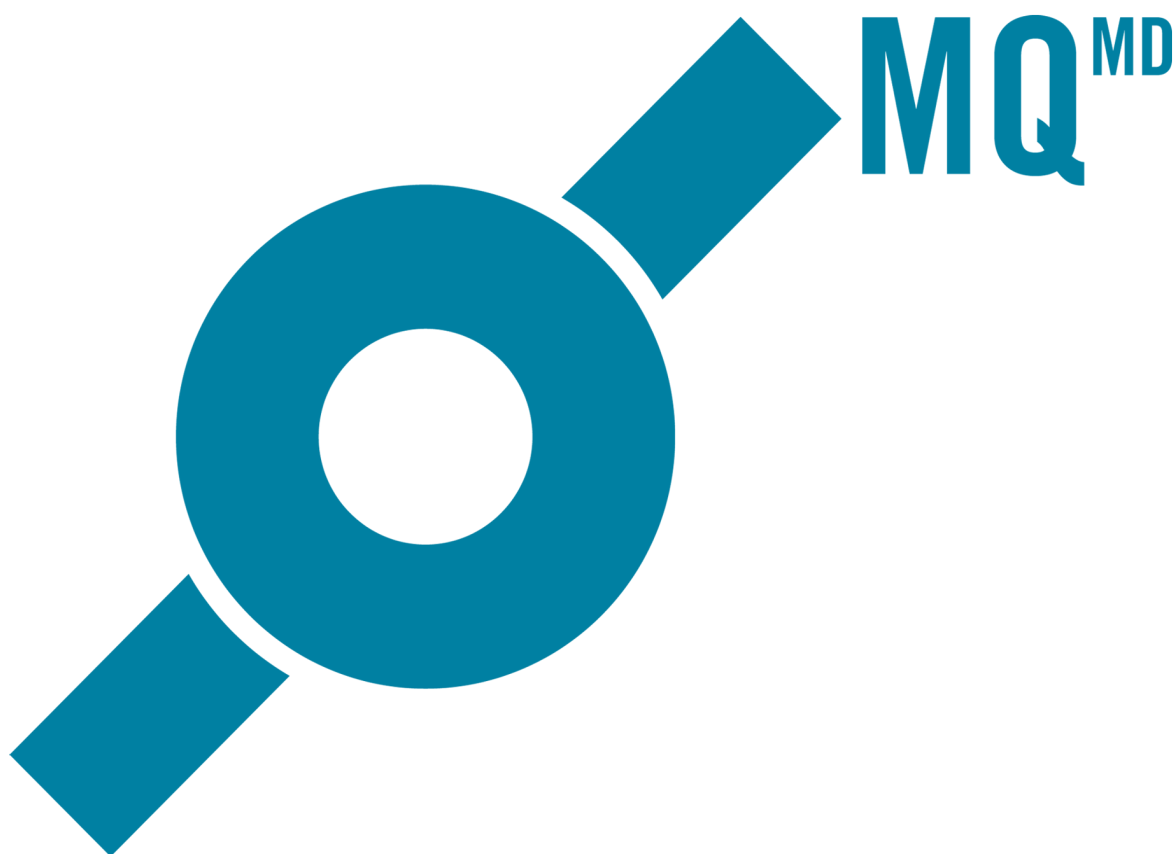

Softver MultiQuant™ MD 3.0.3

Referentni vodič



Ovaj dokument se isporučuje korisnicima koji su kupili SCIEX opremu kako bi ga koristili tokom rada sa SCIEX opremom. Ovaj dokument ima zaštićena autorska prava i strogo je zabranjena bilo kakva vrsta kopiranja dokumenta ili bilo kog njegovog dela, osim ukoliko za to kompanija SCIEX nije izdala pismeno odobrenje.

IVD

Softver opisan u ovom dokumentu je licenciran. Protivzakonito je kopirati, prilagođavati ili dalje distribuirati ovaj softver na bilo koji način, osim ukoliko to nije posebno dozvoljeno licencom. Pored toga, licencom se može zabraniti i svako rastavljanje softvera, reverzni inženjering ili njegova dekompilacija u bilo koje svrhe. Garancije su u skladu sa ovde navedenim informacijama.

Pojedini delovi ovog dokumenta mogu sadržati reference na druge proizvođače i/ili njihove proizvode, što znači da mogu sadržati delove čiji su nazivi zaštićeni i/ili predstavljaju zaštitne znakove svojih vlasnika. Takva upotreba je namenjena isključivo za obeležavanje proizvoda određenih proizvođača koje je isporučila kompanija SCIEX, a koji su sastavni deo njene opreme i kao takva ne podrazumeva davanje nikakvih prava i/ili licence za upotrebu tih pojedinačnih proizvoda niti dozvoljava drugima da koriste proizvode drugih proizvođača i/ili njihove zaštićene nazive.

CE

Garancije kompanije SCIEX su ograničene na garancije obezbeđene prilikom kupovine ili izdavanja licence njenih proizvoda, i one isključivo predstavljaju i obavezuju kompaniju SCIEX. Kompanija SCIEX ne daje nikakve druge garancije bilo koje vrste, izričite ili podrazumevane, uključujući i one garancije koje se odnose na komercijalnost ili podesnost za određenu svrhu, bez ograničenja samo na navedene, bilo da one proizlaze iz statuta ili bilo kog dela zakona ili da prate tokove poslovanja i primene trgovine, te ih se izričito odriče, i ne prihvata nikakvu odgovornost ili eventualne obaveze, uključujući i indirektna ili posledična oštećenja, za bilo kakvu upotrebu od strane kupca ili bilo kakve nepovoljne okolnosti koje iz nje proizlaze.

