonnes actuellement visibles sont copiées.
Fill Down	Lorsque le tableau de résultats est actif avec une zone sélectionnée modifiable, cette commande reproduit les informations figurant dans la première ligne sélectionnée dans toutes les lignes sélectionnées suivantes.
Select all Rows	Sélectionner toutes les lignes du tableau de résultats ou du tableau de statistiques actuellement actif. Cela est utile si l'utilisateur veut par la suite appliquer une commande telle que Copy , qui agit sur les lignes sélectionnées.
Modify Results Table Method	<p>Apporte des modifications à la méthode de quantification associée au tableau de résultats actuellement actif. Cela se révèle utile si l'utilisateur veut ajouter ou supprimer des composants. Pour modifier uniquement les paramètres d'intégration, utiliser la commande Update Quantitation Method for Group. Voir Examen des pics à la page 61.</p> <p>Lorsque la commande est sélectionnée, la boîte de dialogue Quantitation Method Editor s'ouvre. Les données sont retraitées et le tableau de résultats se met à jour pour afficher les données. Voir Quantitation Method Editor à la page 83 et Boîtes de dialogue Results Table à la page 42.</p> <p>La réapplication de la méthode de quantification écrase tous les pics modifiés manuellement pour le composant spécifié, puis décoche les cases dans la colonne Modified du tableau de résultats.</p>

Tableau 3-1 Options du menu Edit (Suite)

Option de menu	Description
Project Integration Defaults	Définit les paramètres de recherche de pic par défaut qui sont utilisés lors de la création d'une méthode de quantification. S'il y a plus que quelques composants, définir les valeurs par défaut d'après la chromatographie afin de ne pas avoir à les ajuster individuellement pour chaque composant. Toutefois, aucun ensemble de paramètres ne semble convenir parfaitement à tous les composants de sorte qu'il pourrait s'avérer nécessaire d'ajuster certains paramètres individuellement pour certains composants. Voir Paramètres des algorithmes d'intégration à la page 121 .
Boîte de dialogue Project Units & Calibration Defaults	Définit les unités de concentration et les paramètres de régression par défaut qui sont utilisés lors de la création d'une méthode de quantification. L'utilisateur peut également définir ces paramètres lors de la création de la méthode. Toutefois, si les mêmes paramètres sont utilisés, il est alors plus facile de définir les valeurs par défaut après avoir utilisé cette commande. Voir Unités et valeurs d'étalonnage par défaut du projet à la page 18 .
Project Secure Export Settings	Si cette option est sélectionnée, les données du fichier texte sont alors chiffrées au cours de l'exportation. Définir un mot de passe pour activer le chiffrement. Voir Project Secure Export Settings à la page 18 .
Enable Project Modified Peak Warning	Par défaut, cette option n'est pas sélectionnée. Si elle est sélectionnée, lorsqu'un utilisateur modifie un chromatogramme dans un tableau de résultats , puis enregistre les modifications, un message d'avertissement s'ouvre pour indiquer qu'une modification a été apportée. L'utilisateur a la possibilité de poursuivre l'enregistrement ou de retourner au tableau de résultats . Voir Modifier la méthode du tableau de résultats à la page 17 .

Tableau 3-1 Options du menu Edit (Suite)

Option de menu	Description
Cache Chromatograms for Faster Peak Review	<p>Lorsque cette fonction est activée, chaque fois qu'un chromatogramme à échange d'ions (XIC) est calculé pour un échantillon et un composant spécifiques, il est enregistré pour une utilisation future tant que le tableau de résultats associé reste ouvert.</p> <p>Par exemple, si l'utilisateur crée un tableau de résultats lorsque cette fonction est activée, les chromatogrammes figurant dans le volet Peak Review apparaissent alors rapidement, car ils ont été précédemment mis en cache durant le processus d'intégration initial pour créer le tableau de résultats et qu'ils n'ont pas besoin d'être recalculés à partir des informations du fichier wiff. Si l'utilisateur ouvre un tableau de résultats précédemment enregistré, les chromatogrammes individuels doivent alors être calculés lorsqu'ils sont affichés pour la première fois dans le volet Peak Review. Il sera toutefois plus rapide de retourner à un chromatogramme précédent spécifique.</p> <p>La mémoire de l'ordinateur doit être suffisante pour mettre en cache tous les chromatogrammes. Toutefois, pour les ensembles d'échantillons très importants qui comportent un grand nombre d'analytes, cette option doit être désactivée afin d'éviter les messages de mémoire insuffisante.</p>
Cache all Chromatograms Now	<p>Lorsque la commande Cache Chromatograms for Faster Peak Review est activée, elle sert à calculer, puis à mettre en cache tous les chromatogrammes pour le tableau de résultats actif. Pour un ensemble de données important, l'exécution de cette commande peut prendre un certain temps. Toutefois, une fois qu'elle a été exécutée, tous les chromatogrammes sont mis en cache et le processus d'examen des pics est plus rapide. La commande peut être arrêtée si besoin est.</p> <p>Effectuer cette opération si de nombreux chromatogrammes vont être examinés. Si l'option Cache Chromatograms for Faster Peak Review a été initialement activée, cette opération n'a pas besoin d'être effectuée de nouveau après avoir créé un tableau de résultats, car les chromatogrammes sont déjà mis en cache. Cette commande est utile après avoir ouvert un tableau de résultats précédemment enregistré.</p>

Modifier la méthode du tableau de résultats

Apporte des modifications à la méthode de quantification associée au tableau de résultats actuellement actif. Cela se révèle utile si l'utilisateur veut ajouter ou supprimer des composants. Pour modifier uniquement les paramètres d'intégration, utiliser la commande **Update Quantitation Method for Group**. Voir [Mettre à jour la méthode de quantification pour le groupe à la page 69](#).

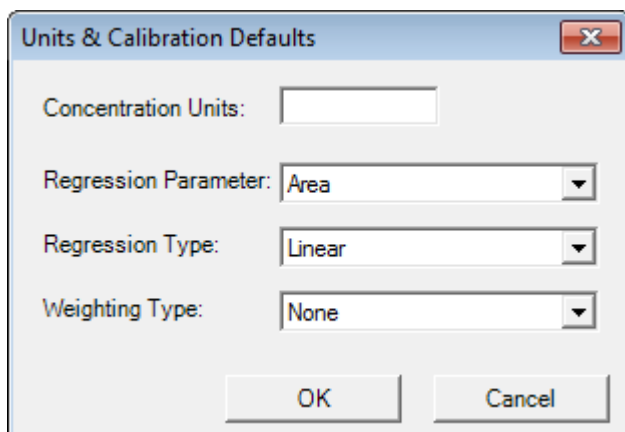
Lorsque la commande est sélectionnée, la boîte de dialogue Quantitation Method Editor s'ouvre. Les données sont retraitées et le tableau de résultats se met à jour pour afficher les nouvelles données. Voir [Quantitation Method Editor à la page 83](#).

La réapplication de la méthode de quantification écrase tous les pics modifiés manuellement pour le composant spécifié, puis décoche les cases dans la colonne **Modified** du **tableau de résultats**.

Unités et valeurs d'étalonnage par défaut du projet

Définit les **unités de concentration**, le **paramètre de régression** (aire ou amplitude), le **type de régression** et le **type de pondération**. Les différents types de régression et de pondération sont décrits dans [Équations de régression à la page 127](#).

Figure 3-1 Boîte de dialogue Units & Calibration Defaults



Project Secure Export Settings

Les données du fichier texte sont chiffrées au cours de l'exportation. Définir un mot de passe pour activer le chiffrement. Voir la [Figure 3-2](#).

Figure 3-2 Boîte de dialogue Secure Export Settings

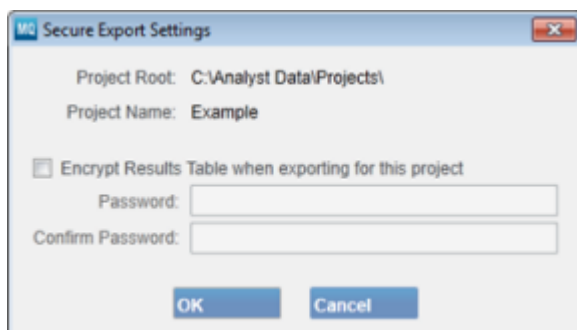


Tableau 4-1 Options du menu Process

Option de menu	Description
Add Samples	Ajoute des échantillons supplémentaires à un tableau de résultats actuellement actif. Voir Sélectionner les échantillons à la page 42 . Une barre de progression apparaît pendant que les nouveaux échantillons sont intégrés et ajoutés au tableau existant. L'autorisation Add samples to Results Table doit être activée pour que l'utilisateur puisse effectuer cette tâche.
Remove Selected Samples	Supprime les échantillons sélectionnés d'un tableau de résultats actuellement actif. L'autorisation Remove samples from Results Table doit être activée pour que l'utilisateur puisse effectuer cette tâche.
Show Only Outliers	Affiche les lignes qui contiennent des données aberrantes. Cliquer sur Process > Show Only Outliers . Pour afficher toutes les lignes, cliquer de nouveau sur Process > Show Only Outliers .
Go to Next Outlier	Avance jusqu'à la donnée aberrante suivante dans le tableau de résultats . Cliquer sur Process > Go to Next Outlier .
Export Calibration and Save Results Table	Enregistre une copie de l'équation d'étalonnage pour tous les analytes associés au tableau de résultats actif dans un fichier externe (*.mqcal). Cela permet d'appliquer l'étalonnage d'un ensemble d'échantillons d'étalon à d'autres échantillons qui ne font pas partie du même tableau de résultats . Voir Exporter un étalonnage à la page 19 .
Import External Calibration	Applique un étalonnage précédemment exporté au tableau de résultats actif. Une alternative à l'utilisation de cette commande consiste à spécifier le fichier d'étalonnage externe depuis l'assistant New Results Table , comme décrit dans Définir l'intégration à la page 48 . Voir Importer un étalonnage externe à la page 20 .
Remove External Calibration	Supprime un étalonnage externe précédemment appliqué d'un tableau de résultats actif.

Exporter un étalonnage

Enregistre une copie de l'équation d'étalonnage pour tous les analytes associés au **tableau de résultats** actif dans un fichier externe (*.mqcal). Cela permet d'appliquer l'étalonnage d'un ensemble d'échantillons standard à d'autres échantillons qui ne font pas partie du même **tableau de résultats**.

Le flux de travail type est le suivant :

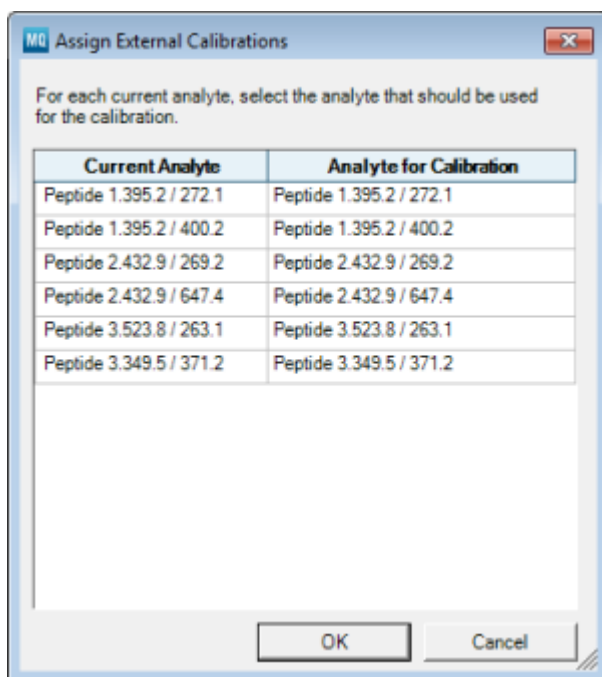
1. Créer un nouveau **tableau de résultats** contenant uniquement l'**étalon**.
2. Utiliser le volet **Peak Review** pour s'assurer que l'intégration a réussi.
3. Utiliser la commande **Export Calibration** pour enregistrer une copie de l'étalonnage.
4. Créer un nouveau **tableau de résultats** contenant des échantillons de concentration inconnue.
5. Appliquer l'étalonnage précédemment exporté au nouveau tableau en utilisant la commande **Import External Calibration** ou en spécifiant le fichier d'étalonnage.
6. Répéter les étapes 4 et 5 selon les besoins.

Si le **tableau de résultats** d'origine (avec les échantillons **Standard**) est modifié, les étalonnages précédemment exportés ne sont alors pas mis à jour automatiquement. Le **tableau de résultats** doit être de nouveau exporté.

Importer un étalonnage externe

Si les mêmes noms d'analyte sont utilisés dans le **tableau de résultats** actuel que dans l'étalonnage exporté, la boîte de dialogue est alors renseignée automatiquement et l'utilisateur peut cliquer sur **OK**. Si les analytes dans le **tableau de résultats** actuel sont attribués à des groupes spécifiques et si les analytes dans l'étalonnage exporté sont attribués à des groupes comportant les mêmes noms, la boîte de dialogue est alors renseignée automatiquement. S'il y a plus que quelques analytes, utiliser alors les mêmes noms d'analyte dans les deux cas ou utiliser des noms de **groupe** cohérents.

Figure 4-1 Boîte de dialogue Assign External Calibrations



Étiquette	Description
Current Analyte	Contient une entrée pour chaque analyte provenant de la méthode de quantification pour le tableau de résultats actuel.
Analyte for Calibration	Contient une liste des noms de tous les analytes disponibles dans le fichier de calibration externe. Pour chacun des analytes actuels, sélectionner l'analyte externe correspondant à partir duquel la calibration est prise.

Remarque : La carte d'audit est ajoutée à la session lors de la première création du **tableau de résultats**. Elle ne peut pas être modifiée après avoir été ajoutée.

Tableau 5-1 Menu Audit Trail

Élément de menu	Description
Audit Trail Viewer	Ouvre la fenêtre Audit Trail Viewer .
Audit Map Manager	Sélectionne, modifie et active les cartes d'audit .
View Session Audit Map	Ouvre la carte actuelle du tableau de résultats actif.

Audit Trail Viewer

La fenêtre Audit Trail Viewer affiche l'historique complet d'un échantillon spécifique dans le tableau de résultats. Les tableaux de résultats sont enregistrés dans le dossier <lecteur>:\Analyst Data\Projects\<nom du projet>\Results.

Remarque :

Le tableau de résultats ne doit pas être masqué lorsque d'autres actions sont réalisées. Par exemple, pendant l'enregistrement d'un registre d'audit.

Pour maximiser un autre volet tel que le volet Peak Review afin de mieux visualiser les données, utiliser le bouton **Toggles Tab Mode** situé sur la barre d'outils.

La fenêtre **Audit Trail Viewer** permet aux utilisateurs d'effectuer les actions suivantes :

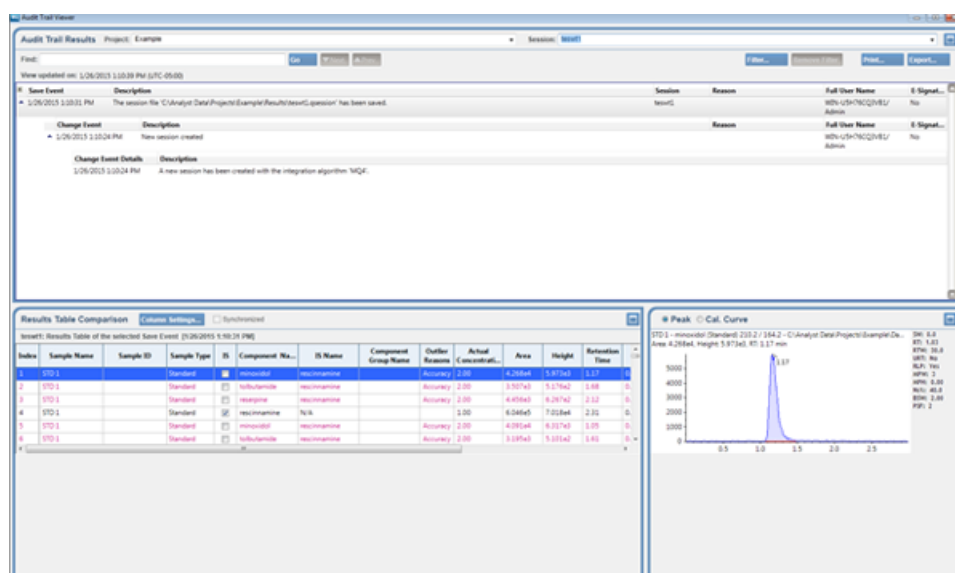
- Afficher les enregistrements du journal d'audit pour chaque **tableau de résultats**.
- Procéder à une recherche par mot clé qui met en surbrillance chaque occurrence du texte.
- Filtrer les événements audités dans le registre d'audit du logiciel d'après un ensemble de critères spécifiés.
- Exporter les enregistrements du registre d'audit dans un fichier txt. (Les fichiers exportés peuvent être modifiés.)
- Imprimer dans un PDF sécurisé.

Afficher les résultats du registre d'audit dans la fenêtre Audit Trail Viewer

1. Ouvrir un tableau de résultats.

2. Cliquez sur **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. Pour modifier des projets, cliquer sur la liste **Projects**, puis sélectionner un autre projet.
4. Pour afficher d'autres sessions, cliquer sur la liste **Sessions**, puis sélectionner une autre session. Les utilisateurs peuvent également choisir d'afficher toutes les sessions du projet en même temps.

Figure 5-1 Audit Trail Viewer



Étiquette	Description
Project	Sélectionner un projet dans la liste.
Session	Sélectionner un fichier de session.
Find	Une recherche par mot clé sans filtrage. Met en surbrillance toutes les occurrences du texte.
Go	Cliquer pour démarrer la recherche.
Next	Cliquer pour passer au mot suivant.
Prev	Cliquer pour passer au mot précédent.
Filter	Cliquer pour afficher uniquement les événements qui correspondent aux critères sélectionnés.
Remove Filter	Cliquer pour supprimer le filtre.
Print	Cliquer pour imprimer le registre d'audit.
Export	Cliquer pour exporter le registre d'audit.

Étiquette	Description
Save Event	Lorsqu'un fichier de session est enregistré, un événement d'enregistrement est créé. L'événement d'enregistrement capture dans le tableau de résultats les modifications apportées depuis l'événement d'enregistrement précédent ainsi que toutes les valeurs.
Description	Détails de l'enregistrement d'événement.
Session	Affiche le nom du fichier de session.
Reason	Affiche le motif de la modification apportée au tableau de résultats .
Full User Name	Affiche le nom de l'utilisateur qui a modifié le tableau de résultats .
E-Signature	Indique si les modifications apportées au tableau de résultats ont été acceptées.
Column Settings	Cliquer pour afficher ou masquer des colonnes dans le tableau de résultats .
Synchronized	Sélectionner pour faire défiler les deux tableaux de résultats horizontalement simultanément.
Previous version	Affiche la version précédente du fichier de session sélectionné.
Peak	Cliquer pour afficher le pic de l'échantillon sélectionné.
Cal Curve	Cliquer pour afficher la courbe d'étalonnage de l'échantillon sélectionné.

Effectuer une recherche par mot clé

Les utilisateurs peuvent effectuer une recherche par mot clé qui met en surbrillance chaque occurrence du texte.

1. Ouvrir un tableau de résultats.
2. Cliquez sur **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. Dans le champ **Find**, entrer le mot à rechercher, puis cliquer sur **Go**.

En cas de correspondances, le champ **Find** devient alors vert, le nombre de correspondances est affiché et le mot est mis en surbrillance en jaune. En l'absence de correspondances, le champ **Find** devient rose.

4. Utiliser les boutons **Next** et **Prev** pour passer d'une correspondance à une autre.

Filtrer les événements audités

Les utilisateurs peuvent filtrer les événements audités dans le registre d'audit en fonction d'un ensemble de critères spécifiés.

1. Ouvrir un tableau de résultats.
2. Cliquez sur **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. Cliquez sur **Filter**.

Figure 5-2 Boîte de dialogue Filter Audit Trail Events

Élément	Description
1	Nom du fichier du tableau de résultats . Un fichier du tableau de résultats ou tous les fichiers du tableau de résultats du projet actif peuvent être filtrés.
2	Description : Entrer le type d'événement partiel ou complet. Sample Name : Entrer le nom de l'échantillon partiel ou complet. Full User Name : Entrer le nom partiel ou complet de l'utilisateur. E-Signature : Sélectionner Yes ou No. Reason : Entrer le motif partiel ou complet.
3	is : Utiliser pour filtrer selon un mot ou une expression spécifique.
4	contains : Utiliser pour filtrer selon un mot ou une expression partiel.
5	Date : Utiliser pour filtrer selon des événements qui se sont produits à une date et une heure spécifiques.

4. Dans la boîte de dialogue **Filter Audit Trail Events**, utiliser les listes pour sélectionner des critères de filtre.

Menu Audit Trail

Remarque : Le champ Results Table ne peut pas être modifié.

5. Cliquer sur **Clear** pour réinitialiser les critères de filtre sur **No filter**.
6. Cliquez sur **OK** pour filtrer les événements.

Conseil ! Pour supprimer le filtre, dans la fenêtre **Audit Trail Viewer**, cliquer sur **Remove Filter**.

Exporter la visionneuse du registre d'audit

1. Ouvrir un tableau de résultats.
2. Cliquer sur **Export**, puis entrer un nom de fichier.

Le fichier est exporté sous la forme d'un fichier texte délimité par des tabulations.

Remarque : Seule la partie des événements enregistrés de l'Audit Trail Viewer est exportée.

Imprimer la visionneuse du registre d'audit

1. Ouvrir un tableau de résultats.
2. Cliquer sur **Print**, puis sélectionner une imprimante.

Les utilisateurs peuvent imprimer un PDF sécurisé à l'aide de pdfFactory.

Remarque : Seule la partie des événements enregistrés de l'Audit Trail Viewer est imprimée.

Gestionnaire du registre d'audit

Le logiciel regroupe les événements de quantification audités dans des registres d'audit. Les registres d'audit sont des fichiers qui stockent des enregistrements des événements audités. Les registres d'audit, associés à des fichiers tels que des fichiers wiff, des méthodes de quantification et des fichiers **Results Table**, constituent des enregistrements électroniques valides pouvant être utilisés à des fins de conformité.

Le logiciel **Audit Trail Manager** conserve tous les événements tels que définis dans la carte d'audit. Le logiciel capture les signatures électroniques et les motifs, notamment l'utilisateur, la date et les détails des modifications. Il enregistre également des informations supplémentaires telles que des commentaires, selon la carte d'audit.

Conseil ! Un fichier de session contient le **tableau de résultats**, une copie de la méthode de quantification, une copie de la carte d'audit à l'heure de création ainsi que le registre d'audit entier pour l'intégralité de la session.

Lorsque le logiciel crée ou modifie un fichier qsession ou qmethod, l'événement est capturé dans le **Project Audit Trail**, dans l'onglet **History** du logiciel Analyst[®] MD. Les événements suivants sont capturés :

- Un fichier de méthode de quantification a été créé.
- Un fichier de méthode de quantification a été modifié.
- Un **tableau de résultats** de quantification a été créé.
- Un **tableau de résultats** de quantification a été modifié.

Si **E-signature** ou **Reason Prompt** est sélectionné pour la création ou la modification du fichier de méthode de quantification, la boîte de dialogue **Audit Trail** générée par le logiciel Analyst[®] MD s'ouvre alors dans le logiciel MultiQuant[™] MD.

Tableau 5-2 Registres d'audit

Registre d'audit	Exemples d'événements enregistrés
Registre d'audit de quantification (un par tableau de résultats)	Modifications apportées : <ul style="list-style-type: none"> • Création et modification de fichiers de session • Informations sur les échantillons • Paramètres d'intégration des pics

À propos des cartes d'audit

Le logiciel MultiQuant[™] MD conserve l'historique de toutes les modifications apportées aux informations des paramètres de traitement associées aux résultats de quantification. Le logiciel audite tous les événements en fonction de la carte d'audit active du projet et capture toutes les signatures électroniques et tous les liens dans les dossiers respectifs.

Créer une carte d'audit

Le logiciel installe plusieurs cartes d'audit. Afficher les cartes d'audit pour décider si la modification d'une ou de plusieurs d'entre elles serait plus facile que d'en créer une complètement nouvelle. La création ou la modification de cartes d'audit constitue un événement audité dans le registre d'audit du projet du logiciel Analyst[®] MD.

ATTENTION : Si deux utilisateurs modifient la même carte d'audit en même temps, seules les modifications effectuées par l'utilisateur qui a enregistré le fichier en dernier sont alors utilisées.

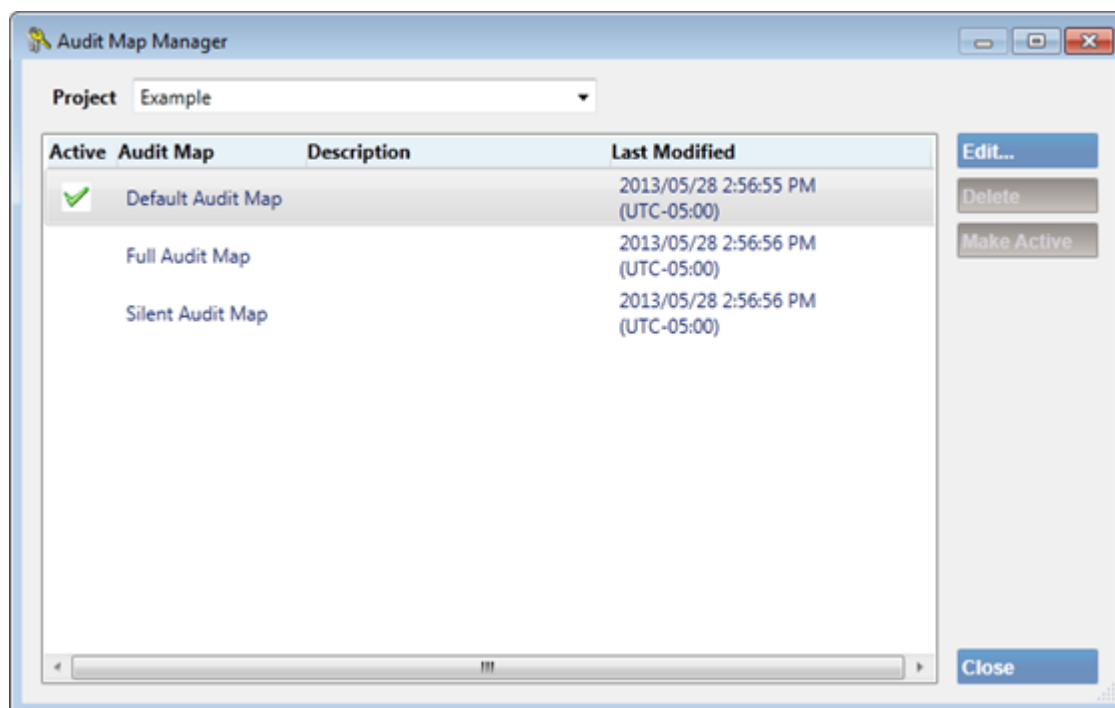
La carte d'audit active pour le projet détermine quels événements sont enregistrés dans le registre d'audit pour n'importe quel **tableau de résultats** créé.

Remarque : Une fois qu'un **tableau de résultats** a été enregistré, la carte d'audit active est enregistrée avec le **tableau de résultats** et elle ne peut pas être modifiée.

Menu Audit Trail

1. Cliquer sur **Audit Trail** > **Audit Map Manager**.

Figure 5-3 Audit Map Manager



Étiquette	Description
Project	Sélectionner un projet dans la liste.
Edit	Cliquer pour modifier la carte d'audit active.
Delete	Cliquer pour supprimer la carte d'audit sélectionnée.

2. Dans la liste **Project**, sélectionner un projet pour lequel l'utilisateur souhaite créer une carte d'audit.
3. Sélectionner une carte d'audit, puis cliquer sur **Edit**.

Figure 5-4 Audit Map Editor

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

Étiquette	Description
Description	Entrer une description de la carte d'audit.
Check	Cliquer pour cocher une case.
Uncheck	Cliquer pour décocher la case.
Add Predefined Reasons	Cliquer pour ajouter un motif prédéfini à la liste.

4. Entrer une description de la carte d'audit dans le champ **Description** si besoin est.
5. Dans le tableau **Audit Map**, configurer chaque événement comme suit :
 - Pour auditer l'événement, cocher la case dans la colonne **Audited**.

Conseil ! Pour renseigner des cellules consécutives d'une colonne avec la valeur de la case à cocher, appuyer sur **Ctrl** ou sur **Maj**, cliquer sur les cellules, puis cliquer sur **Check**.

Menu Audit Trail

- Pour que les opérateurs entrent un motif personnalisé ou choisissent un motif prédéfini, cocher la case dans la colonne **Reason Prompt**.
- Pour que les opérateurs sélectionnent uniquement un motif prédéfini pour la modification lorsque l'événement se produit, cocher les cases dans les colonnes **Reason Prompt** et **Predefined Reasons Only**. Dans les colonnes **Predefined Reason_**, sélectionner jusqu'à dix motifs.

Conseil ! Pour ajouter un motif prédéfini, cliquer sur **Add Predefined Reasons**.

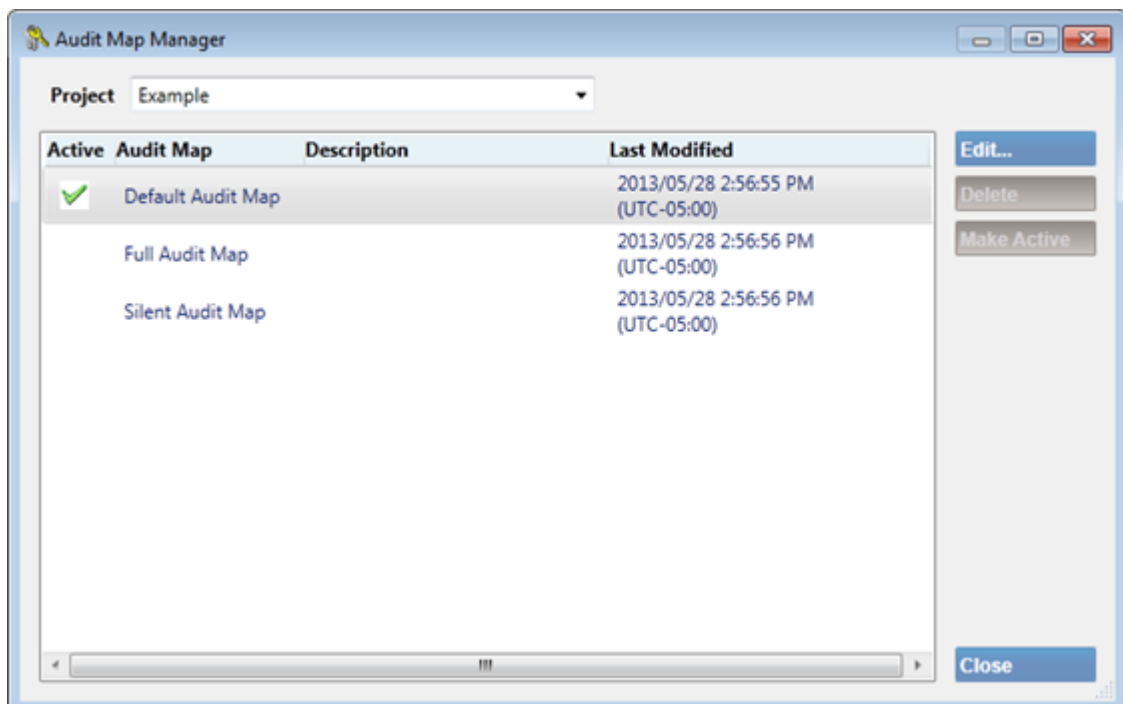
- Pour demander des signatures électroniques pour l'événement, cocher la case dans la colonne **E-Sig**.
6. Cliquer sur **Save As**, puis entrer un nom dans la boîte de dialogue **Save Audit Map As**.
 7. Cliquer sur **Save**.
 8. Cliquer sur **Close** dans la boîte de dialogue **Audit Map Editor**.
 9. Cliquer sur **Make Active**.

Lorsqu'une carte d'audit est appliquée, elle devient la carte d'audit active. La configuration de l'audit dans la carte d'audit active détermine quels événements sont enregistrés dans les registres d'audit à partir de ce moment.

Modifier la carte d'audit

1. Cliquer sur **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Figure 5-5 Audit Map Manager



Étiquette	Description
Project	Sélectionner un projet dans la liste.
Edit	Cliquer pour modifier la carte d'audit active.
Delete	Cliquer pour supprimer la carte d'audit sélectionnée.

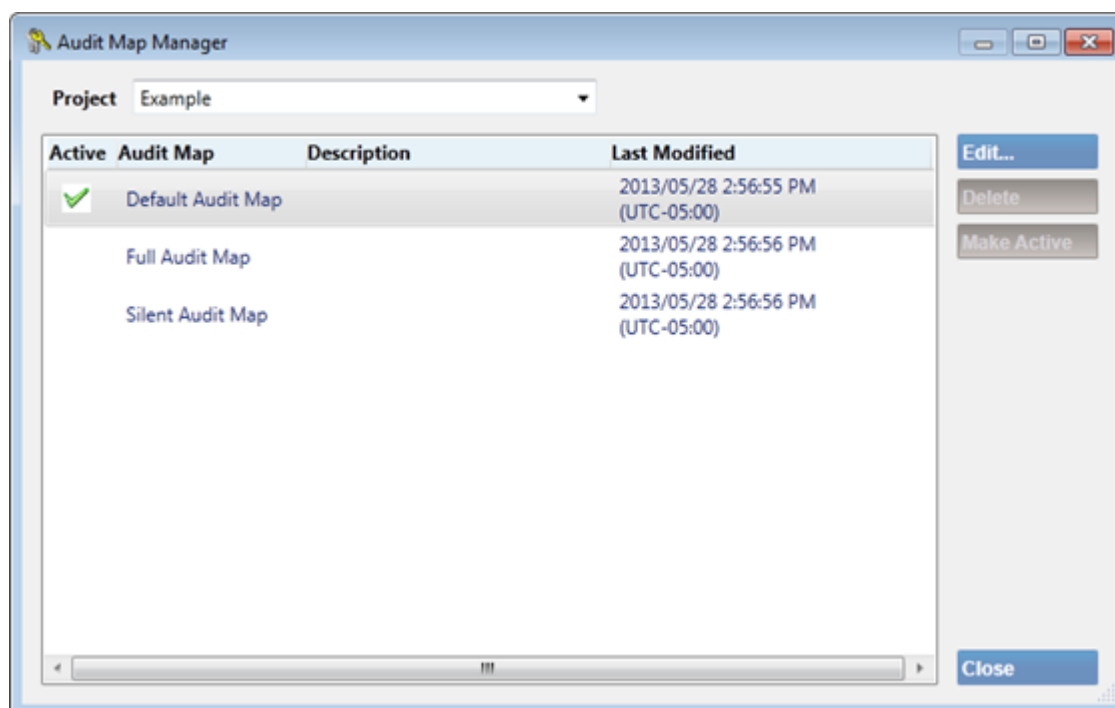
2. Dans la liste **Project**, sélectionner un projet pour lequel modifier la carte d'audit.
3. Sélectionner une autre carte, puis cliquer sur **Make Active**.
4. Cliquer sur **Close**.

Éditer la carte d'audit

Les événements d'audit suivants sont systématiquement enregistrés et ne sont par conséquent pas affichés dans l'**Audit Map Editor** : Print Report, Export Results Table et Transfer to LIMS.

1. Cliquer sur **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Figure 5-6 Audit Map Manager



Menu Audit Trail

Étiquette	Description
Project	Sélectionner un projet dans la liste.
Edit	Cliquer pour modifier la carte d'audit active.
Delete	Cliquer pour supprimer la carte d'audit sélectionnée.

- Sélectionner une carte d'audit, puis cliquer sur **Edit**.

Figure 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

Étiquette	Description
Description	Entrer une description de la carte d'audit.
Check	Cliquer pour cocher une case.
Uncheck	Cliquer pour décocher la case.
Add Predefined Reasons	Cliquer pour ajouter un motif prédéfini à la liste.

- Entrer une description de la carte d'audit dans le champ **Description** si besoin est.

4. Dans le tableau **Audit Map**, configurer chaque événement comme suit :

- Pour auditer l'événement, cocher la case dans la colonne **Audited**.

Conseil ! Pour renseigner des cellules consécutives d'une colonne avec la valeur de la case à cocher, appuyer sur **Ctrl** ou sur **Maj**, cliquer sur les cellules, puis cliquer sur **Check**.

- Pour que les opérateurs entrent un motif personnalisé ou choisissent un motif prédéfini, cocher la case dans la colonne **Reason Prompt**.
- Pour que les opérateurs sélectionnent uniquement un motif prédéfini pour la modification lorsque l'événement se produit, cocher les cases dans les colonnes **Reason Prompt** et **Predefined Reasons Only**. Dans les colonnes **Predefined Reason_**, sélectionner jusqu'à dix motifs.

Conseil ! Pour ajouter un motif prédéfini, cliquer sur **Add Predefined Reasons**.

- Pour demander des signatures électroniques pour l'événement, cocher la case dans la colonne **E-Sig**.

5. Cliquer sur **Save**.

6. Cliquer sur **Make Active**.

Lorsqu'une carte d'audit est appliquée, elle devient la carte d'audit active. La configuration de l'audit dans la carte d'audit active détermine quels événements sont enregistrés dans les registres d'audit à partir de ce moment.

Afficher la configuration de l'audit intégrée

La configuration de l'audit utilisée pour un tableau de résultats est intégrée dans le fichier Results Table lors de la création de ce dernier. Cette configuration ne peut pas être modifiée. L'estampille temporelle affichée à côté du nom de la carte d'audit indique à quel moment la carte d'audit utilisée pour intégrer la configuration a été enregistrée pour la dernière fois.

1. Ouvrir un tableau de résultats.
2. Cliquer sur **Audit Trail > View Session Audit Map**.

Figure 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

À l'exception de l'élément **About**, ce menu contient les éléments répertoriés dans le [Tableau 6-1](#). Ces fichiers sont automatiquement installés et ils se situent également dans le dossier <lecteur>:\Program Files\AB SCIEX\MultiQuant 3\Help.

Les documents ou les dossiers (ou les raccourcis qui y mènent) peuvent être copiés dans ce dossier Help pour qu'ils apparaissent automatiquement dans le menu.

Tableau 6-1 Menu Help

Élément de menu	Description
Install License	Cliquer pour ouvrir la boîte de dialogue MultiQuant™ MD Activation.
Verify Installation	Cliquer pour vérifier les fichiers et l'installation.
Software Reference Guide	Décrit les fonctions et la fonctionnalité du logiciel.
Software Release Notes	Fournit des informations à propos du logiciel ainsi que les procédures d'installation du logiciel.
About	Affiche la version du programme, les droits d'auteur et d'autres informations sur le programme ainsi que des informations sur les fonctions de la licence qui sont installées.

Tableaux de résultats

7

Un **tableau de résultats** constitue le point de départ d'un examen et d'une exportation de données. Utiliser l'assistant **New Results Table** ou cliquer sur **File > New Results Table** pour créer un tableau de résultats. Voir [Boîtes de dialogue Results Table à la page 42](#).

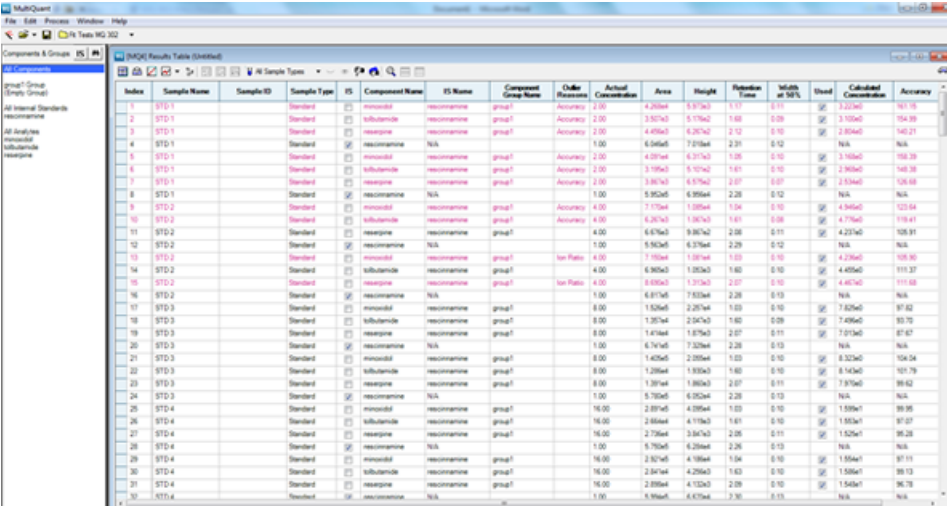
Remarque : Les colonnes **Sample Name** et **Sample ID** ne peuvent pas contenir les caractères \ / : * ? " < > | =.

La configuration d'audit utilisée pour un **tableau de résultats** est intégrée dans le fichier **Results Table** lors de la création du tableau. Cette configuration ne peut pas être modifiée. L'estampille temporelle affichée à côté du nom de la carte d'audit indique à quel moment la carte d'audit est utilisée pour intégrer la configuration enregistrée en dernier.

Remarque : Lors du déplacement de données, déplacer le projet entier pour conserver la structure des fichiers. Si la structure des fichiers et des dossiers n'est pas conservée, l'utilisateur ne pourra pas afficher un **tableau de résultats** ou des chromatogrammes.

Chaque composant dispose d'une ligne distincte pour chacun des échantillons initialement sélectionnés.

