Программное обеспечение MultiQuant™ MD 3.0.3

Справочное руководство

IVD-IDV-06-0904-RU-C

июнь 2017 г.

Данный документ предоставляется покупателям, которые приобрели оборудование SCIEX, для использования данного оборудования SCIEX. Данный документ защищен законом об охране авторских прав, и любое его воспроизведение целиком или частично без письменного разрешения компании SCIEX строго запрещено.

Программное обеспечение, описание которого может содержаться в данном документе, предоставляется на условиях лицензионного соглашения. Любое копирование, изменение или распространение данного программного обеспечения на любом носителе, если это явно не разрешено в лицензионном соглашении, является противозаконным. Кроме того, лицензионное соглашение может запрещать дизассемблирование, реконстркцию кода или декомпиляцию программного обеспечения в любых целях. Гарантии предоставляются в соответствии с положениями настоящего документа.

Некоторые части данного документа могут содержать ссылки на других производителей и/или их продукты, которые могут включать компоненты с названиями, зарегистрированными и/или функционирующими в качестве товарных знаков их владельцев. Любое такое использование имеет целью исключительно указание продуктов других производителей, являющихся компонентами оборудования SCIEX, и не подразумевает обладание правами и/или лицензиями на использование (или выдачу разрешений на использование другим лицам) названий этих производителей и их продуктов в качестве товарных знаков.

Гарантии компании SCIEX ограничиваются явно выраженными гарантиями, предоставляемыми в момент продажи оборудования или выдачи лицензий на использование продуктов компании, и являются единственными обязательствами, которые несет компания SCIEX. Компания SCIEX не предоставляет каких-либо других явных или подразумеваемых гарантий, включая, помимо прочего, гарантии товарного состояния или пригодности для конкретной цели, вследствие требований нормативно-правовых актов или иных действующих правил либо в соответствии с традиционной практикой деловых отношений или торговли. Компания SCIEX не дает никаких подобных гарантий и не несет никакой ответственности или условных обязательств за непрямые или случайные убытки, понесенные покупателем в результате применения описанного здесь оборудования, а также за любые неблагоприятные последствия, проистекающие из этого применения.

IVD

CE

Для лабораторной диагностики *in vitro*.

Rx only.
Доступно не во всех странах. Для получения подробной информации обратитесь к торговому представителю компании SCIEX.

Компания AB Sciex осуществляет коммерческую деятельность под названием SCIEX.

Товарные знаки, упоминаемые в данном документе, являются собственностью компании AB Sciex Pte. Ltd. или ее соответствующих владельцев.

AB SCIEX™ используется по лицензии.

© 2017 г. 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

Содержание

1 Вводные сведения о программном обеспечении....8
Справка по программному обеспечению....8
Типы файлов....9
Свяжитесь с нами....9
Техническая поддержка....9

2 Меню File (Файл)....10
Импорт метода количественного анализа....12
Подменю Export (Экспорт)....12
Экспорт таблицы результатов....13
Экспорт таблицы результатов с количественными показателями....15
Transfer to LIMS (Передать данные в LIMS)....16

3 Меню Edit (Редактирование)....18
Modify Results Table Method (Изменить метод таблицы результатов)....21
Project Units & Calibration Defaults (Проектные единицы измерения и настройки калибровки по умолчанию)....21
Project Secure Export Settings (Настройки защищенного экспорта данных проекта)....22

4 Меню Process (Обработка)....23
Export Calibration (Экспорт калибровки)....24
Import External Calibration (Импорт внешней калибровки)....24

5 Меню Audit Trail (Журнал аудита)....26
Audit Trail Viewer (Программа просмотра журнала аудита)....26
Просмотр результатов аудита в Audit Trail Viewer....27
Поиск по ключевому слову....28
Фильтр подлежащих аудиту событий....29
Экспорт записей из Audit Trail Viewer....30
Печать записей из Audit Trail Viewer....31
Audit Trail Manager (Менеджер журнала аудита)....31
Карты аудита....32
Создание карты аудита....32
Изменение карты аудита....35
Редактирование карты аудита....36
Просмотр встроенных настроек аудита....39

6 Меню Help (Справка)....41

7 Таблицы результатов....42
Components & Groups List (Список компонентов и групп)....43
Контекстное меню Results Table....44
Применение текущих фактических концентраций аналита ко всем аналитам....46
Column Settings (Настройки столбца)....46
Фильтр по типу образца....48

Просмотр скрытых строк....49
Диалоговое окно Results Table....49
Select Samples (Выбрать образцы)....49
Select Method (Выбрать метод)....50
Выбор репрезентативных образцов....52
Установка компонентов....53
Установка параметров интегрирования....55
Настройки значений вне диапазона....59
Столбцы таблицы Results Table....62

8 Просмотр пиков....73
Ручное интегрирование....73
Применить....74
Советы по просмотру пиков....74
Контекстное меню Peak Review (Просмотр пиков)....75
Диалоговое окно Peak Review Options (Настройки просмотра пиков): вкладка Appearance (Вид)....76
Диалоговое окно Peak Review Options (Настройки просмотра пиков): вкладка Zooming (Масштабирование)....78
Set Peak Review Title Format (Установка формата заголовка в окне просмотра пиков)....81
Копирование параметров....81
Вставка параметров....82
Set Peak to 'Not Found' (Присвоить пику статус «не найден»)....82
Использование пика....82
Изменение метода количественного анализа компонента....82
Изменение метода количественного анализа для группы....83
Применение параметров интегрирования к образцу в группе....83
Возврат пика к исходному методу....83
Восстановление всех пиков компонента....83

9 Side-by-side Sample Review (Одновременный просмотр образцов)....84
Одновременный просмотр образцов....84

10 Панель Calibration (Калибровка)....86
Диалоговое окно Regression Options (Параметры регрессии)....86
Советы по калибровке....87
Контекстное меню Calibration (Калибровка)....88

11 Таблицы статистических данных....90
Советы по использованию Statistics Table....91
Контекстное меню Statistics Table....92

12 Графики измерений....93
Создание графика измерений....93
Сохранение настроек графика измерений....93
Советы по использованию графика измерений....93
Контекстное меню графика измерений....94
Диалоговое окно Regression (Регрессия)....95

13 Quantitation Method Editor (Редактор методов количественного анализа)....97
Вкладка Components (Компоненты)....97
Подменю Groups (Группы)....98
Подменю Internal Standards (Внутренние стандарты)....100

Вкладка Integration (Интегрирование) 101
Диалоговое окно Highlight Components (Выделение компонентов)....103
Диалоговое окно Update Retention Times (Обновление времени удерживания)....104
Вкладка Outlier Settings (Настройки значений вне диапазона) 104

14 Учебный курс по рабочему процессу количественного анализа....107
Калибровочные кривые....107
Предварительные условия....107
Изменение отображаемых в Results Table столбцов....108
Обработка данных с использованием алгоритма интегрирования SignalFinder™....109
Установка параметров интегрирования пика....109
Создание Results Table....110
Просмотр пиков....114
Изменение калибровочной кривой....115
Просмотр статистических данных образцов....116
Обработка данных с использованием алгоритма интегрирования MQ4....117
Установка параметров интегрирования пика....117
Создание таблицы результатов....118
Просмотр пиков....122
Изменение калибровочной кривой....124
Просмотр статистических данных образцов....125
Алгоритмы интегрирования....126
Об алгоритме интегрирования SignalFinder....126
SignalFinder™: параметры алгоритма интегрирования....129
Параметры алгоритма интегрирования MQ4....135
Дополнительные задачи....137
Создание графиков измерений....137
Создание пользовательских столбцов....138
О файлах метода количественного анализ и встроенных методах....138

A Параметры алгоритма интегрирования....139
Параметры алгоритма интегрирования SignalFinder....139
Параметры алгоритма интегрирования MQ4....143

B Уравнения регрессии....147
Весовые коэффициенты....148
Регрессии....148
Линейная....149
Прямая, проходящая через начало координат....149
Средний коэффициент чувствительности....149
Квадратичная....150
Степенная....150
По Вагнеру....150
По Хиллу....151
Расчет окончательных концентраций....151
Линейная....151
Прямая, проходящая через начало координат, и средний коэффициент чувствительности....151
Квадратичная....151
Степенная....152
По Вагнеру....152
По Хиллу....152

C Отчеты....153

Создание отчетов....153
Создание пользовательских шаблонов отчетов....154
Шаблоны отчетов....156
Теги шаблонов отчетов....158

D Вычисление относительного шума и отношения «сигнал-шум»....173
Примечание по отношению «сигнал-шум» при использовании алгоритма интегрирования SignalFinder....177

E Значки ПО....178

F Доступ к программному обеспечению MultiQuant™ MD....188
Настройки безопасности....192

История изменений....199

Вводные сведения о программном обеспечении 1

В этом документе описаны функции, доступные в программном обеспечении MultiQuant™ MD.

Доступ к программному обеспечению основан на роли, присвоенной пользователю в программе Analyst® MD. Убедитесь, что каждому пользователю назначен соответствующий доступ к программному обеспечению.

Поддерживается только англоязычная версия следующих операционных систем Microsoft:

- Windows 7 (32-разрядная и 64-разрядная) с SP1
- Windows 10

ПРЕДОСТЕРЕЖЕНИЕ. Необходимо выбрать формат номеров, валют, дат и времени English (US). Если выбрать другой формат, могут возникнуть ошибки.

Программное обеспечение MultiQuant™ MD с журналом аудита и функциями безопасности требует наличия полной лицензии и предварительной установки программного обеспечения Analyst® MD.

Контролируемыми способами вывода данных из программы являются экспорт Results Table, передача в данных ЛИС и составление отчета. Другие способы вывода данных, а именно, копирование и вставка из Results Table не являются контролируемыми. Пользователи не должны использовать неконтролируемые методы вывода для подотчетных целей.

Примечание. Программное обеспечение MultiQuant™ MD использует данные программного обеспечения Analyst® MD по блокировке экрана. Программа MultiQuant™ MD не требует дополнительной установки.

Примечание. Структура папки и файла должна быть сохранена, чтобы обеспечить возможность просмотра хроматограмм. Если данные необходимо удалить, переместите весь проект, сохраняя структуру.

Справка по программному обеспечению

Программное обеспечение содержит всплывающие подсказки и сообщения об ошибках, которые предоставляют дополнительную информацию о функциях программного обеспечения.

- Если поле недоступно, поместите курсор над полем, чтобы отобразить всплывающую подсказку, которая объясняет, почему функция недоступна. Дополнительная информация содержит сведения о том, как активировать поле, или о том, какая настройка безопасности требуется для активации поля.

- Сообщения об ошибках содержат информацию о настройках безопасности, необходимых для использования функции.

Типы файлов

Таблица 1-1 Типы файлов программного обеспечения

Тип файлов	Описание
*.qsession	Таблица результатов ПО MultiQuant. Содержит данные журнала аудита количественного анализа.
*.qmethod	Метод количественного анализа ПО MultiQuant.
*.qmap	Карта аудита ПО MultiQuant.
*.mqcal	Файл внешней калибровки.
*.cset	Файл настройки столбца.

Свяжитесь с нами

Служба поддержки **SCIEX**

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

Обучение для клиентов

- В Северной Америке: NA.CustomerTraining@sciex.com
- В Европе: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Контактные данные для других стран, кроме стран ЕС и Северной Америки, можно найти на веб-сайте sciex.com/education.

Центр дистанционного обучения

- SCIEX**University**

Самые актуальные рекомендации по обеспечению кибербезопасности продуктов SCIEXможно найти на веб-сайте sciex.com/productsecurity.

Техническая поддержка

В компании SCIEX и у ее представителей в различных регионах мира имеются квалифицированные специалисты по обслуживанию и технические специалисты. Они могут ответить на вопросы, касающиеся системы и технических неполадок, которые могут возникнуть. Для получения дополнительной информации посетите веб-сайт компании SCIEX по адресу: sciex.com.

Меню File (Файл) 2

Таблица 2-1 Параметры меню File (Файл)

Пункт меню	Описание
New Results Table (Новая таблица результатов)	Производит количественный анализ набора данных и затем создает Results Table. Выберите файлы данных для обработки, а также метод количественного анализа, который необходимо применить. См. Диалоговое окно Results Table на стр. 49.
New Quantitation Method (Новый метод количественного анализа)	После выбора образца создается редактор пустого метода количественного анализа. Обычно пользователь создает метод с помощью мастера New Results Table. Однако эту команду удобно использовать, если нужно создать метод, но нет необходимости сразу применять его для группы образцов и создавать Results Table. • На панели навигации отображаются подпапки, файлы .wiff и образцы, доступные в папке **Data** для выбранного проекта. • Разверните отдельные папки, чтобы увидеть подпапки или файлы .wiff. Разверните файл .wiff для отображения доступных образцов.
Open Results Table (Открыть таблицу результатов)	Используется для открытия ранее сохраненной таблицы Results Table. После выбора команды открывается стандартное диалоговое окно **Open**. См. Таблицы результатов на стр. 42.
Open Quantitation Method (Открыть метод количественного анализа)	Используется для открытия ранее сохраненного метода количественного анализа. После выбора команды открывается стандартное диалоговое окно **Open**. См. Quantitation Method Editor (Редактор методов количественного анализа) на стр. 97.
Save (Сохранить)	Используется для сохранения в файл активной Results Table или Quantitation Method Editor. Если Results Table или Quantitation Method Editor еще не сохранялись, пользователю направляется запрос на введение имени файла. В противном случае перезаписывается предыдущая версия.
Save As (Сохранить как)	Используется для сохранения в новый файл активной Results Table или Quantitation Method Editor.
Recent Results Table (Последние таблицы результатов)	Содержит пункты подменю для каждой недавно использованной Results Table. Выбрать один из пунктов для открытия соответствующего файла.

Таблица 2-1 Параметры меню File (Файл) (продолжение)

Пункт меню	Описание
Recent Quantitation Methods (Последние методы количественного анализа)	Содержит пункты подменю для каждого недавно использованного метода количественного анализа. Выбрать один из пунктов для открытия соответствующего файла.
Import (Импорт)	Создает новый метод количественного анализа из текстового файла. Обычно пользователь создает метод вручную, используя команду New Quantitation Method (см. Quantitation Method Editor (Редактор методов количественного анализа) на стр. 97) или в рамках процесса создания новой Results Table (см. Таблицы результатов на стр. 42). Эту команду удобно использовать в том случае, если пользователь захочет добавить или изменить метод количественного анализа. В этом случае создайте метод вручную и затем выберите команду **Quantitation Method as Text**.
Export (Экспорт)	Содержит команды для экспорта методов количественного анализа в виде файлов формата .qmethod или .txt. См. Подменю Export (Экспорт) на стр. 12. Контролируемыми способами вывода данных из программы являются экспорт Results Table, передача в ЛИС и составление отчета. Другие способы вывода данных, например копирование и вставка из Results Table, являются неконтролируемыми. Пользователи не должны применять эти неконтролируемые методы вывода для подотчетных целей.
Transfer to LIMS (Передать данные в LIMS)	Для активации данной функции необходим файл лицензии ЛИС. См. Transfer to LIMS (Передать данные в LIMS) на стр. 16.
Export and Save Results Table (Экспорт и сохранение таблицы результатов)	Экспорт таблиц результатов является одним из контролируемых методов вывода данных.
Create Report and Save Results Table (Создать отчет и сохранить таблицу результатов)	Создает отчет в формате Microsoft Word с помощью программы Reporter. См. Отчеты на стр. 153. Когда создается настроенный на индивидуальные нужды пользователя шаблон, проверка шаблона входит в обязанность пользователя. Пользователь может изменять формат чисел в редакторе шаблонов отчетов. Если формат чисел не указан в шаблоне, в отчете используется формат, заданный в Results Table в настройках **Column Setting**.
Exit (Выход)	Выход из программы. Пользователю будет предложено сохранить любые несохраненные данные.

Импорт метода количественного анализа

1. Последовательно выберите пункты **File > Import > Quantitation Method from Text**.
2. Выберите текстовый файл.
3. Выберите репрезентативный образец.

   Откроется редактор метода количественного анализа.
4. Сохраните файл метода в формате *.qmethod, чтобы его впоследствии можно было использовать для количественного анализа новых данных.

Подменю Export (Экспорт)

Контролируемыми способами вывода данных из программы являются экспорт Results Table, передача в ЛИС и составление отчета. Другие способы вывода данных, а именно, копирование и вставка из Results Table не являются контролируемыми. Пользователи не должны использовать неконтролируемые методы вывода для подотчетных целей.

Таблица 2-2 Пункты меню Export (Экспорт)

Пункт меню	Описание
Results Table-Metric (Таблица результатов с количественными показателями)	Создает текстовый файл с разделением табуляцией, содержащий данные активной Results Table. См. Экспорт таблицы результатов с количественными показателями на стр. 15.
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod (Метод количественного анализа для таблицы результатов в формате *.qmethod)	Осуществляет экспорт метода количественного анализа в новый файл. Когда Results Table создана, копия метода количественного анализа, использованная для создания Results Table, сохраняется совместно с таблицей. Эта функция удобна в том случае, если исходный метод количественного анализа был удален или изменен, и пользователь желает применить исходный метод к новому пакету образцов при создании Results Table.

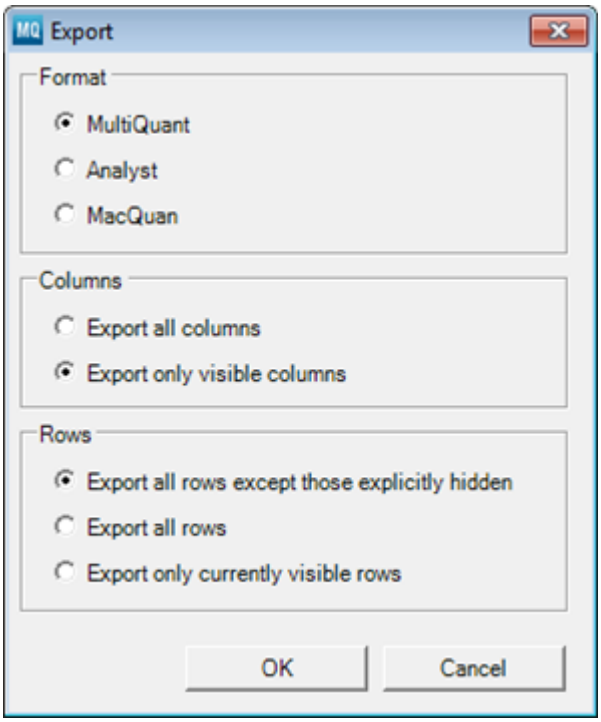
Таблица 2-2 Пункты меню Export (Экспорт) (продолжение)

Пункт меню	Описание
Results Table's Quantitation Method as Text (Метод количественного анализа для таблицы результатов в текстовом формате)	Осуществляет экспорт копии данного метода в текстовом формате. Когда Results Table создана, копия метода количественного анализа, использованная для создания Results Table, сохраняется совместно с таблицей.
Quantitation Method as Text (Метод количественного анализа в текстовом формате)	Эти файлы содержат строку заголовка и строку для каждого компонента (анализируемое вещество или внутренний стандарт). Это столбец для названия компонента, диапазона масс, каждого из параметров интегрирования и т.д. Нельзя менять заголовки строк и нельзя добавлять или удалять столбцы, если метод количественного анализа будет импортирован в программное обеспечение MultiQuant™ MD. При изменении строки заголовка столбца, в котором указан параметр интегрирования, или же при удалении самого столбца для всех компонентов будет установлено значение по умолчанию, заданное в окне User Integration Defaults для данного параметра интегрирования. При изменении или удалении строки заголовка какого-либо другого столбца метод не будет импортирован. Пользователь должен открыть окно метода и подтвердить, что в импортированные параметры метода количественного анализа внесены все изменения. См. таблицу 2-1.

Экспорт таблицы результатов

Примечание. Производитель не несет ответственности или условных обязательств за непрямые или случайные убытки, понесенные после того, как был осуществлен экспорт данных из программы. Таблица Results Table экспортируется в полной точности, независимо от числового формата в настройке столбца.

Рисунок 2-1 Диалоговое окно Export (Экспорт)



Обозначение	Описание
Format (Формат)	
MultiQuant	Выполнение экспорта в полной точности. В данном формате текстовый файл содержит строку-заголовок, которая использует те же имена столбцов, какие отображаются в **Results Table**. Это рекомендованный формат для экспорта **Results Table**.
Analyst	Выполнение экспорта с точностью, заданной в настройке столбца. Этот формат аналогичен формату экспортируемых программным обеспечением Analyst® MD таблиц результатов количественного анализа **Results Table**. Разница между этим и предыдущим форматом заключается в том, что в некоторых случаях в заголовках столбцов используются немного разные названия (для соответствия формату программного обеспечения Analyst® MD) и имеются дополнительные строки заголовков для каждого анализируемого вещества, описывающие калибровочные данные.
MacQuan	Этот формат аналогичен программному обеспечению Analyst® MD за исключением того, что названия заголовков столбцов соответствуют используемым в пакете количественных расчетов MacQuan.
Columns (Столбцы)	

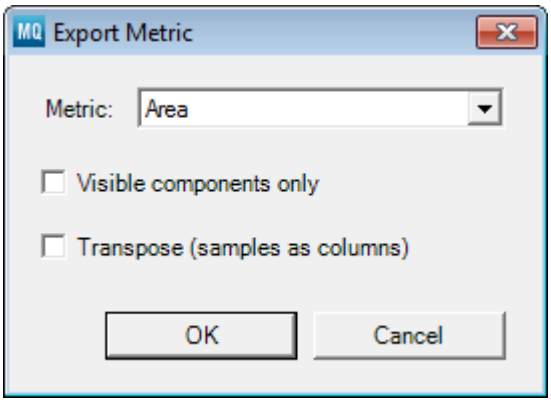
Обозначение	Описание
Export all columns (Экспортировать все столбцы)	Выполнение экспорта всех возможных полей, включая те столбцы, которые скрыты в данный момент в **Results Table**.
Export only visible columns (Экспортировать только видимые столбцы)	Выполнение экспорта только тех столбцов, которые показаны в данный момент в **Results Table**. Можно также выбрать, какие столбцы видимые, используя команду **Column Settings** в Results Table. См. Контекстное меню Results Table на стр. 44.
Rows (Строки)	
Export all rows except those explicitly hidden (Экспортировать все строки, кроме тех, которые намеренно скрыты)	Выполнение экспорта только тех строк, которые скрыты вследствие применения конкретного фильтра. См. Значки ПО на стр. 178. Осуществляется экспорт строк, которые скрыты вследствие фильтрации по **Sample Type** или **Component**.
Export all rows (Экспортировать все строки)	Выполнение экспорта всех строк (а именно, все компоненты для всех образцов).
Export only currently visible rows (Экспортировать только видимые строки)	Выполнение экспорта только тех строк, которые отображаются в данный момент в **Results Table**. Строки, которые скрыты вследствие фильтрации по **Sample Type** или **Component**, не включаются.

Экспорт таблицы результатов с количественными показателями

Примечание. Производитель не несет ответственности или условных обязательств за непрямые или случайные убытки, понесенные после того, как был осуществлен экспорт данных из программы. Таблица **Results Table** экспортируется в полной точности, независимо от числового формата в настройке столбца.

Используется для создания текстового файла с разделением табуляцией, содержащего данные активной Results Table.

Рисунок 2-2 Диалоговое окно Export Metric (Экспорт количественных показателей)



Обозначение	Описание
Metric (Количественный показатель)	Выбирает поле для экспорта. См. Столбцы таблицы Results Table на стр. 62.
Visible components only (Только видимые компоненты)	Если выбран данный параметр, экспортируются в файл только те компоненты, для которых как минимум одна соответствующая строка является видимой в Results Table. Если данный параметр не выбран, информация экспортируется для всех компонентов.
Transpose (samples as columns)	Если выбран данный параметр, результирующий файл будет содержать столбец для каждого образца и строку для каждого компонента (анализируемого вещества или внутреннего стандарта). Если данный параметр не выбран, файл будет содержать столбец для каждого компонента и строку для каждого образца.

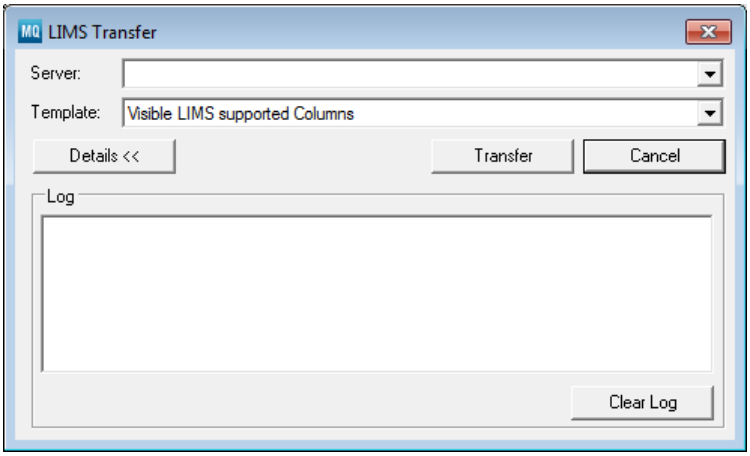
Transfer to LIMS (Передать данные в LIMS)

Эта команда доступна, только когда открыта таблица Results Table. Для активации данной функции необходим файл лицензии ЛИС.

Контролируемыми способами вывода данных из программы являются экспорт Results Table, передача в ЛИС и составление отчета. Другие способы вывода данных, а именно, копирование и вставка из Results Table не являются контролируемыми. Пользователи не должны применять эти неконтролируемые методы вывода для подотчетных целей.

1. Нажмите **Help > Install License**, чтобы активировать лицензию.

Рисунок 2-3 Диалоговое окно LIMS Transfer (Передать данные в LIMS)



2. Введите имя в поле **Server** в следующем формате: **http:\\server IP address;port number**.
3. Выберите шаблон из списка **Template**.
4. Нажмите **Transfer**.

Меню Edit (Редактирование) 3

Таблица 3-1 Пункты меню Edit (Редактирование)

Пункт меню	Описание
Clear (Очистить)	Отменяет текущий выбор. Данный пункт применим, когда вкладка **Components** редактора **Quantitation Method Editor** имеет одну и более выбранных строк.
Copy (Копировать)	Когда **Results Table** активна, данная команда позволяет копировать выбранную часть таблицы в буфер обмена. Когда график на панели **Peak Review** или **Calibration** активен, изображение графика копируется.
Paste (Вставить)	Когда **Results Table** активна с редактируемой выбранной областью, данная команда позволяет вставить ячейки или столбцы из буфера обмена.
Copy Entire Table (Копировать всю таблицу)	Когда активна **Results Table** или **Statistics Table**, эта команда позволяет копировать все данные в буфер обмена. В случае **Results Table** копируются только видимые строки и столбцы.
Fill Down (Заполнить вниз)	Когда **Results Table** активна с редактируемой выбранной областью, данная команда позволяет вставить информацию первой выбранной строки во все последующие выбранные строки.
Select all Rows (Выбрать все строки)	Команда позволяет выбрать все строки в активной на данный момент **Results Table** или **Statistics Table**. Это удобно в том случае, если пользователь захочет далее применить команду, например **Copy**, которая действует на выделенные строки.

Таблица 3-1 Пункты меню Edit (Редактирование) (продолжение)

Пункт меню	Описание
Modify Results Table Method (Изменить метод таблицы результатов)	Вносит изменения в метод количественного анализа, связанный с активной на данный момент **Results Table**. Это удобно в том случае, если пользователь захочет добавить или удалить компоненты. Чтобы изменить только параметры интегрирования, используйте команду **Update Quantitation Method for Group**. См. Просмотр пиков на стр. 73. Когда команда выбрана, открывается диалоговое окно **Quantitation Method Editor**. Данные повторно обрабатываются, и **Results Table** обновляется, чтобы отобразить эти данные. См. Quantitation Method Editor (Редактор методов количественного анализа) на стр. 97 и Диалоговое окно Results Table на стр. 49. При повторном применении **Quantitation Method** будут заменены все пики, измененные вручную для указанного компонента, и сняты флажки в столбце **Modified** таблицы Results Table.
Project Integration Defaults (Настройки параметров интегрирования для проекта по умолчанию)	Устанавливает параметры обнаружения пика по умолчанию, которые используются при создании метода количественного анализа. Если существует более чем несколько компонентов, установите значения по умолчанию на основе хроматографии так, чтобы они не нуждались в индивидуальной корректировке по каждому компоненту. При этом ни один набор параметров не является идеальным для всех компонентов, поэтому может понадобиться корректировка некоторых параметров индивидуально для некоторых компонентов. См. Параметры алгоритма интегрирования на стр. 139.
Project Units & Calibration Defaults (Проектные единицы измерения и настройки калибровки по умолчанию)	Установка единиц измерения концентрации и параметров регрессии, которые будут по умолчанию использоваться при создании метода количественного анализа. Эти параметры можно также задать непосредственно при создании метода. Если используются аналогичные настройки, проще установить значения по умолчанию после использования данной команды. См. Project Units & Calibration Defaults (Проектные единицы измерения и настройки калибровки по умолчанию) на стр. 21.
Project Secure Export Settings (Настройки защищенного экспорта данных проекта)	При выборе данной опции данные в текстовом файле шифруются во время экспорта. Установите пароль, чтобы включить шифрование. См. Project Secure Export Settings (Настройки защищенного экспорта данных проекта) на стр. 22.

Таблица 3-1 Пункты меню Edit (Редактирование) (продолжение)

Пункт меню	Описание
Enable Project Modified Peak Warning (Включить модифицированное предупреждение о пиках для проекта)	По умолчанию не выбрано. Если выбрана данная опция, при внесении изменения в хроматограмму в **Results Table** и дальнейшем сохранении изменений открывается предупреждающее сообщение, указывающее, что были внесены изменений. Пользователю предоставляется выбор: продолжить сохранение или вернуться к **Results Table**. См. Modify Results Table Method (Изменить метод таблицы результатов) на стр. 21.
Cache Chromatograms for Faster Peak Review (Кэшировать хроматограммы для более быстрого просмотра пиков)	При включении данной функции каждый раз, когда экстрагированная ионная хроматограмма (XIC) рассчитывается для конкретного образца и компонента, она сохраняется для последующего использования, пока связанная с ней Results Table остается открытой. Например, если пользователь создает **Results Table**, когда данная функция включена, хроматограммы на панели **Peak Review** появляются быстро, поскольку они были ранее сохранены в буфер при первичной процедуре интегрирования для создания **Results Table**, и нет необходимости рассчитывать их повторно, используя данные из файла .wiff. При открытии ранее сохраненной **Results Table**, индивидуальные хроматограммы необходимо рассчитывать в первый раз, когда они отображаются на панели **Peak Review**. При этом возврат к определенной предыдущей хроматограмме будет осуществляться быстрее. Для сохранения в буфер всех хроматограмм компьютер должен быть снабжен достаточной памятью. При этом для очень больших наборов образцов с большим количеством анализируемых веществ данную опцию необходимо отключить, чтобы избежать сообщений о недостаточной памяти.
Cache all Chomatograms Now (Кэшировать все хроматограммы сейчас)	Команда **Cache Chromatograms for Faster Peak Review** используется для того, чтобы рассчитать и затем сохранить все хроматограммы в кэш-память для активной **Results Table**. Для большого набора данных выполнение данной команды может занять некоторое время. После ее завершения все хроматограммы сохраняются в буфер, а процесс просмотра пиков ускоряется. Выполнение команды можно остановить при необходимости. Выполняйте данную операцию, если будет просмотрено много хроматограмм. Если опция **Cache Chromatograms for Faster Peak Review** изначально активирована, нет необходимости выполнять эту операцию еще раз после создания **Results Table**, поскольку хроматограммы уже сохранены в буфер. Команда может пригодиться после открытия ранее сохраненной **Results Table**.

Modify Results Table Method (Изменить метод таблицы результатов)

Вносит изменения в метод количественного анализа, связанный с активной на данный момент таблицей Results Table. Это удобно в том случае, если пользователь захочет добавить или удалить компоненты. Чтобы изменить только параметры интегрирования, используйте команду **Update Quantitation Method for Group**. См. Изменение метода количественного анализа для группы на стр. 83.

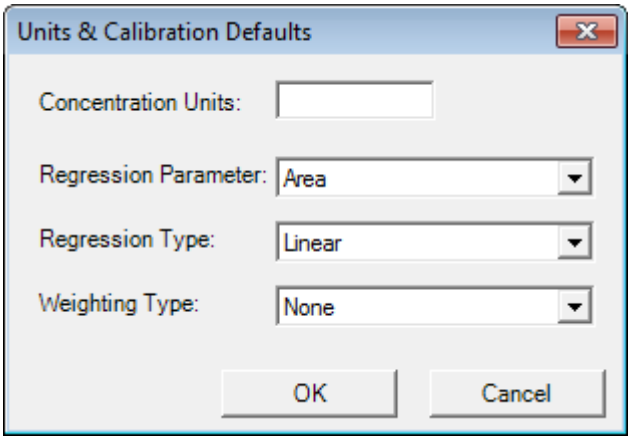
После выбора команды открывается диалоговое окно Quantitation Method Editor. Данные повторно обрабатываются, и Results Table обновляется, чтобы отобразить новые данные. См. Quantitation Method Editor (Редактор методов количественного анализа) на стр. 97.

При повторном применении Quantitation Method будут заменены все пики, измененные вручную для указанного компонента, и сняты флажки в столбце **Modified** в таблице **Results Table**.

Project Units & Calibration Defaults (Проектные единицы измерения и настройки калибровки по умолчанию)

С помощью данного окна можно задать следующие параметры: **Concentration Units**, **Regression Parameter (Area or Height)**, **Regression Type** и **Weighting Type**. Различные типы регрессии и весовые коэффициенты описаны в разделе Уравнения регрессии на стр. 147.

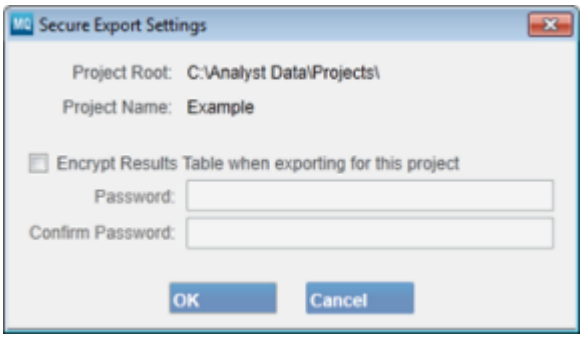
Рисунок 3-1 Units & Calibration Defaults (Принятые по умолчанию единицы измерения и калибровки)



Project Secure Export Settings (Настройки защищенного экспорта данных проекта)

При выборе данной опции данные в текстовом файле шифруются во время экспорта. Установите пароль, чтобы включить шифрование. См. рисунок 3-2.

Рисунок 3-2 Диалоговое окно Secure Export Settings (Настройки защищенного экспорта данных)



Меню Process (Обработка) 4

Таблица 4-1 Пункты меню Process (Обработка)

Пункт меню	Описание
Add Samples	Позволяет добавить дополнительные образцы к активной в настоящее время **Results Table**. См. Select Samples (Выбрать образцы) на стр. 49. Строка состояния отображается, пока происходит интегрирование новых образцов и добавление их в существующую таблицу. Для выполнения данной задачи необходимо иметь права **Add samples to Results Table**.
Remove Selected Samples	Позволяет удалить дополнительные образцы из активной в настоящее время **Results Table**. Для выполнения данной задачи необходимо иметь права **Remove samples from Results Table**.
Show Only Outliers	Позволяет показывать строки со значениями, выходящими за границы диапазона. Выберите последовательно **Process** > **Show Only Outliers**. Для отображения всех строк нажмите **Process** > **Show Only Outliers** еще раз.
Go to Next Outlier	Позволяет перейти к следующему значению в **Results Table**, выходящему за границы диапазона. Выберите последовательно **Process** > **Go to Next Outlier**.
Export Calibration and Save Results Table	Сохраняет копию уравнения калибровки для всех аналитов, связанных с активной **Results Table**, во внешний файл (*.mqcal). Это позволяет применить калибровку от одного набора стандартных образцов к другим образцам, которые не являются частью той же **Results Table**. См. Export Calibration (Экспорт калибровки) на стр. 24.
Import External Calibration	Позволяет применить ранее экспортированную калибровку к активной **Results Table**. Альтернативой использования данной команды является указание файла внешней калибровки из мастера **New Results Table**, как описано в Установка параметров интегрирования на стр. 55. См. Import External Calibration (Импорт внешней калибровки) на стр. 24.
Remove External Calibration	Позволяет удалить ранее примененную внешнюю калибровку из активной **Results Table**.

Export Calibration (Экспорт калибровки)

Сохраняет копию уравнения калибровки для всех аналитов, связанных с активной **Results Table**, во внешний файл (*.mqcal). Это позволяет применить калибровку от одного набора стандартных образцов к другим образцам, которые не являются частью той же **Results Table**.

Обычный рабочий процесс включает:

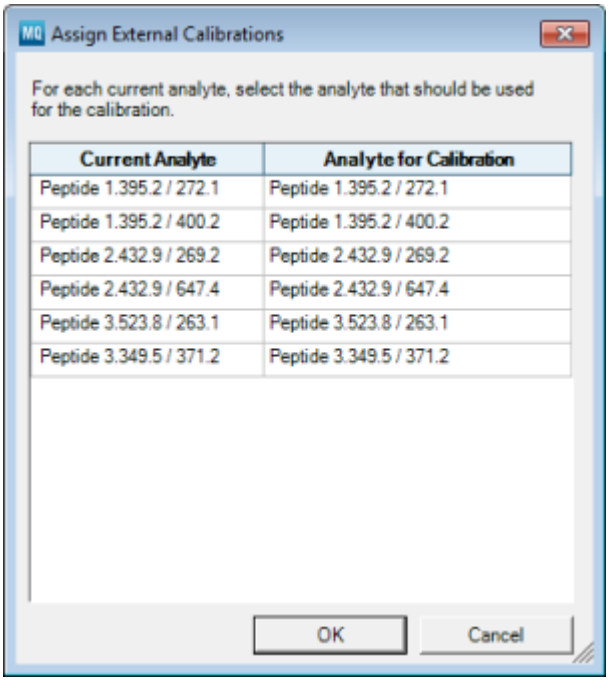
1. Создание новой **Results Table**, содержащей только **Standard**.
2. Использование панели **Peak Review**, чтобы убедиться в успешном выполнении процедуры интегрирования.
3. Использование команды **Export Calibration**, чтобы сохранить копию калибровки.
4. Создание новой **Results Table**, содержащей образцы неизвестной концентрации.
5. Применение предыдущей экспортированной калибровки к новой таблице при помощи команды **Import External Calibration** или при помощи указания файла калибровки.
6. Повтор шагов 4 и 5 при необходимости.

Если исходная **Results Table** (с образцами **Standard**) изменена, автоматическое обновление любых предварительно экспортированных калибровочных данных не произойдет. Необходимо вновь экспортировать **Results Table**.

Import External Calibration (Импорт внешней калибровки)

Если в текущей **Results Table** используются имена анализируемых веществ, аналогичные именам в экспортируемых калибровочных данных, диалог завершается автоматически, и можно нажать **OK**. Если анализируемые вещества в текущей **Results Table** назначены конкретным группам, и если анализируемые вещества в экспортируемых калибровочных данных назначены группам с аналогичными именами, диалог завершается автоматически. Если имеется более чем несколько анализируемых веществ, используйте те же имена анализируемых веществ в обоих случаях или используйте соответствующие имена **Group**.

Рисунок 4-1 Диалоговое окно Assign External Calibrations (Назначение внешней калибровки)



Обозначение	Описание
Current Analyte (Текущий аналит)	Содержит запись для каждого анализируемого вещества из метода количественного анализа для текущей **Results Table**.
Analyte for Calibration (Аналит для калибровки)	Содержит список имен всех анализируемых веществ, доступных в файле внешних калибровочных данных. Для каждого текущего анализируемого вещества выберите соответствующее внешнее анализируемое вещество, от которого получены калибровочные данные.

Меню Audit Trail (Журнал аудита) 5

Примечание. Карта аудита добавляется к сеансу при первоначальном создании **Results Table**. После добавления ее нельзя изменить.

Таблица 5-1 Меню Audit Trail (Журнал аудита)

Пункт меню	Описание
Audit Trail Viewer (Программа просмотра журнала аудита)	Открытие программы **Audit Trail Viewer**
Audit Map Manager	Выбор, изменение и активация карт **Audit Map**
View Session Audit Map	Открытие текущей карты активной **Results Table**

Audit Trail Viewer (Программа просмотра журнала аудита)

Функция Audit Trail Viewer позволяет увидеть полную историю конкретного образца в Results Table. Таблицы Results Table сохраняются в папку <drive>:\Analyst Data\Projects\<project name>\Results.

Примечание.
Не следует скрывать Results Table при выполнении других действий, например при сохранении журнала аудита.

Чтобы для более удобного просмотра данных развернуть другую панель, например Peak Review, воспользуйтесь кнопкой **Toggles tab mode** на панели инструментов.

Функция **Audit Trail Viewer** позволяет выполнять следующие действия:

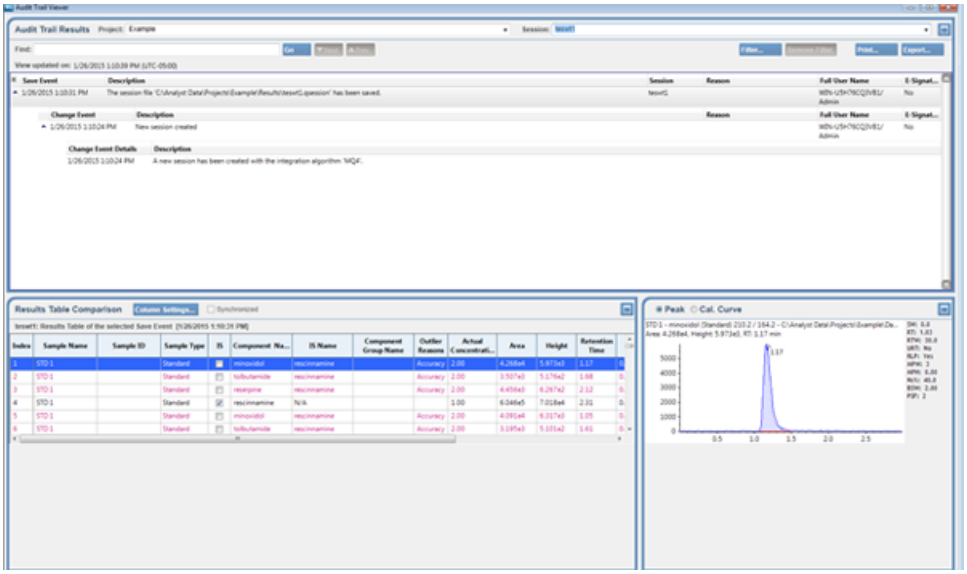
- просматривать записи журнала аудита для каждой **Results Table**;
- выполнять поиск по ключевому слову, при котором выделяется каждое найденное в тексте совпадение;
- фильтровать события, подлежащие аудиту, в журнале аудита, используя набор указанных критериев;
- экспортировать записи журнала аудита в файл .txt; экспортированные файлы можно редактировать;

- выполнять печать в защищенный файл PDF.

Просмотр результатов аудита в Audit Trail Viewer

1. Откройте Results Table.
2. Выберите пункты **Audit Trail** > **Audit Trail Viewer**.
3. Чтобы изменить проекты, нажмите на список **Projects**, а затем выберите другой проект.
4. Чтобы просмотреть другие сеансы, нажмите на список **Sessions**, а затем выберите другой сеанс. Также можно выбрать одновременный просмотр всех сеансов из проекта.

Рисунок 5-1 Audit Trail Viewer (Программа просмотра журнала аудита)



Обозначение	Описание
Project (Проект)	Выбор проекта из списка.
Session (Сеанс)	Выбор файла сеанса.
Find (Поиск)	Поиск по ключевому слову без фильтра. В тексте выделяется каждое совпадение.
Go (Выполнить)	Используется для запуска поиска.
Next (Далее)	Используется для перехода к следующему слову.
Prev (Назад)	Используется для перехода к предыдущему слову.
Filter (Фильтр)	Используется для отображения только тех событий, которые соответствуют выбранным критериям.

Обозначение	Описание
Remove Filter (Удалить фильтр)	Используется для удаления фильтра.
Print (Печать)	Используется для печати журнала аудита
Export (Экспорт)	Используется для экспорта журнала аудита.
Save Event (Безопасное событие)	После сохранения файла сеанса создается «безопасное» событие. В «безопасном» событии фиксируются любые изменения, сделанные с момента предыдущего «безопасного» события, а также все значения из **Results Table**.
Описание	Подробная информация о сделанных изменениях.
Session (Сеанс)	Позволяет увидеть имя файла сеанса.
Reason (Причина)	Позволяет увидеть причину изменения, внесенного в **Results Table**.
Full User Name (Полное имя пользователя)	Позволяет увидеть имя пользователя, который внес изменение в **Results Table**.
E-Signature (Электронная подпись)	Указывает, были ли приняты изменения, внесенные в **Results Table**.
Column Settings (Настройки столбца)	Используется, чтобы показать или скрыть столбцы в **Results Table**.
Synchronized (Синхронно)	Позволяет одновременно осуществлять горизонтальную прокрутку обеих **Results Table**.
Previous version (Предыдущая версия)	Позволяет увидеть предыдущую версию выбранного файла сеанса.
Peak (Пик)	Используется для просмотра пика выбранного образца.
Cal Curve (Калибровочная кривая)	Используется для просмотра калибровочной кривой выбранного образца.

Поиск по ключевому слову

Поиск можно выполнять по ключевому слову, при этом будут выделяться все упоминания этого слова в тексте.

1. Откройте Results Table.
2. Выберите пункты **Audit Trail** > **Audit Trail Viewer**.

3. В поле **Find** введите слово для поиска, а затем нажмите **Go**.

   Если найдены совпадения, поле **Find** станет зеленым, появится количество совпадений, а само слово будет выделено желтым цветом. Если совпадения не найдены, поле **Find** станет розовым.

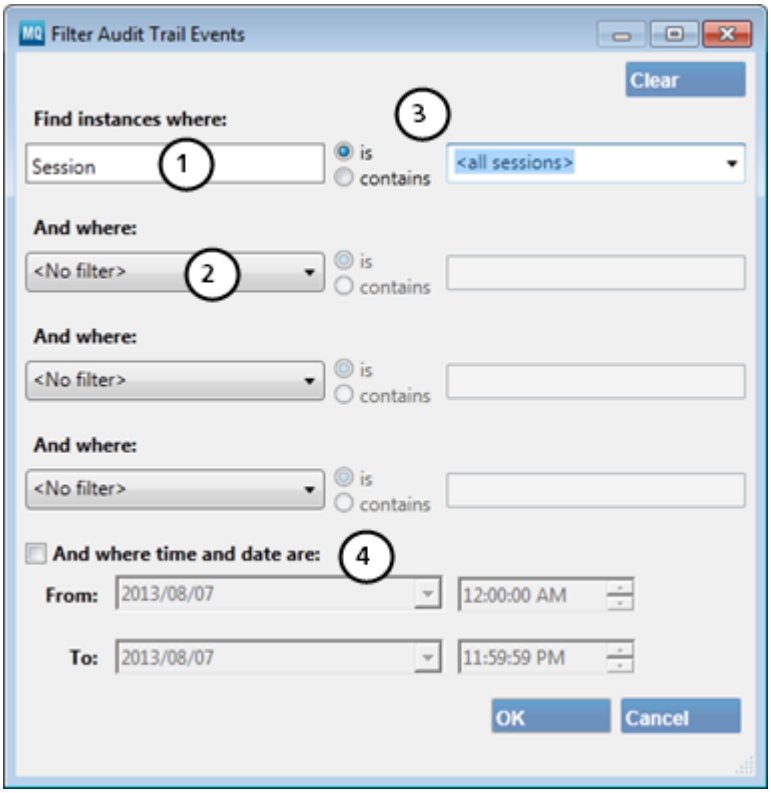
4. Используйте кнопки **Next** и **Prev** для перемещения по совпадениям.