Za „in vitro“ dijagnostičku upotrebu.

Rx only.

Nije dostupan u svim zemljama. Za detalje, kontaktirajte predstavnika prodaje kompanije SCIEX.

Kompanija AB Sciex posluje pod imenom SCIEX.

Pomenute robne marke su u vlasništvu kompanije AB Sciex Pte. Ltd. ili svojih vlasnika.

Zaštitni znak AB SCIEX™ se koristi pod licencom.

© 2017. AB Sciex



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



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

Sadržaj

1 Predstavljanje softvera.....	7
Opcija „Help“ u softveru.....	7
Tipovi datoteka.....	8
Kontaktirajte nas.....	8
Tehnička podrška.....	8
2 Meni „File“.....	9
Uvoz metoda kvantifikacije.....	10
Podmeni izvoza.....	11
Izvoz tabela „Results Tables“.....	11
Izvoz tabele „Results Table-Metric“.....	13
Prenos u LIMS.....	14
3 Meni „Edit“.....	15
Opcija „Modify Results Table Method“.....	17
Opcija „Project Units & Calibration Defaults“.....	18
Opcija „Project Secure Export Settings“.....	18
4 Meni „Process“.....	19
Opcija „Export Calibration“.....	19
Opcija „Import External Calibration“.....	20
5 Meni „Audit Trail“.....	22
Pregledač „Audit Trail Viewer“.....	22
Pregled rezultata traga revizije u pregledaču „Audit Trail Viewer“.....	23
Pretraživanje ključnih reči.....	24
Filtriranje revidiranih događaja.....	24
Izvoz pregledača „Audit Trail Viewer“.....	26
Štampanje pregledača „Audit Trail Viewer“.....	26
Upravljač „Audit Trail Manager“.....	26
Informacije o mapama revizije.....	27
Kreiranje mape revizije.....	27
Promena mape revizije.....	30
Uređivanje mape revizije.....	31
Pregled konfiguracije ugrađene revizije.....	34
6 Meni „Help“.....	36
7 Tabele sa rezultatima.....	37
Lista „Components & Groups“.....	38
Kontekstualni meni u tabeli „Results Table“.....	39
Primena trenutnih koncentracija aktuelnog analita na sve.....	40
Opcija „Column Settings“.....	41
Filter tipa uzorka.....	42
Opcija „View Hidden Rows“.....	43
Dijalozi tabele „Results Table“.....	43

Sadržaj

Odabir uzoraka.....	43
Izbor metoda.....	44
Odabir reprezentativnog uzorka.....	45
Definisanje komponenti.....	46
Definisanje integracije.....	49
Opcija „Outlier Settings“.....	52
Kolone tabele sa rezultatima.....	55
8 Pregled vršne vrednosti.....	63
Ručna integracija.....	63
Dugme „Apply“.....	64
Saveti za pregledanje vršnih vrednosti.....	64
Kontekstualni meni opcije „Peak Review“	65
Dijalog „Peak Review Options“: kartica „Appearance“.....	66
Dijalog „Peak Review Options“: kartica „Zooming“.....	68
Podešavanje formata naslova pregleda vršne vrednosti.....	70
Kopiranje parametara.....	70
Lepljenje parametara.....	71
Podešavanje vršne vrednosti na „Not Found“.....	71
Korišćenje vršne vrednosti.....	71
Ažuriranje metoda kvantifikacije za komponentu.....	71
Ažuriranje metoda kvantifikacije za grupu.....	71
Primena parametara integracije na uzorak u okviru grupe.....	72
Vraćanje vršne vrednosti na originalni metod.....	72
Vraćanje svih vršnih vrednosti za komponentu.....	72
9 Uporedni pregled uzoraka.....	73
Obavljanje uporednog pregleda uzoraka.....	73
10 Okno „Calibration“.....	75
Dijalog „Regression Options“.....	75
Saveti za kalibraciju.....	76
Kontekstualni meni „Calibration“.....	76
11 Tabele „Statistics“.....	78
Saveti za „Statistics Table“.....	79
Kontekstualni meni „Statistics Table“.....	80
12 Metrički grafikoni.....	81
Generisanje metričkog grafikona.....	81
Čuvanje podataka metričkog grafikona.....	81
Saveti za metričke grafikone.....	81
Kontekstualni meni „Metric Plot“.....	82
Dijalog „Regression“.....	83
13 Uređivač „Quantitation Method Editor“.....	84
Kartica „Components“.....	84
Podmeni „Groups“.....	85
Podmeni „Internal Standards“.....	87
Kartica „Integration“	88
Dijalog „Highlight Components“.....	89
Dijalog „Update Retention Time“.....	90
Kartica „Outlier Settings“	90
14 Vodič za radni proces kvantitativne analize.....	92