Figure 7-1 Exemple de tableau de résultats



Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Outer Precision	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	2.00	4.269e6	5.973e3	1.11	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	3.223e6	161.76
2	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	2.00	3.917e3	5.179e2	1.60	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	3.105e6	154.89
3	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	2.00	4.498e3	6.357e2	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.892e6	142.31
4	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	N/A		Accuracy	1.00	6.585e5	7.919e4	2.31	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	2.00	4.391e6	6.317e3	1.08	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.168e6	158.39
6	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	2.00	3.109e3	5.104e2	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.905e6	148.38
7	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	2.00	3.981e3	5.179e2	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	3.154e6	158.68
8	910-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	N/A		Accuracy	1.00	5.952e5	6.958e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	4.00	7.175e6	1.085e4	1.54	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.945e6	123.64
10	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	4.00	4.267e3	1.367e3	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.715e6	119.41
11	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	4.00	6.679e3	9.957e2	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.231e6	109.91
12	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	N/A		Accuracy	1.00	5.962e5	6.979e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Ion Ratio	4.00	7.165e6	1.081e4	1.53	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.235e6	109.80
14	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Ion Ratio	4.00	6.905e3	1.052e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.405e6	111.37
15	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Ion Ratio	4.00	6.690e3	1.015e3	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.407e6	111.68
16	910-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	N/A		Accuracy	1.00	6.817e5	7.932e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	8.00	1.529e5	2.207e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.629e6	97.82
18	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	8.00	1.381e4	2.347e3	1.60	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	7.498e6	93.70
19	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	8.00	1.414e4	1.875e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.013e6	87.67
20	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	N/A		Accuracy	1.00	6.719e5	7.329e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	8.00	1.408e5	2.205e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.322e6	104.34
22	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	8.00	1.288e4	1.838e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.143e6	101.79
23	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	8.00	1.391e4	1.860e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.919e6	98.62
24	910-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	N/A		Accuracy	1.00	5.785e5	6.952e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	16.00	2.891e5	4.098e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.999e7	99.89
26	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	16.00	2.668e4	4.176e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.999e7	97.07
27	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	16.00	2.778e4	3.947e3	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.925e7	95.28
28	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	N/A		Accuracy	1.00	5.785e5	6.952e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	16.00	2.927e5	4.188e4	1.54	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.999e7	97.11
30	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	16.00	2.947e4	4.292e3	1.62	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.999e7	99.13
31	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	reconnaissance	group1	Accuracy	16.00	2.888e4	4.152e3	2.08	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.948e7	98.78
32	910-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	reconnaissance	N/A		Accuracy	1.00	5.996e5	6.979e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

- Les colonnes **IS**, **Component Name** et **IS Name** contiennent des informations sur les analytes.
- La case à cocher sélectionnée indique l'étalon interne pour l'échantillon.
- Sélectionner les colonnes qui seront affichées dans le **tableau de résultats** au moyen de la boîte de dialogue **Column Settings**. Voir [Paramètres de colonne à la page 40](#).

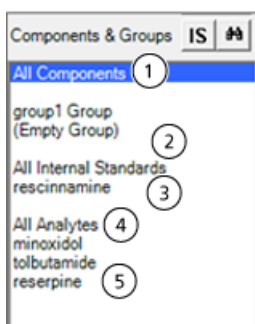
- Modifier la largeur des colonnes en faisant glisser la ligne séparant les en-têtes de deux colonnes. Cette information est automatiquement enregistrée et est appliquée quand l'utilisateur ouvre des **tableaux de résultats** précédemment enregistrés.
- Modifier l'ordre des colonnes en cliquant sur un en-tête de colonne, puis en le faisant glisser vers un nouvel emplacement. Cette information est automatiquement enregistrée et est appliquée quand l'utilisateur ouvre des **tableaux de résultats** précédemment enregistrés.
- Les utilisateurs peuvent limiter le tableau de résultats afin qu'il ne montre que les lignes correspondant à des analytes ou des étalons internes spécifiques. Utiliser la barre d'outils pour limiter les types d'échantillon qui sont affichés. Voir [Liste Components & Groups à la page 37](#) et [Filtrer le type d'échantillon à la page 41](#).
- Certaines opérations, comme la synchronisation avec le volet **Peak Review**, sont appliquées aux lignes actuellement sélectionnées. Sélectionner les lignes en cliquant à gauche de la première colonne.

Liste Components & Groups

Lorsqu'un **tableau de résultats** est ouvert, une liste des composants et des groupes actuels est affichée sur le côté gauche de la fenêtre principale. Utiliser cette liste pour modifier les composants visibles dans le **tableau de résultats** ainsi que dans le volet **Peak Review** ou le tracé **Calibration** lié.

Les composants sont définis par une transition simple ou une plage de masses. Un groupe est défini par le nom du groupe auquel appartient le composant.

Figure 7-2 Liste Components & Groups



Élément	Étiquette	Description
1	All Components	Cliquer pour afficher tous les analytes et étalons internes disponibles dans le tableau de résultats ainsi que dans le volet Peak Review et le tracé Calibration associés s'ils sont affichés.
2	All Internal Standards	Cliquer pour afficher tous les étalons internes et pour masquer tous les analytes. Cet élément n'est pas présent si aucun étalon interne n'est défini.

Tableaux de résultats

Élément	Étiquette	Description
3	Specific Internal Standards	Le nom de chaque étalon interne distinct est inclus dans la liste. Cliquer sur l'un de ces éléments pour afficher cet étalon interne et masquer tous les autres composants.
4	All Analytes	Cliquer pour afficher tous les analytes et masquer tous les étalons internes. Cet élément n'est pas inclus si aucun étalon interne n'est défini.
5	Specific Analytes	Le nom de chaque analyte distinct est inclus dans la liste. Cliquer sur l'un de ces éléments pour afficher cet analyte et masquer tous les autres composants.

Cliquer sur l'un des éléments de la liste pour afficher uniquement les composants de cet élément. Appuyer sur **Maj** ou sur **Ctrl** pour sélectionner plusieurs éléments. Cela peut s'avérer utile pour afficher, par exemple, deux analytes spécifiques uniquement. Utiliser les flèches vers le haut et vers le bas quand la liste est active pour se déplacer parmi les éléments.

Conseil ! Il est possible d'élargir ou de rétrécir la liste en faisant glisser le bord droit du volet vers la gauche ou vers la droite.

L'ordre réel des lignes dans le tableau de résultats n'est pas affecté par le filtrage. Le tableau de résultats est prédéfini pour être ordonné d'abord par échantillon, puis par composant dans l'ordre indiqué dans la méthode de quantification. Le tableau peut toutefois être également trié dans un ordre spécifique, comme décrit dans [Icônes du logiciel à la page 156](#).

Menu accessible par clic droit dans Results Table

Cliquer avec le bouton droit dans le tableau de résultats pour accéder à un menu contextuel. Les commandes suivantes sont disponibles.

Tableau 7-1 Options du menu contextuel Results Table

Option de menu	Description
Column Settings	Utiliser cette commande pour modifier les colonnes du tableau de résultats . Les modifications sont appliquées uniquement au tableau de résultats actuel, sauf si elles sont enregistrées comme paramètre par défaut du projet.
Add Custom Column	Ajoute une nouvelle colonne modifiable au tableau. Renseignez la colonne en entrant des valeurs directement dans les cellules ou en collant un contenu. Un texte peut être saisi, par exemple des commentaires ou les résultats de calculs personnalisés.
Rename Custom Column	Renomme une colonne personnalisée existante. Avant d'utiliser cette commande, cliquer sur l'en-tête personnalisé pour sélectionner la colonne personnalisée.

Tableau 7-1 Options du menu contextuel Results Table (Suite)

Option de menu	Description
Remove Custom Column	Utiliser pour supprimer une colonne personnalisée existante. Avant d'utiliser cette commande, cliquer sur l'en-tête de colonne pour sélectionner la colonne personnalisée.
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	Fournit un raccourci pour définir le champ Actual Concentration pour tous les analytes pour les échantillons de type Standard s'il y a plus d'un analyte et si tous les analytes sont présents dans ces échantillons à la même concentration. Voir Appliquer les concentrations réelles de l'analyte actuel à tous à la page 39 .
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	Similaire à Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All à l'exception du fait qu'elle s'applique aux étalons internes plutôt qu'aux analytes.
Set 'Used'	Utiliser cette commande pour réaliser une quantification absolue afin de déterminer si un échantillon Standard spécifique doit être utilisé dans le calcul de la courbe d'étalonnage pour un analyte donné. Les deux premiers éléments servent à sélectionner ou à effacer le champ Used pour les lignes actuellement sélectionnées dans le tableau de résultats . Les troisième et quatrième éléments sont similaires à l'exception du fait que l'opération s'applique à tous les analytes pour tous les échantillons correspondant à une ligne sélectionnée.
Set Peaks to 'Not Found' for Selected Rows	Utiliser cette commande pour effacer l'intégration du pic pour les lignes actuellement sélectionnées.

Appliquer les concentrations réelles de l'analyte actuel à tous

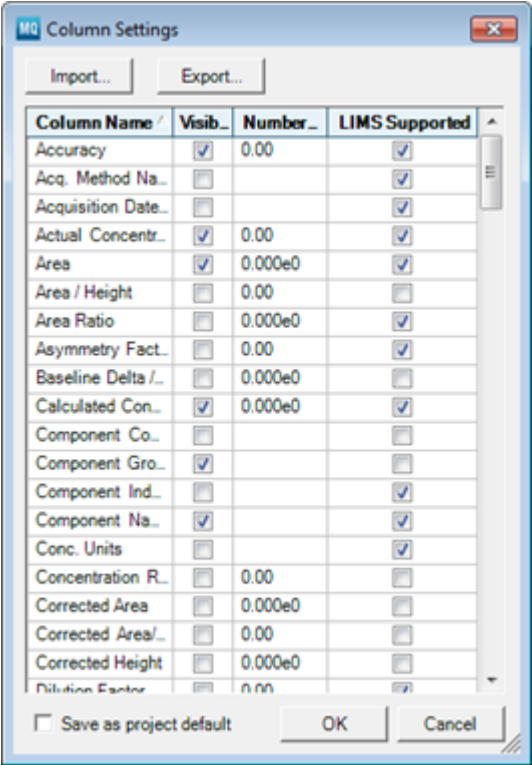
1. Utiliser la [Liste Components & Groups à la page 37](#) pour limiter le tableau à l'affichage d'un seul analyte spécifique.
2. En option, utiliser le **filtre du type d'échantillon** pour afficher uniquement les échantillons **Standard**. Voir [Filtrer le type d'échantillon à la page 41](#).
3. Spécifier les concentrations réelles de l'analyte soit en tapant directement dans les cellules, soit en sélectionnant la colonne, puis en sélectionnant **Paste** si les concentrations sont disponibles ailleurs sous un format texte.
4. Cliquer sur **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All**.
5. Revenez à l'affichage de tous les composants et de tous les types d'échantillons si nécessaire.

Paramètres de colonne

Si les noms des colonnes sont tronqués, déplacer alors le curseur sur le champ pour afficher le nom de la colonne dans une infobulle.

Pour les champs numériques, utiliser le format 0.00 pour les notations non scientifiques et le format 0.00e0 pour les notations scientifiques. Modifier les points décimaux pour indiquer la précision des nombres présentés. Seul un point (.) peut être utilisé comme séparateur décimal. Les regroupements de chiffres ne sont pas pris en charge.

Figure 7-3 Boîte de dialogue Column Settings



Champ	Description
Import	Cliquer pour sélectionner un fichier de paramètres de colonne précédemment enregistré à l'aide de la commande Export . Les champs de la boîte de dialogue sont mis à jour pour utiliser les informations provenant du fichier sélectionné.
Export	Cliquez pour enregistrer les paramètres de la boîte de dialogue en cours dans un fichier. Cela permet à l'utilisateur de basculer entre les différents paramètres de colonne.
Column Name	Affiche le nom des colonnes dans l'ordre alphabétique. Voir Colonnes du tableau de résultats à la page 53 .
Visible	Sélectionner pour rendre la colonne visible. Sinon, la colonne est masquée.

Champ	Description
Number Format	Pour les champs numériques, utiliser le format 0.00 pour les notations non scientifiques et le format 0.00e0 pour les notations scientifiques. Pour la précision affichée, modifier les points décimaux.
LIMS Supported	Les lignes pour lesquelles LIMS Supported est sélectionné sont prédéfinies par le LIMS et les sélections de colonnes ne peuvent pas être modifiées.
Save as project default	Sélectionner pour utiliser les paramètres de colonne dans les tableaux de résultats futurs.

Filtrer le type d'échantillon

Tableau 7-2 Description des filtres des types d'échantillon

Type de filtre	Description
All Sample Types	Affiche tous les types d'échantillons
Unknowns	Affiche uniquement les échantillons inconnus, qui sont des échantillons normaux de concentration inconnue. Lorsque des échantillons standard sont utilisés, leur concentration est rétrocalculée à partir de la courbe d'étalonnage et rapportée dans le tableau de résultats en tant que Concentration calculée. Voir Équations de régression à la page 127 .
Standards	Affiche uniquement les échantillons de concentration connue. Ces échantillons sont utilisés pour la création de la courbe d'étalonnage.
Quality Controls	Affiche uniquement les échantillons de contrôle qualité. Ces échantillons de concentration connue sont utilisés pour vérifier la précision de la courbe d'étalonnage, mais ils n'ont pas d'influence sur sa construction réelle.
Standards & QCs	Affiche les échantillons Standard et Quality Control.
Unknowns, Standards & QCs	Affiche les échantillons Unknown, Standard et Quality Control.
Blanks	Affiche uniquement les échantillons témoins. Ce sont en général des échantillons qui contiennent les composés des étalons internes, s'ils sont utilisés, mais pas d'analytes, et qui ont suivi la procédure de préparation des échantillons normaux. Ces échantillons ne sont pas utilisés pour la construction de la courbe d'étalonnage. Pour les inclure, sélectionner le type d'échantillon Standard, puis définir la concentration réelle sur 0.
Double Blanks	Affiche uniquement les échantillons témoins doubles. Ce sont des échantillons qui ne contiennent ni étalon interne, ni analyte.

Tableau 7-2 Description des filtres des types d'échantillon (Suite)

Type de filtre	Description
Solvents	Affiche uniquement les échantillons de solvant. Il s'agit de témoins doubles n'ayant pas suivi la procédure de préparation normale des échantillons.
Blanks, Double Blanks & Solvents	Affiche tous les types d'échantillons témoins : Blank, Double Blank et Solvent.

Afficher les lignes masquées

Dans le **tableau de résultats**, pour un composant donné, les lignes sont uniquement visibles pour les échantillons pour lesquels la transition MRM correspondante est disponible. Les lignes inutilisées des composants comportant des transitions non disponibles pour un échantillon donné sont présentes dans le tableau, mais elles sont masquées par défaut.

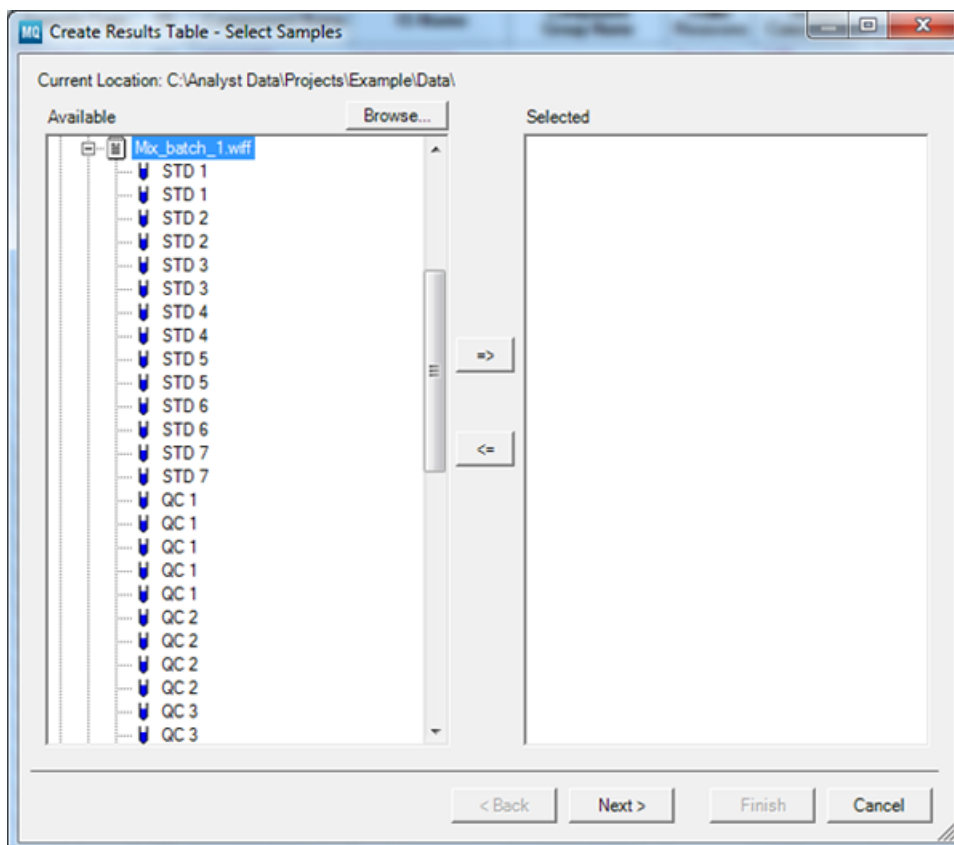
1. Afficher la colonne **Peak Comment** dans le **tableau de résultats**, si elle n'est pas déjà visible.
2. Trier le tableau en utilisant cette colonne.
3. Sélectionner les lignes (maintenant voisines) comportant le commentaire **Not Present**.
4. Cliquer sur l'icône **Hide selected rows(s)**. Voir [Icônes du logiciel à la page 156](#).

Boîtes de dialogue Results Table

Sélectionner les échantillons

Sélectionner les échantillons à partir des fichiers wiff à traiter.

Figure 7-4 Page Create Results Table - Select Samples

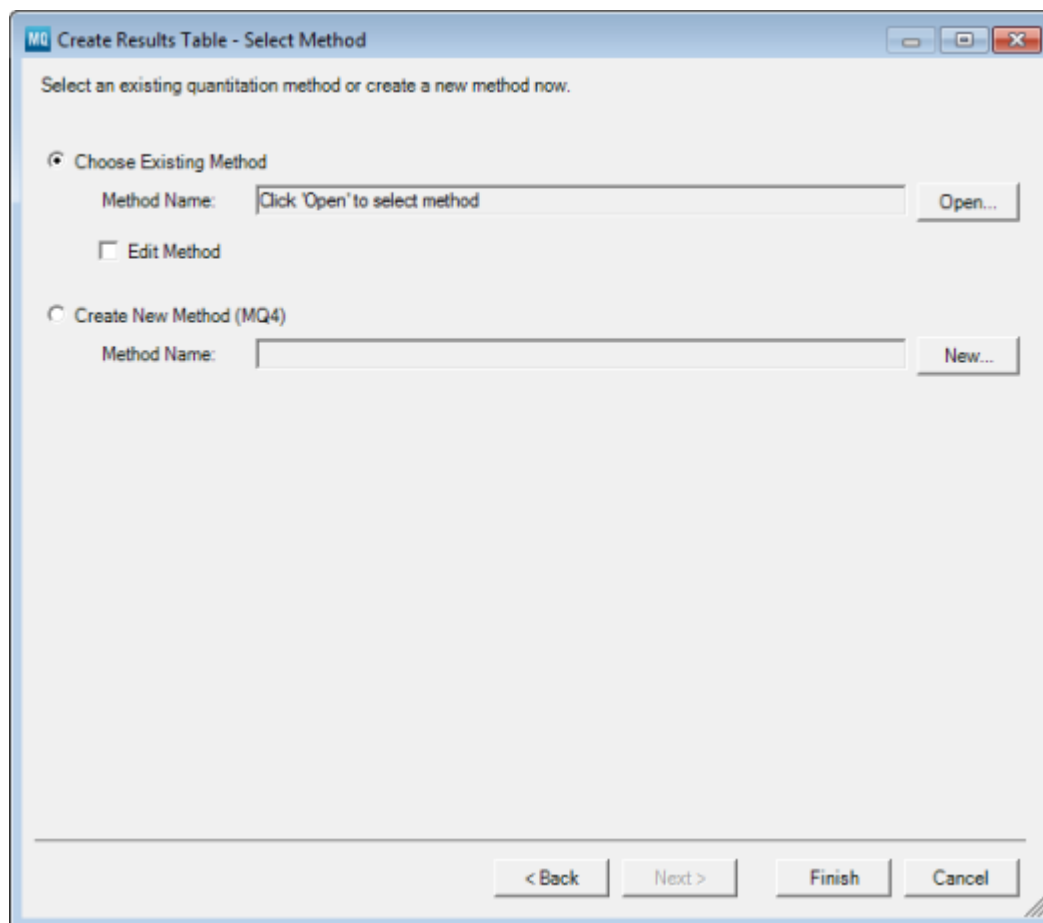


- Le volet **Available** comprend les sous-dossiers, les fichiers wiff et les échantillons disponibles dans le dossier **Data** pour le dossier sélectionné.
- Développer les dossiers individuels pour afficher les sous-dossiers ou les fichiers wiff. Si le fichier wiff est développé, il s'ouvre pour présenter les échantillons disponibles.
- Utiliser les flèches pour ajouter ou supprimer des échantillons.
- Sélectionner des échantillons en double-cliquant sur un échantillon individuel, en sélectionnant un échantillon ou un fichier de données, puis en cliquant sur le bouton => ou en faisant glisser un échantillon ou un fichier de données du volet gauche vers le volet droit. Appuyer sur **Maj** ou sur **Ctrl** pour sélectionner plusieurs fichiers ou échantillons avant de les déplacer.

Sélectionner la méthode

Sélectionner la méthode de quantification. Si une méthode existante est sélectionnée mais non modifiée, une barre de progression s'affiche alors pendant le traitement des échantillons sélectionnés. À la fin de ce processus, un **tableau de résultats** est créé.

Figure 7-5 Page Create Results Table - Select Method



Étiquette	Description
Choose Existing Method	Cliquer sur Open pour sélectionner une méthode de quantification existante.
Edit Method	Sélectionner cette commande pour modifier une méthode existante. Les pages suivantes de l'assistant contiennent des informations provenant de la méthode existante qui peuvent être modifiées selon les besoins.
Create New Method	Cliquer sur New pour créer une méthode de quantification. L'algorithme entre parenthèses correspond à l'algorithme sélectionné dans la boîte de dialogue Integration Defaults .

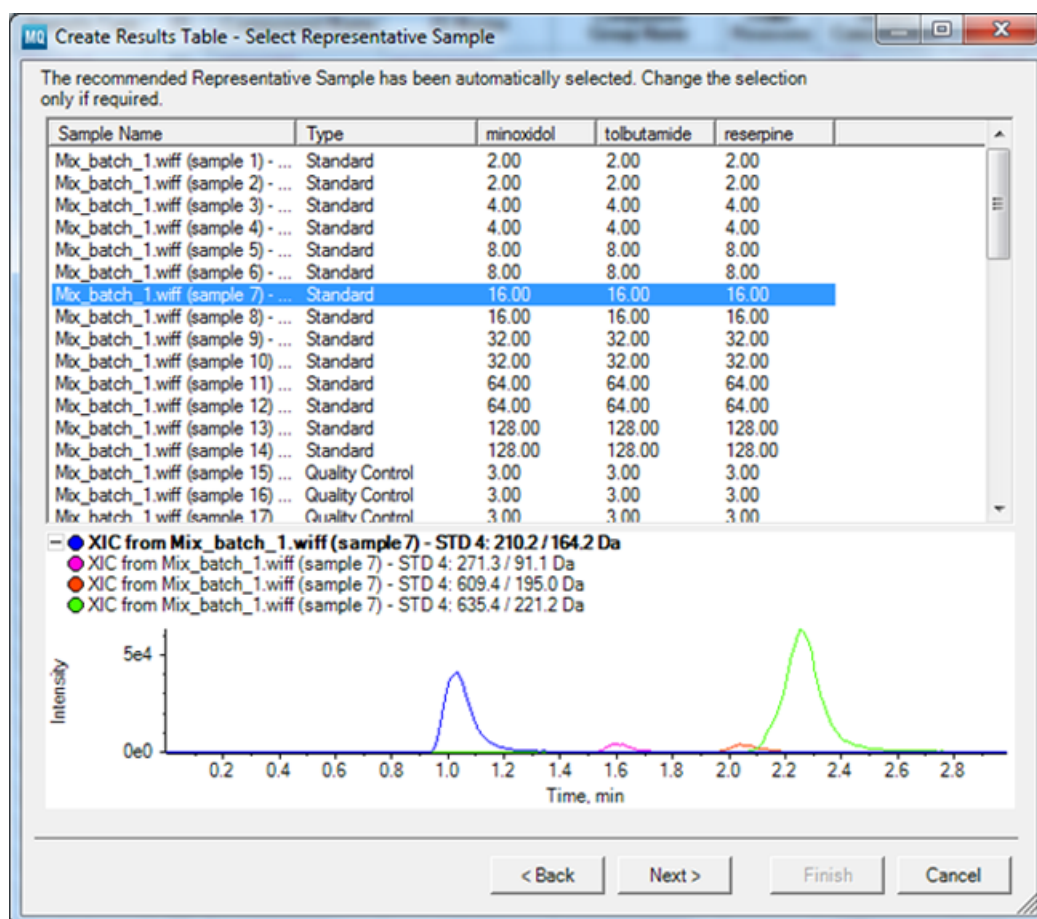
Sélectionner un échantillon représentatif

La page **Select Representative Sample** affiche l'échantillon représentatif sélectionné pour lequel des chromatogrammes sont affichés lors de la définition visuelle des paramètres de recherche et d'intégration de pic. Cet échantillon doit contenir tous les composés qui seront inclus dans la méthode de quantification.

Si les types d'échantillon et les concentrations d'analyte ont été sélectionnés à l'aide de Batch Editor, dans le logiciel Analyst[®] MD, avant l'acquisition des échantillons, ces informations sont alors affichées comme colonnes supplémentaires.

Le logiciel sélectionne un échantillon par défaut. Si l'échantillon sélectionné n'est pas approprié, sélectionner alors un autre échantillon représentatif. Si l'algorithme SignalFinder[™] est sélectionné, dans le but d'éviter de générer un modèle d'intégration incorrect, aucun échantillon représentatif n'est recommandé par le logiciel si le niveau TIC est supérieur à 1.0e6 dans tous les échantillons. Les utilisateurs peuvent sélectionner un échantillon représentatif manuellement dans ce scénario.

Figure 7-6 Page Create Results Table - Select Representative Sample



Définir les composants

La page **Define Components** contient une ligne pour chaque analyte ou étalon interne. Sélectionner les noms des analytes et des étalons internes, s'ils sont utilisés. Voir [Menu accessible par clic droit dans Define Components à la page 47](#).

Figure 7-7 Page Create Results Table - Define Components

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

Experiment: **MRM (4 transitions)**

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

< Back Next > Finish Cancel

Étiquette	Description
Experiment	Sélectionner une expérience à traiter dans la liste. Pour des données de périodes ou d'expériences multiples, sélectionner chacune des expériences devant être traitées, puis renseigner le tableau avec les composants de l'expérience correspondante.
Row	Contient le numéro de ligne actuel.
IS	Indique si le composant défini pour la ligne est un analyte (non sélectionné) ou un étalon interne (sélectionné).
Name	Contient le nom du composant. Pour les expériences MRM, le nom est automatiquement renseigné à l'aide des masses de transition Q1/Q3 . Pour un nom plus spécifique, entrer un nom dans le champ.
Group	Contient le nom du groupe auquel appartient le composant de la ligne. Si des analytes ou des étalons internes liés entre eux sont placés dans le même groupe, ils peuvent alors être examinés et manipulés ensemble plus facilement. Cela est valable pour les entités ayant le même temps de rétention, par exemple des transitions MRM différentes pour le même composé. Entrer les noms des groupes ou les renseigner automatiquement. Voir Menu accessible par clic droit dans Define Components à la page 47 .

Étiquette	Description
IS Name	Contient le nom de l'étalon interne en option qui doit être utilisé pour l'analyte défini pour la ligne. Ce champ ne s'applique pas aux étalons internes.
Mass Info	<p>Pour les expériences MRM, cette colonne est intitulée Q1/Q3 et contient la paire de masses du composant défini pour la ligne. Sélectionner la transition requise dans la liste qui comprend toutes les transitions disponibles pour l'expérience. En règle générale, la colonne est automatiquement initialisée avec les transitions disponibles.</p> <p>Pour les expériences de profil (balayage), cette colonne est intitulée Start - Stop et contient la gamme de masses servant à calculer un XIC (chromatogramme à échange d'ions) pour le composant défini pour la ligne. Entrer la gamme de masses en séparant les deux masses par un trait d'union. Par exemple, 200-201 ou 200-1. Pour la dernière option, la gamme de masses est 199.5-200.5.</p>

Menu accessible par clic droit dans Define Components

Cliquer avec le bouton droit dans la page **Define Components** pour accéder à un menu contextuel. Les commandes suivantes sont disponibles.

Tableau 7-3 Options du menu contextuel Define Components

Option de menu	Description
Clear	Efface le contenu des lignes ou colonnes sélectionnées. Pour sélectionner les lignes, cliquer ou faire glisser dans la zone se trouvant avant les numéros de ligne.
Copy	Copie les lignes ou colonnes sélectionnées dans le presse-papiers.
Paste	Colle le contenu du presse-papiers.
Find Component by Name	<p>Permet de sélectionner le composant dont le nom correspond au texte. Le texte exact n'est pas nécessaire pour trouver une correspondance. Cela permet de sélectionner un composant spécifique s'il y en a beaucoup.</p> <p>Si aucune ligne n'est sélectionnée comme ligne initiale dans le tableur, la recherche commence à la première ligne ; dans le cas contraire, la recherche débute à la ligne suivant celle qui est sélectionnée et revient ensuite au début. Utile s'il existe plusieurs composants dont le nom contient le texte. Si la première recherche ne permet pas de trouver le composant, renouveler la recherche en laissant le premier composant sélectionné, afin de trouver une autre correspondance dans le tableau.</p>
Insert Row Above	Insère une ligne vide juste au-dessus de la ligne actuellement sélectionnée.
Delete Selected Rows	Supprime du tableau les lignes actuellement sélectionnées.
Sum Multiple Ions	Additionne les chromatogrammes de plusieurs transitions MRM ou les gammes de masse de balayages complets. Une fois la commande sélectionnée, d'autres colonnes de masse sont ajoutées au tableau Components . Les masses sélectionnées pour une ligne donnée sont utilisées dans la structure du XIC additionné pour l'analyte ou l'étalon interne correspondant. Il est recommandé de toujours sélectionner cette fonction.

Tableau 7-3 Options du menu contextuel Define Components (Suite)

Option de menu	Description
Groups	Voir Sous-menu Groups à la page 84 .
Internal Standards	Voir Sous-menu Internal Standards à la page 86 .

Définir l'intégration

Sélectionner le temps de rétention attendu et d'autres paramètres de recherche de pic pour chacun des composants.

La liste de gauche affiche une entrée pour chaque composant défini dans la page précédente de l'assistant. Cliquer sur une ligne spécifique pour afficher le chromatogramme correspondant et l'intégration actuelle pour l'échantillon représentatif. Faire défiler la liste en utilisant les touches fléchées haut et bas ou la molette de défilement. En général, il est recommandé d'examiner tous les composants pour contrôler la justesse de l'intégration. Toutefois, si les composants sont nombreux, utiliser alors la commande **Highlight Components with Uncertain RT** pour limiter le nombre de composants à examiner.

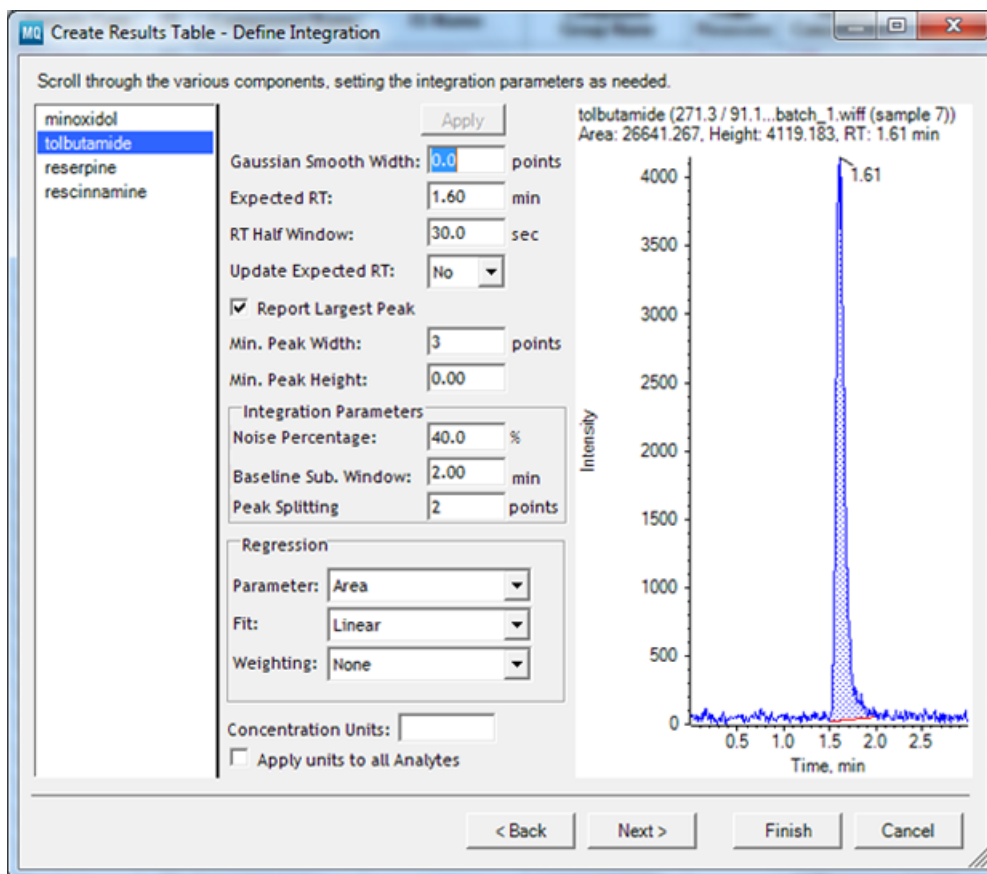
Remarque : S'il y a plus que quelques composants, s'assurer alors que les paramètres de recherche de pic sont définis sur des valeurs par défaut raisonnables avant d'exécuter l'assistant pour éviter d'ajuster les paramètres pour chaque composant.

Cliquer avec le bouton droit dans la page pour afficher les commandes disponibles. Voir [Menu accessible par clic droit dans Define Integration à la page 50](#).

Dans le groupe **Regression**, modifier les options d'étalonnage de tous les composants ou des composants sélectionnés après la création du tableau de résultats. Définir les unités de concentration et les paramètres de régression par défaut afin de ne pas avoir à les ajuster à chaque fois.

Conseil ! Faire un zoom avant sur le graphique en faisant glisser les régions des axes X ou Y. Retourner à la vue prédéfinie en utilisant le menu contextuel (**Home Graph Axes**) ou en double-cliquant dans la région de l'axe.

Figure 7-8 Page Create Results Table - Define Integration



Étiquette	Description
Apply	Ajuste les paramètres de recherche de pic, le cas échéant, pour un composant donné. Lors de la création du nouveau tableau de résultats, les paramètres spécifiés pour un composant donné sont appliqués à ce composant pour tous les échantillons lors de l'intégration des données. Voir Paramètres des algorithmes d'intégration à la page 121 .
Expected RT	Défini initialement comme le temps de rétention du point ayant la plus grande intensité pour le chromatogramme. Il s'agit généralement du pic requis. Toutefois, en présence d'isomères, cette valeur pourrait alors devoir être ajustée. Pour ajuster la valeur, entrer une nouvelle valeur dans le champ Expected RT , puis cliquer sur Apply . Sinon, cliquer sur le graphique, puis le faire glisser sur le pic d'intérêt. Veiller à ne pas faire glisser le curseur dans le graphique et à ne pas ajuster le temps de rétention attendu accidentellement.
Parameter	Sélectionner Area ou Height .
Fit	Les divers types d'ajustement sont décrits dans Équations de régression à la page 127 .

Tableaux de résultats

Étiquette	Description
Weighting	Les divers types de pondération sont décrits dans Facteurs de pondération à la page 128 .
Concentration Units	Entrer les unités de concentration utilisées pour les analytes et les étalons internes. Si une quantification relative est réalisée, laisser alors ce champ vide. L'assistant suppose que les mêmes unités sont utilisées pour tous les composants. Si ce n'est pas le cas, utiliser alors le Quantitation Method Editor .
Apply units to all Analytes	Les utilisateurs peuvent entrer une unité de concentration pour chaque composant. Cocher cette case pour appliquer la même unité à tous les composants. Les informations doivent correspondre aux unités de concentration .

Menu accessible par clic droit dans Define Integration

Cliquer avec le bouton droit dans la page **Define Integration** pour accéder à un menu contextuel. Les commandes suivantes sont disponibles.

Tableau 7-4 Options du menu contextuel Define Integration

Option de menu	Description
Find Component by Name	Similaire à la commande disponible dans la page Define Components , la différence tient au fait qu'au lieu de sélectionner des lignes dans le tableur Components , on sélectionne des éléments individuels dans la liste des composants.
Highlight Components with Uncertain RT	Permet de mettre en surbrillance les composants pour lesquels le temps de rétention par défaut attendu (mesuré comme le temps de rétention du pic dont l'intensité est la plus forte pour chaque chromatogramme) est incorrect. S'il n'y a que quelques composants, passer chacun d'eux en revue individuellement et ne pas utiliser cette commande. Cependant, si les composants sont nombreux, utiliser cette commande pour contrôler visuellement uniquement ceux pour lesquels il y a plusieurs pics significatifs sur le chromatogramme. Voir Boîte de dialogue Highlight Components à la page 88 .
Home Graph Axes	Ramène le graphique agrandi à son affichage initial dans lequel toutes les données sont visibles.

Tableau 7-4 Options du menu contextuel Define Integration (Suite)

Option de menu	Description
Overlay Other Components for Group	<p>Utiliser cette fonction pour superposer les chromatogrammes si divers composants ont été affectés à des groupes et si les composants affectés à un groupe donné doivent avoir le même temps de rétention. Par exemple, s'ils représentent différentes transitions MRM du même composé réel.</p> <p>Lorsque cette fonction est sélectionnée, le chromatogramme du composant en cours, dont les paramètres d'intégration sont en cours de définition, est dessiné sous forme d'un tracé bleu continu et son aire de pic intégrée est présentée. Les chromatogrammes, et non l'aire de pic intégrée, pour les autres composants du même groupe sont superposés à l'aide d'un tracé pointillé.</p>
Update Retention Times	<p>Permet de réinitialiser les temps de rétention attendus pour une méthode de quantification créée au préalable. Si l'utilisateur ouvre une méthode de quantification existante, puis sélectionne Set New Typical Sample, les chromatogrammes présentés correspondent au nouvel échantillon, mais les temps de rétention attendus restent inchangés.</p> <p>Pour chaque composant, le temps de rétention attendu est mis à jour pour coïncider avec le temps de rétention du pic dont l'intensité est la plus forte dans une fenêtre à la largeur spécifiée centrée sur le temps de rétention attendu d'origine.</p> <p>Voir Boîte de dialogue Update Retention Time à la page 88.</p>

Paramètres de la valeur aberrante

Les utilisateurs peuvent marquer les valeurs aberrantes de la précision pour les valeurs **Standards**, **QCs**, **Ion Ratio** et **Calculated Concentration**. Les commandes suivantes sont disponibles.

Figure 7-9 Boîte de dialogue Outlier Settings

Set criteria for flagging outliers.

☒ Accuracy for Standards

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

Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ: %

☒ Accuracy for QCs

Max. Accuracy Tolerance for QC: %

☒ Ion Ratio ☒ Calculated Concentration

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

< Back Next > Finish Cancel

Étiquette	Description
Accuracy for Standards	Modifie la tolérance de précision pour les échantillons Standard .
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Modifie la tolérance de précision pour les échantillons Standard à l'aide d'une valeur correspondant aux procédures d'exploitation normalisées du laboratoire.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Modifie la tolérance de précision pour l' étalon doté de la concentration la plus faible si la procédure d'exploitation normalisée du laboratoire indique une tolérance différente pour cet étalon .
Accuracy for QCs	Modifie la tolérance de précision pour les échantillons Quality Control .
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Modifie la tolérance de précision pour les échantillons Quality Control à l'aide d'une valeur correspondant aux procédures d'exploitation normalisées du laboratoire.
Ion Ratio	Uniquement disponible si les composants sont affectés à des groupes. Sélectionner cette option pour utiliser le ratio d'ions de l'aire de pic ou de l'amplitude de pic. L'aire de pic ou l'amplitude de pic est définie lors de la sélection du paramètre de régression pendant le développement de la méthode de quantification.

Étiquette	Description
Calculated Concentration	Lorsque des échantillons Standard dont la concentration est connue sont utilisés, la concentration est rétrocalculée en fonction de la courbe d'étalonnage. Les équations de régression décrivent la manière dont la régression est effectuée pour les différents types de régression et la pondération.
Component	Analytes ou étalons internes pour tous les échantillons.
IS	Étalon interne sélectionné. Uniquement disponible si la case Ion Ratio est cochée.
Group	Les composants possédant le même temps de rétention (c'est-à-dire des transitions différentes pour le même composé) peuvent être regroupés. Uniquement disponible si la case Ion Ratio est cochée.
Ion Ratio Tolerance (%)	Utiliser le paramètre par défaut ou modifier ce paramètre en fonction des procédures d'exploitation normalisées du laboratoire. Uniquement disponible si la case Ion Ratio est cochée.
Lower Limit of Calculated Concentration	Entrer la limite inférieure de la plage de concentration acceptable. Tout échantillon dont la concentration calculée est inférieure à cette valeur sera marqué comme présentant une donnée aberrante de concentration.
Upper Limit of Calculated Concentration	Entrer la limite supérieure de la plage de concentration acceptable. Tout échantillon dont la concentration calculée est supérieure à cette valeur sera marqué comme présentant une donnée aberrante de concentration.

Cliquer avec le bouton droit dans la page **Outlier Settings** pour accéder à un menu contextuel.