Фильтр подлежащих аудиту событий

Подлежащие аудиту события, зарегистрированные в журнале аудита, можно фильтровать с помощью набора заданных критериев.

1. Откройте Results Table.
2. Выберите пункты **Audit Trail** > **Audit Trail Viewer**.
3. Нажмите **Filter**.

Рисунок 5-2 Диалоговое окно Filter Audit Trail Events (Фильтрация событий из журнала аудита)



Элемент	Описание
1	Имя файла **Results Table**. Для активного проекта можно отфильтровать один или все файлы **Results Table**.
2	**Description** (Описание): частично или полностью вводится тип события. **Sample Name** (Имя образца): частично или полностью вводится имя образца. **Full User Name** (Полное имя пользователя): частично или полностью вводится имя пользователя. **E-Signature** (Электронная подпись): можно выбрать Yes или No. **Reason** (Причина): частично или полностью вводится причина.
3	**is** (является): используется для фильтрации по определенному слову или фразе.
4	**contains** (содержит): используется для фильтрации по части слова или фразы.
5	**Date** (Дата): используется для фильтрации по событиям, которые произошли в определенную дату и время.

4. В диалоговом окне **Filter Audit Trail Events** для выбора критериев фильтрации используйте списки.

Примечание. Редактирование данных в поле Results Table невозможно.

5. Выберите **Clear**, сбросить критерии фильтрации и установить значение **No filter**.
6. Нажмите **OK**, чтобы отфильтровать события.

Совет! Для удаления фильтра в окне **Audit Trail Viewer** нажмите кнопку **Remove Filter**.

Экспорт записей из Audit Trail Viewer

1. Откройте Results Table.
2. Нажмите **Export** и введите имя файла.

   Файл будет экспортироваться в текстовом формате с разделением табуляцией.

Примечание. Из программы Audit Trail Viewer можно экспортировать только часть сохраненных событий.

Печать записей из Audit Trail Viewer

1. Откройте Results Table.
2. Нажмите **Print**, затем выберите принтер.

   Пользователь может распечатать защищенный файл PDF, используя средство pdfFactory.

   Примечание. При помощи программы Audit Trail Viewer можно распечатать только часть сохраненных событий.

Audit Trail Manager (Менеджер журнала аудита)

Данное программное обеспечение группирует события количественного анализа, подлежащие аудиту, в журналы аудита. Журналы аудита представляют собой файлы, в которых хранятся записи подлежащих аудиту событий. Журналы аудита в сочетании с иными файлами, например, файлами wiff, метода количественного анализа и файлами **Results Table** представляют собой легитимные электронные документы, которые можно использовать в целях контроля соответствия необходимым требованиям.

Приложение **Audit Trail Manager** сохраняет все события, как указано в карте аудита. Данное приложение фиксирует электронные подписи и причины, включая имя пользователя, дату и детали внесенных изменений. Оно также регистрирует дополнительную информацию, например комментарии, согласно карте аудита.

Совет! Файл сеанса содержит **Results Table**, копию метода количественного анализа, копию карты Audit Map на момент ее создания, а также весь журнал аудита для полного сеанса.

Когда программное обеспечение создает или изменяет файл qsession или qmethod, это событие фиксируется в журнале **Project Audit Trail** на вкладке **History** в программном обеспечении Analyst® MD. Фиксируются следующие события:

- Создание файла метода количественного анализа
- Изменение файла метода количественного анализа
- Создание **Results Table** количественного анализа
- Изменение **Results Table** количественного анализа

Если для создания или изменения файла метода количественного анализа выбрано **E-signature** или **Reason Prompt**, то диалоговое окно **Audit Trail**, создаваемое программным обеспечением Analyst® MD, открывается в MultiQuant™ MD.

Таблица 5-2 Журналы аудита

Журнал аудита	Примеры зарегистрированных событий
Журнал аудита количественного анализа Quantitation Audit Trail (один на Results Table)	Изменения следующих данных: • создание и изменение файлов сеанса; • сведения об образцах; • параметры интегрирования пиков.

Карты аудита

Программное обеспечение MultiQuant™ MD хранит всю историю изменений настроек обработки, связанных с результатами количественного анализа. Данное программное обеспечение осуществляет аудит всех событий в соответствии с картой аудита активного проекта и фиксирует все электронные подписи и ссылки на соответствующие записи.

Создание карты аудита

Программа устанавливает несколько карт аудита. Просмотрите карты аудита, чтобы решить, не проще ли изменить одну или несколько карт, чем создавать новые. Создание или изменение карт аудита являются событиями, подлежащими аудиту, которые регистрируются в журнала аудита проекта программного обеспечения Analyst® MD.

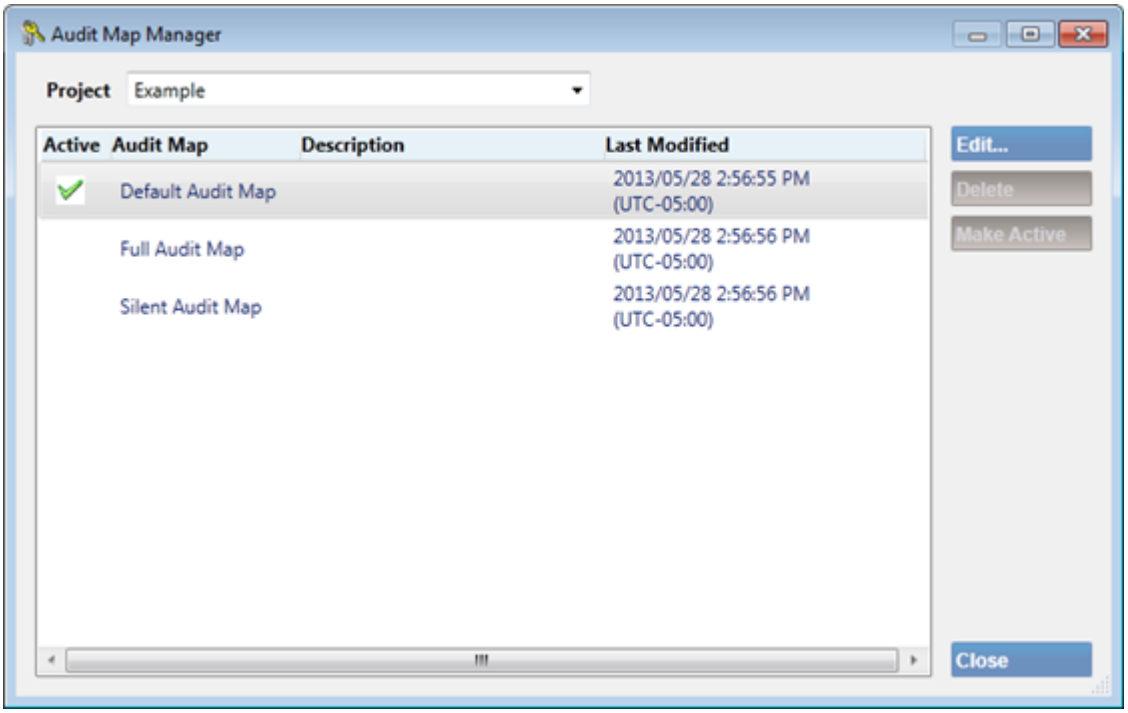
ПРЕДОСТЕРЕЖЕНИЕ. Если два пользователя изменят одну и ту же карту аудита одновременно, то внесены будут только изменения, сделанные пользователем, который сохранил файл последним.

Активная карта аудита для проекта определяет, какие события регистрируются в журнале аудита для любых создаваемых таблиц **Results Table**.

Примечание. При сохранении **Results Table** активная карта аудита сохраняется вместе с **Results Tables** и не может быть изменена.

1. Выберите пункты **Audit Trail** > **Audit Map Manager**.

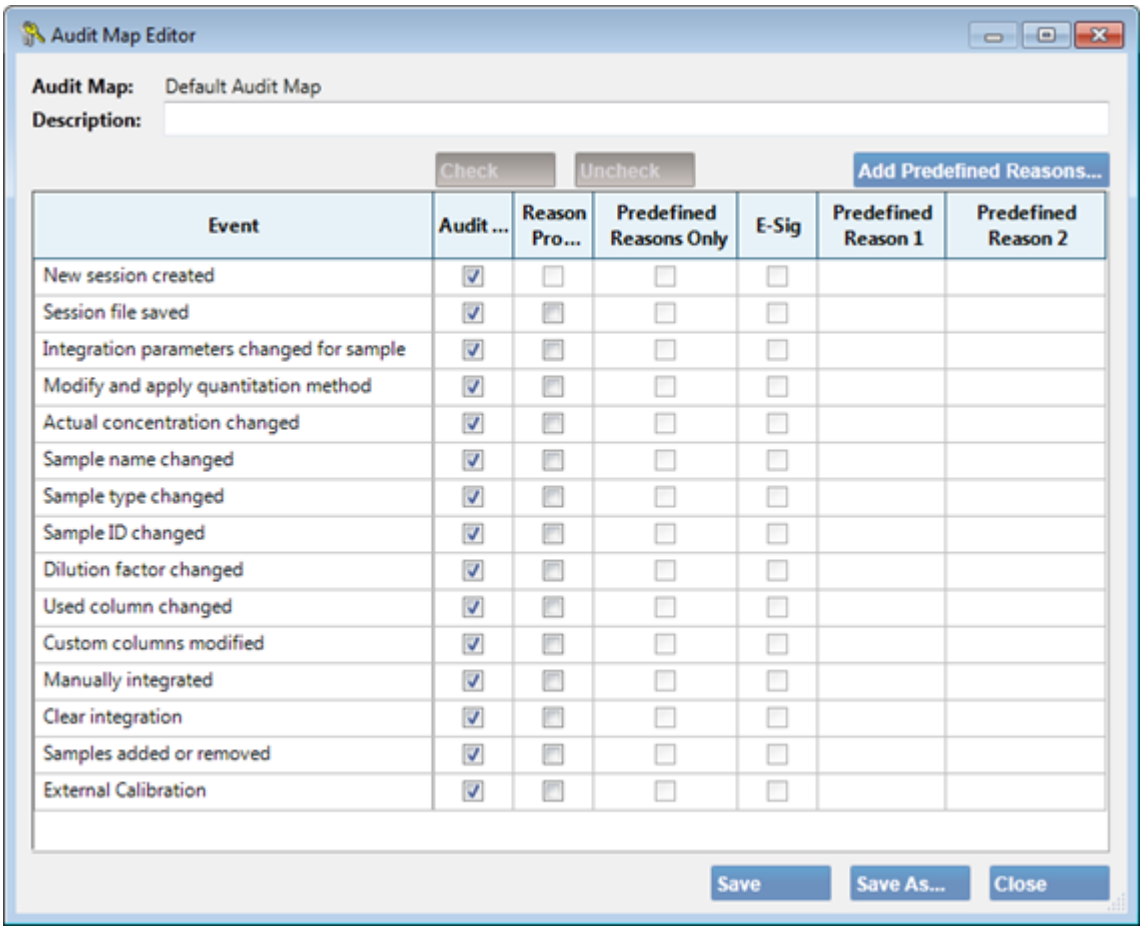
Рисунок 5-3 Audit Map Manager (Менеджер карты аудита)



Обозначение	Описание
Project (Проект)	Выбор проекта из списка.
Edit (Редактирование)	Используется для редактирования активной карты аудита.
Delete (Удалить)	Используется для удаления выбранной карты аудита.

2. Из списка **Project** выберите проект, для которого необходимо создать карту аудита.
3. Выберите карту аудита, затем нажмите **Edit**.

Рисунок 5-4 Audit Map Editor (Редактор карт аудита)



Обозначение	Description (Описание)
Description (Описание)	Ввод описания карты аудита.
Check (Установить флажок)	Используется для установки флажка.
Uncheck (Снять флажок)	Используется для снятия флажка.
Add Predefined Reasons (Добавить предустановленные причины)	Используется для добавления в список предустановленной причины.

4. При необходимости введите в поле **Description** описание карты аудита.
5. В таблице **Audit Map** настройте каждое событие указанным ниже образом.

- Чтобы событие подвергалось аудиту, установите флажок в столбце **Audited**.

  Совет! Чтобы установить флажок в последующих ячейках столбца, нажмите клавишу **Ctrl** или **Shift**, выберите ячейки, а затем нажмите **Check**.

- Если нужно, чтобы операторы вводили пользовательскую причину или выбирали предустановленную причину, установите флажок в столбце **Reason Prompt**.
- Если нужно, чтобы операторы выбирали только предустановленную причину изменения, когда происходит событие, установите флажки в столбцах **Reason Prompt** и **Predefined Reasons only**. В столбцах **Predefined Reason** _ можно выбрать до десяти причин.

  Совет! Для добавления предустановленной причины нажмите **Add Predefined Reasons**.

- Чтобы запрашивались электронные подписи для события, установите флажок в столбце **E-Signature**.

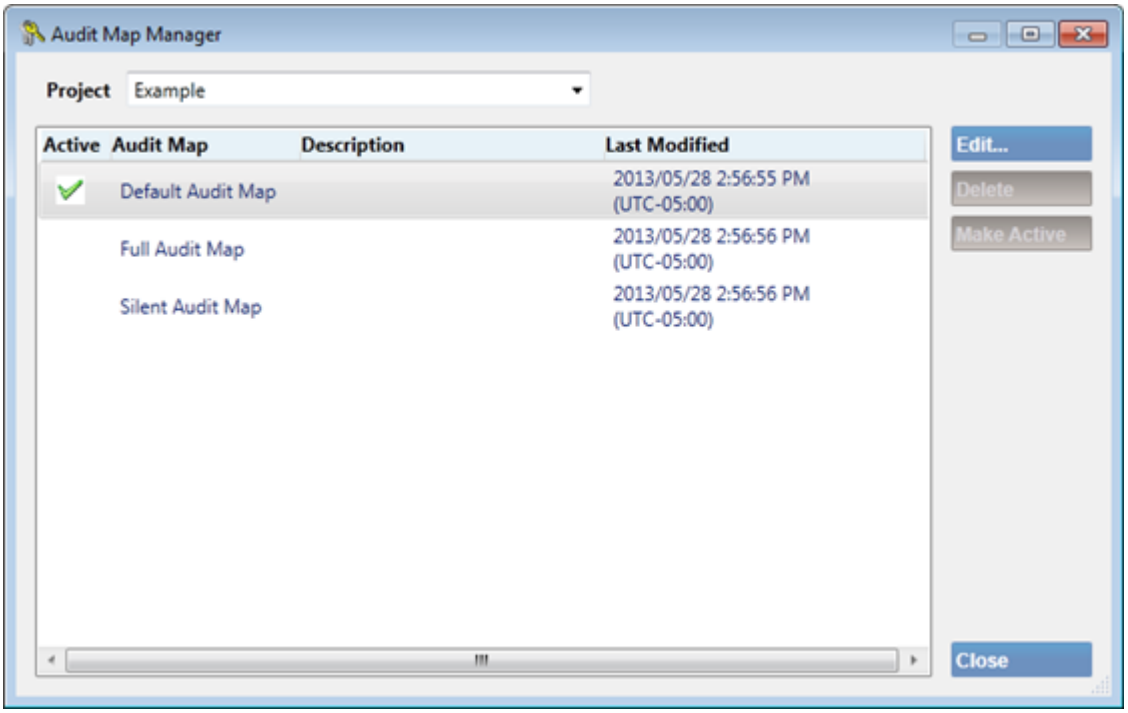
6. Нажмите кнопку **Save As**, а затем в диалоговом окне **Save Audit Map As** введите имя.
7. Нажмите **Save**.
8. Нажмите **Close** в диалоговом окне **Audit Map Editor**.
9. Выберите опцию **Make Active**.

   Когда применяется карта аудита, она становится активной картой аудита. Настройки аудита в активной карте аудита определяют, какие события будут регистрироваться в журналах аудита, начиная с этого момента.

Изменение карты аудита

1. Выберите пункты **Audit Trail** > **Audit Map Manager**.

Рисунок 5-5 Audit Map Manager (Менеджер карты аудита)



Обозначение	Описание
Project (Проект)	Выбор проекта из списка.
Edit (Редактирование)	Используется для редактирования активной карты аудита.
Delete (Удалить)	Используется для удаления выбранной карты аудита.

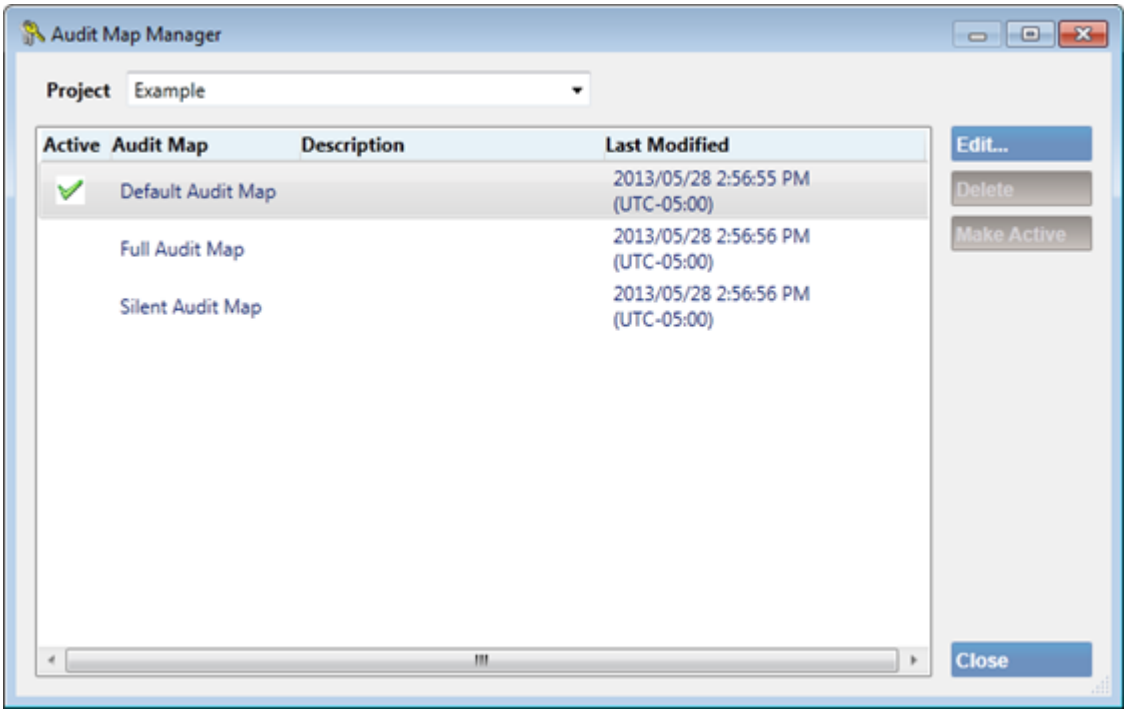
2. Из списка **Project** выберите проект, для которого необходимо изменить карту аудита.
3. Выберите другую карту и затем нажмите **Make Active**.
4. Нажмите **Close**.

Редактирование карты аудита

Следующие подлежащие аудиту события всегда регистрируются и поэтому не отображаются в окне **Audit Map Editor**: Print Report, Export Results Table и Transfer to LIMS.

1. Выберите пункты **Audit Trail** > **Audit Map Manager**.

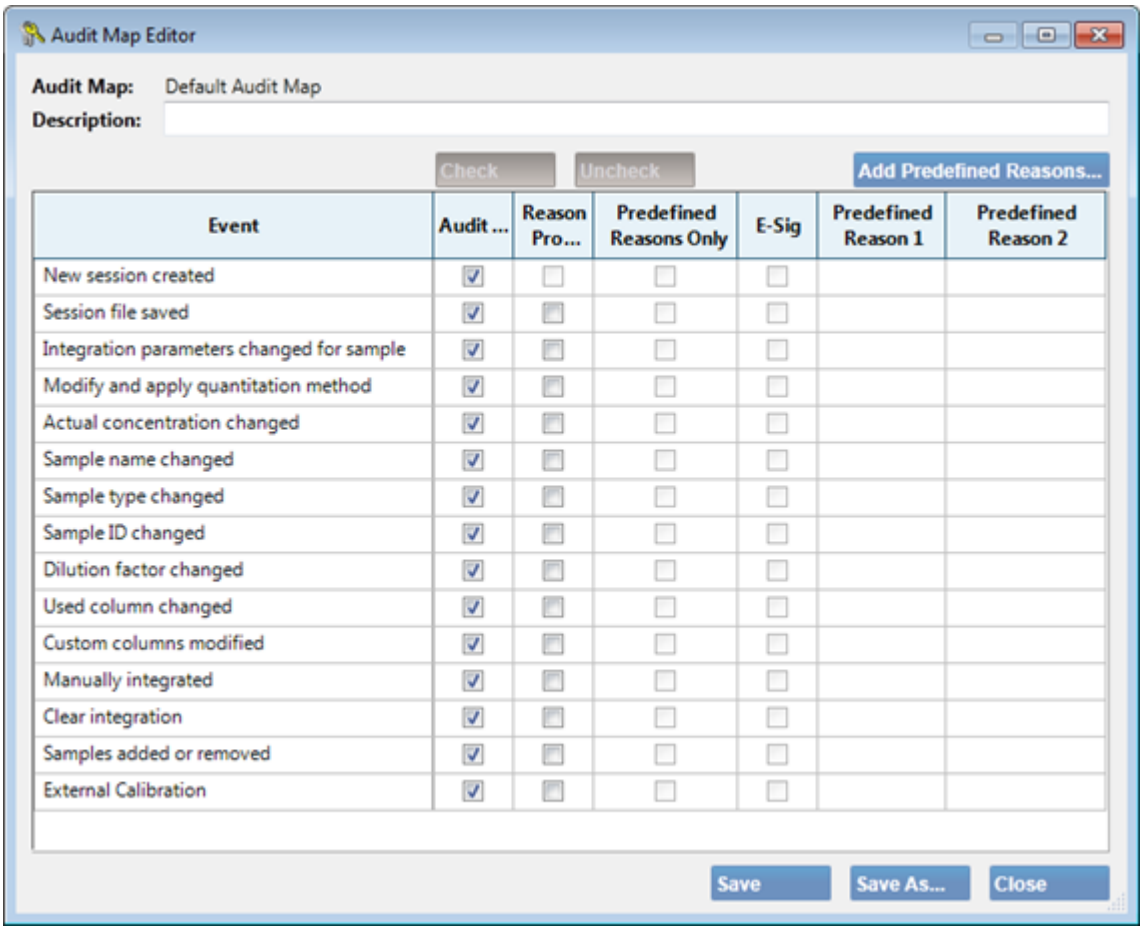
Рисунок 5-6 Audit Map Manager (Менеджер карты аудита)



Обозначение	Описание
Project (Проект)	Выбор проекта из списка.
Edit (Редактирование)	Используется для редактирования активной карты аудита.
Delete (Удалить)	Используется для удаления выбранной карты аудита.

2. Выберите карту аудита, затем нажмите **Edit**.

Рисунок 5-7 Audit Map Editor (Редактор карт аудита)



Обозначение	Description (Описание)
Description (Описание)	Ввод описания карты аудита.
Check (Установить флажок)	Используется для установки флажка.
Uncheck (Снять флажок)	Используется для снятия флажка.
Add Predefined Reasons (Добавить предустановленные причины)	Используется для добавления в список предустановленной причины.

3. При необходимости введите в поле **Description** описание карты аудита.
4. В таблице **Audit Map** настройте каждое событие указанным ниже образом.

- Чтобы событие подвергалось аудиту, установите флажок в столбце **Audited**.

  Совет! Чтобы установить флажок в последующих ячейках столбца, нажмите клавишу **Ctrl** или **Shift**, выберите ячейки, а затем нажмите **Check**.

- Если нужно, чтобы операторы вводили пользовательскую причину или выбирали предустановленную причину, установите флажок в столбце **Reason Prompt**.
- Если нужно, чтобы операторы выбирали только предустановленную причину изменения, когда происходит событие, установите флажки в столбцах **Reason Prompt** и **Predefined Reasons only**. В столбцах **Predefined Reason** _ можно выбрать до десяти причин.

  Совет! Для добавления предустановленной причины нажмите **Add Predefined Reasons**.

- Чтобы запрашивались электронные подписи для события, установите флажок в столбце **E-Signature**.

5. Нажмите **Save**.
6. Выберите опцию **Make Active**.

   Когда применяется карта аудита, она становится активной картой аудита. Настройки аудита в активной карте аудита определяют, какие события будут регистрироваться в журналах аудита, начиная с этого момента.

Просмотр встроенных настроек аудита

Настройки аудита, использующиеся для Results Table, встраиваются при создании таблицы результатов в файл Results Table. Эти настройки нельзя изменить. Метка времени рядом с именем карты аудита указывает, когда в последний раз сохранялась карта аудита, настройки из которой встраивались в файл.

1. Откройте Results Table.
2. Выберите пункты **Audit Trail > View Session Audit Map**.

Рисунок 5-8 Session Audit Map (Карта аудита сеанса)

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	☑	☐	☐	☐	
Session file saved	☑	☐	☐	☐	
Integration parameters changed for sample	☑	☐	☐	☐	
Modify and apply quantitation method	☑	☐	☐	☐	
Actual concentration changed	☑	☐	☐	☐	
Sample name changed	☑	☐	☐	☐	
Sample type changed	☑	☐	☐	☐	
Sample ID changed	☑	☐	☐	☐	
Dilution factor changed	☑	☐	☐	☐	
Used column changed	☑	☐	☐	☐	
Custom columns modified	☑	☐	☐	☐	
Manually integrated	☑	☐	☐	☐	
Clear integration	☑	☐	☐	☐	
Samples added or removed	☑	☐	☐	☐	
External Calibration	☑	☐	☐	☐	

Close

Меню Help (Справка) 6

За исключением пункта **About**, данное меню содержит пункты, перечисленные в таблицу 6-1. Эти файлы устанавливаются автоматически, и их также можно найти в папке <drive>:\Program Files\AB SCIEX\MultiQuant 3\Help.

Документы или папки (или краткий путь к ним) можно скопировать в данную папку Help, чтобы они автоматически появились в меню.

Таблица 6-1 Меню Help (Справка)

Пункт меню	Описание
Install License (Установка лицензии)	Открытие диалогового окна MultiQuant™ MD Activation.
Verify Installation (Проверка установки)	Проверка файлов и установки.
Software Reference Guide (Руководство по программному обеспечению)	Описание характеристик и функций программного обеспечения.
Software Release Notes (Примечания к версии программного обеспечения)	Содержат информацию о программном обеспечении, а также процедуры для установки программного обеспечения.
About (О программе)	Показывает версию программы, авторское право и другую информацию о программе наряду с информацией о том, какие функции лицензии устанавливаются.

Таблицы результатов 7

Таблица **Results Table** является начальной точкой для просмотра и экспорта данных. Для создания Results Table используйте мастер **New Results Table wizard** или нажмите на **File > New Results Table**. См. Диалоговое окно Results Table на стр. 49.

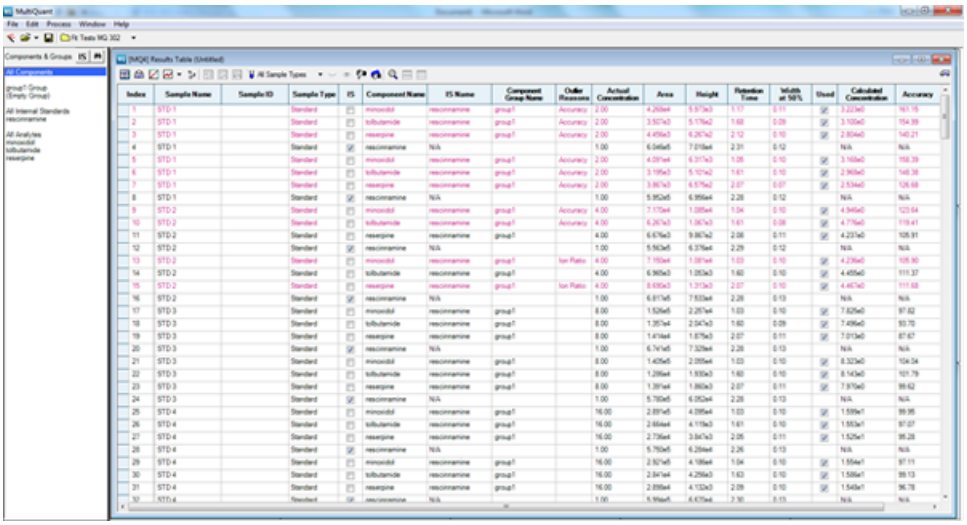
Примечание. Столбцы **Sample Name** и **Sample ID** не могут содержать следующих символов: \ / : * ? " < > |=.

Конфигурация аудита, используемая для **Results Table**, встраивается в файл **Results Table** при создании **Results Table** Эти настройки нельзя изменить. Метка времени, показанная рядом с именем карты аудита, указывает, когда карта аудита, используемая для встраивания конфигурации, была в последний раз сохранена.

Примечание. При перемещении данных перемещайте весь проект, чтобы сохранить структуру файла. Если структура папки и файла не сохранена, невозможно будет просмотреть **Results Table** или хроматограммы.

Для каждого компонента каждого первоначально выбранного образца имеется отдельная строка.

Рисунок 7-1 Пример Results Table (Таблица результатов)



- В столбцах **IS** (Внутренний стандарт), **Component Name** (Название компонента) и **IS Name** (Название внутреннего стандарта) содержится информация об анализируемых веществах.
- Флажок указывает, какой внутренний стандарт выбран для образца.

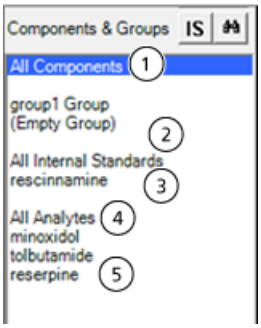
- Выберите, какие столбцы необходимо отобразить в **Results Table**, с помощью диалогового окна **Column Settings**. См. Column Settings (Настройки столбца) на стр. 46.
- Меняйте ширину столбцов путем перемещения линии, отделяющей два заголовка столбцов. Данная информация автоматически сохраняется и применяется при открытии пользователем сохраненной ранее **Results Table**.
- Меняйте порядок столбцов нажатием на заголовок столбца и дальнейшим его перемещением в новое местоположение. Данная информация автоматически сохраняется и применяется при открытии пользователем сохраненной ранее **Results Table**.
- Пользователи могут ограничить таблицу Results Table так, чтобы она отображала только строки, соответствующие конкретным анализируемым веществам или внутренним стандартам. Используйте панель инструментов, чтобы ограничить отображаемые типы образцов. См. Components & Groups List (Список компонентов и групп) на стр. 43 и Фильтр по типу образца на стр. 48.
- Определенные операции, в частности, синхронизация с панелью **Peak Review**, применяются к выбранным на данный момент строке или строкам. Выберите строки, нажав на область слева от первого столбца.

Components & Groups List (Список компонентов и групп)

Когда открыта **Results Table**, слева от главного окна отображается список текущих компонентов и групп. С помощью этого списка можно изменять компоненты, которые будут отображаться в **Results Table**, а также на любой панели, связанной с панелью **Peak Review**, или на графике **Calibration**.

Компоненты определяются в виде единичного перехода или диапазона масс. Группа определяется в виде имени группы, к которой принадлежат компоненты.

Рисунок 7-2 Components & Groups List (Список компонентов и групп)



Элемент	Обозначение	Описание
1	All Components (Все компоненты)	Нажмите, чтобы просмотреть все доступные анализируемые вещества и внутренние стандарты в **Results Table**, а также соответствующую панель **Peak Review** и график **Calibration**, если показано.
2	All Internal Standards (Все внутренние стандарты)	Нажмите, чтобы просмотреть все внутренние стандарты и скрыть все анализируемые вещества. Данный пункт не представлен, если внутренние стандарты не определены.
3	Specific Internal Standards (Определенные внутренние стандарты)	Имя каждого отдельного внутреннего стандарта включается в список. Выберите один из этих пунктов, чтобы просмотреть все внутренние стандарты и скрыть все остальные компоненты.
4	All Analytes (Все аналиты)	Нажмите, чтобы просмотреть все анализируемые вещества и скрыть все внутренние стандарты. Данный пункт не представлен, если внутренние стандарты не определены.
5	Specific Analytes (Определенные аналиты)	Имя каждого отдельного анализируемого вещества включается в список. Выберите один из этих пунктов, чтобы просмотреть эти анализируемые вещества и скрыть все остальные компоненты.

Выберите конкретный пункт в списке, чтобы отображать компоненты только для этого пункта. Нажмите клавишу **Shift** или **Ctrl**, чтобы выбрать несколько пунктов. Это удобно для отображения, например, только двух конкретных анализируемых веществ. Используйте клавиши со стрелками «вверх» и «вниз», когда список активный, для перемещения по пунктам.

Совет! Делайте список шире или уже, перемещая правый край панели влево или вправо.

Фильтрация не влияет на действительный порядок строк в Results Table. В Results Table предварительно установлен порядок сначала по образцу, затем по компоненту, в порядке, указанном в методе количественного анализа. Однако может быть произведена сортировка таблицы в указанном порядке, как описано в Значки ПО на стр. 178.

Контекстное меню Results Table

Для открытия контекстного меню нажмите правой кнопкой мыши на Results Table. Доступны следующие команды.

Таблица 7-1 Пункты контекстного меню Results Table

Пункт меню	Описание
Column Settings (Настройки столбца)	Эта команда используется для редактирования столбцов **Results Table**. Изменения применяются только к текущей **Results Table**, только если она сохранена как проект по умолчанию.
Add Custom Column (Добавить пользовательский столбец)	Добавляет новый редактируемый столбец к таблице. Заполняйте столбец, непосредственно внося информацию в ячейки или вставляя содержимое. Можно ввести любой текст, в частности, комментарии или результаты пользовательских расчетов.
Rename Custom Column (Переименовать пользовательский столбец)	Переименовывает существующий пользовательский столбец. Перед использованием данной команды нажмите на пользовательский заголовок, чтобы выбрать пользовательский столбец.
Remove Custom Column (Удалить пользовательский столбец)	Выберите, чтобы удалить существующий пользовательский столбец. Перед использованием данной команды нажмите на заголовок столбца, чтобы выбрать пользовательский столбец.
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All (Применить текущие фактические концентрации аналита ко всем аналитам)	Обеспечивает короткий путь для настройки поля **Actual Concentration** для всех анализируемых веществ для образцов **Standard**, если в наличии более одного анализируемого вещества и все анализируемые вещества присутствуют в этих образцах в одинаковой концентрации. См. Применение текущих фактических концентраций аналита ко всем аналитам на стр. 46.
Apply Current IS's Actual Concentrations to All (Применить текущие фактические концентрации внутреннего стандарта ко всем аналитам)	Подобно функции **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All**, за исключением того, что данная функция применяется ко внутренним стандартам, а не к анализируемым веществам.

Таблица 7-1 Пункты контекстного меню Results Table (продолжение)

Пункт меню	Описание
Set 'Used' (Установить флажок «Используется»)	Используйте эту команду для выполнения абсолютного количественного анализа, чтобы определить, необходимо ли использовать конкретный образец **Standard** в расчете калибровочной кривой для данного анализируемого вещества. Первые два пункта меню используются для установки или снятия флажка **Used** для выбранных в данный момент строк в **Results Table**. Третий и четвертый пункты одинаковы, за исключением того, что операция применяется ко всем анализируемым веществам для любых образцов, соответствующих выбранной строке.
Set Peaks to 'Not Found' for Selected Rows (Присвоить пику статус «не найден» для выбранных строк)	С помощью этой команды можно очистить результаты интегрирования пиков для выбранных в данный момент строк.

Применение текущих фактических концентраций аналита ко всем аналитам

1. С помощью элемента Components & Groups List (Список компонентов и групп) на стр. 43 можно отфильтровать таблицу, чтобы в ней отображался только нужный аналит.
2. Дополнительно можно использовать параметр **Sample Type Filter** для отображения только образцов **Standard**. См. Фильтр по типу образца на стр. 48.
3. Укажите фактические концентрации аналита, введя значения прямо в ячейки или выбрав столбец, а затем нажав **Paste**, если эти концентрации указаны где-либо в текстовом формате.
4. Выберите **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All**.
5. Вернитесь при необходимости к просмотру всех компонентов и всех типов образцов.

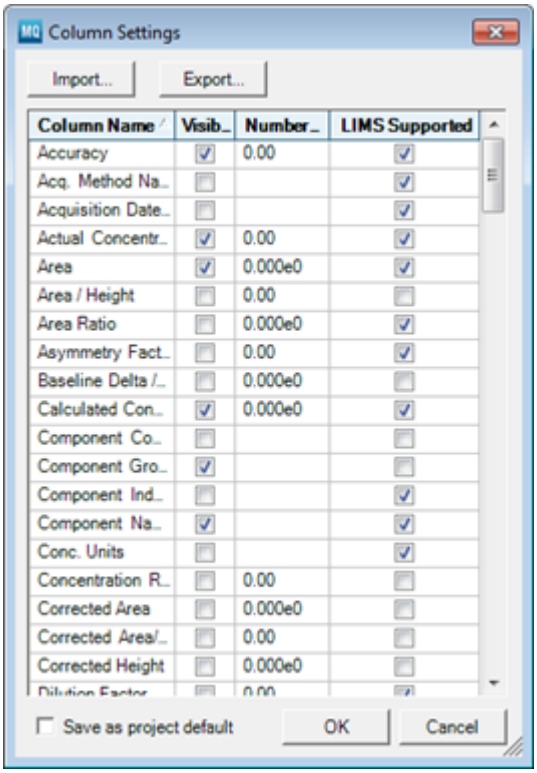
Column Settings (Настройки столбца)

Если названия столбцов обрезаны, перемещайте курсор по полю, чтобы увидеть название столбца во всплывающем сообщении.

В числовых полях используйте формат 0,00 для неэкспоненциальных чисел и формат 0,00e0 для экспоненциальных чисел. Изменение количества разрядов после десятичного разделителя позволяет менять точность отображаемых чисел. Только точка (.) может

быть использована в качестве десятичного разделителя. Разделение числовых разрядов не поддерживается.

Рисунок 7-3 Диалоговое окно Column Settings (Настройки столбца)



Поле	Описание
Import (Импорт)	Нажмите, чтобы выбрать файл настроек столбца, ранее сохраненный с помощью функции **Export**. Поля диалогового окна обновлены для использования информации из выбранного файла.
Export (Экспорт)	Нажмите, чтобы сохранить текущие настройки диалогового окна в файл. Данная функция позволяет переключаться между разными настройками столбца.
Column Name (Название столбца)	Показывает название столбцов в алфавитном порядке. См. Столбцы таблицы Results Table на стр. 62.
Visible (Видимый)	Выберите, чтобы сделать столбец видимым. В противном случае столбец скрыт.
Number Format (Формат чисел)	В числовых полях используйте формат 0,00 для неэкспоненциальных чисел и формат 0,00e0 для экспоненциальных чисел. Для отображаемого значения точности нужно выбрать количество десятичных знаков.

Поле	Описание
LIMS Supported (Поддерживаемые ЛИС)	Строки, для которых выбрана опция LIMS Supported, предварительно определены ЛИС, а выбор столбцов невозможно изменить.
Save as project default (Сохранить как пользователя по умолчанию)	Выберите, чтобы использовать настройки столбца в будущих таблицах результатов.

Фильтр по типу образца

Таблица 7-2 Описания фильтра по типу образца

Тип фильтра	Описание
All Sample Types (Все типы образца)	Показывает все типы образца.
Unknown	Вывод на экран только образцов типа Unknown, которые являются нормальными образцами неизвестной концентрации. При использовании образцов типа Standard их концентрация рассчитывается путем обратных вычислений от калибровочной кривой и вносится в Results Table в столбец Calculated Concentration. См. Уравнения регрессии на стр. 147.
Standards (Стандартны)	Вывод на экран только образцов известной концентрации. Эти образцы используются для создания калибровочной кривой.
Quality Controls (Контрольные)	Вывод на экран только образцов Quality Control. Эти образцы известной концентрации используются для проверки точности калибровочной кривой, но не оказывают влияния на ее фактическую схему.
Standards & QCs (Стандартные и контрольные)	Показывает как образцы типа Standard, так и образцы Quality Control.
Unknowns, Standards & QCs (Неизвестные, стандартные и контрольные)	Показывает образцы типа Unknown, Standard и образцы Quality Control.

Таблица 7-2 Описания фильтра по типу образца (продолжение)

Тип фильтра	Описание
Blanks (Фон)	Вывод на экран только образцов типа Blank. Как правило, это образцы, которые содержат соединения внутреннего стандарта (если таковой используется), но не содержат анализируемое вещество, и проходят обычную процедуру подготовки образца. Данные образцы не используются при построении калибровочной кривой. Чтобы их включить, выберите тип образца Standard и установите параметр Actual Concentration на 0.
Double Blanks (Двойной фон)	Вывод на экран только образцов типа Double Blank. Эти образцы не содержат ни внутренних стандартов, ни анализируемых веществ.
Solvents (Растворители)	Вывод на экран только образцов типа Solvent. Это образцы для измерения двойного фона, которые не прошли стандартную процедуру подготовки образцов.
Blanks, Double Blanks & Solvents (Фон, двойной фон и растворители)	Показывает все типы холостых образцов: типа Blank, Double Blank и Solvent.

Просмотр скрытых строк

Для любого указанного компонента строки с образцами в **Results Table** отображаются только в том случае, если для этих образцов имеются данные по соответствующему MRM-переходу. Не отображающиеся строки и компоненты с переходами, недоступными для данного образца, содержатся в таблице, но по умолчанию скрыты.

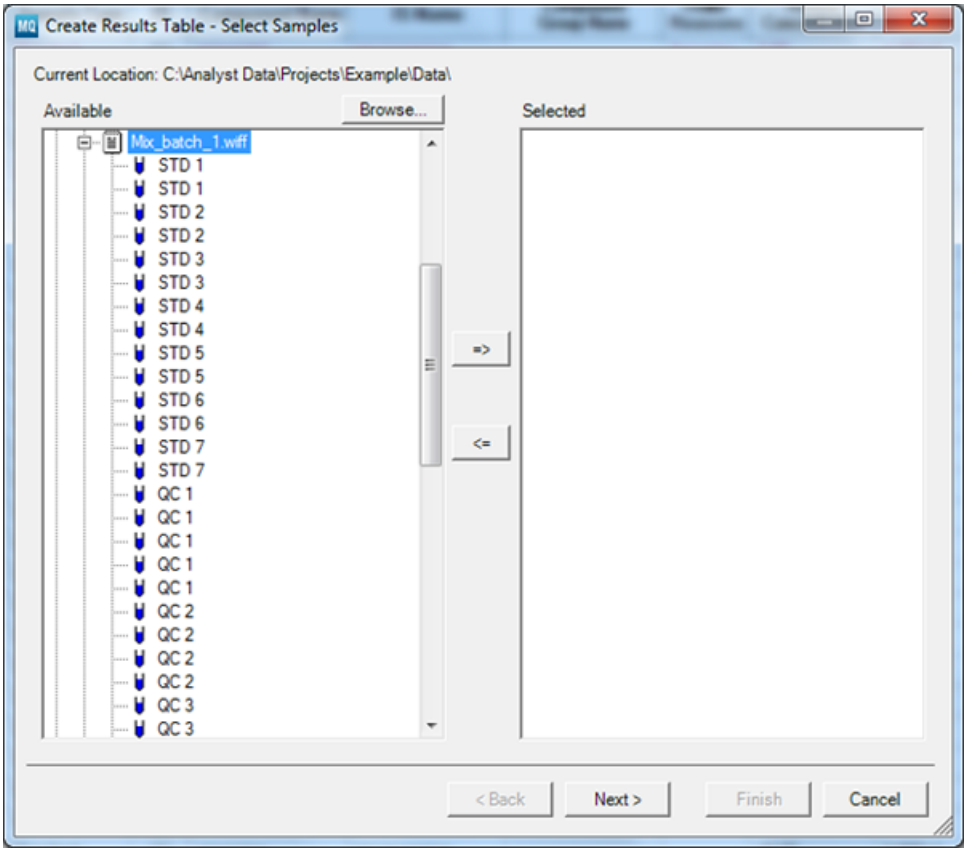
1. Выведите на экран столбец **Peak Comment** в **Results Table**, если он еще скрыт.
2. Отсортируйте таблицу по этому столбцу.
3. Выберите (смежные в данный момент) строки с комментарием **Not Present**.
4. Нажмите на значок **Hide selected rows(s)**. См. Значки ПО на стр. 178.

Диалоговое окно Results Table

Select Samples (Выбрать образцы)

Выберите образцы для обработки из файла wiff.

Рисунок 7-4 Страница Create Results Table - Select Samples (Создание таблицы результатов - Выбор образцов)

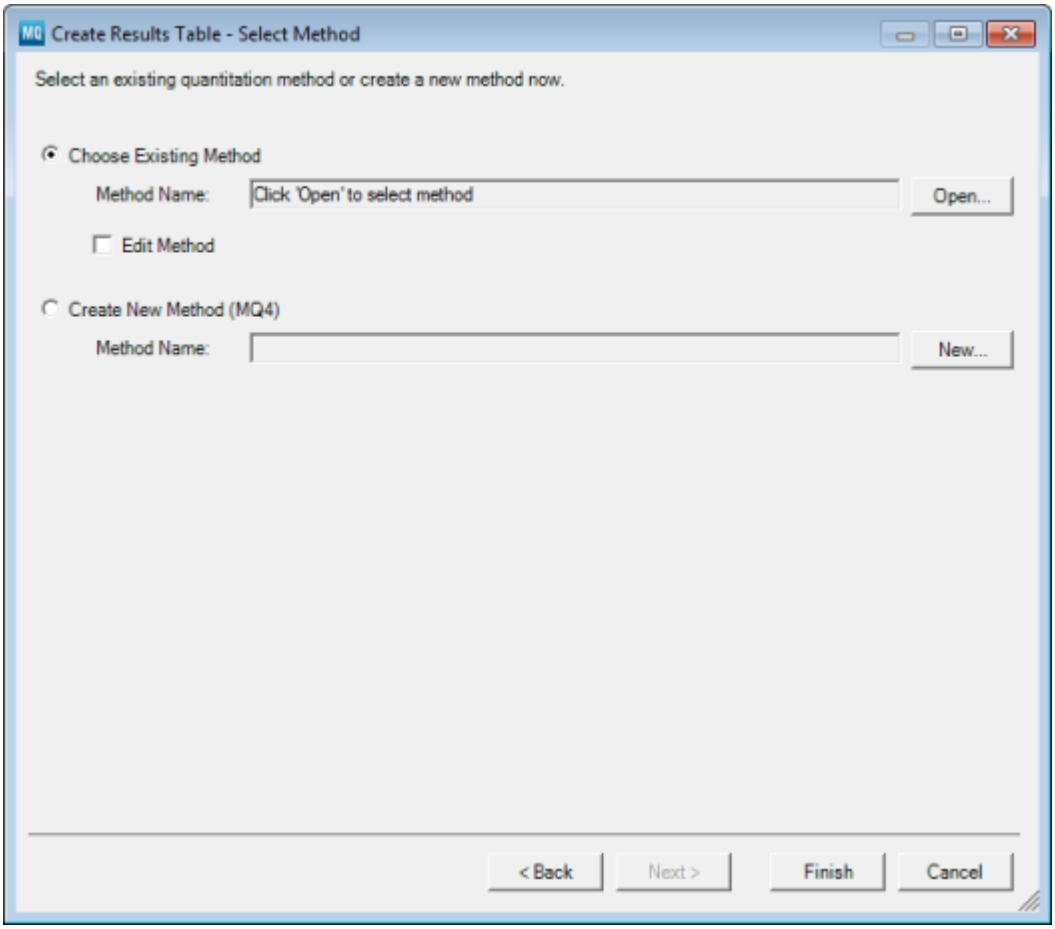


- Панель **Available** отображает вложенные папки, файлы wiff и образцы, доступные в папке **Data** для выбранной папки.
- Разверните отдельные папки, чтобы увидеть подпапки или файлы wiff. Если файл wiff развернут, он открывается для отображения доступных образцов.
- Используйте стрелки, чтобы добавить или удалить образцы.
- Выберите отдельные образцы двойным щелчком мыши, выбирая образец или файл данных и затем нажимая кнопку => или перетаскивая образец или файл данных из левого окна в правое. Нажмите клавишу **Shift** или **Ctrl**, чтобы выбрать несколько файлов до их перемещения.