O kalibracionim krivama.....	92
Preduslovi.....	92
Izmena kolona prikazanih u tabeli „Results Table“.....	92
Obrada podataka pomoću algoritma integracije SignalFinder™ Integration Algorithm.....	94
Podešavanje parametara integracije vršnih vrednosti.....	94
Kreiranje tabele „Results Table“.....	95
Pregled vršnih vrednosti.....	99
Izmena kalibracione krive.....	100
Pregled statističkih podataka za uzorke.....	101
Obrada podataka korišćenjem algoritma integracije MQ4.....	102
Podešavanje parametara integracije vršnih vrednosti.....	102
Kreiranje tabele „Results Table“.....	103
Pregled vršnih vrednosti.....	107
Izmena kalibracione krive.....	108
Pregled statističkih podataka za uzorke.....	109
Algoritmi integracije.....	110
O algoritmu „SignalFinder Integration Algorithm“.....	111
Parametri algoritma integracije SignalFinder™ Integration Algorithm.....	114
Parametri algoritma integracije MQ4.....	118
Opcioni zadaci.....	121
Kreiranje metričkih grafikona.....	121
Kreiranje prilagođenih kolona.....	122
O datotekama metoda kvantifikacije i ugrađenim metodima.....	122
A Parametri algoritma integracije.....	123
Parametri algoritma integracije SignalFinder Integration Algorithm.....	123
Parametri algoritma integracije MQ4.....	126
B Jednačine regresije.....	129
Ponderi.....	130
Regresije.....	130
Linearna.....	131
Linearna do nule.....	131
Srednji faktor odgovora.....	131
Kvadratna.....	132
Stepenovana.....	132
„Wagner“.....	132
„Hill“.....	133
Izračunavanje konačnih koncentracija.....	133
Linearna.....	133
Linearna regresija do nule i faktor srednje vrednosti odziva.....	133
Kvadratna.....	133
Stepenovana.....	133
„Wagner“.....	133
„Hill“.....	134
C Izveštaji.....	135
Kreiranje izveštaja.....	135
Kreiranje šablona zaštićenog izveštaja.....	136
Predlošci izveštaja.....	138
Oznake predloška izveštaja.....	139
D Izračunavanja relativnog šuma i odnosa signala i šuma.....	153

Sadržaj

Napomena o odnosu signala i šuma pri korišćenju algoritma integracije	
SignalFinder.....	157
E Softverske ikone.....	158
F MultiQuant™ MD – pristup.....	165
Podešavanja bezbednosti.....	168
Podaci o revizijama.....	172

Predstavljanje softvera

1

U ovom dokumentu su opisane funkcije koje su dostupne u softveru MultiQuant™ MD.

Pristup softveru se zasniva na ulozi koja je dodeljena korisniku u softveru Analyst® MD. Vodite računa da se svakom korisniku dodeli odgovarajući pristup softveru.

Podržana je samo verzija na engleskom jeziku sledećih Microsoft operativnih sistema:

- Windows 7 (32-bitni i 64-bitni) sa SP1
- Windows 10

OPREZ: Format brojeva, valuta, datuma i vremena mora biti postavljen na „English (United States)“. Postavljanje formata na drugačiju vrednost može dovesti do pogrešnih podataka.

MultiQuant™ MD sa zapisom za reviziju i bezbednosnim funkcijama zahteva punu licencu, kao i da bude instaliran softver Analyst® MD.

Kontrolisani načini za izvoz podataka iz softvera su izvoz tabela „Results Tables“, prenos na LIS i izveštavanje. Drugi izvori izlaznih podataka, kao što je kopiranje i lepljenje iz tabela „Results Tables“, nisu kontrolisani. Korisnici ne treba da koriste ove nekontrolisane izlazne metode u svrhe koje su regulisane.

Napomena: MultiQuant™ MD koristi informacije za zaključavanje ekrana iz softvera Analyst® MD. Nije potrebno dodatno podešavanje za softver MultiQuant™ MD.

Napomena: Struktura datoteka i foldera se mora održavati da bi bio moguć prikaz hromatograma. Ako se podaci moraju premeštati, u tom slučaju premestite ceo projekat, održavajući strukturu datoteka.

Opcija „Help“ u softveru

Softver sadrži kratke opise alatki i poruke o greškama koje pružaju dodatne informacije o funkcijama softvera.

- Ako polje nije dostupno, pomerite kursor preko polja da biste prikazali kratke opise alatki koji objašnjavaju zašto data funkcija nije dostupna. Dodatne informacije obuhvataju informacije o tome kako da omogućite polje ili koje podešavanje bezbednosti je potrebno da bi se polje omogućilo.
- Poruke o greškama uključuju informacije o podešavanjima bezbednosti koja su potrebna za korišćenje određene funkcije.

Tipovi datoteka

Tabela 1-1 Tipovi softverskih datoteka

Tip datoteke	Opis
*.qsession	Tabela „Results Table“ softvera MultiQuant. Sadrži podatke traga revizije kvantifikacije.
*.qmethod	Metod kvantifikacije softvera MultiQuant.
*.qmap	Mapa revizije softvera MultiQuant.
*.mqcal	Datoteka eksterne kalibracije.
*.cset	Datoteka sa postavkama kolona.

Kontaktirajte nas

SCIEX podrška

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

Obuka za korisnike

- U Severnoj Americi: NA.CustomerTraining@sciex.com
- U Evropi: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Ako ste u području izvan Evrope ili Severne Amerike, kontakt informacije potražite na veb-sajtu sciex.com/education.

Centar za obuku na Internetu

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

Najnovije smernice za sigurnost na Internetu za SCIEX proizvode potražite na veb-sajtu sciex.com/productsecurity.

Tehnička podrška

Kompanija SCIEX i njeni predstavnici imaju kompletno obučeno osoblje i tehničke stručnjake širom sveta. Oni mogu dati odgovore na pitanja o sistemu i svim tehničkim problemima koji mogu nastati. Za više informacija posetite veb-sajt kompanije SCIEX na lokaciji sciex.com.