Tableau 7-5 Options du menu contextuel Outlier Settings

Étiquette	Description
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Applique la limite inférieure de la concentration calculée à tous les analytes si tous les analytes présentent les mêmes critères.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Applique la limite supérieure de la concentration calculée à tous les analytes si tous les analytes présentent les mêmes critères.

Colonnes du tableau de résultats

Remarque : Certaines colonnes critiques des informations sur les échantillons comme **Sample Name**, **Sample ID**, etc. ne doivent pas être masquées lorsque les utilisateurs personnalisent les paramètres de colonne du **tableau de résultats**.

Tableaux de résultats

Pour les champs numériques, utiliser le format 0.00 pour les notations non scientifiques et le format 0.00e0 pour les notations scientifiques. Modifier les points décimaux pour indiquer la précision des nombres présentés. Seul un point (.) peut être utilisé comme séparateur décimal. Les groupements de chiffres ne sont pas pris en charge.

Tableau 7-6 Colonnes du tableau de résultats

Étiquette	Description
Accuracy	Lorsque l'utilisateur utilise des échantillons Standard de concentration connue pour les échantillons Standard et les échantillons Quality Control , la précision est définie comme suit : $100 \% * (\text{concentration calculée}) / (\text{concentration réelle})$ Pour les autres types d'échantillon, la valeur est N/A.
Acq. Method Name	Nom de la méthode d'acquisition utilisée pour acquérir l'échantillon.
Acquisition Date & Time	Date et heure d'acquisition de l'échantillon wiff.
Actual Concentration	Pour les échantillons Standard et les échantillons Quality Control , il s'agit de la concentration connue attendue.
Area	Aire de pic détectée. Si aucun pic n'a été détecté, la valeur est N/A.
Area / Height	Aire de pic détectée divisée par l'amplitude. Si aucun pic n'a été détecté, la valeur est N/A.
Area Ratio	Pour les analytes utilisant un étalon interne, il s'agit du ratio Area par rapport à IS Area . Pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne, la valeur est N/A.
Asymmetry Factor	Distance séparant la ligne centrale du pic de la pente arrière divisée par la distance séparant la ligne centrale du pic de la pente avant, les mesures étant effectuées à 10 % de l'amplitude maximale du pic.
Baseline Delta / Height	Valeur absolue de la différence d'amplitude de la ligne de base (au début du pic et à la fin du pic) par rapport à l'amplitude réelle du pic. Les valeurs supérieures à 0,1 environ indiquent que la ligne de base n'a peut-être pas été intégrée correctement et que le pic doit être examiné.
Calculated Concentration	Lorsque des échantillons Standard dont la concentration est connue sont utilisés, la concentration est rétrocalculée en fonction de la courbe d'étalonnage. Voir Équations de régression à la page 127 pour des informations sur la réalisation de la régression pour les divers types de régression et la pondération.
Component Comment	Commentaire arbitraire qui s'applique à l'analyte ou à l'étalon interne pour tous les échantillons.
Component Group Name	Nom du groupe (éventuel) associé à l'analyte ou à l'étalon interne.
Component Index	Indice de l'analyte ou de l'étalon interne dans la méthode de quantification d'origine. Il peut être utile de trier le tableau d'après ce champ.

Tableau 7-6 Colonnes du tableau de résultats (Suite)

Étiquette	Description
Component Name	Nom de l'analyte ou de l'étalon interne.
Conc. Units	Unités de concentration.
Concentration Ratio	Pour les analytes utilisant un étalon interne, il s'agit du ratio Actual Concentration par rapport à IS Actual Concentration . Pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne, la valeur est N/A.
Corrected Area	Aire de pic détectée. Si aucun pic n'a été détecté, la valeur est alors N/A.
Corrected Area / Height	Aire de pic détectée divisée par l'amplitude. Si aucun pic n'a été détecté, la valeur est alors N/A.
Corrected Height	Amplitude de pic détectée. Si aucun pic n'a été détecté, la valeur est alors N/A.
Dilution Factor	Facteur selon lequel l'échantillon a été dilué. Ce facteur est utilisé dans le calcul de la courbe d'étalonnage. Voir Équations de régression à la page 127 .
End Time	Temps de fin de rétention du pic détectée, en minutes.
End Time at 10%	Temps en minutes le long de la partie arrière du pic où l'intensité est de 10 % de l'amplitude du pic.
End Time at 5%	Temps en minutes le long de la partie arrière du pic où l'intensité est de 5% de l'amplitude du pic.
Expected Ion Ratio	Ratio d'ions attendu pour tous les types d'échantillons.
Expected RT	Temps de rétention d'origine attendu en fonction de la méthode de quantification, en minutes.
Height	Amplitude de pic détectée. Si aucun pic n'a été détecté, la valeur est alors N/A.
Height Ratio	Pour les analytes utilisant un étalon interne, il s'agit du ratio Height par rapport à IS Height . Pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne, la valeur est N/A.
Index	Il s'agit de l'indice de la ligne dans l'ordre d'origine, non trié. Si le tableau est trié en fonction d'une autre colonne, il est possible de le ramener à l'ordre d'origine en effectuant un tri sur cette colonne.
Injection Volume	Volume d'échantillon injecté par l'auto-échantillonneur en ml.
Integration Type	<ul style="list-style-type: none"> La valeur Baseline indique qu'un pic autonome a été intégré de la manière habituelle. La valeur Valley indique que deux pics étaient voisins et que le signal n'est pas retourné à la valeur de la ligne de base entre ces pics. La valeur Manual indique que le pic a été intégré manuellement. La valeur N/A indique qu'aucun pic n'a été détecté.

Tableau 7-6 Colonnes du tableau de résultats (Suite)

Étiquette	Description
Ion Ratio	<ul style="list-style-type: none"> Les ratios d'ions sont déterminés quand au minimum deux transitions MRM à partir d'un seul analyte ont été rassemblées dans un groupe. Le premier composant d'un sous-groupe sera utilisé en tant qu'ions quantificateurs. Le reste des composants du sous-groupe sera utilisé en tant qu'ions qualificateurs. $\text{Ion Ratio} = (\text{aire ou amplitude de pic du qualificateur}) / (\text{aire ou amplitude de pic du quantificateur})$ Subgroups <ul style="list-style-type: none"> Tous les analytes d'un groupe constituent le sous-groupe des analytes. Tous les étalons internes d'un groupe constituent un sous-groupe IS. Si un composant n'est pas membre d'un groupe, Ion Ratio est alors défini sur N/A. Si le pic n'est pas trouvé, Ion Ratio est alors défini sur N/A. Appliqué à tous les composants des sous-groupes Analyte et IS, pour le quantificateur, le qualificateur est lui-même. Si l'intégration change pour les pics Quantifier ou Qualifier, la valeur Ion Ratio est alors calculée de nouveau. Peut être calculé pour l'aire de pic ou pour l'amplitude de pic. Si l'aire est utilisée dans la partie régression d'un fichier .qmethod pour le premier composant (l'indice du composant est 1) dans le tableau de résultats, l'aire du pic est utilisée pour le calcul de la valeur Ion Ratio pour le tableau de résultats entier. Si l'Amplitude est utilisée dans la régression du premier composant, l'amplitude du pic est alors utilisée pour le calcul.
IS	Une case cochée indique que le composant de la ligne est un étalon interne, et non un analyte.
IS Actual Concentration	Concentration réelle de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Area	Aire de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Area / Height	Ratio Area par rapport à Height de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Baseline Delta / Height	Delta/Amplitude de la ligne de base de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Comment	Commentaire arbitraire de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.

Tableau 7-6 Colonnes du tableau de résultats (Suite)

Étiquette	Description
IS Corrected Area	Aire corrigée de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Corrected Area / Height	Aire corrigée / Amplitude corrigée de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Corrected Height	Amplitude corrigée de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS End Time	Heure de fin de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Expected RT	Temps de rétention attendu de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Height	Amplitude de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Integration Type	Type d'intégration de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Mass Info	Informations sur la masse de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Name	Nom du composant de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Peak Comment	Commentaire sur le pic de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Quality	Qualité de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Region Height	Métrique de qualité de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Retention Time	Temps de rétention de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Signal / Noise	Signal/Bruit de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Start Time	Heure de début de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Total Width	Largeur totale de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.
IS Width at 50%	Largeur à 50 % de l'étalon interne associé à l'analyte actuel, ou N/A pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne.

Tableau 7-6 Colonnes du tableau de résultats (Suite)

Étiquette	Description
Mass Info	Informations de masse associées au composant. Pour les expériences MRM, il s'agit de Q1/Q3 et pour les expériences de profil (balayage complet), il s'agit de Start - Stop .
Modified	Une coche indique que les paramètres de recherche de pic ont été modifiés, à l'aide du volet Peak Review , par rapport à leurs valeurs d'origine indiquées dans la méthode de quantification.
Operator Name	Nom de l'opérateur de l'instrument qui a acquis l'échantillon.
Original Filename	Nom du fichier wiff.
Outlier Reasons	<p>Lorsque les critères des valeurs aberrantes ont été définis dans la méthode de quantification, cette colonne indique quel critère s'est avéré être hors des limites prédéterminées pour le composant.</p> <p>La colonne Outlier Reason est uniquement liée à Outlier Settings dans la méthode de quantification et est une colonne prédéfinie dans le tableau de résultats.</p> <p>Motif du marquage de la donnée aberrante :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Accuracy • Concentration • Ion Ratio S'il existe un pic pour le quantificateur, mais pas pour le qualificateur, le ratio d'ions sera alors marqué pour les deux composants. S'il existe un pic pour le qualificateur, mais pas pour le quantificateur, le ratio d'ions sera alors marqué pour les deux composants. Si aucun des deux ne comporte de pic, aucun composant ne sera alors marqué. • Cannot calculate the Expected Ion Ratio.
Peak Comment	Commentaire arbitraire concernant la ligne.
Plate Number	Numéro de la plaque de l'auto-échantillonneur tel qu'indiqué initialement dans le Batch Editor utilisé pour acquérir les données.
Points Across Baseline	Nombre d'analyses effectuées entre le début et l'arrêt du pic.
Points Across Half Height	Nombre d'analyses effectuées le long du pic jusqu'à 50 % environ de l'amplitude.
Quality	<p>Cette métrique tente d'indiquer la qualité du pic intégré.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Les valeurs proches de zéro indiquent que le pic s'est mal intégré (ou qu'aucun pic réel n'est présent). • Les valeurs proches de 1,0 indiquent que le pic s'est bien intégré et qu'il n'a pas besoin d'être examiné.

Tableau 7-6 Colonnes du tableau de résultats (Suite)

Étiquette	Description
Rack Number	Numéro de carrousel de l'auto-échantillonneur tel qu'indiqué initialement dans le Batch Editor utilisé pour acquérir les données.
Region Height	Amplitude de pic du plus grand pic à proximité du pic détecté réel. Cela est utile avec le champ conjointement avec le champ Quality . Les pics de basse qualité qui ont également une Region Height raisonnable doivent être examinés. Si la Region Height est faible, aucun pic significatif n'est alors présent.
Relative RT	Pour les analytes qui utilisent un étalon interne, il s'agit du ratio Retention Time par rapport à IS Retention Time . Pour les étalons internes ou pour les analytes sans étalon interne, la valeur est N/A.
Retention Time	Temps de rétention réel du pic détecté, en minutes.
Sample Comment	Commentaire arbitraire concernant l'échantillon.
Sample ID	Identifiant arbitraire pour l'échantillon. Il est initialisé à partir de la valeur initialement spécifiée dans le Batch Editor utilisé pour acquérir les données.
Sample Index	Indice de l'échantillon actuel.
Sample Name	Nom arbitraire de l'échantillon. Il est initialisé à partir de la valeur initialement spécifiée dans le Batch Editor utilisé pour acquérir les données.
Sample Type	Type de l'échantillon. Voir Filtrer le type d'échantillon à la page 41 .
Signal / Noise	Estimation du ratio entre l'amplitude de pic pour le pic détecté et le bruit présent dans le chromatogramme. En cas d'utilisation de l'algorithme d'intégration SignalFinder, le bruit est estimé en utilisant le bruit relatif calculé et la ligne de base au point culminant du pic. L'algorithme d'intégration MQ4 utilise une approche similaire, excepté que la ligne de base est estimée en utilisant le chromatogramme entier. Voir Bruit relatif et calculs du ratio signal sur bruit à la page 151 .
Slope of Baseline	Indique la dérive de la ligne de base.
Start Time	Temps de rétention initial du pic détecté, en minutes.
Start Time at 10%	Temps en minutes le long de la partie avant du pic où l'intensité est à 10 % de l'amplitude de pic.
Start Time at 5%	Temps en minutes le long de la partie avant du pic où l'intensité est à 5% de l'amplitude de pic.
Tailing Factor	Distance entre la pente avant du pic et la pente arrière, divisée par deux fois la distance entre la ligne centrale du pic et la pente avant, toutes les mesures étant effectuées à 5 % de l'amplitude maximale du pic.
Total Width	Largeur du pic chromatographique à la ligne de référence.

Tableaux de résultats

Tableau 7-6 Colonnes du tableau de résultats (Suite)

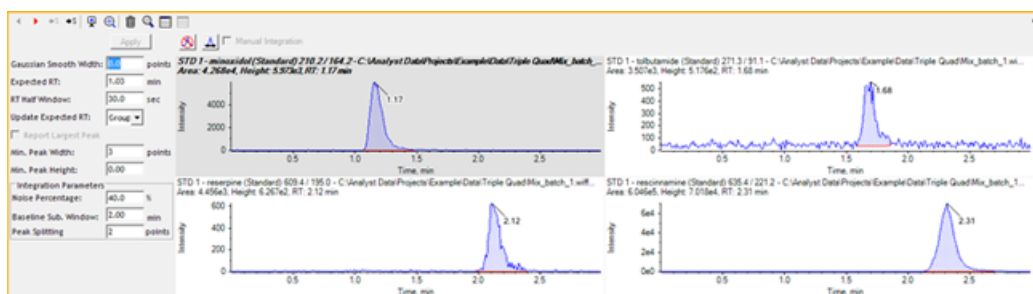
Étiquette	Description
Used	Pour les échantillons Standard , une coche indique que l'analyte correspondant est actuellement utilisé pour la construction de la courbe d'étalonnage. Pour les échantillons Quality Control , une coche indique que l'analyte est utilisé pour le calcul des statistiques de QC . Pour les autres types d'échantillon, ce champ est présenté uniquement à titre d'information.
Vial Number	Numéro de flacon de l'auto-échantillonneur, tel qu'indiqué initialement dans le Batch Editor utilisé pour acquérir les données.
Width at 10 %	Largeur du pic mesurée à 10 % de l'amplitude de pic.
Width at 5%	Largeur du pic mesurée à 5% de l'amplitude de pic.
Width at 50%	Largeur de pic chromatographique, en minutes, pour le pic détecté mesuré à la moitié de son amplitude.

Utiliser le volet **Peak Review** pour inspecter visuellement les chromatogrammes bruts afin que la qualité du processus de recherche de pic puisse être déterminée. Lorsqu'un **tableau de résultats** est actif, cliquer sur l'icône **Show Peak Review** dans la barre d'outils du tableau de résultats pour ouvrir le volet Peak Review. Les examinateurs doivent passer en revue les données quantitatives en fonction des critères d'intégration des pics et d'acceptation des données de leurs propres procédures opérationnelles normalisées (SOP).

Le regroupement des nombres n'est pas pris en charge. Les utilisateurs ne doivent pas regrouper des nombres dans une zone de texte (par exemple, les paramètres d'intégration) et une grille (par exemple, **Results Tables**).

Le **Peak Review** amélioré indique l'acceptation du **ratio d'ion** sur un chromatogramme superposé. Les utilisateurs peuvent également agrandir un chromatogramme.

Figure 8-1 Volet Peak Review



Utiliser le volet **Peak Review** pour corriger les chromatogrammes qui ne sont pas intégrés correctement soit en ajustant les paramètres de détection du pic soit en sélectionnant les points de démarrage et de fin de l'intégration. Une fois qu'un chromatogramme est réintégré, le **tableau de résultats** est automatiquement mis à jour avec la nouvelle aire du pic et les autres paramètres.

Les méthodes de quantification comprennent les critères utilisés pour quantifier les pics sélectionnés pour l'intégration. Les examinateurs doivent passer en revue les données quantitatives en fonction des critères d'intégration des pics et d'acceptation des données de leurs propres procédures opérationnelles normalisées.

Intégration manuelle

Une fois qu'un pic d'un chromatogramme spécifique a été intégré manuellement, cocher cette case pour indiquer que le chromatogramme est intégré manuellement. Dans cet état, si l'utilisateur décoche la case, l'intégration manuelle du pic est alors annulée et le pic est automatiquement réintégré à l'aide des paramètres de méthode.

La différence entre cette case à cocher et le bouton **Enable Manual Integration Mode** réside dans le fait qu'elle reflète l'état du pic actuel tandis que le bouton spécifie le comportement lors du glissement d'un chromatogramme.

Remarque : Une fois que le mode d'intégration manuelle a été activé, il reste activé pour tous les volets jusqu'à ce que la case soit décochée.

Appliquer

Si l'utilisateur a ajusté l'un des paramètres de recherche de pic, le bouton **Apply** est alors activé. Cliquer sur le bouton pour appliquer les paramètres de recherche de pic modifiés au chromatogramme actif.

Excepté en mode d'intégration manuelle, le glissement sur un pic spécifique d'un chromatogramme équivaut à ajuster le paramètre **Expected RT**, puis à cliquer sur **Apply**.

Remarque : Si l'utilisateur modifie les paramètres de recherche de pic, puis active un chromatogramme différent sans cliquer sur **Apply**, les paramètres ne sont alors pas appliqués et les modifications sont perdues.

Conseils pour examiner les pics

- Trier le **tableau de résultats** dans une colonne particulière et passer en revue uniquement les chromatogrammes qui sont triés vers le haut ou le bas du tableau.
- Le volet **Peak Review** est systématiquement synchronisé avec le **tableau de résultats** correspondant et affiche les chromatogrammes pour les mêmes pics dans le même ordre que dans le tableau. Les éventuelles modifications (telles que le tri des lignes, le filtrage des types d'échantillon ou la sélection de composants) qui sont apportées au **tableau de résultats** apparaissent automatiquement dans le volet **Peak Review**.
- Sélectionner le nombre de chromatogrammes à afficher à la fois.
- Utiliser la barre de défilement à droite du volet pour parcourir les chromatogrammes disponibles. Lorsque le volet **Peak Review** est actif, utiliser les touches fléchées haut et bas du clavier ou la molette de défilement pour parcourir les chromatogrammes.
- À tout moment, un chromatogramme particulier est considéré comme étant actif, ce qui est indiqué par son titre qui apparaît en gras. Pour activer un chromatogramme particulier, cliquer n'importe où dans le chromatogramme.
- Lorsqu'un chromatogramme devient actif, les paramètres d'intégration présentés à gauche du volet sont mis à jour pour refléter le chromatogramme nouvellement actif. Si l'utilisateur ajuste les paramètres d'intégration de pic, puis clique sur **Apply**, cela affecte le chromatogramme actuellement actif.
- Sélectionner une ligne dans le **tableau de résultats** en cliquant sur la région grise à gauche de la première colonne pour afficher le pic correspondant dans le volet **Peak Review**. Si l'utilisateur fait défiler jusqu'à un chromatogramme spécifique dans le volet **Peak Review**, le **tableau de résultats** met en surbrillance la ligne correspondante, puis la fait défiler à l'écran.
- Si l'utilisateur fait glisser le curseur sur un pic spécifique dans un chromatogramme, le paramètre d'intégration **Expected RT** est mis à jour avec le temps de rétention réel du pic. Le nouveau temps de rétention est alors appliqué automatiquement et le pic est de nouveau intégré, ce qui met à jour le **tableau de résultats**.

- Si l'utilisateur examine les pics en mode d'intégration manuelle, le déplacement en travers du pic intègre manuellement le pic sélectionné.
- Le processus d'examen des pics peut être accéléré en mettant en cache les chromatogrammes précédemment calculés. Voir [Menu Edit à la page 15](#).

Menu accessible par clic droit dans Peak Review

Ces fonctions contrôlent l'aspect des paramètres d'intégration qui sont illustrés à gauche des chromatogrammes. Cliquer avec le bouton droit dans le volet **Peak Review** pour accéder à un menu contextuel. Les commandes suivantes sont disponibles.

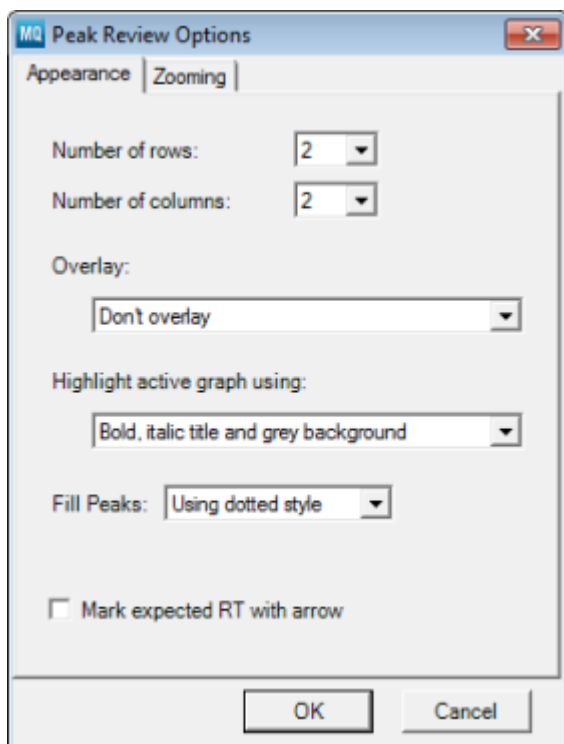
Tableau 8-1 Paramètres de Peak review

Tâche	Commandes
Modifier l'aspect du volet Peak Review .	Boîte de dialogue Peak Review Options : Onglet Appearance à la page 63 ou Boîte de dialogue Peak Review Options : Onglet Zooming à la page 66.
Définir le format du titre de l'examen de pic	Définir le format du titre de l'examen de pic à la page 68.
Afficher les paramètres à l'aide de noms descriptifs pour les paramètres individuels.	Par défaut, Show Parameters-Normal Width est systématiquement défini.
Copier les paramètres.	Copier les paramètres à la page 68.
Coller les paramètres.	Coller les paramètres à la page 68.
Définir le pic sur « Not Found ».	Définir le pic sur « Not Found » à la page 69.
Utiliser le pic.	Utiliser le pic à la page 69.
Mettre à jour la méthode de quantification pour le composant	Mettre à jour la méthode de quantification pour le composant à la page 69.
Mettre à jour la méthode de quantification pour le groupe.	Mettre à jour la méthode de quantification pour le groupe à la page 69.
Appliquer les paramètres d'intégration à un échantillon dans le groupe	Appliquer les paramètres d'intégration à l'échantillon au sein du groupe à la page 70.
Restaurer le pic à la méthode d'origine.	Restaurer le pic à la méthode d'origine à la page 70.
Restaurer tous les pics du composant.	Restaurer tous les pics pour le composant à la page 70.

Boîte de dialogue Peak Review Options : Onglet Appearance

Cliquer avec le bouton droit dans le volet **Peak Review** pour ajuster les options affectant l'aspect du volet **Peak Review**. Il est recommandé de ne pas définir plus de quatre lignes et de quatre colonnes.

Figure 8-2 Boîte de dialogue Peak Review Options : Onglet Appearance



Étiquette	Description
Number of rows et Number of columns	Contrôle le nombre de chromatogrammes visibles simultanément. Cela prendra plus de temps pour faire défiler les pages si de nombreux chromatogrammes sont affichés à moins qu'ils n'aient déjà été mis en mémoire cache. Voir Menu Edit à la page 15 .
Overlay	<p>Détermine si d'autres chromatogrammes doivent être superposés au-dessus du chromatogramme principal dans chacun des sous-volets.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Don't Overlay : Empêche la superposition des autres chromatogrammes. • All components for group : Superpose tous les chromatogrammes pour les composants du même groupe comme composant principal (pour l'échantillon actuel). • Analytes and IS's separately for group : Similaire à l'option précédente, à l'exception du fait que plutôt que de superposer tous les composants du même groupe, les analytes et les étalons internes sont conservés séparément. • Internal Standard with Analyte : Pour les analytes, superpose l'étalon interne utilisé par l'analyte (les chromatogrammes des étalons internes n'ont pas d'autres superpositions). • Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines : Affiche les lignes du ratio d'ion. Sélectionner cette option pour visualiser l'acceptation du ratio d'ion dans le tableau de résultats. Les utilisateurs peuvent afficher l'acceptation du ratio d'ion lorsque des groupes sont définis dans la méthode de quantification. Les lignes du ratio d'ion constituent toutefois uniquement une indication de l'acceptation, et non le résultat final. Les lignes sont affichées dans le chromatogramme en tant qu'amplitude du pic, mais elles sont calculées d'après l'aire ou l'amplitude du pic en fonction des paramètres définis dans la méthode de quantification. En cas d'écart entre l'amplitude et l'aire, l'utilisateur doit alors confirmer la valeur aberrante Ion Ratio dans le tableau de résultats.
Highlight active graph using:	Indique comment le chromatogramme actuellement actif doit être affiché. Définir cette option pour utiliser le titre en gras et en italique, et le fond gris.

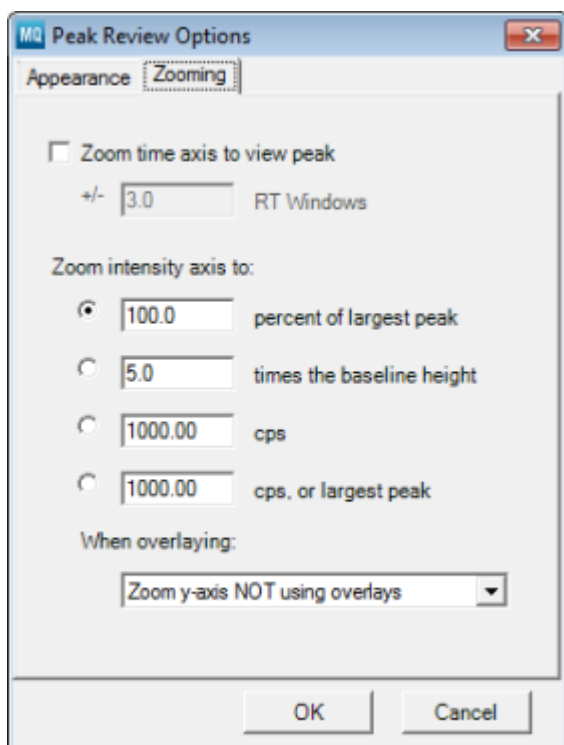
Examen des pics

Étiquette	Description
Fill peaks	<p>Indique comment l'aire intégrée des pics doit être affichée. Les choix sont les suivants:</p> <ul style="list-style-type: none">• Utiliser un style en pointillé tel que celui qui est employé dans les captures d'écran de ce document.• Utiliser un style en trait plein.• N'utiliser aucun remplissage. Dans tous les cas, la ligne de base du pic est également tracée (en rouge). <p>Lorsque la troisième option est utilisée, seule la référence est dessinée et le pic n'est pas rempli.</p>
Mark expected RT with arrow	<p>Indique le temps de rétention attendu avec une flèche bleue dessinée au-dessous de l'axe Time. Utile pour déterminer si le pic intégré est proche du temps de rétention attendu.</p>

Boîte de dialogue Peak Review Options : Onglet Zooming

Cliquer avec le bouton droit dans le volet **Peak Review** pour ajuster les options affectant l'aspect du volet **Peak Review**. Les fonctions **Zoom intensity axis to** sont utilisées pour ajuster automatiquement l'axe Y des chromatogrammes.

Figure 8-3 Boîte de dialogue Peak Review Options : Onglet Zooming



Étiquette	Description
Zoom time axis to view peak	Quand il est sélectionné, l'axe des x des chromatogrammes est automatiquement ajusté afin que seule une partie de la totalité de la procédure soit visible. Utile pendant les procédures LC prolongées afin que la région d'intérêt puisse être vue plus clairement. La largeur de la fenêtre est exprimée comme un multiple du paramètre d'intégration RT Window. La largeur totale de la région zoomée est le double du nombre spécifié des multiples de la RT Window .
Zoom intensity axis to percent of largest peak	Utilisé pour ajuster automatiquement l'axe des y des chromatogrammes. Met à l'échelle l'axe Y en fonction du pourcentage spécifié du plus grand pic dans la plage X visible du chromatogramme. Il sera plus petit que la durée totale de la procédure LC si la fonction Zoom time axis to view peak est utilisée.
Zoom intensity axis to times the baseline height	Utilisé pour ajuster automatiquement l'axe des y des chromatogrammes. Utilisé pour se concentrer sur la zone de la ligne de base elle-même.
Zoom intensity axis to cps	Met à l'échelle directement l'axe des ordonnées à la valeur spécifiée.
Zoom intensity axis to cps, or largest peak	Met à l'échelle l'axe des y en fonction de la plus petite des valeurs spécifiées ou du pic le plus large.
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays	Conserve les paramètres de Zoom sur l'axe des intensités en fonction de la section utilisant uniquement l'ensemble de données principal. Ce paramètre peut faire que les superpositions ne sont que partiellement visibles si elles sont plus intenses que l'ensemble de données principal.
When overlaying Zoom y-axis using overlays	Utilise l'ensemble de données principal et toutes les superpositions et la plus grande valeur globale des y. Cette fonction conserve toujours les superpositions visibles.
When overlaying Use a percentage y-axis	Met à l'échelle l'ensemble de données principal et les superpositions séparément en utilisant une mise à l'échelle en pourcentage. Permet à chaque tracé d'utiliser la totalité de l'amplitude disponible. Cependant, les amplitudes relatives des pics ne peuvent pas être comparées visuellement directement.

Conseil ! Double-cliquer sur l'axe des y pour le mettre à l'échelle en fonction du pic le plus intense de l'ensemble de données principal.

Quand il est sélectionné, le chromatogramme du pic en cours d'examen est indiqué par un tracé bleu en trait plein et l'aire du pic intégré est affichée. Les chromatogrammes (pas l'aire du pic intégré) des autres composants (pour le même échantillon) sont superposés à l'aide de lignes pointillées.

Quand le graphique présente de telles superpositions, double-cliquer n'importe où dans la zone de titre pour basculer de l'affichage des titres de tous les chromatogrammes à celui du chromatogramme actif.

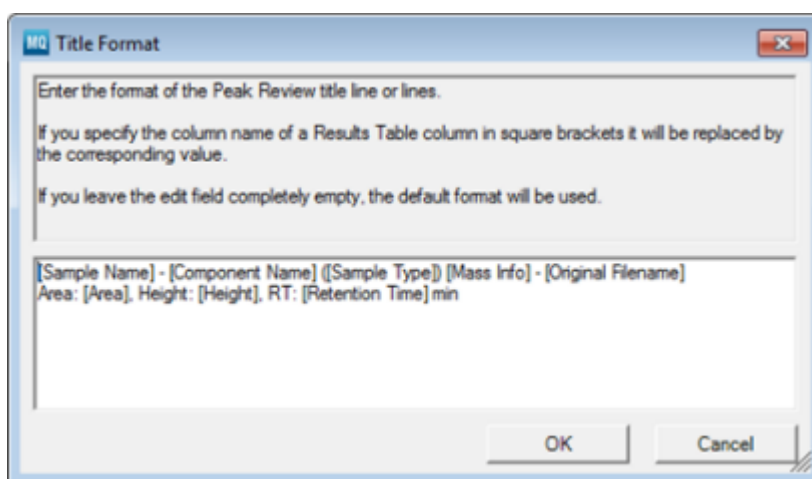
Conseil ! Double-cliquer sur l'axe des x pour faire revenir le graphique à sa vue initiale dans laquelle toutes les données sont visibles. Agrandissez en faisant glisser à l'intérieur de l'axe pour sélectionner une période couverte.

Définir le format du titre de l'examen de pic

Utiliser la boîte de dialogue pour personnaliser les informations qui apparaissent dans le titre du graphique pour chaque chromatogramme. Si l'utilisateur entre un nom de colonne dans le **tableau de résultats** entre crochets, ce nom est alors remplacé par la valeur du champ pour l'échantillon et le composant actuels. L'utilisateur peut aussi saisir tout texte supplémentaire qui est laissé en l'état. Il est recommandé d'inclure le nom de l'échantillon [Sample Name] dans le titre de l'examen des pics.

- Cliquer avec le bouton droit dans le volet **Peak Review**, puis cliquer sur **Set Peak Review Title Format**

Figure 8-4 Boîte de dialogue Title Format



Copier les paramètres

Cliquer avec le bouton droit dans le volet **Peak Review** pour accéder à cette commande. Utiliser cette commande conjointement avec **Paste Parameters** pour copier les paramètres de recherche de pic depuis un chromatogramme vers un autre. Cette commande peut être utilisée si le même ajustement des paramètres doit être fait pour plusieurs chromatogrammes.

1. Dans un graphique où un chromatogramme actif est ouvert, cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Copy Parameters**.
2. Utiliser la commande **Update Quantitation Method for Component** pour appliquer la modification à tous les chromatogrammes pour le composant.

Coller les paramètres

1. Dans un graphique où un chromatogramme actif est ouvert, cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Copy Parameters**.
2. Cliquer avec le bouton droit dans un chromatogramme différent, puis cliquer sur **Paste Parameters**.

Les paramètres précédemment copiés sont appliqués au nouveau chromatogramme.

Définir le pic sur « Not Found »

- Dans un graphique où un chromatogramme actif est ouvert, cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Set Peak to 'Not Found'** pour supprimer l'intégration du chromatogramme sélectionné.

Utiliser le pic

- Dans un graphique où un chromatogramme actif est ouvert, cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Use Peak** pour inclure ou exclure le pic actif de la courbe d'étalonnage.

Mettre à jour la méthode de quantification pour le composant

Après avoir réglé les paramètres de détection des pics pour un chromatogramme particulier, sélectionner cette fonction pour régler la copie de la méthode de quantification enregistrée avec le tableau de résultats pour utiliser ces paramètres pour le composant.

- Ajuster les paramètres de recherche de pic, cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Update Quantitation Method for Component**.

Pour le composant spécifique, tous les échantillons sont automatiquement intégrés pour utiliser les nouveaux paramètres et le volet **Peak Review** ainsi que le **tableau de résultats** sont mis à jour. Si des pics ont été intégrés manuellement, l'utilisateur est alors invité à préciser si la réintégration doit s'appliquer à tous les pics ou seulement à ceux qui n'ont pas été intégrés manuellement.

Mettre à jour la méthode de quantification pour le groupe

Similaire à la commande **Update Quantitation Method for Component**, si ce n'est que l'intégration s'applique à tous les composants qui appartiennent au même groupe que le composant pour le chromatogramme actuellement actif. Si l'utilisateur a attribué les divers composants à des groupes et si les composants attribués à un groupe donné doivent avoir le même temps de rétention, cette fonction est alors utile pour permettre à l'utilisateur de réinitialiser les paramètres, y compris le temps de rétention attendu, pour tous les composants

du groupe à la fois. Cette fonction n'est pas utile si les composants des groupes n'ont pas les mêmes temps de rétention.

- Ajuster les paramètres de recherche de pic, cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Update Quantitation Method for Group**.

Appliquer les paramètres d'intégration à l'échantillon au sein du groupe

Après avoir réglé les paramètres de détection des pics pour un chromatogramme particulier, utilisez cette fonction pour appliquer au chromatogramme les paramètres d'origine à partir de la copie de la méthode de quantification enregistrée avec le tableau de résultats.

- Après avoir réglé les paramètres de détection des pics pour un chromatogramme spécifique, cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Apply Integration Parameters to Sample Within Group**.

Restaurer le pic à la méthode d'origine

Après avoir ajusté les paramètres de recherche de pic pour un chromatogramme spécifique, utiliser cette fonction pour appliquer au chromatogramme les paramètres d'origine à partir de la copie de la méthode de quantification enregistrée avec le **tableau de résultats**.

- Cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Revert Peak to Original Method**.

Restaurer tous les pics pour le composant

Après avoir ajusté les paramètres de recherche de pic pour certains chromatogrammes, utiliser cette fonction pour appliquer les paramètres d'origine à partir de la copie de la méthode de quantification enregistrée avec le **tableau de résultats** à tous les chromatogrammes pour le même composant que le chromatogramme actif. Si des pics ont été intégrés manuellement, l'utilisateur est alors invité à préciser si la réintégration doit s'appliquer à tous les pics ou seulement à ceux qui n'ont pas été intégrés manuellement.

- Cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Revert All Peaks for Component**.

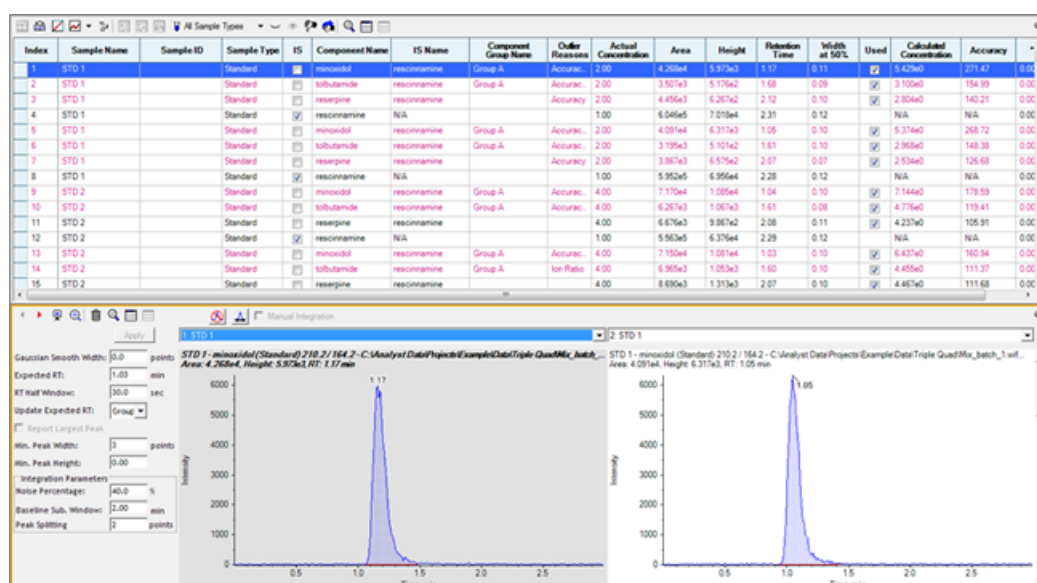
Examen des échantillons côte à côte

9

Utiliser la fonction **Side-by-side Sample Review** pour dépister des composés cibles spécifiques. Les utilisateurs peuvent sélectionner jusqu'à six échantillons pour comparer les réponses des pics sur les échantillons. Les examinateurs doivent passer en revue les données quantitatives en fonction des critères d'intégration des pics et d'acceptation des données de leurs propres procédures opérationnelles normalisées (SOP).

Lorsqu'un **tableau de résultats** est actif, cliquer sur l'icône **Side-by-side Sample Review** dans la barre d'outils du **tableau de résultats** pour ouvrir le volet **Side by Side Sample Review**.

Figure 9-1 Volet Side by Side Sample Review



Les méthodes de quantification comprennent les critères utilisés pour quantifier les pics sélectionnés pour l'intégration. Les examinateurs doivent passer en revue les données quantitatives en fonction des critères d'intégration des pics et d'acceptation des données de leurs propres procédures opérationnelles normalisées.

Effectuer un examen des échantillons côte à côte

1. Ouvrir un tableau de résultats.
2. Cliquer sur l'icône **Side by Side Sample Review**.
3. Sélectionner un échantillon dans la liste dans le volet **Side by Side Sample Review**.

Les paramètres d'intégration sont affichés.

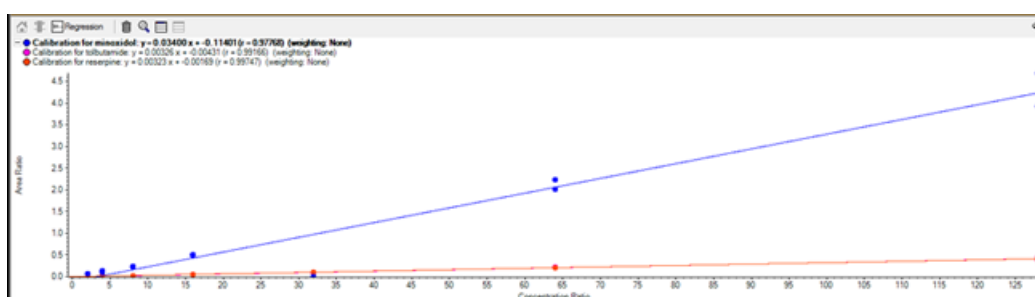
Examen des échantillons côte à côte

Conseil ! Cliquer avec le bouton droit dans le volet **Side by Side Sample Review**, puis cliquer sur **Options** pour modifier le nombre de lignes ou de colonnes lors de l'examen côte à côte.

4. Sélectionner un autre échantillon dans l'autre liste.

Utiliser le volet **Calibration** pour inspecter visuellement la régression pour chaque analyte si des échantillons **Standard** de concentration connue sont utilisés. Ce volet ne s'applique pas si l'utilisateur procède à une quantification relative et n'a pas d'échantillons **Standard**. Lorsqu'un **tableau de résultats** est actif, cliquer sur **Show Calibration** dans la barre d'outils.

Figure 10-1 Volet Calibration

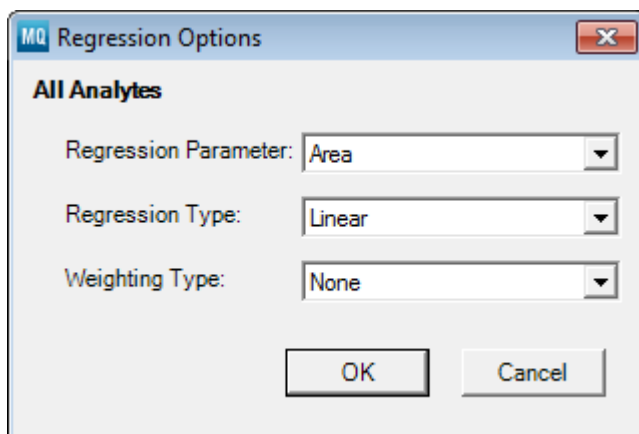


En plus d'inspecter la régression, l'utilisateur peut exclure des échantillons **Standard** afin qu'ils ne soient pas utilisés pour la régression. Une fois les ajustements effectués, une nouvelle régression est automatiquement calculée et les paramètres tels que **Calculated Concentration** et **Accuracy** sont recalculés pour tous les échantillons de l'analyte. Voir [Équations de régression à la page 127](#).