Select Method (Выбрать метод)

Выберите метод количественного анализа. Если существующий метод выбран, но не редактирован, строка состояния будет отображаться, пока обрабатываются выбранные образцы. По окончании этого процесса создается **Results Table**.

Рисунок 7-5 Страница Create Results Table - Select Method (Создание таблицы результатов - Выбор метода)



Обозначение	Описание
Choose Existing Method (Выбрать существующий метод)	Нажмите кнопку **Open**, чтобы выбрать существующий метод количественных расчетов.
Edit Method (Редактировать метод)	Выберите данную команду, чтобы редактировать существующий метод. Последующие страницы мастера содержат информацию существующего метода, которую можно изменить при необходимости.
Create New Method (Создать новый метод)	Выберите пункт **New**, чтобы создать метод количественного анализа. Алгоритм в скобках представляет собой алгоритм, выбранный в диалоговом окне **Integration Defaults**.

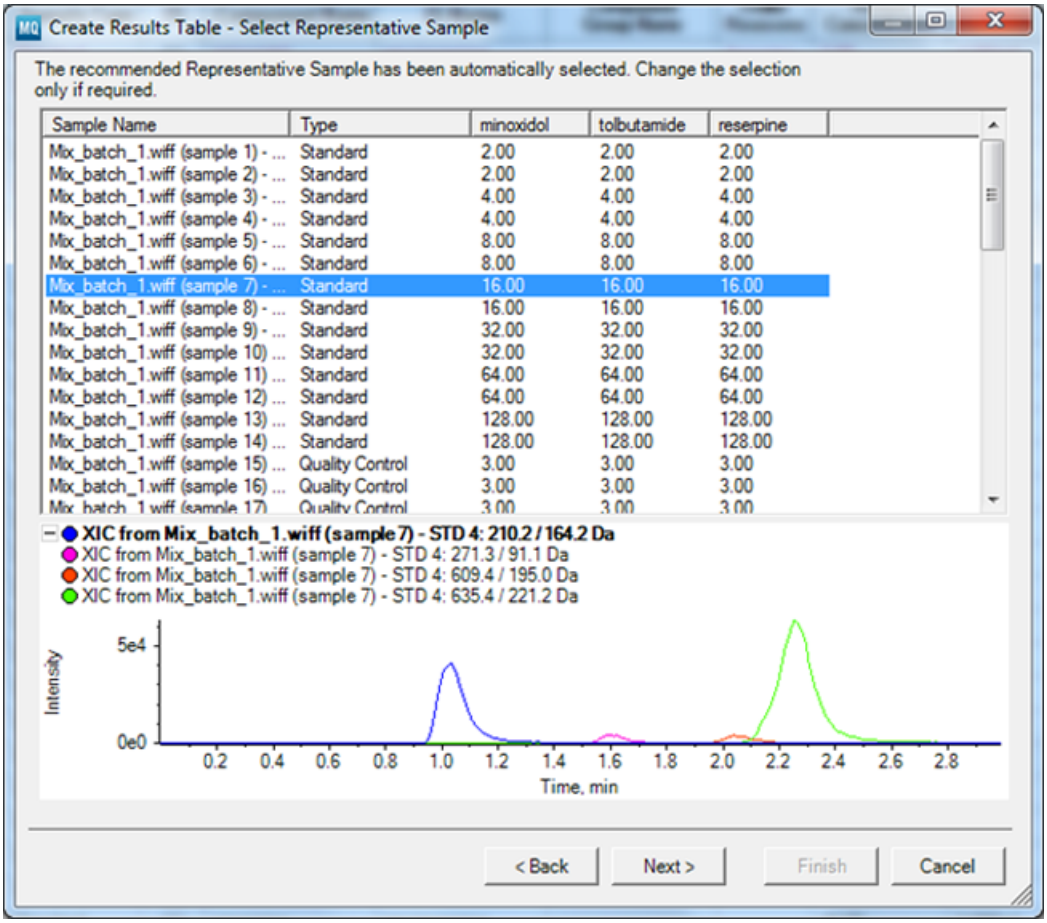
Выбор репрезентативных образцов

На странице **Select Representative Sample** представлены выбранные репрезентативные образцы, для которых хроматограммы отображаются при визуальной настройке параметров обнаружения пика и интегрирования. В этом образце должны содержаться все соединения, которые будут включены в метод количественного анализа.

Если типы образцов и концентрации анализируемых веществ были выбраны с помощью Batch Editor программного обеспечения Analyst® MD перед получением образцов, данная информация отображается в виде дополнительных столбцов.

ПО выбирает образец по умолчанию. Если выбранный образец не подходит, выберите другой репрезентативный образец. Чтобы избежать создания неверной модели интегрирования при выборе алгоритма SignalFinder™, программное обеспечение не предлагает никаких репрезентативных образцов, если уровень TIC во всех образцах выше 1,0e6. При этом пользователи могут выбирать репрезентативный образец вручную.

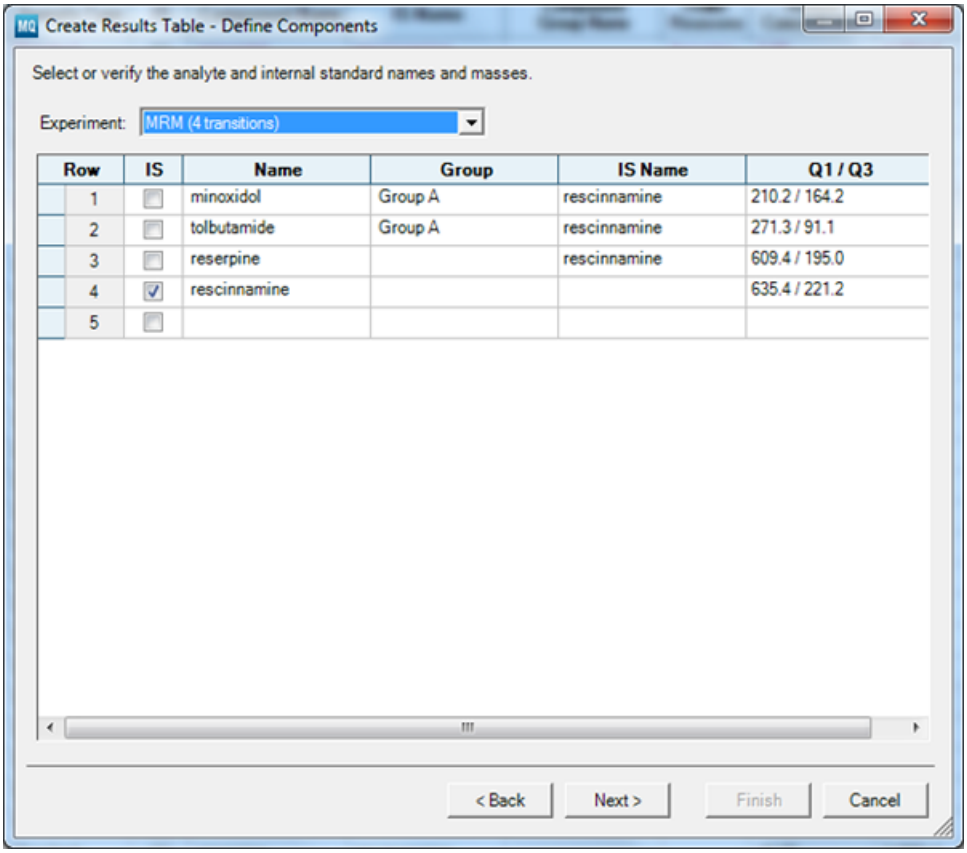
Рисунок 7-6 Страница Create Results Table - Select Representative Sample (Создание таблицы результатов - Выбор репрезентативного образца)



Установка компонентов

На странице **Define Components** представлена строка для каждого аналита или внутреннего стандарта. Выберите имена аналитов и внутренних стандартов в случае использования. См. Define Components Right-Click Menu (Контекстное меню Define Components) на стр. 54.

Рисунок 7-7 Страница Create Results Table - Define Components (Создание таблицы результатов - Установка компонентов)



Обозначение	Описание
Experiment (Эксперимент)	Выберите эксперимент для обработки из списка. Для данных нескольких периодов или нескольких экспериментов выберите каждый эксперимент, который должен быть обработан, и внесите в таблицу компоненты для соответствующего эксперимента.
Row (Строка)	Содержит номер текущей строки.
IS (Внутренний стандарт)	Указывает, является ли компонент, определенный для строки, анализируемым веществом (не выбрано) или внутренним стандартом (выбрано).

Обозначение	Описание
Name (Название)	Содержит название компонента. Для экспериментов MRM название заполняется автоматически с помощью перехода для масс **Q1/Q3**. Чтобы указать более конкретное название, введите название в поле.
Group (Группа)	Содержит имя группы, к которой принадлежит компонент в строке. Если анализируемые вещества или внутренние стандарты, которые соотносятся друг с другом, помещаются в одну и ту же группу, процесс их совместного просмотра и управления ими упрощается. Это действительно для объектов, которые имеют одинаковое время удерживания, например, различные переходы MRM для одного и того же компонента. Введите имена групп или вставьте их автоматически. См. Define Components Right-Click Menu (Контекстное меню Define Components) на стр. 54.
IS Name (Название внутреннего стандарта)	Содержит имя дополнительного внутреннего стандарта, которое необходимо использовать для аналита, указанного в строке. Это поле не применимо к собственно внутренним стандартам.
Mass Info (Информация о массе)	Для экспериментов MRM этот столбец озаглавлен **Q1/Q3** и содержит пары по массе для компонента, указанного в строке. Выберите необходимый переход из списка, в котором отображены все доступные переходы для эксперимента. Обычно, столбец с доступными переходами инициализируется автоматически. Для профиля (сканирования) экспериментов этот столбец озаглавлен **Start - Stop** (Начало - остановка) и содержит значение диапазона масс, используемое для расчета XIC (экстрагированная ионная хроматограмма) компонента, указанного в данной строке. Введите диапазон масс с разделением двух масс дефисом. Например, 200-201 или 200-1. Для последнего параметра, диапазон масс составляет 199,5-200,5.

Define Components Right-Click Menu (Контекстное меню Define Components)

Для получения доступа к контекстному меню выберите правой кнопкой мыши страницу **Define Components**. Доступны следующие команды.

Таблица 7-3 Пункты контекстного меню Define Components

Пункт меню	Описание
Clear (Очистить)	Удаление содержимого любых выбранных строк или столбцов. Строки можно выбрать путем нажатия или перетаскивания в области перед номером строки.
Copy (Копировать)	Копирование выбранных строк или столбцов в буфер обмена.

Таблица 7-3 Пункты контекстного меню Define Components (продолжение)

Пункт меню	Описание
Paste (Вставить)	Вставка содержимого буфера обмена.
Find Component by Name (Найти компонент по имени)	Выбор компонента, для которого параметр **Name** совпадает с заданным текстом. Для поиска соответствия не требуется ввод точного текста. Эта опция полезна для того, чтобы выбрать конкретный компонент среди множества. Если в таблице заранее не выбрана какая-либо строка, поиск начнется с первой строки. В противном случае поиск начинается с выделенной строки и возвращается к началу таблицы. Такая опция полезна в том случае, если имеется более одного компонента, поле **Name** которого содержит заданный текст. Если первый поиск не дал нужных результатов, можно провести повторный поиск, оставив первый компонент выбранным, чтобы найти следующее соответствие в таблице.
Insert Row Above (Вставить строку выше)	Вставка одной пустой строки непосредственно над выбранной строкой.
Delete Selected Rows (Удалить выбранные строки)	Удаление выбранной строки из таблицы.
Sum Multiple Ions (Суммировать несколько ионов)	Суммирование хроматограмм для нескольких MRM-переходов во всем диапазоне сканируемых масс. После выбора этой команды в таблицу **Components** добавляются дополнительные столбцы для масс. Любые значения масс, выбранные в данной строке, используются для получения суммированного значения XIC для соответствующего анализируемого вещества или внутреннего стандарта. Рекомендуется всегда выбирать данную опцию.
Groups (Группы)	См. Подменю Groups (Группы) на стр. 98.
Internal Standards (Внутренние стандарты)	См. Подменю Internal Standards (Внутренние стандарты) на стр. 100

Установка параметров интегрирования

Выберите ожидаемое время удерживания и другие параметры обнаружения пика для каждого из компонентов.

В списке слева приводятся записи для каждого компонента, заданные на предыдущей странице мастера. Выберите конкретную строку, чтобы просмотреть соответствующую хроматограмму и текущее интегрирование для репрезентативного образца. Прокрутите список, используя клавиши со стрелками «вверх» и «вниз» или используя колесо прокрутки. В целом, рекомендуется, чтобы все компоненты были проверены на правильность

интегрирования. Однако если имеется много компонентов, используйте команду **Highlight Components with Uncertain RT**, чтобы ограничить количество просматриваемых компонентов.

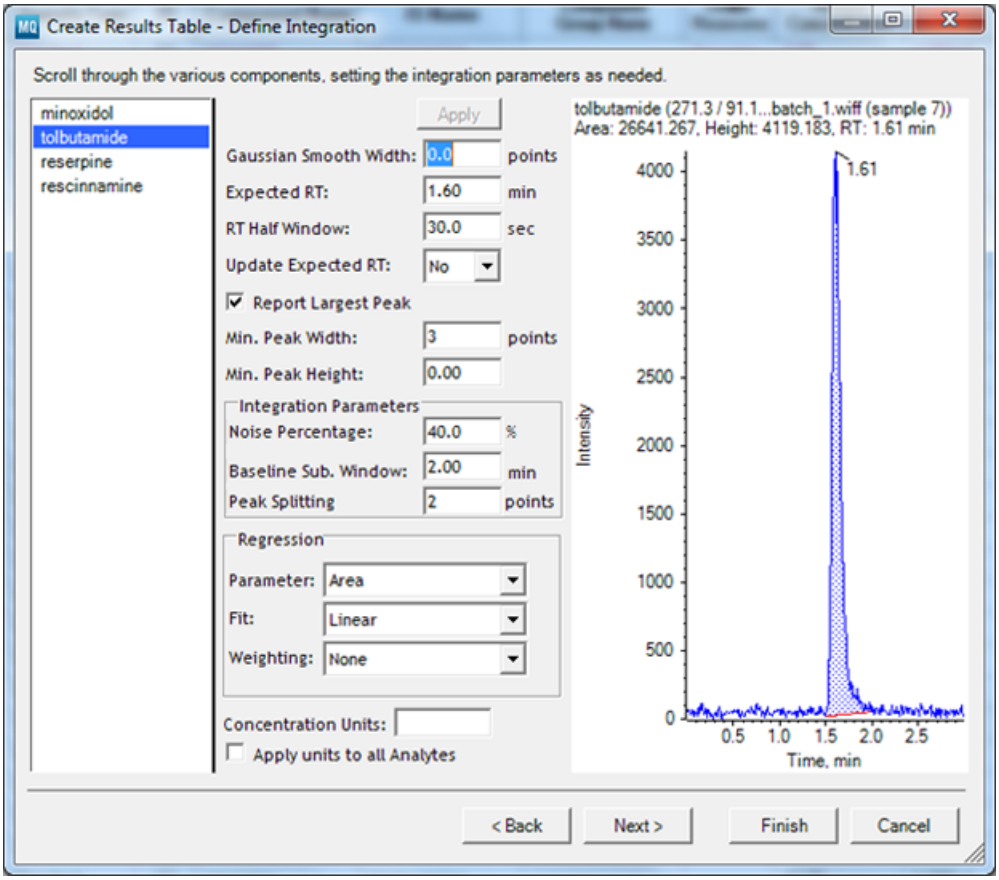
Примечание. Если имеется несколько компонентов, перед запуском мастера убедитесь, что параметры обнаружения пика имеют соответствующие настройки по умолчанию, чтобы избежать настройки параметров для каждого компонента.

Нажмите правой кнопкой мыши на странице, чтобы увидеть доступные команды. См. Контекстное меню Define Integration (Установка параметров интегрирования) на стр. 57.

После создания Results Table измените параметры калибровки для всех или только выбранных компонентов в группе **Regression**. Установите единицы измерения концентрации и параметры регрессии по умолчанию, чтобы избежать необходимости настраивать их каждый раз.

Совет! Увеличьте масштаб графика, растягивая области по оси x или y. Вернитесь к предыдущему виду, используя контекстное меню (**Home Graph Axes**) или двойной щелчок на области оси.

Рисунок 7-8 Страница Create Results Table - Define Integration (Создание таблицы результатов - Установка параметров интегрирования)



Обозначение	Описание
Применение	Применяется для настройки параметров обнаружения пика при необходимости для данного компонента. При создании новой Results Table указанные параметры для данного компонента применяются к этому компоненту для всех образцов при интегрировании данных. См. Параметры алгоритма интегрирования на стр. 139.
Expected RT (Ожидаемое время удерживания)	Первоначально задано как время удерживания для точки на хроматограмме с самой большой интенсивностью. Обычно это требуемый пик. Однако если присутствуют изомеры, может понадобиться корректировка данного значения. Чтобы скорректировать значение, укажите новое значение в поле **Expected RT** и затем нажмите **Apply**. В качестве альтернативы нажмите на график и затем перемещайтесь по изучаемому пику. Постарайтесь не переместить курсор случайно на график и не изменить ожидаемое время удерживания.
Parameter (Параметр)	Выберите параметр **Area** или **Height**.
Fit (Аппроксимация)	Различные типы аппроксимации описаны в Уравнения регрессии на стр. 147
Weighting (Взвешивание)	Различные типы взвешивания описаны в Весовые коэффициенты на стр. 148.
Concentration Units (Единицы измерения концентрации)	Введите единицы измерения концентрации, используемые для анализируемых веществ и любые внутренние стандарты. Если будет выполняться относительный количественный анализ, оставьте это поле пустым. При использовании мастера предполагается, что одни и те же единицы используются для всех компонентов. В противном случае используйте **Quantitation Method Editor**.
Apply units to all Analytes (Применить единицы измерения ко всем анализируемым веществам)	Можно ввести единицы измерения концентрации для отдельных компонентов. Этот флажок устанавливается, чтобы применить ту же единицу измерения ко всем компонентам. Информация должна соответствовать **Concentration Units**.

Контекстное меню Define Integration (Установка параметров интегрирования)

Для открытия контекстного меню нажмите правой кнопкой мыши на странице **Define Integration**. Доступны следующие команды.

Таблица 7-4 Пункты контекстного меню Define Integration (Установка параметров интегрирования)

Пункт меню	Описание
Find Component by Name (Найти компонент по имени)	Эта команда сходна с той, что доступна на странице **Define Components**, за исключением того, что вместо выбора строк в таблице **Components** имеет место выбор отдельных позиций в списке компонентов.
Highlight Components with Uncertain RT (Выделить компоненты с неопределенным временем удерживания)	Эта опция используется для выделения тех компонентов, для которых ожидаемое время удерживания, принятое по умолчанию, (в качестве которого принимается время удерживания пика с максимальной интенсивностью для каждой из хроматограмм) оказывается неверным. Если рассматривается всего несколько компонентов, их следует проверить по отдельности, не используя данную команду. Однако при рассмотрении множества компонентов данную команду можно использовать для визуальной проверки только тех компонентов, для которых на хроматограмме присутствует более одного значимого пика. См. Диалоговое окно Highlight Components (Выделение компонентов) на стр. 103.
Home Graph Axes (Оси исходного графика)	Возвращение масштабированного графика к исходному виду, в котором показаны все данные.

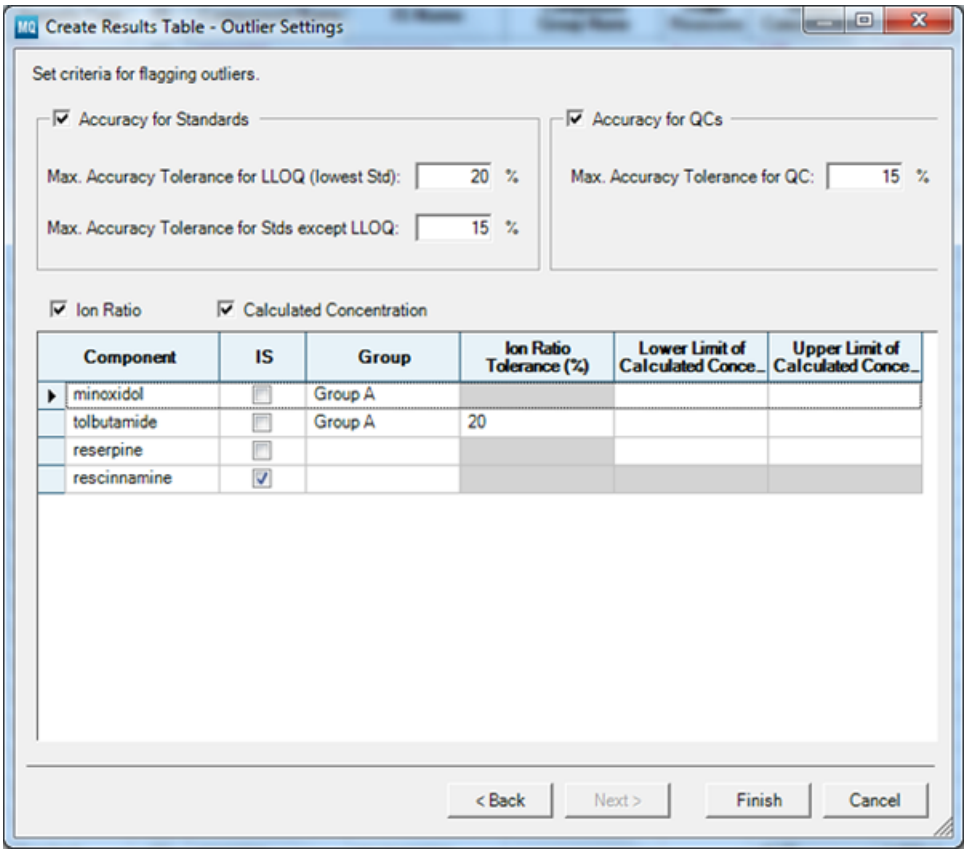
Таблица 7-4 Пункты контекстного меню Define Integration (Установка параметров интегрирования) (продолжение)

Пункт меню	Описание
Overlay Other Components for Group (Наложить хроматограммы других компонентов группы)	Данная команда используется для наложения хроматограмм друг на друга, если различные компоненты были распределены по группам и если ожидается, что компоненты, отнесенные к одной и той же группе, имеют одно и то же ожидаемое время удерживания. Например, если у них выявляются разные MRM-переходы при том, что вещество фактически одно и то же. При выборе данной опции хроматограмма текущего компонента, для которой задаются параметры интегрирования, обрисовывается сплошной синей кривой с указанием результатов интегрирования площади пика. Хроматограммы (но не результаты интегрирования площади пиков) для других компонентов в той же группе накладываются поверх нее с использованием пунктирной линии.
Update Retention Times (Обновить время удерживания)	Используется для сброса ожидаемых значений времени удерживания для ранее созданного метода количественного анализа. Если открыт существующий метод количественного анализа и выбран пункт **Set New Typical Sample**, хроматограммы отображаются в соответствии с новым образцом, но ожидаемые времена удерживания остаются без изменений. Для каждого компонента ожидаемое время удерживания обновляется таким образом, чтобы соответствовать времени удерживания пика с самой большой интенсивностью в окне указанной ширины, центрированного по исходному ожидаемому времени удерживания. См. Диалоговое окно Update Retention Times (Обновление времени удерживания) на стр. 104.

Настройки значений вне диапазона

Можно отмечать флагом выходящие за границы диапазона значения для образцов **Standard** и **QC** образцов, **Ion Ratio** и **Calculated Concentration**. Доступны следующие команды.

Рисунок 7-9 Диалоговое окно Outlier Settings (Настройка значений вне диапазона)



Обозначение	Описание
Accuracy for Standards (Точность стандартов)	Редактирование допустимых пределов для точности образцов **Standard**.
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ% (Макс. допустимые пределы точности для стандартов за исключением НПКО %)	Позволяет изменять допустимые пределы точности для образцов **Standard**, у которых эта величина соответствует лабораторным инструкциям, касающимся обращения со стандартами.
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ% (Макс. допустимые пределы точности для НПКО (стандарт с минимальной концентрацией) %)	Позволяет изменять допустимые пределы точности для образцов **Standard**, если в стандартной лабораторной инструкции для данного образцов **Standard** указано другое значение допустимых пределов точности.

Обозначение	Описание
Accuracy for QCs (Точность контрольных образцов)	Позволяет изменять допустимые пределы точности для образцов **QC**.
Max. Accuracy Tolerance for QC% (Макс. допустимый предел точности для КК %)	Позволяет изменять допустимые пределы точности для образцов **QC**, у которых эта величина соответствует лабораторным инструкциям, касающимся обращения со стандартами.
Ion Ratio (Соотношение ионов)	Данная опция доступна только в том случае, если компоненты распределены по группам. Опция предназначена для использования соотношения ионов, рассчитываемого по площади или по высоте пика. Площадь или высота пика задаются при выборе параметров регрессии при разработке метода количественного анализа.
Calculated Concentration (Расчетная концентрация)	При использовании образцов **Standard** известной концентрации это концентрация, рассчитанная путем обратных вычислений от калибровочной кривой. Уравнения регрессии описывают, каким образом осуществляется регрессия для различных типов регрессии и весовых коэффициентов.
Component (Компонент)	Анализируемые вещества или внутренние стандарты для всех образцов.
IS (Внутренний стандарт)	Выбранный внутренний стандарт. Данная опция доступна только в том случае, если выбран флажок **Ion Ratio**.
Group (Группа)	Компоненты, которые имеют одно и то же время удерживания (т.е. разные переходы для одного и того же вещества), можно группировать. Данная опция доступна только в том случае, если выбран флажок **Ion Ratio**.
Ion Ratio Tolerance (%) (Допустимые пределы соотношения ионов (%))	Можно использовать значение по умолчанию или изменить значение в соответствии с инструкциями, принятыми в данной лаборатории. Данная опция доступна только в том случае, если выбран флажок **Ion Ratio**.

Обозначение	Описание
Lower Limit of Calculated Concentration (Нижний предел расчетной концентрации)	В этом поле указывают нижний предел допустимого диапазона концентрации. Любой образец, для которого **Calculated Concentration** будет ниже этого значения, получает отметку о наличии значения, выходящего за границы диапазона концентрации.
Upper Limit of Calculated Concentration (Верхний предел расчетной концентрации)	В этом поле указывают верхний предел допустимого диапазона концентрации. Любой образец, для которого **Calculated Concentration** будет выше этого значения, получает отметку о наличии значения, выходящего за границы диапазона концентрации.

Для открытия контекстного меню нажмите правой кнопкой мыши на странице **Outlier Settings**.

Таблица 7-5 Пункты контекстного меню Outlier Settings (Настройка значений вне диапазона)

Обозначение	Описание
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration (Применить ко всем анализируемым веществам нижний предел расч. концентрации)	При выборе данной опции ко всем анализируемым веществам применяется нижний предел расчетной концентрации, если все анализируемые вещества имеют одни и те же критерии.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration (Применить ко всем анализируемым веществам верхний предел расч. концентрации)	При выборе данной опции ко всем анализируемым веществам применяется верхний предел расчетной концентрации, если все анализируемые вещества имеют одни и те же критерии.

Столбцы таблицы Results Table

Примечание. Некоторые наиболее важные столбцы с информацией об образце, например **Sample Name**, **Sample ID** и т.д. не должны быть скрыты при изменении пользователями настроек столбцов **Results Table**.

В числовых полях используйте формат 0,00 для неэкспоненциальных чисел и формат 0,00e0 для экспоненциальных чисел. Изменение количества разрядов после десятичного разделителя позволяет менять точность отображаемых чисел. Только точка (.) может быть использована в качестве десятичного разделителя. Разделение числовых разрядов не поддерживается.

Таблица 7-6 Столбцы таблицы Results Table

Обозначение	Описание
Accuracy (Точность)	При использовании образцов **Standard** известной концентрации для образцов **Standard** и **Quality Control** точность определяется следующим образом: 100 % * (Расчетная концентрация) / (Фактическая концентрация) Для других типов образцов значение отмечается как N/A.
Acq. Method Name (Название метода сбора данных)	Название метода сбора данных, используемого для получения образца.
Acquisition Date & Time (Дата и время получения данных)	Дата и время получения образца в формате wiff.
Actual Concentration (Фактическая концентрация)	Для образцов **Standard** и **Quality Control** это ожидаемая известная концентрация.
Area (Площадь)	Обнаруженная площадь пика. Если пик не был обнаружен, то значение отмечается как N/A.
Area / Height (Площадь/высота)	Обнаруженная площадь пика, деленная на высоту. Если пик не был обнаружен, то значение отмечается как N/A.
Area Ratio (Соотношение площадей)	Для аналитов, использующих внутренний стандарт, это отношение **Area** к **IS Area**. Для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
Asymmetry Factor (Фактор асимметрии)	Расстояние от центральной линии пика до заднего наклона, деленное на расстояние от центральной линии пика до переднего наклона, со всеми измерениями, сделанными на уровне 10 % от максимальной высоты пика.
Baseline Delta/Height (Расстояние от базовой линии/ высота)	Абсолютное значение различия высоты базовой линии (в начале и в конце пика) к фактической высоте пика. Значения, превышающие 0,1, указывают, что базовая линия, возможно, была интегрирована неправильно и что пик следует проверить.
Calculated Concentration (Расчетная концентрация)	При использовании образцов **Standard** известной концентрации это концентрация, рассчитанная путем обратных вычислений от калибровочной кривой. Для получения информации о проведении регрессии для различных типов регрессии и взвешивания см. Уравнения регрессии на стр. 147.
Component Comment (Комментарий к компоненту)	Произвольный комментарий, который применяется к аналиту или внутреннему стандарту для всех образцов.

Таблица 7-6 Столбцы таблицы Results Table (продолжение)

Обозначение	Описание
Component Group Name (Имя группы компонента)	Имя группы (если имеется), связанное с аналитом или внутренним стандартом.
Component Index (Индекс компонента)	Указатель анализируемого вещества или внутреннего стандарта в первоначальном методе количественного анализа. Данный параметр может пригодиться при сортировке таблицы по данному полю.
Component Name (Название компонента)	Имя аналита или внутреннего стандарта.
Conc. Units (Единицы измерения концентрации)	Единицы измерения концентрации.
Concentration Ratio (Соотношение концентраций)	Для аналитов, использующих внутренний стандарт, это отношение **Actual Concentration** к **IS Actual Concentration**. Для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
Corrected Area (Скорректированная площадь)	Обнаруженная площадь пика. Если пик не был обнаружен, то значение отмечается как N/A.
Corrected Area / Height (Скорректированная площадь/высота)	Обнаруженная площадь пика, деленная на высоту. Если пик не был обнаружен, то значение отмечается как N/A.
Corrected Height (Скорректированная высота)	Обнаруженная высота пика. Если пик не был обнаружен, то значение отмечается как N/A.
Dilution Factor (Коэффициент разбавления)	Коэффициент, по которому разбавляется образец. Данный коэффициент используется при расчете калибровочной кривой. См. Уравнения регрессии на стр. 147.
End Time (Конечное время)	Конечное время удерживания обнаруженного пика в минутах.
End Time at 10% (Конечное время на уровне 10 %)	Время в минутах по задней стороне пика, где интенсивность составляет 10 % от высоты пика.
End Time at 5% (Конечное время на уровне 10 %)	Время в минутах по задней стороне пика, где интенсивность составляет 5% от высоты пика.

Таблица 7-6 Столбцы таблицы Results Table (продолжение)

Обозначение	Описание
Expected Ion Ratio (Ожидаемое соотношение ионов)	Ожидаемое соотношение ионов для всех типов образцов.
Expected RT (Ожидаемое время удерживания)	Первоначально ожидаемое время удерживания на основе метода количественного анализа, в минутах.
Height (Высота)	Обнаруженная высота пика. Если пик не был обнаружен, то значение отмечается как N/A.
Height Ratio (Соотношение высот)	Для анализируемых веществ, использующих внутренний стандарт, это отношение **Height** к **IS Height**. Для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта значение определяется как N/A.
Index (Индекс)	Это указатель строки в первоначальном, несортированном порядке. Если сортировка таблицы произведена по другому столбцу, можно осуществить возврат к первоначальному порядку с помощью сортировки по данному столбцу.
Injection Volume (Вводимый объем)	Объем образца, вводимого автодозатором, в мл.
Integration Type (Тип интегрирования)	• Параметр **Baseline** указывает, что одиночный пик был интегрирован обычным способом. • Параметр **Valley** указывает, что было два смежных пика и что сигнал не возвращался к значению базовой линии между ними. • Параметр **Manual** указывает, что пик был интегрирован вручную. • Параметр **N/A** указывает, что ни одного пика не было детектировано.

Таблица 7-6 Столбцы таблицы Results Table (продолжение)

Обозначение	Описание

Ion Ratio (Соотношение ионов)	• **Ion Ratio** определяется, когда не менее двух переходов MRM от одного аналита были собраны в группу.
	• Первый компонент подгруппы будет использован в качестве ионов-квантификаторов (**Quantifier**). Остальные компоненты подгруппы будут использованы в качестве ионов-квалификаторов (**Qualifier**).
	• Соотношение ионов = (Площадь пика или высота квалификатора) / (Площадь пика или высота квантификатора)
	• Подгруппы
	  • Все аналиты группы составляют подгруппу **Analyte**.
	  • Все внутренние стандарты группы составляют подгруппу **IS**.
	• Если компонент не входит в какую-либо группу, **Ion Ratio** определяется как N/A.
	• Если пик не обнаружен, **Ion Ratio** определяется как N/A.
	• Применимо ко всем компонентам в подгруппах **Analyte** и **IS**, для **Quantifier**, для **Qualifier** отдельно.
	• Если интеграция изменяется для **Quantifier** или для пиков **Qualifier**, **Ion Ratio** рассчитывается повторно.
	• Может быть рассчитано либо для площади пика, либо для высоты пика. Если для первого компонента (Индекс компонента - 1) в **Results Table** используется параметр **Area** в регрессионной части .qmethod, площадь пика используется для расчета **Ion Ratio** для всей **Results Table**. Если при регрессии первого компонента используется параметр **Height**, для расчета используется высота пика.

IS (Внутренний стандарт)	Установленный флажок указывает, что компонент строки является внутренним стандартом, а не аналитом.
IS Actual Concentration (Фактическая концентрация внутреннего стандарта)	Фактическая концентрация для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Area (Площадь пика внутреннего стандарта)	Площадь пика для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.

Таблица 7-6 Столбцы таблицы Results Table (продолжение)

Обозначение	Описание
IS Area / Height (Площадь/высота пика внутреннего стандарта)	Отношение **Area** к **Height** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Baseline Delta / Height (Расстояние от базовой линии/ высота пика внутреннего стандарта)	**Baseline Delta / Height** пика внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Comment (Комментарий к внутреннему стандарту)	Произвольный комментарий для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Corrected Area (Скорректированная площадь пика внутреннего стандарта)	Скорректированная площадь для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Corrected Area / Height (Скорректированная площадь/высота пика внутреннего стандарта)	**Corrected Area** / **Corrected Height** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Corrected Height (Скорректированная высота пика внутреннего стандарта)	**Corrected Height** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS End Time (Конечное время выхода внутреннего стандарта)	**End Time** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Expected RT (Ожидаемое время удерживания внутреннего стандарта)	**Expected RT** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.

Таблица 7-6 Столбцы таблицы Results Table (продолжение)

Обозначение	Описание
IS Height (Высота пика внутреннего стандарта)	**Height** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Integration Type (Тип интегрирования пика внутреннего стандарта)	**Integration Type** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Mass Info (Информация о массе внутреннего стандарта)	**Mass Info** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Name (Имя внутреннего стандарта)	**Component Name** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Peak Comment (Комментарий к пику внутреннего стандарта)	**Peak Comment** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Quality (Качество внутреннего стандарта)	Качество для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Region Height (Высота области пика внутреннего стандарта)	Метрический показатель качества для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Retention Time (Время удерживания внутреннего стандарта)	**Retention Time** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Signal / Noise (Соотношение сигнал/шум для внутреннего стандарта)	Соотношение **Signal / Noise** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Start Time (Время начала выхода внутреннего стандарта)	**Start Time** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.

Таблица 7-6 Столбцы таблицы Results Table (продолжение)

Обозначение	Описание
IS Total Width (Общая ширина пика внутреннего стандарта)	**Total Width** для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
IS Width at 50% (Ширина пика внутреннего стандарта на уровне 50 %)	Ширина пика на высоте 50 % для внутреннего стандарта, связанного с текущим аналитом; для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта данное значение отмечается как N/A.
Mass Info (Информация о массе)	Информация о массе, связанная с данным компонентом. Для экспериментов MRM — **Q1/Q3**, для профиля (полное сканирование) экспериментов – **Start - Stop**.
Modified (Изменено)	Галочка в данном столбце указывает, что параметры обнаружения пика были изменены с помощью панели **Peak Review** с их первоначальных значений, указанных в методе количественного анализа.
Operator Name (Имя оператора)	Имя оператора, который получил образец.
Original Filename (Исходное имя файла)	Имя файла wiff.

Таблица 7-6 Столбцы таблицы Results Table (продолжение)

Обозначение	Описание
Outlier Reasons (Причины появления значений вне диапазона)	Если в методе количественного анализа указаны критерии выхода значений за границы допустимого диапазона, в данном столбце указывается, по какому критерию обнаружен выход за установленные для данного компонента пределы диапазона. Столбец **Outlier Reasons** связан только с настройками **Outlier Settings** в методе количественного анализа, и это заранее заданный столбец в **Results Table**. Причина появления значений вне диапазона отмечается флажком: • **Accuracy** • **Concentration** • **Ion Ratio** Если обнаружен пик для квантификатора, а не для квалификатора, соотношение ионов для обоих компонентов будет помечено флагом. Если обнаружен пик для квалификатора, а не для квантификатора, соотношение ионов для обоих компонентов будет помечено флагом. Если для данных ионов пики не обнаружены, то ни один из компонентов не будет помечен флагом. • **Cannot calculate the Expected Ion Ratio**
Peak Comment (Комментарий к пику)	Произвольный комментарий к строке.
Plate Number (Номер пластины)	Номер пластины автодозатора, как изначально указано в редакторе **Batch Editor**, используемом для получения данных.
Points Across Baseline (Точки за базовой линией)	Количество сканирований от начала до окончания пика.
Points Across Half Height (Точки за полувысотой)	Количество сканирований по пику на высоте приблизительно 50 %.
Quality (Качество)	Данный метрический показатель предполагает определение качества интегрированного пика. • Значения, близкие к нулю указывают, что пик был плохо интегрирован (или что фактический пик отсутствует). • Значения, близкие к 1,0 указывают, что пик интегрирован хорошо и что он не нуждается в проверке.

Таблица 7-6 Столбцы таблицы Results Table (продолжение)

Обозначение	Описание
Rack Number (Номер стойки)	Номер стойки автодозатора в соответствии с номером, первоначально указанным в редакторе **Batch Editor**, используемом для получения данных.
Region Height (Высота области)	Высота самого большого пика около фактически обнаруженного пика. Данную команду удобно использовать вместе с полем **Quality**. Пики с низким качеством, которые также имеют значительную **Region Height**, нуждаются в проверке. Если **Region Height** мала, тогда значимый пик отсутствует.
Relative RT (Относительное время удерживания)	Для анализируемых веществ, использующих внутренний стандарт, это отношение **Retention Time** к **IS Retention Time**. Для внутренних стандартов или для аналитов без внутреннего стандарта значение определяется как N/A.
Retention Time (Время удерживания)	Фактическое время удерживания обнаруженного пика, в минутах.
Sample Comments (Комментарий к образцу)	Произвольный комментарий к образцу.
Sample ID (Идентификатор образца)	Произвольный идентификатор для образца. Идентификатор начинается со значения, изначально указанного в редакторе **Batch Editor**, используемом для получения данных.
Sample Index (Индекс образца)	Индекс текущего образца.
Sample Name (Имя образца)	Произвольное имя образца. Идентификатор начинается со значения, изначально указанного в редакторе **Batch Editor**, используемом для получения данных.
Sample Type (Тип образца)	Тип образца. См. Фильтр по типу образца на стр. 48.
Signal / Noise (Соотношение сигнал/шум)	Отношение высоты обнаруженного пика к шуму, присутствующему на хроматограмме. При использовании алгоритма интегрирования SignalFinder оценка шума производится с помощью рассчитанного относительного шума и базовой линии в положении вершины пика. Алгоритм интегрирования MQ4 использует подобный подход, за исключением того, что для оценки базовой линии используется вся хроматограмма. См. Вычисление относительного шума и отношения «сигнал-шум» на стр. 173.

Таблица 7-6 Столбцы таблицы Results Table (продолжение)

Обозначение	Описание
Slope of Baseline (Наклон базовой линии)	Показывает смещение базовой линии.
Start Time (Время начала)	Начальное время удерживания обнаруженного пика, в минутах.
Start Time at 10% (Время начала на уровне 10 %)	Время в минутах по переднему краю пика, где интенсивность составляет 10 % от высоты пика.
Start Time at 5% (Время начала на уровне 10 %)	Время в минутах по переднему краю пика, где интенсивность составляет 5% от высоты пика.
Tailing Factor (Коэффициент размывания)	Расстояние от центральной линии пика до заднего наклона, деленное на расстояние от центральной линии пика до переднего наклона, со всеми измерениями, сделанными на уровне 5 % от максимальной высоты пика.
Total Width (Общая ширина)	Ширина хроматографического пика в минутах на уровне базовой линии.
Used (Используется)	Для образцов **Standard** данный флажок указывает, что соответствующий аналит используется в данный момент для построения калибровочной кривой. Для образцов **Quality Control** такой флажок указывает, что аналит используется для расчета статистический данных **QC**. Для других образцов данное поле заполняется только в информационных целях.
Vial Number (Номер флакона)	Номер флакона автодозатора в соответствии с номером, первоначально указанным в редакторе **Batch Editor**, используемом для получения данных.
Width at 10% (Ширина на уровне 10 %)	Ширина пика, измеренная на уровне 10 % от высоты пика.
Width at 5% (Ширина на уровне 10 %)	Ширина пика, измеренная на уровне 5% от высоты пика.
Width at 50% (Ширина на уровне 10 %)	Ширина хроматографического пика в минутах, измеренная на уровне половины его максимальной интенсивности.

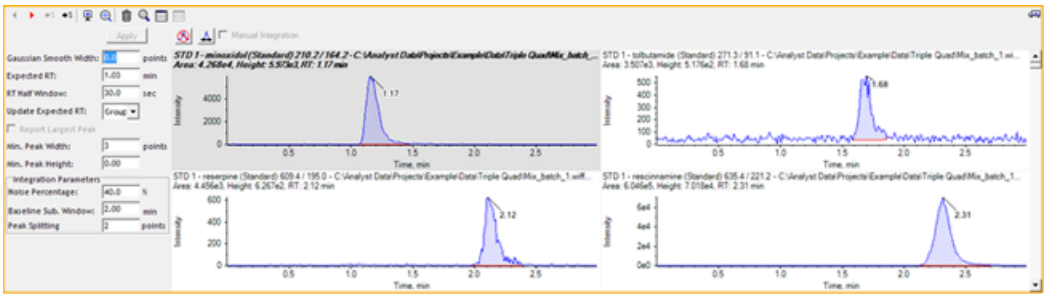
Просмотр пиков 8

Используйте панель **Peak Review**, чтобы визуально проверить исходные хроматограммы, чтобы можно было определить качество процесса обнаружения пика. Когда **Results Table** активна, нажмите на значок **Peak Review** на панели инструментов Results Table, чтобы открыть панель Peak Review Peak Review. Эксперты должны проверять результаты количественного анализа согласно критериям интегрирования пика и приемлемости данных на основании собственных стандартных операционных процедур (СОП).

Группировка чисел не поддерживается. Не следует группировать числа ни в каком-либо текстовом поле (например, параметры интегрирования), ни в таблице (например, в **Results Table**).

На развернутой панели **Peak Review** указано подтверждение **Ion Ratio** на наложенной хроматограмме. Можно также усилить одиночную хроматограмму.

Рисунок 8-1 Панель Peak Review (Просмотр пиков)



Используйте панель **Peak Review** для коррекции хроматограмм, которые не были интегрированы надлежащим образом ни с помощью настроенных параметров обнаружения пика, ни с помощью ручного выбора начальных и конечных точек интегрирования. После того, как хроматограмма интегрирована, **Results Table** автоматически обновляется с использованием новой площади пика и других параметров.

Методы количественного анализа включают критерии, используемые для количественного анализа пиков, выбранных для интегрирования. Эксперты должны проверять результаты количественного анализа согласно критериям интегрирования пика и приемлемости данных на основании собственных стандартных операционных процедур (СОП).

Ручное интегрирование

Установке этого флажка после ручного интегрирования пика на конкретной хроматограмме указывает, что хроматограмма интегрирована вручную. При этом если снять этот флажок, ручное интегрирование для пика будет отменено и он автоматически будет интегрирован еще раз с использованием параметров, указанных в описании метода.

Отличие между этим флажком и кнопкой **Enable Manual Integration Mode** заключается в том, что этот флажок отражает статус текущего пика, тогда как кнопка указывает операцию при перемещении по хроматограмме.

Примечание. После включения режима ручного интегрирования он остается включенным для всех областей до его отключения.

Применить

Если скорректировать какие-либо параметры обнаружения пика, активируется кнопка **Apply**. Нажмите кнопку, чтобы применить измененные параметры обнаружения пика к активной хроматограмме.

За исключением ручного режима интегрирования, перемещение по конкретному пику в хроматограмме эквивалентно изменению значения **Expected RT** и последующему нажатию кнопки **Apply**.

Примечание. Если изменить параметры обнаружения пика и затем активировать другую хроматограмму без нажатия кнопки **Apply**, параметры не применяются, и изменения не сохраняются.

Советы по просмотру пиков

- Проведите сортировку **Results Table** в конкретном столбце и просмотрите только те хроматограммы, которые сортируются к верху или к низу таблицы.
- Панель **Peak Review** всегда синхронизируется с соответствующей **Results Table** и показывает хроматограммы для одинаковых пиков в том же порядке, как и в **Results Table**. Любые изменения (в частности, сортировка строк, фильтрация типов образцов или выбор каких-либо компонентов), которые вносятся в **Results Table**, автоматически отражается на панели **Peak Review**.
- Выберите количество хроматограмм для одновременного просмотра.
- Используйте полосу прокрутки справа от панели для прокрутки доступных хроматограмм. Когда панель **Peak Review** активна, используйте клавиши со стрелками «Вверх» и «Вниз» на клавиатуре или колесо прокрутки для перемещения по хроматограммам.
- Единовременно одна конкретная хроматограмма считается активной и указывается по названию, выделенному жирным шрифтом. Активируйте конкретную хроматограмму, нажав в любом месте в пределах данной хроматограммы.
- Когда хроматограмма станет активной, параметры интегрирования, изображенные слева от панели, изменятся в соответствии с новой активной хроматограммой. Если настроить параметры интегрирования пиков и затем нажать **Apply**, это повлияет на текущую активную хроматограмму.