Tabela 2-1 Opcije menija „File“

Opcija menija	Opis
New Results Table	Kvantifikuje skup podataka, a zatim kreira tabelu „Results Table“. Izaberite datoteke sa podacima, kao i metod kvantifikacije koji treba da se primeni. Pogledajte Dijalozi tabele „Results Table“ na stranici 43.
New Quantitation Method	Kreira se prazna kvantifikacija „Quantitation Method Editor“ nakon što se izabere uzorak. Korisnik obično kreira metod kao deo čarobnjaka „New Results Table“. Međutim, ova komanda je korisna ako korisnik želi da kreira metod, ali ne želi odmah da ga primeni na kolekciju uzoraka da bi kreirao tabelu „Results Table“. <ul style="list-style-type: none"> • Okno za navigaciju prikazuje podfascikle, wiff datoteke i uzorke koji su dostupni u fascikli Data za izabrani projekat. • Proširite pojedinačne foldere da biste videli potfoldere ili wiff datoteke. Proširite wiff datoteku da biste prikazali dostupne uzorke.
Open Results Table	Otvora prethodno sačuvanu tabelu „Results Table“. Nakon što izaberete komandu, otvara se standardni dijalog Open . Pogledajte Tabele sa rezultatima na stranici 37.
Open Quantitation Method	Otvora prethodno sačuvan metod kvantifikacije. Nakon što izaberete komandu, otvara se standardni dijalog Open . Pogledajte Uređivač „Quantitation Method Editor“ na stranici 84.
Save	Koristi se za čuvanje aktivne tabele „Results Table“ ili uređivača „Quantitation Method Editor“ u novoj datoteci. Ako se tabela „Results Table“ ili uređivač „Quantitation Method Editor“ ne sačuva, onda se od korisnika traži naziv datoteke. U suprotnom se prethodna verzija zamenjuje.
Save As	Koristi se za čuvanje aktivne tabele „Results Table“ ili „Quantitation Method Editor“ u novoj datoteci.
Recent Results Table	Sadrži stavke podmenija za svaku nedavno korišćenu tabelu „Results Table“. Izaberite jednu od stavki da biste otvorili odgovarajuću datoteku.
Recent Quantitation Methods	Sadrži stavke podmenija za svaki nedavno korišćen metod kvantifikacije. Izaberite jednu od stavki da biste otvorili odgovarajuću datoteku.

Tabela 2-1 Opcije menija „File“ (nastavak)

Opcija menija	Opis
Import	Kreira novi metod kvantifikacije iz tekstualne datoteke. Korisnik obično kreira metod ručno koristeći komandu „New Quantitation Method command“ (pogledajte Uređivač „Quantitation Method Editor“ na stranici 84) ili kao deo procesa kreiranja nove tabele „Results Table“ (pogledajte Tabele sa rezultatima na stranici 37). Ova komanda je korisna ako korisnik želi da kreira ili izmeni metod kvantifikacije. U tom slučaju, kreirajte metod ručno, a zatim koristite komandu Quantitation Method as Text .
Export	Sadrži komande za izvoz metoda kvantifikacije u obliku .qmethod ili .txt datoteke. Pogledajte Podmeni izvoza na stranici 11 . Kontrolisani načini za izvoz podataka iz softvera su izvoz tabela „Results Tables“, prenos u LIMS i izveštavanje. Drugi izvori izlaznih podataka, kao što je kopiranje i lepljenje iz tabela „Results Tables“, nisu kontrolisani. Korisnici ne treba da koriste ove nekontrolisane izlazne metode u svrhe koje su regulisane.
Transfer to LIMS	Datoteka LIMS licence je potrebna za aktiviranje ove funkcije. Pogledajte Prenos u LIMS na stranici 14 .
Export and Save Results Table	Izvoz iz tabela „Results Tables“ je jedan od kontrolisanih metoda izvoza podataka.
Create Report and Save Results Table	Kreira izveštaj u formatu programa Microsoft Word koristeći softver Reporter. Pogledajte Izveštaji na stranici 135 . U slučaju kreiranja prilagođenog šablona, korisnik je odgovoran za proveru šablona. Korisnik može da izmeni format broja u uređivaču šablona izveštaja. Ako format broja nije naznačen u šablonu, onda se format iz opcije Results Table Column Setting koristi u izveštaju.
Exit	Izlaz iz programa. Korisniku se prikazuje podsećanje da sačuva nesačuvane podatke.

Uvoz metoda kvantifikacije

1. Kliknite na **File > Import > Quantitation Method from Text**.
2. Izaberite tekstualnu datoteku.
3. Izaberite reprezentativni uzorak.

Otvora se uređivač „Quantitation Method Editor“.

4. Sačuvajte metod u formatu *.qmethod tako da se može naknadno koristiti za kvantifikaciju novog skupa podataka.

Podmeni izvoza

Kontrolisani načini za izvoz podataka iz softvera su izvoz tabela „Results Tables“, prenos u LIMS i izveštavanje. Drugi izvori izlaznih podataka, kao što je kopiranje i lepljenje iz tabela „Results Tables“, nisu kontrolisani. Korisnici ne treba da koriste ove nekontrolisane izlazne metode u svrhe koje su regulisane.