Boîte de dialogue Regression Options

En présence de nombreux analytes, il est alors plus facile d'appliquer les modifications à l'aide de la boîte de dialogue **Regression Options** plutôt qu'en modifiant les paramètres de régression un par un.

Figure 10-2 Boîte de dialogue Regression Options



Conseils d'étalonnage

- Pour les analytes sans étalon interne associé, l'axe des Y correspond à l'**aire** ou à l'**amplitude** du pic, comme sélectionné dans la méthode de quantification. Pour les analytes avec un étalon interne, l'axe des Y correspond au ratio **Area** ou **Height** du pic (ratio de l'analyte par rapport à l'étalon interne).
- Pour les analytes sans étalon interne associé, l'axe des X correspond à **Actual Concentration**. Sinon, il correspond au ratio **Actual Concentration** (ratio de l'analyte par rapport à l'étalon interne).
- Si plusieurs analytes de la liste **Components and Groups** sont sélectionnés, les étalonnages de tous les analytes sont alors superposés. Sinon, l'étalonnage de l'analyte sélectionné est affiché.
- La zone de titre affiche systématiquement le nom de l'analyte actif et l'équation de régression associée avec le coefficient de corrélation. Si la régression n'a pas pu être calculée, par exemple en l'absence d'échantillons **Standard**, le titre l'indique alors. Si les étalonnages de plusieurs analytes sont superposés, basculer alors le titre entre l'affichage des informations pour tous les analytes ou seulement pour l'analyte actif en double-cliquant n'importe où dans la zone de titre. Si beaucoup d'analytes sont superposés, il peut alors ne pas être possible d'afficher toutes les informations. Dans ce cas, faire défiler le titre en faisant glisser à l'intérieur de celui-ci.
- Les points de données des échantillons **Standard** qui sont utilisés sont systématiquement tracés tout comme l'équation d'étalonnage qui utilise ces points. L'utilisateur peut, en option, afficher les points de données des échantillons **Standard** exclus et des échantillons **Quality Control**.
- Si l'utilisateur clique sur un point de données, la ligne correspondante dans le **tableau de résultats** est alors automatiquement sélectionnée et apparaît à l'écran sous réserve que la ligne soit actuellement visible à un endroit dans le tableau et qu'elle n'ait pas été masquée.

Menu accessible par clic droit dans Calibration

Cliquer avec le bouton droit dans le volet **Calibration** pour accéder à un menu contextuel. Les commandes suivantes sont disponibles.

Tableau 10-1 Options du menu contextuel du volet Calibration

Option de menu	Description
Exclude (or Include)	Si l'utilisateur clique avec le bouton droit directement sur un point de données pour un étalon qui n'a pas été exclu, cette option est alors utilisée pour exclure l'échantillon du calcul de la régression (pour l'échantillon et l'analyte pour le point de données sur lequel l'utilisateur a cliqué). Si l'échantillon a déjà été exclu, le texte de l'élément de menu indique alors Include et le fait de le sélectionner inclut ce point. Après la sélection, la régression est calculée et le tableau de résultats est mis à jour. Cette fonctionnalité équivaut à décocher ou à cocher la case Used dans le tableau de résultats pour la ligne correspondante.
Exclude – All Analytes (or Include – All Analytes)	Exclut ou inclut tous les analytes, et pas uniquement l'analyte correspondant à un point de données sélectionné.

Tableau 10-1 Options du menu contextuel du volet Calibration (Suite)

Option de menu	Description
Show Excluded Standards	Lorsque cette option est sélectionnée, les points de données des étalons exclus (le cas échéant) sont dessinés à l'aide de cercles ouverts. Lorsque cette option est décochée, les étalons exclus ne sont pas affichés.
Show QCs	Lorsque cette option est sélectionnée, les points de données des échantillons Quality Control (QC) sont dessinés à l'aide d'un diamant ouvert. Lorsque cette option est décochée, les échantillons QC ne sont pas affichés.
Show Legend	<p>Lorsque cette option est sélectionnée, une légende est dessinée à droite du tracé pour indiquer les symboles des points pour les divers types d'échantillon (cercles fermés pour les échantillons Standard, cercles ouverts pour les étalons exclus et diamants ouverts pour les échantillons Quality Control).</p> <hr/> <p>Remarque : Si l'utilisateur ne voit pas certains types d'échantillon, par exemple si l'option Show QCs n'est pas sélectionnée, l'entrée pour ces types d'échantillon n'est alors pas présente. Si ni les échantillons QC ni les étalons exclus ne sont affichés, cette option n'est alors pas disponible et aucune légende n'est dessinée.</p> <hr/>
Use Percent Y-Axis	<p>Lorsque cette option n'est pas sélectionnée, l'axe Y du tracé est exprimé en unités du ratio Area ou Height absolu du pic (ou du ratio Area ou Height du pic si un étalon interne est utilisé). Lorsqu'elle est sélectionnée, l'axe Y est exprimé en tant que pourcentage du point de données avec la valeur y la plus élevée pour chaque analyte indépendamment.</p> <p>L'utilisation d'un axe en pourcentage est utile si plusieurs analytes sont superposés et que leurs réponses absolues sont relativement différentes étant donné qu'il permet de mettre chaque tracé à l'échelle afin d'utiliser toute l'aire verticale disponible. Sinon, les analytes dont la réponse est faible se situent près de l'axe X et le tracé doit être zoomé pour les afficher en détail.</p>
Log-Log Plot	Permet de basculer la vue entre le traçage Area par rapport à Concentration et Log(Area) par rapport à Log(Concentration) .

Tableaux de statistiques

11

Utiliser le **tableau de statistiques** pour afficher les informations relatives à la reproductibilité d'une analyse. Chaque ligne du tableau récapitule des informations comme la moyenne et l'écart-type pour un groupe de pics liés du même analyte qui, idéalement, devraient donner la même réponse.

Figure 11-1 Volet Statistics

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	miconidol	2.00	2 of 2	5.402e0	3.884e-2	0.72	270.59	5.429e0	5.374e0
2	miconidol	4.00	2 of 2	6.791e0	4.995e-1	7.35	169.76	7.144e0	6.437e0
3	miconidol	8.00	2 of 2	1.026e1	3.500e-1	3.41	128.21	1.001e1	1.050e1
4	miconidol	16.00	2 of 2	1.797e1	3.199e-1	1.79	111.94	1.875e1	1.762e1
5	miconidol	32.00	1 of 2	3.366e0	N/A	N/A	10.49	N/A	3.396e0
6	miconidol	64.00	2 of 2	6.580e1	4.675e0	7.11	102.82	6.911e1	6.250e1
7	miconidol	128.00	2 of 2	1.302e2	1.583e1	12.16	101.69	1.414e2	1.190e2
8	tolbutamide	2.00	2 of 2	3.034e0	9.352e-2	3.08	151.69	3.100e0	2.960e0
9	tolbutamide	4.00	2 of 2	4.616e0	2.274e-1	4.93	115.39	4.775e0	4.405e0
10	tolbutamide	8.00	2 of 2	7.819e0	4.579e-1	5.86	97.74	7.496e0	8.143e0
11	tolbutamide	16.00	2 of 2	1.570e1	2.324e-1	1.48	98.10	1.553e1	1.586e1
12	tolbutamide	32.00	2 of 2	2.865e1	1.188e0	3.98	90.30	2.902e1	3.070e1
13	tolbutamide	64.00	2 of 2	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	2.683e0	1.912e-1	7.16	133.44	2.804e0	2.534e0
16	reserpine	4.00	2 of 2	4.352e0	1.633e-1	3.75	108.80	4.237e0	4.467e0
17	reserpine	8.00	2 of 2	7.491e0	6.761e-1	9.03	93.64	7.013e0	7.970e0
18	reserpine	16.00	2 of 2	1.535e1	1.693e-1	1.10	96.03	1.525e1	1.548e1

Étiquette	Description
Row	Numéro de la ligne. Cliquer sur l'un des en-têtes des autres colonnes pour trier le tableau. Ramener le tableau à la vue d'origine en cliquant sur cet en-tête.
Component Name	Nom de l'analyte.
Actual Concentration (or Sample Name)	En cas de regroupement par concentration réelle, cette colonne affiche alors la concentration. En cas de regroupement par nom d'échantillon, le titre de la colonne change alors et le nom de l'échantillon est affiché.
Num. Values	Indique m sur n, où n est le nombre total d'échantillons à la concentration réelle (ou ayant le même nom) et m le nombre de ces échantillons utilisé pour les calculs. Les échantillons ne sont pas utilisés si le pic correspondant n'a pas pu être intégré ou si le champ Used a été effacé manuellement.
Mean	Moyenne des échantillons utilisés.
Standard Deviation	Écart-type des échantillons utilisés.
Percent CV	Le coefficient de variation est exprimé comme un pourcentage : $100 * (\text{Écart-type}) / \text{Moyenne}$.

Étiquette	Description
Accuracy	Valeur moyenne divisée par la concentration réelle exprimée sous la forme d'un pourcentage : $100 * \text{Moyenne} / (\text{Concentration réelle})$. Ce champ est affiché uniquement en cas de regroupement par concentration réelle, et non en cas de regroupement par nom d'échantillon.
Values	Les valeurs individuelles pour les échantillons apparaissent dans des colonnes supplémentaires. Si l'échantillon correspondant n'a pas pu être intégré, la valeur est alors définie sur N/A. Si le champ Used a été effacé manuellement, la valeur est affichée avec une ligne barrée.

Conseils relatifs au tableau de statistiques

- Le **tableau de statistiques** est lié à la liste **Components and Groups** pour afficher les lignes correspondant aux analytes sélectionnés. Si les options **All Components** ou **All Analytes** sont sélectionnées, tous les analytes comportent des entrées. Si un analyte individuel est sélectionné, seul cet analyte comporte des entrées. Si un étalon interne individuel est sélectionné dans la liste, le **tableau de statistiques** est alors vide. Voir [Liste Components & Groups à la page 37](#).
- Si l'utilisateur clique sur l'une des cellules **Value**, la ligne correspondante dans le **tableau de résultats** pour l'analyte et l'échantillon est alors sélectionnée sous réserve que la ligne soit actuellement visible dans le **tableau de statistiques**. Seuls les échantillons **Unknown** dans le **tableau de résultats** sont affichés. Si le **tableau de statistiques** contient des informations pour les échantillons **Standard**, les lignes correspondantes ne sont alors pas visibles dans le **tableau de résultats**. Si le volet **Peak Review** est visible, il se lie alors au **tableau de résultats** et est mis à jour lorsque l'utilisateur clique sur la cellule.
- Cliquer sur l'un des en-têtes de colonne pour trier le **tableau de statistiques**.
- L'utilisateur peut copier la totalité du **tableau de statistiques** ou seulement les lignes d'intérêt.
 - Pour copier le tableau entier, cliquer sur **Edit > Copy**.
 - Pour copier seulement les lignes d'intérêt, sélectionner manuellement les lignes, puis cliquer sur **Edit > Copy**.
- Si les largeurs des colonnes sont ajustées, ces largeurs sont alors restaurées au prochain affichage du **tableau de statistiques**.
- Le format et la précision sont les mêmes que ceux du **tableau de résultats**.
- Le **Group by Concentration for Standards and QCs** est basé sur la valeur **Displayed Actual Concentration**, et non sur **Actual Concentration** stockée dans le **tableau de résultats**. Si la concentration Std 1 est de 0,001, que la concentration Std 2 est de 0,005 et que le format d'affichage est 0, les concentrations Std 1 et Std 2 sont alors regroupées, car les deux sont traitées comme 0. Pour les regrouper séparément, dans la boîte de dialogue **Column Settings**, définir la précision pour **Analyte Concentration** sur 0,000. Si Std 1 est de 0,500 et Std 2 de 0,499, définir alors la précision sur 0,00 pour les regrouper.

Menu accessible par clic droit dans Statistics Table

Cliquer avec le bouton droit dans le **tableau de statistiques** pour accéder à la commande **Use Peak**. Utiliser cette commande pour définir le champ **Used** pour l'échantillon et l'analyte correspondant à la cellule sélectionnée dans l'une des colonnes **Value**. Avant de cliquer avec le bouton droit pour accéder au menu, cliquer sur la cellule appropriée dans l'une des colonnes **Value** pour la sélectionner.

Utiliser Metric Plots pour tracer les valeurs dans une colonne du tableau de résultats en fonction du numéro de ligne ou d'une autre colonne. Ces tracés constituent une aide précieuse pour l'examen visuel des données, tout particulièrement si les utilisateurs ne veulent pas examiner manuellement chaque chromatogramme au moyen du volet Peak Review.

Générer un tracé métrique

1. Sélectionner une ou deux colonnes dans le **tableau de résultats**.
2. Cliquer sur **Show Metric Plot**.

Si une colonne est sélectionnée, le tracé obtenu présente alors les valeurs de la colonne en fonction du numéro de ligne dans le tableau. Si deux colonnes sont sélectionnées, les valeurs des colonnes sont alors tracées l'une par rapport à l'autre. La première des deux colonnes à sélectionner contient les valeurs x et la seconde contient les valeurs y.

Save Metric Plot Settings

1. Ouvrir un tracé métrique en sélectionnant une colonne, puis cliquer sur **Show Metric Plot**.
2. Cliquer avec le bouton droit sur le tracé, puis cliquer sur **Save Setting**.

Cela permet à l'utilisateur de générer rapidement les **Metric Plots** qui sont fréquemment utilisés sans avoir à sélectionner la colonne correspondante à chaque fois.

Conseils relatifs aux tracés métriques

- Si l'utilisateur clique avec le bouton gauche de la souris sur un point de données, la ligne correspondante du tableau de résultats est alors automatiquement sélectionnée et apparaît. Si le volet Peak Review est ouvert, il se met alors également à jour pour afficher le chromatogramme correspondant. C'est un moyen pratique de procéder à un examen des pics pour les données aberrantes.
- Si plusieurs composants de la liste Components & Groups sont sélectionnés, les tracés de tous les composants sont alors superposés. Dans le cas contraire, le tracé du composant sélectionné est affiché.
- La zone de titre affiche toujours le nom du tracé actif. Si des tracés pour plusieurs composants sont superposés, basculer alors le titre entre l'affichage des informations pour tous les tracés ou seulement le tracé actif en double-cliquant n'importe où dans la zone de titre. Activer un tracé spécifique en cliquant sur le point de couleur à gauche du titre correspondant.

- Enregistrer les paramètres du tracé métrique pour les réutiliser. Cliquer avec le bouton droit de la souris sur le tracé métrique, puis cliquer sur **Save Settings As**.

Menu accessible par clic droit dans Metric Plot

Cliquer avec le bouton droit dans Metric Plot pour accéder à un menu contextuel. Les commandes suivantes sont disponibles.

Tableau 12-1 Options du menu contextuel Metric Plot

Option de menu	Description
Regression	Affiche une droite de régression sur le tracé métrique. <ul style="list-style-type: none">• Regression Type• Weighting Type• Include standard deviation lines and Multiplier Voir Boîte de dialogue Regression à la page 81 .
Display "N/A" as 0.0	Lorsque cette option est sélectionnée, les valeurs qui ne sont pas numériques sont tracées en utilisant zéro comme valeur y. Sinon, ces points sont omis du tracé. Par exemple, la valeur Retention Time est communiquée comme N/A pour les pics qui n'ont pas pu être intégrés. Pour cette fonction, un point est présent pour ces pics afin que l'utilisateur puisse afficher ces échantillons potentiellement problématiques et les lier au volet Peak Review en cliquant sur le point.
Show Legend	Modifie la légende qui annote les symboles de point utilisés pour les divers types d'échantillon.
Label Active Series (using sample names)	Modifie l'étiquetage des points de données à l'aide du texte provenant du champ Sample Name du tableau de résultats . En présence de plusieurs tracés superposés, seul le tracé actuellement actif est étiqueté.
Use Percent Y-Axis	Modifie le fait que l'axe des y utilise des unités absolues ou un pourcentage de la valeur maximum de y. En cas d'utilisation de la fonction de pourcentage, le pourcentage est calculé indépendamment pour chaque tracé superposé. Cette fonction peut être utilisée pour tracer les tracés superposés de multiples composants et la réponse pour la métrique des composants est significativement différente.
Start Y-Axis at Zero	Modifie le fait que l'axe des y commence à y=0 ou à la valeur minimum de y ayant besoin d'être tracée.
Connect Points With Lines	Modifie le fait que les points de données sont connectés par des lignes.
Save Setting	Si le tracé est actuellement associé à un paramètre, cette fonction enregistre alors les fonctions actuelles. Sinon, cette fonction se comporte comme la fonction Save Setting As .

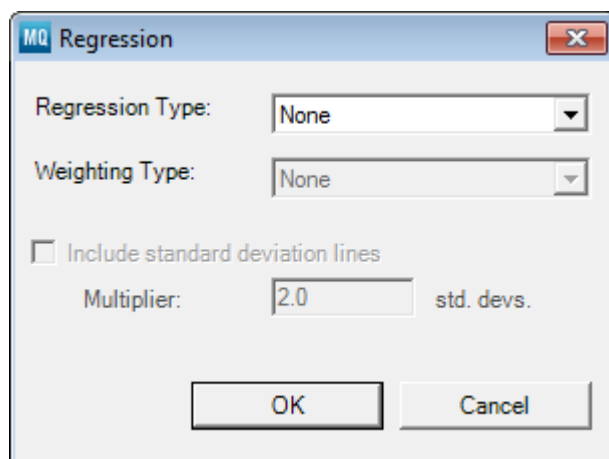
Tableau 12-1 Options du menu contextuel Metric Plot (Suite)

Option de menu	Description
Save Setting As	Si les mêmes colonnes sont fréquemment tracées, l'utilisateur peut alors enregistrer les options de traçage comme un paramètre. Cela permet à l'utilisateur de générer rapidement un tracé, même si les colonnes requises ne sont pas actuellement visibles dans le tableau de résultats . En plus des colonnes, les diverses options de traçage sont enregistrées. Après l'enregistrement d'un paramètre, le nom est affiché dans le menu Metric Plot .
Delete Setting	Si le tracé actuel est associé à un paramètre, utiliser alors cette fonction pour supprimer le paramètre.

Boîte de dialogue Regression

Cliquer pour afficher une droite de régression sur le tracé métrique.

Figure 12-1 Boîte de dialogue Regression



Tracés métriques

Étiquette	Description
Regression Type	Contient les divers types de régression (linéaire, quadratique, etc.). Le type de régression Mean produit une ligne horizontale à l'emplacement de la valeur y moyenne pour tous les points de données et le type de régression Median produit une ligne horizontale à l'emplacement de la valeur y médiane pour les points. De plus, il existe une fonction None qui supprime toute régression précédente.
Weighting Type	Les divers types de pondération sont décrits dans Facteurs de pondération à la page 128 .
Include standard deviation lines and Multiplier	Ces options sont disponibles lorsque le type de régression Mean ou Median est sélectionné. Lorsqu'il est sélectionné, des lignes horizontales en pointillés supplémentaires sont ajoutées pour tracer le nombre spécifié d'écarts-types au-dessus et au-dessous de la ligne principale. Utiliser cette option pour afficher les points qui sont, par exemple, à plus de deux ou trois écarts-types de la moyenne.

Utiliser la fenêtre **Quantitation Method Editor** pour créer une méthode de quantification ou modifier une méthode existante.

Le flux de travail type consiste à créer des méthodes de quantification à l'aide de l'assistant **New Results Table**. L'utilisateur peut toutefois utiliser **Quantitation Method Editor** pour créer une méthode de quantification pouvant être utilisée selon les besoins.

Onglet Components

Cliquer avec le bouton droit dans l'onglet **Components** pour accéder à un menu contextuel. Les commandes suivantes sont disponibles.

Tableau 13-1 Options du menu contextuel Components

Option de menu	Description
Find Component by Name	Permet de sélectionner le composant dont le nom correspond au texte. Le texte exact n'est pas nécessaire pour trouver une correspondance. Cela permet de sélectionner un composant spécifique s'il y en a beaucoup. Si aucune ligne n'est sélectionnée comme ligne initiale dans le tableur, la recherche commence alors à la première ligne. Dans le cas contraire, la recherche débute à la ligne suivant celle qui est sélectionnée et revient ensuite au début. Utile s'il existe plusieurs composants dont le nom contient le texte. Si la première recherche ne permet pas de trouver le composant, renouveler la recherche en laissant le premier composant sélectionné, afin de trouver une autre correspondance dans le tableau.
Insert Row Above	Insère une ligne vide juste au-dessus de la ligne actuellement sélectionnée.
Delete Selected Rows	Supprime du tableau les lignes actuellement sélectionnées.
Sum Multiple Ions	Additionne les chromatogrammes de plusieurs transitions MRM ou les gammes de masse de balayages complets. Une fois la commande sélectionnée, d'autres colonnes de masse sont ajoutées au tableau Components . Les masses sélectionnées pour une ligne donnée sont utilisées dans la structure du XIC additionné pour l'analyte ou l'étalon interne correspondant. Il est recommandé de toujours sélectionner cette fonction.
Groups	Voir Sous-menu Groups à la page 84 .
Internal Standards	Voir Sous-menu Internal Standards à la page 86 .

Sous-menu Groups

Tableau 13-2 Options du menu Groups

Option de menu	Description
Using Constant Group Size	Ouvre la boîte de dialogue Set Automatic Groups qui est utilisée pour renseigner automatiquement la colonne Group en utilisant le nom du premier composant pour chaque groupe en supposant que chaque groupe contient le même nombre de composants. Voir Boîte de dialogue Set Automatic Groups à la page 85 .
By Filling Down Existing Groups	Indique automatiquement le même nom de groupe pour un certain nombre de composants séquentiels. Pour utiliser la commande, spécifier manuellement le nom de groupe pour le premier composant de chaque groupe distinct, puis sélectionner la commande. Les noms de groupe spécifiés sont indiqués jusqu'à tout composant suivant pour lequel le nom de groupe est vide. Seules les lignes dont le nom a été renseigné sont prises en considération.
Using Q1 Masses	Uniquement disponible pour les expériences MRM. Utilisé pour renseigner la colonne Group à l'aide de la masse de Q1. Utile si la même masse Q1 a été spécifiée pour plusieurs transitions pour le même composé et si différents fragments ont été surveillés. Si les composants sont nombreux et si certains partagent par coïncidence la même masse de Q1, ils sont alors attribués au même groupe.
Using Q3 Masses	Uniquement disponible pour les expériences MRM. Utilisé pour renseigner la colonne Group à l'aide de la masse de Q3. Cela est utile si différentes formes isotopiques d'un composé ont été surveillées (avec des masses Q1 différentes), mais si une masse Q3 constante a été surveillée. Si les composants sont nombreux et si certains partagent par hasard la même masse Q3, ils sont alors attribués au même groupe.
Using (Q1 – Q3) Mass Differences	Permet de renseigner la colonne Group en utilisant la différence entre les masses Q1 et Q3 (uniquement disponible pour les expériences MRM). Peut être utile si différentes formes isotopiques d'un composé ont été surveillées (avec des masses Q1 différentes), mais si un fragment Q3 constant contenant tous les isotopes modifiés a été surveillé. Si les composants sont nombreux et si certains partagent par coïncidence la même différence de masse, ils sont alors attribués au même groupe.
Add Group to Start of Component Name	Ajoute le nom du groupe au début du nom de l'analyte ou de l'étalon interne. Peut être utile si les noms initiaux ne sont pas uniques.

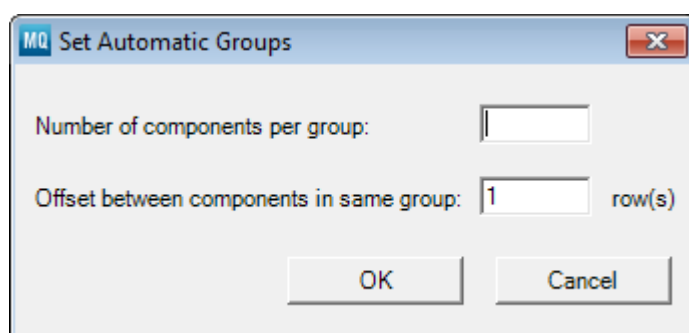
Tableau 13-2 Options du menu Groups (Suite)

Option de menu	Description
Remove Group from Start of Component Name	Supprime le nom du groupe, s'il est présent, du début du nom de l'analyte ou de l'étalon interne.
Append Summed Ions for Groups	Lorsque l'option Sum Multiple Ions est activée, cette commande annexe un nouveau composant pour chaque groupe qui utilise la somme des chromatogrammes pour le groupe. Les composants distincts sont ajoutés pour les analytes et les étalons internes pour les groupes, s'ils sont tous deux définis. Le nom des nouveaux analytes est par défaut le nom du groupe et, pour les étalons internes, le nom du groupe avec .IS annexé. Si la somme des composants est requise, et pas les composants de masse simple d'origine, ces derniers peuvent alors être supprimés.

Boîte de dialogue Set Automatic Groups

Alimente automatiquement la colonne Group en utilisant le nom du premier composant pour chaque groupe, en supposant que chaque groupe contienne le même nombre de composants.

Figure 13-1 Boîte de dialogue Set Automatic Groups



Étiquette	Description
Number of components per group	Nombre total de composants pour chaque groupe.
Offset between components in same group	Décalage en lignes entre des composants séquentiels d'un même groupe. Cette valeur est généralement de 1, mais elle peut être supérieure si les composants du groupe ne se trouvent pas sur des lignes voisines.

Sous-menu Internal Standards

Tableau 13-3 Options du menu Internal Standards

Option de menu	Description
Set IS for All Analytes	Définit le champ IS Name pour toutes les lignes d'analyte. Si un étalon interne a été défini, son nom est alors utilisé. Dans le cas contraire, sélectionner l'étalon interne requis dans la boîte de dialogue qui s'ouvre.
Set IS for Selected Analytes	Si le même étalon interne est utilisé pour plusieurs analytes, fournir alors un raccourci pour définir séparément les étalons internes pour chaque analyte individuellement. Voir Définir l'étalon interne pour les analytes sélectionnés à la page 86 .
Set Last Component of Group as IS	Utiliser cette commande si les divers composants ont été assignés à des groupes soit manuellement, soit en utilisant les éléments du sous-menu Set Groups. La case IS du dernier composant de chaque groupe est cochée et tous les autres composants du groupe, qui sont supposés être des analytes, sont définis pour utiliser ce dernier composant comme étalon interne.
Set for All Groups as for Selected Group	Permet de copier l'organisation des étalons internes pour le groupe correspondant à la ligne actuellement sélectionnée dans tous les autres groupes de manière symétrique. Cela est utile s'il existe plusieurs étalons internes pour chacun des groupes. Voir Définir pour tous les groupes comme pour le groupe sélectionné à la page 86 .

Définir l'étalon interne pour les analytes sélectionnés

1. S'assurer que l'étalon interne requis est défini (les cases à cocher **Name** et **IS** sont sélectionnées).
2. Sélectionner les lignes des analytes pour lesquels l'étalon interne doit être utilisé.
3. Sélectionner l'élément de menu.

Si plusieurs étalons internes sont définis, une boîte de dialogue s'ouvre alors pour inviter l'utilisateur à sélectionner l'étalon interne requis.

Définir pour tous les groupes comme pour le groupe sélectionné

1. Attribuer des groupes.
2. Indiquer manuellement quels composants sont des étalons internes en sélectionnant la case dans la première colonne pour le premier groupe.
3. Indiquer manuellement l'étalon interne pour chaque analyte pour le premier groupe en faisant une sélection dans la zone combinée dans la colonne **IS Name**.
4. Sélectionnez n'importe quelle ligne correspondant au premier groupe.
5. Cliquer sur **Set for All Groups as for Selected Group**.

Onglet Integration

Cliquer avec le bouton droit dans l'onglet **Integration** pour accéder à un menu contextuel. Les commandes suivantes sont disponibles.

Tableau 13-4 Options du menu contextuel de l'onglet Integration & Regression

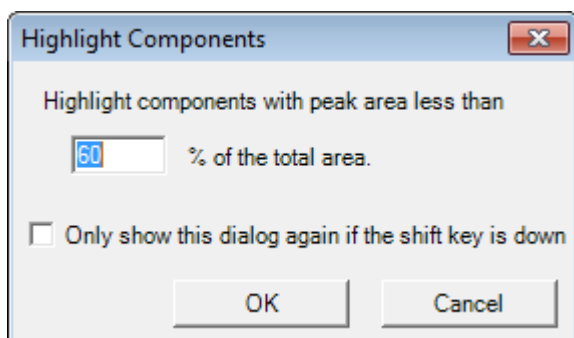
Option de menu	Description
Find Component by Name	Similaire à la commande disponible dans l'onglet Components , la différence tient au fait qu'au lieu de sélectionner des lignes dans le tableur Components , on sélectionne des éléments individuels dans la liste des composants.
Highlight Components with Uncertain RT	Permet de mettre en surbrillance les composants pour lesquels le temps de rétention par défaut attendu (mesuré comme le temps de rétention du pic dont l'intensité est la plus forte pour chaque chromatogramme) est incorrect. S'il n'y a que quelques composants, passer chacun d'eux en revue individuellement et ne pas utiliser cette commande. Cependant, si les composants sont nombreux, utiliser cette commande pour contrôler visuellement uniquement ceux pour lesquels il y a plusieurs pics significatifs sur le chromatogramme. Voir Boîte de dialogue Highlight Components à la page 88 .
Home Graph Axes	Ramène le graphique agrandi à son affichage initial dans lequel toutes les données sont visibles.
Overlay Other Components for Group	Utiliser cette commande pour superposer les chromatogrammes si divers composants ont été affectés à des groupes et si les composants affectés à un groupe donné doivent avoir le même temps de rétention. Par exemple, s'ils représentent différentes transitions MRM du même composé réel. Lorsque cette fonction est sélectionnée, le chromatogramme du composant en cours, dont les paramètres d'intégration sont en cours de définition, est dessiné sous forme d'un tracé bleu continu et son aire de pic intégrée est présentée. Les chromatogrammes, et non l'aire de pic intégrée, pour les autres composants du même groupe sont superposés à l'aide d'un tracé pointillé.
Update Retention Times	Permet de réinitialiser les temps de rétention attendus pour une méthode de quantification créée au préalable. Si l'utilisateur ouvre une méthode de quantification existante, puis sélectionne Set New Typical Sample , les chromatogrammes présentés correspondent au nouvel échantillon, mais les temps de rétention attendus restent inchangés. Pour chaque composant, le temps de rétention attendu est mis à jour pour coïncider avec le temps de rétention du pic dont l'intensité est la plus forte dans une fenêtre à la largeur spécifiée centrée sur le temps de rétention attendu d'origine. Voir Boîte de dialogue Update Retention Time à la page 88 .
Set New Typical Sample	Permet d'associer un échantillon représentatif à la méthode. Cela peut affecter les sélections disponibles dans la colonne Q1/Q3 (pour les expériences MRM) ou dans la colonne Start - Stop (pour les expériences de profil). Cela affecte également les chromatogrammes présentés sous l'onglet Integration .

Boîte de dialogue Highlight Components

Les noms des composants pour lesquels le pic automatiquement sélectionné ne représente pas au moins le pourcentage spécifié de l'aire de pic totale dans le chromatogramme sont indiqués en gras. Par exemple, dans la [Figure 13-2](#), si le pic sélectionné par défaut représente 70 % à 100 % de l'aire totale, il n'est alors pas marqué. Examiner uniquement ces pics en les sélectionnant dans la liste des composants.

Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, la boîte de dialogue n'apparaît alors pas à la prochaine sélection de la commande, sauf si vous appuyez sur **Maj**. Le paramètre du pourcentage de l'aire totale précédemment spécifié est automatiquement utilisé.

Figure 13-2 Boîte de dialogue Highlight Components



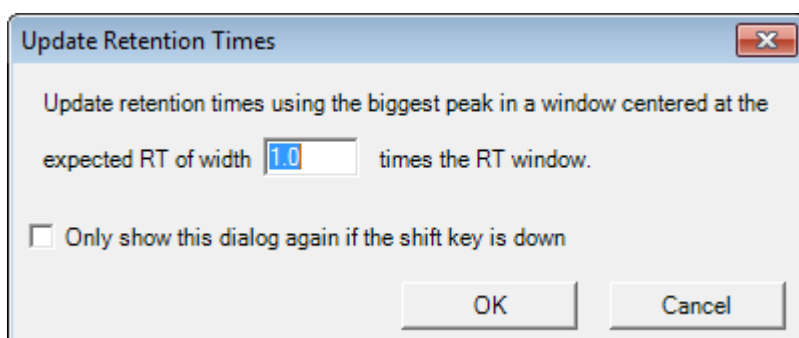
Boîte de dialogue Update Retention Time

Permet de réinitialiser les pointes de retenue attendues pour une méthode de quantification créée précédemment. Si une méthode de quantification existante est ouverte et que Set New Typical Sample est sélectionné, les chromatogrammes affichés correspondent alors au nouvel échantillon, mais les pointes de retenue attendues, restent inchangées.

Pour chaque composant, le temps de rétention attendu est mis à jour pour coïncider avec le temps de rétention du pic dont l'intensité est la plus forte dans une fenêtre à la largeur spécifiée centrée sur le temps de rétention attendu d'origine.

Si la case **Only show this dialog again if the shift key is down** est cochée, la boîte de dialogue n'apparaît alors pas à la prochaine sélection de la commande, sauf si vous appuyez sur **Maj**. Le temps de rétention précédemment spécifié est automatiquement utilisé.

Figure 13-3 Boîte de dialogue Update Retention Times



Onglet Outlier Settings

Cliquer avec le bouton droit dans l'onglet **Outlier Settings** pour accéder à un menu contextuel. Les commandes suivantes sont disponibles.

Étiquette	Description
Accuracy for Standards	Modifie la tolérance de précision pour les échantillons Standard .
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Modifie la tolérance de précision pour les échantillons Standard à l'aide d'une valeur correspondant aux procédures d'exploitation normalisées du laboratoire.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Modifie la tolérance de précision pour l' étalon doté de la concentration la plus faible si la procédure d'exploitation normalisée du laboratoire indique une tolérance différente pour cet étalon .
Accuracy for QCs	Modifie la tolérance de précision pour les échantillons Quality Control .
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Modifie la tolérance de précision pour les échantillons Quality Control à l'aide d'une valeur correspondant aux procédures d'exploitation normalisées du laboratoire.
Ion Ratio	Uniquement disponible si les composants sont affectés à des groupes. Sélectionner cette option pour utiliser le ratio d'ions de l'aire de pic ou de l'amplitude de pic. L'aire de pic ou l'amplitude de pic est définie lors de la sélection du paramètre de régression pendant le développement de la méthode de quantification.
Calculated Concentration	Lorsque des échantillons Standard dont la concentration est connue sont utilisés, la concentration est rétrocalculée en fonction de la courbe d'étalonnage. Les équations de régression décrivent la manière dont la régression est effectuée pour les différents types de régression et la pondération.
Component	Analytes ou étalons internes pour tous les échantillons.
IS	Étalon interne sélectionné. Uniquement disponible si la case Ion Ratio est cochée.

Étiquette	Description
Group	Les composants possédant le même temps de rétention (c'est-à-dire des transitions différentes pour le même composé) peuvent être regroupés. Uniquement disponible si la case Ion Ratio est cochée.
Ion Ratio Tolerance (%)	Utiliser le paramètre par défaut ou modifier ce paramètre en fonction des procédures d'exploitation normalisées du laboratoire. Uniquement disponible si la case Ion Ratio est cochée.
Lower Limit of Calculated Concentration	Entrer la limite inférieure de la plage de concentration acceptable. Tout échantillon dont la concentration calculée est inférieure à cette valeur sera marqué comme présentant une donnée aberrante de concentration.
Upper Limit of Calculated Concentration	Entrer la limite supérieure de la plage de concentration acceptable. Tout échantillon dont la concentration calculée est supérieure à cette valeur sera marqué comme présentant une donnée aberrante de concentration.

Tableau 13-5 Options du menu contextuel Outlier Settings

Étiquette	Description
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Applique la limite inférieure de la concentration calculée à tous les analytes si tous les analytes présentent les mêmes critères.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Applique la limite supérieure de la concentration calculée à tous les analytes si tous les analytes présentent les mêmes critères.

Tutoriel sur le flux de travail de l'analyse de quantification

14

Objectifs:

- Apprendre à traiter les données à l'aide de l'algorithme SignalFinder™.
- Apprendre à traiter les données à l'aide de l'algorithme d'intégration MQ4.
- Apprendre à utiliser les paramètres des algorithmes d'intégration MQ4 et SignalFinder™.

Les méthodes de quantification comprennent une série d'instructions expliquant comment quantifier les pics sélectionnés pour l'intégration. Dans ce tutoriel, une méthode de quantification est créée en même temps que le tableau de résultats.

Sont également incluses des tâches supplémentaires qui peuvent servir à manipuler les données dans le **tableau de résultats** ainsi que des informations sur les icônes du logiciel disponibles.

Remarque : Les utilisateurs de l'édition du registre d'audit et sécurité peuvent uniquement utiliser la structure de dossiers Analyst Data. Les utilisateurs peuvent uniquement traiter les fichiers de données qui se trouvent dans la structure de fichiers du logiciel Analyst® MD. Si la structure des fichiers et des dossiers n'est pas conservée, l'utilisateur pourrait alors ne pas pouvoir afficher les chromatogrammes.

À propos des courbes d'étalonnage

Une courbe d'étalonnage (également appelée courbe de concentration standard) est une méthode qui permet de déterminer la concentration d'une substance dans un échantillon **Unknown** en comparant cet échantillon **Unknown** à un ensemble d'échantillons **Standard** dont la concentration est connue. La courbe d'étalonnage est un tracé de la réponse de l'instrument (le signal analytique) aux modifications de la concentration de l'analyte (la substance à mesurer). L'utilisateur prépare une série d'échantillons **Standard** sur une plage de concentrations proches de la concentration attendue de l'analyte dans l'échantillon **Unknown**.

Conditions préalables

Dans le logiciel Analyst® MD, sélectionner le projet **Example**.

Le fichier Mix_batch_1. Wiff est disponible dans le dossier Analyst Data\Projects\Example\Data\Triple Quad.

Modifier les colonnes affichées dans le tableau de résultats

Utiliser cette procédure pour afficher ou masquer des colonnes dans le **tableau de résultats** ou modifier la précision du format des nombres. Pour les champs numériques, utiliser le format 0.00 pour les notations

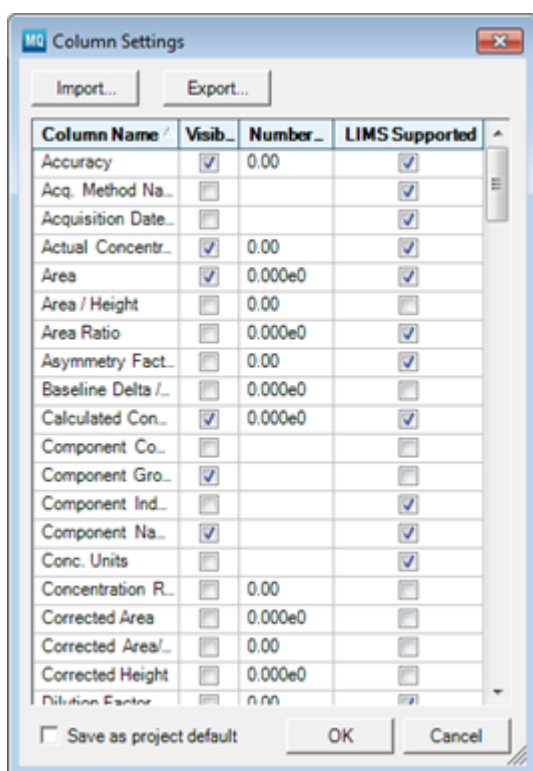
Tutoriel sur le flux de travail de l'analyse de quantification

non scientifiques et le format 0.00e0 pour les notations scientifiques. Modifier les points décimaux pour indiquer la précision des nombres présentés. Seul un point (.) peut être utilisé comme séparateur décimal. Les regroupements de chiffres ne sont pas pris en charge.

Remarque : Certaines colonnes critiques des informations sur les échantillons comme **Sample Name**, **Sample ID**, etc. ne doivent pas être masquées lorsque les utilisateurs personnalisent les paramètres de colonne du **tableau de résultats**.

1. Cliquer avec le bouton droit dans le **tableau de résultats**, puis cliquer sur **Column Settings**.

Figure 14-1 Boîte de dialogue Column Settings



2. Sélectionner ou effacer la case à cocher dans la colonne **Visible** selon les besoins.
3. Dans la colonne **Number Format**, modifier le format en optant pour entier ou notation scientifique. Le nombre de points décimaux à afficher peut également être modifié.

Conseil ! Pour appliquer les paramètres de colonne à tous les **tableaux de résultats** du projet, cocher la case **Save as project default**.