- В **Results Table** выберите строку, нажав в серой области слева от первого столбца, чтобы показать соответствующий пик на панели **Peak Review**. Если на панели **Peak Review** прокрутить до конкретной хроматограммы, в **Results Table** будет выделена соответствующая строка и затем прокручена для просмотра.
- Если перемещаться на хроматограмме по какому-то пику, параметр интегрирования **Expected RT** будет обновляться в соответствии с фактическим временем удерживания пика. Затем новое время удерживания будет применено автоматически, и пик вновь будет интегрирован с обновлением **Results Table**.
- Если просматривать пики в режиме ручного интегрирования, при перемещении по пику будет выполняться его ручное интегрирование.
- Процесс просмотра пиков можно ускорить путем кэширования ранее рассчитанных хроматограмм. См. Меню Edit (Редактирование) на стр. 18.

Контекстное меню Peak Review (Просмотр пиков)

Эти функции влияют на параметры интегрирования, которые отображаются слева от хроматограмм. Для открытия контекстного меню нажмите правой кнопкой мыши на панели **Peak Review**. Доступны следующие команды.

Таблица 8-1 Параметры панели Peak Review (Просмотр пиков)

Задача	Команды
Изменить вид панели **Peak Review**.	Диалоговое окно Peak Review Options (Настройки просмотра пиков): вкладка Appearance (Вид) на стр. 76 или Диалоговое окно Peak Review Options (Настройки просмотра пиков): вкладка Zooming (Масштабирование) на стр. 78.
Настроить формат заголовка в окне Peak Review.	Set Peak Review Title Format (Установка формата заголовка в окне просмотра пиков) на стр. 81.
Показать параметры с помощью описательных названий для индивидуальных параметров.	По умолчанию всегда выбран пункт **Show Parameters-Normal Width**.
Копировать параметры.	Копирование параметров на стр. 81.
Вставить параметры.	Вставка параметров на стр. 82.
Пометить пик как не найденный.	Set Peak to 'Not Found' (Присвоить пику статус «не найден») на стр. 82.
Использовать пик.	Использование пика на стр. 82.

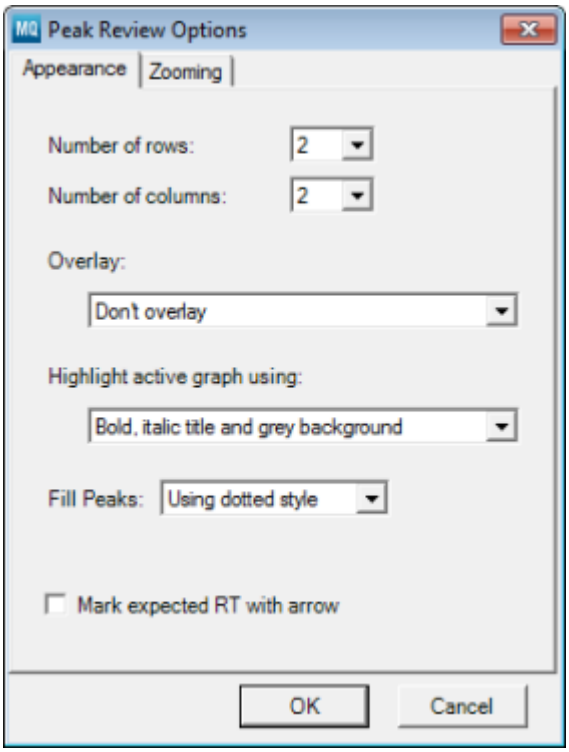
Таблица 8-1 Параметры панели Peak Review (Просмотр пиков) (продолжение)

Задача	Команды
Обновить метод количественного анализа для компонента.	Изменение метода количественного анализа компонента на стр. 82.
Обновить метод количественного анализа для группы.	Изменение метода количественного анализа для группы на стр. 83.
Применить параметры интегрирования к образцу в пределах группы.	Применение параметров интегрирования к образцу в группе на стр. 83.
Вернуть пик к исходному методу.	Возврат пика к исходному методу на стр. 83.
Вернуть все пики для компонента.	Восстановление всех пиков компонента на стр. 83.

Диалоговое окно Peak Review Options (Настройки просмотра пиков): вкладка Appearance (Вид)

Нажмите правой кнопкой мыши на панели **Peak Review**, чтобы выбрать параметры настройки, влияющие на внешний вид панели **Peak Review**. Рекомендуется, чтобы было задано не более четырех строк и четырех столбцов.

Рисунок 8-2 Диалоговое окно Peak Review Option (Настройки просмотра пиков): вкладка Appearance (Вид)



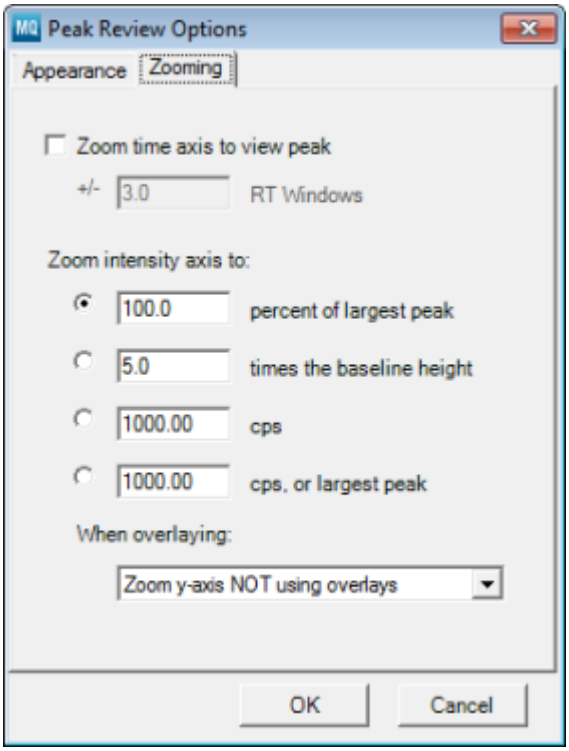
Обозначение	Описание
Number of rows and Number of columns (Количество строк и столбцов)	Определяет количество одновременно отображающихся хроматограмм. Кроме случаев, когда хроматограммы уже зарегистрированы, для прокрутки страниц потребуется больше времени, если отображается несколько хроматограмм. См. Меню Edit (Редактирование) на стр. 18.
Overlay (Наложение)	Данная команда используется для того, чтобы определить, необходимо ли накладывать другие хроматограммы на основную хроматограмму в каждой из подобластей. • **Don't Overlay** (Не применять наложение): наложения хроматограмм не выполняется. • **All components for group** (Все компоненты группы): выполняется наложение всех хроматограмм компонентов, относящихся к группе основного компонента (для текущего образца). • **Analytes and IS's separately for group** (Аналиты и внутренние стандарты отображать отдельно для группы): аналогично предыдущей функции, за исключением того, что не выполняется наложение всех компонентов одной и той же группы — аналиты и внутренние стандарты отображаются отдельно. • **Internal Standard with Analyte**: (Внутренний стандарт с аналитом): применимо для аналитов, наложение хроматограммы внутреннего стандарта, используемого аналитом (хроматограммы внутреннего стандарта не имеют других наложений). • **Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines** (Квалификатор и квантификатор с линией соотношения ионов): отображает линии соотношения ионов. Выберите данную опцию, чтобы наглядно увидеть подтверждение соотношения ионов в **Results Table**. Можно наглядно увидеть подтверждение соотношения ионов, когда имеются группы, определенные в методе количественного анализа. При этом **Ion Ratio Lines** являются только индикатором подтверждения, а не окончательным результатом. Линии отображаются на хроматограмме в виде высоты пика, но расчет линий осуществляется на основании области или высоты пика в зависимости настроек, определенных в методе количественного анализа. При наличии несоответствия между значениями высоты и площади в **Results Table** нужно подтвердить значение **Ion Ratio**, выходящее за границы диапазона.

Обозначение	Описание
Highlight active graph using (Выделить активный график следующим образом):	Указывает, как должна отображаться хроматограмма, активная в данный момент. Установить использование заголовка, выделенного жирным курсивным шрифтом, и серый фон.
Fill peaks (Показать площадь пика)	Указывает, как должна отображаться интегрированная площадь пиков. Варианты выбора: • Use a dotted style (Использовать пунктирную линию), как на снимках экрана в данном документе. • Use a solid style (Сплошное изображение). • Use no fill (Без заполнения). Во всех случаях также отображается (в красном цвете) базовая линия для пика. При использовании третьей опции отображается только базовая линия, а пик не заполняется.
Mark expected RT with arrow (Отметить ожидаемое время удерживания стрелкой)	Указывает **Expected Retention Time** синей стрелкой, отображаемой под осью времени. Это может пригодиться при определении того, находится ли интегрированный пик вблизи ожидаемого времени удерживания.

Диалоговое окно Peak Review Options (Настройки просмотра пиков): вкладка Zooming (Масштабирование)

Нажмите правой кнопкой мыши на панели **Peak Review**, чтобы выбрать параметры настройки, влияющие на внешний вид панели **Peak Review**. Настройки **Zoom intensity axis to** используются для автоматической настройки оси у хроматограмм.

Рисунок 8-3 Диалоговое окно Peak Review Options (Настройки просмотра пиков): вкладка Zooming (Масштабирование)



Обозначение	Описание
Zoom time axis to view peak (Установить масштаб по оси времени для просмотра пика)	При выборе данной функции ось x хроматограмм автоматически настраивается таким образом, что становится видна только часть хроматограммы. Эту функцию удобно использовать для длительных процедур ЖХ, чтобы изучаемая область была видна более отчетливо. Ширина окна выражается в виде множителя параметра интегрирования RT Window. Общая ширина масштабированной области будет в два раза больше, чем произведение указанного множителя на параметр **RT Window**.
Zoom intensity axis to percent of largest peak (Установить масштаб по оси интенсивности по проценту от наибольшего пика)	Используется для автоматической настройки оси Y хроматограмм. Используется для масштабирования по оси y до указанного процента от наибольшего пика в пределах видимого диапазона хроматограммы по оси x. Это будет меньше, чем общая продолжительность процедуры ЖХ, если для просмотра пика используется функция масштабирования по оси времени.

Обозначение	Описание
Zoom intensity axis to times the baseline height (Установить масштаб по оси интенсивности кратно высоте базовой линии)	Используется для автоматической настройки оси Y хроматограмм. Используется, чтобы сосредоточить внимание непосредственно на области базовой линии.
Zoom intensity axis to cps (Установить масштаб по оси интенсивности по значению имп./с)	Используется для изменения масштаба оси Y непосредственно до указанного значения.
Zoom intensity axis to cps, or largest peak (Установить масштаб по оси интенсивности по значению имп./с или наибольшего пика)	Используется для масштабирования оси Y до наименьшего из указанных значений или до наибольшего пика.
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays (При наложении задавать масштаб по оси y без использования наложений)	Позволяет сохранить настройки масштаба по оси интенсивности в раздел, используя только основной набор данных. Эта настройка может обусловить лишь частичную видимость наложений, если они более интенсивны, чем основная группа данных.
When overlaying Zoom y-axis using overlays (При наложении задавать масштаб по оси y с использованием наложений)	Используется основной набор данных и все наложения, а также наибольшее общее значение y. При использовании этой функции наложения всегда остаются видимыми.
When overlaying Use a percentage y-axis (При наложении использовать значения оси Y в процентах)	Используется для масштабирования основного набора данных и наложений отдельно, с помощью процентного масштабирования. При этом для каждой кривой используется вся доступная высота. Однако относительную высоту пика невозможно сравнить визуально напрямую.

Совет! Дважды щелкните на оси Y, чтобы изменить масштаб оси до наиболее интенсивного пика в пределах всей группы данных.

При выборе данного параметра хроматограмма на участке просматриваемого в настоящий момент пика обрисовывается сплошной синей линией с указанием результатов

интегрирования площади пика. Хроматограммы (но не интегрированные площади пиков) для других компонентов (для того же образца) накладываются поверх нее с использованием пунктирной линии.

Если наложения на графике отображаются подобным способом, дважды щелкните в любом месте в области заголовка, чтобы переключиться между отображением заголовков для всех хроматограмм или только для активной хроматограммы.

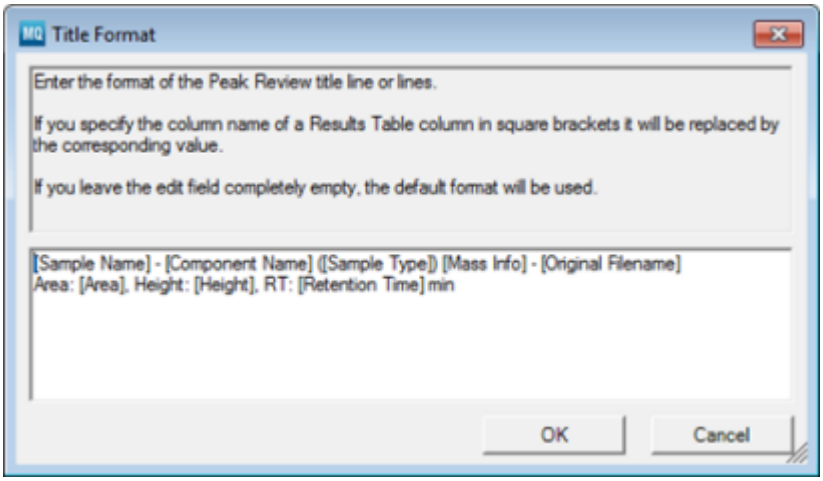
Совет! Дважды нажмите на ось X, чтобы вернуть график к исходному виду, когда видны все данные. Увеличьте масштаб путем перемещения по оси, чтобы выбрать диапазон времени.

Set Peak Review Title Format (Установка формата заголовка в окне просмотра пиков)

Используйте диалоговое окно, чтобы изменить информацию, которая появляется в заголовке графика для каждой из хроматограмм. Если ввести имя столбца в **Results Table** в квадратных скобках, оно заменится значением из поля, относящегося к текущему образцу и компоненту. Можно также ввести любой дополнительный текст, который останется в неизменном виде. Рекомендуется включать в заголовок окна просмотра пиков имя образца [Sample Name].

- Нажмите правой кнопкой мыши на панели **Peak Review** и выберите пункт **Set Peak Review Title Format**.

Рисунок 8-4 Диалоговое окно Title Format (Формат заголовка)



Копирование параметров

Для получения доступа к данной команде нажмите правой кнопкой мыши на панели **Peak Review**. Данная команда используется в сочетании с командой **Paste Parameters** для копирования параметров обнаружения пиков с одной хроматограммы на другую. Эту

команду можно использовать, если нужно внести одинаковое изменение в параметры нескольких хроматограмм.

1. На графике с открытой активной хроматограммой нажмите правую кнопку мыши и выберите пункт **Copy Parameters**.
2. С помощью команды **Update Quantitation Method for Component** можно изменить все хроматограммы компонента.

Вставка параметров

1. На графике с открытой активной хроматограммой нажмите правую кнопку мыши и выберите пункт **Copy Parameters**.
2. Нажмите правой кнопкой мыши на другой хроматограмме и выберите пункт **Paste Parameters**.

   Предварительно скопированные параметры будут применены к новой хроматограмме.

Set Peak to 'Not Found' (Присвоить пику статус «не найден»)

- На графике с открытой активной хроматограммой нажмите правую кнопку мыши и выберите пункт **Set Peak to 'Not Found'**, чтобы удалить из выбранной хроматограммы результат интегрирования.

Использование пика

- На графике с открытой активной хроматограммой нажмите правую кнопку мыши и выберите пункт **Use Peak**, чтобы включить или исключить активный пик из калибровочной кривой.

Изменение метода количественного анализа компонента

После настройки параметров обнаружения пиков для конкретной хроматограммы с помощью данной функции к компоненту можно применять параметры из копии метода количественного анализа, сохраненной с Results Table.

- Настройте параметры обнаружения пиков, нажмите правую кнопку мыши и выберите пункт **Update Quantitation Method for Component**.

  Для всех образцов, относящихся к конкретному компоненту, автоматически будут использоваться новые параметры, а панель **Peak Review** и **Results Table** будут обновлены. Если какие-либо пики были интегрированы вручную, пользователя спросят,

необходимо ли применить повторное интегрирование ко всем пикам или только к тем, которые не были интегрированы вручную.

Изменение метода количественного анализа для группы

Эта операция аналогична команде **Update Quantitation Method for Component**, за исключением того, что интегрирование применяется ко всем компонентам из той же группы, что и компонент на активной в данный момент хроматограмме. Если группам назначены различные компоненты и предполагается, что компоненты, назначенные каждой конкретной группе, имеют одинаковое время удерживания, то с помощью данной функции можно сбросить параметры сразу для всех компонентов группы, включая предполагаемое время удерживания. Эта функция бесполезна, если у компонентов в группах разное время удерживания.

- Настройте параметры обнаружения пиков, нажмите правую кнопку мыши и выберите пункт **Update Quantitation Method for Group**.

Применение параметров интегрирования к образцу в группе

После настройки параметров обнаружения пика для конкретной хроматограммы с помощью данной функции к хроматограмме можно применять исходные параметры из копии метода количественного анализа, сохраненной с Results Table.

- После настройки параметров обнаружения пика для конкретной хроматограммы нажмите правую кнопку мыши и выберите пункт **Apply Integration Parameters to Sample Within Group**.

Возврат пика к исходному методу

После настройки параметров обнаружения пика для конкретной хроматограммы с помощью данной функции к хроматограмме можно применять исходные параметры из копии метода количественного анализа, сохраненной с **Results Table**.

- Выберите правой кнопкой мыши и затем зажмите **Revert Peak to Original Method**.

Восстановление всех пиков компонента

После настройки параметров обнаружения пиков для некоторых хроматограмм с помощью данной функции можно применить исходные параметры из копии метода количественного анализа, сохраненной с **Results Table**, ко всем хроматограммам того же компонента, к которому относится активная хроматограмма. Если какие-либо пики были интегрированы вручную, пользователя спросят, необходимо ли применить повторное интегрирование ко всем пикам или только к тем, которые не были интегрированы вручную.

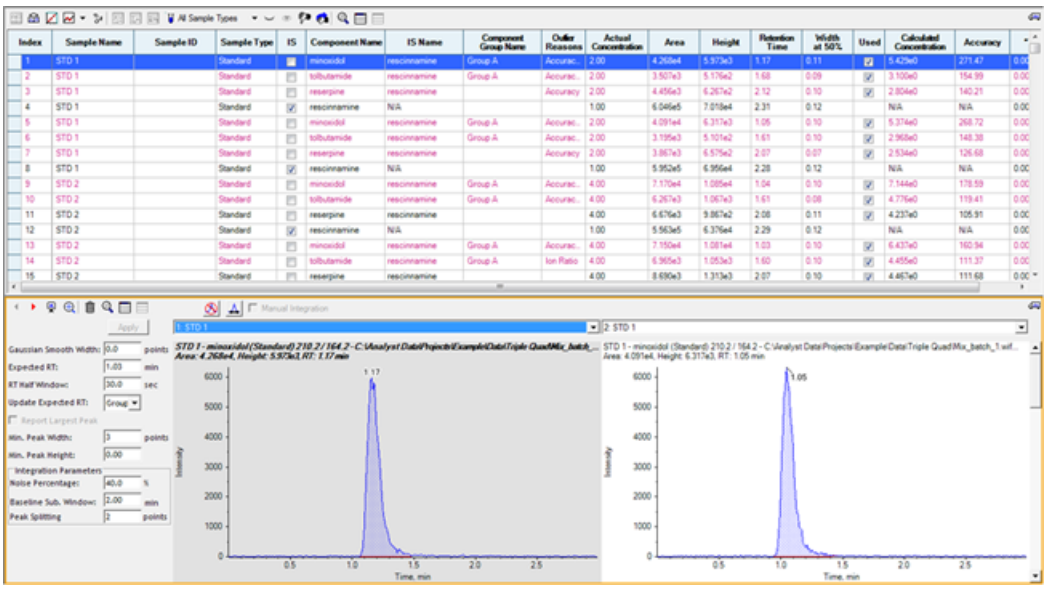
- Нажмите правую кнопку мыши и выберите пункт **Revert All Peaks for Component**.

Side-by-side Sample Review (Одновременный просмотр образцов) 9

Используйте функцию **Side-by-side Sample Review**, чтобы отобразить на экране конкретные целевые соединения. Для сравнения пиков разных образцов можно выбрать до шести образцов. Эксперты должны проверять результаты количественного анализа согласно критериям интегрирования пика и приемлемости данных на основании собственных стандартных операционных процедур (СОП).

Когда **Results Table** активна, нажмите на значок **Side by Side Sample Review** на панели инструментов **Results Table**, чтобы открыть окно **Side by Side Sample Review**.

Рисунок 9-1 Окно Side-by-side Sample Review (Одновременный просмотр образцов)



Методы количественного анализа включают критерии, используемые для количественного анализа пиков, выбранных для интегрирования. Эксперты должны проверять результаты количественного анализа согласно критериям интегрирования пика и приемлемости данных на основании собственных стандартных операционных процедур (СОП).

Одновременный просмотр образцов

1. Откройте Results Table.
2. Нажмите на значок **Side by Side Sample Review**.
3. В области **Side by Side Sample Review** выберите образец из списка.

   Появятся параметры интегрирования.

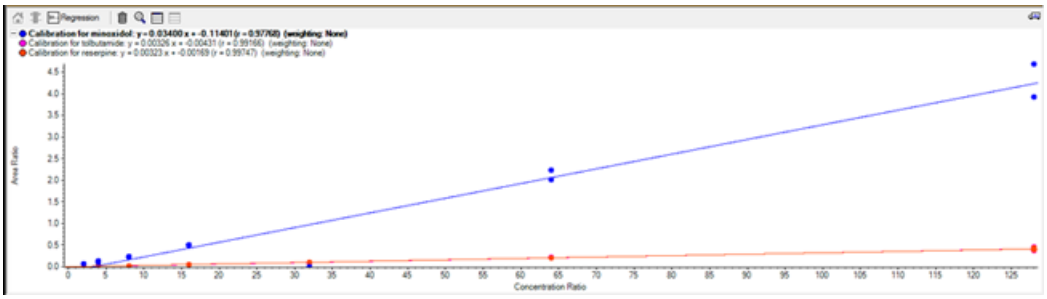
Совет! Нажмите правой кнопкой мыши на панели **Side by Side Sample Review**, затем выберите пункт **Options**, чтобы изменить количество строк или столбцов в окне параллельного просмотра.

4. Выберите другой образец из другого списка.

Панель Calibration (Калибровка) 10

Панель **Calibration** используется для визуального просмотра кривой регрессии для каждого анализируемого вещества при использовании образцов **Standard** известной концентрации. Данная панель не применяется, если пользователь выполняет относительный количественный анализ и не имеет образцов **Standard**. Когда **Results Table** активна, нажмите на панели инструментов **Show Calibration**.

Рисунок 10-1 Панель Calibration (Калибровка)

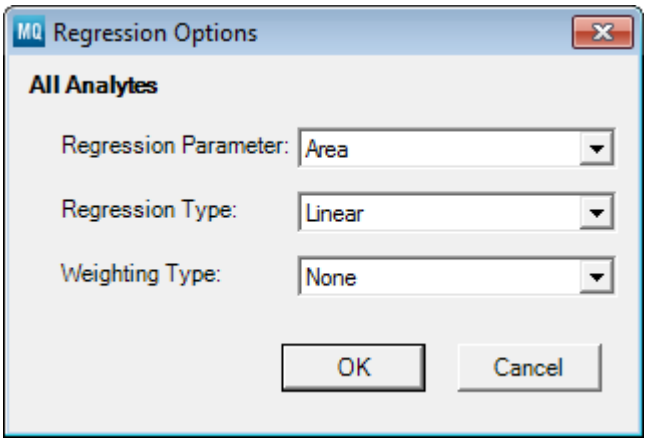


Так же как и при просмотре кривой регрессии, можно исключать образцы **Standard**, чтобы они не использовались при построении кривой регрессии. После окончания настройки автоматически рассчитывается новая регрессия и параметры, например, параметры **Calculated Concentration** и **Accuracy** рассчитываются повторно для всех образцов анализируемого вещества. См. Уравнения регрессии на стр. 147.

Диалоговое окно Regression Options (Параметры регрессии)

При наличии множества аналитов проще вносить изменения с помощью диалогового окна **Regression Options**, чем последовательно изменять параметры регрессии.

Рисунок 10-2 Диалоговое окно Regression Options (Параметры регрессии)



Советы по калибровке

- Для анализируемых веществ, не связанных с внутренним стандартом, по оси y откладываются параметры пика — **Area** или **Height**, — как указано в методе количественного анализа. Для анализируемых веществ с внутренним стандартом по оси y откладывается отношение показателя **Area** или **Height** анализируемого вещества к соответствующему показателю внутреннего стандарта.
- Для анализируемых веществ, не связанных с внутренним стандартом, по оси y откладываются значения **Actual Concentration**. В противном на ней откладывается отношение показателя **Actual Concentration** анализируемого вещества к соответствующему показателю внутреннего стандарта.
- Если из списка **Components & Groups List** выбрано более одного анализируемого вещества, происходит наложение калибровок всех анализируемых веществ. В противном случае отображается калибровка выбранного аналита.
- В области заголовка всегда указывается имя активного аналита и связанное с ним уравнение регрессии с коэффициентом корреляции. Если регрессию невозможно рассчитать, например, если отсутствуют данные образцов **Standard**, это будет указано в заголовке. Если происходит наложение калибровок нескольких анализируемых веществ, с помощью двойного щелчка кнопкой мыши в любом месте области заголовка можно переключаться между окном просмотра данных всех аналитов и окном просмотра данных только одного активного аналита. При наложении калибровок большого количества анализируемых веществ может оказаться невозможным увидеть все данные. В этом случае прокрутите заголовок, перемещая по нему курсор мыши.
- Точки измерений для образцов **Standard**, которые используются в данный момент, всегда отображаются на графике в соответствии с уравнением калибровочной кривой, для построения которой они использовались. Можно выборочно отображать точки измерений для исключенных образцов **Standard** и для образцов **Quality Control**.

- Если нажать на точку измерения, будет автоматически выбрана и выведена на экран соответствующая строка в **Results Table**, при условии что она отображалась в каком-то месте таблицы и не была скрыта.

Контекстное меню Calibration (Калибровка)

Для открытия контекстного меню нажмите правой кнопкой мыши на панели **Calibration**. Доступны следующие команды.

Таблица 10-1 Пункты контекстного меню панели Calibration (Калибровка)

Пункт меню	Описание
Exclude (or Include) (Исключить (или включить))	Если нажать правой кнопкой мыши прямо в точке измерения стандартного образца, которая не была исключена, с помощью этого параметра можно исключить образец из расчета регрессии (исключить образец и аналит, соответствующие выбранной точке измерения). Если образец уже был исключен, то пункт меню отображается как **Include**, и при его выборе данная точка включается в расчет. После выбора рассчитывается регрессия и происходит обновление **Results Table**. Данная функция эквивалентна снятию или установке флажка **Used** для соответствующей строки в Results Table.
Exclude – All Analytes (or Include – All Analytes) (Исключить все аналиты (Включить все аналиты))	Используется для исключения или включения всех анализируемых веществ, а не только аналита, соответствующего выбранной точке измерения.
Show Excluded Standards (Показать исключенные стандарты)	При выборе данного параметра точки измерений для исключенных стандартов (если имеются) наносятся с помощью светлых кругов. При отмене выбора исключенные стандарты не отображаются.
Show QCs (Показать результаты КК)	При выборе данного параметра точки измерений для образцов **Quality Control** наносятся с помощью светлых ромбов. При отмене выбора образцы **QC** не отображаются.

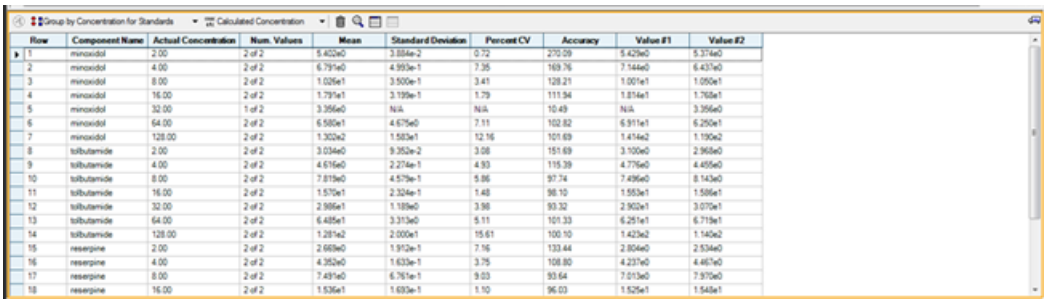
Таблица 10-1 Пункты контекстного меню панели Calibration (Калибровка) (продолжение)

Пункт меню	Описание
Show Legend (Показать условные обозначения)	При выборе данного параметра условные обозначения точек измерений для различных типов образцов (темные круги для образцов **Standard**, светлые круги для исключенных стандартов и светлые ромбы для образцов **QC**) отображаются справа от графика. **Примечание.** Если пользователь не просматривает определенные типы образцов, например, если параметр **Show QCs** не выбран, то запись для тех типов образцов отсутствует. Если не отображаются ни образцы **QC**, ни исключенные стандарты, то данная опция будет недоступна и не появятся условные обозначения.
Use Percent Y-Axis (Откладывать значения по оси Y в процентах)	Если данный параметр не выбран, по оси y графика будут откладываться значения в абсолютных единицах **Area** или **Height** пика (либо отношение **Area** или **Height** пика при использовании внутреннего стандарта). При выборе данного параметра по оси y откладывается процент точек измерений с самым большим значением y независимо для каждого анализируемого вещества. Использование оси, по которой значения откладываются в процентах, удобно в том случае, если накладываются кривые более чем одного аналита и их абсолютные значения существенно различаются, поскольку это позволяет масштабировать каждую кривую, чтобы она заполняла все пространство по вертикали. В противном случае графики аналитов с низкими показателями будут располагаться близко к оси x и их придется увеличить, чтобы рассмотреть подробно.
Log-Log Plot (График в логарифмическом масштабе по обеим осям)	Используется для переключения окон просмотра графика зависимости **Area** от **Concentration** и графика зависимости **Log(Area)** от **Log(Concentration)**.

Таблицы статистических данных 11

Таблица **Statistics Table** используется для просмотра информации, относящейся к воспроизводимости анализа. В каждой строке таблицы приводятся данные, такие как среднее значение и стандартное отклонение для группы соответствующих пиков одного и того же аналита, который, как ожидается, должен имеет одинаковый отклик.

Рисунок 11-1 Окно Statistics (Статистические данные)



Group by Concentration for Standards | Calculated Concentration

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	minoxidol	2.00	2 of 2	5.402e0	3.884e-2	0.72	270.09	5.429e0	5.374e0
2	minoxidol	4.00	2 of 2	6.791e0	4.993e-1	7.35	169.76	7.144e0	6.437e0
3	minoxidol	8.00	2 of 2	1.026e1	3.500e-1	3.41	128.21	1.001e1	1.050e1
4	minoxidol	16.00	2 of 2	1.791e1	3.199e-1	1.79	111.94	1.814e1	1.768e1
5	minoxidol	32.00	1 of 2	3.356e0	N/A	N/A	10.49	N/A	3.356e0
6	minoxidol	64.00	2 of 2	6.580e1	4.675e0	7.11	102.82	6.911e1	6.250e1
7	minoxidol	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	2.968e0
9	tolbutamide	4.00	2 of 2	4.616e0	2.274e-1	4.93	115.39	4.776e0	4.455e0
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	2.986e1	1.189e0	3.98	93.32	2.902e1	3.070e1
13	tolbutamide	64.00	2 of 2	6.485e1	3.313e0	5.11	101.33	6.251e1	6.719e1
14	tolbutamide	128.00	2 of 2	1.281e2	2.000e1	15.61	100.10	1.423e2	1.140e2
15	reserpine	2.00	2 of 2	2.669e0	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	1.536e1	1.693e-1	1.10	96.03	1.525e1	1.548e1

Обозначение	Описание
Row (Строка)	Номер строки. Выберите один из нескольких заголовков столбца, чтобы осуществить сортировку таблицы. Верните таблице первоначальный вид, нажав на данный заголовок.
Component Name (Название компонента)	Название аналита.
Actual Concentration (or Sample Name) (Фактическая концентрация (или название образца))	Если проводится группировка по фактической концентрации, в данном столбце отображается концентрация. Если проводится группировка по названию образца, заголовок столбца меняется, и отображается название образца.
Кол. Values (Значения)	Показывает m значений из n, где n - общее количество образцов с определенной фактической концентрацией (или с одинаковым названием образца), а m - количество данных образцов, используемых для расчетов. Образцы не используются, если соответствующий пик нельзя интегрировать или флажок **Used** снят вручную.
Mean (Среднее)	Среднее значение для используемых образцов.
Standard Deviation (Стандартное отклонение)	Стандартное отклонение используемых образцов.

Обозначение	Описание
Percent CV (Значение коэффициента вариации в процентах)	Коэффициент вариации, выраженный в процентах: 100 * (Стандартное отклонение) / среднее значение.
Accuracy (Точность)	Среднее значение, деленное на фактическую концентрацию, выраженное в процентах: 100 * Среднее значение / (Фактическая концентрация). Это поле отображается только при группировке по фактической концентрации, а не по названию образца.
Values (Значения)	Индивидуальные значения для образцов появляются в дополнительных столбцах. Если соответствующий образец нельзя интегрировать, то ставится обозначение N/A. Если поле **Used** было очищено вручную, то значение будет зачеркнуто.

Советы по использованию Statistics Table

- **Statistics Table** подключается к списку **Components & Groups List** для отображения строк, соответствующих выбранным анализируемым веществам. Если выбраны пункты **All Components** или **All Analytes**, в таблице отображаются записи всех аналитов. Если выбирается отдельный аналит, в таблице отображаются записи только данного аналита. Если из списка выбран отдельный внутренний стандарт, тогда **Statistics Table** остается пустой. См. Components & Groups List (Список компонентов и групп) на стр. 43.
- Если выбрать одну из ячеек **Value**, будет выбрана соответствующая строка в **Results Table** для анализируемого вещества и образца, причем строка видима в данный момент в **Statistics Table**. Только образцы **Unknown** отображаются в **Results Table**. Если в **Statistics Table** содержится информация о образцах **Standard**, соответствующие столбцы в **Results Table** не видны. Если видна панель **Peak Review**, она связывается с **Results Table**, и таблица результатов обновляется при нажатии на ячейку.
- Выберите один из нескольких заголовков столбца, чтобы осуществить сортировку **Statistics Table**.
- Можно копировать всю **Statistics Table** или только необходимые строки.
  - Чтобы копировать всю таблицу, выберите последовательно **Edit** > **Copy**.
  - Чтобы копировать только необходимые строки, выберите строки вручную и последовательно выберите **Edit** > **Copy**.
- Если значения ширины столбца будут изменены, в следующий раз при отображении **Statistics Table** будут восстановлены прежние значения.
- Формат и точность такие же, как в **Results Table**.

- Способ группировки **Group by Concentration for Standards and QCs** основан на **Displayed Actual Concentration**, а не на **Actual Concentration**, сохраненной в **Results Table**. Если концентрация Std 1 составит 0,001, концентрация Std 2 составит 0,005, а формат отображения - 0, Std 1 и Std 2 группируются вместе, поскольку они оба обрабатываются как 0. Чтобы сгруппировать их отдельно друг от друга, в диалоговом окне **Column Settings** установите значение точности 0,000 для параметра **Analyte Concentration**. Если Std 1 составит 0,500, а Std 2 составит 0,499, установите точность на 0,00, чтобы сгруппировать их вместе.

Контекстное меню Statistics Table

Нажмите правой кнопкой мыши в окне **Statistics Table**, чтобы выбрать команду **Use Peak**. С помощью этой команды можно установить флажок **Used** для образца и аналита в соответствии с выбранной ячейкой в одном из столбцов **Value**. Перед нажатием правой кнопкой мыши для открытия контекстного меню выберите соответствующую ячейку в одном из столбцов **Value**, чтобы его выбрать.

Графики измерений 12

С помощью функции Metric Plots можно построить график зависимости значений из столбца Results Table от номера строки или значений в другом столбце. Эти графики значительно облегчают визуальный просмотр данных, особенно если каждая хроматограмма не будет в обязательном порядке просматриваться вручную с помощью панели Peak Review.

Создание графика измерений

1. Выберите один из двух столбцов в **Results Table**.
2. Выберите **Show Metric Plot**.

   Если выбран один столбец, на результирующим графике будут отображаться значения из столбца как функция от номера строки в таблице. При выборе двух столбцов значения из одного столбца откладываются относительно значений из другого столбца. Первый из двух выбранных столбцов содержит значения по оси x, а второй — значения по оси y.

Сохранение настроек графика измерений

1. Откройте график измерений, выбрав столбец и нажав **Show Metric Plot**.
2. Нажмите правой кнопкой мыши на графике и выберите пункт **Save Setting**.

   Это позволяет пользователю быстро построить часто используемые **Metric Plots** без необходимости выбирать каждый раз соответствующий столбец.

Советы по использованию графика измерений

- Если нажать левой кнопкой мыши на точку измерения, автоматически будет выбрана и выведена на экран соответствующая строка Results Table. Если открыта панель Peak Review, она также обновляется и на ней появляется соответствующая хроматограмма. Это удобное средство просмотра пиков на предмет значений, выходящих за границы диапазона.
- Если выбрано более одного компонента из списка Components & Groups, произойдет наложение кривых всех компонентов. В противном случае отображается кривая одного выбранного компонента.

- В области заголовка всегда отображается имя активной кривой. Если происходит наложение кривых нескольких компонентов, с помощью двойного щелчка кнопкой мыши в любом месте области заголовка можно переключаться между окном просмотра всех кривых и окном просмотра только одной активной кривой. Активируйте конкретную кривую нажатием на цветное пятно слева от соответствующего заголовка.
- Сохраните настройки Metric Plot для последующего использования. Нажмите правой кнопкой мыши на графике Metric plot, затем нажмите **Save Settings As**.

Контекстное меню графика измерений

Для открытия контекстного меню нажмите правой кнопкой мыши на графике измерений. Доступны следующие команды.

Таблица 12-1 Пункты контекстного меню Metric Plot

Пункт меню	Описание
Regression (Регрессия)	Используется для отображения линии регрессии на графике измерений. • **Regression Type** (Тип регрессии) • **Weighting Type** (Тип взвешивания) • **Include standard deviation lines and Multiplier** (Добавить линии стандартного отклонения и множитель) См. Диалоговое окно Regression (Регрессия) на стр. 95.
Display "N/A" as 0.0 (Отображать «Нет данных» как 0,0)	При выборе данного параметра нечисловые значения наносятся на график с помощью значений по оси y (значение 0). В противном случае такие точки исключаются из графика. Например, в столбце **Retention Time** для пиков, которые не могут быть интегрированы, указывается значение N/A. При выборе данной функции для подобных пиков наносится точка, чтобы пользователь мог видеть эти потенциально проблемные образцы и затем переходить для их просмотра на панель **Peak Review**, нажав на соответствующую точку.
Show Legend (Показать условные обозначения)	Изменение условных обозначений для точек измерений, используемых для различных типов образцов.
Label Active Series (using sample names) (Пометить активные серии (используя названия образцов))	Указывает, берется ли текст для обозначения точек измерений из поля **Sample Name** таблицы **Results Table**. Если накладывается более одной кривой, отмечается только текущая активная кривая.

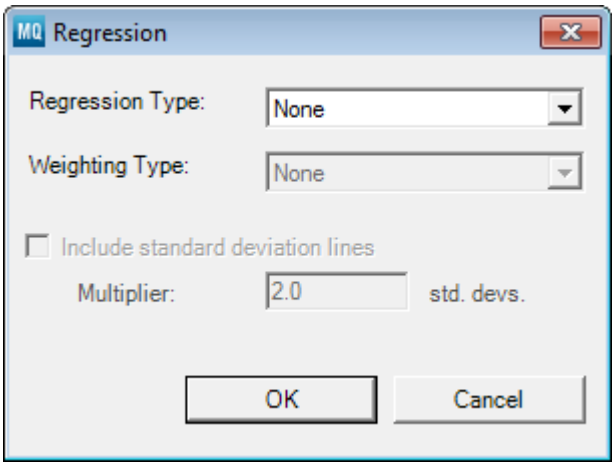
Таблица 12-1 Пункты контекстного меню Metric Plot (продолжение)

Пункт меню	Описание
Use Percent Y-Axis (Откладывать значения по оси Y в процентах)	Указывает, используются ли для значений по оси y абсолютные единицы или процент от максимального значения y. При использовании функции процента процент рассчитывается независимо для каждой наложенной кривой. Эту функцию можно использовать для построения графика с наложенными кривыми нескольких компонентов, когда результаты измерений этих компонентов значительно различаются.
Start Y-Axis at Zero (Установить нулевое начальное значение для оси Y)	Указывает, устанавливается ли для оси y начальное значение y=0 или берется минимальное значение y, необходимое для построения графика.
Connect Points With Lines (Соединить точки линиями)	Указывает, соединяются ли точки измерений линиями.
Save Setting (Сохранить настройку)	Если в данный момент график связан с настройкой, данная функция позволяет сохранить текущие параметры. В противном случае эта функция действует аналогично функции **Save Setting As**.
Save Setting As (Сохранить настройку как)	Если для построения графика часто используются одни и те же столбцы, параметры построения графика можно сохранить как настройку. Это позволяет пользователю быстро создавать график, даже если необходимые столбцы в настоящий момент не видны в **Results Table**. Кроме столбцов, сохраняются и другие параметры построения графика. После сохранения настройки в меню **Metric Plot** появится ее название.
Delete Setting (Удалить настройку)	Если текущий график связан с определенной настройкой, эту функцию можно использовать для удаления настройки.

Диалоговое окно Regression (Регрессия)

Используется для отображения кривой регрессии на графике измерений.

Рисунок 12-1 Диалоговое окно Regression (Регрессия)



Обозначение	Описание
Regression Type (Тип регрессии)	Этот список содержит различные типы регрессии (линейная, квадратичная и т.д.). При выборе типа регрессии **Mean** создается горизонтальная линия на уровне среднего значения по оси y для всех точек измерений; при выборе типа регрессии **Median** создается горизонтальная линия на уровне медианы по оси y для всех точек измерений. Кроме того, имеется опция **None**, которая позволяет удалить любой предыдущий тип регрессии.
Weighting Type (Тип взвешивания)	Различные типы взвешивания описаны в Весовые коэффициенты на стр. 148.
Include standard deviation lines and Multiplier (Добавить линии стандартного отклонения и множитель)	Эти опции доступны при выборе типа регрессии **Mean** или **Median**. При выборе этих опций на график добавляются дополнительные пунктирные горизонтальные линии, которые обозначают указанное количество стандартных отклонений выше и ниже основной линии. Данная опция используется для просмотра результатов измерений, которые отличаются от среднего значения, например, на более чем два или три стандартных отклонения.

Quantitation Method Editor (Редактор методов количественного анализа) 13

Чтобы создать метод количественного анализа или изменить существующий, используйте **Quantitation Method Editor**.

Обычный рабочий процесс включает создание методов количественного анализа с помощью мастера **New Results Table**. Однако можно использовать **Quantitation Method Editor** для создания метода количественного анализа, который будет использоваться при необходимости.

Вкладка Components (Компоненты)

Для открытия контекстного меню нажмите правой кнопкой мыши на вкладке **Components**. Доступны следующие команды.

Таблица 13-1 Пункты контекстного меню окна Components

Пункт меню	Описание
Find Component by Name (Найти компонент по имени)	Используется для выбора компонента, **Name** которого совпадает с заданным текстом. Для поиска соответствия не требуется ввод точного текста. Эта опция полезна для того, чтобы выбрать конкретный компонент среди множества. Если в таблице заранее не выбрана какая-либо строка, поиск начнется с первой строки. В противном случае поиск начинается с выделенной строки и возвращается к началу таблицы. Такая опция полезна в том случае, если имеется более одного компонента, **Name** которого содержит заданный текст. Если первый поиск не дал нужных результатов, можно провести повторный поиск, оставив первый компонент выбранным, чтобы найти следующее соответствие в таблице.
Insert Row Above (Вставить строку выше)	Вставка одной пустой строки непосредственно над выбранной строкой.
Delete Selected Rows (Удалить выбранные строки)	Удаление выбранной строки из таблицы.

Таблица 13-1 Пункты контекстного меню окна Components (продолжение)

Пункт меню	Описание
Sum Multiple Ions (Суммировать несколько ионов)	Суммирование хроматограмм для нескольких MRM-переходов во всем диапазоне сканируемых масс. После выбора этой команды в таблицу **Components** добавляются дополнительные столбцы для масс. Любые значения масс, выбранные в данной строке, используются для получения суммированного значения XIC для соответствующего анализируемого вещества или внутреннего стандарта. Рекомендуется всегда выбирать данную опцию.
Groups (Группы)	См. Подменю Groups (Группы) на стр. 98.
Internal Standards (Внутренние стандарты)	См. Подменю Internal Standards (Внутренние стандарты) на стр. 100

Подменю Groups (Группы)

Таблица 13-2 Пункты меню Groups (Группы)

Пункт меню	Описание
Using Constant Group Size (Использование постоянного размера группы)	Открывает диалоговое окно Set Automatic Groups, которое используется для автоматического заполнения столбца Group с использованием названия первого компонента для каждой группы при условии, что каждая группа содержит одинаковое количество компонентов. См. Диалоговое окно Set Automatic Groups (Автоматическая установка групп) на стр. 100.
By Filling Down Existing Groups (Путем заполнения существующими группами)	Автоматически восполняет аналогичное имя группы для ряда последовательных компонентов. Чтобы использовать команду, вручную укажите имя группы для первого компонента для каждой отдельной группы и затем выберите команду. Указанные имена групп будут включаться в любые последующие компоненты, для которых поле имени группы пустое. Учитываются только строки, для которых поле Name заполнено.
Using Q1 Masses (Использование масс Q1)	Доступно только для экспериментов MRM. Используется для заполнения столбца Group значением массы Q1. Это удобно в том случае, если та же масса Q1 была указана для нескольких переходов для одного и того же соединения и проводился мониторинг различных фрагментов. Если имеется много компонентов и если некоторые случайно имеют одинаковые массы Q1, такие компоненты будут распределены в одну группу.

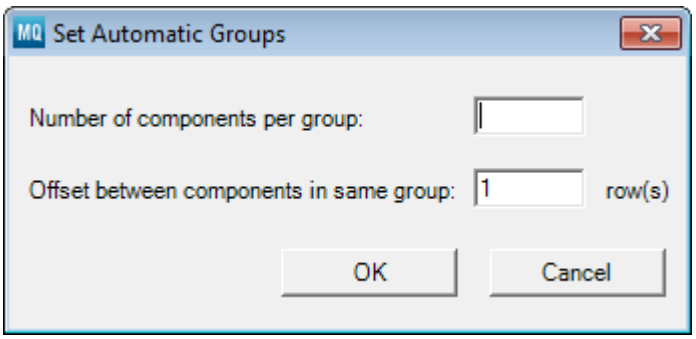
Таблица 13-2 Пункты меню Groups (Группы) (продолжение)

Пункт меню	Описание
Using Q3 Masses (Использование масс Q3)	Доступно только для экспериментов MRM. Используется для заполнения столбца Group значением массы Q3. Это удобно в том случае, если проводился мониторинг разных изотопов соединения (с разными массами Q1), в том числе мониторинг постоянной массы Q3. Если имеется много компонентов и некоторые из них случайно имеют одинаковые массы Q3, такие компоненты будут распределены в одну группу.
Using (Q1 – Q3) Mass Differences (Использование разности масс (Q1 - Q3))	Используется для заполнения столбца Group значением разности масс Q1 и Q3 (доступно только для экспериментов MRM). Это удобно в том случае, если проводился мониторинг разных изотопов соединения (с разными массами Q1), в том числе мониторинг соответствующего фрагмента Q3, содержащего все модифицированные изотопы. Если имеется много компонентов, и если некоторые случайно разделили ту же разность масс, они назначены одинаковой группе.
Add Group to Start of Component Name (Добавить имя группы перед именем компонента)	Позволяет добавить имя группы перед именем анализируемого вещества или внутреннего стандарта. Это может пригодиться, если исходные имена не являются уникальными.
Remove Group from Start of Component Name (Удалить имя группы перед именем компонента)	Позволяет удалить имя группы, если оно имеется, перед именем анализируемого вещества или внутреннего стандарта.
Append Summed Ions for Groups (Добавить для групп суммированные ионы)	Если функция Sum Multiple Ions включена, с помощью данной команды для каждой группы добавляется новый компонент, в котором используется суммированная для этой группы хроматограмма. Для анализируемых веществ и внутренних стандартов (если и то, и другое задано) добавляются разные компоненты. Имена новых анализируемых веществ по умолчанию добавляются к имени группы, а для внутренних стандартов — к имени группы с добавлением суффикса «.IS». Если необходимы суммированные компоненты, а не исходные компоненты с единичной массой, последние могут быть удалены.