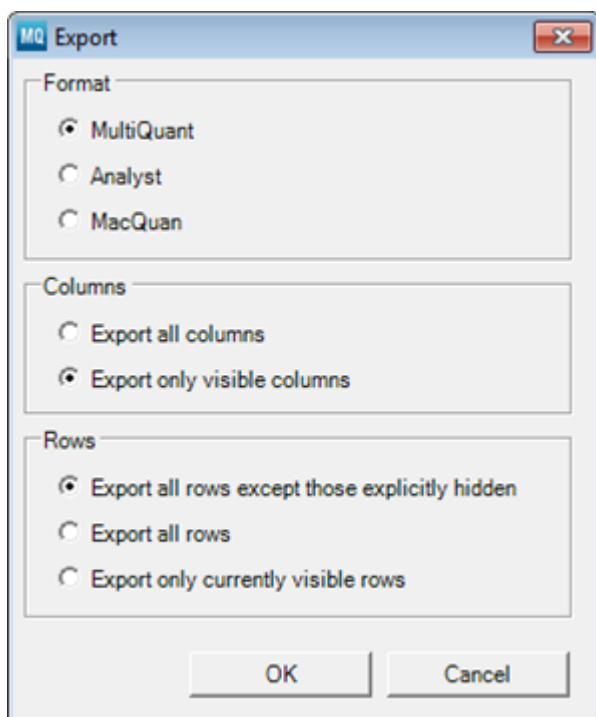
Tabela 2-2 Opcije menija izvoza

Opcija menija	Opis
Results Table-Metric	Kreira tekstualnu datoteku sa tabulatorskim delimiterom koja sadrži informacije iz aktivne tabele „Results Table“. Pogledajte Izvoz tabele „Results Table-Metric“ na stranici 13 .
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod	Izvozi metod kvantifikacije u novu datoteku. Kada se kreira tabela „Results Table“, kopija metoda kvantifikacije koja je korišćena za generisanje tabele se interno čuva sa tabelom. Ovo je korisno ako je originalni metod kvantifikacije obrisani ili izmenjen, a korisnik želi da primeni originalni metod na novi paket uzoraka kreirajući tabelu „Results Table“.
Results Table's Quantitation Method as Text	Izvozi kopiju metoda u tekstualnom formatu. Kada se kreira tabela „Results Table“, kopija metoda kvantifikacije koja je korišćena za generisanje tabele se interno čuva sa tabelom.
Quantitation Method as Text	Ove datoteke sadrže red zaglavlja i red za svaku komponentu (analit ili interni standard). Postoji kolona za naziv komponente, opseg mase, svaki parametar integracije i tako dalje. Redovi zaglavlja ne smeju da se menjaju niti smeju da se dodaju ili brišu kolone ako je potrebno da se metod kvantifikacije uveze u softver MultiQuant™ MD. Ako se izmeni red zaglavlja kolone koja određuje parametar integracije ili se sama kolona obriše, podrazumevana vrednost, kao što je navedeno u opciji „User Integration Defaults“, tog parametra integracije će se promeniti za sve komponente. Ako se izmeni ili obriše red zaglavlja bilo koje druge kolone, metod neće biti uvezen. Korisnik treba da otvori metod i uveri se da postoje sve zahtevane promene u uvezenom metodu kvantifikacije. Pogledajte tabelu 2-1 .

Izvoz tabela „Results Tables“

Napomena: Proizvođač ne prihvata nikakvu odgovornost ili eventualne obaveze, uključujući i indirektna ili posledična oštećenja, nakon izvoza podataka iz softvera. Tabela „Results Table“ se izvozi sa punom preciznošću, bez obzira na format broja u podešavanju kolone.

Slika 2-1 Dijalog „Export“



Oznaka	Opis
Format	
MultiQuant	Izaberite za izvoz u punoj preciznosti. U ovom formatu tekstualna datoteka sadrži naslovni red koji koristi iste nazive kolona koji su prikazani u tabeli Results Table . To je preporučeni format za izvoz tabela Results Tables .
Analyst	Izaberite za izvoz u preciznosti koja je definisana u podešavanju kolone. Ovaj format je identičan onom koji izvozi softver Analyst® MD kvantifikacijom tabele Results Tables . Razlika između ovog formata i prethodnog formata je u tome što naslovi kolona koriste malo drugačije nazive u nekim slučajevima (kako bi odgovarali formatu softvera Analyst® MD) i što postoje dodatni redovi zaglavlja za svaki analit koji opisuje kalibraciju.
MacQuan	Ovaj format je identičan onom koji koristi softver Analyst® MD osim što nazivi iz zaglavlja kolona odgovaraju onima koje koristi paket za kvantifikaciju MacQuan.
Columns	
Export all columns	Izaberite za izvoz svih mogućih polja, uključujući one kolone koje su trenutno sakrivene u tabeli Results Table .

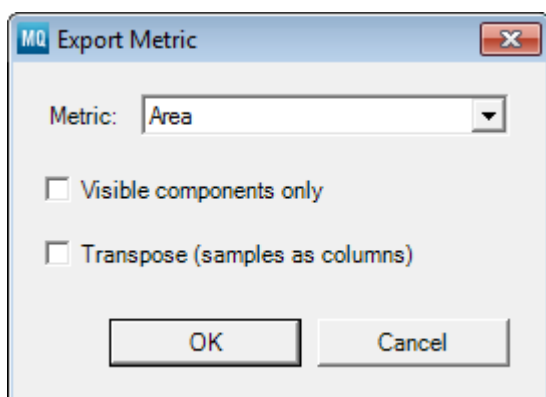
Oznaka	Opis
Export only visible columns	Izaberite za izvoz samo onih kolona koje su trenutno prikazane u tabeli Results Table . Korisnik takođe može izabrati koje su kolone vidljive pomoću komande Results Table Column Settings . Pogledajte Kontekstualni meni u tabeli „Results Table“ na stranici 39 .
Rows	
Export all rows except those explicitly hidden	Izaberite za izvoz svih redova osim onih koji su sakriveni zbog specijalnog filtriranja. Pogledajte Softverske ikone na stranici 158 . Izvoze se redovi koji su sakriveni zbog filtriranja po stavki Sample Type ili po stavki Component .
Export all rows	Izaberite za izvoz svih redova (tj. svih komponenti za sve uzorke).
Export only currently visible rows	Izaberite za izvoz samo onih redova koji su trenutno prikazani u tabeli Results Table . Redovi koji su sakriveni zbog filtriranja po stavki Sample Type ili stavki Component nisu uključeni.