4. Cliquez sur **OK**.

Traiter des données avec l'algorithme d'intégration SignalFinder™

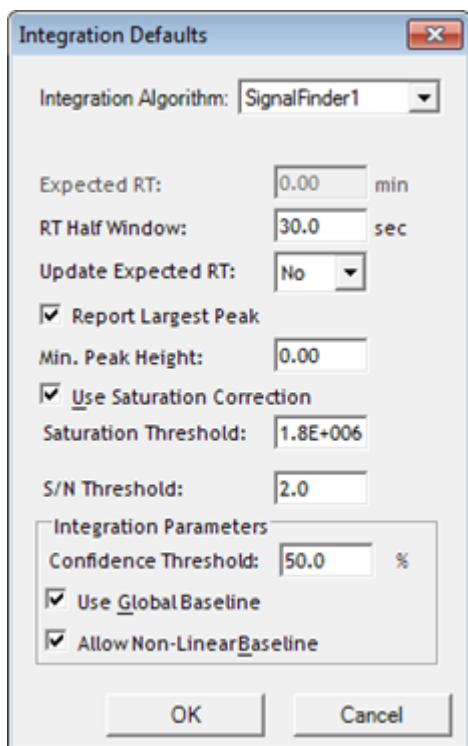
À l'inverse de l'algorithme d'intégration MQ4 ou des algorithmes disponibles dans le logiciel Analyst® MD, le SignalFinder™ crée un modèle de pic en utilisant l'échantillon sélectionné lors de la création d'une méthode de quantification. Ce modèle décrit la forme du pic sélectionné utilisé par l'algorithme. Lors de l'intégration, l'algorithme d'intégration SignalFinder applique ce modèle aux autres échantillons en étirant ou en penchant l'échantillon. Cela tient compte du fait que la forme du pic est similaire, mais pas identique, pour un analyte ou un étalon interne donné pour plusieurs échantillons.

Définir les paramètres d'intégration des pics

Utiliser la procédure suivante pour vérifier ou définir l'algorithme d'intégration qui traite les données. Voir [À propos de l'algorithme d'intégration SignalFinder à la page 109](#).

1. Dans le logiciel Analyst® MD, dans la barre de **Navigation**, sous **Companion Software**, double-cliquer sur **MultiQuant 3.0.3**.
2. Cliquer sur **Edit > Project Integration Defaults**.
3. Dans la boîte de dialogue **Integration Defaults**, sélectionner **SignalFinder1** dans la liste **Integration Algorithm**.
4. Cocher la case **Use Saturation Correction**, puis définir la valeur **Saturation Threshold** sur **1.8E+006**.

Figure 14-2 Boîte de dialogue Integration Defaults



Remarque : Les pics au-dessus du **Saturation Threshold** sont considérés comme saturés. Cette valeur est fonction du détecteur.

5. Cliquer sur **OK**.

Créer un tableau de résultats

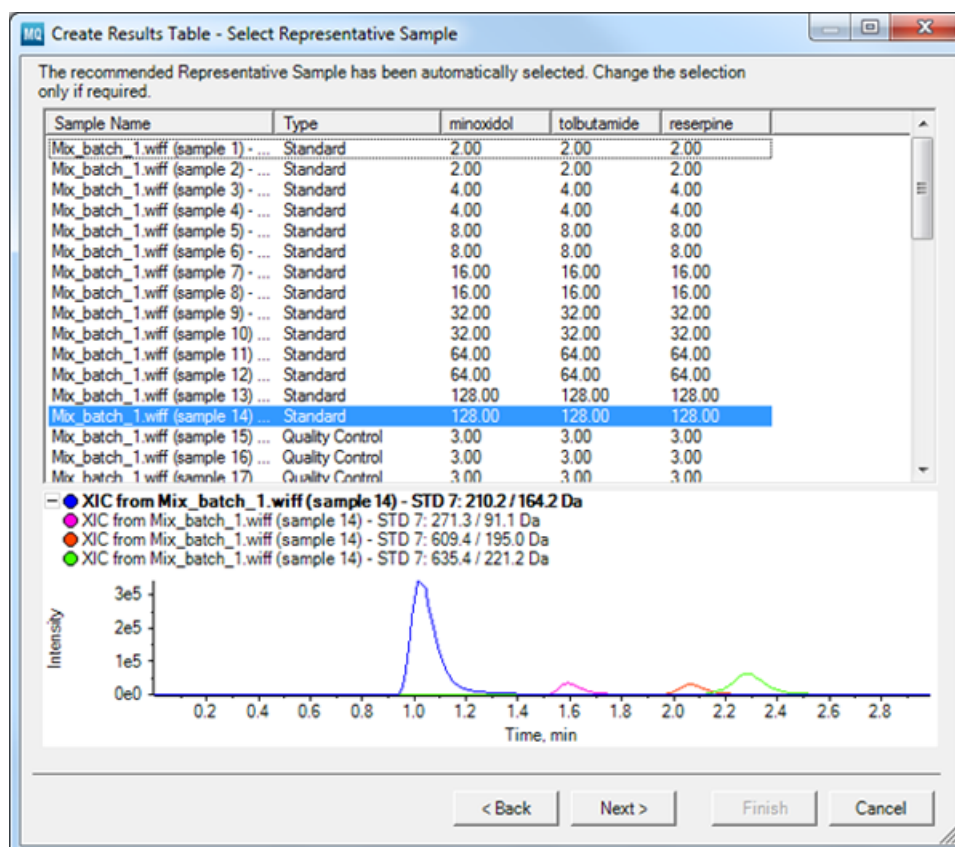
1. Cliquer sur **File > New Results Table**.
2. Dans la page **Create Results Table - Select Samples**, développer le dossier **Example Data**, puis faire glisser le fichier **Mix_batch_1.wiff** dans le volet **Selected**.
3. Cliquer sur **Next**.
4. Cliquer sur l'option **Create New Method (SignalFinder1)**.
5. Cliquer sur **New**.
6. Entrer un nom pour la méthode dans la boîte de dialogue **Save Quantitation Method As**, puis cliquer sur **Save**.
7. Cliquer sur **Next**.

Dans la page **Create Results Table - Select Representative Sample**, un échantillon représentatif a été sélectionné. Le logiciel recommande un échantillon représentatif d'après la sélection d'un

chromatogramme qui offre la meilleure opportunité de sélection de paramètres d'intégration qui correspondent au lot d'échantillons entier. Il est recommandé de sélectionner un échantillon Standard ou QC non saturé et fortement concentré (TIC inférieur à 1E+006 cps).

Conseil ! Lors de l'examen des pics, un autre échantillon permettant de construire un modèle de pic pendant l'examen des pics peut être sélectionné.

Figure 14-3 Page Create Results Table - Select Representative Sample



8. Dans la page **Create Results Table - Define Components**, confirmer les analytes et les étalons internes.
9. Cliquer sur **Next**.

Figure 14-4 Page Create Results Table - Define Components

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

Experiment: MRM (4 transitions)

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

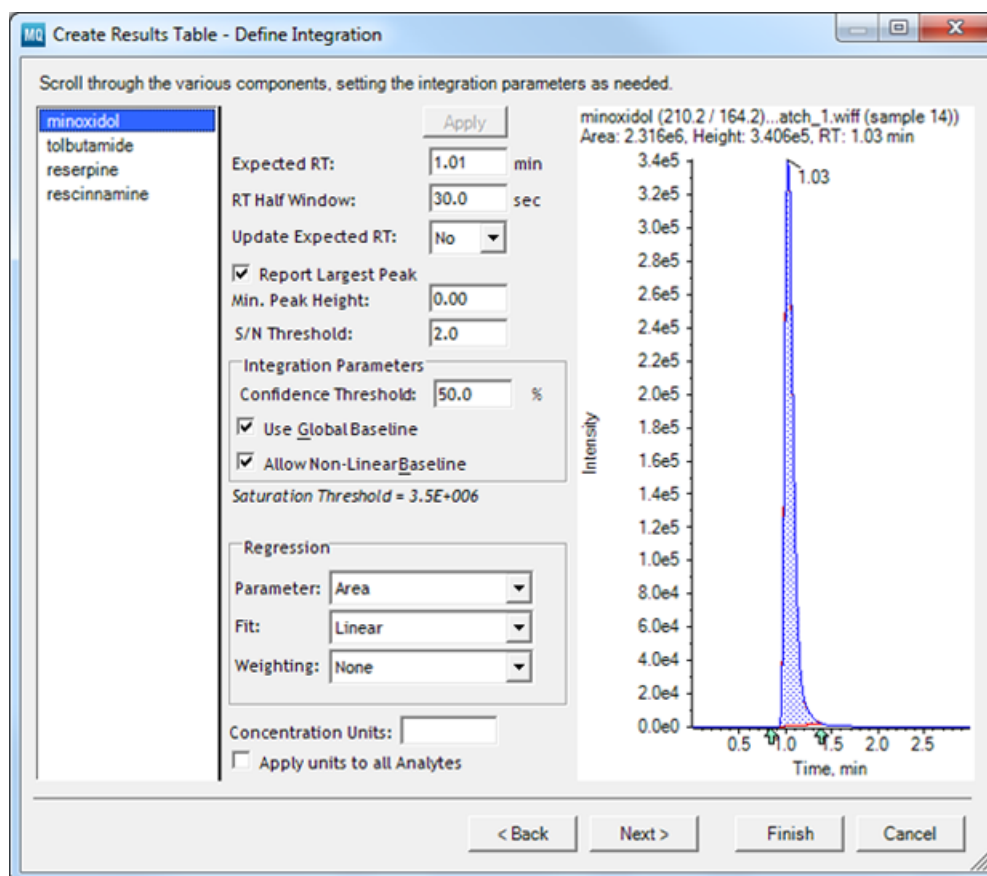
< Back Next > Finish Cancel

Remarque : Lorsqu'une méthode d'acquisition est créée, si le nom du composant est inclus dans la colonne **ID** du tableau de gammes de masses, ce nom est alors renseigné automatiquement dans la page **Define Components**. Si le nom du composant n'a pas été inclus, mettre alors à jour manuellement le tableau avec le nom du composant.

Dans la page **Create Results Table - Define Integration**, les analytes et les étalons internes sont affichés sur le côté gauche. Les paramètres d'intégration actuels ont été appliqués à l'échantillon représentatif et le chromatogramme s'affiche.

Les composants de l'échantillon représentatif précédemment sélectionnés sont affichés dans le volet **Integration**. Les pics de cet échantillon représentatif sont trouvés et intégrés à l'aide des paramètres qui ont été définis dans la boîte de dialogue **Integration Defaults**.

Figure 14-5 Page Create Results Table - Define Integration



Le cas échéant, ajuster les paramètres de recherche de pic et les positions des flèches vertes sur l'axe X des chromatogrammes. Cela permet à l'utilisateur de définir avec plus de précision la position de début et la position de fin requises de l'intégration des pics. En fait, il s'agit d'une méthode visuelle d'ajustement de deux paramètres de recherche de pic qui sont enregistrés avec la méthode de quantification et appliqués à tous les pics à intégrer. Le logiciel restreint les limites de ces paramètres dans ce qu'il considère être des limites raisonnables pour l'étendue du pic.

Si le chromatogramme comporte plusieurs pics et que le pic correct n'a pas été sélectionné automatiquement, faire alors glisser un pic pour définir le temps de rétention attendu. Faire glisser depuis le début réel à la fin réelle du pic et ne pas sélectionner une région très large ou très étroite. La raison en est que l'algorithme suppose que la sélection ne contient qu'un seul pic. Par exemple, si l'ensemble de données est bruyant et que l'algorithme trouve deux pics fusionnés alors qu'un seul pic est présent, sélectionner alors une région contenant les deux pics pour que l'algorithme puisse ajuster ses paramètres internes afin de ne trouver qu'un seul pic. Sinon, si l'algorithme a trouvé un seul pic alors qu'il semble que deux pics voisins ou plus soient présents, sélectionner alors une région couvrant uniquement le pic d'intérêt.

10. Dans le groupe **Integration Parameters**, cocher la case **Global Baseline** pour utiliser le chromatogramme entier comme ligne de base.

Si cette option n'est pas sélectionnée, le logiciel considère alors uniquement une aire étroite autour du pic d'intérêt.

11. Cocher la case **Allow Non-Linear Baseline** pour choisir entre une ligne de base linéaire ou non linéaire. Une référence non linéaire estime la référence sous chaque pic. Une ligne de base linéaire ajuste une ligne entre les points situés au début et à la fin de ce groupe de pics spécifique.
12. Passez en revue l'intégration des pics pour chaque composant en cliquant sur le nom du composant dans le volet de gauche. Ajuster les paramètres d'intégration de manière à ce que le pic représentatif soit correctement intégré.
13. Pour les composants **Minoxidol**, **Tolbutamide** et **Reserpine**, utiliser les paramètres de groupe **Regression** pour définir les éléments suivants, puis cliquer sur **Apply** :
 - **Parameter** : Area
 - **Fit** : Linear
 - **Weighting** : None
14. Définir les **unités de concentration** sur **ng/mL**, puis cocher la case **Apply units to all Analytes**.
15. Cliquer sur **Apply**.
16. Cliquer sur **Finish**.

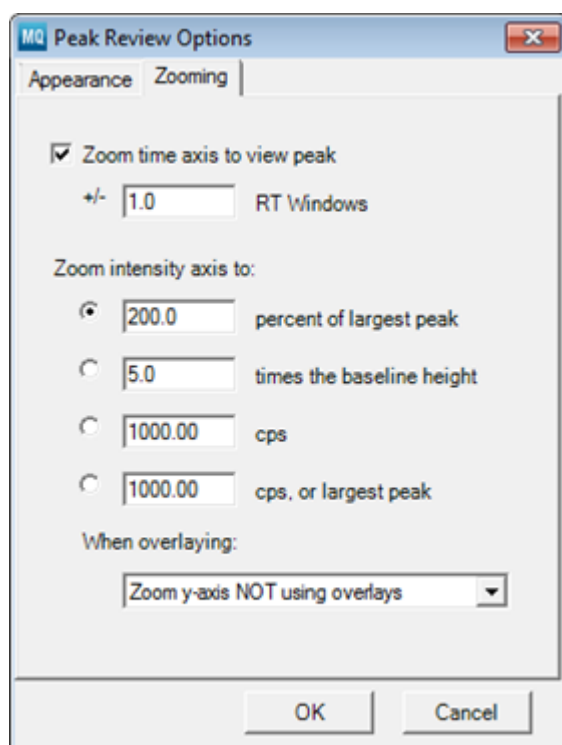
Les fichiers d'échantillon sont automatiquement intégrés et un **tableau de résultats** est généré.

Voir [Examiner les pics à la page 98](#) pour gérer les données du **tableau de résultats**. Voir [Rapports à la page 133](#) pour des informations sur la création de rapports.

Examiner les pics

1. Cliquer sur l'icône **Peak Review**.
2. Cliquer avec le bouton droit dans le tableau, puis cliquer sur **Column Settings**.
3. Rendre la colonne **SF Saturated** visible.
4. Cliquer avec le bouton droit dans le volet **Peak Review**, puis cliquer sur **Options**.
5. Dans l'onglet **Zooming**, modifier **Zoom time axis to view peak** sur **1**.
6. Définir **Zoom intensity axis** sur **200 percent of largest peak**.

Figure 14-6 Peak Review Options



7. Utiliser les flèches rouges pour faire défiler les pics.

Si le détecteur est saturé, le pic semble alors plus plat que la normale. Par exemple, ce pic comporterait un profil rouge autour du pic et **Yes** apparaît dans la colonne **SF Saturated** parce que l'intensité du pic est supérieure au seuil de saturation de $1,8^6$ cps.

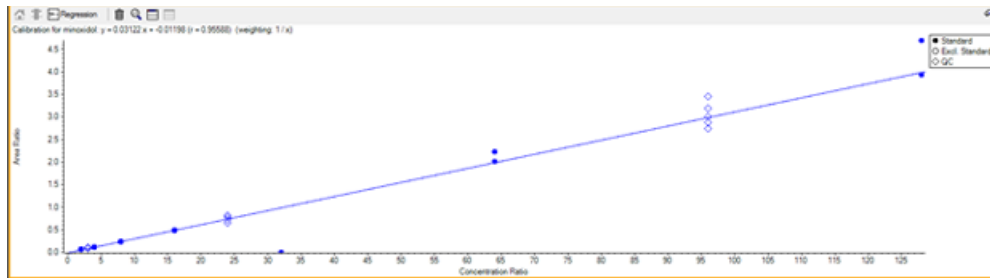
Remarque : L'échantillon représentatif pourrait ne pas convenir pour tous les composants. Un nouvel échantillon représentatif peut être sélectionné pendant l'examen des pics et un nouveau modèle peut être généré.

8. Pour créer un nouveau modèle, sélectionner un nouveau pic, puis cliquer sur l'icône **Update Peak Model**. Sélectionner un pic dont la forme est similaire à celle des autres pics et qui n'est pas saturé.
9. Cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Update Quantitation Method for Component** pour appliquer les modifications à tous les échantillons du composant.

Modifier la courbe d'étalonnage

1. Cliquer sur l'icône **Show Calibration Curve** pour afficher la courbe d'étalonnage.
2. Pour ajouter une légende, cliquer avec le bouton droit dans le volet **Calibration**, puis cliquer sur **Show Legend**.

Figure 14-7 Courbe d'étalonnage



3. Pour ajouter les QC à la courbe, cliquer de nouveau avec le bouton droit dans le volet **Calibration**, puis cliquer sur **Show QCs**.

Conseil ! Pour exclure un point de la courbe, cliquer avec le bouton droit sur un point de la courbe, puis cliquer sur **Exclude**.

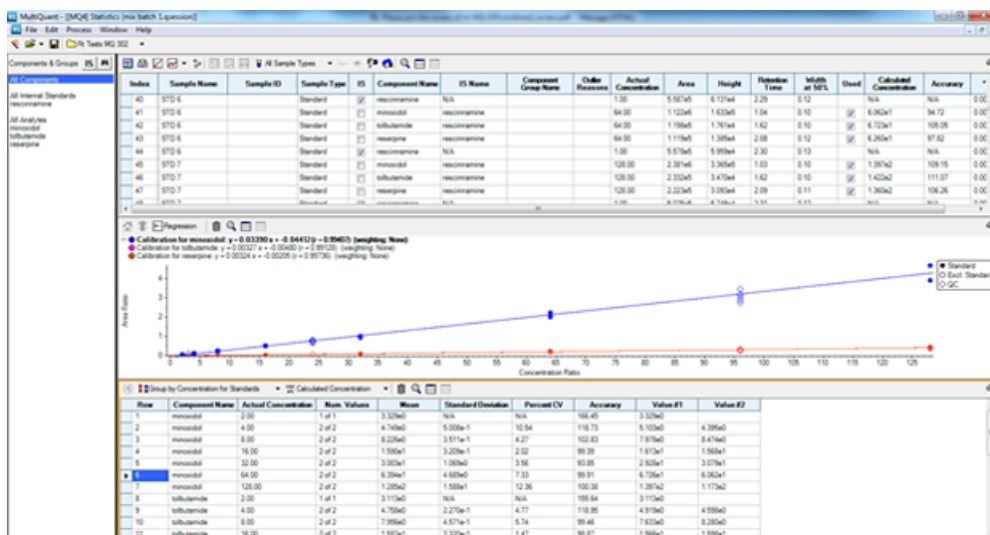
4. Pour confirmer ou modifier les paramètres de régression pour un analyte individuel, sélectionner l'analyte dans la liste **Components and Groups**, puis cliquer sur le bouton **Regression** de la barre d'outils.

Examiner les statistiques des échantillons

Les utilisateurs peuvent examiner les statistiques d'un seul tableau de résultats. L'examen de l'intégration des pics, de la courbe d'étalonnage et des statistiques relatives aux échantillons est un processus itératif.

1. Lorsqu'un tableau de résultats est ouvert, cliquer sur l'icône **Show Statistics Table**.
2. Dans la liste **Sample Grouping**, cliquer sur un élément pour spécifier la manière dont l'échantillon (pour un analyte donné) doit être regroupé pour le calcul des statistiques.

Figure 14-8 Volet Statistics



3. Dans la liste **Metric**, cliquer sur un élément pour spécifier la métrique réelle utilisée pour le calcul des statistiques.
4. Examiner les colonnes **Value**. Les points rayés indiquent des points de données exclus.

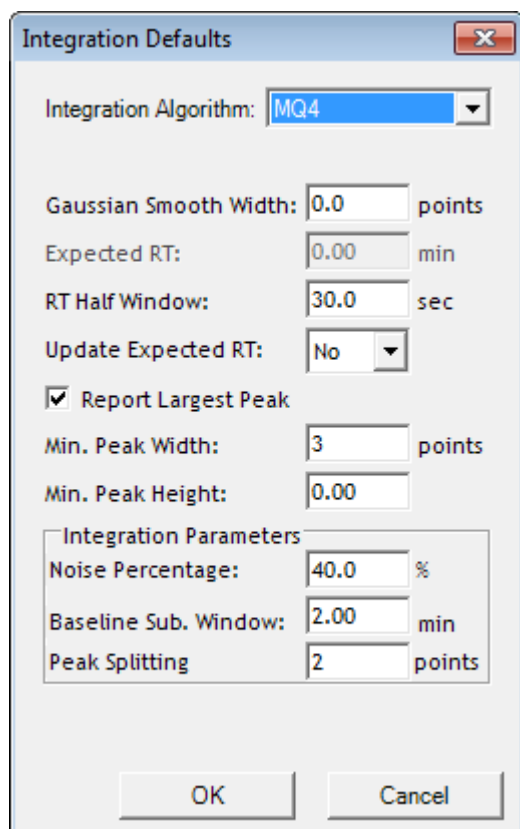
Traiter les données à l'aide de l'algorithme d'intégration MQ4

Définir les paramètres d'intégration des pics

Utiliser la procédure suivante pour vérifier ou définir l'algorithme d'intégration avant de traiter les données. Voir [Paramètres de l'algorithme d'intégration MQ4 à la page 116](#).

1. Dans le logiciel Analyst[®] MD, dans la barre de **Navigation**, sous **Companion Software**, double-cliquer sur **MultiQuant 3.0.3**.
2. Cliquer sur **Edit > Project Integration Defaults**.
3. Dans la boîte de dialogue **Integration Defaults**, dans la liste **Integration Algorithm**, sélectionner **MQ4**.

Figure 14-9 Boîte de dialogue Integration Defaults



4. Le cas échéant, modifier les paramètres du projet, puis cliquer sur **OK**.

L'algorithme d'intégration MQ4 et les paramètres sont utilisés pour les nouvelles méthodes créées dans ce dossier de projet **Example**. Ces paramètres par défaut sont fonction du projet. Pour modifier les paramètres par défaut pour d'autres projets, répéter cette procédure pour le projet sélectionné.

Créer un tableau de résultats

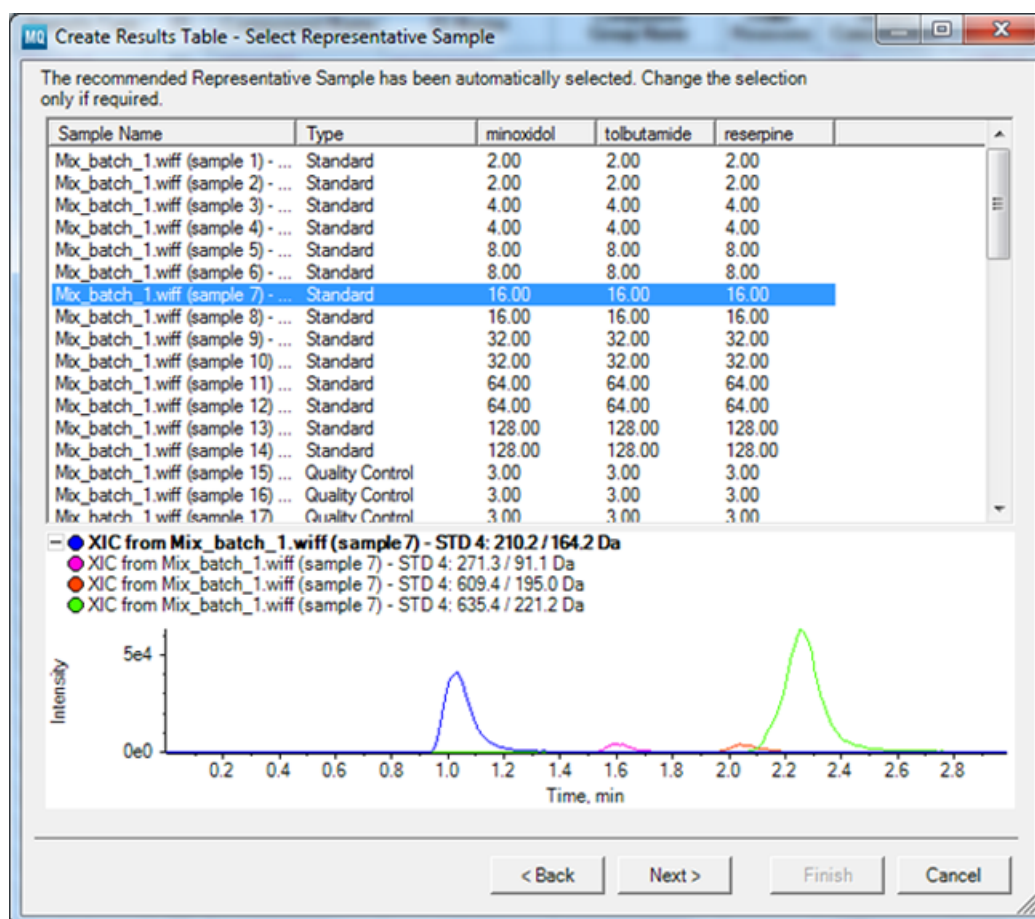
1. Cliquer sur **File > New Results Table**.
2. Dans la page **Create Results Table - Select Samples**, développer le dossier **Example Data**, puis faire glisser le fichier **Mix_batch_1.wiff** dans le volet **Selected**.
3. Cliquer sur **Next**.
4. Cliquer sur l'option **Create New Method (MQ4)**.
5. Cliquer sur **New**.
6. Entrer un nom pour la méthode dans la boîte de dialogue **Save Quantitation Method As**, puis cliquer sur **Save**.

Dans ce tutoriel, une méthode est créée. La création de méthodes permet d'examiner et d'appliquer des paramètres différents pour l'intégration des données.

S'il existe déjà une méthode, sélectionner alors l'option **Choose Existing Method**, puis cocher la case **Edit Method** pour examiner et appliquer des paramètres différents à la méthode. Si la case à cocher **Edit Method** n'est pas sélectionnée, l'assistant génère le tableau de résultats en utilisant la méthode existante.

7. Dans la page **Create Results Table - Select Representative Sample**, un échantillon représentatif a été recommandé et est sélectionné.

Figure 14-10 Page Create Results Table - Select Representative Sample

8. Cliquer sur **Next**.

Le logiciel recommande un échantillon représentatif d'après la sélection d'un chromatogramme qui offre la meilleure opportunité de sélection de paramètres d'intégration qui correspondent au lot d'échantillons entier. Il est recommandé de sélectionner l'échantillon Standard ou QC ayant la deuxième plus basse concentration pour l'algorithme d'intégration MQ4 si les informations relatives à la concentration de l'analyte sont intégrées dans le fichier .wiff. Par exemple, si la plage de concentration est comprise entre un et huit, la deuxième plus basse concentration est alors deux. Si l'échantillon représentatif par défaut n'est pas suffisamment intense, sélectionner alors un autre échantillon représentatif en cliquant sur le bouton **Back** dans l'assistant, puis en sélectionnant un autre échantillon. Il est possible de sélectionner un autre échantillon durant l'examen des pics. Voir [Examiner les pics à la page 106](#).

9. Dans la page **Create Results Table - Define Components**, confirmer les analytes et les étalons internes.

Figure 14-11 Page Create Results Table - Define Components

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

Experiment: MRM (4 transitions)

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

< Back Next > Finish Cancel

10. Cliquer sur **Next**.

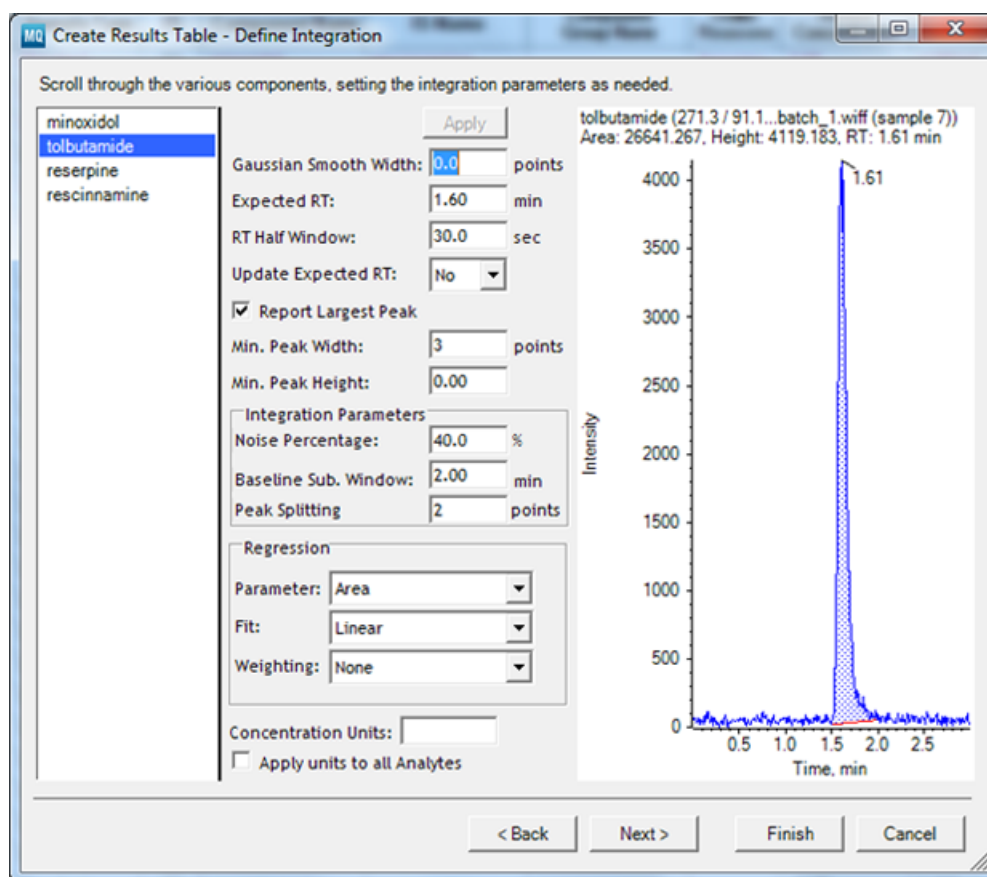
Remarque : Lorsqu'une méthode d'acquisition est créée, si le nom du composant est inclus dans la colonne **ID** du tableau de gammes de masses, ce nom est alors renseigné automatiquement dans la page **Define Components**. Si le nom du composant n'a pas été inclus, mettre alors à jour manuellement le tableau avec le nom du composant. Si une extension **.IS** est ajoutée au nom d'un composant, le logiciel identifie ce composant comme étant un étalon interne et attribue le composant **.IS** en tant qu'étalon interne à son analyte correspondant.

Dans la page **Create Results Table - Define Integration**, les analytes et les étalons internes sont affichés sur le côté gauche. Les paramètres d'intégration actuels ont été appliqués à l'échantillon représentatif et le chromatogramme s'affiche.

Les composants de l'échantillon représentatif précédemment sélectionnés sont affichés dans le volet **Integration**. Les pics de cet échantillon représentatif sont trouvés et intégrés à l'aide des paramètres qui ont été définis dans la boîte de dialogue **Integration Defaults**.

11. Passez en revue l'intégration des pics pour chaque composant en cliquant sur le nom du composant dans le volet de gauche. Ajuster les paramètres d'intégration de manière à ce que le pic représentatif soit correctement intégré. Voir [Définir les paramètres d'intégration des pics à la page 101](#).

Figure 14-12 Page Create Results Table - Define Integration



12. Pour les composants **Minoxidol**, **Tolbutamide** et **Reserpine**, utiliser les paramètres de groupe **Regression** pour définir les éléments suivants, puis cliquer sur **Apply** :

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

13. Définir les **unités de concentration** sur **ng/mL**, puis cocher la case **Apply units to all Analytes**.

14. Cliquer sur **Apply**.

15. Cliquer sur **Finish**.

Les fichiers sont automatiquement intégrés ; un tableau de résultats est généré.

Figure 14-13 Results Table

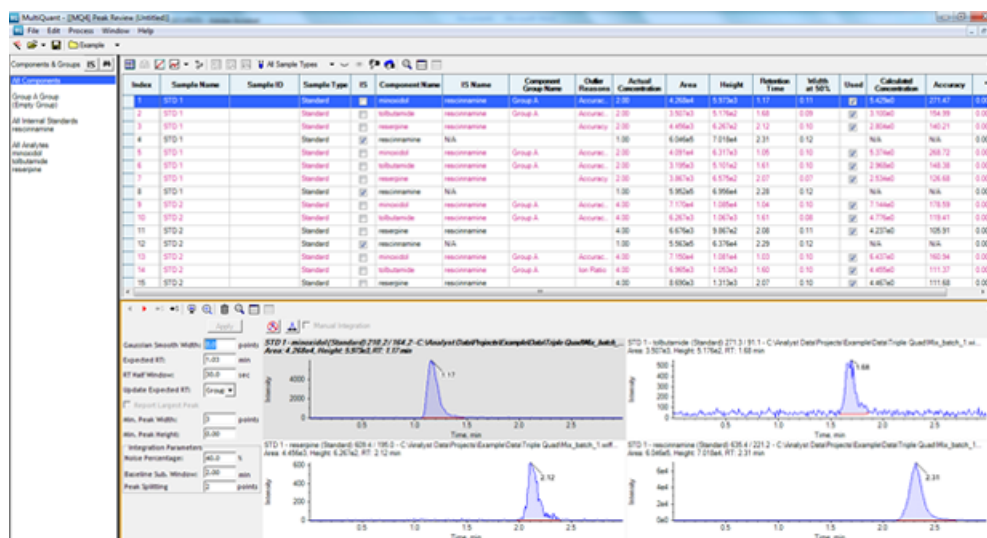
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Order	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.205e4	5.375e3	1.17	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	2.12e0	101.16
2	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.507e3	5.179e2	1.68	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.105e0	154.99
3	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.495e3	6.267e2	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.856e0	140.21
4	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.045e3	7.218e4	2.31	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.097e4	6.317e3	1.05	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	5.375e0	154.99
6	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.105e3	5.179e2	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.856e0	140.21
7	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.807e3	6.575e2	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.536e0	126.88
8	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.902e3	6.956e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	7.175e4	1.085e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.946e0	111.37
10	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.307e3	1.067e3	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.176e0	119.41
11	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.675e3	9.967e2	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.221e0	108.91
12	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	1.00	5.902e3	6.956e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	7.175e4	1.085e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.226e0	108.90
14	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.307e3	1.067e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.405e0	111.37
15	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.675e3	9.967e2	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.407e0	111.68
16	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.045e3	7.218e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.026e4	2.207e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.625e0	97.62
18	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.307e4	2.047e4	1.60	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	7.495e0	93.70
19	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.407e4	1.876e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.975e0	97.67
20	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	6.707e3	7.326e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.407e4	2.205e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.325e0	104.34
22	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.285e4	1.833e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.145e0	101.79
23	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.307e4	1.863e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.975e0	98.62
24	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.705e3	6.952e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.897e4	4.395e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.859e1	99.95
26	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.897e4	4.119e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.855e1	97.07
27	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.775e4	3.847e3	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.925e1	98.28
28	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.705e3	6.952e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.897e4	4.188e3	1.54	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.856e1	97.11
30	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.897e4	4.296e3	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.858e1	99.13
31	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.897e4	4.132e3	2.09	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.846e1	96.78
32	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A			1.00	5.705e3	6.952e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

Voir [Examiner les pics à la page 98](#) pour gérer les données du tableau de résultats. Voir [Rapports à la page 133](#) pour des informations sur la création de rapports.

Examiner les pics

1. Cliquer sur l'icône **Peak Review**.

Figure 14-14 Volet Peak Review



2. Cliquer avec le bouton droit dans le tableau, puis cliquer sur **Column Settings**.
3. Cliquer avec le bouton droit dans le volet **Peak Review**, puis cliquer sur **Options**.

4. Dans l'onglet **Zooming**, modifier **Zoom time axis to view peak** à **3 RT Windows**.
5. Si un chromatogramme contient plusieurs pics et qu'un pic incorrect est intégré, le faire alors glisser sur le pic correct pour définir un nouveau **Expected RT**. Au besoin, ajustez le résultat de pic et les paramètres d'intégration. Voir [Algorithmes d'intégration à la page 109](#).
6. Pour appliquer les nouveaux paramètres à tous les autres échantillons, pour le même composant, cliquer avec le bouton droit sur le chromatogramme, puis cliquer sur **Update Quantitation Method for Component**.
7. La méthode de quantification intégrée peut être modifiée pendant que l'utilisateur consulte le **tableau de résultats** en cliquant sur **Edit > Modify Results Table Method**. L'utilisateur peut modifier les options de régression des paramètres d'intégration et les informations des composants pour chaque composant.

Si les options de régression des paramètres d'intégration et les informations des composants pour chaque composant sont modifiées, seule la méthode de quantification intégrée dans le **tableau de résultats** est alors modifiée. Le fichier de méthode de quantification réel utilisé pour créer le **tableau de résultats** n'est pas modifié. Pour utiliser cette méthode de quantification intégrée pour traiter d'autres fichiers de données, exporter cette méthode intégrée dans un fichier de méthode à l'aide de la fonction **Export**.

Remarque : Effacer l'intégration en cliquant sur **Set Peak to Not Found** pour consulter les données brutes avant d'intégrer manuellement le pic.

8. Pour utiliser le mode d'intégration manuelle, cliquer sur l'icône **Enable Manual Integration Mode** dans le volet **Peak Review**. Faites glisser le curseur de la base d'un côté du pic d'intérêt vers l'autre. Le pic est maintenant intégré manuellement et les paramètres d'intégration utilisés précédemment ne sont pas disponibles.

Conseil ! Si le pic vient d'être modifié, le ramener alors à la méthode d'origine en cliquant avec le bouton droit, puis en cliquant sur **Revert Peak to Original Method**.

Remarque : Le champ **Calculated Concentration** dans **Results Table** reflète les modifications résultant de l'ajustement de la courbe aux points de l'étalon.

Modifier la courbe d'étalonnage

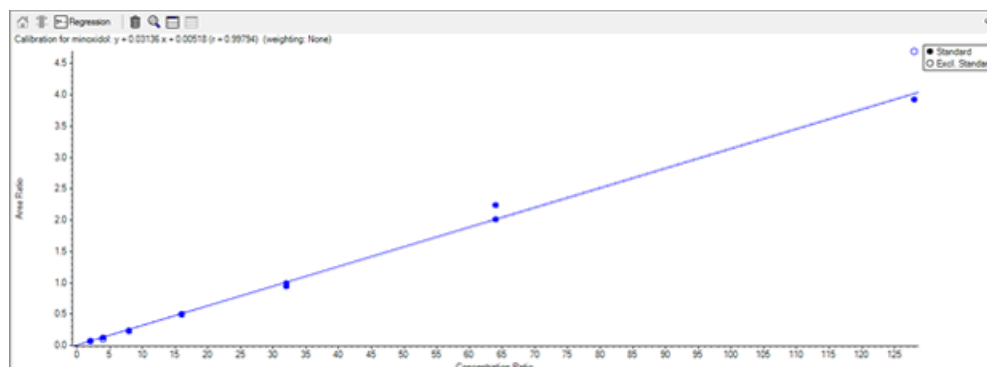
1. Cliquer sur l'icône **Show Calibration Curve** pour afficher la courbe d'étalonnage.
2. Pour ajouter une légende, cliquer avec le bouton droit dans le volet **Calibration**, puis cliquer sur **Show Legend**.
3. Pour ajouter les QC à la courbe, cliquer de nouveau avec le bouton droit dans le volet **Calibration**, puis cliquer sur **Show QCs**.

Conseil ! Pour exclure un point de la courbe, cliquer avec le bouton droit sur un point de la courbe, puis cliquer sur **Exclude**.

Tutoriel sur le flux de travail de l'analyse de quantification

4. Pour confirmer ou modifier les paramètres de régression pour un analyte individuel, sélectionner l'analyte dans le volet **Components and Groups**, puis cliquer sur le bouton **Regression** de la barre d'outils.
5. Pour mieux adapter la courbe d'étalonnage, exclure le deuxième échantillon STD 2 (concentration 4,00 ng/ml) et le premier échantillon STD 7 (concentration 128,00 ng/ml). Pour ce faire, utiliser la colonne **Actual Concentration** et la colonne **Used** pour supprimer les échantillons. Décocher la case de la colonne Used pour supprimer le point de la courbe. La courbe d'étalonnage doit maintenant ressembler à celle illustrée à la Figure 14-15.

Figure 14-15 Courbe d'étalonnage avec les échantillons exclus



Examiner les statistiques des échantillons

Les utilisateurs peuvent examiner les statistiques d'un seul tableau de résultats. L'examen de l'intégration des pics, de la courbe d'étalonnage et des statistiques relatives aux échantillons est un processus itératif.