Диалоговое окно Set Automatic Groups (Автоматическая установка групп)

Используется для автоматического заполнения столбца Group с использованием названия первого компонента для каждой группы при условии, что каждая группа содержит одинаковое количество компонентов.

Рисунок 13-1 Диалоговое окно Set Automatic Groups (Автоматическая установка групп)



Обозначение	Описание
Number of components per group (Количество компонентов на группу)	Используется для отображения общего количества компонентов в каждой группе.
Offset between components in same group (Смещение между компонентами в одной группе)	Смещение в строках между последовательными компонентами в одной группе. Это значение обычно равно 1, но может быть больше, если компоненты группы расположены не в смежных строках.

Подменю Internal Standards (Внутренние стандарты)

Таблица 13-3 Пункты меню Internal Standards (Внутренние стандарты)

Пункт меню	Описание
Set IS for All Analytes (Установить внутренний стандарт для всех аналитов)	Задает поле IS Name для всех строк анализируемых веществ. Если был определен один внутренний стандарт, будет использовано его имя. В противном случае выберите необходимый внутренний стандарт из открытого диалогового окна.
Set IS for Selected Analytes	Если для нескольких анализируемых веществ используется один и тот же внутренний стандарт, обеспечивает короткий путь к установке внутреннего стандарта для каждого анализируемого вещества по очереди. См. Set IS for Selected Analytes (Установить внутренний стандарт для выбранных аналитов) на стр. 101.

Таблица 13-3 Пункты меню Internal Standards (Внутренние стандарты) (продолжение)

Пункт меню	Описание
Set Last Component of Group as IS (Установить последний компонент группы в качестве внутреннего стандарта)	Используйте эту команду, вручную или с помощью пунктов подменю Set Groups, если в группу попали различные компоненты. Флажок IS устанавливается для последнего компонента каждой группы, а для всех остальных компонентов группы, которые считаются анализируемыми веществами, этот последний компонент задается в качестве внутреннего стандарта.
Set for All Groups as for Selected Group	Используется для симметричного копирования расположения внутренних стандартов группы, соответствующей выбранной в данный момент строке, во все другие группы. Это удобно в том случае, если имеется более одного внутреннего стандарта для каждой из групп. См. Set for All Groups as for Selected Group (Установить настройки выбранной группы для всех групп) на стр. 101.

Set IS for Selected Analytes (Установить внутренний стандарт для выбранных аналитов)

1. Убедитесь, что задан нужный внутренний стандарт (установлены флажки **Name** и **IS**).
2. Выберите строки для аналитов, для которых используются этот внутренний стандарт.
3. Выберите пункт меню.

   Если задано более одного внутреннего стандарта, откроется диалоговое окно, предлагающее пользователю выбрать один нужный стандарт.

Set for All Groups as for Selected Group (Установить настройки выбранной группы для всех групп)

1. Назначьте группы.
2. Укажите вручную, какие компоненты являются внутренними стандартами, установив флажок в первом столбце, относящемся к первой группе.
3. Для каждого аналита из первой группы укажите вручную внутренний стандарт, выбрав его из списка в столбце **IS Name**.
4. Выберите любую строку, соответствующую первой группе.
5. Нажмите **Set for All Groups as for Selected Group**.

Вкладка Integration (Интегрирование)

Для открытия контекстного меню нажмите правой кнопкой мыши на вкладке **Integration**. Доступны следующие команды.

Таблица 13-4 Пункты контекстного меню вкладки Integration & Regression (Интегрирование и регрессия)

Пункт меню	Описание
Find Component by Name (Найти компонент по имени)	Эта команда сходна с той, что доступна на вкладке **Components**, за исключением того, что вместо выбора строк в таблице **Components** имеет место выбор отдельных позиций в списке компонентов.
Highlight Components with Uncertain RT (Выделить компоненты с неопределенным временем удерживания)	Эта опция используется для выделения тех компонентов, для которых ожидаемое время удерживания, принятое по умолчанию, (в качестве которого принимается время удерживания пика с максимальной интенсивностью для каждой из хроматограмм) оказывается неверным. Если рассматривается всего несколько компонентов, их следует проверить по отдельности, не используя данную команду. Однако при рассмотрении множества компонентов данную команду можно использовать для визуальной проверки только тех компонентов, для которых на хроматограмме присутствует более одного значимого пика. См. Диалоговое окно Highlight Components (Выделение компонентов) на стр. 103.
Home Graph Axes (Оси исходного графика)	Возвращение масштабированного графика к исходному виду, в котором показаны все данные.
Overlay Other Components for Group (Наложить хроматограммы других компонентов группы)	Данная команда используется для наложения хроматограмм друг на друга, если различные компоненты были распределены по группам и если ожидается, что компоненты, отнесенные к одной и той же группе, имеют одно и то же ожидаемое время удерживания. Например, если у них выявляются разные MRM-переходы при том, что вещество фактически одно и то же. При выборе данной опции хроматограмма текущего компонента, для которой задаются параметры интегрирования, обрисовывается сплошной синей кривой с указанием результатов интегрирования площади пика. Хроматограммы (но не результаты интегрирования площади пиков) для других компонентов в той же группе накладываются поверх нее с использованием пунктирной линии.

Таблица 13-4 Пункты контекстного меню вкладки Integration & Regression (Интегрирование и регрессия) (продолжение)

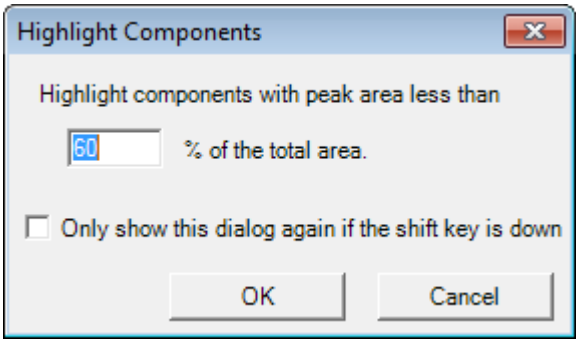
Пункт меню	Описание
Update Retention Times (Обновить время удерживания)	Используется для сброса ожидаемых значений времени удерживания для ранее созданного метода количественного анализа. Если открыт существующий метод количественного анализа и выбран пункт **Set New Typical Sample**, хроматограммы отображаются в соответствии с новым образцом, но ожидаемые времена удерживания остаются без изменений. Для каждого компонента ожидаемое время удерживания обновляется таким образом, чтобы соответствовать времени удерживания пика с самой большой интенсивностью в окне указанной ширины, центрированного по исходному ожидаемому времени удерживания. См. Диалоговое окно Update Retention Times (Обновление времени удерживания) на стр. 104.
Set New Typical Sample (Установить новый типовой образец)	Используется для привязки репрезентативного образца к методу. Потенциально это сказывается на вариантах выбора, доступных в столбце **Q1/Q3** (для MRM-экспериментов) или в столбце **Start - Stop** для профильных экспериментов. Данная опция также влияет на хроматограммы, отображаемые на вкладке **Integration**.

Диалоговое окно Highlight Components (Выделение компонентов)

Названия всех компонентов, для которых автоматически выбираемый пик не учитывается как минимум для указанного процента от общей площади пика в хроматограмме, выделены жирным шрифтом. Например, если в рисунок 13-2 выбранный по умолчанию пик составляет 70–100 % от общей площади, то он не помечается флагом. Просмотр только этих пиков можно осуществить, выбрав их из списка компонентов.

Если установлен флажок **Only show this dialog again if the shift key is down**, в следующий раз при выборе этой команды диалоговое окно не откроется, пока не будет нажата клавиша **Shift**. Ранее указанный параметр процента общей площади используется автоматически.

Рисунок 13-2 Диалоговое окно Highlight Components (Выделение компонентов)



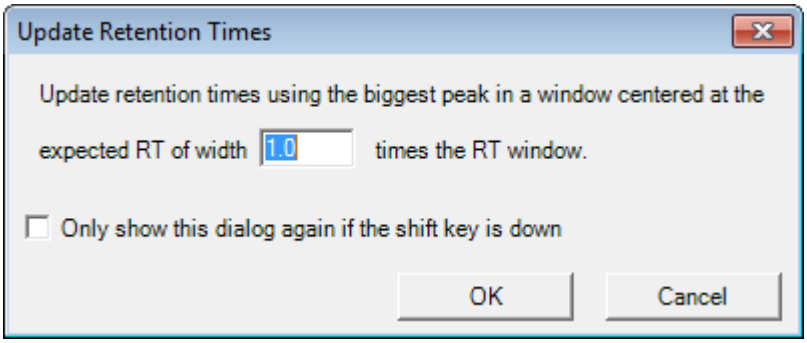
Диалоговое окно Update Retention Times (Обновление времени удерживания)

Используется для сброса ожидаемых значений времени удерживания для ранее созданного количественного метода. Если открыт существующий количественный метод и выбран пункт Set New Typical Sample, хроматограммы отображаются в соответствии с новым образцом, но ожидаемые значения времени удерживания остаются без изменений.

Для каждого компонента ожидаемое время удерживания обновляется таким образом, чтобы соответствовать времени удерживания пика с самой большой интенсивностью в окне указанной ширины, центрированного по исходному ожидаемому времени удерживания.

Если установлен флажок **Only show this dialog again if the shift key is down**, в следующий раз при выборе этой команды диалоговое окно не откроется, пока не будет нажата клавиша **Shift**. Ранее указанное время удерживания используется автоматически.

Рисунок 13-3 Диалоговое окно Update Retention Times (Обновление времени удерживания)



Вкладка Outlier Settings (Настройки значений вне диапазона)

Для открытия контекстного меню нажмите правой кнопкой мыши на вкладке **Outlier Settings**. Доступны следующие команды.

Обозначение	Описание
Accuracy for Standards (Точность стандартов)	Редактирование допустимых пределов для точности образцов **Standard**.
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ% (Макс. допустимые пределы точности для стандартов за исключением НПКО %)	Позволяет изменять допустимые пределы точности для образцов **Standard**, у которых эта величина соответствует лабораторным инструкциям, касающимся обращения со стандартами.
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ% (Макс. допустимые пределы точности для НПКО (стандарт с минимальной концентрацией) %)	Позволяет изменять допустимые пределы точности для образцов **Standard**, если в стандартной лабораторной инструкции для данного образцов **Standard** указано другое значение допустимых пределов точности.
Accuracy for QCs (Точность контрольных образцов)	Позволяет изменять допустимые пределы точности для образцов **QC**.
Max. Accuracy Tolerance for QC% (Макс. допустимый предел точности для КК %)	Позволяет изменять допустимые пределы точности для образцов **QC**, у которых эта величина соответствует лабораторным инструкциям, касающимся обращения со стандартами.
Ion Ratio (Соотношение ионов)	Данная опция доступна только в том случае, если компоненты распределены по группам. Опция предназначена для использования соотношения ионов, рассчитываемого по площади или по высоте пика. Площадь или высота пика задаются при выборе параметров регрессии при разработке метода количественного анализа.
Calculated Concentration (Расчетная концентрация)	При использовании образцов **Standard** известной концентрации это концентрация, рассчитанная путем обратных вычислений от калибровочной кривой. Уравнения регрессии описывают, каким образом осуществляется регрессия для различных типов регрессии и весовых коэффициентов.
Component (Компонент)	Анализируемые вещества или внутренние стандарты для всех образцов.
IS (Внутренний стандарт)	Выбранный внутренний стандарт. Данная опция доступна только в том случае, если выбран флажок **Ion Ratio**.

Обозначение	Описание
Group (Группа)	Компоненты, которые имеют одно и то же время удерживания (т.е. разные переходы для одного и того же вещества), можно группировать. Данная опция доступна только в том случае, если выбран флажок **Ion Ratio**.
Ion Ratio Tolerance (%) (Допустимые пределы соотношения ионов (%))	Можно использовать значение по умолчанию или изменить значение в соответствии с инструкциями, принятыми в данной лаборатории. Данная опция доступна только в том случае, если выбран флажок **Ion Ratio**.
Lower Limit of Calculated Concentration (Нижний предел расчетной концентрации)	В этом поле указывают нижний предел допустимого диапазона концентрации. Любой образец, для которого **Calculated Concentration** будет ниже этого значения, получает отметку о наличии значения, выходящего за границы диапазона концентрации.
Upper Limit of Calculated Concentration (Верхний предел расчетной концентрации)	В этом поле указывают верхний предел допустимого диапазона концентрации. Любой образец, для которого **Calculated Concentration** будет выше этого значения, получает отметку о наличии значения, выходящего за границы диапазона концентрации.

Таблица 13-5 Пункты контекстного меню Outlier Settings (Настройка значений вне диапазона)

Обозначение	Описание
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration (Применить ко всем анализируемым веществам нижний предел расч. концентрации)	При выборе данной опции ко всем анализируемым веществам применяется нижний предел расчетной концентрации, если все анализируемые вещества имеют одни и те же критерии.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration (Применить ко всем анализируемым веществам верхний предел расч. концентрации)	При выборе данной опции ко всем анализируемым веществам применяется верхний предел расчетной концентрации, если все анализируемые вещества имеют одни и те же критерии.

Учебный курс по рабочему процессу количественного анализа

14

Задачи:

- Изучить порядок обработки данных с помощью алгоритма SignalFinder™.
- Изучить, как обрабатывать данные с помощью алгоритма интегрирования MQ4.
- Изучить порядок использования параметров алгоритмов интегрирования MQ4 и SignalFinder™.

Методы количественного анализа включают набор инструкций о том, как выполнить количественный анализ пиков, выбранных для интегрирования. В данном учебном курсе метод создается одновременно с Results Table.

В него также входят дополнительные задачи, которые можно использовать для управления данными в **Results Table**, а также информация о значках имеющегося ПО.

Примечание. Журнал аудита и функции редактирования безопасности ограничены использованием структуры папки Analyst Data. Пользователи могут обрабатывать только файлы данных, которые имеются в структуре файла программного обеспечения Analyst® MD. Если структура файла и папки не сохраняются, может отсутствовать возможность просмотреть хроматограммы.

Калибровочные кривые

Калибровочная кривая (также известная как стандартная кривая концентрации) является методом определения концентрации вещества в образце **Unknown** с помощью сравнения образца **Unknown** с набором образцов **Standard** известной концентрации. Калибровочная кривая представляет собой график, отражающий ответы прибора (аналитический сигнал) на изменения концентрации аналита (вещества, концентрация которого измеряется). Подготавливают серию образцов **Standard** в диапазоне концентраций, близком к ожидаемой концентрации аналита в образце **Unknown**.

Предварительные условия

В окне настройки защиты программы Analyst® MD выберите проект **Example**.

Файл Mix_batch_1. Wiff можно найти в папке Analyst Data\Projects\Example\Data\Triple Quad.

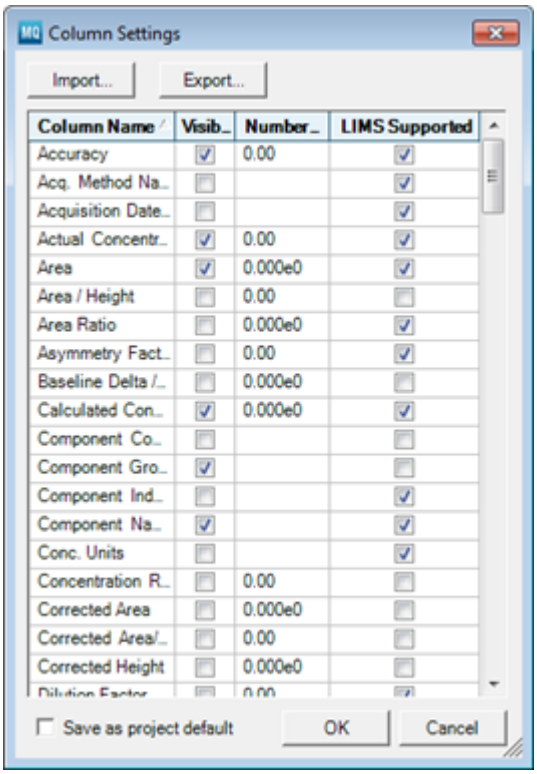
Изменение отображаемых в Results Table столбцов

С помощью этой процедуры можно отображать или скрывать столбцы в **Results Table** или изменять точность числового формата. В числовых полях используйте формат 0,00 для неэкспоненциальных чисел и формат 0,00e0 для экспоненциальных чисел. Изменение количества разрядов после десятичного разделителя позволяет менять точность отображаемых чисел. Только точка (.) может быть использована в качестве десятичного разделителя. Разделение числовых разрядов не поддерживается.

Примечание. Некоторые наиболее важные столбцы с информацией об образце, например **Sample Name**, **Sample ID** и т.д. не должны быть скрыты при изменении пользователями настроек столбцов **Results Table**.

1. Нажмите правой кнопкой мыши на **Results Table** и выберите пункт **Column Settings**.

Рисунок 14-1 Диалоговое окно Column Settings (Настройки столбцов)



2. При необходимости установите или снимите флажок в столбце **Visible**.
3. В столбце **Number Format** измените формат: установите формат целых или экспоненциальных чисел. Также можно изменить количество знаков после точки.

Совет! Чтобы применить настройки столбца ко всем **Results Table** в проекте, установите флажок **Save as project default**.

4. Нажмите **OK**.

Обработка данных с использованием алгоритма интегрирования SignalFinder™

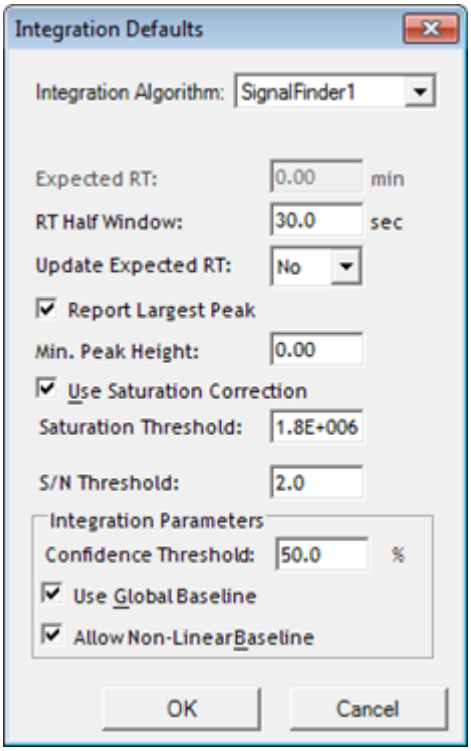
В отличие от алгоритма интегрирования MQ4 или алгоритмов, доступных в программном обеспечении Analyst® MD, SignalFinder™ при создании метода количественного анализа строит модель пика, используя выбранный образец. Эта модель описывает форму выбранного пика, используемого алгоритмом. Во время процедуры интегрирования алгоритм интегрирования SignalFinder применяет данную модель к другим образцам, растягивая или отклоняя пик образца. Здесь учитывается тот факт, что форма пика указанного анализируемого вещества или внутреннего стандарта для нескольких образцов схожа, но не идентична.

Установка параметров интегрирования пика

Используйте описанную ниже процедуру для проверки или установки алгоритма интегрирования данных. См. Об алгоритме интегрирования SignalFinder на стр. 126

1. В окне настройки защиты программы Analyst® MD на строке **Navigation** в разделе **Companion Software** дважды щелкните по **MultiQuant 3.0.3**.
2. Выберите последовательно **Edit** > **Project Integration Defaults**.
3. В диалоговом окне **Integration Defaults** выберите из списка **Integration Algorithm** значение **SignalFinder1**.
4. Установите флажок **Use Saturation Correction** и затем задайте для параметра **Saturation Threshold** значение **1,8E+006**.

Рисунок 14-2 Диалоговое окно Integration Defaults (Настройки параметров интегрирования по умолчанию)



Примечание. Пики, превышающие значение **Saturation Threshold**, считаются насыщенными. Это значение зависит от типа детектора.

5. Нажмите **OK**.

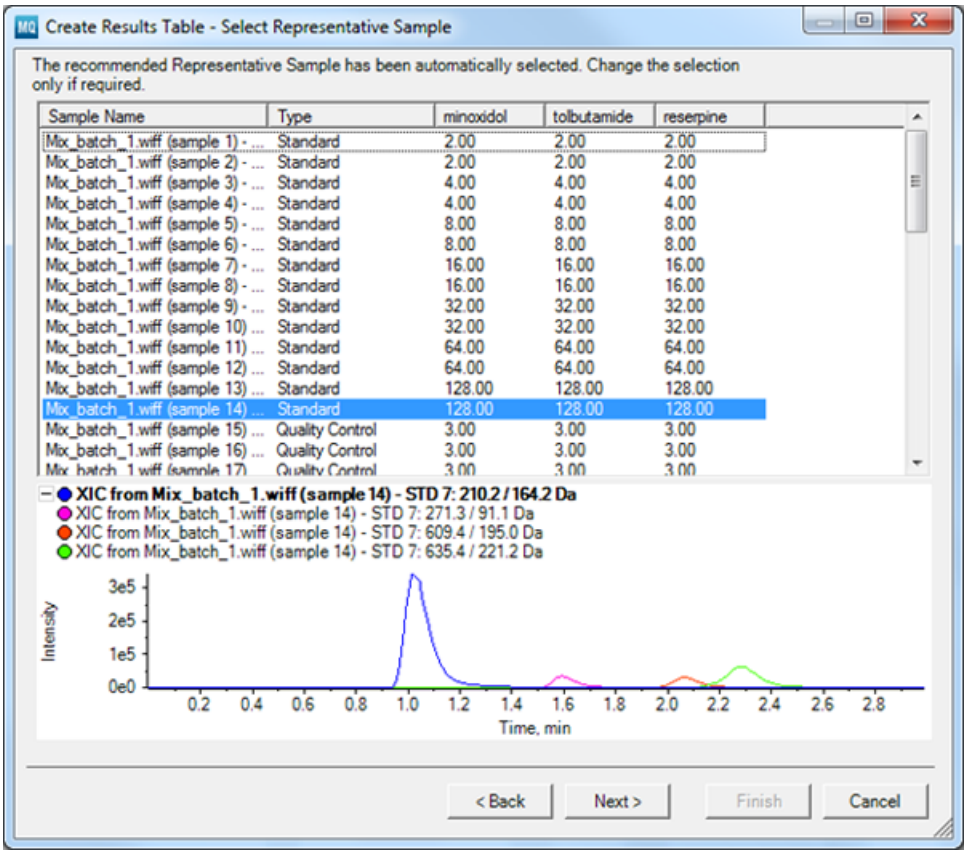
Создание Results Table

1. Выберите пункты **File** > **New Results Table**.
2. На странице **Create Results Table - Select Samples** откройте папку **Example Data** и затем перетащите файл **Mix_batch_1.wiff** в область **Selected**.
3. Нажмите **Next**.
4. Выберите опцию **Create New Method (SignalFinder1)**.
5. Откроется диалоговое окно **New**.
6. В диалоговом окне **Save Quantitation Method As** введите название метода и нажмите **Save**.
7. Нажмите **Next**.

На странице **Create Results Table - Select Representative Sample** выбран репрезентативный образец. Программа предлагает репрезентативный образец на основании выбранной хроматограммы, что позволяет более эффективно выбирать параметры интегрирования, чем на основании всего пакета. Рекомендуется выбирать ненасыщенный стандартный образец высокой концентрации или **контрольный** образец (TIC менее 1E+006 имп/с).

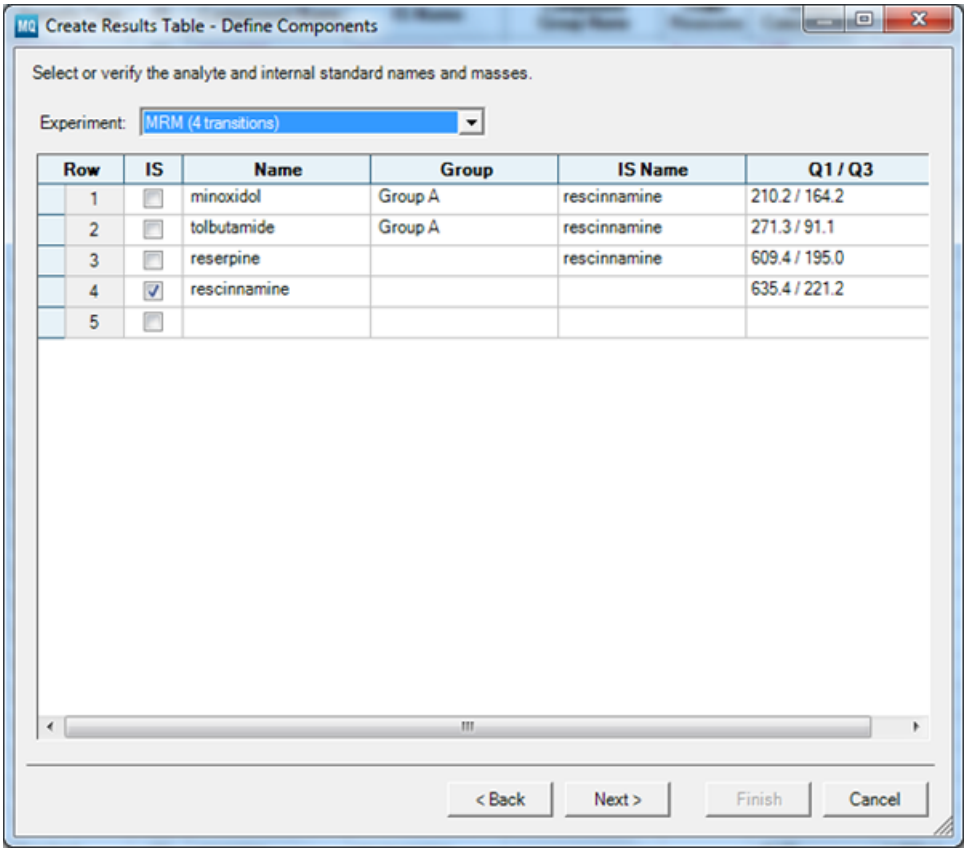
Совет! Во время просмотра пиков можно выбрать другой образец, по которому будет строиться модель пика при его просмотре.

Рисунок 14-3 Страница Create Results Table - Select Representative Sample (Создание таблицы результатов - Выбор репрезентативного образца)



8. На странице **Create Results Table - Define Components page** подтвердите анализируемые вещества и внутренние стандарты.
9. Нажмите **Next**.

Рисунок 14-4 Страница Create Results Table - Define Components (Создание таблицы результатов - Установка компонентов)

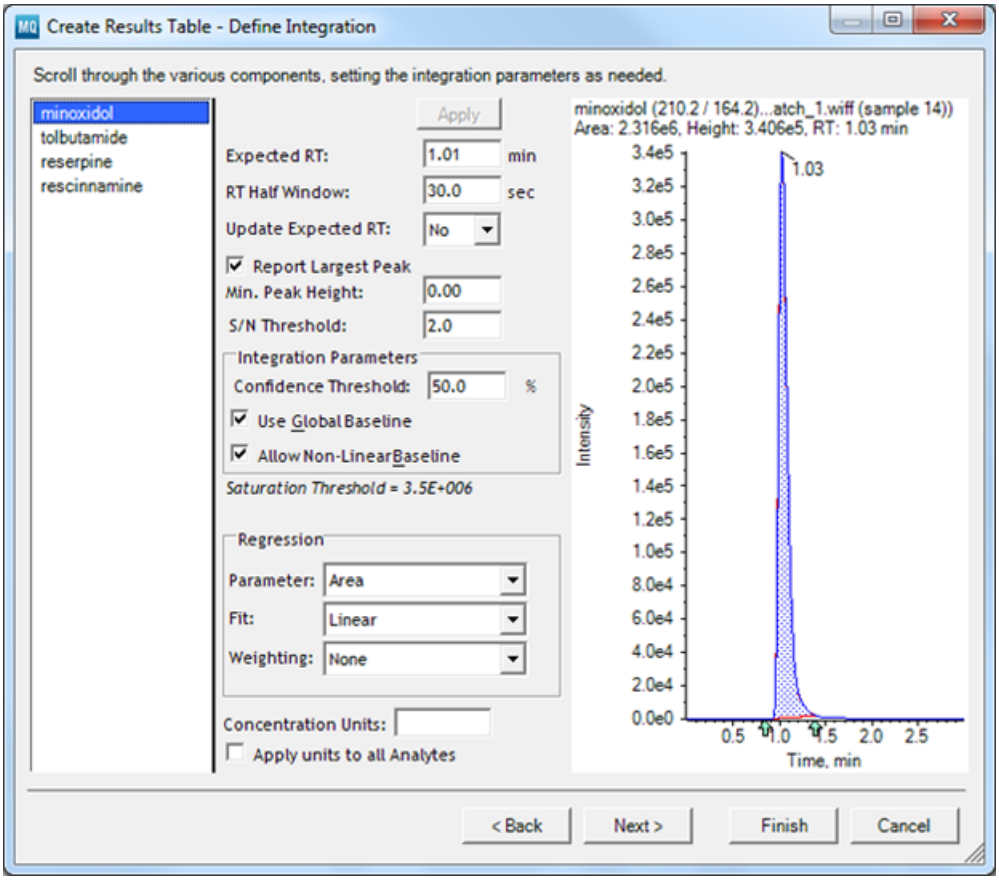


Примечание. Если название компонента содержится в столбце **ID** таблицы диапазонов масс, то при создании метода получения данных оно автоматически указывается на странице **Define Components**. Если название компонента не было включено в таблицу, внесите название компонента таблицу вручную.

На странице **Create Results Table - Define Integration** анализируемые вещества и внутренние стандарты отображаются слева. К репрезентативному образцу применены текущие параметры интегрирования и представлена хроматограмма.

Компоненты ранее выбранного репрезентативного образца отображаются в окне **Integration**. Обнаружение и интегрирование пиков в данном репрезентативном образце осуществляется с помощью параметров, которые были установлены в диалоговом окне **Integration Defaults**.

Рисунок 14-5 Страница Results Table - Define Integration (Создание таблицы результатов - Установка параметров интегрирования)



При необходимости настройте параметры обнаружения пика и положение зеленых стрелок на оси x хроматограмм. Это позволит более точно установить необходимую начальную и конечную точку для интегрирования пика. Фактически, это визуальный способ настройки двух параметров обнаружения пика, которые сохраняются с методом количественного анализа и применяются ко всем пикам, подлежащим интегрированию. Программа содержит границы данных параметров, в пределах которых протяженность пика считается разумной.

Если на хроматограмме имеется более одного пика и нужный пик не был выбран автоматически, перемещайтесь по пику, чтобы установить ожидаемое время удерживания. Перемещайтесь от фактического начала к фактическому концу пика и не выбирайте очень широкую или очень узкую область. Дело в том, что алгоритм предполагает наличие только одного пика в пределах выбранной области. Например, если набор данных зашумлен и алгоритм при наличии только одного пика обнаруживает два объединенных пика, выберите область, содержащую оба пика, чтобы настроить внутренние параметры алгоритма на обнаружение только одного пика. И наоборот, если алгоритм обнаруживает один пик, когда предполагается наличие двух или более смежных пиков, выберите область, охватывающую только нужный пик.

10. В группе **Integration Parameters** установите флажок **Global Baseline**, чтобы использовать в качестве базовой линии всю хроматограмму.

    Если этот параметр не выбран, программа будет учитывать только узкую область вокруг изучаемого пика.

11. Установка флажка **Allow Non-Linear Baseline** позволяет сделать выбор между линейной и нелинейной базовой линией. При установке нелинейной базовой линии базовая линия оценивается под каждым пиком. Линейная базовая линия соответствует линии между точками в начале и в конце этой определенной группы пиков.
12. Просматривайте результаты интегрирования пика для каждого компонента, выбирая название компонента на левой панели. Изменяйте параметры интегрирования, чтобы получить надлежащим образом интегрированный пик.
13. Для компонентов **Minoxidol**, **Tolbutamide** и **Reserpine** используйте группу параметров **Regression**, чтобы задать указанные ниже опции, а затем нажмите **Apply**.

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

14. Задайте для параметра **Concentration Units** значение **ng/mL** (нг/мл), а затем установите флажок **Apply units to all Analytes**.
15. Нажмите **Apply**.
16. Нажмите **Finish**.

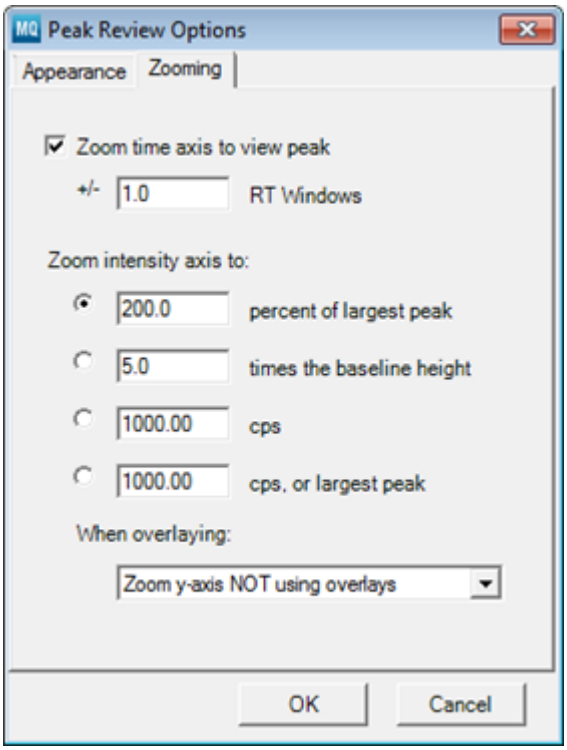
    Файлы с образцами встраиваются автоматически, и создается **Results Table**.

    Для получения сведений об организации данных в **Results Table** см. Просмотр пиков на стр. 114. Для получения сведений о создании отчетов см. Отчеты на стр. 153.

Просмотр пиков

1. Нажмите на значок **Peak Review**.
2. Нажмите правой кнопкой мыши на таблице и выберите пункт **Column Settings**.
3. Сделайте столбец **SF Saturated** видимым.
4. Нажмите правой кнопкой мыши на панели **Peak Review** и выберите пункт **Options**.
5. На вкладке **Zooming** задайте для параметра **Zoom time axis to view peak** значение **1**.
6. Установите для параметра **Zoom intensity axis** значение **200 percent of largest peak**.

Рисунок 14-6 Peak Review Options (Настройки просмотра пиков)



7. Для перемещения по пикам используйте красные стрелки.

   Если имеет место насыщение детектора, пик кажется уплощенным по сравнению с нормальным пиком. Например, такой пик будет обозначен красным контуром, а в столбце **SF Saturated** появится кнопка **Yes**, поскольку интенсивность пика превысит порог насыщения, равный $1{,}8^6$ имп/с.

   Примечание. Репрезентативный образец может не подходить для всех компонентов. При просмотре пиков можно выбрать новый репрезентативный образец и создать новую модель.

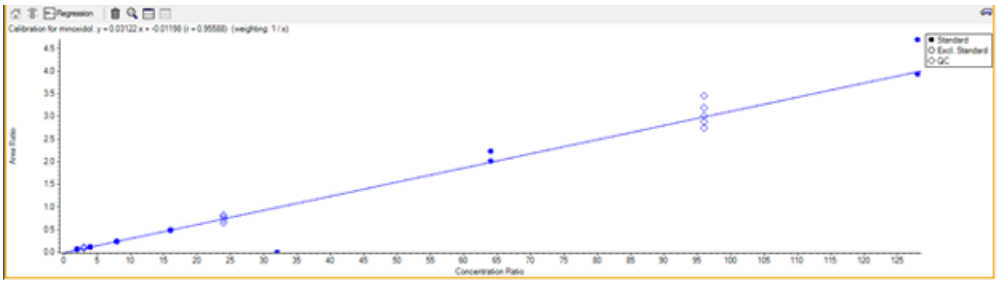
8. Чтобы создать новую модель, выберите новый пик, а затем нажмите на значок **Update Peak Model**. Выберите пик, который аналогичен по форме другим пикам и не насыщен.
9. Нажмите правую кнопку мыши и выберите пункт **Update Quantitation Method for Component**, чтобы применить изменения ко всем образцам, относящимся к данному компоненту.

Изменение калибровочной кривой

1. Для просмотра калибровочной кривой нажмите на значок **Show Calibration Curve**.

2. Чтобы добавить условные обозначения, нажмите правой кнопкой мыши на панели **Calibration** и выберите пункт **Show Legend**.

Рисунок 14-7 Калибровочная кривая



3. Чтобы добавить на график кривой результаты КК, еще раз нажмите правой кнопкой мыши на панели **Calibration** и выберите пункт **Show QCs**.

Совет! Чтобы исключить точку из графика кривой, нажмите правой кнопкой мыши на кривой и выберите пункт **Exclude**.

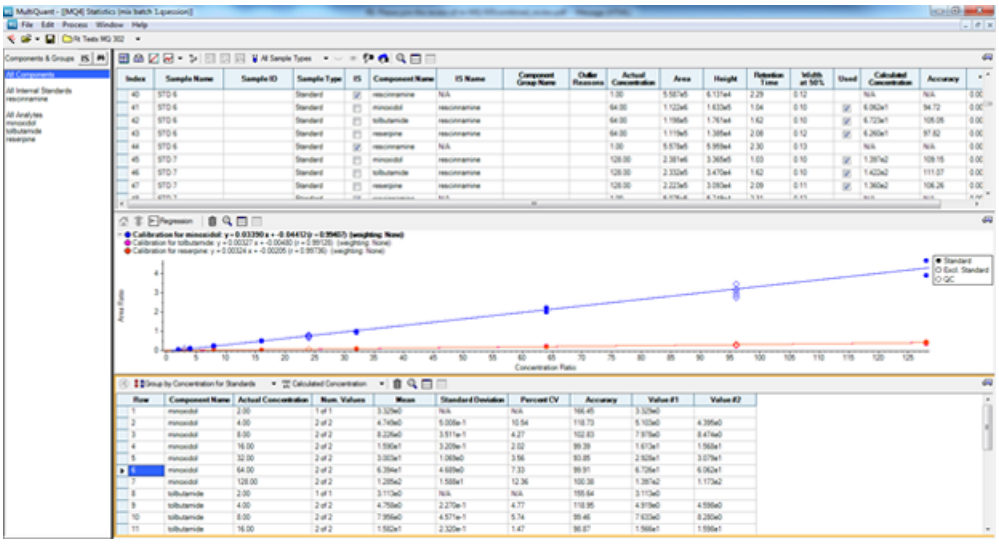
4. Чтобы подтвердить или изменить параметры регрессии для отдельного аналита, выберите аналит в списке **Components and Group**, а затем нажмите кнопку **Regression** на панели инструментов.

Просмотр статистических данных образцов

Можно просматривать статистические данные для одной Results Table. Анализ результатов интегрирования пиков, калибровочной кривой и статистических данных образцов представляет собой итерационный процесс.

1. Открыв Results Table, нажмите на значок **Show Statistics Table**.
2. Из списка **Sample Grouping** выберите способ группирования образцов (для данного аналита) для расчета статистических данных.

Рисунок 14-8 Statistics Table (Таблица статистических данных)



3. Выберите пункт из списка **Metric**, чтобы задать фактический показатель, которые будут использоваться для расчета статистических данных.
4. Просмотрите столбцы **Value**. Зачеркнутые данные обозначают исключенные измерения.

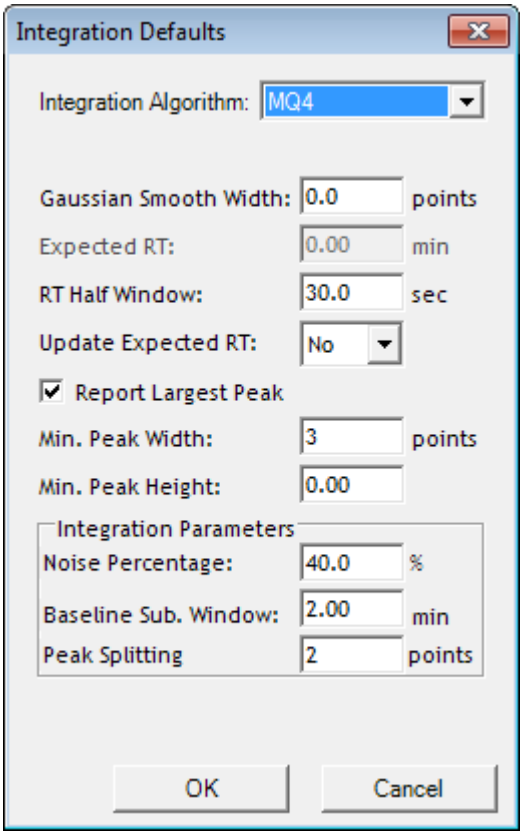
Обработка данных с использованием алгоритма интегрирования MQ4

Установка параметров интегрирования пика

Перед началом обработки данных используйте описанную ниже процедуру для проверки или установки алгоритма интегрирования. См. Параметры алгоритма интегрирования MQ4 на стр. 135.

1. В окне настройки защиты программы Analyst® MD на панели **Navigation** в разделе **Companion Software** дважды щелкните по **MultiQuant 3.0.3**.
2. Выберите последовательно **Edit > Project Integration Defaults**.
3. В диалоговом окне **Integration Defaults** выберите из списка **Integration Algorithm** значение **MQ4**.

Рисунок 14-9 Диалоговое окно Integration Defaults (Настройки параметров интегрирования по умолчанию)



4. При необходимости измените параметры проекта и затем нажмите **OK**.

   Алгоритм интеграции MQ4 и настройки параметров используются для любых новых методов, созданных в этой папке проекта **Example**. Эти настройки по умолчанию относятся к данному проекту. Чтобы изменить настройки по умолчанию для других проектов, повторите данную процедуру для выбранного проекта.

Создание таблицы результатов

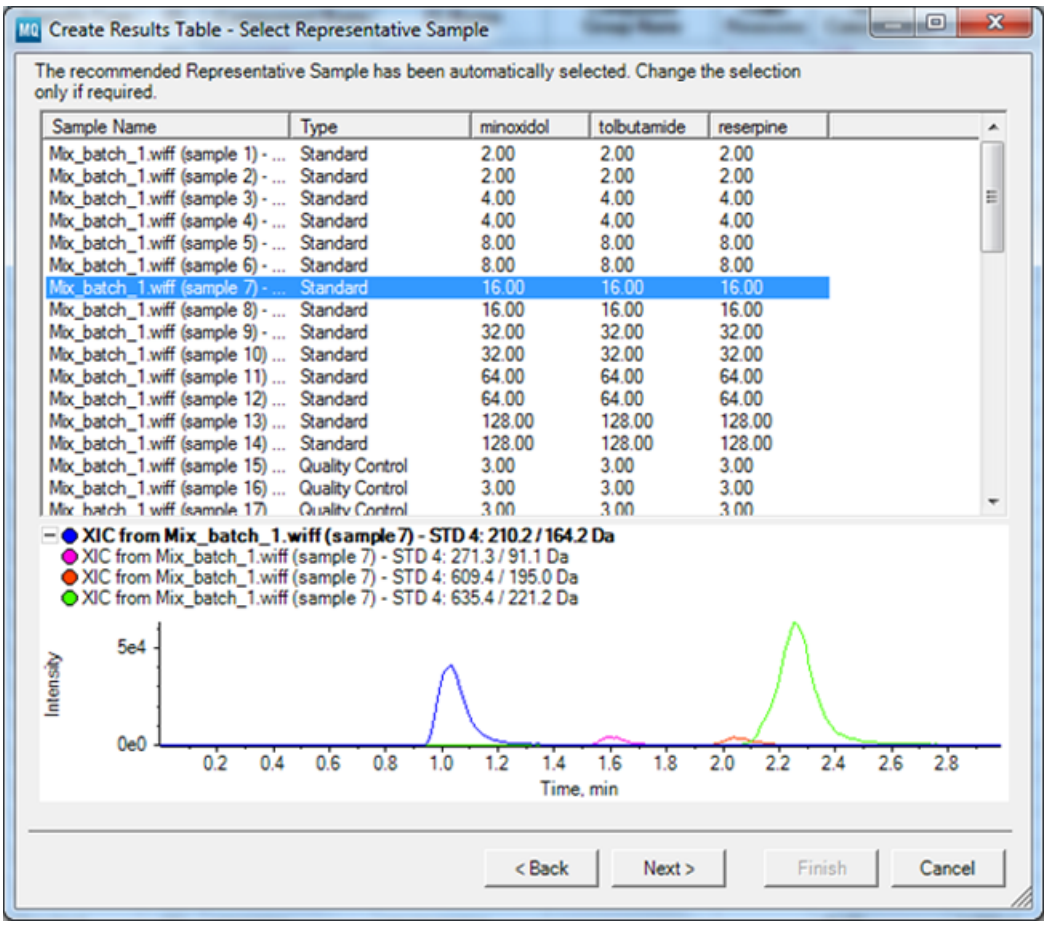
1. Выберите пункты **File** > **New Results Table**.
2. На странице **Create Results Table - Select Samples** откройте папку **Example Data** и затем перетащите файл **Mix_batch_1.wiff** в область **Selected**.
3. Нажмите **Next**.
4. Выберите опцию **Create New Method (MQ4)**.
5. Откроется диалоговое окно **New**.
6. В диалоговом окне **Save Quantitation Method As** введите название метода и нажмите **Save**.

В данном учебном курсе метод уже создан. Создание методов позволяет просматривать и применять различные параметры для интегрирования данных.

Если имеется уже созданный метод, выберите опцию **Choose Existing Method** и затем установите флажок **Edit Method**, чтобы просмотреть и применить различные параметры к данному методу. Если флажок **Edit Method** не установлен, мастер создаст **Results Table**, используя существующий метод.

7. На странице **Create Results Table - Select Representative Sample** предложен и выбран репрезентативный образец.

Рисунок 14-10 Страница Create Results Table - Select Representative Sample (Создание таблицы результатов - Выбор репрезентативного образца)



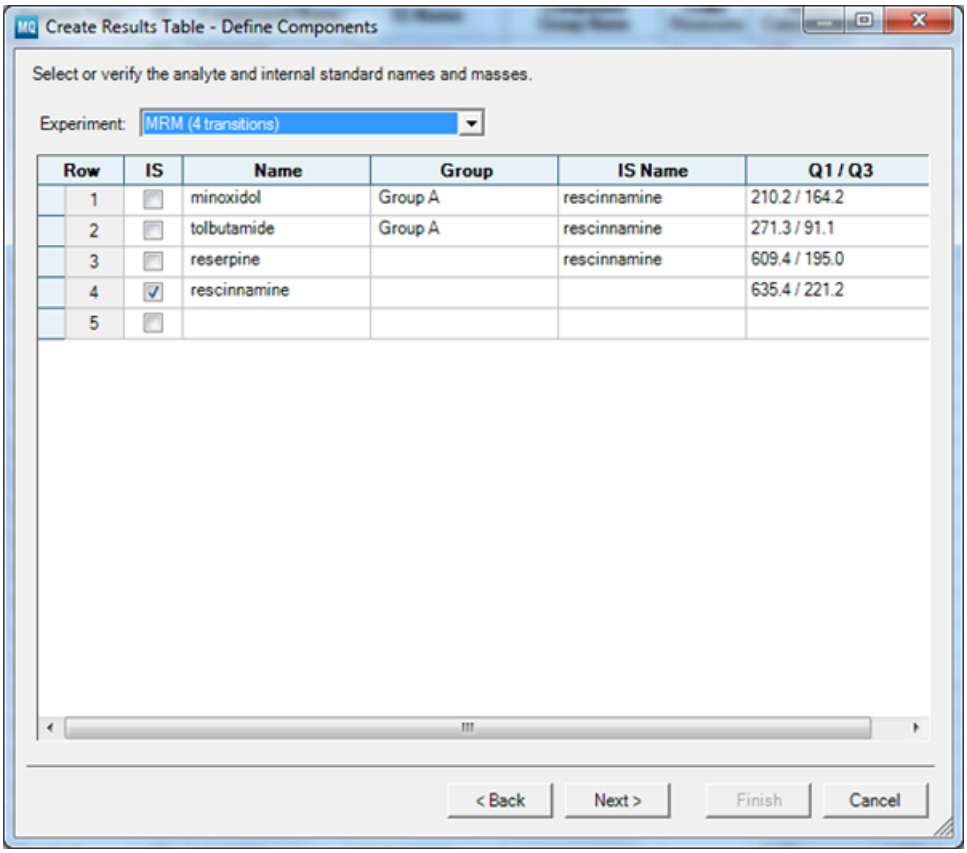
8. Нажмите **Next**.