Izvoz tabele „Results Table-Metric“

Napomena: Proizvođač ne prihvata nikakvu odgovornost ili eventualne obaveze, uključujući i indirektna ili posledična oštećenja, nakon izvoza podataka iz softvera. Tabela **Results Table** se izvozi sa punom preciznošću, bez obzira na format broja u podešavanju kolone.

Koristi se za kreiranje tekstualne datoteke sa tabulatorskim delimiterom koja sadrži informacije iz aktivne tabele „Results Table“.

Slika 2-2 Dijalog „Export Metric“



Meni „File“

Oznaka	Opis
Metric	Izaberite polje za izvoz. Pogledajte Kolone tabele sa rezultatima na stranici 55 .
Visible components only	Ako je izabrana ova opcija, onda se u datoteku izvoze samo one komponente za koje je najmanje jedan odgovarajući red trenutno vidljiv u tabeli „Results Table“. Ako ova opcija nije izabrana, onda se izvoze informacije za sve komponente.
Transpose (samples as columns)	Ako je izabrana ova opcija, onda rezultirajuća datoteka ima kolonu za svaki uzorak i red za svaku komponentu (analit ili interni standard). Ako ova opcija nije izabrana, onda postoji kolona za svaku komponentu i red za svaki uzorak.

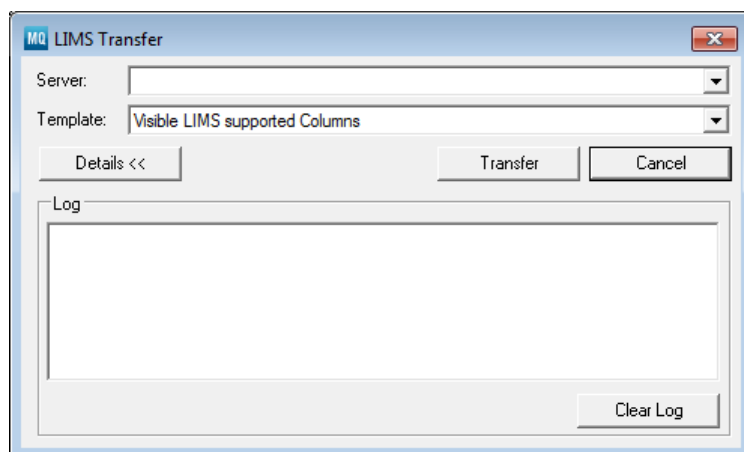
Prenos u LIMS

Ova komanda je dostupna samo kada je tabela „Results Table“ otvorena. Datoteka LIMS licence je potrebna za aktiviranje ove funkcije.

Kontrolisani načini za izvoz podataka iz softvera su izvoz tabela „Results Tables“, prenos u LIMS i izveštavanje. Drugi izvori izlaznih podataka, kao što je kopiranje i lepljenje iz tabela „Results Tables“, nisu kontrolisani. Korisnici ne treba da koriste ove nekontrolisane izlazne metode u svrhe koje su regulisane.

1. Kliknite na **Help > Install License** da biste aktivirali licencu.

Slika 2-3 Dijalog „LIMS Transfer“



2. Unesite naziv servera u polje **Server** u sledećem formatu: **http:\\IP adresa servera;broj porta**.
3. Izaberite šablon sa liste **Template**.
4. Kliknite na opciju **Transfer**.

Tabela 3-1 Opcije menija „Edit“

Opcija menija	Opis
Clear	Briše trenutni izbor. Ova opcija se primenjuje kada na kartici Components u uređivaču Quantitation Method Editor postoji jedan ili više izabranih redova.
Copy	Kada je tabela Results Table aktivna, ova komanda kopira izabrani deo tabele u ostavu. Kada je grafikon Peak Review ili Calibration aktivan, kopira se slika grafikona.
Paste	Kada je tabela Results Table aktivna sa izabranom oblašću koja se može izmeniti, ova komanda lepi ćelije ili kolone iz ostave.
Copy Entire Table	Kada je tabela Results Table ili tabela Statistics Table aktivna, ova komanda kopira sve podatke u ostavu. U slučaju tabele Results Table , kopiraju se samo trenutno vidljivi redovi i kolone.
Fill Down	Kada je tabela Results Table aktivna sa izabranom oblašću koja se može izmeniti, ova komanda kopira informacije iz prvog izabranog reda u sve naredne izabrane redove.
Select all Rows	Odabira sve redove u trenutno aktivnoj tabeli Results Table ili Statistics Table . Ovo je korisno ako korisnik želi naknadno da primeni komandu kao što je Copy , kojom se izvršavaju operacije na izabranim redovima.
Modify Results Table Method	<p>Vrši promene u metodu kvantifikacije povezanim sa trenutno aktivnom tabelom Results Table. Ovo je korisno ako korisnik želi da doda ili ukloni komponente. Da biste izmenili samo parametre integracije, koristite opciju Update Quantitation Method for Group. Pogledajte Pregled vršne vrednosti na stranici 63.</p> <p>Kada se ova komanda izabere, otvara se dijalog Quantitation Method Editor. Podaci se ponovo obrađuju, a tabela Results Table se ažurira kako bi se prikazali podaci. Pogledajte Uređivač „Quantitation Method Editor“ na stranici 84 i Dijalozi tabele „Results Table“ na stranici 43.</p> <p>Ponovnom primenom opcije Quantitation Method zamenjuju se sve ručno izmenjene vršne vrednosti za zadatu komponentu, a zatim brišu polja za potvrdu u koloni Modified u tabeli „Results Table“.</p>