1. Lorsqu'un tableau de résultats est ouvert, cliquer sur l'icône **Show Statistics Table**.

Figure 14-16 Tableau de statistiques

MultiQuant - [SMQ4] Statistics [Untitled] File Edit Process Window Help																
<div><div>Components & Groups</div><div><div>All Components</div><div>Group A (Group)</div><div>Empty (Group)</div><div>All Internal Standards</div><div>recombinant</div><div>All Analyses</div><div>recombined</div><div>Isibutamide</div><div>recombinant</div></div></div>																
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Order	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Initial at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
2	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Accuracy	2.00	3.92763	5.17662	1.68	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	2.42740	121.33
6	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	2.00	3.92963	5.16762	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.29260	114.59
10	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	4.00	6.26763	1.86763	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.12740	103.43
14	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	4.00	6.26563	1.85363	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.89690	98.23
18	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	8.00	1.35764	2.54763	1.60	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	6.91260	96.40
22	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	8.00	1.29564	1.93363	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.87260	94.69
26	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	16.00	2.68464	4.11963	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.81161	94.44
30	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	16.00	2.81764	4.25663	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.84561	96.54
34	STD 5		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	32.00	5.67964	6.42763	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	2.88761	90.23
38	STD 5		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	32.00	5.57764	6.43763	1.62	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.05661	88.59
42	STD 6		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	64.00	1.11565	1.76264	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	6.30661	88.50
46	STD 6		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	64.00	1.11565	1.76764	1.62	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	6.76261	105.97
50	STD 7		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	128.00	2.33065	3.47564	1.62	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.44462	112.83
54	STD 7		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Ion Ratio	128.00	2.22565	3.48064	1.60	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	1.19662	90.28
58	QC 1		Quality Control	<input checked="" type="checkbox"/>	Isibutamide	recombinant	Group A	Accuracy	1.30	6.75563	8.30562	1.60	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	3.79560	125.16
Group by Concentration for Standards <div>Calculated Concentration</div>																
Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2							
1	Isibutamide	2.00	2 of 2	2.33065	3.547e-2	4.04	117.96	2.42740	2.29260							
2	Isibutamide	4.00	2 of 2	3.97960	2.330e-1	5.84	99.33	4.12740	3.89690							
3	Isibutamide	8.00	2 of 2	7.24260	4.670e-1	6.45	90.52	6.91260	7.57060							
4	Isibutamide	16.00	2 of 2	1.52061	2.371e-1	1.55	95.49	1.81161	1.84561							
5	Isibutamide	32.00	2 of 2	2.97961	1.21560	4.08	92.91	2.88761	3.05661							
6	Isibutamide	64.00	2 of 2	6.54261	3.38560	5.17	102.23	6.30661	6.76261							
7	Isibutamide	128.00	2 of 2	1.30562	2.047e1	15.70	101.55	1.44462	1.19662							

2. Dans la liste **Sample Grouping**, cliquer sur un élément pour spécifier la manière dont l'échantillon (pour un analyte donné) doit être regroupé pour le calcul des statistiques
3. Cliquer sur la colonne **Value #1**.

Remarque : La valeur **Group by Concentration for Standards and QCs** est réellement basée sur **Displayed Actual Concentration**, et non sur **Actual Concentration** stockée dans le tableau de résultats. Si la concentration Std 1 est de 0,001, que la concentration Std 2 est de 0,005 et que le format d'affichage est 0, les concentrations Std 1 et Std 2 sont alors regroupées, car les deux sont traitées comme 0. Pour les regrouper séparément, dans la boîte de dialogue **Column Settings**, définir la précision pour **Analyte Concentration** sur 0,000. Si la concentration Std 1 est de 0,500 et la concentration Std 2 est de 0,499, définir alors la précision sur 0,00 pour les regrouper. Voir [Modifier les colonnes affichées dans le tableau de résultats à la page 91](#).

4. Cliquer sur un élément dans la liste **Metric** pour spécifier la métrique réelle utilisée pour le calcul des statistiques.
5. Examiner les colonnes **Value**. Les points rayés indiquent des points de données exclus.

Algorithmes d'intégration

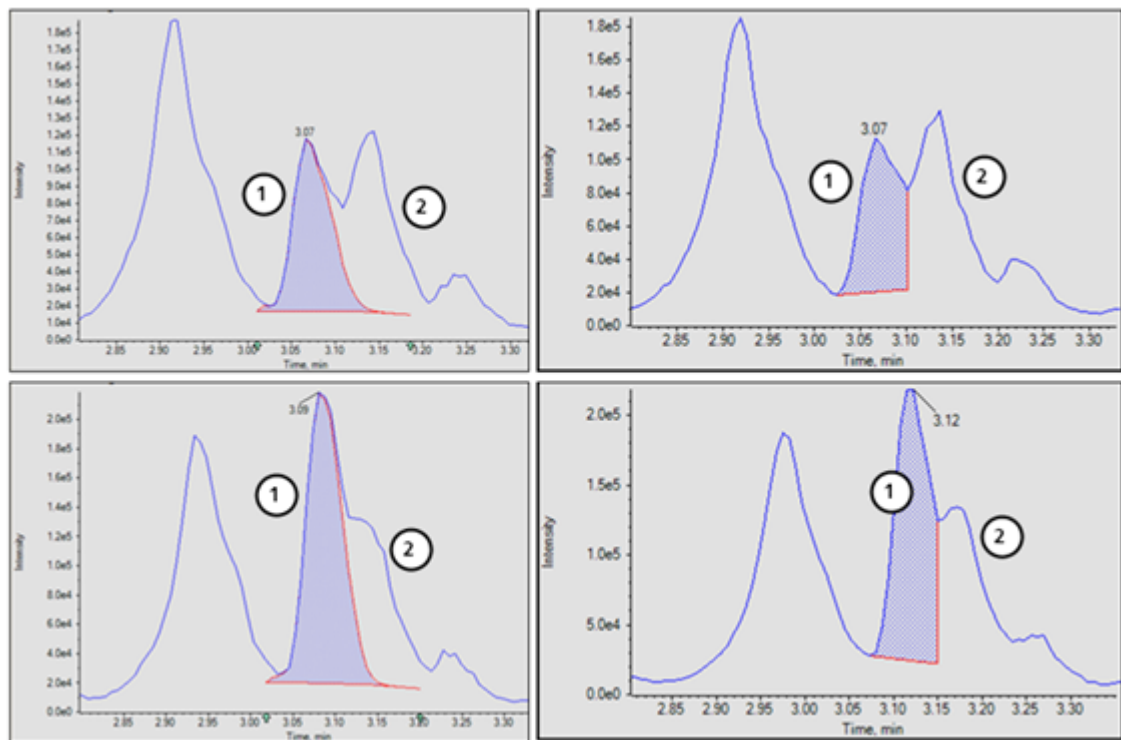
Cette section décrit les différents paramètres disponibles pour chaque algorithme.

À propos de l'algorithme d'intégration SignalFinder

Pics à élution proche

L'algorithme SignalFinder™ offre une représentation plus précise de l'aire des pics à élution proche. La [Figure 14-17](#) illustre un exemple de la façon dont les algorithmes d'intégration MQ4 (graphique de droite) et SignalFinder (graphique de gauche) traitent les pics à élution proche. Dans cet exemple, le pic de bruit de fond (élément 2) interfère avec le pic d'intérêt (élément 1). Comme le pic d'interférence provient soit du système LC, soit de la matrice, il est relativement constant sur l'ensemble du lot d'échantillons. L'intensité du pic de l'analyte augmente toutefois au fur et à mesure que la concentration de l'analyte augmente, ce qui entraîne la modification spectaculaire des formes des pics combinés. L'algorithme d'intégration SignalFinder, qui est basé sur un modèle de pic défini par l'utilisateur, peut identifier constamment le pic d'intérêt à tous les niveaux de concentration tandis que l'algorithme d'intégration MQ4 peut uniquement dessiner une ligne verticale partant de la vallée jusqu'à la ligne de base. Cela intègre uniquement un pic partiel, ce qui introduit des erreurs dans l'aire du pic.

Figure 14-17 Pics à élution proche



Élément	Description
1	Pic d'intérêt
2	Pic de bruit de fond co-éluant

Pics traînants

Pour les pics traînants, les algorithmes précédents sont souvent incohérents quand il s'agit de sélectionner le temps de rétention auquel le pic se termine. En fonction de la nature exacte du bruit dans cette région, deux peaks d'aspect similaire pourraient avoir des extrémités de pic communiquées différentes. L'intégration peut généralement rendue plus cohérente en ajustant les paramètres de recherche de pic. Cela nécessite toutefois beaucoup de temps et d'efforts. Avec une approche de modélisation, l'intégration est interrompue lorsque le modèle baisse en dessous d'un seuil de sorte qu'elle est bien moins affectée par le bruit.

Pics saturés

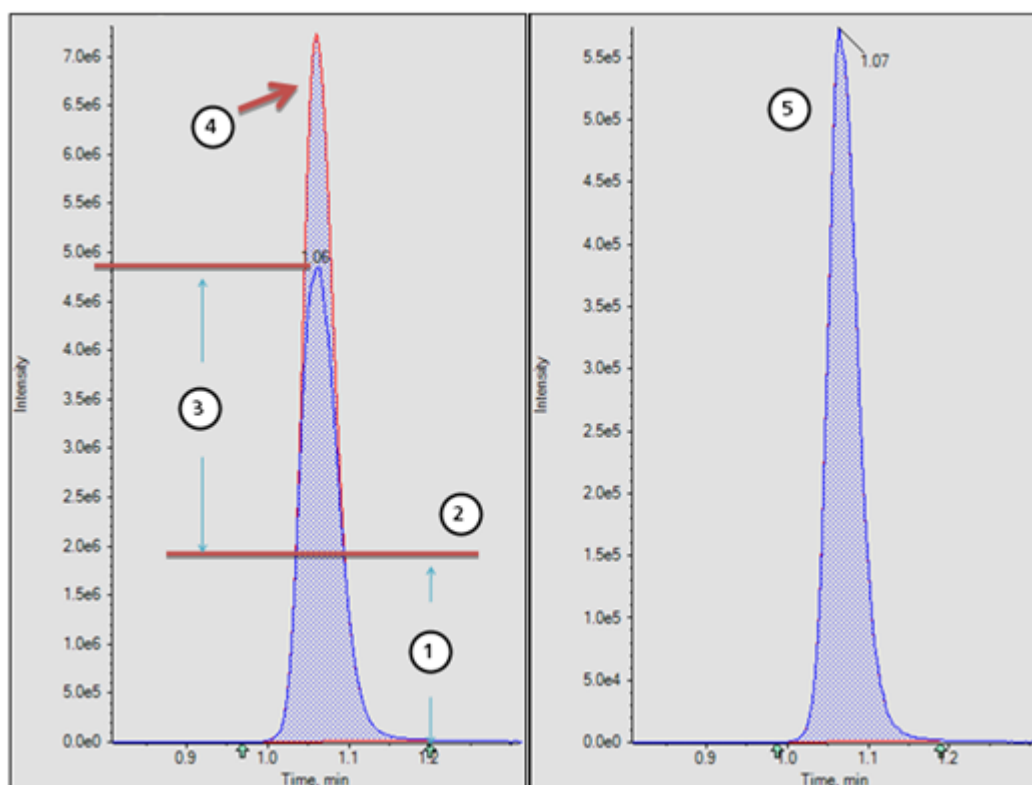
Lorsque l'algorithme détecte qu'un pic est saturé, il utilise un modèle pour prédire à quoi pourrait ressembler le pic si le détecteur n'était pas saturé. Cela apparaît sous la forme d'un profil rouge s'étendant au-dessus du pic pour se rapprocher de la réponse qui aurait été obtenue si le détecteur n'avait pas été saturé. Cette fonction corrige uniquement la saturation du détecteur, et non la saturation de la source d'ions ou la saturation des colonnes. La Figure 14-18 illustre un exemple de correction de la saturation.

Avant d'utiliser l'algorithme SignalFinder™, sélectionner un échantillon non saturé à utiliser pour construire le modèle de pic, puis définir le seuil de saturation sur une valeur appropriée pour le détecteur. Dans cet

exemple, un seuil de saturation de $1,8E+006$ cps est utilisé. L'algorithme fait correspondre la partie non saturée du pic qui reste, à savoir le pic en dessous de $1,8E+006$ cps, au modèle de pic. L'algorithme prédit alors le reste du pic indiqué par le tracé rouge en fonction du modèle de pic sélectionné.

Remarque : Le seuil de saturation dépend de plusieurs facteurs, notamment le type de détecteur, l'âge du détecteur et le composé d'intérêt. Pour optimiser les résultats, le seuil de saturation doit être ajusté de manière appropriée.

Figure 14-18 Correction de la saturation du détecteur



Élément	Description
1	Partie non saturée (correspond au modèle de pic)
2	Seuil de $1,8e6$ cps
3	Partie saturée
4	Profil de pic corrigé
5	Modèle de pic

Notes sur l'utilisation

Certains flux de travail n'ont pas d'échantillon type contenant tous les composants d'intérêt. Par exemple, au cours d'un travail de découverte de médicaments, les utilisateurs pourraient rechercher les métabolites

d'oxydation en ajoutant +16 à la masse Q1 du médicament parent et +0 ou +16 à la masse Q3. Ces métabolites sont généralement présents pour certains échantillons, mais pas nécessairement dans l'échantillon choisi comme modèle pour la création de la méthode de quantification. Dans cette situation, l'algorithme SignalFinder™ utilise un modèle par défaut si, pour une transition MRM donnée, un pic raisonnable n'existe pas dans l'échantillon type. Dans de nombreux cas, ce modèle par défaut est suffisamment précis. Il est toutefois également possible de créer un nouveau modèle lors d'un examen des pics ultérieur en utilisant un échantillon ne contenant pas le pic d'intérêt.

SignalFinder™

Les paramètres suivants servent à identifier et à communiquer le pic d'intérêt. Voir [Paramètres des algorithmes d'intégration à la page 121](#) pour une liste complète des paramètres disponibles.

Use Saturation Correction

Cette option est disponible uniquement lors de la définition des valeurs globales par défaut de l'algorithme, et non durant la création de la méthode de quantification ou l'examen de chaque pic, car il n'est pas utile d'utiliser ce paramètre pour seulement quelques pics.

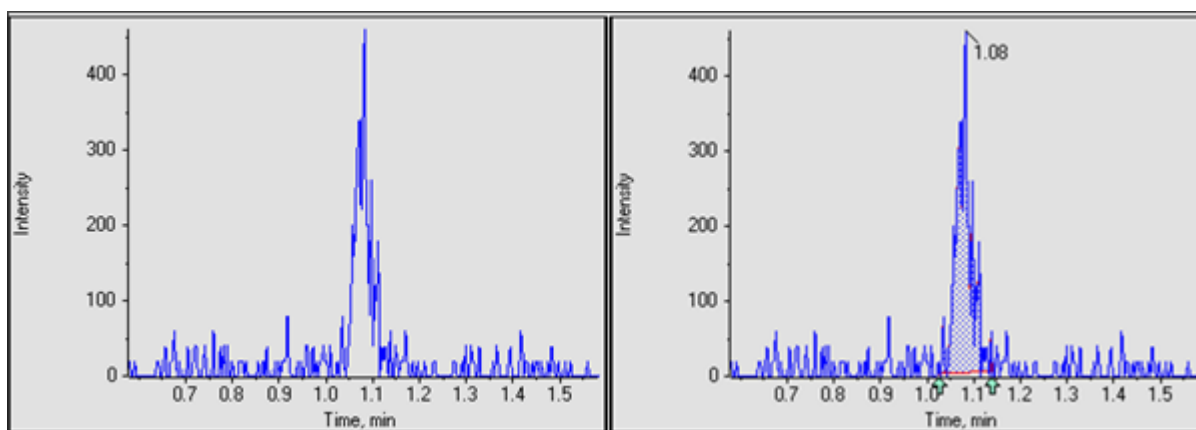
Saturation Threshold

Les pics au-dessus de ce seuil sont considérés comme saturés. Cette valeur est fonction du détecteur.

S/N Threshold

Dans la [Figure 14-19](#), si le seuil S/N est défini sur sept (le graphique de gauche), le pic n'est alors pas communiqué. Si le seuil S/N est défini sur deux (le graphique de droite), le pic est alors communiqué. Ce paramètre n'affecte pas l'intégration.

Figure 14-19 S/N Threshold



Confidence Threshold

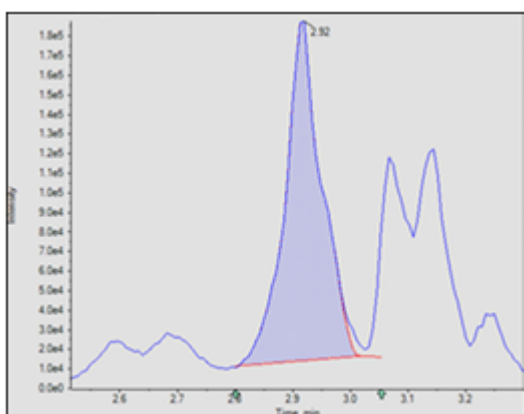
Ce paramètre permet de filtrer les pics potentiels qui sont de faux positifs. La valeur par défaut est de 50 %, ce qui convient généralement. L'utilisateur pourrait toutefois vouloir utiliser une valeur plus élevée pour les

données très bruyantes ou pour celles pour lesquelles la largeur de pic présente une variation considérable d'un échantillon à l'autre.

La [Figure 14-20](#) et la [Figure 14-21](#) présentent la manière dont le seuil de confiance affecte le nombre de pics identifiés. Lorsque **Confidence Threshold** est défini sur 50 %, le pic qui présente une petite épaule est identifié comme un seul pic. Lorsque le paramètre **Confidence Threshold** est abaissé à 16 %, l'algorithme SignalFinder™ détecte deux pics. Faire glisser les deux régions de pic pour visualiser les deux pics.

Pour déterminer quels autres pics sont potentiellement présents dans ce pic et si la valeur **Confidence Threshold** correcte n'est pas connue, appuyer sur **Ctrl**, puis faire alors glisser sur la région d'intérêt du pic. Cela abaisse automatiquement le **Confidence Threshold** pour révéler le deuxième pic d'intérêt qui n'est pas présent lorsque le **Confidence Threshold** est défini sur 50 %.

Figure 14-20 Confiance à 50 %



Avec une confiance de 16 %, deux pics sont trouvés. Faire glisser la zone de pic pour identifier les deux pics.

Figure 14-21 Confiance à 16%

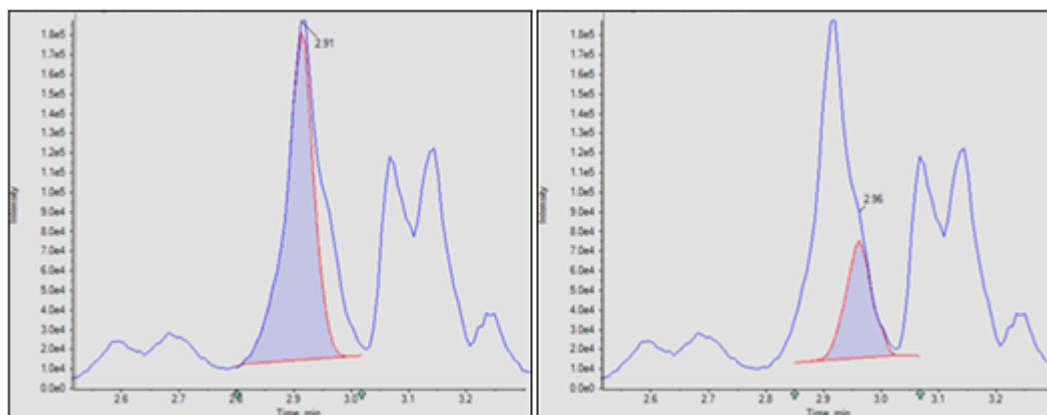
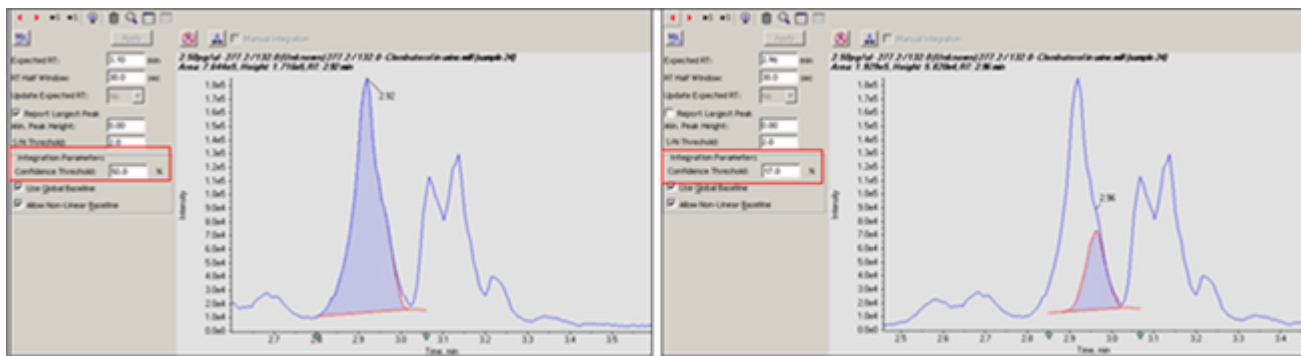


Figure 14-22 Paramètre Confidence Threshold

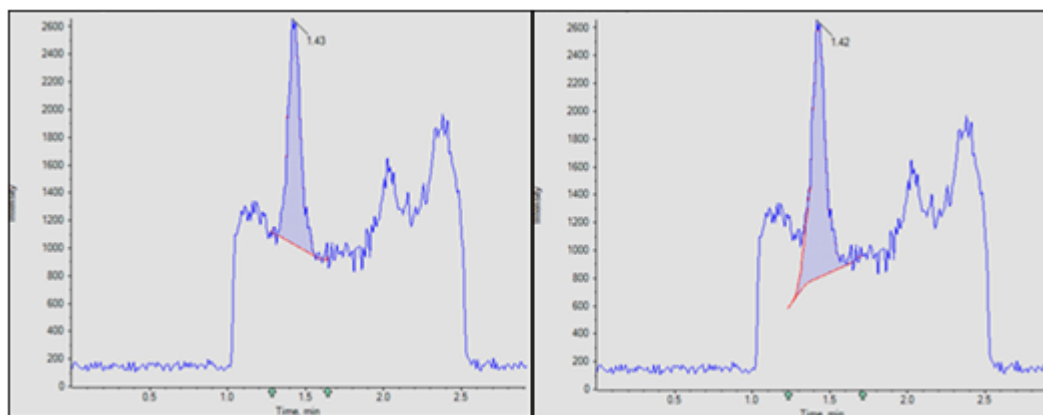


Utiliser la référence globale

Sélectionner cette option pour utiliser la totalité du chromatogramme comme référence. Si l'option n'est pas sélectionnée, le logiciel de quantification évalue alors les modifications apportées à la référence localement. La [Figure 14-23](#) illustre un exemple du moment où la référence locale doit être utilisée.

Le graphique de gauche présente un chromatogramme ayant été correctement intégré au moyen de la référence locale. Le graphique de droite montre le même chromatogramme qui a été mal intégré au moyen de la référence globale.

Figure 14-23 Use Global Baseline



Allow Non-Linear Baseline

Utiliser cette option pour faire un choix entre une référence linéaire et non linéaire. Une référence non linéaire estime la référence sous chaque pic. L'option linéaire intègre une ligne entre les points au début et à la fin de ce groupe spécifique de pics. La [Figure 14-24](#) et la [Figure 14-25](#) présentent des exemples de lignes de référence linéaire et non linéaire pour les pics en co-élution. Les éléments 1 à 4 sont des pics convolués.

Une référence non linéaire est recommandée pour plusieurs pics. Pour un pic unique, la différence entre la référence linéaire et la référence non linéaire est insignifiante.

Figure 14-24 Exemple de référence linéaire

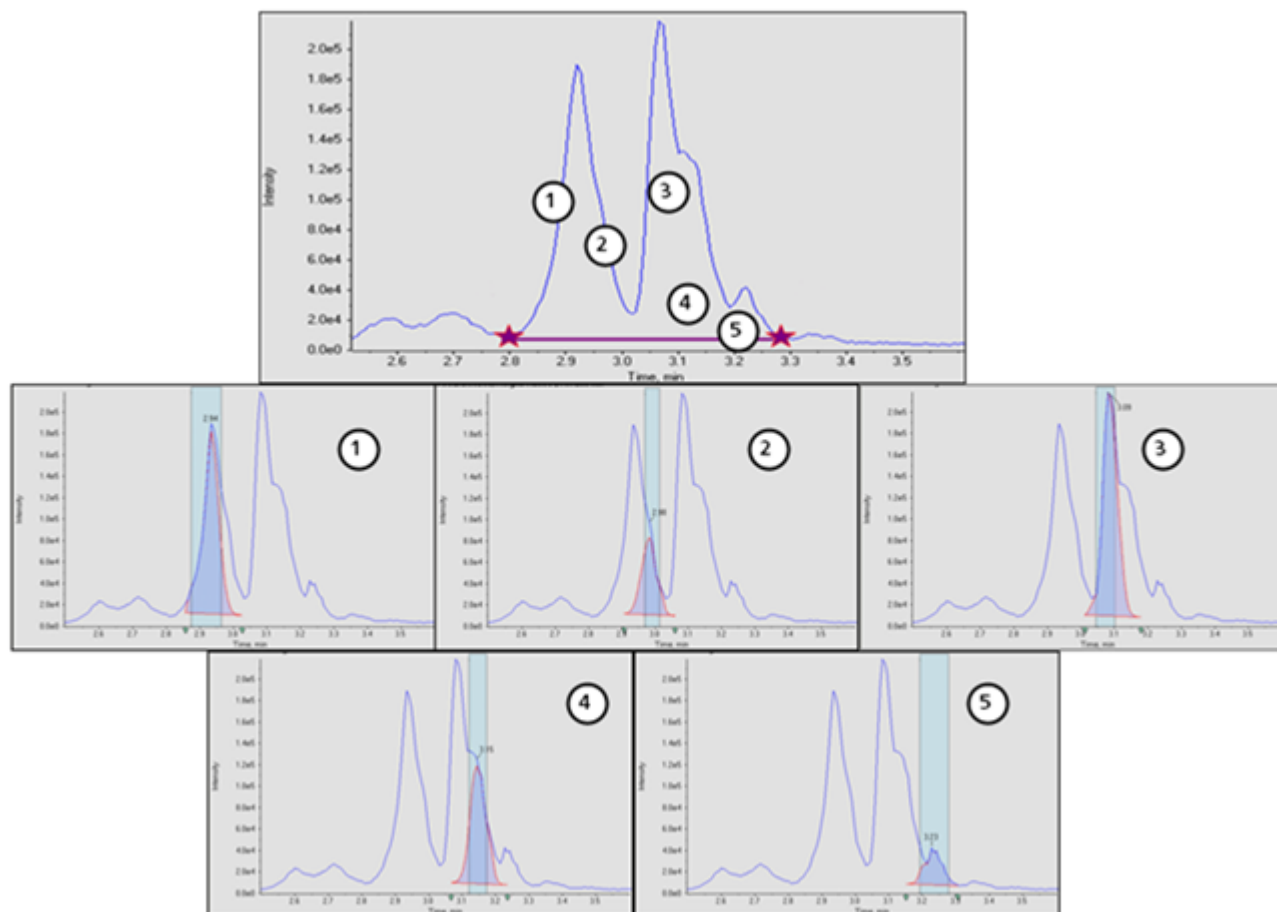
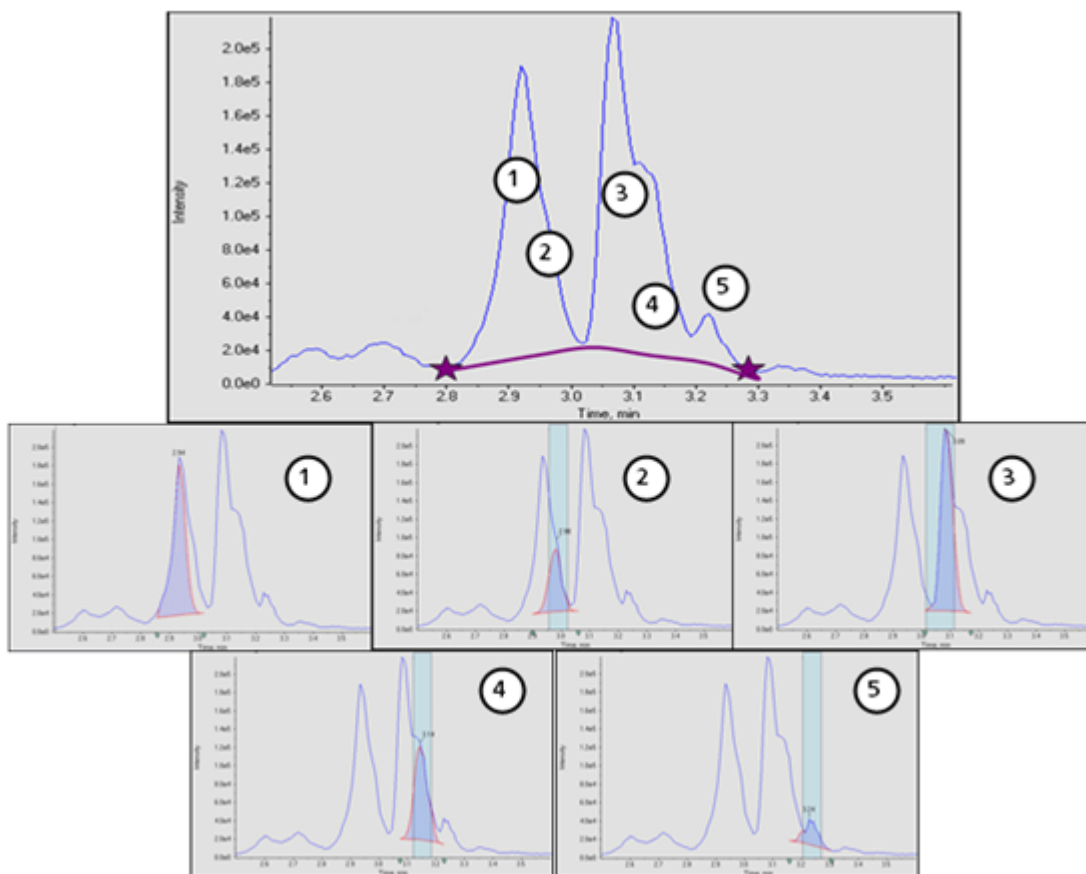


Figure 14-25 Exemple de référence non linéaire



Conseils relatifs à l'utilisation de l'algorithme d'intégration SignalFinder™

- Merge two peaks : quelquefois, l'algorithme d'intégration SignalFinder détecte deux pics. Pour fusionner les deux pics, appuyer sur **Ctrl**, puis faire glisser sur les deux pics. Le logiciel essaye de fusionner les pics en réduisant la sensibilité de convolution, sauf si les deux pics sont trop éloignés.
- Change the peak start and end times : pour modifier les heures de début et de fin du pic soit pendant la création d'un **tableau de résultats**, soit pendant l'examen des pics, faire glisser les flèches de début et de fin du pic.

Remarque : L'utilisateur peut uniquement modifier les flèches de début et de fin dans des limites raisonnables.

Paramètres de l'algorithme d'intégration MQ4

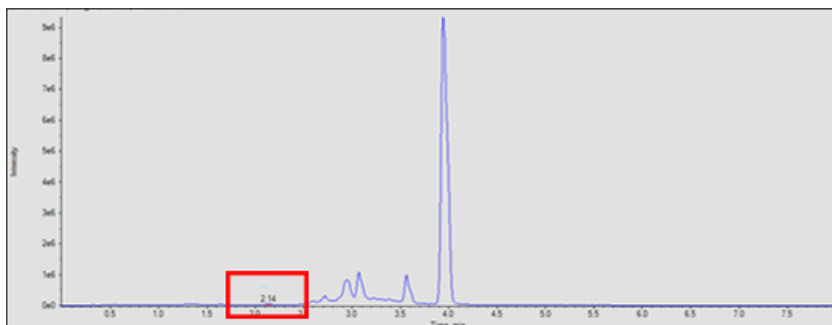
Les paramètres suivants servent à identifier et à communiquer le pic d'intérêt. Voir [Paramètres des algorithmes d'intégration à la page 121](#) pour une liste complète des paramètres disponibles.

Noise Percentage

Ce paramètre permet d'estimer le niveau de bruit dans les chromatogrammes. Le pourcentage spécifié de points de données présentant la plus petite intensité est considéré comme étant du bruit.

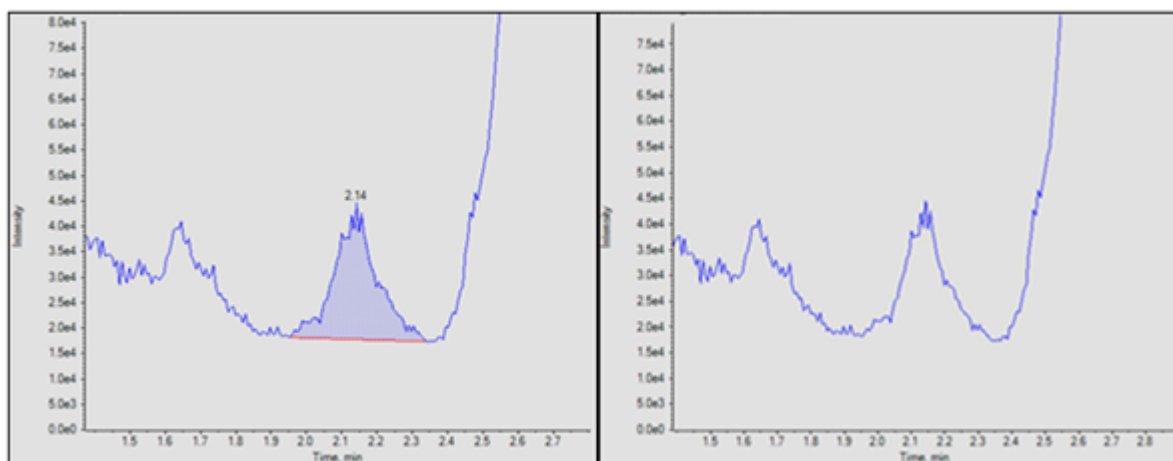
Les valeurs typiques se situent entre 20 et 60 %. Si des petits pics ne sont pas trouvés en présence de pics plus grands, le pourcentage de bruit doit alors être abaissé. La [Figure 14-26](#) donne un exemple d'un petit pic en présence d'un pic extrêmement grand. Ce pic n'est pas trouvé lorsque le pourcentage de bruit est défini sur 90 %, mais il l'est lorsque le pourcentage de bruit est défini sur 40 %.

Figure 14-26 Pic d'intérêt



Dans la [Figure 14-27](#), le graphique de gauche représente le pourcentage de bruit défini sur 40 %. Le graphique de droite est défini sur 90 %.

Figure 14-27 Niveaux de bruit

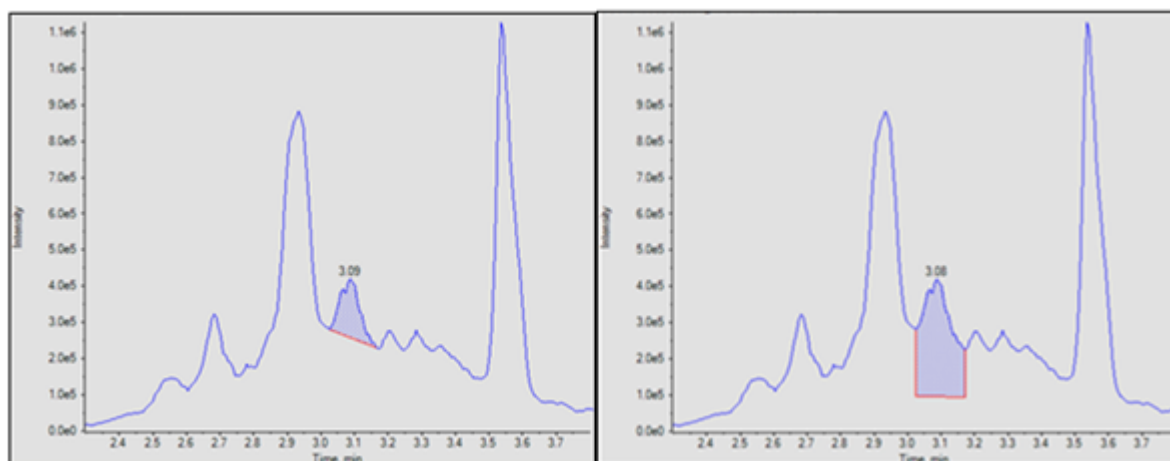


Baseline Sub. Window

Après le lissage, mais avant tout autre traitement, les chromatogrammes sont soustraits de la référence afin d'éliminer les irrégularités dans les données. Pour chaque point de données, la référence est calculée à l'aide des points de données situés à gauche et à droite du point en cours et présentant une intensité minimale (dans la fenêtre de soustraction).

La valeur exacte de ce paramètre n'est pas essentielle, sous réserve qu'elle soit au moins plusieurs fois supérieure à la largeur de pic attendue.

Figure 14-28 Fenêtre Baseline Subtraction



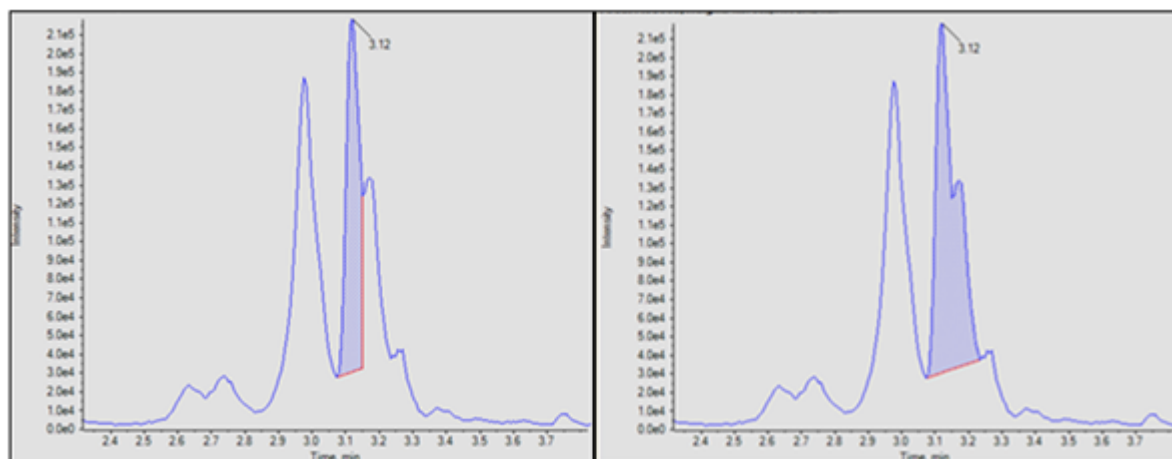
Peak Splitting

Ce paramètre détermine si un pic potentiellement bruyant est identifié comme un seul pic ou comme deux pics distincts (voire plus). Si le creux entre deux pics potentiels est inférieur à la valeur spécifiée, un seul pic est alors trouvé. Dans le cas contraire, deux pics sont trouvés.

Le réglage de ce paramètre sur une valeur élevée évite aux pics bruyants d'être divisés et considérés comme deux pics distincts. Toutefois, il convient d'utiliser une valeur plus basse si deux pics distincts sont en élution (se chevauchent).

Le graphique de gauche illustre le paramètre Peak Splitting défini sur deux points. Le graphique de droite illustre le paramètre Peak Splitting défini sur trois points.

Figure 14-29 Peak Splitting



Tâches facultatives

Cette section contient des tâches en option qui peuvent servir à améliorer l'analyse des données.

Créer des tracés métriques

Utiliser un **tracé métrique** pour tracer les valeurs dans une colonne du **tableau de résultats** par rapport au numéro de ligne ou à une autre colonne. Ces tracés constituent une aide précieuse pour l'examen des données visuelles, tout particulièrement si chaque chromatogramme ne doit pas être examiné manuellement au moyen du volet **Peak Review**.

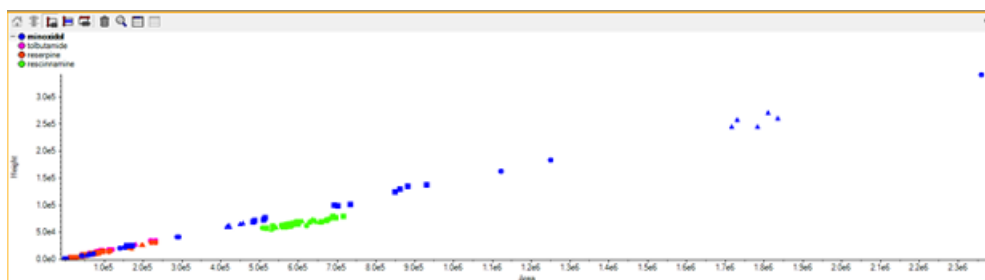
Remarque : Les tracés métriques utilisent les mêmes formules de régression que les courbes d'étalonnage. Pour les tracés métriques, il existe deux formules supplémentaires : moyenne et médiane.

1. Ouvrir un **tableau de résultats**.
2. Sélectionner une ou deux colonnes, puis cliquer sur l'icône **Metric Plot**. Pour cet exemple, sélectionner la colonne **IS Area**.

Si une colonne est sélectionnée, le tracé obtenu affiche alors les valeurs de la colonne en fonction du numéro de ligne dans le tableau. Si deux colonnes sont sélectionnées, les valeurs des colonnes sont alors tracées l'une par rapport à l'autre. La première des deux colonnes à sélectionner contient les valeurs x et la seconde contient les valeurs y.

3. Cliquer avec le bouton droit dans le volet de tracé, puis cliquer sur **Show Legend** pour afficher une explication des symboles utilisés par le tracé.

Figure 14-30 Tracé métrique



Créer des colonnes personnalisées

1. Avec un **tableau de résultats** ouvert et actif, cliquer avec le bouton droit, puis cliquer sur **Add Custom Column**.

Une colonne est ajoutée à la fin du tableau.

2. Entrer le nom de la colonne dans la boîte de dialogue **Custom Column Name**.
3. Cliquer sur **OK**.

À propos des fichiers des méthodes de quantification et des méthodes intégrées

Des méthodes de quantification peuvent être créées en utilisant l'une des options suivantes :

- Utiliser l'assistant **Quantitation**.
- Modifier une méthode existante dans l'assistant **Quantitation** en cochant la case **Edit**.
- Ouvrir et modifier une méthode de quantification existante.

Les méthodes de quantification sont enregistrées dans le dossier **Quantitation Method**.

Lorsqu'un **tableau de résultats** est créé, la méthode de quantification utilisée pour le créer est intégrée dans le **tableau de résultats**. Modifier la méthode de quantification intégrée, toutefois les modifications apportées à la méthode de quantification s'appliquent uniquement à la méthode intégrée du **tableau de résultats**, et non aux méthodes du dossier **Quantitation Method**.

Conseil ! Cette méthode intégrée modifiée peut être exportée pour une utilisation ultérieure.