Программа предлагает репрезентативный образец на основании выбранной хроматограммы, что позволяет более эффективно выбирать параметры интегрирования, чем на основании всего пакета. Для алгоритма интегрирования MQ4 рекомендуется выбирать второй стандартный образец с самой низкой концентрацией или контрольный образец, если данные о концентрации анализируемого вещества встроены в файл .wiff. Например, если диапазон концентрации от одного до восьми, то вторая наименьшая

концентрация будет равна двум. Если репрезентативный образец, выбранный по умолчанию, не достаточно интенсивный, выберите другой репрезентативный образец, нажав кнопку **Back** в окне мастера и выбрав другой образец. Другой образец можно выбрать во время просмотра пиков. См. Просмотр пиков на стр. 122.

9. На странице **Create Results Table - Define Components page** подтвердите анализируемые вещества и внутренние стандарты.

Рисунок 14-11 Страница Create Results Table - Define Components (Создание таблицы результатов - Установка компонентов)



10. Нажмите **Next**.

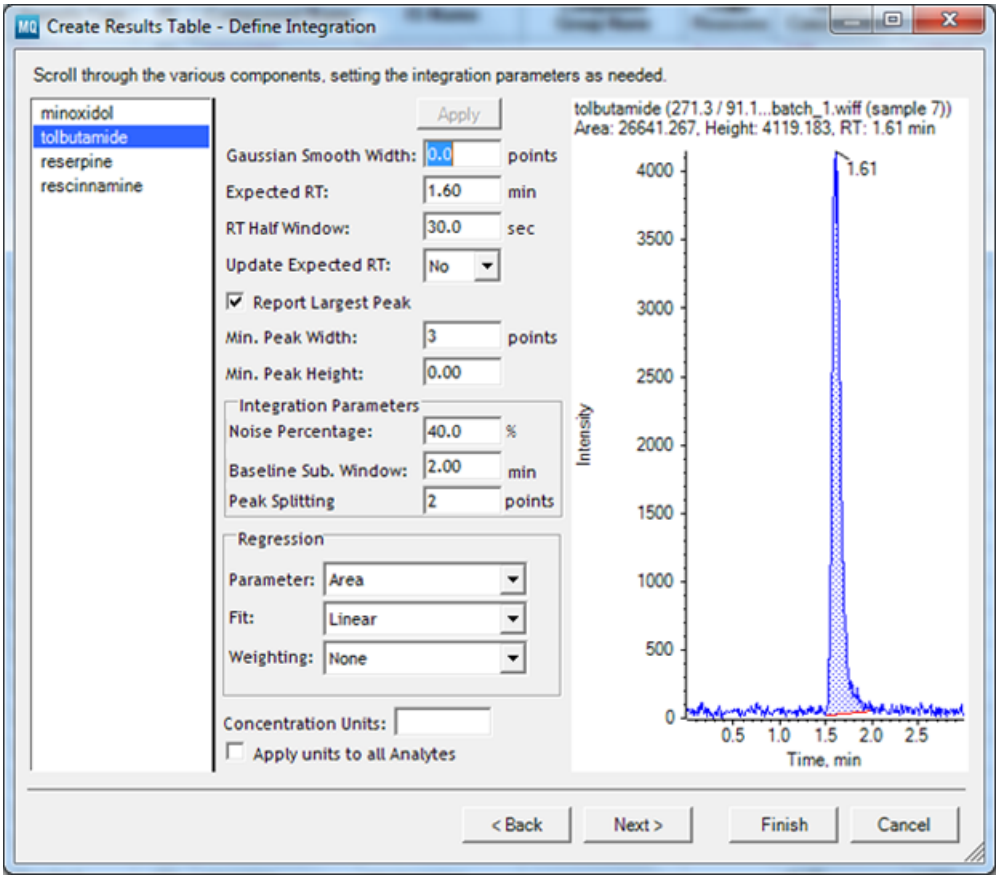
Примечание. Если название компонента содержится в столбце **ID** таблицы диапазонов масс, то при создании метода получения данных оно автоматически указывается на странице **Define Components**. Если название компонента не было включено в таблицу, внесите название компонента таблицу вручную. Если к названию компонента добавлено расширение «.IS», программа идентифицирует компонент как внутренний стандарт и назначит его в качестве внутреннего стандарта соответствующему анализируемому веществу.

На странице **Create Results Table - Define Integration** анализируемые вещества и внутренние стандарты отображаются слева. К репрезентативному образцу применены текущие параметры интегрирования и представлена хроматограмма.

Компоненты ранее выбранного репрезентативного образца отображаются в окне **Integration**. Обнаружение и интегрирование пиков в данном репрезентативном образце осуществляется с помощью параметров, которые были установлены в диалоговом окне **Integration Defaults**.

11. Просматривайте результаты интегрирования пика для каждого компонента, выбирая название компонента на левой панели. Изменяйте параметры интегрирования, чтобы получить надлежащим образом интегрированный пик. См. Установка параметров интегрирования пика на стр. 117.

Рисунок 14-12 Страница Results Table - Define Integration (Создание таблицы результатов - Установка параметров интегрирования)



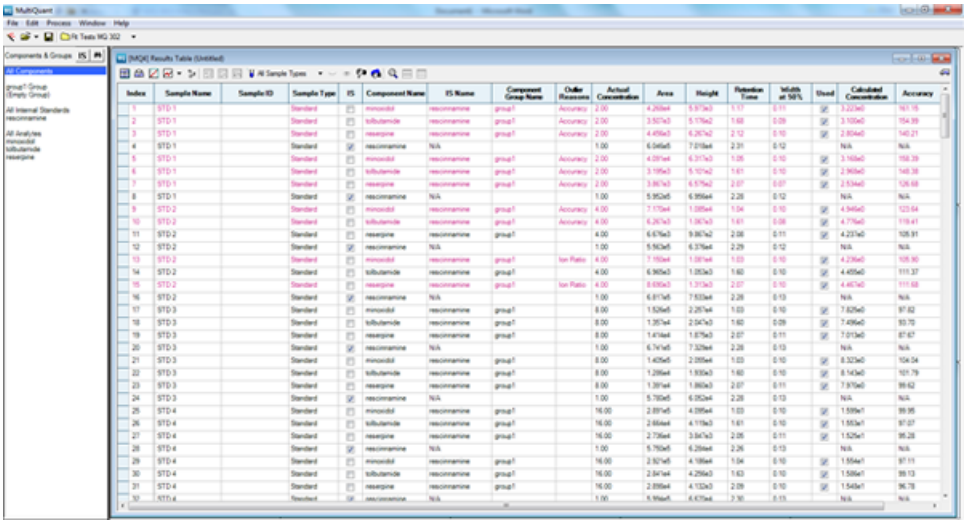
12. Для компонентов **Minoxidol**, **Tolbutamide** и **Reserpine** используйте группу параметров **Regression**, чтобы задать указанные ниже опции, а затем нажмите **Apply**.

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

13. Задайте для параметра **Concentration Units** значение **ng/mL**, а затем установите флажок **Apply units to all Analytes**.
14. Нажмите **Apply**.
15. Нажмите **Finish**.

    Файлы с образцами встраиваются автоматически, и создается Results Table.

    Рисунок 14-13 Results Table (Таблица результатов)

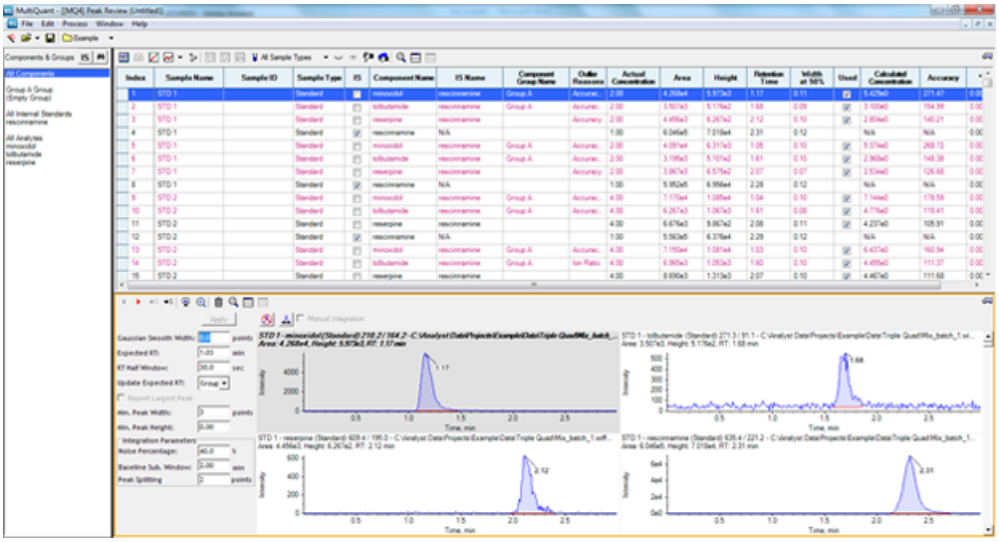


Для получения сведений об организации данных в Results Table см. Просмотр пиков на стр. 114. Для получения сведений о создании отчетов см. Отчеты на стр. 153.

Просмотр пиков

1. Нажмите на значок **Peak Review**.

Рисунок 14-14 Панель Peak Review



2. Нажмите правой кнопкой мыши на таблице и выберите пункт **Column Settings**.
3. Нажмите правой кнопкой мыши на панели **Peak Review** и выберите пункт **Options**.
4. На вкладке **Zooming** измените **Zoom time axis to view peak** на **3 RT Windows**.
5. Если хроматограмма содержит несколько пиков и интегрирован неправильный пик, перемещайтесь по нужному пику, чтобы установить новое значение параметра **Expected RT**. При необходимости настройте параметры обнаружения и интегрирования пика. См. Алгоритмы интегрирования на стр. 126.
6. Чтобы применить новые параметры ко всем остальным образцам, относящимся к одному и тому же компоненту, нажмите правой кнопкой на хроматограмме и затем выберите **Update Quantitation Method for Component**.
7. Встроенный метод количественного анализа можно изменить при просмотре **Results Table**, выбрав последовательно пункты **Edit > Modify Results Table Method.** Параметры интегрирования для параметрической регрессии и сведения о каждом компоненте можно изменить.

   Если параметры интегрирования для параметрической регрессии и сведения о каждом компоненте изменились, изменится только метод количественного анализа, встроенный в **Results Table**. Файл фактического метода количественного анализа, используемый для создания **Results Table**, не изменится. Чтобы использовать это встроенный метод количественного анализа для обработки других файлов данных, необходимо экспортировать этот встроенный метод в файл метода с помощью функции **Export**.

   Примечание. Очистите параметры интегрирования, выбрав **Set Peak to Not Found**, чтобы просмотреть исходные данные перед ручным интегрированием пика.

8. Чтобы использовать режим ручного интегрирования, нажмите на значок **Enable Manual Integration Mode** на панели **Peak Review**. Перетащите курсор с одной стороны основания изучаемого пика на другую. Теперь пик будет интегрирован вручную, а ранее использовавшиеся параметры интегрирования станут недоступны.

Совет! Если пик только что был изменен, его можно вернуть к исходному состоянию, нажав правую кнопку мыши и выбрав пункт **Revert Peak to Original Method**.

Примечание. В поле **Calculated Concentration** в **Results Table** отражаются любые изменения, произошедшие в результате аппроксимации кривой к точкам стандарта.

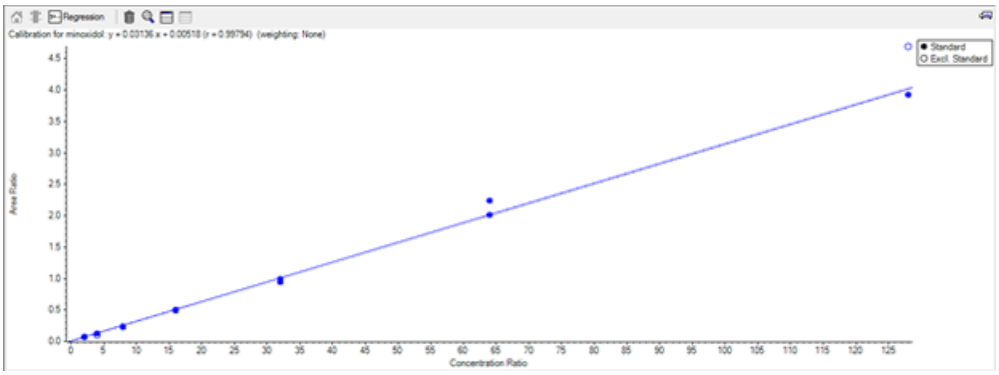
Изменение калибровочной кривой

1. Для просмотра калибровочной кривой нажмите на значок **Show Calibration Curve**.
2. Чтобы добавить условные обозначения, нажмите правой кнопкой мыши на панели **Calibration** и выберите пункт **Show Legend**.
3. Чтобы добавить на график кривой результаты КК, еще раз нажмите правой кнопкой мыши на панели **Calibration** и выберите пункт **Show QCs**.

Совет! Чтобы исключить точку из графика кривой, нажмите правой кнопкой мыши на кривой и выберите пункт **Exclude**.

4. Чтобы подтвердить или изменить параметры регрессии для отдельного аналита, выберите аналит на панели **Components and Group**, а затем нажмите кнопку **Regression** на панели инструментов.
5. Для лучшей подгонки калибровочной кривой нужно исключить вторую пробу STD 2 (концентрация 4,00 нг/мл) и первую пробу STD 7 (концентрация 128,00 нг/мл). Для удаления образцов используйте столбцы **Actual Concentration** и **Used**. Снимите флажок в столбце Used, чтобы удалить точку с графика кривой. Теперь калибровочная кривая должна выглядеть, как показано на рисунок 14-15.

Рисунок 14-15 Калибровочная кривая с исключенными образцами

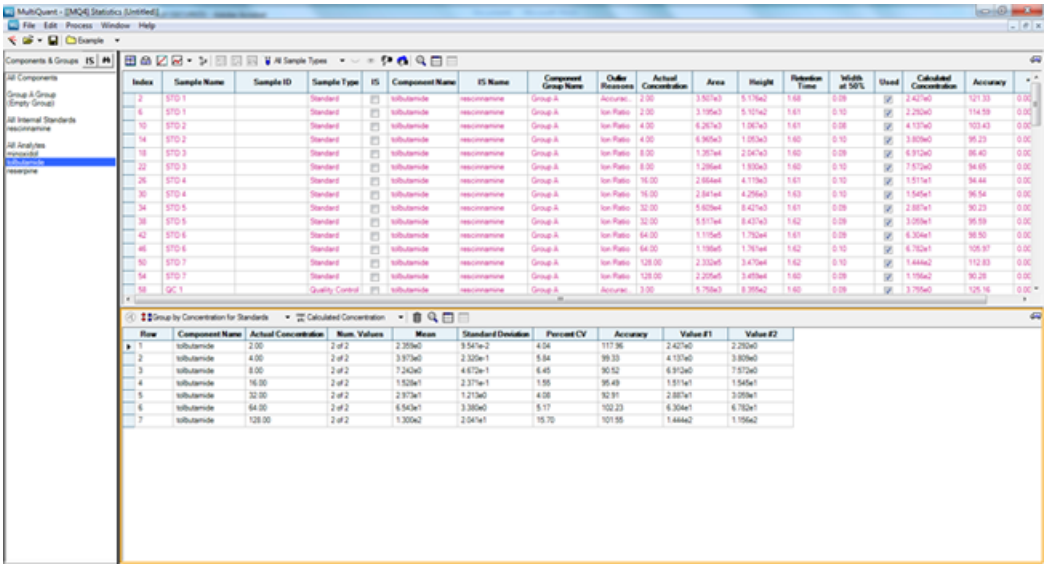


Просмотр статистических данных образцов

Можно просматривать статистические данные для одной Results Table. Анализ результатов интегрирования пиков, калибровочной кривой и статистических данных образцов представляет собой итерационный процесс.

1. Открыв Results Table, нажмите на значок **Show Statistics Table**.

Рисунок 14-16 Statistics Table (Таблица статистических данных)



2. Из списка **Sample Grouping** выберите способ группирования образцов (для данного аналита) для расчета статистических данных.
3. Выберите столбец **Value #1**.

Примечание. Для функции **Group by Concentration for Standards and QCs** используются значения **Displayed Actual Concentration**, а не значения **Actual Concentration**, сохраненные в Results Table. Если концентрация образца Std 1 составляет 0,001, концентрация Std 2 — 0,005, а в качестве формата отображения концентрации задано значение 0, то образцы Std 1 и Std 2 группируются вместе, поскольку они оба считаются имеющими нулевую концентрацию. Чтобы сгруппировать их по отдельности, задайте в диалоговом окне **Column Settings** для параметра **Analyte Concentration** точность 0,000. Если концентрация образца Std 1 равна 0,500, а концентрация образца Std 2 — 0,499, чтобы сгруппировать их вместе, установите значение точности 0,00. См. Изменение отображаемых в Results Table столбцов на стр. 108.

4. Выберите пункт из списка **Metric**, чтобы задать фактические показатели, которые будут использоваться для расчета статистических данных.
5. Просмотрите столбцы **Value**. Зачеркнутые данные обозначают исключенные измерения.

Алгоритмы интегрирования

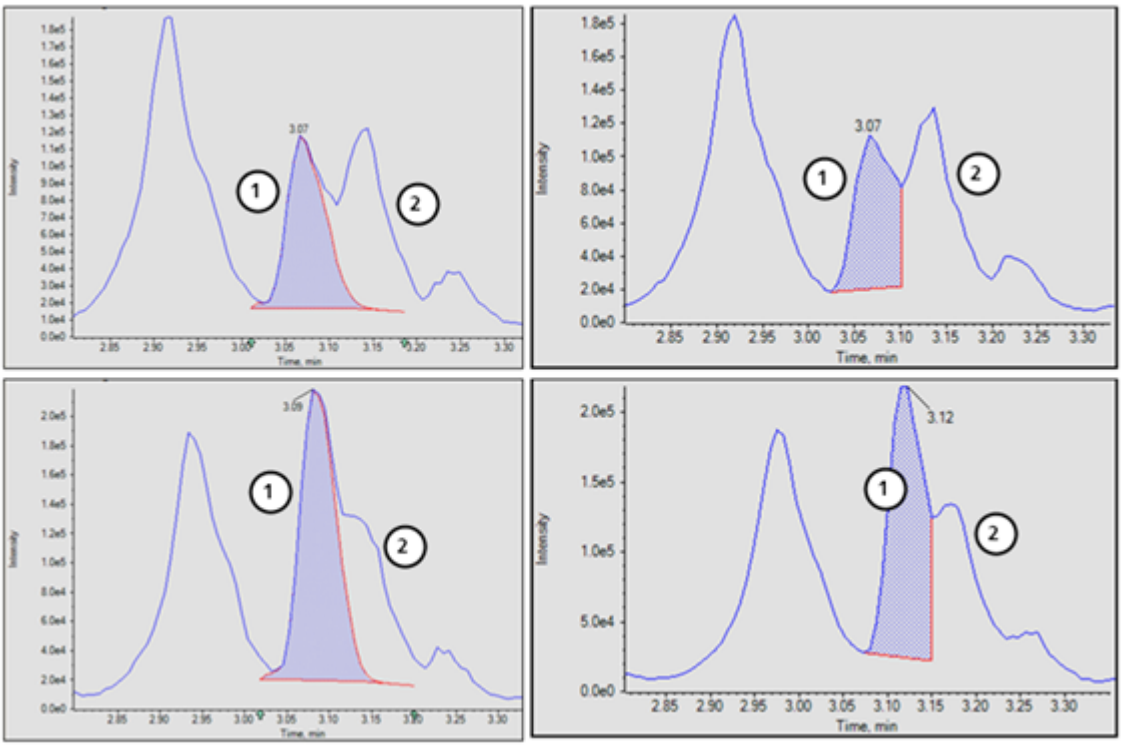
В этом разделе описаны различные параметры, доступные для каждого алгоритма.

Об алгоритме интегрирования SignalFinder

Тесно элюирующие пики

Алгоритм SignalFinder™ обеспечивает более точное представление площади для пиков, элюирующих близко друг к другу. На рисунок 14-17 приведен пример того, как алгоритмы интегрирования MQ4 (график справа) и SignalFinder (график слева) обрабатывают тесно элюирующие пики. В данном примере фоновый пик (пункт 2) создает помехи исследуемому пику (пункт 1). Поскольку пик интерференции появляется либо от ЖК, либо от матрицы, он относительно постоянный по всему пакету. Однако интенсивность пика анализируемого вещества повышается с повышением концентрации анализируемого вещества, что приводит к появлению сильно изменяющихся комбинированных форм пиков. Алгоритм интегрирования SignalFinder, основанный на модели пиков, задаваемой пользователем, может последовательно идентифицировать нужный пик при всех уровнях концентрации, тогда как алгоритм интегрирования MQ4 может только нанести вертикальную линию от провала на кривой до базовой линии. Это интегрирует только неполный пик, который вносит ошибки в площади пика.

Рисунок 14-17 Тесно элюирующие пики



Элемент	Описание
1	Исследуемый пик
2	Совместно элюирующий фоновый пик

Пики с растянутыми краями

Для пиков с растянутыми краями предыдущие алгоритмы часто непоследовательно выбирают время удерживания, при котором пик оканчивается. В зависимости от истинной природы шума в данной области два пика, которые выглядят одинаково, могут иметь разные зарегистрированные вершины. Обычно процедуру интегрирования можно сделать более единообразной путем настройки параметров обнаружения пика. Однако это трата времени и сил. При использовании моделирования интегрирование обрезается, если модель становится ниже порога, поэтому оно значительно менее подвержено влиянию шума.

Насыщенные пики

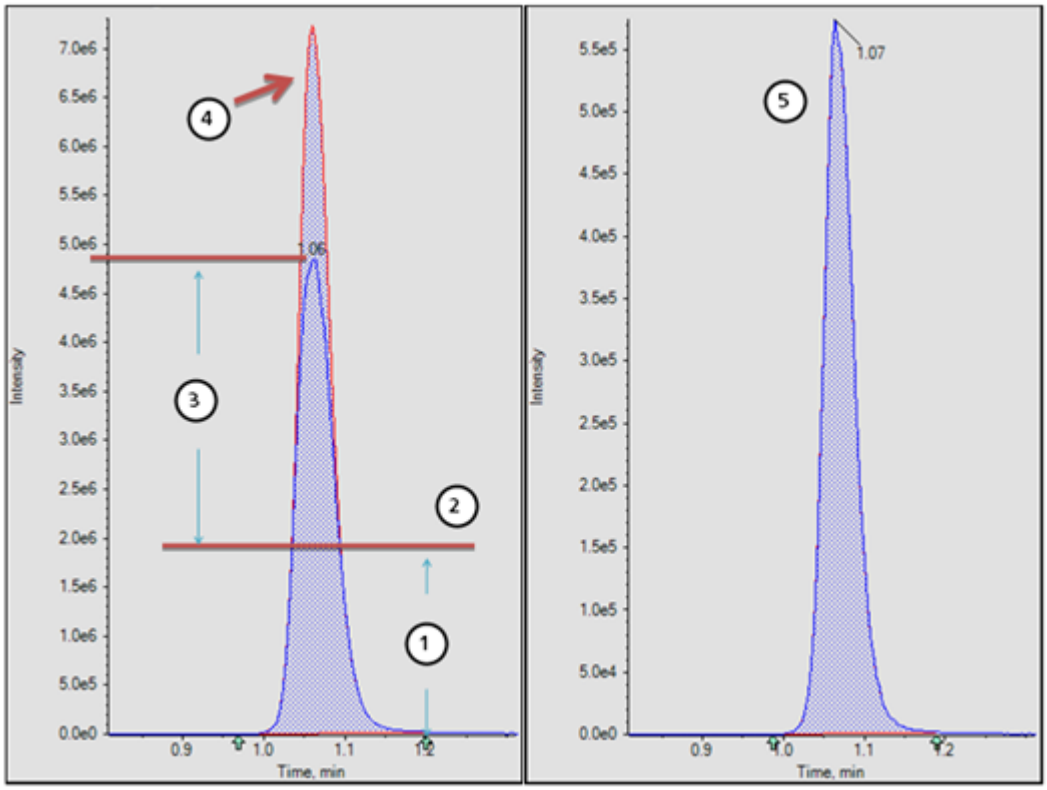
Когда алгоритм определяет, что пик насыщен, он использует модель, чтобы прогнозировать возможный вид пика, если детектор не насыщен. Он отображается в виде красного контура, превышающего вершину пика и аппроксимирующего ответ, который должен был бы получиться, если бы не было насыщения детектора. Эта функция корректирует только

насыщение детектора, а не насыщение источника ионов или насыщение колонки. рисунок 14-18 показывает пример коррекции насыщения.

Перед использованием алгоритма SignalFinder™ выберите ненасыщенный образец для построения модели пика, затем укажите порог насыщения до значения, которое соответствует детектору. В данном примере используется порог насыщения, равный 1,8E+006 имп/с. Алгоритм соотносит оставшуюся ненасыщенную часть пика (менее 1,8E+006 имп/с) с моделью пика. Затем на основании выбранной модели пика с помощью алгоритма прогнозируется оставшаяся часть пика, обозначенная красным контуром.

Примечание. Порог насыщения зависит от ряда факторов, включая тип детектора, срок службы детектора и рассматриваемое соединение. Для получения оптимальных результатов порог насыщения должен быть настроен надлежащим образом.

Рисунок 14-18 Корректировка насыщения детектора



Элемент	Описание
1	Ненасыщенная часть (соответствует модели пика)
2	Порог 1,8e6 имп/с
3	Насыщенная порция

Элемент	Описание
4	Скорректированный контур пика
5	Модель пика

Примечания по использованию

При некоторых рабочих процессах отсутствует типичных образец, который содержит все рассматриваемые компоненты. Например, при разработке лекарственного препарата пользователи могут осуществлять поиск метаболитов, полученных при окислении, добавляя +16 к массе Q1 исходного лекарственного вещества и +0 или +16 к массе Q3. Эти метаболиты обычно представлены для некоторых образцов, но не обязательно в образце, выбранном в качестве модели, использованной для создания метода количественного анализа. В этой ситуации алгоритм SignalFinder™ будет использовать модель по умолчанию, если для данного MRM-перехода отсутствует надлежащий пик в типичном образце. Во многих случаях данная модель по умолчанию будет достаточно точной. При этом также возможно создание новой модели во время последующего просмотра пиков с помощью образца, который содержит надлежащий пик.

SignalFinder™: параметры алгоритма интегрирования

Для идентификации исследуемого пика и отчета о нем используются указанные ниже параметры. Полный список доступных параметров см. в разделе Параметры алгоритма интегрирования на стр. 139.

Use Saturation Correction (Использовать поправку на насыщение)

Данная опция доступна только при применении значений, принятых по умолчанию, ко всему алгоритму и не во время создания метода количественного анализа или просмотра отдельного пика, поскольку не рекомендуется использовать данную настройку только для некоторых пиков.

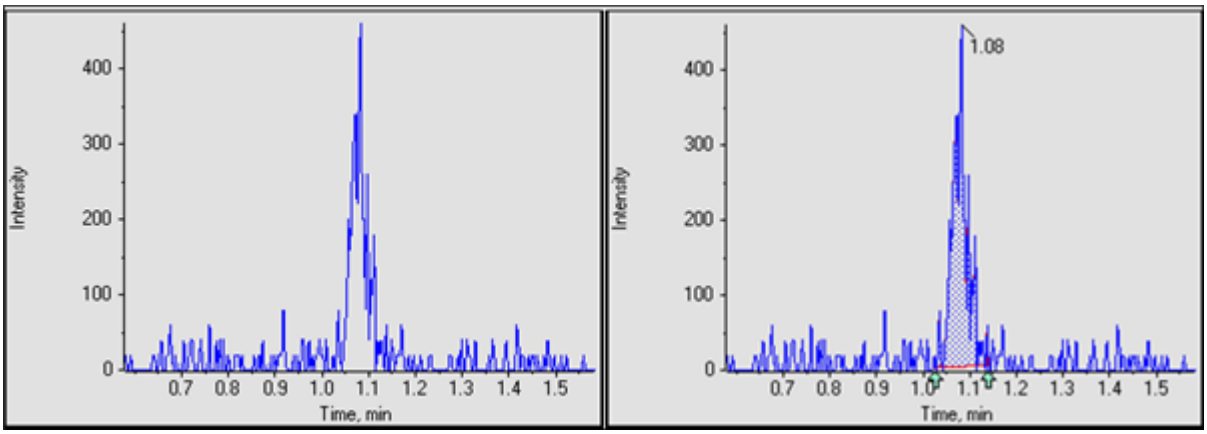
Saturation Threshold (Порог насыщения)

Пики, превышающие данный порог, считаются насыщенными. Это значение зависит от типа детектора.

S/N Threshold (Порог отношения «сигнал/шум»)

См. рисунок 14-19; если для порога отношения «сигнал/шум» задано значение 7 (слева), пик не включается в отчет. Если для порога отношения «сигнал/шум» задано значение 2 (справа), пик включается в отчет. Данный параметр не влияет на интегрирование.

Рисунок 14-19 Порог отношения «сигнал/шум»



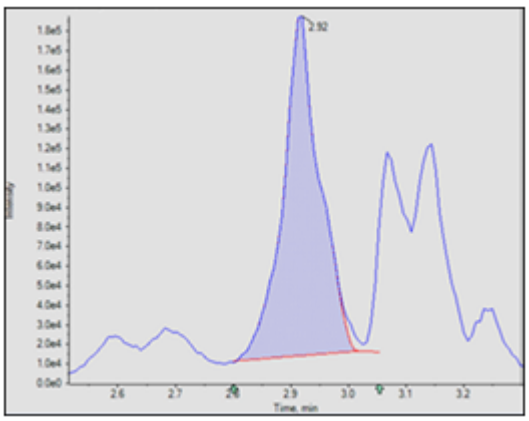
Confidence Threshold (Доверительный уровень)

Данный параметр используется для фильтрации возможных ложноположительных пиков. По умолчанию это значение составляет 50 %, что обычно подходит для большинства случаев. Однако если данные очень зашумлены или ширина пика значительно колеблется от образца к образцу, может понадобиться использовать большее значение.

Рисунки рисунок 14-20 и рисунок 14-21 иллюстрируют влияние параметра **Confidence Threshold** на количество распознаваемых пиков. Если для параметра **Confidence Threshold** установлено значение 50 %, пик с небольшим плечом распознается как один пик. Если значение параметра **Confidence Threshold** снижено до 16 %, алгоритм SignalFinder™ распознает два пика. Перемещайтесь по области двух пиков, чтобы просмотреть два пика.

Чтобы обнаружить другие пики, которые могут присутствовать на этом одиночном пике, если неизвестно нужное значение **Confidence Threshold**, нажмите клавишу **Ctrl** и, удерживая ее, перемещайтесь по области исследуемого пика. Это автоматически снижает **Confidence Threshold** и позволяет обнаружить второй искомый пик, который отсутствует при **Confidence Threshold** 50 %.

Рисунок 14-20 Доверительный уровень 50%



При доверительном уровне 16% обнаруживаются два пика. Перемещайтесь по области пика, чтобы выявить два пика.

Рисунок 14-21 Доверительный уровень 16%

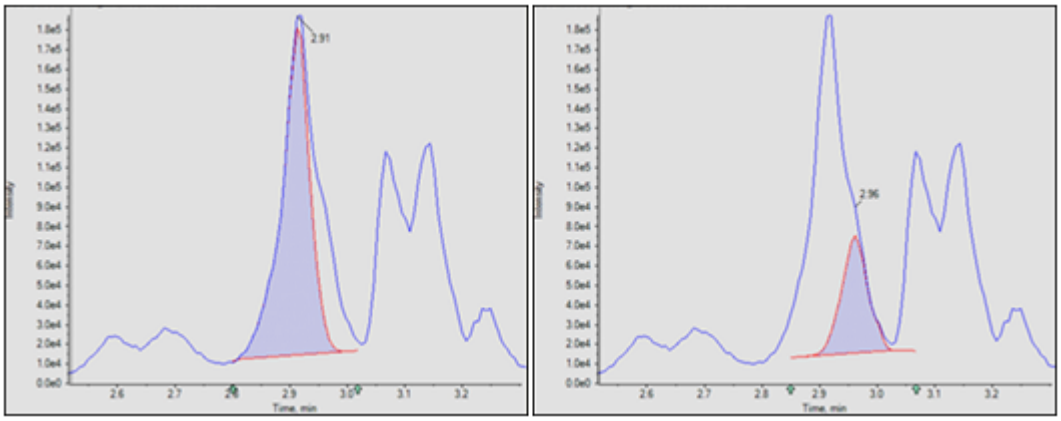
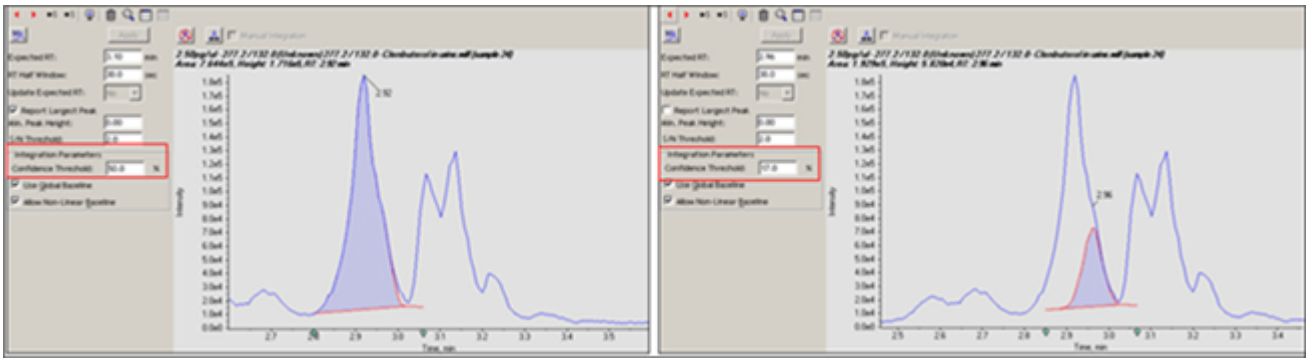


Рисунок 14-22 Значение доверительного уровня

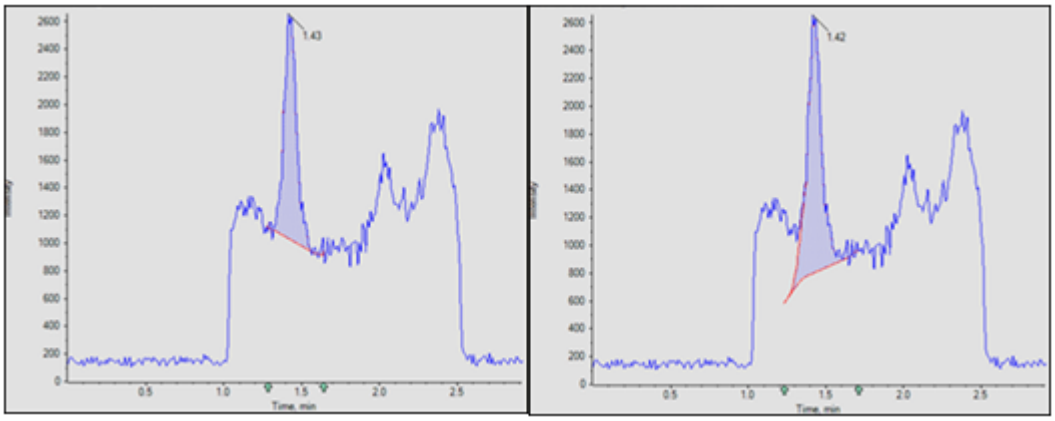


Use Global Baseline (Использовать общую базовую линию)

При выборе данного параметра в качестве базовой линии будет использоваться вся хроматограмма. Если этот параметр не выбран, программа количественного анализа будет оценивать изменения базовой линии локально. На рисунок 14-23 показан пример, когда следует выбрать локальную базовую линию.

На левом графике представлена хроматограмма, которая была интегрирована надлежащим образом с помощью локальной базовой линии. На правом графике изображена та же хроматограмма, интегрированная ненадлежащим образом с помощью общей базовой линии.

Рисунок 14-23 Use Global Baseline (Использовать общую базовую линию)



Allow Non-Linear Baseline (Разрешение использовать нелинейную базовую линию)

Опция Allow Non-Linear Baseline позволяет сделать выбор между линейной и нелинейной базовой линией. При установке нелинейной базовой линии базовая линия оценивается под каждым пиком. Линейная базовая линия соответствует линии между точками в начале и в конце этой определенной группы пиков. На рисунок 14-24 и рисунок 14-25 приведены примеры линейной и нелинейной базовых линий для совместно элюирующих пиков. Позиции от 1 до 4 являются сплетенными пиками.

Нелинейная базовая линия рекомендуется для нескольких пиков. Для одного пика различие между линейной и нелинейной базовой линией незначительно.

Рисунок 14-24 Пример линейной базовой линии

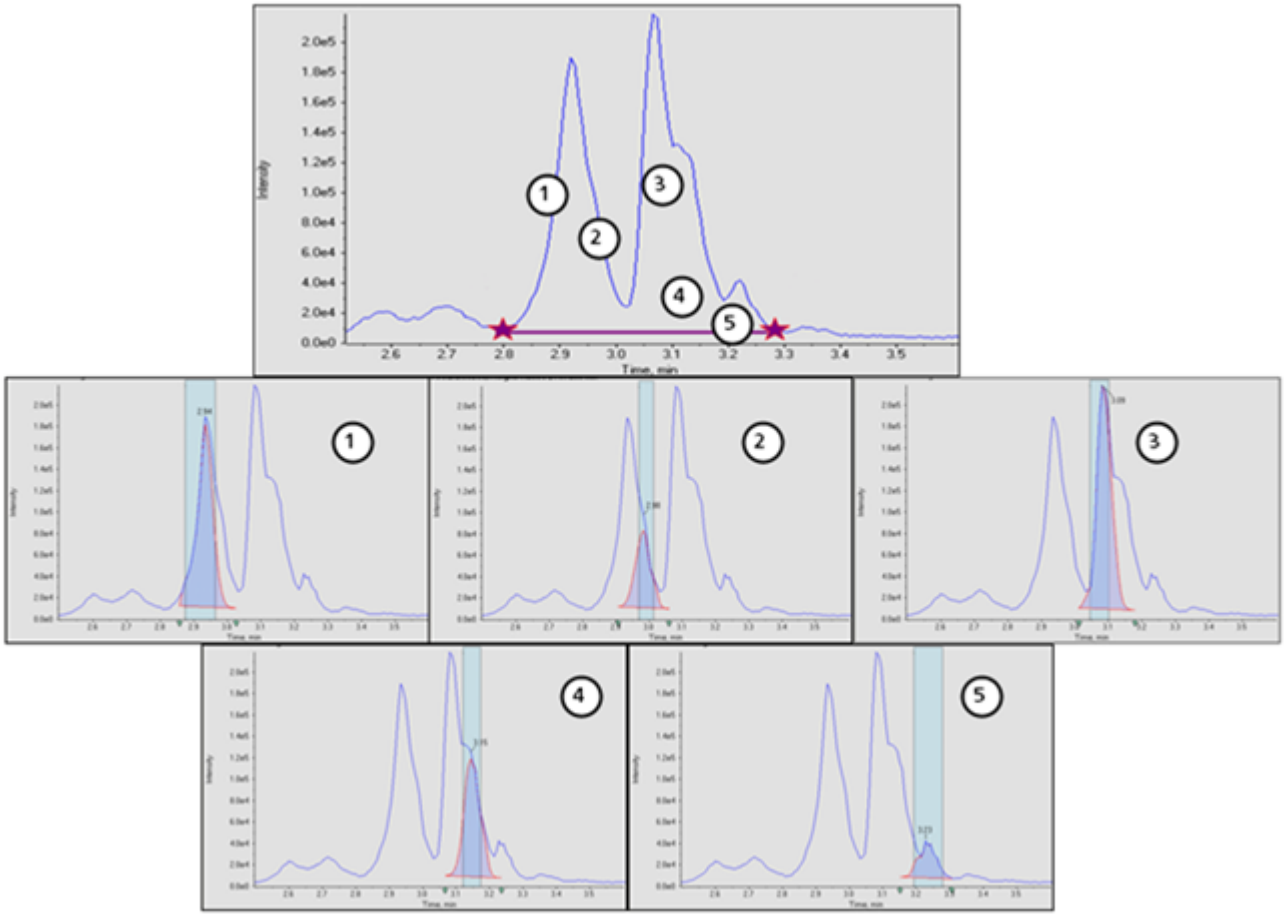
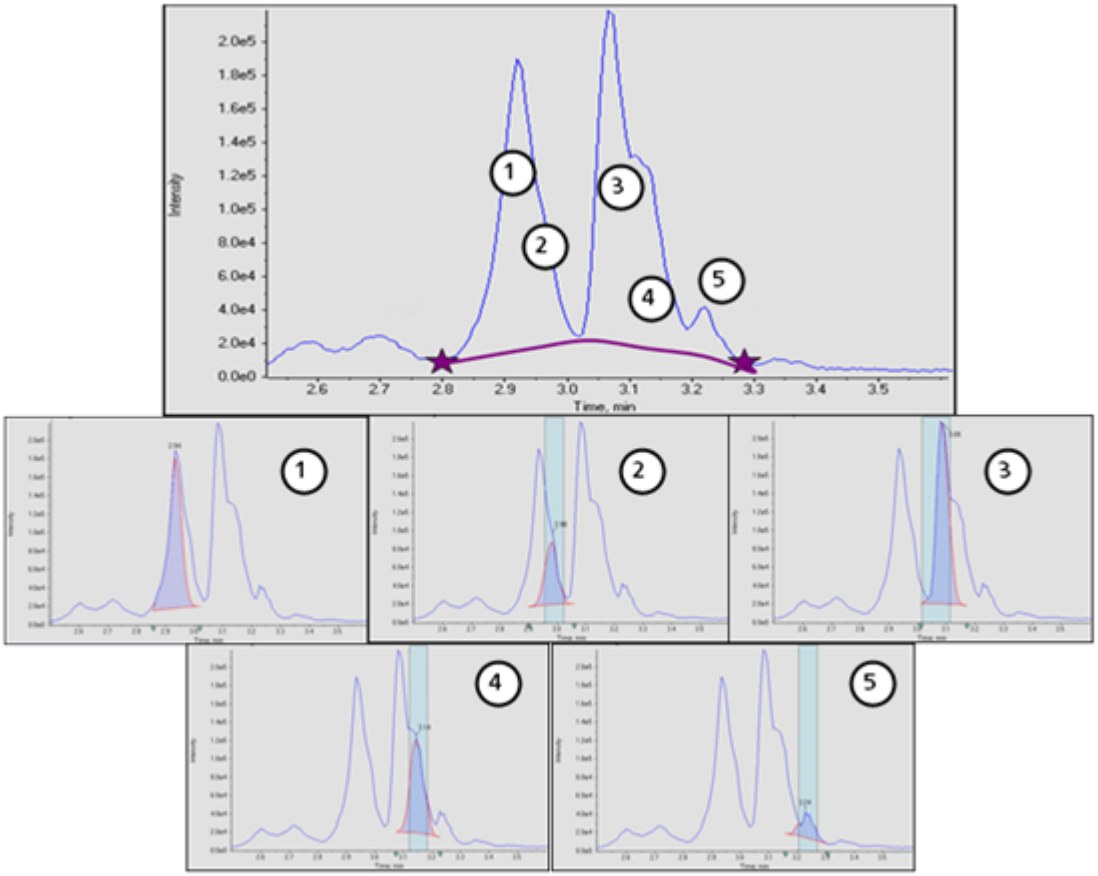


Рисунок 14-25 Пример нелинейной базовой линии



Советы по использованию алгоритма интегрирования SignalFinder™

- Объединяйте два пика: иногда алгоритм интегрирования SignalFinder детектирует два пика. Чтобы объединить два пика, нажмите клавишу **Ctrl** и перемещайтесь по области двух пиков. Программа пытается объединить пики с помощью уменьшения чувствительности свертки, пока два пика находятся на большом расстоянии друг от друга.
- Изменение времени начала и окончания пика: чтобы изменить время начала и окончания пика при создании **Results Table** или во время просмотра пика, перемещайте стрелки начала и окончания пика.

Примечание. Можно изменить стрелки начала и окончания только в разумных пределах.

Параметры алгоритма интегрирования MQ4

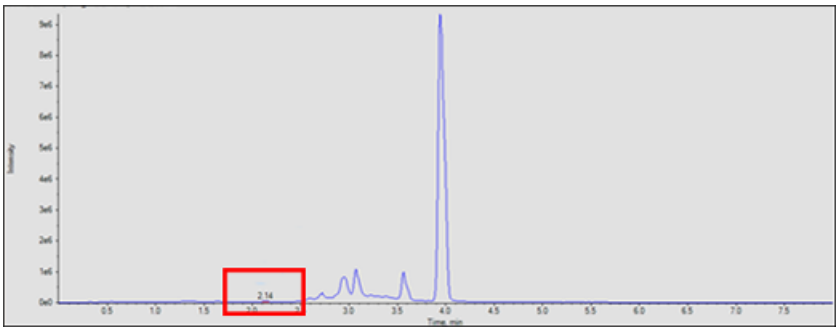
Для идентификации исследуемого пика и отчета о нем используются указанные ниже параметры. Полный список доступных параметров см. в разделе Параметры алгоритма интегрирования на стр. 139.

Noise Percentage (Процентная доля шума)

Данный параметр используется для оценки уровня шума на хроматограммах. Указанный процент точек измерений с наименьшей интенсивностью рассматривается как шум.

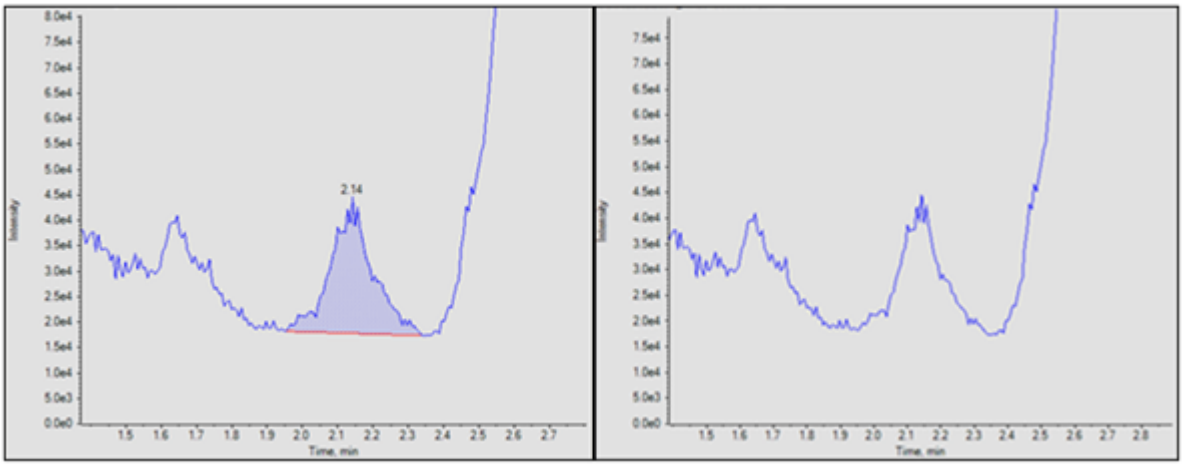
Типичные значения варьируют от 20 до 60 %. Если маленькие пики в присутствии более высоких не обнаруживаются, данное значение необходимо снизить. рисунок 14-26 - пример наличия малого пика в присутствии чрезвычайно большого пика. Этот пик не обнаруживается, когда для процентной доли шума установлено значение 90 %, но обнаруживается, когда для этого параметра установлено значение 40 %.