Tabela 3-1 Opcije menija „Edit“ (nastavak)

Opcija menija	Opis
Project Integration Defaults	Podešava podrazumevane parametre za pronalaženje vršne vrednosti koji se koriste kada se kreira metod kvantifikacije. Ako ima više komponenti, podesite podrazumevane vrednosti na osnovu hromatografije tako da ne moraju da se podešavaju pojedinačno za svaku komponentu. Međutim, nijedan skup parametara neće biti idealan za sve komponente, pa će biti potrebno da se neki parametri pojedinačno podese za neke komponente. Pogledajte Parametri algoritma integracije na stranici 123 .
Project Units & Calibration Defaults	Podešava podrazumevane jedinice koncentracije i parametre za regresiju koji se koriste kada se kreira novi metod kvantifikacije. Korisnik može da podesi ove parametre i prilikom kreiranja samog metoda. Ipak, ako se koriste ista podešavanja, podrazumevane vrednosti se mogu jednostavnije podesiti nakon korišćenja ove komande. Pogledajte Opcija „Project Units & Calibration Defaults“ na stranici 18 .
Project Secure Export Settings	Ukoliko je ova opcija izabrana, podaci u tekstualnoj datoteci će biti šifrovani tokom izvoza. Podesite lozinku da biste omogućili šifrovanje. Pogledajte Opcija „Project Secure Export Settings“ na stranici 18 .
Enable Project Modified Peak Warning	Podrazumevano nije izabrana opcija. Ako je izabrana, kada korisnik izvrši izmenu u hromatogramu u tabeli Results Table a zatim sačuva izmene, prikazuje se poruka upozorenja u kojoj se navodi da je izvršena izmena. Korisnik ima opciju da nastavi sa čuvanjem ili da se vrati u tabelu Results Table . Pogledajte Opcija „Modify Results Table Method“ na stranici 17 .

Tabela 3-1 Opcije menija „Edit“ (nastavak)

Opcija menija	Opis
Cache Chromatograms for Faster Peak Review	<p>Kada je ova funkcija omogućena, svaki put kada se ekstrahovani jonski hromatogram (XIC) izračunava za određeni uzorak i komponentu, on se čuva za naknadnu upotrebu sve dok povezana tabela „Results Table“ ostane otvorena.</p> <p>Na primer, ako korisnik kreira tabelu Results Table kada je ova funkcija omogućena, onda će se hromatogrami u oknu Peak Review brzo prikazivati zato što su prethodno keširani tokom procesa prvobitne integracije kako bi kreirali tabelu Results Table i neće biti potrebno da se ponovo izračunavaju na osnovu informacija iz wiff datoteke. Ako korisnik otvori prethodno sačuvanu tabelu Results Table, onda se pojedinačni hromatogrami moraju izračunati kada se prvi put prikažu u oknu Peak Review. Ipak, vraćanje na određeni prethodni hromatogram biće brže.</p> <p>Potrebno je da postoji dovoljno memorije na računaru za keširanje svih hromatograma. Ipak, za veoma velike skupove uzoraka sa velikim brojem analita, ovu opciju treba onemogućiti da bi se sprečile poruke o nedostatku memorije.</p>
Cache all Chromatograms Now	<p>Kada je komanda Cache Chromatograms for Faster Peak Review omogućena, ova komanda se koristi za izračunavanje i potonje keširanje svih hromatograma za aktivnu tabelu Results Table. Kod velikih skupova podataka izvršavanje ove komande može trajati dugo. Ipak, kada se završi, svi hromatogrami su keširani i proces pregleda vršne vrednosti je brži. Komanda se po potrebi može zaustaviti.</p> <p>Izvršite ovu operaciju u slučaju pregleda velikog broja hromatograma. Ako je opcija Cache Chromatograms for Faster Peak Review prvobitno omogućena, ovu operaciju ne treba izvoditi ponovo nakon kreiranja tabele Results Table, jer su hromatogrami već keširani. Ova komanda je korisna nakon otvaranja prethodno sačuvane tabele Results Table.</p>

Opcija „Modify Results Table Method“

Ova opcija vrši promene u metodu kvantifikacije povezanom sa trenutno aktivnom tabelom Results Table. Ovo je korisno ako korisnik želi da doda ili ukloni komponente. Da biste izmenili samo parametre integracije, koristite komandu **Update Quantitation Method for Group**. Pogledajte odeljak [Ažuriranje metoda kvantifikacije za grupu na stranici 71](#).

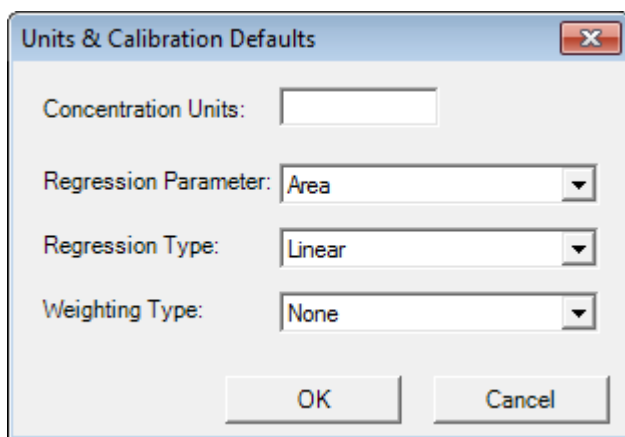
Kada se ova komanda izabere, otvara se dijalog „Quantitation Method Editor“. Podaci se ponovo obrađuju i tabela „Results Table“ se ažurira kako bi se prikazali novi podaci. Pogledajte odeljak [Uređivač „Quantitation Method Editor“ na stranici 84](#).