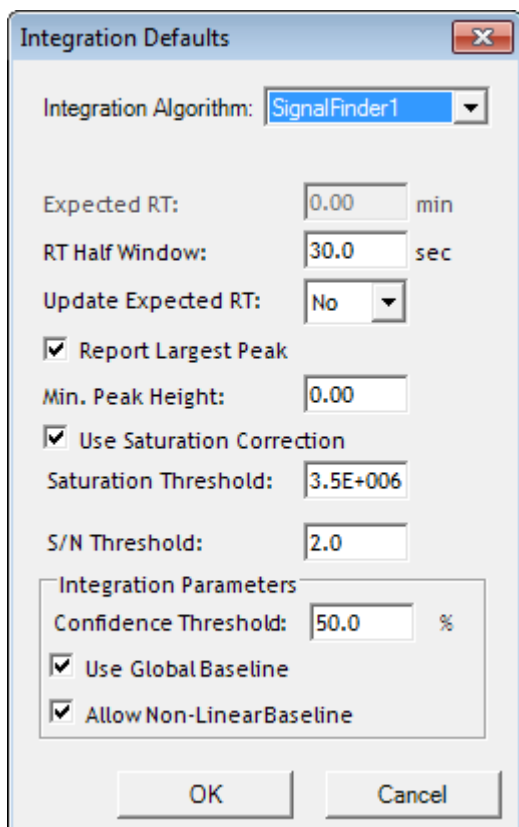
Paramètres des algorithmes d'intégration

A

Paramètres de l'algorithme d'intégration SignalFinder

L'algorithme d'intégration SignalFinder™ construit un modèle de pic en utilisant l'échantillon sélectionné lors de la création d'une nouvelle méthode de quantification. Ce modèle décrit la forme du pic sélectionné utilisé pour former l'algorithme.

Figure A-1 Boîte de dialogue Integration Defaults



Paramètres des algorithmes d'intégration

Étiquette	Description
Integration Algorithm	Algorithme d'intégration sélectionné.
Expected RT	Le temps de rétention attendu, en minutes. Cette valeur est initialement définie sur le temps de rétention du pic le plus large dans le chromatogramme pour l'échantillon représentatif utilisé pour créer la méthode de quantification. Ce champ n'est pas modifiable. Il est mis à jour en fonction du composé dans la méthode de quantification.
RT Half Window	La moitié de la fenêtre de temps de rétention total en secondes. Pour qu'un pic soit détecté et communiqué, la différence entre le point culminant et le temps de rétention attendu doit être inférieure ou égale à cette valeur.
Update Expected RT	<p>Indique si le temps de rétention attendu doit être ajusté à la volée en utilisant d'autres composants. Utilise des informations supplémentaires pour compenser les variations de temps de rétention d'un échantillon à l'autre. Les choix sont les suivants:</p> <ul style="list-style-type: none"> • No : Le temps de rétention attendu est utilisé en l'état. • Group : S'applique aux composants qui ont été attribués à des groupes pour lesquels tous les composants d'un groupe donné possèdent le même temps de rétention (transitions différentes pour le même composé). Le temps de rétention attendu est mis à jour à l'aide de la position de chevauchement maximale des chromatogrammes individuels pour le groupe (pour un échantillon donné) dans la fenêtre RT. Il s'agit de définir le temps de rétention attendu sur le temps de rétention probable pour le composant d'intérêt réel (où un pic est attendu dans chaque chromatogramme). <p>Si deux étalons internes au moins sont définis pour un groupe, seuls leurs chromatogrammes sont alors utilisés pour déterminer le nouveau temps de rétention. Dans le cas contraire, tous les chromatogrammes pour le groupe sont utilisés. Le but est d'utiliser uniquement les chromatogrammes pour lesquels le composant est le plus susceptible d'être présent à un niveau raisonnable.</p> <ul style="list-style-type: none"> • IS : Pour les analytes utilisant un étalon interne, le temps de rétention réel du pic d'étalon interne (pour l'échantillon correspondant) est déterminé en premier lieu. Le temps de rétention attendu pour l'analyte est déterminé en multipliant le temps de rétention attendu spécifié par le ratio entre le temps de rétention réel et le temps de rétention attendu pour l'étalon interne. Cette option est parfois appelée temps de rétention relatif. <p>Remarque : Cette option ne s'applique pas aux étalons internes ni aux analytes qui n'utilisent pas d'étalon interne.</p>
Report Largest Peak	<p>Si plusieurs pics sont trouvés dans un chromatogramme dans la fenêtre de temps de rétention et satisfaisant à la largeur et à l'amplitude minimum, ce paramètre contrôle le pic qui est communiqué. Lorsque la case est cochée, le pic ayant la plus grande aire est communiqué. Lorsque la case est décochée, le pic ayant le temps de rétention le plus proche du temps attendu est communiqué.</p> <p>Il est recommandé d'activer cette option sauf si les temps de rétention sont très reproductibles.</p>

Paramètres des algorithmes d'intégration

Étiquette	Description
Min. Peak Height	Ce paramètre n'affecte pas l'intégration. Il est uniquement utilisé pour générer des rapports. Tous les pics potentiels qui sont moins intenses que cette valeur sont supposés être sans intérêt et ne sont pas utilisés.
Use Saturation Correction	Lorsque l'algorithme détecte qu'un pic est saturé, il utilise le modèle pour prédire à quoi pourrait ressembler le pic si le détecteur n'était pas saturé. Le profil s'étend alors au-dessus du sommet du pic pour se rapprocher de la réponse qui aurait été obtenue si le détecteur n'avait pas été saturé. Cela peut étendre la plage dynamique linéaire des courbes d'étalonnage. Cette option est disponible uniquement lors de la définition des valeurs globales par défaut de l'algorithme, et non durant la création de la méthode de quantification ou l'examen de chaque pic, car il n'est pas utile d'utiliser ce paramètre pour seulement quelques pics.
Saturation Threshold	Les pics au-dessus de ce seuil sont considérés comme saturés. Cette valeur est fonction du détecteur.
S/N Threshold	Ce paramètre n'affecte pas l'intégration. Il est uniquement utilisé pour générer des rapports. Les pics inférieurs au seuil ne sont pas communiqués.
Confidence Threshold	Permet de filtrer les pics potentiels qui sont de faux positifs. La valeur par défaut est de 50 %, ce qui convient généralement. Une valeur plus élevée peut toutefois être utilisée pour les données très bruyantes ou pour les données pour lesquelles la largeur de pic présente des variations considérables d'un échantillon à l'autre.
Use Global Baseline	Sélectionner cette option pour utiliser la totalité du chromatogramme comme référence. Si la case n'est pas cochée, le logiciel évalue alors les modifications apportées à la ligne de base localement.
Allow Non-Linear Baseline	Choisir une référence linéaire ou non linéaire. Une référence non linéaire estime la référence sous chaque pic. Une ligne de base linéaire ajuste une ligne entre les points situés au début et à la fin de ce groupe de pics spécifique.

Paramètres de l'algorithme d'intégration MQ4

Figure A-2 Boîte de dialogue Integration Defaults

Integration Defaults

Integration Algorithm: MQ4

Gaussian Smooth Width: 0.0 points

Expected RT: 0.00 min

RT Half Window: 30.0 sec

Update Expected RT: No

☒ Report Largest Peak

Min. Peak Width: 3 points

Min. Peak Height: 0.00

Integration Parameters

Noise Percentage: 40.0 %

Baseline Sub. Window: 2.00 min

Peak Splitting: 2 points

OK Cancel

Étiquette	Description
Integration Algorithm	Algorithme d'intégration sélectionné.
Gaussian Smoothing Width	Un algorithme standard de lissage gaussien dont la demi-largeur est égale à la valeur spécifiée (en points) est appliqué. Pour les chromatogrammes bruyants, une valeur proche de la largeur de pic réelle (à mi-amplitude) constitue un bon choix. Pour les données moins bruyantes, une valeur plus petite peut être utilisée.
Expected RT	Temps de rétention attendu en minutes. Cette valeur est initialement définie sur le temps de rétention du pic le plus large dans le chromatogramme pour l'échantillon représentatif utilisé pour créer la méthode de quantification.
RT Half Window	La moitié de la fenêtre de temps de rétention total en secondes. Pour qu'un pic soit détecté et communiqué, la différence entre le point culminant et le temps de rétention attendu doit être inférieure ou égale à cette valeur.

Étiquette	Description
Update Expected RT	<p>Indique si le temps de rétention attendu doit être ajusté à la volée en utilisant d'autres composants. Utilise des informations supplémentaires pour compenser les variations de temps de rétention d'un échantillon à l'autre. Les choix sont les suivants:</p> <ul style="list-style-type: none"> • No : Le temps de rétention attendu est utilisé en l'état. • Group : S'applique aux composants qui ont été attribués à des groupes pour lesquels tous les composants d'un groupe donné possèdent le même temps de rétention (transitions différentes pour le même composé). Le temps de rétention attendu est mis à jour à l'aide de la position de chevauchement maximale des chromatogrammes individuels pour le groupe (pour un échantillon donné) dans la fenêtre RT. Il s'agit de définir le temps de rétention attendu sur le temps de rétention probable pour le composant d'intérêt réel (où un pic est attendu dans chaque chromatogramme). <p>Si deux étalons internes au moins sont définis pour un groupe, seuls leurs chromatogrammes sont alors utilisés pour déterminer le nouveau temps de rétention. Dans le cas contraire, tous les chromatogrammes pour le groupe sont utilisés. Le but est d'utiliser uniquement les chromatogrammes pour lesquels le composant est le plus susceptible d'être présent à un niveau raisonnable.</p> <ul style="list-style-type: none"> • IS : Pour les analytes utilisant un étalon interne, le temps de rétention réel du pic d'étalon interne (pour l'échantillon correspondant) est déterminé en premier lieu. Le temps de rétention attendu pour l'analyte est déterminé en multipliant le temps de rétention attendu spécifié par le ratio entre le temps de rétention réel et le temps de rétention attendu pour l'étalon interne. Cette option est parfois appelée temps de rétention relatif.
Report Largest Peak	<p>Si plusieurs pics sont trouvés dans un chromatogramme dans la fenêtre de temps de rétention et satisfaisant à la largeur et à l'amplitude minimum, ce paramètre contrôle alors le pic qui est communiqué. Lorsque la case est cochée, le pic ayant la plus grande aire est communiqué. Lorsque la case est décochée, le pic dont le temps de rétention est le plus proche du temps attendu est alors communiqué.</p> <p>Il est recommandé d'activer cette option sauf si les temps de rétention sont très reproductibles.</p>
Min. Peak Height	Ce paramètre n'affecte pas l'intégration. Il est uniquement utilisé pour générer des rapports. Tous les pics potentiels qui sont moins intenses que cette valeur sont supposés être sans intérêt et ne sont pas utilisés.
Min. Peak Width	Tous les pics potentiels qui sont plus étroits que cette valeur sont considérés comme du bruit et ne sont pas utilisés.
Noise Percentage	<p>Ce paramètre permet d'estimer le niveau de bruit dans les chromatogrammes. Le pourcentage spécifié de points de données présentant la plus petite intensité est considéré comme étant du bruit.</p> <p>Les valeurs typiques se situent entre 20 et 60 %. Si des petits pics ne sont pas trouvés en présence de pics plus grands, cette valeur doit alors être abaissée.</p>

Paramètres des algorithmes d'intégration

Étiquette	Description
Baseline Sub. Window	<p>Après le lissage, mais avant tout autre traitement, les chromatogrammes sont soustraits de la référence afin d'éliminer les irrégularités dans les données. Pour chaque point de données, la référence est calculée à l'aide des points de données situés à gauche et à droite du point en cours et présentant une intensité minimale (dans la fenêtre de soustraction).</p> <p>La valeur exacte de ce paramètre n'est pas essentielle, sous réserve qu'elle soit au moins plusieurs fois supérieure à la largeur de pic attendue.</p>
Peak Splitting	<p>Ce paramètre détermine si un pic potentiellement bruyant est identifié comme un seul pic ou comme deux pics distincts (voire plus). Si le creux entre deux pics potentiels est inférieur à la valeur spécifiée, un seul pic est alors trouvé. Dans le cas contraire, deux pics sont trouvés.</p> <p>La définition de ce paramètre sur une valeur élevée évite aux pics bruyants d'être divisés et considérés comme deux pics distincts. Toutefois, il convient d'utiliser une valeur plus basse si deux pics distinctes sont en élution (se chevauchent).</p>

Équations de régression

B

Cette section décrit les équations utilisées pour calculer les courbes de régression. Dans les équations suivantes, x représente la concentration de l'analyte pour les échantillons **Standard** et y représente l'aire ou l'amplitude de pic correspondante. Les variables exactes utilisées pour la régression dépendent de l'utilisation ou non d'un étalon interne et de l'utilisation de l'aire ou de l'amplitude du pic, comme illustré dans le [Tableau B-1](#).

Tableau B-1 Variables de régression

Étalon interne utilisé ?	Aire utilisée ?	x	y
Oui	Oui	$C_a / C_{is} / DF$	A_a / A_{is}
Oui	Non	$C_a / C_{is} / DF$	H_a / H_{is}
Non	Oui	C_a / DF	A_a
Non	Non	C_a / DF	H_a

où :

- C_a = concentration réelle de l'analyte
- C_{is} = concentration de l'étalon interne
- DF = facteur de dilution
- A_a = aire de pic de l'analyte
- A_{is} = aire de pic de l'étalon interne
- H_a = amplitude de pic de l'analyte
- H_{is} = amplitude de pic de l'étalon interne

Facteurs de pondération

Le [Tableau B-2](#) présente le calcul du facteur de pondération (w dans les équations) pour chacun des sept types de pondération.

Tableau B-2 Facteurs de pondération

Type de pondération	Poids (w)
Aucun	Toujours 1,0.
1/x	Si $ x < 10^{-5}$, alors $w = 10^5$. Sinon, $w = 1 / x $.
1 / x ²	Si $ x < 10^{-5}$, alors $w = 10^{10}$. Sinon, $w = 1 / x^2$.
1/y	Si $ y < 10^{-8}$, alors $w = 10^8$. Sinon, $w = 1 / y $.
1 / y ²	Si $ y < 10^{-8}$, alors $w = 10^{16}$. Sinon, $w = 1 / y^2$.
ln x	Si $x < 0$, alors une erreur est générée. Si $x < 10^{-5}$, alors $w = \ln 10^5$. Sinon, $w = \ln x $.
ln y	Si $y < 0$, alors une erreur est générée. Si $y < 10^{-8}$, alors $w = \ln 10^8$. Sinon, $w = \ln y $.

Régressions

Cette section donne les équations pour chacun des types de régression. Dans les équations suivantes, x, y et w sont tels que définis précédemment. Toutes les sommes sont calculées sur l'ensemble des échantillons **Standard**, à l'exception des échantillons **Standard** marqués comme non utilisés.

Le coefficient de correction est calculé comme suit :

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

où :

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

y_c = valeur y calculée avec l'équation appropriée ci-dessous

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

Linear

L'équation d'étalonnage linéaire est la suivante :

$$y = mx + b$$

La pente et l'interception sont calculées comme suit :

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

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

où :

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

Linear Through Zero

L'équation d'étalonnage linéaire passant par zéro est la suivante :

$$y = mx$$

La pente est calculée comme suit :

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

Mean Response Factor

L'étalonnage avec le facteur de réponse moyen est le suivant :

$$y = mx$$

Il s'agit de la même équation que dans le cas de la régression linéaire passant par zéro. Cependant, la pente est calculée de façon différente comme suit :

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

L'écart-type du facteur de réponse est calculé comme suit :

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

où :

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

Remarque : Les points ayant zéro pour valeur x sont exclus des sommes.

Si la ligne de points présente certaines zones linéaires et certaines zones courbes, utiliser alors la régression de puissance plutôt que la régression linéaire ou la régression quadratique pour obtenir une ligne quelque part entre ces ajustements.

Quadratic

L'équation d'étalonnage quadratique est la suivante :

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

Les coefficients polynomiaux sont calculés comme suit :

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

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

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

où :

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

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

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

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

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

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

Power

L'équation d'étalonnage de la fonction de puissance est la suivante :

$$y = ax^p$$

Les équations d'étalonnage linéaire sont utilisées comme décrit ci-dessus pour calculer la pente (m) et l'ordonnée (b), excepté que dans ces équations, x est remplacé par ln x et y est remplacé par ln y. Une fois cela effectué, a et p sont calculés comme suit :

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Si l'une des valeurs x ou y est négative ou est égale à zéro, une erreur est alors communiquée.

Wagner

L'équation d'étalonnage de Wagner est la suivante :

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

Les équations d'étalonnage quadratique sont utilisées comme décrit ci-dessus pour calculer a_0 , a_1 et a_2 , excepté que dans ces équations, x est remplacé par ln x et y est remplacé par ln y.

Si l'une des valeurs x ou y est négative ou est égale à zéro, une erreur est alors communiquée.

Hill

L'équation d'étalonnage de Hill est la suivante :

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

Il n'est pas possible de fournir une fonction analytique pour calculer a, b, c et n. Au lieu de cela, les coefficients sont déterminés selon la méthode itérative de Levenberg-Marquardt.

Calcul des concentrations finales

Cette section explique comment calculer la concentration finale à partir des équations de régression obtenues en utilisant la concentration et le facteur de dilution de l'étalon interne utilisés dans la concentration d'origine.

Linear

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

Linear Through Zero and Mean Response Factor

$$x = y / m$$

Quadratic

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

- Si les deux racines + et - se situent dans la plage des étalons, une erreur est alors générée, car il n'existe pas de solution unique.
- Si exactement une des deux racines se situe dans la plage de concentration des étalons, cette valeur est alors communiquée.
- Si les deux racines se situent en dessous de l'étalon de concentration la plus faible, la racine + est alors communiquée.
- Si les deux racines se situent au-dessus de l'étalon de concentration la plus élevée, la racine - est alors communiquée.
- Si la racine - se situe en dessous de l'étalon le plus faible et que la racine + se situe au-dessus de l'étalon le plus élevé, la racine - est alors communiquée si la différence à partir de l'étalon ayant la plus faible concentration est inférieure à la différence de la racine + à partir de la concentration la plus élevée. Sinon, la racine + est communiquée.

Power

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

Wagner

La même équation pour le cas quadratique est utilisée pour le calcul principal, excepté que x est remplacé par ln x et y est remplacé par ln y.

Hill

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

Cette section décrit l'utilisation de la fonctionnalité de rapports du logiciel pour créer des rapports formatés depuis le **tableau de résultats**.

Créer des rapports

Ce logiciel utilise des documents Microsoft Word comme modèles prédéfinis. Lorsqu'un rapport est créé, les valeurs sont extraites du tableau de résultats le plus récent et des fichiers associés.

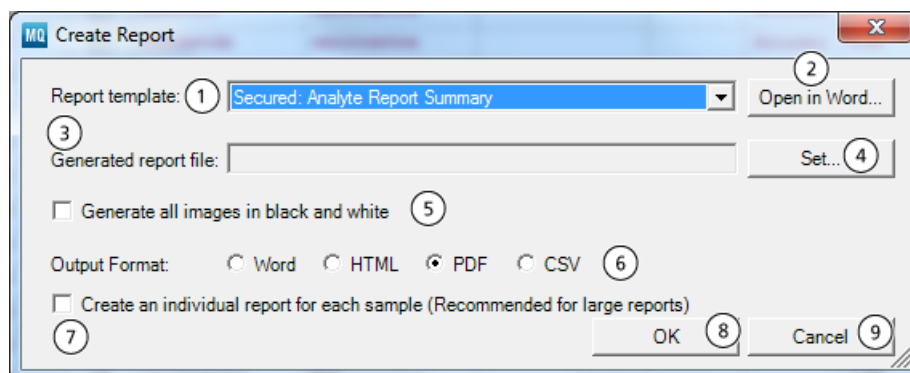
Les utilisateurs sont chargés de valider les modèles personnalisés. L'utilisateur peut modifier le format des nombres dans l'éditeur de modèle de rapport. Si le format des nombres n'est pas spécifié dans le modèle, le format indiqué dans **Results Table Column Settings** est alors utilisé dans le rapport. S'assurer que le nombre de décimales adéquat est utilisé.

Les méthodes contrôlées de sortie des données depuis le logiciel consistent à exporter les **tableaux de résultats**, à les transférer sur le LIMS et à établir un rapport. Les autres moyens de sortie des données tels que la copie et le collage depuis les **tableaux de résultats** ne sont pas contrôlés. Les utilisateurs ne doivent pas utiliser ces méthodes de sortie non contrôlées dans un but réglementaire.

Naviguer vers n'importe quel dossier afin d'accéder aux données et de les stocker. Les emplacements précédents à partir desquels des modèles ont été ouverts et dans lesquels des rapports ont été enregistrés sont ouverts par défaut.

1. Ouvrir un **tableau de résultats**.
2. Cliquer sur **File > Create Report and Save Results Table**.

Figure C-1 Boîte de dialogue Create Report



Élément	Description
1	Report template : sélectionner un modèle dans la liste.
2	Open in Word : cliquer pour ouvrir le modèle de rapport spécifié directement dans Microsoft Word afin de le vérifier ou de le modifier.
3	Generated report file : affiche le nom du fichier du rapport.
4	Set : cliquer pour spécifier le nom de fichier du rapport à générer.
5	Generate all images in black and white : cocher la case pour imprimer en noir et blanc.
6	Output Format : Word, HTML, PDF ou CSV. PDF constitue la méthode de sortie la plus sécurisée, car le rapport ne peut pas être modifié.
7	Create an individual report for each sample (Recommended for large reports) : cocher la case pour créer un rapport individuel pour chaque échantillon (recommandé pour les rapports volumineux).
8	Cliquer sur OK pour imprimer le rapport.
9	Cliquer sur Cancel pour fermer la boîte de dialogue sans créer de rapport.

3. Sélectionner un modèle dans la liste Report template. Les modèles de rapport sont stockés dans les emplacements suivants :

- Pour Windows 7 et 10 : C:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

Voir [Modèles de rapports à la page 136](#) pour une description des modèles.

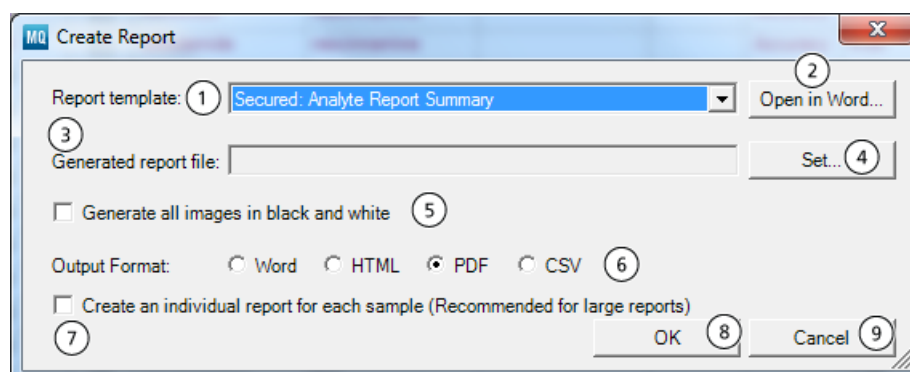
4. Cliquer sur **Set** pour créer le nom et l'emplacement du rapport.
5. Cliquer sur **OK** pour générer le rapport.

Créer des modèles de rapport personnalisés

Les méthodes contrôlées de sortie des données depuis le logiciel consistent à exporter les **tableaux de résultats**, à les transférer sur le LIMS et à établir un rapport. Les autres moyens de sortie des données tels que la copie et le collage depuis les **tableaux de résultats** ne sont pas contrôlés. Les utilisateurs ne doivent pas utiliser ces méthodes de sortie non contrôlées dans un but réglementaire.

1. Ouvrir ou créer un **tableau de résultats**.
2. Cliquer sur **File > Create Report and Save Results Table**.

Figure C-2 Boîte de dialogue Create Report



Élément	Description
1	Report template : sélectionner un modèle dans la liste.
2	Open in Word : cliquer pour ouvrir le modèle de rapport spécifié directement dans Microsoft Word afin de le vérifier ou de le modifier.
3	Generated report file : affiche le nom du fichier du rapport.
4	Set : cliquer pour spécifier le nom de fichier du rapport à générer.
5	Generate all images in black and white : cocher la case pour imprimer en noir et blanc.
6	Output Format : Word, HTML, PDF ou CSV. PDF constitue la méthode de sortie la plus sécurisée, car le rapport ne peut pas être modifié.
7	Create an individual report for each sample (Recommended for large reports) : cocher la case pour créer un rapport individuel pour chaque échantillon (recommandé pour les rapports volumineux).
8	Cliquer sur OK pour imprimer le rapport.
9	Cliquer sur Cancel pour fermer la boîte de dialogue sans créer de rapport.

3. Sélectionner un modèle dans la liste **Report template**.

4. Cliquer sur **Open in Word**.

Le modèle docx s'ouvre et l'éditeur de modèle Reporter apparaît à droite. L'éditeur de modèle est automatiquement renseigné à l'aide des informations d'étiquette.

5. Modifier le modèle selon les besoins.

6. Enregistrer le modèle.

Modèles de rapports

Le tableau suivant décrit les modèles disponibles accessibles depuis <lecteur>:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

En cas de création d'un modèle personnalisé, il incombe à l'utilisateur de valider le modèle. L'utilisateur peut modifier le format des nombres dans l'éditeur de modèles de rapport. Si le format des nombres n'est pas spécifié dans le modèle, le format indiqué dans la boîte de dialogue **Results Table Column Settings** sera utilisé dans le rapport. La validation du modèle de rapport personnalisé est sous la responsabilité de l'utilisateur.

Certains modèles de rapport utilisent des requêtes. Les utilisateurs peuvent créer des requêtes en utilisant des formules basées sur Microsoft Excel pour évaluer, manipuler et présenter les données du tableau de résultats dans un rapport. La balise MetaField du modèle de rapport indique au rapport le nom du fichier de requête à utiliser. Pour pouvoir utiliser des requêtes, le nom du fichier de requête doit être spécifié dans la balise MetaField du modèle de rapport. Les requêtes doivent également comporter l'extension « .query » pour pouvoir être reconnues en tant que requête. Les requêtes doivent être stockées dans le dossier Reporter qui stocke les modèles de rapport.

Nous recommandons à l'utilisateur de valider les résultats générés lorsqu'un modèle Reporter est utilisé, tout particulièrement lorsque des requêtes sont utilisées dans un modèle. Si des modifications sont apportées au modèle de rapport après validation, le modèle de rapport doit alors être de nouveau validé. Les modifications apportées au modèle de rapport incluent toute modification des balises Reporter ou des requêtes.

Tableau C-1 Description des modèles de rapport

Modèle	Description
Analyte Report Summary	Rapport sécurisé comprenant un tableau récapitulatif des échantillons pour chaque analyte. Ce modèle de rapport est adapté à un tableau de résultats avec des groupes définis.
Calibration Curves Template	Rapport comprenant des informations sur le fichier, un tableau de statistiques (étalons) et une courbe d'étalonnage pour les analytes, une page par analyte.
Metric Plot_IS Area	Rapport sécurisé comprenant, pour chaque étalon interne, une section incluant des informations sur le fichier et le tracé métrique de l'aire du pic de l'étalon interne.
Per Analyte Ion Ratio Report	Rapport sécurisé comprenant, pour chaque analyte, une section incluant des informations sur le fichier, le tableau de résultats, les courbes d'étalonnage de chaque analyte et des chromatogrammes incluant l'étalon interne et chaque analyte. Ce modèle est adapté à un tableau de résultats avec des groupes définis.
Per Analyte Report	Rapport sécurisé comprenant, pour chaque analyte, une section incluant des informations sur le fichier, le tableau de résultats, les courbes d'étalonnage de chaque analyte et des chromatogrammes incluant l'étalon interne et chaque analyte. Ce modèle est adapté à un tableau de résultats sans groupe défini.

Tableau C-1 Description des modèles de rapport (Suite)

Modèle	Description
Per Sample Ion Ratio Report	Rapport sécurisé comprenant, pour chaque échantillon, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon, le tableau de résultats de l'analyte, les courbes d'étalonnage de chaque analyte et des chromatogrammes incluant l'étalon interne et chaque analyte. Ce modèle est adapté à un tableau de résultats avec des groupes définis.
Per Sample Report	Rapport sécurisé comprenant, pour chaque échantillon, une section incluant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon, le tableau de résultats de l'analyte, les courbes d'étalonnage de chaque analyte et des chromatogrammes incluant l'étalon interne et chaque analyte. Ce modèle est adapté à un tableau de résultats sans groupe défini.
Sample Report Summary	Rapport sécurisé comprenant un tableau récapitulatif des analytes pour chaque échantillon. Ce modèle de rapport est adapté à un tableau de résultats avec des groupes définis.
Sample Report with Concentration Threshold.docx	Rapport comprenant des informations sur le fichier, des informations sur l'échantillon et un tableau récapitulatif des résultats pour chaque échantillon inconnu. Le tableau récapitulatif des résultats inclut les seuils de concentration spécifiques aux analytes. Les analytes sont marqués comme positifs si la concentration est supérieure au seuil. Ce modèle fait référence au fichier Sample Report With Concentration Threshold.query. L'utilisateur peut modifier le fichier de requête pour spécifier le nom des analytes, les groupes d'analytes (par exemple, classe de composé) et les seuils de concentration des analytes.

Balises de modèles de rapport

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport

Type	Type de champ	Description de la balise
Balises du schéma fournisseur de données du logiciel Analyst [®] MD		
Analyte	ForEach	Fait une boucle sur tous les analytes dans l'ordre dans lequel ils sont définis dans le tableau de résultats.

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
AnalyteGroup	ForEach	Fait une boucle sur les divers groupes d'analytes uniquement. Les balises TextField ou PictureField récupèrent des valeurs pour l'ion quantificateur. Si les balises de ce type contiennent une balise For_Each supplémentaire spécifiant l'attribut Ratiolons, la boucle interne concerne alors uniquement les ions qualificateurs qui font partie du groupe actuel.
InternalStandard	ForEach	Fait une boucle sur tous les étalons internes.
QCStatistics	ForEach	Fait une boucle sur toutes les statistiques de contrôle qualité.
Ratiolons	ForEach	Voir AnalyteGroup.
Sample	ForEach	Fait une boucle sur chaque échantillon. Cette balise est utilisée, par exemple, conjointement avec une configuration de balise TextField pour insérer le nom de l'échantillon.
Statistics	ForEach	Fait une boucle sur toutes les statistiques d'étalon.
MQ_Group	ForEach	Fait une boucle sur les divers groupes, notamment les groupes ou sous-groupes d'étalons internes. Les balises TextField ou PictureField récupèrent des valeurs pour l'ion quantificateur. Si les balises de ce type contiennent une balise For_Each supplémentaire spécifiant l'attribut Ratiolons, la boucle interne concerne alors uniquement les ions qualificateurs qui font partie du groupe actuel.
MQ_AnalyteRatiolons	ForEach	Voir MQ_Group pour le qualificateur de l'analyte uniquement.
MQ_ISRatiolons	ForEach	Voir MQ_Group pour le qualificateur de l'étalon interne uniquement.

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
AnalyteRatio	PictureField	Affiche les superpositions des chromatogrammes du quantificateur et du qualificateur du sous-groupe d'analytes. Affiche la ligne continue au milieu pour indiquer le ratio d'ion attendu. Ligne du milieu = amplitude du pic du quantificateur x ratio d'ion attendu. Affiche les limites inférieure et supérieure de la plage du ratio d'ion acceptable avec des lignes en pointillés. Limite inférieure = amplitude du pic du quantificateur x ratio d'ion attendu x $((100-\text{tolérance})/100)$. Limite supérieure = amplitude du pic du quantificateur x ratio d'ion attendu x $((100+\text{tolérance})/100)$.
AnalyteRatioNoLines	PictureField	Affiche les superpositions des chromatogrammes du quantificateur et du qualificateur du sous-groupe d'analytes sans les lignes.
Calibration	PictureField	Affiche la courbe d'étalonnage de l'analyte.
IS_AnalyteRatio	PictureField	Affiche les superpositions des chromatogrammes du quantificateur et du qualificateur du sous-groupe d'étalons internes. Affiche la ligne continue au milieu pour indiquer le ratio d'ion attendu. Ligne du milieu = amplitude du pic du quantificateur x ratio d'ion attendu. Affiche les limites inférieure et supérieure de la plage du ratio d'ion acceptable avec des lignes en pointillés. Limite inférieure = amplitude du pic du quantificateur x ratio d'ion attendu x $((100-\text{tolérance})/100)$. Limite supérieure = amplitude du pic du quantificateur x ratio d'ion attendu x $((100+\text{tolérance})/100)$.
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField	Affiche les superpositions des chromatogrammes du quantificateur et du qualificateur du sous-groupe d'étalons internes sans les lignes.
IS_PeakReview	PictureField	Affiche le chromatogramme de l'étalon interne.
Overlay_All_XIC	PictureField	Affiche la superposition des chromatogrammes de tous les analytes de l'échantillon.
Overlay_All_XIC_with_IntStd	PictureField	Affiche la superposition des chromatogrammes de tous les analytes et étalons internes de l'échantillon.

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
Overlay_All_XIC_with_IntStds_NoLegend	PictureField	Affiche la superposition des chromatogrammes de tous les analytes et étalons internes de l'échantillon sans la légende.
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField	Affiche la superposition des chromatogrammes de tous les analytes de l'échantillon, sans la légende.
PeakReview	PictureField	Affiche le chromatogramme de l'analyte.
TIC	PictureField	Affiche le TIC de l'échantillon.
Acquisition_Date	TextField	Date à laquelle cet échantillon a été acquis. Affiche "Acquisition Date & Time".
Acquisition_Duration_Minutes	TextField	Affiche la période des données acquises de l'échantillon communiquée en minutes.
Acquisition_Method	TextField	Méthode d'acquisition utilisée pour acquérir l'échantillon. Affiche "Acq. Method Name".
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField	Affiche "Component Comment".
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField	Affiche la valeur de régression R.
Analyte_AnalyteRegression	TextField	Affiche l'équation de régression, notamment la valeur R et la pondération.
Analyte_Concentration	TextField	Concentration réelle de l'analyte telle que définie par l'utilisateur dans le tableau de résultats. Affiche "Actual Concentration".
Analyte_Expected_RT	TextField	Temps de rétention attendu pour un analyte spécifique, en minutes. Affiche "Expected RT".
Analyte_Integration_Type	TextField	Type d'intégration utilisé pour des pics d'analyte spécifiques. Les pics peuvent être intégrés manuellement ou peuvent être intégrés à l'aide des paramètres disponibles. Affiche "Integration Type".
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField	Ratio entre l'aire du pic de l'analyte et l'aire du pic d'une solution d'étalon interne. Calculé en tant qu'aire du pic de l'analyte / aire du pic IS. Affiche "Area Ratio".

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField	Ratio entre la hauteur du pic de l'analyte en comptage par seconde (cps) et la hauteur du pic de la solution d'étalon interne. Calculé en tant que hauteur du pic de l'analyte / hauteur du pic IS. Affiche "Height Ratio".
Analyte_Mass_Ranges	TextField	Transition MRM pour un analyte, définie dans la méthode d'acquisition utilisée. Affiche "Mass Info".
Analyte_Peak_Area	TextField	Aire de pic d'un analyte dans un chromatogramme. Affiche "Area".
Analyte_Peak_Height	TextField	Hauteur pour le pic de l'analyte, en comptage par seconde (cps). Affiche "Height".
Analyte_Peak_Name	TextField	Nom défini par l'utilisateur attribué à des échantillons spécifiques lors de la création du tableau de résultats. Affiche "Component Name".
Analyte_Peak_Width	TextField	Largeur d'un pic d'analyte, en minutes. Affiche "Total Width".
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	Largeur à 50 % de la hauteur du pic pour un pic d'analyte, en minutes. Affiche "Width at 50%".
AnalyteQuantPeak_info	TextField	Affiche les informations d'intégration, notamment l'algorithme et les paramètres.
Analyte_QTY	TextField	Quantité d'analyte, calculée à partir de la concentration calculée d'analyte et le rapport poids/volume (par exemple, ng d'analyte par gramme d'échantillon). Affiche "Quality".
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField	Premier analyte du groupe.
Analyte_Processing_Alg	TextField	Affiche l'algorithme d'intégration.

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
Analyte_Retention_Time	TextField	Temps de rétention courant pour un analyte dans un chromatogramme utilisé pour générer un tableau de résultats. Affiche "Retention Time".
Analyte_R_Squared	TextField	Affiche la valeur de régression R^2 .
Analyte_RT_Window	TextField	Plage de temps, en secondes, dans laquelle l'apparition d'un pic de l'analyte est attendue. Le centre de cette plage est le temps de rétention attendu pour l'analyte. Affiche la valeur de "RT Half Window" pour les paramètres d'intégration.
Analyte_Signal_To_Noise	TextField	Rapport signal-bruit pour un pic d'analyte spécifique. Affiche "Signal/Noise".
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField	Pente de la ligne de base pour un analyte, prise en termes de % intensité/minutes. Affiche "Slope of Baseline" pour l'analyte.
Analyte_Start_Scan	TextField	Balayage de début de l'analyte.
Analyte_Start_Time	TextField	Heure à laquelle le pic de l'analyte commence, en minutes. Affiche "Start Time".
Analyte_Stop_Scan	TextField	Balayage d'arrêt de l'analyte.
Analyte_Stop_Time	TextField	Heure à laquelle le pic de l'analyte se termine, en minutes. Affiche "End Time".
Analyte_Unit	TextField	Unités utilisées pour représenter la concentration pour les analytes. L'unité standard pour le tableau de résultats est ng/mL. Affiche "Conc. Units".
Analyte_Use_Record	TextField	Case à cocher qui détermine si un disque spécifié sera utilisé pour une analyse subséquente telle qu'une analyse des courbes d'étalonnage. Affiche "Used".
Analyte_Count	TextField	Affiche le nombre total d'analytes.

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
Analyte_Index	TextField	Affiche le numéro d'ordre de l'analyte dans l'échantillon en commençant par 0.
Calculated_Accuracy	TextField	Précision du pic de l'analyte, déterminée par la comparaison entre la concentration réelle de l'analyte et la concentration calculée de l'analyte. Affiche "Accuracy".
Calculated_Concentration	TextField	Concentration calculée pour le pic de l'analyte exécutée par le logiciel Analyst [®] MD en utilisant l'aire du pic. Affiche "Calculated Concentration".
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField	Temps de rétention pour un enregistrement d'analyte ou d'étalon interne spécifique dans un tableau de résultats. Affiche "Relative RT".
IS_Concentration	TextField	Concentration réelle d'un étalon interne telle que définie par l'utilisateur dans le tableau de résultats. Affiche "IS Actual Concentration".
IS_Expected_RT	TextField	Temps de rétention attendu d'un pic d'étalon interne, en minutes. Affiche "IS Expected RT".
IS_Integration_Type	TextField	Type d'intégration utilisé pour les pics d'étalon interne spécifiques. Les pics peuvent être intégrés manuellement ou peuvent être intégrés à l'aide des paramètres disponibles. Affiche "IS Integration Type".
IS_Mass_Ranges	TextField	Transition MRM définie par l'utilisateur pour un étalon interne, définie dans la méthode d'acquisition utilisée. Affiche "IS Mass Info".
IS_Peak_Area	TextField	Aire de pic pour un étalon interne. Affiche "IS Area".
IS_Peak_Height	TextField	Hauteur pour le pic d'étalon interne, en comptage par seconde (cps). Affiche "IS Height".

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
IS_Peak_Name	TextField	Nom défini par l'utilisateur attribué à un étalon interne spécifique, lors de la création du tableau de résultats. Affiche "IS Name".
IS_Peak_Width	TextField	Largeur d'un pic d'analyte, en minutes. Affiche "IS Total Width".
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	Largeur de pic, en minutes, pour un pic d'étalon interne à mi-hauteur, en comptage par seconde (cps). Affiche "IS Width at 50%".
IS_Retention_Time	TextField	Temps de rétention réel pour un étalon interne. Affiche "IS Retention Time".
IS_RT_Window	TextField	Plage de temps, en secondes, dans laquelle l'apparition d'un pic d'étalon interne est attendue. Le centre de cette plage est le temps de rétention attendu pour l'étalon interne. Affiche la valeur de "RT Half Window" pour les paramètres d'intégration de l'étalon interne.
ISQuantPeak_Info	TextField	Affiche les informations d'intégration, notamment l'algorithme et les paramètres.
IS_Signal_To_Noise	TextField	Rapport signal-bruit d'un pic d'étalon interne. Affiche "IS Signal/Noise".
IS_Slope_of_Baseline	TextField	Pente de la ligne de base pour un étalon interne, prise en termes de % intensité/minutes. Affiche "Slope of Baseline" pour l'étalon interne.
IS_Start_Scan	TextField	Balayage de début de l'étalon interne.
IS_Start_Time	TextField	Heure à laquelle le pic de l'étalon interne commence, en minutes. Affiche "IS Start Time".
IS_Stop_Scan	TextField	Heure d'arrêt de l'étalon interne.
IS_Stop_Time	TextField	Heure à laquelle le pic de l'étalon interne se termine, en minutes. Affiche "IS End Time".

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
IS_Units	TextField	Unités utilisées pour représenter la concentration pour les étalons internes. L'unité standard pour le tableau de résultats est ng/mL. Affiche "Conc. Units" pour l'étalon interne.
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField	Affiche la valeur Max. Accuracy Tolerance for LLOQ dans la boîte de dialogue Outlier Settings de la méthode de quantification.
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField	Affiche la valeur Max. Accuracy Tolerance for Standards dans la boîte de dialogue Outlier Settings de la méthode de quantification.
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField	Affiche la valeur Max. Accuracy Tolerance for QCs dans la boîte de dialogue Outlier Settings de la méthode de quantification.
MQ_Analyte_Group_Name	TextField	Affiche le nom du groupe d'analytes.
MQ_Created_With	TextField	Affiche le nom du produit qui sert à générer le rapport.
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField	Affiche "Expected Ion Ratio".
MQ_Group_Index	TextField	Affiche le numéro d'ordre du groupe dans l'échantillon en commençant par 1. Utiliser cette balise avec la boucle ForEach MQ_Group.
MQ_Group_Name	TextField	Affiche le nom du groupe. Utiliser cette balise avec la boucle ForEach MQ_Group.
MQ_Ion_Ratio	TextField	Affiche "Ion Ratio".
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField	Affiche la valeur Max. Ion Ratio Tolerance for the analyte dans la boîte de dialogue Outlier Settings de la méthode de quantification.
MQ_IS_Group_Name	TextField	Affiche le nom du groupe d'étalons internes.
MQ_IsRowHidden	TextField	Affiche la ligne masquée dans le tableau de résultats.
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField	Affiche la valeur Lower Limit of Calculated Concentration dans la boîte de dialogue Outlier Settings de la méthode de quantification.
MQ_Outlier_Reasons	TextField	Affiche "Outlier Reasons".
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField	Affiche "Asymmetry Factor".
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField	Affiche "Baseline Delta/Height".