Рисунок 14-26 Изучаемый пик



На рисунок 14-27 слева задана процентная доля шума 40 %. Процентная доля шума справа равна 90%.

Рисунок 14-27 Уровни шума

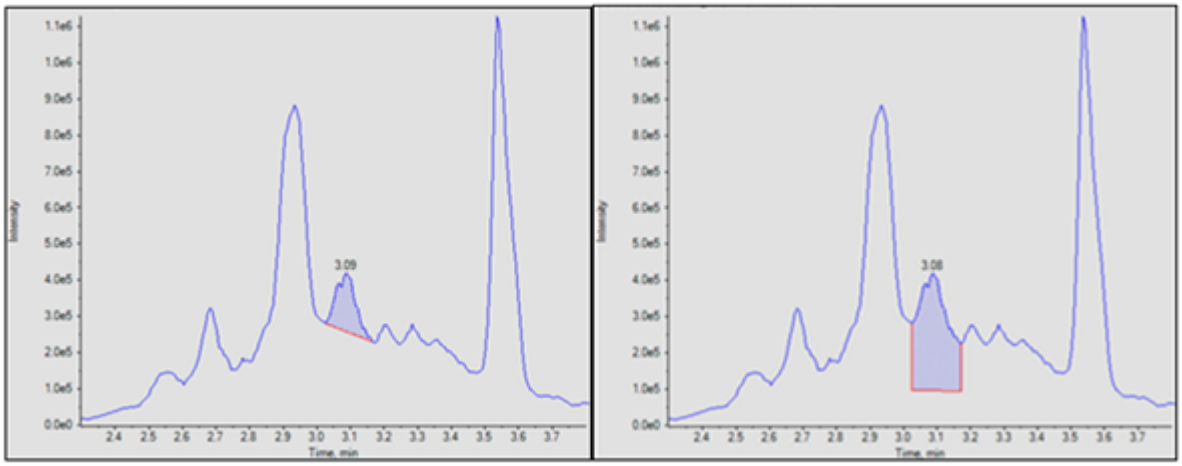


Окно Baseline Subtraction (вычитание базовой линии)

Прежде чем приступить после сглаживания к другой процедуре обработки, из хроматограммы вычитается базовая линия, что позволяет нейтрализовать ее колебания. Для каждой точки измерения базовая линия рассчитывается с использованием точек измерений как слева, так и справа от текущей точки с минимальной интенсивностью (в пределах окна вычитания).

Точность значения данного параметра не является критическим фактором, при условии что оно устанавливается по крайней мере в несколько раз большим, чем ожидаемая ширина пика.

Рисунок 14-28 Окно Baseline Subtraction (вычитание базовой линии)



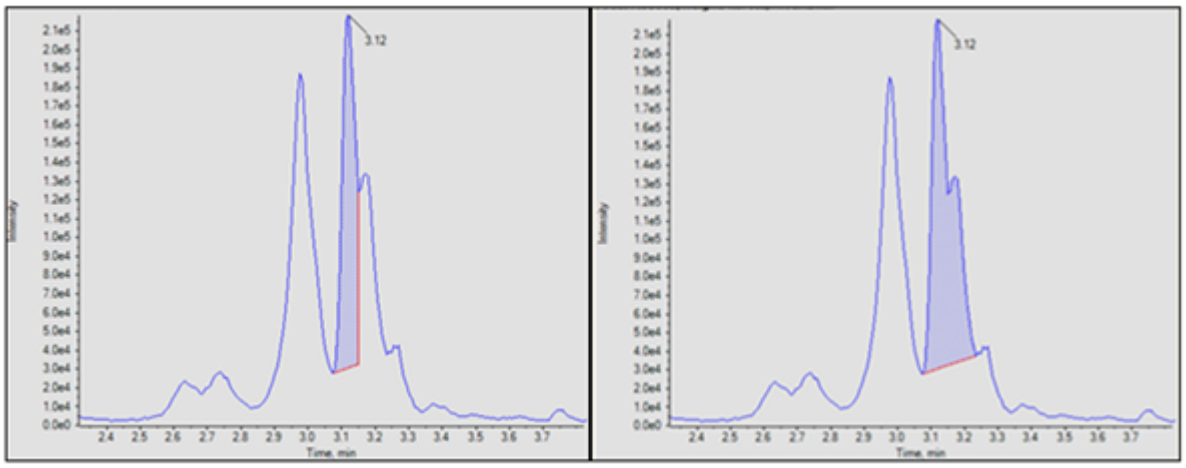
Peak Splitting (Разделение пиков)

Данный параметр определяет, обнаруживается ли потенциально зашумленный пик в виде единичного пика или в виде двух (и более) отдельных пиков. Если провал между двумя потенциальными пиками меньше указанного значения, регистрируется единичный пик. В противном случае регистрируются два пика.

При установке для этого параметра большего значения зашумленные пики не будут разделены и зарегистрированы в виде двух отдельных пиков. Однако при наличии двух тесно элюирующих (перекрывающихся) отдельных пиков необходимо использовать меньшее значение.

Рисунок слева иллюстрирует разделение пиков, для которого заданы две точки. Рисунок справа иллюстрирует разделение пиков, для которого заданы три точки.

Рисунок 14-29 Разделение пиков



Дополнительные задачи

В этом разделе содержатся дополнительные задачи, которые можно использовать для оптимизации анализа данных.

Создание графиков измерений

Используйте функцию **Metric Plot**, чтобы построить график зависимости значений из столбца **Results Table** от номера строки или значений в другом столбце. Эти графики значительно облегчают визуальный просмотр данных, особенно если каждая хроматограмма не будет в обязательном порядке просматриваться вручную с помощью панели **Peak Review**.

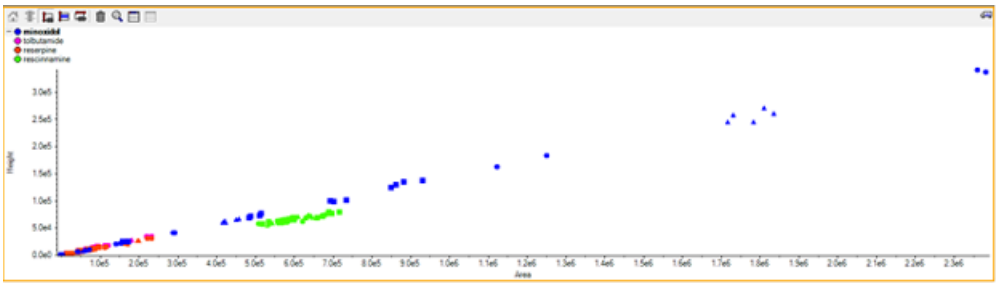
Примечание. Для графиков измерений используются те же формулы регрессии, что и для калибровочных кривых. Для графиков измерений имеются две дополнительные формулы: для расчета среднего значения и медианы.

1. Откройте **Results Table**.
2. Выберите один или два столбца, а затем нажмите на значок **Metric Plot**. Для этого примера выберите столбец **IS Area**.

   Если выбран один столбец, на результирующим графике будут отображаться значения из столбца как функция от номера строки в таблице. При выборе двух столбцов значения из одного столбца откладываются относительно значений из другого столбца. Первый из двух выбранных столбцов содержит значения по оси x, а второй — значения по оси y.

3. Нажмите правой кнопкой мыши в окне графика и выберите пункт **Show Legend**, чтобы просмотреть пояснение к используемым на графике обозначениям.

Рисунок 14-30 Metric Plot (График измерений)



Создание пользовательских столбцов

1. При открытой и активной **Results Table** нажмите правую кнопку мыши и выберите пункт **Add Custom Column**.

   В конце таблицы добавится столбец.
2. В диалоговом окне **Custom Column Name** введите название столбца.
3. Нажмите **OK**.

О файлах метода количественного анализ и встроенных методах

Методы количественного анализа можно создать следующими способами:

- использовать **Quantitation wizard**;
- изменить существующий метода в **Quantitation wizard**, установив флажок **Edit**;
- открыть и изменить существующий метод количественного анализа.

Методы количественного анализа сохранены в папке **Quantitation Method**.

Когда **Results Table** создана, метод количественного анализа, использовавшийся для ее создания, встраивается в **Results Table**. Однако при редактировании встроенного метода количественного анализа любые вносимые в него изменения будут применены только к встроенному методу в **Results Table**, а не к методам, сохраненным в папке **Quantitation Method**.

Совет! Этот измененный встроенный метод можно экспортировать для последующего использования.

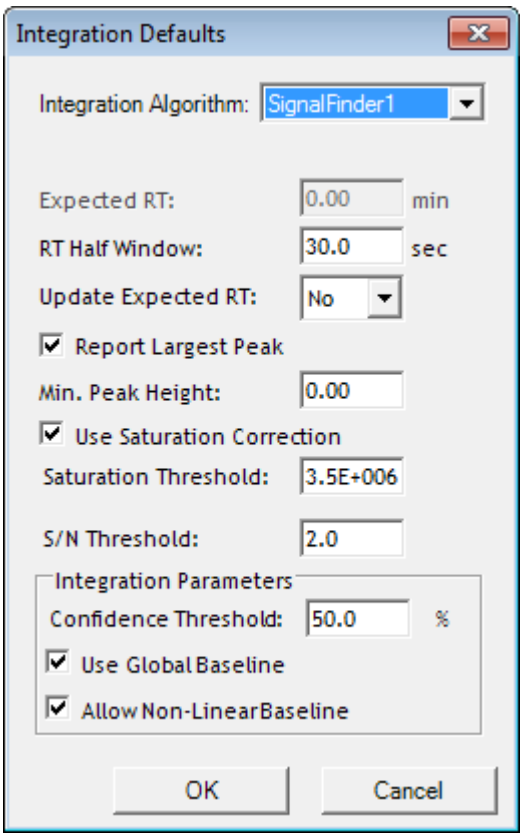
Параметры алгоритма интегрирования

A

Параметры алгоритма интегрирования SignalFinder

В программе SignalFinder™ строит модель пика, используя выбранный образец, при создании нового метода количественного анализа. Эта модель описывает форму выбранного пика, используемого для проверки алгоритма.

Рисунок A-1 Диалоговое окно Integration Defaults (Настройки параметров интегрирования по умолчанию)



Обозначение	Описание
Integration Algorithm (Алгоритм интегрирования)	Выбранный алгоритм интегрирования.
Expected RT (Ожидаемое время удерживания)	Ожидаемое время удерживания в минутах. Оно первоначально устанавливается на время удерживания самого большого пика в хроматограмме для репрезентативного образца, использованного для метода количественного анализа. Это нередактируемое поле. Значение в нем обновляется в зависимости от соединения в методе количественного анализа.
RT Half Window (Половина диапазона времени удерживания)	Половина диапазона общего времени удерживания в секундах. Чтобы обнаружить и зарегистрировать пик, разность между вершиной и ожидаемым временем удерживания должна быть меньше или равна данному значению.

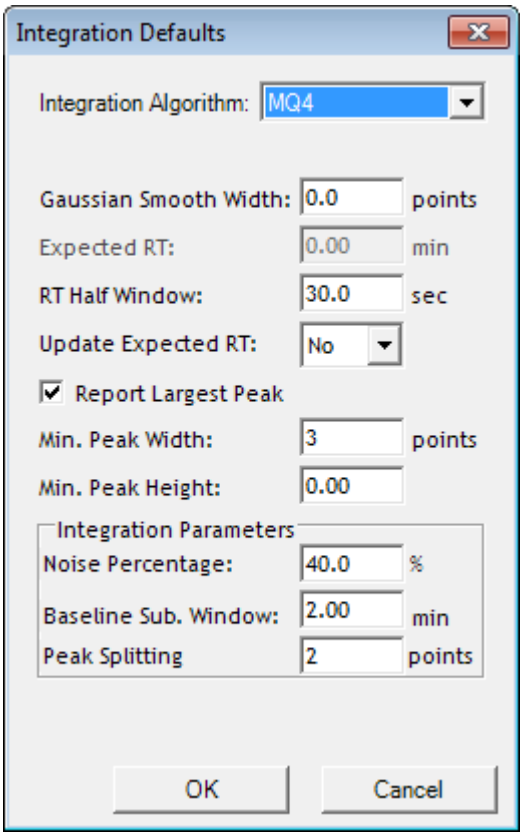
Обозначение	Описание
Update Expected RT (Изменить ожидаемое время удерживания)	Указывает необходимость корректирования ожидаемого времени удерживания в процессе работы, используя другие компоненты. Обеспечивает использование дополнительной информации, чтобы компенсировать сдвиги во времени удерживания от образца к образцу. Варианты выбора: • **No** (Нет): ожидаемое время удерживания используется как есть. • **Group** (Группа): применима для компонентов, которые назначены группам, для которых все компоненты для данной группы имеют одинаковое время удерживания (это означает разные переходы для одного и того же вещества). Ожидаемое время удерживания обновляется при помощи изменения положения максимального перекрытия отдельных хроматограмм для группы (для данного образца) в окне данных времени удерживания. Идея заключается в том, чтобы уравнять ожидаемое время удерживания с предполагаемым временем удерживания для конкретного изучаемого компонента (когда на каждой хроматограмме ожидается появление пика). Если имеется не менее двух внутренних стандартов, определенных для группы, только их хроматограммы используются для определения нового времени удерживания. В противном случае используются все хроматограммы для группы. Цель заключается в использовании только тех хроматограмм, для которых компонент наиболее вероятно присутствует на надлежащем уровне. • **IS** (Внутренний стандарт): для анализируемых соединений, использующих внутренний стандарт, сначала определяют фактическое время удерживания пика внутреннего стандарта (для соответствующего образца). Ожидаемое время удерживания для анализируемого вещества определяется путем умножения заданного ожидаемого времени удерживания на отношение фактического времени удерживания для внутреннего стандарта к ожидаемому. Данный параметр иногда называют относительным временем удерживания. **Примечание.** Данный параметр не применяется к внутренним стандартам или анализируемым веществам, которые не используют внутренний стандарт.

Обозначение	Описание
Report Largest Peak (Включить в отчет наибольший пик)	Если на хроматограмме обнаруживается более одного пика, находящегося в диапазоне времени удерживания и удовлетворяющего требованиям к минимальной ширине и высоте, данный параметр указывает, какой пик будет включен в отчет. При установке этого флажка регистрируется пик с наибольшей площадью. Если этот флажок снят, регистрируется пик с временем удерживания, наиболее близким к ожидаемому времени удерживания. Активация данной опции рекомендуется, только если времена удерживания достаточно воспроизводимы.
Min. Peak Width (Мин. высота пика)	Данный параметр не влияет на процедуру интегрирования. Он используется только для составления отчета. Любые возможные пики с высотой меньше этого значения будут считаться не представляющими интереса и не будут использоваться.
Use Saturation Correction (Использовать поправку на насыщение)	Когда алгоритм определяет насыщение пика, используется специальная модель для прогнозирования возможного вида пика, как если бы детектор не был насыщен. В результате этого контур превысит вершину пика, чтобы аппроксимировать ответ, который был бы получен при отсутствии насыщения детектора. При этом может быть превышен линейный динамический диапазон калибровочных кривых. Данная опция доступна только при применении значений, принятых по умолчанию, ко всему алгоритму и не во время создания метода количественного анализа или просмотра отдельного пика, поскольку не рекомендуется использовать данную настройку только для некоторых пиков.
Saturation Threshold (Порог насыщения)	Пики, превышающие данный порог, считаются насыщенными. Это значение зависит от типа детектора.
S/N Threshold (Порог отношения «сигнал/шум»)	Данный параметр не влияет на процедуру интегрирования. Он используется только для составления отчета. Пики, которые ниже данного порога, не включаются в отчет.
Confidence Threshold (Доверительный уровень)	Используется для фильтрации возможных пиков, которые являются ложноположительными. По умолчанию это значение составляет 50 %, что обычно подходит для большинства случаев. Однако можно использовать большее значение для очень зашумленных данных или для данных, для которых ширина пика имеет значительную вариабельность от образца к образцу.

Обозначение	Описание
Use Global Baseline (Использовать общую базовую линию)	При выборе данного параметра в качестве базовой линии будет использоваться вся хроматограмма. Если этот флажок не установлен, программа будет оценивать изменения базовой линии локально.
Allow Non-Linear Baseline (Разрешение использовать нелинейную базовую линию)	Позволяет сделать выбор между линейной и нелинейной базовой линией. При установке нелинейной базовой линии базовая линия оценивается под каждым пиком. Линейная базовая линия соответствует линии между точками в начале и в конце этой определенной группы пиков.

Параметры алгоритма интегрирования MQ4

Рисунок A-2 Диалоговое окно Integration Defaults (Настройки параметров интегрирования по умолчанию)



Обозначение	Описание
Integration Algorithm (Алгоритм интегрирования)	Выбранный алгоритм интегрирования.
Gaussian Smoothing Width (Ширина гауссовского сглаживания)	Применяется стандартный алгоритм гауссовского сглаживания с определенным значением половины ширины полосы (в точках). Для зашумленной хроматограммы значение, близкое к фактической ширине пика (на уровне половины высоты), является хорошим результатом. Для менее зашумленных данных можно использовать меньшее значение.
Expected RT (Ожидаемое время удерживания)	Ожидаемое время удерживания, в минутах. Оно первоначально устанавливается на время удерживания самого большого пика в хроматограмме для репрезентативного образца, использованного для метода количественного анализа.
RT Half Window (Половина диапазона времени удерживания)	Половина диапазона общего времени удерживания в секундах. Чтобы обнаружить и зарегистрировать пик, разность между вершиной и ожидаемым временем удерживания должна быть меньше или равна данному значению.

Обозначение	Описание
Update Expected RT (Изменить ожидаемое время удерживания)	Указывает необходимость корректирования ожидаемого времени удерживания в процессе работы, используя другие компоненты. Обеспечивает использование дополнительной информации, чтобы компенсировать сдвиги во времени удерживания от образца к образцу. Варианты выбора: • **No** (Нет): ожидаемое время удерживания используется как есть. • **Group** (Группа): применима для компонентов, которые назначены группам, для которых все компоненты для данной группы имеют одинаковое время удерживания (это означает разные переходы для одного и того же вещества). Ожидаемое время удерживания обновляется при помощи изменения положения максимального перекрытия отдельных хроматограмм для группы (для данного образца) в окне данных времени удерживания. Идея заключается в том, чтобы уравнять ожидаемое время удерживания с предполагаемым временем удерживания для конкретного изучаемого компонента (когда на каждой хроматограмме ожидается появление пика). Если имеется не менее двух внутренних стандартов, определенных для группы, только их хроматограммы используются для определения нового времени удерживания. В противном случае используются все хроматограммы для группы. Цель заключается в использовании только тех хроматограмм, для которых компонент наиболее вероятно присутствует на надлежащем уровне. • **IS** (Внутренний стандарт): для анализируемых соединений, использующих внутренний стандарт, сначала определяют фактическое время удерживания пика внутреннего стандарта (для соответствующего образца). Ожидаемое время удерживания для анализируемого вещества определяется путем умножения заданного ожидаемого времени удерживания на отношение фактического времени удерживания для внутреннего стандарта к ожидаемому. Данный параметр иногда называют относительным временем удерживания.
Report Largest Peak (Включить в отчет наибольший пик)	Если на хроматограмме обнаруживается более одного пика, находящегося в диапазоне времени удерживания и удовлетворяющего требованиям к минимальной ширине и высоте, данный параметр указывает, какой пик будет включен в отчет. При установке этого флажка регистрируется пик с наибольшей площадью. Если этот флажок снят, регистрируется пик с временем удерживания, наиболее близким к ожидаемому времени удерживания. Активация данной опции рекомендуется, только если времена удерживания достаточно воспроизводимы.

Обозначение	Описание
Min. Peak Width (Мин. высота пика)	Данный параметр не влияет на процедуру интегрирования. Он используется только для составления отчета. Любые возможные пики с высотой меньше этого значения будут считаться не представляющими интереса и не будут использоваться.
Min. Peak Width (Мин. ширина пика)	Любые потенциальные пики, которые уже, чем данное значение, рассматриваются как шумы и не используются.
Noise Percentage (Процентная доля шума)	Данный параметр используется для оценки уровня шума на хроматограммах. Указанный процент точек измерений с наименьшей интенсивностью рассматривается как шум. Типичные значения варьируют от 20 до 60 %. Если маленькие пики в присутствии более высоких не обнаруживаются, данное значение необходимо снизить.
Baseline Sub. Window (Окно вычитания базовой линии)	Прежде чем приступить после сглаживания к другой процедуре обработки, из хроматограммы вычитается базовая линия, что позволяет нейтрализовать ее колебания. Для каждой точки измерения базовая линия рассчитывается с использованием точек измерений как слева, так и справа от текущей точки с минимальной интенсивностью (в пределах окна вычитания). Точность значения данного параметра не является критическим фактором, при условии что оно устанавливается по крайней мере в несколько раз большим, чем ожидаемая ширина пика.
Peak Splitting (Разделение пиков)	Данный параметр определяет, обнаруживается ли потенциально зашумленный пик в виде единичного пика или в виде двух (и более) отдельных пиков. Если провал между двумя потенциальными пиками меньше указанного значения, регистрируется единичный пик. В противном случае регистрируются два пика. Выбор для данного параметра большего значения позволит предотвратить разделение зашумленных пиков, и они не будут распознаваться как два отдельных пика. Однако при наличии двух тесно элюирующих (перекрывающихся) отдельных пиков необходимо использовать меньшее значение.

Уравнения регрессии B

В этом разделе описаны уравнения, используемые для расчета регрессионных кривых. В следующих уравнениях x обозначает концентрацию анализируемого вещества для образцов **Standard**, y обозначает соответствующую площадь или высоту пика. Точные переменные, используемые для регрессии, зависят от того, будет ли использоваться внутренний стандарт, а также от использования либо площади, либо высота пика, как показано в таблицу B-1.

Таблица B-1 Регрессионные переменные

Используется ли внутренний стандарт?	Используется ли площадь?	x	y
Да	Да	$C_a/C_{is}/DF$	A_a/A_{is}
Да	Нет	$C_a/C_{is}/DF$	H_a/H_{is}
Нет	Да	C_a/DF	A_a
Нет	Нет	C_a/DF	H_a

где:

- C_a = фактическая концентрация аналита
- C_{is} = концентрации внутреннего стандарта
- DF = коэффициент разбавления
- A_a = площадь пика аналита
- A_{is} = площадь пика внутреннего стандарта
- H_a = высота пика аналита
- H_{is} = высота пика внутреннего стандарта

Весовые коэффициенты

таблицу B-2 показывает, как вычисляется весовой коэффициент (w в уравнениях) для каждого из семи типов взвешивания.

Таблица B-2 Весовые коэффициенты

Weighting Type (Тип взвешивания)	Вес (w)
Нет	Всегда 1,0.
1 / x	Если $\|x\| < 10^{-5}$, то $w = 10^{5}$. Иначе $w = 1 / \|x\|$.
$1 / x^2$	Если $\|x\| < 10^{-5}$, то $w = 10^{10}$. Иначе $w = 1 / x^2$.
1 /y	Если $\|y\| < 10^{-8}$, то $w = 10^{8}$. Иначе $w = 1 / \|y\|$.
$1 / y^2$	Если $\|y\| < 10^{-8}$, то $w = 10^{16}$. Иначе $w = 1 / y^2$.
ln x	Если $x < 0$, тогда генерируется ошибка. Если $x < 10^{-5}$, то $w = \ln 10^{5}$. Иначе $w = \|\ln x\|$.
ln y	Если $y < 0$, тогда генерируется ошибка. Если $y < 10^{-8}$, то $w = \ln 10^{8}$. Иначе $w = \|\ln y\|$.

Регрессии

В этом разделе приводятся уравнения для каждого из типов регрессии. В следующих уравнениях величины x, y и w соответствуют описанию, приведенному выше. Все суммирования вычисляются по всем образцам **Standard**, за исключением тех образцов **Standard**, которые отмечены как не используемые.

Коэффициент корреляции вычисляется так:

$$r = \left(\sum w \sum wyy_c - \sum wy \sum wy_c\right) / \sqrt{\left(D_y D_{yc}\right)}$$

где:

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

yc = значение y, рассчитанное с использованием соответствующего уравнения ниже

$$D_{yc} = \sum w \sum wy_c^{\,2} - \left(\sum wy_c\right)^2$$

Линейная

Уравнение линейной калибровки имеет следующий вид:

y = mx + b

Наклон и отсекаемый отрезок вычисляются так:

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

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

где:

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

Прямая, проходящая через начало координат

Уравнение калибровочной прямой, проходящей через начало координат, имеет следующий вид:

y = mx

Наклон вычисляется как:

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

Средний коэффициент чувствительности

Калибровка со средним коэффициентом чувствительности вычисляется следующим образом:

y = mx

Это такое же уравнение, как для случая линейной регрессии через ноль. Однако наклон вычисляется по-другому:

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

Стандартное отклонение коэффициента отклика вычисляется следующим образом:

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

где:

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

Примечание. Точки, где значение x равно нулю, исключаются из суммирования.

Если некоторые точки ложатся на прямую линию, а некоторые — нет, используйте вместо линейной или квадратичной регрессии степенную регрессию, чтобы построить некую промежуточную кривую.

Квадратичная

Квадратное уравнение для калибровки:

$y = a_2x^2 + a_1x + a_0$

Полиномиальные коэффициенты вычисляются следующим образом:

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

$a_1 = b_5/b_3 - a_2b_4/b_3$

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

где:

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

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

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

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

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

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

Степенная

Калибровочное уравнение степенной функции выглядит следующим образом:

$y = ax^p$

Уравнения для линейной калибровки используются, как описано ранее, чтобы вычислить наклон (m) и отсекаемый отрезок (b), за исключением того, что x в этих уравнениях заменяется на ln x, а y заменяется на ln y. Когда это сделано, a, и p вычисляются следующим образом:

$a = e^b$

$p = m$

Если какое-либо из значений x или y отрицательно или равно нулю, появится сообщение об ошибке.

По Вагнеру

Уравнение калибровки Вагнера:

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

Уравнения для квадратичной калибровки используются, как описано ранее, чтобы вычислить $_0$, a_1, and a_2, за исключением того, что x в этих уравнениях заменяется на ln x, а y заменяется на ln y.

Если какое-либо из значений x или y отрицательно или равно нулю, появится сообщение об ошибке.

По Хиллу

Уравнение калибровки по Хиллу:

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

Невозможно обеспечить аналитическую функцию для вычисления a, b, c и n. Вместо этого коэффициенты определяются с помощью итерационного метода Левенберга-Марквардта.

Расчет окончательных концентраций

Этот раздел посвящен расчету конечной концентрации по уравнениям обобщенной регрессии с помощью концентрации внутреннего стандарта и коэффициента разведения, использовавшегося для исходной концентрации.

Линейная

$x = (y – b) / m$

Прямая, проходящая через начало координат, и средний коэффициент чувствительности

$x = y / m$

Квадратичная

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

- Если оба корня — положительный и отрицательный — находятся в пределах диапазона концентрации стандартов, появляется сообщение об ошибке, так как отсутствует единственное решение.
- Если один из двух корней точно находится в пределах диапазона концентрации стандартов, это значение будет зарегистрировано.
- Если оба корня меньше самого низкого значения концентрации стандарта, будет зарегистрирован положительный корень.
- Если оба корня выше самого высокого значения концентрации стандарта, будет зарегистрирован отрицательный корень.

- Если отрицательный корень меньше самого низкого значения концентрации стандарта, а положительный корень выше самого высокого значения концентрации стандарта, то отрицательный корень будет зарегистрирован в том случае, если разница между отрицательным корнем и самой низкой концентрацией стандарта меньше, чем разница между положительным корнем и самой высокой концентрацией. В противном случае будет зарегистрирован положительный корень.

Степенная

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

По Вагнеру

Аналогичное уравнение для квадратичного случая используется для основного расчета, однако x заменяется на ln x, а y заменяется на ln y.

По Хиллу

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

Отчеты C

В этом разделе описано, как использовать функцию отчета в программе для создания отформатированных отчетов по **Results Table**.

Создание отчетов

В качестве готовых шаблонов программа использует документы Microsoft Word. При создании отчета значения извлекаются из самых последних Results Table и относящихся к ним файлов.

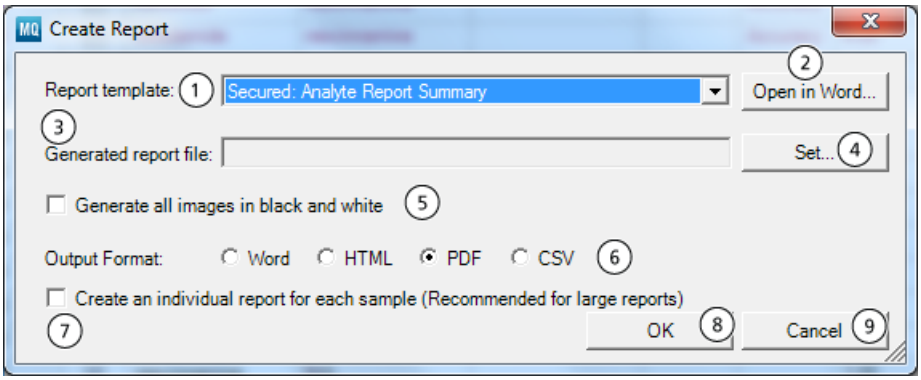
Пользователь несет ответственность за проверку пользовательских шаблонов. Пользователь может изменять формат чисел в редакторе шаблонов отчетов. Если числовой формат в шаблоне не указан, в отчете будет использоваться формат, указанный в области **Results Table Column Setting**. Убедитесь, что используется правильное количество десятичных знаков.

Контролируемыми способами вывода данных для этой программы являются экспорт **Results Table**, передача данных в ЛИС и составление отчета. Другие способы вывода данных, например копирование и вставка из **Results Table**, не являются контролируемыми. Пользователи не должны применять эти неконтролируемые методы вывода для подотчетных целей.

Для доступа к данным и их сохранения можно открыть любую папку. Предыдущие папки, из которых открывались шаблоны и в которые сохранялись отчеты, открываются по умолчанию.

1. Откройте таблицу **Results Table**.
2. Выберите пункты **File > Create Report and Save Results Table.**

Рисунок C-1 Диалоговое окно Create Report (Создать отчет)



Элемент	Описание
1	Report template (Шаблон отчета): выбор шаблона из списка.
2	Open in Word (Открыть в программе Word): эта кнопка позволяет открыть указанный шаблон отчета для проверки или редактирования непосредственно в программе Microsoft Word.
3	Generated report file (Созданный файл отчета): позволяет увидеть имя файла отчета.
4	Set (Установить): с помощью этой кнопки можно указать имя файла для создания отчета.
5	Generate all images in black and white (Создать все изображения в черно-белом формате): при установке этого флажка можно распечатать черно-белое изображение.
6	Output Format (Формат вывода): Word, Html, PDF или CSV. PDF является наиболее безопасным выходным форматом, так как в этом случае отчет не может быть изменен.
7	Create an individual report for each sample (Recommended for large reports) (Создание индивидуального отчета для каждого образца (рекомендуется для больших отчетов))
8	С помощью кнопки **OK** запускается печать отчета.
9	Кнопка **Cancel**: позволяет закрыть диалоговое окно без создания отчета.

3. Выберите шаблон из списка Report template. Шаблоны отчетов сохраняются в следующие папки:

   - Для Windows 7 и 10: C:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

   Для получения описания шаблонов см. Шаблоны отчетов на стр. 156.
4. Нажмите **Set**, чтобы задать имя и местоположение отчета.
5. Нажмите **OK**, чтобы распечатать отчет.

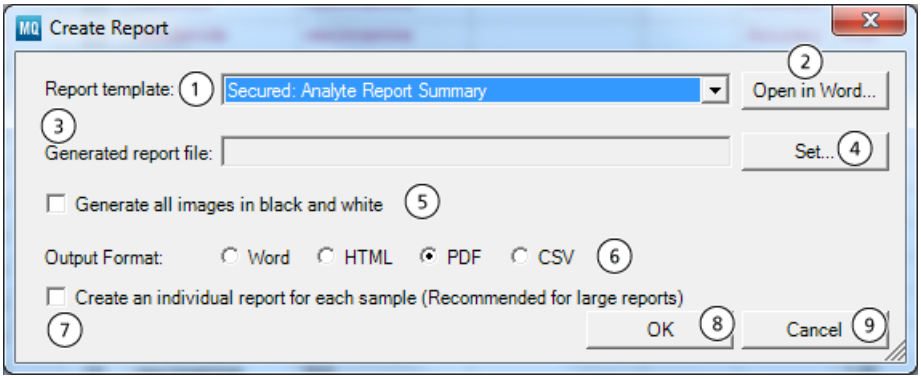
Создание пользовательских шаблонов отчетов

Контролируемыми способами вывода данных для этой программы являются экспорт **Results Table**, передача данных в ЛИС и составление отчета. Другие способы вывода данных, например копирование и вставка из **Results Table**, не являются контролируемыми. Пользователи не должны применять эти неконтролируемые методы вывода для подотчетных целей.

1. Открытие или создание **Results Table**.

2. Выберите пункты **File > Create Report and Save Results Table**.

Рисунок C-2 Диалоговое окно Create Report (Создать отчет)



Элемент	Описание
1	Report template (Шаблон отчета): выбор шаблона из списка.
2	Open in Word (Открыть в программе Word): эта кнопка позволяет открыть указанный шаблон отчета для проверки или редактирования непосредственно в программе Microsoft Word.
3	Generated report file (Созданный файл отчета): позволяет увидеть имя файла отчета.
4	Set (Установить): с помощью этой кнопки можно указать имя файла для создания отчета.
5	Generate all images in black and white (Создать все изображения в черно-белом формате): при установке этого флажка можно распечатать черно-белое изображение.
6	Output Format (Формат вывода): Word, Html, PDF или CSV. PDF является наиболее безопасным выходным форматом, так как в этом случае отчет не может быть изменен.
7	Create an individual report for each sample (Recommended for large reports) (Создание индивидуального отчета для каждого образца (рекомендуется для больших отчетов))
8	С помощью кнопки **OK** запускается печать отчета.
9	Кнопка **Cancel**: позволяет закрыть диалоговое окно без создания отчета.

3. Выберите шаблон из списка **Report template**.
4. Нажмите **Open in Word**.

   Откроется файл шаблона в формате «.docx», и справа появится редактор шаблонов Reporter. Редактор шаблонов автоматически заполняется данными тегов.

5. При необходимости отредактируйте шаблон.
6. Сохраните шаблон.

Шаблоны отчетов

В следующей таблице описаны доступные шаблоны, расположенные в папке <drive>:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

Когда создается настроенный на индивидуальные нужды пользователя шаблон, проверка шаблона входит в обязанность пользователя. Пользователь может редактировать формат чисел в редакторе шаблонов отчета. Если формат чисел не указан в шаблоне, в отчете будет использован формат, заданный в **Results Table** в настройках **Column Setting**. Пользователь несет ответственность за проверку пользовательских шаблонов отчетов.

В некоторых шаблонах отчетов используются запросы. Для оценки данных из Results Table, работы с ними и включения их в отчет пользователь может создавать запросы с помощью формул программы Microsoft Excel. Тег метаполя в шаблоне отчета содержит имя файла запроса, который должен использоваться для отчета. Для использования функции запросов в теге метаполя в шаблоне отчета должно быть указано имя файла запроса. Запросы также должны иметь расширение «.query», чтобы их можно было распознать как запросы. Запросы должны быть сохраняться в папку генератора отчетов, где хранятся шаблоны отчетов.

При использовании шаблона Reporter пользователю рекомендуется проверять получаемые результаты, особенно в тех случаях, когда в шаблоне используются запросы. Если в шаблон отчета после его валидации вносились какие-то изменения, необходимо повторно проверить шаблон отчета. Изменения, вносимые в шаблон отчета, включают любые изменения тегов генератора отчетов или запросов.

Таблица C-1 Описание шаблонов отчетов

Шаблон	Описание
Analyte Report Summary	Защищенный отчет, в котором для каждого аналита имеется сводная таблица образцов. Этот шаблон отчета подходит для таблицы результатов с указанными группами.
Calibration Curves Template	В данном отчете приведены данные о файле, таблица статистических данных (для стандартных образцов) и калибровочная кривая для аналитов; по одной странице на каждый аналит.
Metric Plot_IS Area	Защищенный отчет, в котором для каждого внутреннего стандарта имеется раздел с данными о файле и график измерений площади внутреннего стандарта.

Таблица C-1 Описание шаблонов отчетов (продолжение)

Шаблон	Описание
Per Analyte Ion Ratio Report	Защищенный отчет, в котором для каждого аналита имеется раздел с данными о файле, таблица результатов, калибровочные кривые каждого аналита и хроматограммы внутреннего стандарта и каждого аналита. Этот шаблон подходит для таблицы результатов с указанными группами.
Per Analyte Report	Защищенный отчет, в котором для каждого аналита имеется раздел с данными о файле, таблица результатов, калибровочные кривые каждого аналита и хроматограммы внутреннего стандарта и каждого аналита. Этот шаблон подходит для таблицы результатов с неуказанными группами.
Per Sample Ion Ratio Report	Защищенный отчет, в котором для каждого образца имеется раздел с данными о файле, сведения об образцах, таблица результатов измерений аналита, калибровочные кривые каждого аналита и хроматограммы внутреннего стандарта и каждого аналита. Этот шаблон подходит для таблицы результатов с указанными группами.
Per Sample Report	Защищенный отчет, в котором для каждого образца имеется раздел с данными о файле, сведения об образцах, таблица результатов измерений аналита, калибровочные кривые каждого аналита и хроматограммы внутреннего стандарта и каждого аналита. Этот шаблон подходит для таблицы результатов с неуказанными группами.
Sample Report Summary	Защищенный отчет, в котором для каждого образца имеется сводная таблица аналитов. Этот шаблон отчета подходит для таблицы результатов с указанными группами.
Sample Report with Concentration Threshold.docx	В данном отчете приведены сведения о всех неизвестных образцах, в том числе информация о файлах, образцах и сводная таблица результатов. В сводной таблице результатов указываются пороговые значения концентрации аналитов. Аналиты помечаются как «положительные», если их концентрация выше порогового значения. Данный шаблон связан с файлом Sample Report With Concentration Threshold.query. Пользователь может изменить файл запроса, указав названия аналитов, группы аналитов (например, класс соединений) и пороговые концентрации аналитов.

Теги шаблонов отчетов

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов

Тип	Тип поля	Описание тега
Теги из схемы поставщика данных программного обеспечения Analyst® MD		
Analyte	ForEach	Используется для объединения всех анализируемых веществ в порядке, в котором они указаны в Results Table.
AnalyteGroup	ForEach	Используется для объединения только различных групп анализируемых веществ. Теги TextField или PictureField извлекают значения для иона-квантификатора. Если теги данного типа содержат дополнительный тег For_Each, указывающий элемент RatioIons, внутреннее объединение применяется только для ионов-квантификаторов, которые являются частью текущей группы.
InternalStandard	ForEach	Используется для объединения всех внутренних стандартов.
QCStatistics	ForEach	Используется для объединения всех статистических данных по контролю качества.
RatioIons	ForEach	См. AnalyteGroup.
Sample	ForEach	Используется для объединения каждого отдельного образца. Это применяется, например, в сочетании с установкой тега TextField, чтобы вставить имя образца.
Statistics	ForEach	Используется для объединения всех статистических данных по стандартам.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
MQ_Group	ForEach	Используется для объединения различных групп, включая группы и подгруппы ВС. Теги TextField или PictureField извлекают значения для иона-квантификатора. Если теги данного типа содержат дополнительный тег For_Each, указывающий элемент RationIons, внутреннее объединение применяется только для ионов-квалификаторов, которые являются частью текущей группы.
MQ_AnalyteRatioIons	ForEach	См. MQ_Group только для квалификатора анализируемого вещества.
MQ_ISRatioIons	ForEach	См. MQ_Group только для квалификатора ВС.
AnalyteRatio	PictureField	Указывает наложения хроматограмм квантификатора и квалификатора подгруппы анализируемого вещества. Указывает сплошную линию в середине, чтобы обозначить ожидаемое соотношение ионов. Средняя линия = высота пика квантификатора x ожидаемое соотношение ионов. Указывает нижнюю и верхнюю границы приемлемого диапазона соотношения ионов пунктирными линиями. Нижняя граница = Высота пика квантификатора x ожидаемое соотношение ионов x ((100-допустимые пределы)/100). Верхняя граница = Высота пика квантификатора x ожидаемое соотношение ионов x ((100+допустимые пределы)/100).
AnalyteRatioNoLines	PictureField	Указывает наложения хроматограмм квантификатора и квалификатора подгруппы аналита без линий.
Calibration	PictureField	Указывает калибровочную кривую аналита.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
IS_AnalyteRatio	PictureField	Указывает наложения хроматограмм квантификатора и квалификатора подгруппы внутреннего стандарта. Указывает сплошную линию в середине, чтобы обозначить ожидаемое соотношение ионов. Средняя линия = высота пика квантификатора x ожидаемое соотношение ионов. Указывает нижнюю и верхнюю границы приемлемого диапазона соотношения ионов пунктирными линиями. Нижняя граница = Высота пика квантификатора x ожидаемое соотношение ионов x ((100-допустимые пределы)/100). Верхняя граница = Высота пика квантификатора x ожидаемое соотношение ионов x ((100+допустимые пределы)/100).
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField	Указывает наложения хроматограмм квантификатора и квалификатора подгруппы внутреннего стандарта без линий.
IS_PeakReview	PictureField	Указывает хроматограмму внутреннего стандарта.
Overlay_All_XIC	PictureField	Указывает наложения хроматограмм всех аналитов в образце.
Overlay_All_XIC_with_IntStds	PictureField	Указывает наложение хроматограмм всех аналитов и внутренних стандартов в образце.
Overlay_All_XIC_with_IntStds_NoLegend	PictureField	Указывает наложение хроматограмм всех аналитов и внутренних стандартов в образце без условных обозначений.
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField	Указывает наложение хроматограмм всех аналитов в образце без условных обозначений.
PeakReview	PictureField	Указывает хроматограмму аналита.
TIC	PictureField	Указывает значение TIC образца.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
Acquisition_Date	TextField	Дата получения образца. Указывает Acquisition Date & Time.
Acquisition_ Duration_Minutes	TextField	Указывает длительность получения данных по образцу в минутах.
Acquisition_Method	TextField	Метод сбора данных, используемый для получения образца. Указывает Acq. Method Name.
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField	Указывает Component Comment.
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField	Указывает коэффициент линейной корреляции для регрессии.
Analyte_AnalyteRegression	TextField	Указывает уравнение регрессии, включая коэффициент линейной корреляции и весовые коэффициенты.
Analyte_Concentration	TextField	Фактическая концентрация аналита, заданная пользователем в Results Table. Указывает Actual Concentration.
Analyte_Expected_RT	TextField	Ожидаемое время удерживания для конкретного аналита, в минутах. Указывает Expected RT.
Analyte_Integration_Type	TextField	Тип интегрирования, использованный для пиков конкретного аналита. Пики могут быть просчитаны вручную или с использованием доступных параметров. Указывает Integration Type.
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField	Отношение площади пика аналита к площади пика раствора внутреннего стандарта. Вычислено как отношение площади пика аналита к площади пика внутреннего стандарта. Указывает Area Ratio.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField	Соотношение высоты пика аналита в импульсах в секунду (имп/с) к высоте пика раствора внутреннего стандарта. Вычислено как отношение высоты пика аналита к высоте пика внутреннего стандарта. Указывает Height Ratio.
Analyte_Mass_Ranges	TextField	Заданный пользователем MRM-переход для аналита, заданный в используемом методе получения данных. Указывает Mass Info
Analyte_Peak_Area	TextField	Площадь пика аналита на хроматограмме. Указывает Area.
Analyte_Peak_Height	TextField	Высота пика аналита в импульсах в секунду (имп/с). Указывает Height.
Analyte_Peak_Name	TextField	Заданное пользователем при создании таблицы результата название конкретных образцов. Указывает Component Name.
Analyte_Peak_Width	TextField	Ширина пика аналита в минутах. Указывает Total Width.
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	Ширина пика на 50% высоты (для пика аналита) в минутах. Указывает Width at 50%.
AnalyteQuantPeak_info	TextField	Указывает информацию по интегрированию, включая алгоритм и параметры.
Analyte_QTY	TextField	Количество аналита, вычисленное по расчетной концентрации аналита и соотношению веса и объема (например, количество нанограммов аналита на грамм образца). Указывает Quality.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField	Первое анализируемое вещество в группе.
Analyte_Processing_Alg	TextField	Указывает алгоритм интегрирования.
Analyte_Retention_Time	TextField	Фактическое время удерживания аналита на хроматограмме, использованное для создания Results Table. Указывает Retention Time.
Analyte_R_Squared	TextField	Указывает коэффициент детерминации для регрессии.
Analyte_RT_Window	TextField	Диапазон времени в секундах, в течение которого предполагается появление пика аналита. На центр этого диапазона приходится ожидаемое время удерживания аналита. Указывает значение RT Half Window для параметров интегрирования.
Analyte_Signal_To_Noise	TextField	Отношение «сигнал/шум» для пика конкретного аналита. Указывает Signal/Noise.
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField	Угол наклона базовой линии для аналита, выраженный в процентном отношении «интенсивность/минуты». Указывает Slope of Baseline для аналита.
Analyte_Start_Scan	TextField	Анализируемое вещество, начало сканирования.
Analyte_Start_Time	TextField	Время начала выхода пика аналита в минутах. Указывает Start Time.
Analyte_Stop_Scan	TextField	Анализируемое вещество, остановка сканирования.
Analyte_Stop_Time	TextField	Время окончания выхода аналита в минутах. Указывает End Time.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
Analyte_Unit	TextField	Единицы измерения, используемые для представления концентрации аналитов. Стандартная единица в Results Table — нг/мл. Указывает Conc. Units Results Table.
Analyte_Use_Record	TextField	Установка данного флажка определяет, будет ли указанная запись использоваться для последующего анализа, например для построения кривых калибровки. Указывает Used.
Analyte_Count	TextField	Указывает общее количества аналитов.
Analyte_Index	TextField	Указывает порядковый номер аналита в образце, начиная с 0.
Calculated_Accuracy	TextField	Точность определения пика аналита, определяемая сравнением фактической концентрации аналита с расчетной. Указывает Accuracy.
Calculated_Concentration	TextField	Расчетная концентрация для пика анализируемого вещества, вычисляемая программным обеспечением Analyst® MD с использованием площади пика. Указывает Calculated Concentration.
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField	Время удерживания для аналита или для определенной записи внутреннего стандарта в Results Table. Указывает Relative RT.
IS_Concentration	TextField	Фактическая концентрация внутреннего стандарта, определяемая пользователем в Results Table. Указывает IS Actual Concentration.
IS_Expected_RT	TextField	Ожидаемое время удерживания пика внутреннего стандарта в минутах. Указывает IS Expected RT.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
IS_Integration_Type	TextField	Тип интегрирования, используемый для определенных пиков внутреннего стандарта. Пики могут быть просчитаны вручную или с использованием доступных параметров. Указывает IS Integration Type.
IS_Mass_Ranges	TextField	Определяемый пользователем MRM-переход для внутреннего стандарта, заданный в используемом методе получения данных. Указывает IS Mass Info.
IS_Peak_Area	TextField	Площадь пика внутреннего стандарта. Указывает IS Area.
IS_Peak_Height	TextField	Высота пика внутреннего стандарта в импульсах в секунду (имп/с). Указывает IS Height.
IS_Peak_Name	TextField	Название конкретного внутреннего стандарта, присваиваемое пользователем при создании Results Table. Указывает IS Name.
IS_Peak_Width	TextField	Ширина пика аналита в минутах. Указывает IS Total Width.
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	Ширина пика внутреннего стандарта в минутах на уровне половины его высоты в импульсах в секунду (имп/с). Указывает IS Width at 50%.
IS_Retention_Time	TextField	Фактическое время удерживания для внутреннего стандарта. Указывает IS Retention Time.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
IS_RT_Window	TextField	Диапазон времени в секундах, в котором ожидается появление пика внутреннего стандарта. На центр этого диапазона приходится ожидаемое время удерживания внутреннего стандарта. Указывает значение RT Half Window для параметров интегрирования внутреннего стандарта.
ISQuantPeak_Info	TextField	Указывает информацию по интегрированию, включая алгоритм и параметры.
IS_Signal_To_Noise	TextField	Отношение сигнал-шум для пика внутреннего стандарта. Указывает IS Signal/Noise.
IS_Slope_of_Baseline	TextField	Угол наклона базовой линии для внутреннего стандарта, выраженный в процентном отношении «интенсивность/минуты». Указывает Slope of Baseline для внутреннего стандарта.
IS_Start_Scan	TextField	Начало сканирования внутреннего стандарта
IS_Start_Time	TextField	Время начала выхода пика внутреннего стандарта в минутах. Указывает IS Start Time.
IS_Stop_Scan	TextField	Время окончания сканирования для внутреннего стандарта.
IS_Stop_Time	TextField	Время окончания выхода пика внутреннего стандарта в минутах. Указывает IS End Time.
IS_Units	TextField	Единицы измерения, используемые для представления концентрации внутреннего стандарта. Стандартная единица в Results Table — нг/мл. Указывает Conc. Units Results Table для ВС.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField	Указывает используется для отображения значения максимально допустимых пределов точности для НПКО в диалоговом окне Outlier Setting метода количественного анализа.
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField	Указывает используется для отображения значения максимально допустимых пределов точности для стандартов в диалоговом окне Outlier Setting метода количественного анализа.
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField	Указывает используется для отображения значения максимально допустимых пределов точности для контролей качества в диалоговом окне Outlier Setting метода количественного анализа.
MQ_Analyte_Group_Name	TextField	Указывает название имени группы аналита.
MQ_Created_With	TextField	Указывает название продукта, который используется для создания отчета.
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField	Указывает Expected Ion Ratio.
MQ_Group_Index	TextField	Указывает порядковый номер группы в образце, начиная с 1. Используется совместно с ForEach MQ_Group loop.
MQ_Group_Name	TextField	Указывает название группы. Используется совместно с ForEach MQ_Group loop.
MQ_Ion_Ratio	TextField	Указывает Ion Ratio.
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField	Указывает используется для отображения значения максимально допустимых пределов ионного соотношения для анализируемого вещества в диалоговом окне Outlier Setting метода количественного анализа.
MQ_IS_Group_Name	TextField	Указывает название группы внутреннего стандарта.
MQ_IsRowHidden	TextField	Указывает строку, скрытую в Results Table.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField	Указывает значение нижнего предела расчетной концентрации в диалоговом окне Outlier Setting метода количественного анализа.
MQ_Outlier_Reasons	TextField	Указывает Outlier Reasons.
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField	Указывает Asymmetry Factor.
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField	Указывает Baseline Delta/Height.
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField	Указывает End Time at 10%.
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField	Указывает End Time at 5%.
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField	Указывает Points Across Baseline.
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField	Указывает Points Across Half Height.
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField	Указывает Start Time at 10%.
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField	Указывает Start Time at 5%.
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField	Указывает Tailing Factor.
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField	Указывает Width at 10%.
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField	Указывает Width at 5%.
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField	Указывает значение в столбце Mass Range для квантификатора в группе аналита.
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField	Указывает значения в столбце Area для квантификатора в группе аналита.
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField	Указывает значение в столбце Calculated Concentration для квантификатора в группе аналита.
MQ_Report_Generation_Date	TextField	Указывает дату создания отчета, отражающую региональные настройки, выполненные в программном обеспечении.
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField	Указывает значение верхнего предела расчетной концентрации в диалоговом окне Outlier Setting метода количественного анализа.
Query_Name	TextField	Название запроса, указанного в шаблоне отчета (если применимо).