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField	Affiche "End Time at 10%".
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField	Affiche "End Time at 5%".
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField	Affiche "Points Across Baseline".
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField	Affiche "Points Across Half Height".
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField	Affiche "Start Time at 10%".
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField	Affiche "Start Time at 5%".
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField	Affiche "Tailing Factor".
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField	Affiche "Width at 10%".
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField	Affiche "Width at 5%".
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField	Affiche "Mass Range" pour le quantificateur dans le groupe d'analytes.
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField	Affiche "Area" pour le quantificateur dans le groupe d'analytes.
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField	Affiche "Calculated Concentration" pour le quantificateur dans le groupe d'analytes.
MQ_Report_Generation_Date	TextField	Affiche la date de la génération du rapport qui reflète les paramètres de culture du logiciel.
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField	Affiche la valeur Upper Limit of Calculated Concentration dans la boîte de dialogue Outlier Settings de la méthode de quantification.
Query_Name	TextField	Nom de la requête référencée dans le modèle de rapport (le cas échéant).
Record_Modified	TextField	Affiche "Modified".
Reporter_Template_Name	TextField	Nom du modèle de rapport utilisé pour créer le rapport.
ResultTbl_CreateDate	TextField	Affiche la date de création du tableau de résultats.
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField	Affiche l'algorithme de traitement utilisé pour traiter le tableau de résultats (par exemple, MQ4, SignalFinder1).
ResultTbl_Name	TextField	Affiche le nom de fichier pour le tableau de résultats.

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
ResultTbl_ProjName	TextField	Affiche le nom du projet dans lequel est enregistré le tableau de résultats.
Sample_Comment	TextField	Commentaire en rapport avec l'échantillon. Affiche "Sample Comment".
Sample_Dilution_Factor	TextField	Nombre total de volumes d'unités dans lesquels l'échantillon est dissolu. Affiche "Dilution Factor".
Sample_File_Name	TextField	Nom du fichier des données où sont enregistrées les données brutes pour un échantillon spécifique. Affiche "Original Filename".
Sample_ID	TextField	Valeur définie par l'utilisateur pour répertorier les identifiants spécifiques à chaque échantillon ou analyte dans le tableau de résultats. Affiche "Sample ID".
Sample_Index	TextField	Affiche "Index".
Sample_Count	TextField	Affiche le nombre total d'analytes.
Sample_InjectionVolume	TextField	Volume d'injection utilisé dans l'auto-échantillonneur au moment où l'échantillon original est injecté, tel que défini dans la méthode d'acquisition. Affiche "Injection Volume".
Sample_Instrument	TextField	Affiche le type d'instrument utilisé pour acquérir l'échantillon, qui est extrait du fichier wiff.
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField	Affiche le numéro de série de l'instrument ayant servi à acquérir l'échantillon, qui est extrait du fichier wiff.
Sample_Name	TextField	Nom défini par l'utilisateur attribué à des échantillons spécifiques lors de la création du tableau de résultats. Affiche "Sample Name".
Sample_Operator	TextField	Utilisateur connecté au moment de l'acquisition. Affiche "Operator Name".

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
Sample_Plate_Number	TextField	Position de la planche d'échantillons dans l'auto-échantillonneur utilisé au moment de l'acquisition des échantillons. Affiche "Plate Number".
Sample_Rack_Number	TextField	Position du rack d'échantillons dans l'auto-échantillonneur utilisé au moment de l'acquisition des échantillons. Affiche "Rack Number".
Sample_Type	TextField	Valeur définie par l'utilisateur indiquant de quel type d'échantillon provient chaque injection. Par exemple, Blank, Standard, etc. Affiche "Sample Type".
Sample_Vial_Position	TextField	Position du flacon définie dans le lot d'acquisition utilisé dans l'auto-échantillonneur pour déterminer quel flacon contient l'échantillon. Affiche "Vial Number".
Sample_File_Full_Name	TextField	Affiche le nom de fichier avec le chemin complet.
Sample_Index_In_Wiff	TextField	Affiche le numéro d'ordre de l'échantillon dans le fichier wiff, en commençant par 0.
Sta_Accuracy	TextField	Précision du pic de l'analyte, déterminée par la comparaison entre la concentration réelle de l'analyte et la concentration calculée de l'analyte. Affiche "Accuracy".
Sta_CV	TextField	Affiche le pourcentage de variation conditionnelle qui dicte à quel degré, en termes de pourcentage, une valeur de concentration calculée dévie de la valeur de concentration moyenne. Calculé en prenant l'écart-type/la moyenne.
Sta_ExpectedConcent	TextField	Concentration attendue pour un analyte calculée par le logiciel Analyst [®] MD en utilisant l'aire du pic. Affiche "Actual Concentration".

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
Sta_Mean	TextField	Affiche la valeur moyenne des concentrations calculées qui sont calculées par le logiciel Analyst [®] MD.
Sta_NumVal	TextField	Affiche le nombre de valeurs qui composent la statistique. Nombre d'échantillons pris en compte lors du calcul de la moyenne.
Sta_QCAccuracy	TextField	Précision déterminée par la comparaison entre la concentration attendue et la concentration réelle pour un échantillon de contrôle qualité telle que définie par l'utilisateur dans la colonne Sample Type. Affiche "Accuracy".
Sta_QCCV	TextField	Affiche le pourcentage de variation conditionnelle qui dicte à quel degré, en termes de pourcentage, une valeur de concentration calculée dévie de la valeur de concentration moyenne. Calculé en prenant l'écart-type/la moyenne. S'applique à un échantillon de contrôle qualité.
Sta_QCExpectedConcent	TextField	Concentration attendue pour un échantillon de contrôle qualité, tel que définie par l'utilisateur. Affiche "Actual Concentration" pour l'échantillon de contrôle qualité.
Sta_QCMean	TextField	Affiche la valeur moyenne des concentrations calculées qui sont calculées par le logiciel Analyst [®] MD pour un échantillon de contrôle qualité.
Sta_QCNumVal	TextField	Affiche le nombre de valeurs prises en compte pour la moyenne de la concentration d'un échantillon de contrôle qualité lors du calcul de la moyenne.
Sta_QCStdDev	TextField	Affiche l'écart-type pour les valeurs de concentration de chaque échantillon. L'écart-type représente une mesure de la diffusion d'un ensemble de valeurs à partir de la valeur moyenne.

Tableau C-2 Balises de modèles de rapport (Suite)

Type	Type de champ	Description de la balise
Sta_StdDev	TextField	Affiche l'écart-type d'un échantillon Standard. L'écart-type représente une mesure de la diffusion d'un ensemble de valeurs à partir de la valeur moyenne.
CUSTOM	TextField	Affiche la valeur des colonnes personnalisées du tableau de résultats.

Bruit relatif et calculs du ratio signal sur bruit

D

Lors du traitement des données quantitatives de spectrométrie de masse, il est important de déterminer si un pic donné est significatif ou non, « significatif » signifiant généralement « ce signal excède-t-il le bruit de fond ? ».

En règle générale, l'amplitude du pic est comparée au bruit de fond mesuré dans une région sans pic où le bruit est généralement estimé comme représentant une ou trois fois l'écart-type des points de données figurant dans cette plage. Cette approche est loin d'être idéale pour les motifs suivants :

- Elle est subjective, la région du bruit étant sélectionnée manuellement.
- Une région de bruit de fond sans pic pourrait ne pas exister ou la région pourrait être trop étroite pour estimer le bruit avec précision.
- Le bruit au point culminant pourrait être tout à fait différent de celui dans la région du bruit sélectionnée.
- Le facteur « un ou trois » est également subjectif et des autorités différentes émettent des recommandations différentes.
- Le bruit apparent peut être modifié si les données ont été prétraitées. Par exemple, il peut être lissé ou seuillé.

L'utilisation du concept de bruit relatif (R_n) permet de développer facilement une méthode simple pour calculer le bruit attendu à un point quelconque des données afin de le comparer au signal mesuré. Il s'agit d'une métrique objective et fiable qui peut servir à calculer le ratio signal sur bruit (S/N) et à évaluer et comparer les performances de l'instrument et du dosage. Le concept de bruit relatif revêt de nombreuses applications, notamment le calcul du ratio S/N .

L'algorithme fondamental fonctionne comme suit :

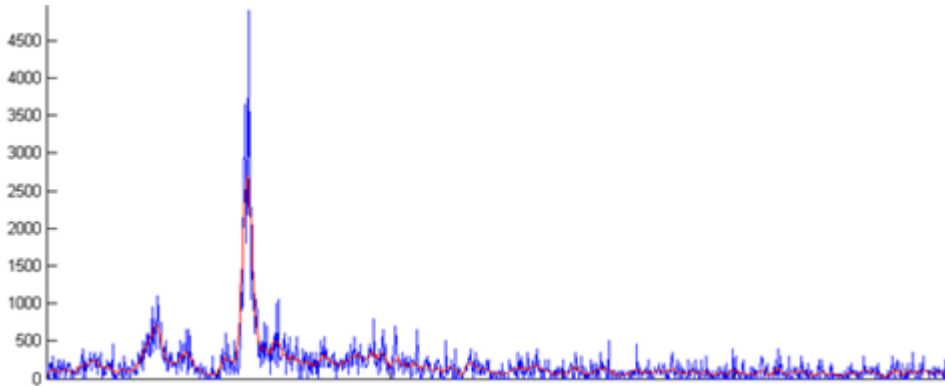
1. Élaborer un modèle de bruit permettant à l'utilisateur de calculer le bruit attendu à un point quelconque de l'enregistrement de données compte tenu du niveau du signal sous-jacent à ce point.

Le modèle de bruit peut être déterminé à partir de considérations théoriques ou être modélisé à partir de mesures réelles pour un système spécifique. Pour les détecteurs de comptage d'impulsions, l'écart-type d'un signal, et par conséquent le bruit attendu, est proportionnelle à la racine carrée du signal et varie par conséquent avec le signal. Les autres systèmes comprendront un composant « bruit blanc » constant éventuellement combiné à un composant dépendant de l'intensité.

2. Estimer le signal sous-jacent à partir du signal mesuré.

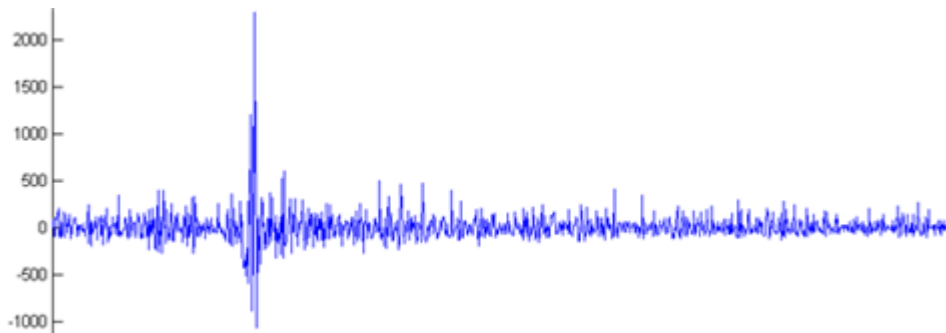
Il est possible d'y parvenir selon plusieurs méthodes, mais la plus simple consiste à générer une version lissée des données, comme illustré à la [Figure D-1](#).

Figure D-1 Superposition des données brutes et lissées



3. Mesurer le bruit réel sur les données en utilisant tous les points (pics et bruit de fond).
Pour ce faire, soustraire l'estimation du signal sous-jacent du signal mesuré à chaque point des données où le signal lissé a été soustrait du signal d'origine. Cela est également connu sous le nom de bruit delta. La plage du bruit delta est raisonnablement constante, excepté au niveau des grands pics, car le bruit dépend du signal et est par conséquent plus important lorsque le signal est plus grand. Voir [Figure D-2](#).

Figure D-2 Tracé des valeurs de bruit delta de chaque point de données



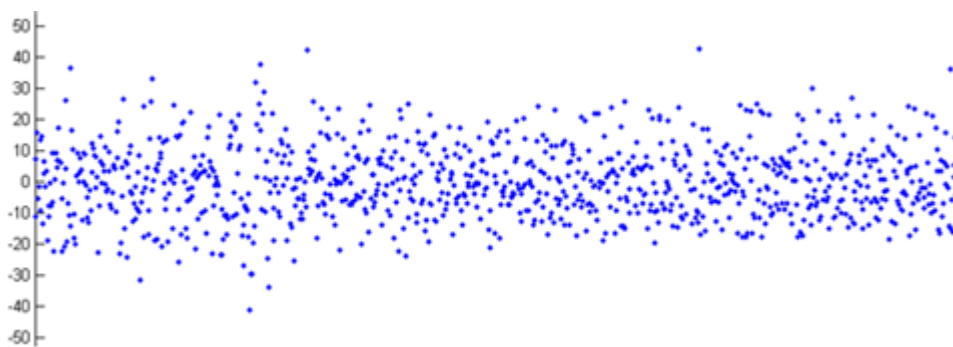
4. À chaque point de données, calculer le ratio du bruit mesuré par rapport au bruit attendu.

En d'autres termes, à chaque point de données, nous divisons le bruit mesuré à l'étape 3 par la valeur prédite par notre modèle de bruit (dans notre cas, la racine carrée de l'intensité). Si le modèle de bruit est correct, une série de valeurs demeurant essentiellement contraintes par des limites, comme indiqué à la [Figure D-3](#), est alors générée. La [Figure D-3](#) illustre également le tracé de

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

Remarque : Cela diminue la variation importante du bruit delta et produit un ensemble de valeurs bien délimitées.

Figure D-3 Modèle de bruit

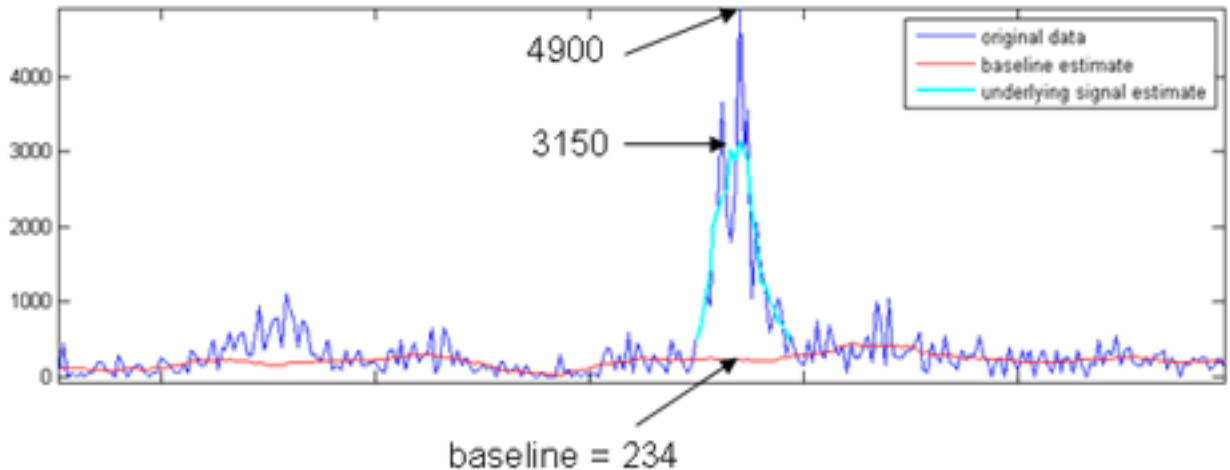


Bruit relatif et calculs du ratio signal sur bruit

5. Calculer l'écart-type des valeurs du ratio. Il s'agit du R_n , une estimation de la relation la plus vraisemblable entre le bruit delta réel et celui prédit par le modèle. La valeur est ainsi de 9,5 dans la [Figure D-3](#).

La [Figure D-4](#) illustre un exemple d'utilisation du bruit relatif pour calculer le ratio S/N.

Figure D-4 Superposition des données brutes, des estimations du signal sous-jacent et des estimations de la ligne de base



Comme décrit précédemment :

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

Dans cet exemple précis :

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

Si le point culminant du pic est utilisé comme signal, le ratio S/N est alors de 34 (4 900/145) et si l'amplitude du signal lissé est utilisée, le ratio S/N est alors de 22 (3 150/145).

Lors de la communication du ratio S/N, l'algorithme d'intégration MQ4 utilise la procédure décrite ici et le point culminant du pic comme signal. Étant donné que l'algorithme d'intégration SignalFinder™ ajuste un modèle au pic, il utilise l'amplitude du profil ajusté. Le ratio S/N communiqué est ainsi plus petit. Toutefois, il représente une valeur plus précise, car il est moins affecté par d'éventuels pics de bruit. L'algorithme d'intégration SignalFinder adopte également une approche plus sophistiquée de l'estimation de la ligne de base de sorte que pour ces deux motifs, les valeurs du ratio S/N communiquées par les deux algorithmes ne sont pas identiques bien qu'elles soient généralement similaires.

Pour résumer, par rapport à l'approche habituelle d'estimation du bruit en tant qu'écart-type d'une région de bruit de fond, l'approche du bruit relatif pour le calcul du ratio S/N comporte les avantages suivants :

- Elle est bien moins subjective, car une région de bruit de fond n'a pas besoin d'être sélectionnée manuellement.
- Il est possible de prédire un ratio S/N précis, même en l'absence de régions sans pic sur le chromatogramme.

- La ligne de base, et par conséquent le bruit, sont estimés près du pic d'intérêt. Cela peut faire une grande différence quant à la valeur du ratio S/N communiquée, car la région de bruit de fond sélectionnée pour l'approche habituelle pourrait être bien plus silencieuse que le bruit de fond près du pic. Comme décrit précédemment, le ratio S/N calculé selon l'approche **Relative Noise** pourrait produire des valeurs plus petites que l'approche habituelle. Ce sont toutefois là des valeurs plus précises et plus utiles. Voir [Figure D-4](#).

Pour rendre la colonne **Signal / Noise** visible dans le **tableau de résultats**, voir [Modifier les colonnes affichées dans le tableau de résultats à la page 91](#).

Remarque sur le ratio signal sur bruit en cas d'utilisation de l'algorithme d'intégration SignalFinder

Étant donné que l'algorithme d'intégration SignalFinder™ calcule le ratio signal sur bruit de manière plus précise (et prédit par conséquent les CV de manière plus précise), si l'approche du ratio signal sur bruit à 1-sigma est utilisée, envisager alors de diminuer la valeur du ratio signal sur bruit minimum acceptable lors des procédures opérationnelles normalisées (SOP) selon les données empiriques du laboratoire.

Icônes du logiciel

E

Un seul volet est actif à un moment donné. Les volets actifs ont une bordure orange et l'utilisateur peut activer un volet en cliquant n'importe où à l'intérieur de celui-ci. De nombreux contrôles du menu sont opérationnels dans le volet actif.

Les icônes de la barre d'outils décrites dans cette section s'affichent dans la barre d'outils spécifique du volet pour tous les types de volets. Des icônes supplémentaires, spécifiques de chaque type de volet, sont également disponibles.

Tableau E-1 Icônes de la barre d'outils










Icône	Nom	Description
	New Results Table	Ouvre l'assistant New Results Table .
	Open	Ouvre un tableau de résultats .
	Save	Enregistre tous les fichiers ouverts.
	Select Analyst Project	Sélectionne un dossier de projet.
	Screen Lock	Verrouille l'écran. Cette fonction n'est disponible que lorsque le logiciel Analyst [®] MD est en mode mixte et que la fonction de verrouillage de l'écran est activée.
	Show Internal Standard with Analyte	Montre les rangées du tableau de résultats pour l'analyte actuellement sélectionné et l'étalon interne correspondant. Quand cette fonction est sélectionnée, l'utilisateur peut cliquer sur le nom d'un analyte pour l'afficher avec son étalon interne. Cela équivaut à cliquer sur l'analyte, puis à cliquer sur l'étalon interne tout en appuyant sur Ctrl (afin que les deux soient sélectionnés).
	Find Component or Group	Sélectionne les éléments de la liste qui correspondent au texte spécifié.
	Arranging Panes	Permet de modifier les positions relatives des volets. Cliquer sur l'icône dans un volet, puis la faire glisser vers le haut, le bas, la gauche ou la droite d'un deuxième volet. Selon l'endroit où le curseur est relâché, le premier volet change de position par rapport au second. Lorsque le curseur se déplace, l'un des côtés du second volet est mis en surbrillance en rouge pour indiquer l'endroit où sera tracé le premier volet.
	Delete Pane	Supprime le volet. Si un tableau de résultats est supprimé, les autres volets qui lui sont liés (Peak Review et Calibration) sont aussi supprimés et toute la fenêtre est fermée.

Tableau E-1 Icônes de la barre d'outils (Suite)




Icône	Nom	Description
	Toggles tab mode	Maximise le volet pour couvrir la totalité de la fenêtre (ou vice versa). Utile quand il y a plusieurs volets dans la fenêtre afin que l'utilisateur puisse temporairement se focaliser sur l'un d'entre eux. En mode Zoom, un onglet distinct apparaît en haut de la fenêtre pour chaque volet. Passer d'un volet à un autre en cliquant sur l'onglet approprié. Depuis le mode Zoom, revenir à la vue d'origine affichant tous les volets en cliquant une deuxième fois sur Zoom Pane . En cliquant sur l'icône, il est possible de basculer d'un état à l'autre.
	Hide Pane	Masque le volet afin que les autres volets de la fenêtre couvrent l'espace disponible.
	Show Hidden Panes	Affiche tous les volets qui avaient été précédemment masqués.

Tableau E-2 Icônes de la barre d'outils Peak Review








Icône	Nom	Description
	Display Previous Page	Affiche l'ensemble de chromatogrammes précédent. Équivaut à appuyer sur la touche fléchée vers le haut ou vers la gauche, ou à cliquer sur la flèche supérieure de la barre de défilement.
	Display Next Page	Affiche l'ensemble de chromatogrammes suivant. Équivaut à appuyer sur la touche fléchée vers le bas ou vers la droite, ou à cliquer sur la flèche inférieure de la barre de défilement.
	Display Previous Sample	Défile en arrière dans le volet Peak Review . Équivaut à cliquer sur la touche fléchée vers le haut de la barre de défilement jusqu'à ce que le premier échantillon du premier chromatogramme actuellement visible soit affiché.
	Display Next Sample	Défile jusqu'à l'échantillon suivant.
	Starts Slide Show Peak Review mode	Lance le diaporama. Lors de la première utilisation, la boîte de dialogue Slide Show Options s'ouvre. Définir, en secondes, le délai entre les pics. Pour éviter que la boîte de dialogue ne s'ouvre à nouveau, cocher la case Only show this dialog again if the shift key is down . Cliquer n'importe où dans le volet Peak Review pour arrêter le diaporama.
	Peak Magnifier	Agrandit le pic sélectionné.
	Peak Demagnifier	Ramène le pic agrandi à sa taille d'origine.

Tableau E-2 Icônes de la barre d'outils Peak Review (Suite)




Icône	Nom	Description
	Set Peak to 'Not Found'	<p>Cliquer pour indiquer qu'aucun pic n'est présent dans le chromatogramme actif. Dans certains cas, lorsqu'aucun pic significatif n'est réellement présent, de petits pics de bruit peuvent être intégrés et rapportés. Cliquer sur cette icône pour outrepasser ce comportement. L'aire du pic apparaît comme N/A dans le tableau de résultats.</p> <p>Une fois que l'utilisateur a marqué le pic comme Not Found, les paramètres de recherche de pic sur la gauche du volet ne sont pas disponibles pour le chromatogramme, car ils ne sont pas utilisés. Cliquez à nouveau sur l'icône pour revenir au mode automatique.</p>
	Enable Manual Integration Mode	<p>Cliquer pour entrer en mode d'intégration manuelle. Quand le logiciel est en mode d'intégration manuelle, faites glisser un tracé de chromatogramme afin de spécifier la zone exacte à intégrer. L'intégration commence (temps, intensité) à partir du point sur lequel le curseur a été cliqué en premier et se poursuit jusqu'au point où le curseur est relâché. Cliquer à nouveau sur l'icône pour quitter le mode d'intégration manuelle.</p> <p>Une fois que l'utilisateur a intégré manuellement le pic, les paramètres de recherche de pic sur la gauche du volet ne sont pas disponibles pour le chromatogramme car ils n'ont pas été utilisés. Cliquer à nouveau sur l'icône pour revenir au mode automatique.</p>
	Recalculate Peak Model	<p>Recalcule le modèle de pic à l'aide du chromatogramme actif et l'applique à ce chromatogramme (algorithme d'intégration SignalFinder™ uniquement).</p>

Tableau E-3 Icônes de la barre d'outils Calibration

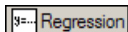
Icône	Name	Description
	Edit Regression and Weighting	<p>Permet de modifier les paramètres d'étalonnage. Cela inclut le paramètre réel utilisé pour la régression (Area ou Height) ainsi que le type de régression et la pondération. Voir Équations de régression à la page 127.</p>

Tableau E-4 Icônes de la barre d'outils Statistics



Icône	Nom	Description
	Remove Trailing Index from Sample Name	Le tableau de statistiques peut être disposé de sorte que les échantillons (pour un analyte donné) soient regroupés par concentration réelle ou par nom d'échantillon. En cas de regroupement par nom d'échantillon, l'option Remove Trailing Index from Sample Name contrôle si les noms des échantillons doivent correspondre exactement pour pouvoir être regroupés ou si un indice numérique terminal suivant un tiret (-) doit être supprimé. Par exemple, deux échantillons dont les noms sont Sample 1 - 001 et Sample 1 - 002 seraient regroupés si cette option avait été sélectionnée, mais pas autrement.
	Sample Grouping	<p>Les éléments de cette liste spécifient la façon dont l'échantillon pour un analyte donné doit être regroupé pour le calcul des statistiques. Les choix suivants sont disponibles :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Group by Concentration for Standards : les échantillons de type Standard sont regroupés par concentration réelle. • Group by Concentration for QCs : les échantillons de type Quality Control sont regroupés par concentration réelle. • Group by Sample Name for Standards : les échantillons de type Standard en double sont regroupés par le champ Sample Name. Comme décrit précédemment, si l'option Remove Trailing Index from Sample Name n'est pas utilisée, les noms d'échantillons doivent alors correspondre exactement. Sinon, ils peuvent différer par un chiffre terminal (suivant un tiret). • Group by Sample Name for QCs : similaire à l'option précédente, excepté que seuls les échantillons de type Quality Control sont utilisés. • Group by Sample Name for All Samples : similaire à l'option précédente, excepté que tous les échantillons sont utilisés.

Tableau E-4 Icônes de la barre d'outils Statistics (Suite)


Icône	Nom	Description
	Metric	<p>Les éléments de cette liste spécifient la métrique réelle utilisée pour le calcul des statistiques. Les choix suivants sont disponibles :</p> <ul style="list-style-type: none"> • Calculated Concentration : Le champ Calculated Concentration du tableau de résultats est utilisé. • Area : Le champ Area du tableau de résultats est utilisé. • Height : Le champ Height du tableau de résultats est utilisé. • Calibration Y-Value : le paramètre de régression spécifié pour l'analyte est utilisé. Il s'agit soit de Area soit de Height pour un analyte qui ne dispose pas d'un étalon interne correspondant, ou bien soit de Area Ratio soit de Height Ratio pour un analyte qui utilise un étalon interne.

Tableau E-5 Icônes de la barre d'outils Results Table






Icône	Infobulle	Description
	Displays the peak review	Affiche le volet Peak Review afin que la qualité des intégrations du pic puisse être vérifiée et modifiée si nécessaire.
	Displays the side by side sample review	Affiche deux listes d'échantillons afin que les utilisateurs puissent sélectionner jusqu'à six échantillons en vue de comparer les réponses du pic sur les échantillons.
	Displays the calibration curve	Affiche la courbe d'étalonnage (applicable uniquement si des échantillons de type Standard de concentration connue sont utilisés). Ce volet permet à l'utilisateur d'examiner l'étalonnage et d'ajuster le type de régression et la pondération.
	Creates a metric plot	Affiche le tracé métrique des colonnes en cours de sélection. Ces tracés peuvent s'avérer très utiles pour la recherche de données aberrantes. Ce menu qui se trouve tout de suite à droite du bouton répertorie tous les paramètres du tracé métrique.
	Displays the statistics pane	Affiche le volet Statistics . Ce tableau indique la concentration moyenne calculée, l'écart-type et le CV pour chaque niveau de concentration.

Tableau E-5 Icônes de la barre d'outils Results Table (Suite)




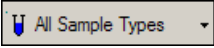






Icône	Infobulle	Description
	Sort selected column from smallest to largest	Trie le tableau de résultats de sorte que les valeurs de la colonne sélectionnée soient dans l'ordre ascendant. Cette icône n'est disponible qu'une fois que l'utilisateur a cliqué sur l'en-tête de la colonne.
	Sort selected column from largest to smallest	Trie le tableau de résultats de sorte que les valeurs de la colonne sélectionnée soient dans l'ordre descendant. Cette icône n'est disponible qu'une fois que l'utilisateur a cliqué sur l'en-tête de la colonne.
	Removes any previous sorting	Si le tableau a été trié, ramène le tableau de résultats à l'ordre par défaut.
	Shows only the selected sample type(s)	Filtre le tableau de résultats afin que seuls les échantillons d'un type spécifique soient visibles. Cela s'avère utile uniquement en présence d'échantillons de type Standard avec une concentration connue et d'échantillons qui ne sont pas tous de type Unknown .
	Hide selected row(s)	<p>Masque les lignes sélectionnées dans le tableau de résultats. Sélectionner les lignes à masquer, puis cliquer sur l'icône.</p> <p>Étant donné que le volet Peak Review se synchronise avec le tableau de résultats, le fait de masquer les lignes correspondant aux pics qui n'ont pas besoin d'être examinés accélère le processus d'examen. Par exemple, l'utilisateur peut trier le tableau sur la colonne Quality et masquer toutes les lignes ayant une qualité supérieure à une valeur quelconque (par exemple, 0,8). Le tableau peut ensuite être trié sur la colonne Region Height et toutes les lignes ayant une valeur faible peuvent être masquées (en vue de masquer les lignes pour lesquels le pic n'est manifestement pas présent). Il s'ensuit que seuls les pics ayant une basse qualité mais pour lesquels un pic est réellement présent sont visibles. L'utilisateur peut ensuite passer rapidement d'une ligne visible à l'autre depuis le volet Peak Review en moins de temps qu'il n'en faudrait pour examiner tous les pics possibles.</p>
	Show previously hidden row(s)	Affiche toutes les lignes. Les lignes affichées peuvent encore être contraintes par Sample Type Filter et par la sélection Components & Groups List .

Tableau E-5 Icônes de la barre d'outils Results Table (Suite)

Icône	Infobulle	Description
	Show only outliers	Affiche les lignes qui contiennent des données aberrantes.
	Go to next outlier	Avance jusqu'à la donnée aberrante suivante dans le tableau de résultats .
	Lock and Save	Verrouille le tableau de résultats une fois qu'il a été enregistré. Les modifications apportées au tableau de résultats ne sont pas enregistrées à moins que le fichier ne soit déverrouillé.
	Review and Save	Cliquer pour enregistrer le tableau de résultats une fois qu'il a été examiné. L'icône est indisponible si le tableau de résultats est en lecture seule.

Accès au logiciel MultiQuant™ MD

F

Remarque : Lorsque le logiciel MultiQuant™ MD est désinstallé, les éléments de sécurité du logiciel MultiQuant™ MD intégrés au logiciel Analyst® MD demeurent. Les autorisations de sécurité sont indiquées dans l'onglet **Roles** de la boîte de dialogue **Security Configuration**.

Accès prédéfini	Description
Create session file	Permet aux utilisateurs de créer un tableau de résultats .
Create quantitation method	Permet aux utilisateurs de créer des méthodes de quantification.
Modify quantitation method files	Permet aux utilisateurs de modifier les méthodes de quantification se trouvant dans le dossier Quantitation Methods du dossier Analyst Data .
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Permet aux utilisateurs d'exporter ou de créer des rapports sur des tableaux de résultats déverrouillés.
Replace existing Results Table when saved	Permet aux utilisateurs de mettre à jour les tableaux de résultats existants, mais ne les autorise pas à créer un nouveau tableau de résultats en utilisant le nom d'un tableau de résultats existant. Par exemple, si un tableau de résultats appelé RT1 est créé, les utilisateurs peuvent alors le mettre à jour, mais ils ne peuvent pas créer un nouveau tableau de résultats sous le nom RT1. Les utilisateurs ne peuvent pas nommer un tableau de résultats sans nom en utilisant le nom d'un tableau de résultats existant.
Change default quantitation method integration algorithm	Dans la boîte de dialogue Integration Defaults , permet aux utilisateurs de modifier l'algorithme. Cliquer sur Edit > Project Integration Defaults .
Change default quantitation method integration parameters	Dans la boîte de dialogue Integration Defaults , permet aux utilisateurs de modifier les paramètres par défaut de l'algorithme. Edit > Project Integration Defaults .
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Permet aux utilisateurs d'activer ou de désactiver l'indicateur qui active l'option Project Modified Peak Warning dans le menu Edit .
Allow Project Secure Export Settings	Si cette option est activée, les données du fichier texte sont alors chiffrées au cours de l'exportation. Définir un mot de passe pour activer le chiffrement.
Add samples to Results Table	Permet aux utilisateurs d'ajouter des échantillons. Cliquez sur Process > Add Samples .
Remove samples from Results Table	Permet aux utilisateurs de supprimer les échantillons sélectionnés. Cliquer sur Process > Remove Selected Samples .

Accès prédéfini	Description
Export, import, or remove External Calibration	Permet aux utilisateurs d'exporter, d'importer ou de supprimer un étalonnage externe en utilisant l'une des options suivantes : <ul style="list-style-type: none"> • Cliquer sur Process > Export Calibration. • Cliquer sur Process > Import External Calibration. • Cliquer sur Process > Remove External Calibration.
Change Audit Map settings	Permet aux utilisateurs de modifier la carte d'audit du projet et sa définition. Cliquer sur Audit Trail > Audit Map Manager .
Modify Sample Name	Permet aux utilisateurs de modifier le nom de l'échantillon dans le tableau de résultats .
Modify Sample Type	Permet aux utilisateurs de modifier le type d'échantillon (Standard, QC, Unknown) dans le tableau de résultats .
Modify Sample ID	Permet aux utilisateurs de modifier l' ID de l'échantillon dans le tableau de résultats .
Modify Actual Concentration	Permet aux utilisateurs de modifier la concentration réelle de l'échantillon Standard et QC dans le tableau de résultats .
Modify Dilution Factor	Permet aux utilisateurs de modifier le facteur de dilution dans le tableau de résultats.
Modify Comment Fields	Permet aux utilisateurs de modifier les champs de commentaires : <ul style="list-style-type: none"> • Component Comment • IS Comment • IS Peak Comment • Peak Comment • Sample Comments
Allow manual integration	Permet aux utilisateurs d'activer le mode d'intégration manuelle dans le volet Peak Review . Si cette autorisation est activée, l'autorisation Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram doit alors être également activée. La commande Allow manual integration peut être désactivée si l'autorisation Modify Results Table integration parameters est activée.
Allow set to Peak Not Found	Permet aux utilisateurs d'utiliser Set peak to not found . Pour effectuer cette action, cliquer avec le bouton droit dans le volet Peak Review .
Include or exclude a peak from the Results Table	Permet aux utilisateurs d'inclure ou d'exclure des pics des tableaux de résultats , des tableaux de statistiques et des courbes d'étalonnage.

Accès prédéfini	Description
Modify regression settings for fit and weight	Permet aux utilisateurs de modifier les paramètres de régression dans le volet de la courbe d'étalonnage lors de l'utilisation de la fonctionnalité Modify Results Table Method et de l'assistant New Quantitation Method .
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Permet aux utilisateurs de modifier un chromatogramme.
Modify quantitation method for the Results Table component	Permet aux utilisateurs d'appliquer les modifications du chromatogramme au composant. Cette autorisation et l'autorisation Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram doivent être activées pour les utilisateurs s'ils veulent mettre à jour, puis appliquer des modifications aux composants.
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Permet aux utilisateurs de créer et d'utiliser des tracés métriques dans le tableau de résultats (le bouton Metric Plot est activé) ou d'exporter des tracés métriques. Cliquer sur File > Export .
Set Peak Review Title Format	Permet aux utilisateurs de modifier la valeur Peak Review Title Format in Peak Review . Pour effectuer cette action, cliquer avec le bouton droit dans le volet Peak Review .
Add, Rename, or Modify custom column	Permet aux utilisateurs d'ajouter, de renommer ou de modifier une colonne personnalisée. Même sans cette autorisation, les utilisateurs peuvent exécuter des requêtes qui créeront automatiquement des colonnes personnalisées. Si cette autorisation est désactivée, l'autorisation Remove custom column doit alors être également désactivée. L'autorisation Remove custom column peut être désactivée si l'autorisation Add, Rename, or Modify custom column est activée.
Remove custom column	Permet aux utilisateurs de supprimer une colonne personnalisée du tableau de résultats .
Modify Results Table column settings	Permet aux utilisateurs de modifier les paramètres de colonne du tableau de résultats dans un tableau de résultats .
Save Column Settings as Project Default	Permet aux utilisateurs d'appliquer les paramètres de colonne au projet.
Lock and save Results Table	Permet aux utilisateurs de verrouiller et d'enregistrer un tableau de résultats .
Unlock and save Results Table	Permet aux utilisateurs de déverrouiller et d'enregistrer un tableau de résultats .
Review and save Results Table	Permet aux utilisateurs d'examiner et d'enregistrer le tableau de résultats .

Accès prédéfini	Description
Edit Report Template	Permet aux utilisateurs de modifier les modèles de rapport.
Transfer to LIMS	Permet aux utilisateurs de transférer les tableaux de résultats enregistrés et verrouillés vers un LIMS. L'événement est enregistré dans le registre d'audit.

Paramètres de sécurité

Le [Tableau F-1](#) contient les paramètres de sécurité recommandés pour les rôles d'utilisateur.

Tableau F-1 Paramètres de sécurité basés sur les rôles d'utilisateur

Paramètre de sécurité	Administrateur	Superviseur	Analyste	Examineur
Create session file	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès
Create quantitation methods	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Modify quantitation method files	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Replace existing Results Table when saved	Accès	Accès	Pas d'accès	Accès
Change default quantitation method integration algorithm	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Change default quantitation method integration parameters	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Allow Project Secure Export Settings	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Add samples to Results Table	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès
Remove samples from Results Table	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès

Tableau F-1 Paramètres de sécurité basés sur les rôles d'utilisateur (Suite)

Paramètre de sécurité	Administrateur	Superviseur	Analyste	Examineur
Modify Sample Name	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Modify Sample Type	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès
Modify Sample ID	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Modify Actual Concentration	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès
Modify Dilution Factor	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès
Modify Comment Fields	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Allow manual integration	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès
Allow set to Peak Not Found	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès
Include or exclude a peak from the Results Table	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès
Modify regression settings for fit and weight	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès
Modify quantitation method for the Results Table component	Accès	Accès	Accès	Pas d'accès
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Accès	Accès	Accès	Accès
Set Peak Review Title Format	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Add, Rename, or Modify custom column	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Remove custom column	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Modify Results Table column settings	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès

Tableau F-1 Paramètres de sécurité basés sur les rôles d'utilisateur (Suite)

Paramètre de sécurité	Administrateur	Superviseur	Analyste	Examineur
Save Column Settings as Project Default	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Lock and save Results Table	Accès	Accès	Accès	Accès
Unlock and save Results Table	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Review and save Results Table	Accès	Accès	Pas d'accès	Accès
Modify Report Template	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Transfer to LIMS (Controls Initiate Transfer to Watson LIMS as well)	Accès	Accès	Pas d'accès	Accès
Export, import, or remove External Calibration	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès
Change Audit Map Setting	Accès	Accès	Pas d'accès	Pas d'accès

Historique des révisions

Révision	Raison de la modification	Date
A	Première version du document.	Septembre 2013
B	Mise à jour de la section Menu File. Mise à jour de la section Menu Audit Trail. Mise à jour du tableau Colonnes du tableau de résultats. Mise à jour de la section Rapports.	Janvier 2015
C	Remplacement du logo AB SCIEX par SCIEX Diagnostics sur la page de garde. Mise à jour de la page des droits d'auteur et remplacement de AB Sciex par SCIEX lorsque nécessaire. Ajout de Windows 10 au chapitre Introduction au logiciel. Mise à jour de la section Nous contacter. Remplacement du titre de la rubrique Gestionnaire de cartes d'audit par À propos des cartes d'audit. Mise à jour de la description de l'option de menu Set Last Component of Group as IS dans la section Sous-menu Internal Standards. Remplacement du « paramètre du pourcentage de l'aire totale » par le « temps de rétention » dans la section Boîte de dialogue Update Retention Time. Mise à jour de la description de Expected RT dans la section Paramètres de l'algorithme d'intégration SignalFinder. Ajout de Windows 10 à la section Créer des rapports. Mise à jour du contenu de la section Balises de modèles de rapport. Modification de la capture d'écran de la Figure 7-3. De nouveaux modèles ont été appliqués au contenu, ce qui a entraîné certaines modifications du contenu. Suppression de toutes les références à Windows XP.	Juin 2017