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
Record_Modified	TextField	Указывает Modified.
Reporter_Template_Name	TextField	Название шаблона отчета, используемого при создании отчетов.
ResultTbl_CreateDate	TextField	Указывает дату создания Results Table.
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField	Указывает алгоритм обработки, используемый для обработки Results Table (например, MQ4, SignalFinder1).
ResultTbl_Name	TextField	Указывает имя файла Results Table.
ResultTbl_ ProjName	TextField	Указывает название проекта, в котором сохранена Results Table.
Sample_Comment	TextField	Комментарий, связанный с образом. Указывает Sample Comment.
Sample_Dilution_Factor	TextField	Общее количество единичных объемов, в которых растворен образец. Указывает Dilution Factor.
Sample_File_Name	TextField	Название файла данных, в котором хранятся необработанные данные по конкретному образцу. Указывает Original Filename.
Sample_ID	TextField	Заданное пользователем значение для вывода списка конкретных ID по каждому образцу или аналиту в Results Table. Указывает Sample ID.
Sample_Index	TextField	Указывает Index.
Sample_Count	TextField	Указывает общее количество аналитов.
Sample_InjectionVolume	TextField	Объем впрыска в устройстве автоматической подачи проб, используемый при впрыске исходной пробы, как это определяется методом получения данных. Указывает Injection Volume.
Sample_Instrument	TextField	Указывает тип прибора, использованного для получения образца, извлеченный из файла .wiff.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField	Указывает серийный номер прибора, использованного для получения образца, извлеченный из файла .wiff.
Sample_Name	TextField	Заданное пользователем при создании Results Table название конкретного образца. Указывает Sample Name.
Sample_Operator	TextField	Пользователь, находившийся в системе на момент получения данных. Указывает Operator Name.
Sample_Plate_Number	TextField	Положение пластины с образцами в устройстве автоматической подачи проб на момент получения информации об образцах. Указывает Plate Number.
Sample_Rack_Number	TextField	Положение стойки с образцами в устройстве автоматической подачи проб на момент получения информации об образцах. Указывает Rack Number.
Sample_Type	TextField	Заданное пользователем значение, указывающее на то, из какого типа образца делается каждый конкретный впрыск. Например, фоновый образец, стандартный образец и т.п. Указывает Sample Type.
Sample_Vial_Position	TextField	Положение флакона, заданное в пакете для сбора данных, который используется в автоматическом пробоотборнике для определения того, в котором из флаконов находится образец. Указывает Vial Number.
Sample_File_Full_Name	TextField	Указывает название файла и путь к нему.
Sample_ Index _ In _ Wiff	TextField	Указывает номер заказа для образца в файле .wiff, начиная с 0.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
Sta_Accuracy	TextField	Точность определения пика аналита, определенная сравнением фактической концентрации аналита с расчетной. Указывает Accuracy.
Sta_CV	TextField	Указывает условную дисперсию, которая определяет, насколько сильно в процентах значение расчетной концентрации отклоняется от среднего значения концентрации. Рассчитывается на основе отношения стандартное отклонение/среднее значение.
Sta_ExpectedConcent	TextField	Ожидаемая концентрация для пика анализируемого вещества, вычисляемая программным обеспечением Analyst® MD с использованием площади пика. Указывает Actual Concentration.
Sta_Mean	TextField	Указывает среднее значение для расчетных концентраций, которые вычисляются с помощью программного обеспечения Analyst® MD.
Sta_NumVal	TextField	Указывает количество значений, которые составляют статистические данные. Сколько образцов учитывается при расчете средней.
Sta_QCAccuracy	TextField	Точность, определяемая сравнением ожидаемой и фактической концентраций в образце, предназначенном для контроля качества, как это определяется пользователем в столбце типа образца. Указывает Accuracy.

Таблица C-2 Теги шаблонов отчетов (продолжение)

Тип	Тип поля	Описание тега
Sta_QCCV	TextField	Указывает условную дисперсию, которая определяет, насколько сильно в процентах значение расчетной концентрации отклоняется от среднего значения концентрации. Рассчитывается на основе отношения стандартное отклонение/среднее значение. Применяется к образцу для контроля качества.
Sta_QCExpectedConcent	TextField	Ожидаемая концентрация в образце, предназначенном для контроля качества, заданная пользователем в столбце типа образца. Указывает фактическую концентрацию в образце, предназначенном для контроля качества.
Sta_QCMean	TextField	Указывает среднее значение для расчетных концентраций, которые вычисляются с помощью программного обеспечения Analyst® MD применительно к образцу для контроля качества.
Sta_QCNumVal	TextField	Указывает количество значений, учитываемых при расчете среднего значения концентрации образца для контроля качества.
Sta_QCStdDev	TextField	Указывает стандартное отклонение значений концентрации для каждого образца. Стандартное отклонение представляет собой меру разброса набора значений от средней величины.
Sta_StdDev	TextField	Указывает стандартное отклонение для стандартного образца. Стандартное отклонение представляет собой меру разброса набора значений от средней величины.
CUSTOM	TextField	Указывает значение в дополнительных столбцах Results Table.

Вычисление относительного шума и отношения «сигнал-шум» D

При выполнении обработки данных количественного масс-спектрометрического анализа важно определить, является ли данный пик значимым; под словом «значимый» обычно понимают, «превышает ли данный сигнал фоновый шум».

Обычно высоту пика сравнивают с фоновым шумом, измеренным в области, свободной от пиков, где шум обычно оценивается в форме однократного или трехкратного стандартного отклонения от результатов измерений в данном диапазоне. Это подход далеко не идеален по следующим причинам:

- Он субъективен, поскольку область зашумления выбирается вручную.
- Фоновая область без пика может отсутствовать или быть слишком узкой для точной оценки шума.
- Шум в месте расположения пика может значительно отличаться от шума в выбранной зашумленной области.
- Фактор «один или три» также субъективен, и разные ведомства предоставляют разные рекомендации.
- Если данные прошли предварительную обработку, наблюдаемый шум может быть изменен. Например, сглажен или ограничен пороговым значением.

При использовании понятия относительного шума (Rn) легко разработать простой метод расчета ожидаемого шума в любой точке измерения для сравнения с измеренным сигналом. Это надежная объективная характеристика, которую можно использовать для расчета отношения «сигнал-шум» (S/N), а также для оценки и сравнения приборов и процедур лабораторных анализов. Существует много вариантов применения показателя относительного шума, одним из которых является расчет отношения «сигнал-шум».

Основной алгоритм работает следующим образом:

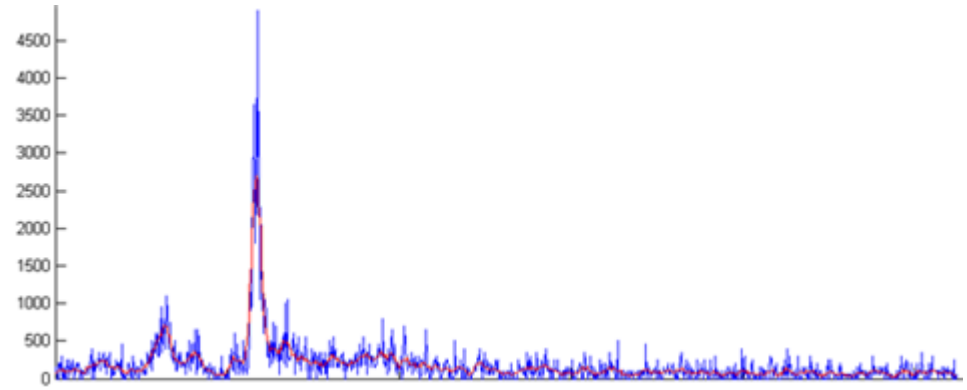
1. Разрабатывается модель шума, которая позволит пользователю вычислять ожидаемый шум в любой точке измерений с учетом уровня фонового сигнала в данной точке.

   Модель шума можно определить из теоретических соображений или создать, используя фактические результаты измерения в конкретной системе. Для детекторов типа «счетчик импульсов» стандартное отклонение сигнала и, следовательно, ожидаемый шум, пропорциональны квадратному корню из сигнала, поэтому они изменяются при изменении сигнала. В других системах будет присутствовать постоянный компонент «белый шум», возможно, в комбинации с зависящим от интенсивности компонентом.

2. Оценивается фоновый сигнал по отношению к измеренному сигналу.

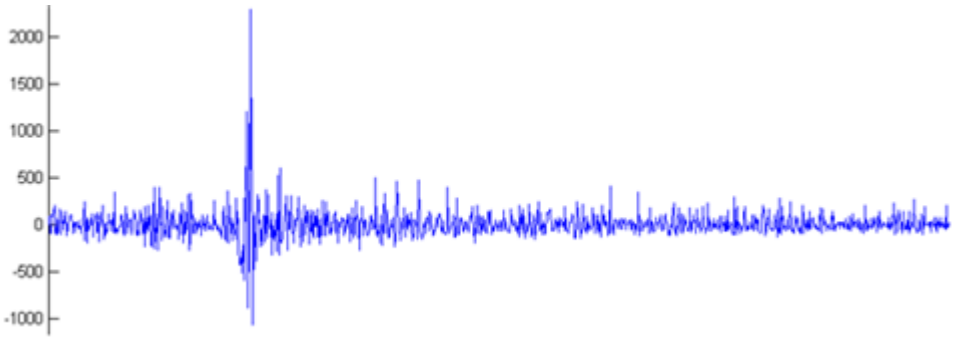
   Оценку можно осуществить многими способами, но наиболее простой заключается в генерировании сглаженной версии данных, как показано на рисунок D-1.

   Рисунок D-1 Наложение исходных и сглаженных данных



3. Измеряется фактический шум во всех точках измерений (пики и фон).
   Это осуществляется путем вычитания фонового сигнала из измеренного сигнала во всех точках измерений, где сглаженный сигнал вычитался из исходного. Это называется дельта-шум. Диапазон значений дельта-шума достаточно постоянный, за исключением случаев, когда имеют место большие пики, поскольку шум зависит от величины сигнала и, следовательно, он выше там, где сигнал больше. См. рисунок D-2.

   Рисунок D-2 График значений дельта-шума в каждой точке измерения



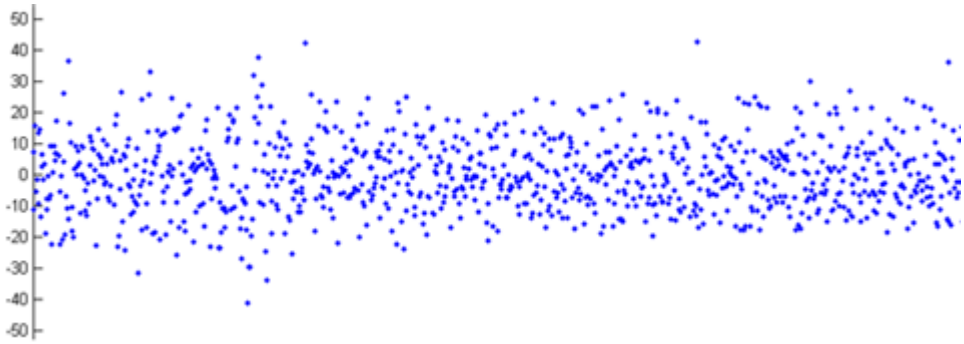
4. Для каждой точки измерения рассчитывается отношение измеренного шума к ожидаемому шуму.

   Иными словами, для каждой точки измерения нужно разделить показатель шума, который был измерен на этапе 3, на значение, прогнозируемое моделью шума (в нашем случае квадратный корень из интенсивности). Если модель шума хорошая, генерируется серия значений, которые в основном остаются ограниченными некоторыми пределами, как показано на рисунок D-3. На рисунок D-3 также изображен график зависимости

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

   Примечание. Это приводит к уменьшению значительных колебаний дельта-шума и созданию более однородного набора значений.

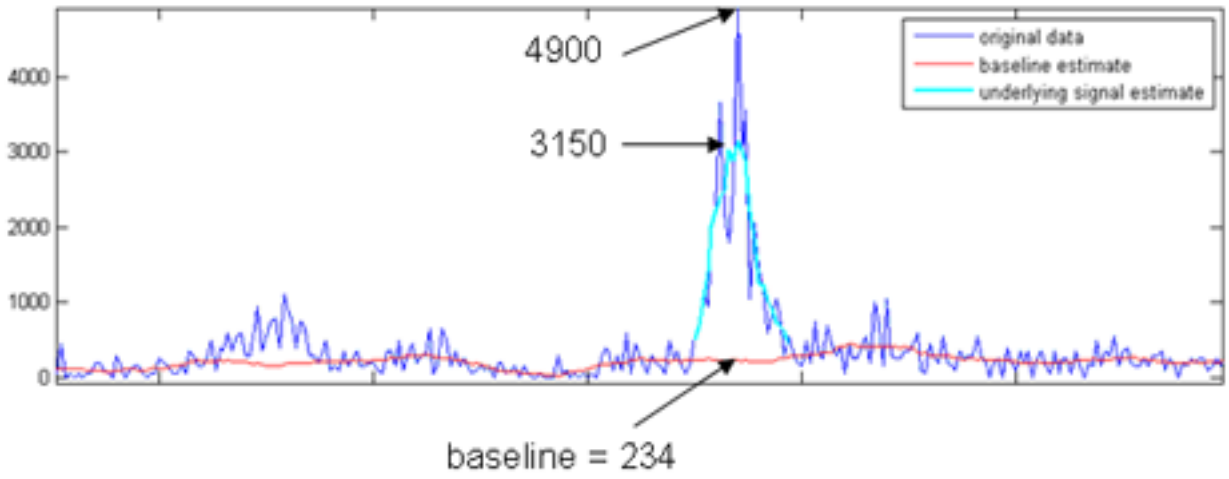
Рисунок D-3 Модель шума



5. Рассчитывается стандартное отклонение относительных показателей. Это показатель Rn — оценка наиболее вероятного соотношения фактического дельта-шума и шума, прогнозируемого в соответствии с моделью. На рисунок D-3 результатом является значение 9,5.

   На рисунок D-4 приведен пример того, как относительный шум может использоваться для вычисления отношения «сигнал-шум».

   Рисунок D-4 Наложение исходных данных, оценка фоновых сигналов и оценка базовых линий



   Как описано выше:

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

   В данном конкретном примере:

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

Если в качестве сигнала используется вершина пика, отношение «сигнал-шум» составит 34 (4900/145); если используется высота сглаженного сигнала, отношение «сигнал-шум» составит 22 (3150/145).

При расчете отношения «сигнал-шум» алгоритм интегрирования MQ4 использует описанную здесь процедуру и вершину пика в качестве сигнала. Поскольку алгоритм интегрирования SignalFinder™ сопоставляет модель с пиком, используется высота аппроксимированного контура. В результате получается заниженное отношение «сигнал-шум». Однако это более точное значение, поскольку оно менее подвержено возможным шумовым выбросам. Алгоритм интегрирования SignalFinder также отличается более продуманным подходом к оценке базовой линии; по этим двум причинам значения соотношения сигнал/шум, рассчитанные с помощью этих двух алгоритмов, не идентичны, хотя, как правило, близки.

Таким образом, по сравнению с обычным подходом к оценке шума в виде стандартного отклонения от фоновой области, подход с использованием показателя относительного шума для расчета отношения «сигнал-шум» обладает следующими преимуществами:

- Он значительно менее субъективен, поскольку отсутствует необходимость в выборе фоновой области вручную.
- Точное отношение «сигнал-шум» можно прогнозировать, даже если на хроматограмме нет областей, свободных от пиков.
- Базовая линия и, следовательно, шум оцениваются вблизи от рассматриваемого пика. Это может привести к значительному отличию от полученного соотношения «сигнал-шум», поскольку фоновая область, выбираемая при стандартном методе оценки, может быть значительно более спокойной, чем фон вблизи пика. Как описано выше, значение отношения «сигнал-шум», рассчитанное с использованием показателя **относительного шума**, может быть меньше значений, полученных при использовании стандартного метода. Однако эти значения более точные и информативные. См. рисунок D-4.

Чтобы сделать столбец **Signal/Noise** видимым в **Results Table**, см. Изменение отображаемых в Results Table столбцов на стр. 108.

Примечание по отношению «сигнал-шум» при использовании алгоритма интегрирования SignalFinder

Поскольку алгоритм интегрирования SignalFinder™ рассчитывает отношение «сигнал-шум» более точно (и вследствие этого более точно прогнозирует величину стандартного отклонения), при использовании метода расчета отношения «сигнал-шум» с 1 сигмой следует учитывать снижение минимально допустимого значения «сигнал-шум» при стандартных операционных процедурах (СОП) на основании полученных лабораторией эмпирических данных.

Значки ПО

E

Одновременно активна только одна панель. Активная панель имеет оранжевые границы. Оператор может активировать панель, щелкнув по ней в любом месте. Многие команды меню работают на активной панели.

Значки панели инструментов, описанные в данном разделе, появляются на панели инструментов вне зависимости от типа панели. Доступны также дополнительные значки, характерные для той или иной панели.

Таблица E-1 Значки панели инструментов

Значок	Название	Описание
	New Results Table (Новая таблица результатов)	Открытие мастера **New Results Table**.
	Open (Открыть)	Открытие **Results Table**.
	Save (Сохранить)	Сохранение любых открытых файлов.
	Select Analyst Project (Выбрать проект для программы Analyst)	Выбор папки проекта.
	Screen Lock (Блокировка экрана)	Блокировка экрана. Эта функция доступна, только когда программное обеспечение Analyst® MD работает в смешанном режиме и опция блокировки экрана включена.
IS	Show Internal Standard with Analyte (Показать внутренний стандарт вместе с аналитом)	Отображение строк в **Results Table** как для выбранного в данный момент анализируемого вещества, так и для соответствующего внутреннего стандарта. Если данная опция выбрана, оператор может щелкнуть на имени аналита и просмотреть его вместе с внутренним стандартом. Данное действие эквивалентно нажатию на имени анализируемого вещества и затем нажатию на внутренний стандарт с одновременным нажатием клавиши **Ctrl** (таким образом, чтобы оба вещества были выбраны).
	Find Component or Group (Найти компонент или группу)	Позволяет выбрать в списке элемент, совпадающий с введенным текстом.

Таблица E-1 Значки панели инструментов (продолжение)

Значок	Название	Описание
	Arranging Panes (Организация расположения панелей)	Позволяет изменять относительное расположение панелей. Необходимо нажать значок на одной из панелей, а затем перемещать ее вверх, вниз, влево или вправо относительно второй панели. Выбранная панель занимает относительно второй панели положение, соответствующее тому, в котором будет отпущен курсор. По мере перемещения курсора одна из сторон второй панели выделяется красным, указывая, куда перемещается первая панель.
	Delete Pane (Удалить панель)	Удаление панели. При удалении панели **Results Table** связанные с ней панели (**Peak Review** и **Calibration**) также удаляются и окно полностью закрывается.
	Toggles tab mode (Переключение режима вкладок)	Позволяет расширить панель до размеров окна (или наоборот). Данная функция полезна, если на экране одновременно открыто несколько панелей, так что оператор может сосредоточиться на одной из них. В режиме масштабирования появляется отдельная вкладка в верхней части окна каждой панели. Переключаться между панелями можно нажатием на соответствующую вкладку. Для того чтобы вернуться из режима масштабирования к обычному просмотру, на котором видны все панели, нужно еще раз нажать на панель **Zoom Pane**. Нажатие на значок позволяет переключаться между двумя состояниями.
	Hide Pane (Скрыть панель)	Позволяет скрыть панель так, что другие панели, открытые в окне, заполняют доступное пространство.
	Show Hidden Panes (Показать скрытые панели)	Показывает все панели, которые ранее были спрятаны.

Таблица E-2 Значки панели инструментов Peak Review

Значок	Название	Описание
	Display Previous Page (Показать предыдущую страницу)	Показывает ранее настроенный набор хроматограмм. Это действие эквивалентно нажатию кнопки со стрелкой влево или вверх или верхней стрелки на полосе прокрутки.
	Display Next Page (Показать следующую страницу)	Показывает следующий набор хроматограмм. Это действие эквивалентно нажатию на кнопку со стрелкой вправо или вниз или нижней стрелки на полосе прокрутки.
	Display Previous Sample (Показать предыдущий образец)	Прокрутка назад по панели **Peak Review**. Это действие эквивалентно нажатию на верхнюю стрелку на полосе прокрутки до тех пор, пока не покажется первый образец, отличный от того, для которого показывается первая видимая в данный момент хроматограмма.
	Display Next Sample (Показать следующий образец)	Прокрутка к следующему образцу
	Starts Slide Show Peak Review mode (Запуск режима последовательного просмотра пиков)	Запуск слайд-шоу. При первом нажатии открывается диалоговое окно **Slide Show Options**. Установите параметры времени в секундах для переключения между пиками. Во избежание повторного открытия диалогового окна нужно выбрать опцию **Only show this dialog again if the shift key is down**. Для остановки показа пиков нужно щелкнуть мышью в любом месте на **панели Peak Review**.
	Peak Magnifier (Увеличить пик)	Увеличивает выбранный пик.
	Peak Demagnifier (Уменьшить пик)	Возвращает увеличенный пик к исходным размерам.

Таблица E-2 Значки панели инструментов Peak Review (продолжение)

Значок	Название	Описание
	Set Peak to 'Not Found' (Присвоить пику статус «не найден»)	Щелчок на этом значке указывает на то, что на рассматриваемой хроматограмме пик не найден. В некоторых случаях, когда нет значимых пиков, могут быть интегрированы и зарегистрированы небольшие пики шумов. Чтобы предотвратить это, нужно нажать на данный значок. Площадь пика отображается в **Results Table** с пометкой N/A. После того как оператор установил отметку **Not Found**, параметры обнаружения пика для данной хроматограммы с левой стороны панели становятся недоступными, так как они больше не используются. Чтобы войти в автоматический режим, нужно еще раз нажать на значок.
	Enable Manual Integration Mode (Включить режим интегрирования вручную)	Нажатие включает режим интегрирования вручную. При работе программного обеспечения в ручном режиме интегрирования для указания области выполнения расчетов нужно выделить ее при помощи мыши. Интегрирование начинается в той точке (времени, интенсивности), на которую приходится первый щелчок мыши, и продолжается по всей хроматограмме вплоть до точки, в которой курсор будет отпущен. Чтобы выйти из ручного режима, нужно еще раз нажать на значок. После того, как оператор вручную подсчитает площадь пика, параметры обнаружения пика для данной хроматограммы с левой стороны панели становятся недоступными, так как они больше не используются. Чтобы войти в автоматический режим, нужно еще раз нажать на значок.
	Recalculate Peak Model (Пересчитать модель пика)	Эта опция позволяет пересчитать модель пика с использованием рассматриваемой хроматограммы и применить ее к данной хроматограмме (только для алгоритма интегрирования SignalFinder™).

Таблица E-3 Значки панели инструментов Calibration (Калибровка)

Значок	Название	Описание
Regression	Edit Regression and Weighting (Редактирование регрессии и весовых коэффициентов)	Используются для изменения параметров калибровки. Сюда входят как фактические параметры регрессии (площадь или высота), так и тип регрессии и весовые коэффициенты. См. Уравнения регрессии на стр. 147.

Таблица E-4 Значки панели инструментов Statistics (Статистические данные)

Значок	Название	Описание
	Remove Trailing Index from Sample Name (Снять индекс отслеживания с имени образца)	Таблицу **Statistics Table** можно организовать таким образом, чтобы образцы (для одного и того же аналита) группировались по фактической концентрации или по имени образца. Если образцы группируются по имени, то с помощью опции **Remove Trailing Index from Sample Name** можно указать, должны ли имена образцов в точности совпадать, чтобы их можно было сгруппировать, или же нужно убрать из имени индекс отслеживания, предваряемый дефисом (-). Например, если включить эту опцию, образцы с именами «Sample 1 - 001» и «Sample 1 - 002» будут объединены в группу, в противном случае группирования не будет.

Таблица E-4 Значки панели инструментов Statistics (Статистические данные) (продолжение)

Значок	Название	Описание
	Sample Grouping (Группирование образцов)	Пункты данного списка указывают способ группирования образцов для данного аналита для расчета статистических данных. Доступны следующие варианты: • **Group by Concentration for Standards** (Группировать стандартные образцы по концентрации): образцы **Standard** группируются по фактической концентрации. • **Group by Concentration for QCs** (Группировать контрольные образцы по концентрации): образцы **Quality Control** группируются по фактической концентрации. • **Group by Sample Name for Standards** (Группировать стандартные образцы по имени): повторно встречающиеся образцы **Standard** группируются по полю **Sample Name**. Как уже разъяснялось ранее, если опция **Remove Trailing Index from Sample Name** не используется, имена образцов должны в точности совпадать. В противном случае имена могут различаться по индексу отслеживания (номеру, который следует за дефисом). • **Group by Sample Name for QCs** (Группировать контрольные образцы по имени): группировка по имени в этом случае аналогична предыдущей опции, за исключением того, что используются образцы **QC**. • **Group by Sample Name for All Samples** (Группировать все образцы по имени): опция, сходная с предыдущими, за исключением того, что используются все образцы.

Таблица E-4 Значки панели инструментов Statistics (Статистические данные) (продолжение)

Значок	Название	Описание
	Metric (Количественный показатель)	Пункты в списке указывают фактические показатели, которые будут использоваться для расчета статистических данных. Доступны следующие варианты: • **Calculated Concentration** (Расчетная концентрация): используется поле **Calculated Concentration** в **Results Table**. • **Area** (Площадь): используется поле **Area** в **Results Table**. • **Height** (Высота): используется поле **Height** в **Results Table**. • **Calibration Y-Value** (Калибровка значений Y): используется указанный для данного анализируемого вещества параметр регрессии. Для анализируемого вещества, не имеющего соответствующего внутреннего стандарта, в качестве такого параметра выступают параметр **Area** или **Height**. Если же для аналита задан внутренний стандарт, то используются параметры **Area Ratio** или **Height Ratio**.

Таблица E-5 Значки панели инструментов Results Table

Значок	Всплывающее сообщение	Описание
	Отображает просмотр пиков	Отображает панель **Peak Review**, что позволяет проверить качество расчета площади пиков и изменить интегрирование, если потребуется.
	Отображение обзор образцов рядом.	Отображает два списка образцов рядом, так что можно выбрать до шести образцов, чтобы сравнить ответы пика по образцам.
	Отображение калибровочной кривой	Отображает калибровочную кривую (применимо только в случае использования образцов типа **Standard** с известными концентрациями). Эта панель позволяет оператору просматривать калибровку и корректировать тип регрессии и весовые коэффициенты.

Таблица E-5 Значки панели инструментов Results Table (продолжение)

Значок	Всплывающее сообщение	Описание
	Создание графика показателя	Показывает график показателя для выбранного в данный момент столбца или столбцов. Такие графики очень полезны с точки зрения поиска выпадающих значений. Меню справа от кнопки показывает сохраненные настройки графика.
	Отображение окна статистики	Отображает окно **Statistics**. В этой таблице показаны средние расчетные значения концентрации, стандартное отклонение и коэффициент вариации для каждого уровня концентраций.
	Сортировать выбранные столбцы по возрастанию	Сортирует данные в таблице **Results Table** таким образом, что значения в выбранном столбце располагаются по возрастанию. Этот значок появляется только при нажатии на заголовок столбца.
	Сортировать выбранные столбцы по убыванию	Сортирует данные в таблице **Results Table** таким образом, что значения в выбранном столбце располагаются по убыванию. Этот значок появляется только при нажатии на заголовок столбца.
	Отмена предыдущей сортировки	Если к таблице была применена сортировка, эта команда возвращает таблицу **Results Table** к состоянию, в котором она пребывала по умолчанию.
All Sample Types	Отображение только образцов выбранного типа (типов)	Эта команда фильтрует таблицу **Results Table** таким образом, что остаются видны только образцы определенного типа или типов. Эта функция полезна только в том случае, если имеются образцы с известной концентрацией, т.е., образцы типа **Standard**, и если не все образцы имеют тип **Unknowns**.

Таблица E-5 Значки панели инструментов Results Table (продолжение)

Значок	Всплывающее сообщение	Описание
	Спрятать выбранную строку (строки)	Эта команда скрывает выбранные строки в таблице **Results Table**. Нужно выбрать строки, которые предполагается скрыть, а затем нажать на значок. Поскольку панель **Peak Review** синхронизируется с таблицей **Results Table**, скрытие строк для пиков, которые не требуется просматривать, делает процесс просмотра проще. Например, оператор может отсортировать таблицу в столбце **Quality** и убрать все строки, которые имеют значение качества выше определенной величины (например, 0,8). Затем таблицу можно будет отсортировать по столбцу **Region Height** и скрыть все строки с низким значением (то есть, спрятать строки для тех пиков, которые практически не выявлены). В итоге видны будут только пики низкого качества, но фактически присутствующие на хроматограмме. Таким образом, оператор может просмотреть эти видимые строки в панели **Peak Review** быстрее, чем если бы он проверял все возможные пики.
	Показать ранее спрятанную строку (строки)	Показывает все строки. К показанным строкам могут по-прежнему применяться ограничения по типу образца **Sample Type Filter** и выбор в опции **Components & Groups List**.
	Показывать только выпадающие значения	Позволяет показывать строки со значениями, выходящими за границы диапазона.
	Переход к следующему выпадающему значению	Позволяет перейти к следующему значению в **Results Table**, выходящему за границы диапазона.

Таблица E-5 Значки панели инструментов Results Table (продолжение)

Значок	Всплывающее сообщение	Описание
	Блокировка и сохранение	Блокирует таблицу **Results Table** после ее сохранения. Изменения в таблице **Results Table** не будут сохраняться, пока ее не разблокируют.
	Просмотр и сохранение	Нажмите для сохранения таблицы **Results Table** после ее просмотра. Значок недоступен, если таблица **Results Table** сохранена в формате «только для чтения».

Доступ к программному обеспечению MultiQuant™ MD

F

Примечание. При удалении программы MultiQuant™ MD средства безопасности программного обеспечения MultiQuant™ MD в программном обеспечении Analyst® MD остаются. Полномочия доступа находятся на вкладке **Roles** в диалоговом окне **Security Configuration**.

Предустановленный доступ	Описание
Create session file (Создание файла сеанса)	Позволяет пользователям создавать **Results Table**.
Create quantitation method (Создание метода количественного анализа)	Позволяет пользователям создавать методы количественного анализа.
Modify quantitation method files (Изменение файлов метода количественного анализа)	Позволяет пользователям изменять методы количественного анализа, расположенные в папке **Quantitation Methods** в папке **Analyst Data**.
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table (Экспорт и создание отчета разблокированной таблицы результатов)	Позволяет пользователям экспортировать и создавать отчеты разблокированных **Results Table**.
Replace existing Results Table when saved (Замена существующей таблицы результатов при сохранении)	Позволяет пользователям обновлять существующие таблицы **Results Table**, но не позволяет им создавать новую **Results Table**, используя существующее название **Results Table**. Например, если создана **Results Table** с именем RT1, пользователи могут обновить ее, но не могут создать новую **Results Table** с именем RT1. Пользователи не могут называть безымянную **Results Table**, используя существующее название **Results Table**
Change default quantitation method integration algorithm (Изменение выбранного по умолчанию алгоритма интегрирования метода количественного анализа)	Диалоговое окно **Integration Default** позволяет пользователям изменять алгоритм. Выберите последовательно **Edit** > **Project Integration Defaults**.

Предустановленный доступ	Описание
Change default quantitation method integration parameters (Изменение выбранных по умолчанию параметров метода количественного анализа)	Диалоговое окно **Integration Default** позволяет пользователям изменять выбранные по умолчанию параметры алгоритма. **Edit** > **Project Integration Defaults**.
Allow Enable Project Modified Peak Warning (Включение предупреждения об изменении пика проекта)	Позволяет пользователям включать или отключать функцию **Project Modified Peak Warning** в меню **Edit**.
Allow Project Secure Export Settings (Настройка защищенного экспорта данных проекта)	Если включено, данные в текстовом файле шифруются во время экспорта. Установите пароль, чтобы включить шифрование.
Add samples to Results Table (Добавление образцов в таблицу результатов)	Позволяет пользователям добавлять образцы. Выберите последовательно **Process** > **Add Samples**.
Remove samples from Results Table (Удаление образцов из таблицы результатов)	Позволяет пользователям удалять выбранные образцы. Выберите последовательно **Process** > **Remove Selected Samples**.
Export, import, or remove External Calibration (Экспорт, импорт или удаление внешней калибровки)	Позволяет пользователям экспортировать, импортировать или удалять внешнюю калибровку, используя одну из следующих опций: • Нажмите **Process** > **Export Calibration.** • Выберите последовательно **Process** > **Import External Calibration**. • Выберите последовательно пункты **Process** > **Remove External Calibration**.
Change Audit Map settings (Изменение настроек карты аудита)	Позволяет пользователям изменять карту аудита проекта и изменять описание карты аудита. Выберите последовательно пункты **Audit Trail** > **Audit Map Manager**.
Modify Sample Name (Изменение названия образца)	Позволяет пользователям изменять название образца в **Results Table**.
Modify Sample Type (Изменение типа образца)	Позволяет пользователям изменять тип образца (**Standard**, **QC**, **Unknown**) в **Results Table**.
Modify Sample ID (Изменение идентификатора образца)	Позволяет пользователям изменять **ID** образца в **Results Table**.

Предустановленный доступ	Описание
Modify Actual Concentration (Изменение фактической концентрации)	Позволяет пользователям изменять фактическую концентрацию образцов **Standard** и образцов **QC** в **Results Table**.
Modify Dilution Factor (Изменение коэффициента разбавления)	Позволяет пользователям изменить коэффициент разбавления в Results Table.
Modify Comment Fields (Изменение поля с комментарием)	Позволяет пользователям изменять поля комментариев: • **Component Comment** (Комментарий к компоненту) • **IS Comment** (Комментарий к внутреннему стандарту) • **IS Peak Comment** (Комментарий к пику внутреннего стандарта) • **Peak Comment** (Комментарий к пику) • **Sample Comments** (Комментарий к образцу)
Allow manual integration (Интегрирование вручную)	Позволяет пользователям активировать режим ручного интегрирования на панели **Peak Review**. Если выбрана эта опция, необходимо также установить флажок **Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram**. Команда **Allow manual integration** может быть отключена, если выбрана опция **Modify Results Table integration parameters**.
Allow set to Peak Not Found (Присвоение пику статуса «не найден»)	Позволяет использовать функцию **Set peak to not found**. Чтобы выполнить данное действие, нажмите правой кнопкой мыши на панели **Peak Review**.
Include or exclude a peak from the Results Table (Включение или исключение пика из таблицы результатов)	Позволяет включать или исключать пики из **Results Table**, **Statistics Table** и калибровочных кривых.
Modify regression settings for fit and weight (Изменение настроек регрессии: параметров аппроксимации и весовых коэффициентов)	Позволяет пользователю изменять настройки регрессии в окне калибровочной кривой при использовании функций **Modify Results Table Method** и **New Quantitation Method wizard**.

Предустановленный доступ	Описание
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram (Изменение параметров интегрирования таблицы результатов для одной хроматограммы)	Позволяет пользователям изменять одну хроматограмму.
Modify quantitation method for the Results Table component (Изменение метода количественного анализа для компонента таблицы результатов)	Позволяет пользователю применять изменения, внесенные в одну хроматограмму, к компоненту. Пользователи должны обладать данным полномочием и установить флажок **Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram**, если необходимо сделать единичные изменения, а затем применить их к компонентам.
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables (Создание, использование и экспорт графиков измерений в таблицы результатов)	Позволяет пользователям создавать и использовать графики измерений в **Results Table** (кнопка **Metric Plot** нажата) или экспортировать графики измерений. Выберите последовательно пункты **File > Export**.
Set Peak Review Title Format (Установка формата заголовка в окне просмотра пиков)	Позволяет пользователям изменять **Peak Review Title Format**. Чтобы выполнить данное действие, нажмите правой кнопкой мыши на панели **Peak Review**.
Add, Rename, or Modify custom column (Добавление, переименовывание и изменение пользовательского столбца)	Позволяет пользователям добавлять, переименовывать и изменять пользовательский столбец. Даже без данного полномочия пользователи могут выполнять запросы, при которых будут автоматически создаваться пользовательские столбцы. Если данное полномочие отключено, также должно быть отключено полномочие **Remove custom column**. Полномочие **Remove custom column** может быть отключено, если установлен флажок **Add, Rename, or Modify custom column**.
Remove custom column (Удаление пользовательского столбца)	Позволяет пользователям удалять пользовательский столбец в **Results Table**.
Modify Results Table column settings (Изменение настроек столбца таблицы результатов)	Позволяет пользователям изменять настройки столбца **Results Table** в пределах **Results Table**.

Предустановленный доступ	Описание
Save Column Settings as Project Default (Сохранение настроек столбца в качестве настроек проекта по умолчанию)	Позволяет пользователям применять настройки столбца к проекту.
Lock and save Results Table (Блокировка и сохранение таблицы результатов)	Позволяет пользователям блокировать и сохранять **Results Table**.
Unlock and save Results Table (Разблокировка и сохранение таблицы результатов)	Позволяет пользователям разблокировать и сохранять **Results Table**.
Review and save Results Table (Просмотр и сохранение таблицы результатов)	Позволяет пользователям просматривать и сохранять **Results Table**
Edit Report Template (Редактирование шаблона отчета)	Позволяет пользователям редактировать шаблоны отчета.
Transfer to LIMS (Передать данные в LIMS)	Позволяет пользователям передавать сохраненные и блокированные **Results Table** в ЛИС. Событие записывается в журнал аудита.

Настройки безопасности

таблицу F-1 содержат рекомендованные настройки безопасности для ролей пользователя.

Таблица F-1 Настройки безопасности в зависимости от роли пользователя

Настройка безопасности	Admini-стратор	Наблюдатель	Химик-аналитик	Эксперт
Create session file (Создание файла сеанса)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Create quantitation methods (Создание методов количественного анализа)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа

Таблица F-1 Настройки безопасности в зависимости от роли пользователя (продолжение)

Настройка безопасности	Администратор	Наблюдатель	Химик-аналитик	Эксперт
Modify quantitation method files (Изменение файлов метода количественного анализа)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table (Экспорт и создание отчета разблокированной таблицы результатов)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Replace existing Results Table when saved (Замена существующей таблицы результатов при сохранении)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Доступ
Change default quantitation method integration algorithm (Изменение выбранного по умолчанию алгоритма интегрирования метода количественного анализа)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа

Таблица F-1 Настройки безопасности в зависимости от роли пользователя (продолжение)

Настройка безопасности	Администратор	Наблюдатель	Химик-аналитик	Эксперт
Change default quantitation method integration parameters (Изменение выбранных по умолчанию параметров метода количественного анализа)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Allow Enable Project Modified Peak Warning (Включение предупреждения об изменении пика проекта)	Доступ	Нет доступа	Нет доступа	Нет доступа
Allow Project Secure Export Settings	Доступ	Нет доступа	Нет доступа	Нет доступа
Add samples to Results Table (Добавление образцов в таблицу результатов)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Remove samples from Results Table (Удаление образцов из таблицы результатов)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Modify Sample Name (Изменение названия образца)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Modify Sample Type (Изменение типа образца)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Modify Sample ID (Изменение идентификатора образца)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа

Таблица F-1 Настройки безопасности в зависимости от роли пользователя (продолжение)

Настройка безопасности	Администратор	Наблюдатель	Химик-аналитик	Эксперт
Modify Actual Concentration (Изменение фактической концентрации)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Modify Dilution Factor (Изменение коэффициента разбавления)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Modify Comment Fields (Изменение поля с комментарием)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Allow manual integration (Интегрирование вручную)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Allow set to Peak Not Found (Присвоение пику статуса «не найден»)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Include or exclude a peak from the Results Table (Включение или исключение пика из таблицы результатов)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Modify regression settings for fit and weight (Изменение настроек регрессии: параметров аппроксимации и весовых коэффициентов)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа

Таблица F-1 Настройки безопасности в зависимости от роли пользователя (продолжение)

Настройка безопасности	Администратор	Наблюдатель	Химик-аналитик	Эксперт
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram (Изменение параметров интегрирования таблицы результатов для одной хроматограммы)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Modify quantitation method for the Results Table component (Изменение метода количественного анализа для компонента таблицы результатов)	Доступ	Доступ	Доступ	Нет доступа
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables (Создание, использование и экспорт графиков измерений в таблицы результатов)	Доступ	Доступ	Доступ	Доступ
Set Peak Review Title Format (Установка формата заголовка в окне просмотра пиков)	Доступ	Нет доступа	Нет доступа	Нет доступа

Таблица F-1 Настройки безопасности в зависимости от роли пользователя (продолжение)

Настройка безопасности	Администратор	Наблюдатель	Химик-аналитик	Эксперт
Add, Rename, or Modify custom column (Добавление, переименовывание и изменение пользовательского столбца)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Remove custom column (Удаление пользовательского столбца)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Modify Results Table column settings (Изменение настроек столбца таблицы результатов)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Save Column Settings as Project Default (Сохранение настроек столбца в качестве настроек проекта по умолчанию)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Lock and save Results Table (Блокировка и сохранение таблицы результатов)	Доступ	Доступ	Доступ	Доступ
Unlock and save Results Table (Разблокировка и сохранение таблицы результатов)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа

Таблица F-1 Настройки безопасности в зависимости от роли пользователя (продолжение)

Настройка безопасности	Администратор	Наблюдатель	Химик-аналитик	Эксперт
Review and save Results Table (Просмотр и сохранение таблицы результатов)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Доступ
Modify Report Template (Изменение шаблона отчета)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Transfer to LIMS (Controls Initiate Transfer to Watson LIMS as well) (Передача данных в ЛИС (Управление передачей данных в приложение Watson LIMS))	Доступ	Доступ	Нет доступа	Доступ
Export, import, or remove External Calibration (Экспорт, импорт или удаление внешней калибровки)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа
Change Audit Map Setting (Изменение настроек карты аудита)	Доступ	Доступ	Нет доступа	Нет доступа

История изменений

Версия	Причина изменения	Дата
A	Первый выпуск документа.	Сентябрь 2013
B	Изменен раздел «Меню File (Файл)». Изменен раздел «Меню Audit Trail (Журнал аудита)». Изменена таблица «Столбцы таблицы Results Talbe». Изменен раздел «Отчеты».	Январь 2015 г.
C	Логотип AB SCIEX на обложке изменен на SCIEX Diagnostics. Обновлена страница с указанием авторских прав; там, где это требуется, «AB Sciex» заменено на «SCIEX». В главе Вводные сведения о программном обеспечении добавлены сведения о Windows 10. Обновлен раздел «Свяжитесь с нами». Изменен заголовок темы «Менеджер карты аудита» на «Карты аудита». Обновлено описание пункта меню Set Last Component of Group as IS в разделе подменю Internal Standards. В разделе о диалоговом окне Update Retention Time заменено «параметр процента общей площади» на «время удерживания». Обновлено описание параметра Expected RT в разделе о параметрах алгоритма интегрирования SignalFinder. В раздел о создании отчетов добавлены сведения о Windows 10. Обновлено содержание раздела о тегах шаблона отчета. Изменен снимок экрана для рисунка 7-3. К содержимому применены новые шаблоны, что привело к ряду правок в содержимом. Удалены все ссылки на Windows XP.	Июнь 2017 г.