Ponovnom primenom opcije „Quantitation Method“ zamenjuju se sve ručno izmenjene vršne vrednosti za zadatu komponentu a zatim brišu polja za potvrdu u koloni **Modified** u tabeli **Results Table**.

Opcija „Project Units & Calibration Defaults“

Ova opcija podešava opcije **Concentration Units**, **Regression Parameter** (Area or Height), **Regression Type** i **Weighting Type**. Različiti tipovi regresije i merenja težine su opisani u odeljku [Jednačine regresije na stranici 129](#).

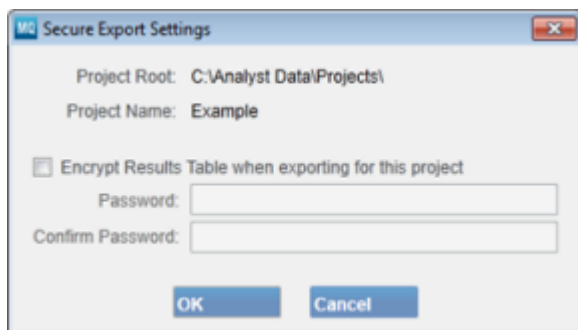
Slika 3-1 Dijalog „Units & Calibration Defaults“



Opcija „Project Secure Export Settings“

Podaci u tekstualnoj datoteci se šifruju tokom izvoza. Podesite lozinku da biste omogućili šifrovanje. Pogledajte [sliku 3-2](#).

Slika 3-2 Dijalog „Secure Export Settings“



Meni „Process“

4

Tabela 4-1 Opcije menija „Process“

Opcija menija	Opis
Add Samples	Dodaje dodatne uzorke trenutno aktivnoj tabeli Results Table . Pogledajte Odabir uzoraka na stranici 43 . Traka toka se prikazuje dok se novi uzorci integrišu i dodaju u postojeću tabelu. Korisnik mora da ima omogućenu dozvolu Add samples to Results Table za obavljanje ovog zadatka.
Remove Selected Samples	Uklanja izabrane uzorke iz trenutno aktivne tabele Results Table . Korisnik mora da ima omogućenu dozvolu Remove samples from Results Table za obavljanje ovog zadatka.
Show Only Outliers	Prikazuje redove koji sadrže odstupanja. Kliknite na opciju Process > Show Only Outliers . Da bi se prikazali svi redovi, ponovo kliknite na Process > Show Only Outliers .
Go to Next Outlier	Vrši pomeranje na sledeće odstupanje u tabeli Results Table . Kliknite na opciju Process > Go to Next Outlier .
Export Calibration and Save Results Table	Čuva kopiju jednačine kalibracije za sve analite koji su povezani sa aktivnom tabelom Results Table u eksternoj datoteci (*.mqcal). Ovo omogućava da se kalibracija sa jednog skupa standardnih uzoraka primeni na druge uzorke koji nisu deo iste tabele Results Table . Pogledajte Opcija „Export Calibration“ na stranici 19 .
Import External Calibration	Primenjuje prethodno izvezenu kalibraciju na aktivnu tabelu Results Table . Alternativa za korišćenje ove komande jeste da se naznači datoteka eksterne kalibracije iz čarobnjaka New Results Table kao što je opisano u odeljku Definisanje integracije na stranici 49 . Pogledajte Opcija „Import External Calibration na stranici 20 .
Remove External Calibration	Uklanja prethodno primenjenu eksternu kalibraciju iz aktivne tabele Results Table .

Opcija „Export Calibration“

Čuva kopiju jednačine kalibracije za sve analite koji su povezani sa aktivnom tabelom **Results Table** u eksternoj datoteci (*.mqcal). Ovo omogućava da se kalibracija sa jednog seta standardnih uzoraka primeni na druge uzorke koji nisu deo iste tabele **Results Table**.

Tipičan radni proces je:

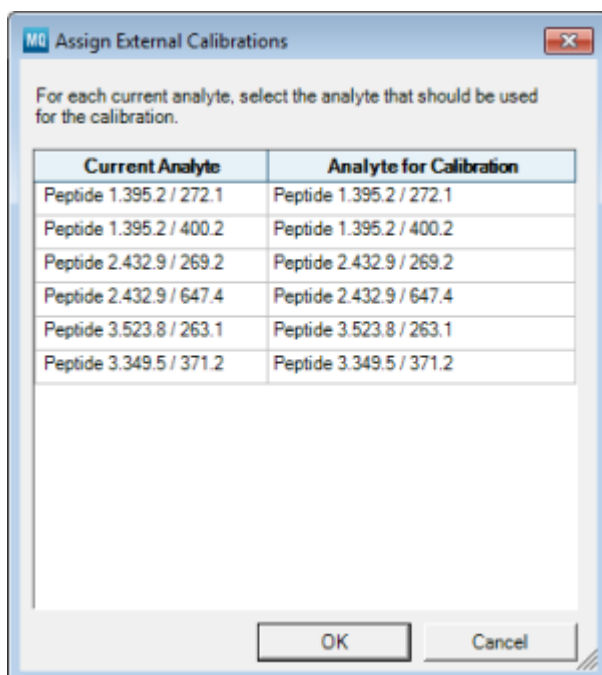
1. Kreirajte novu tabelu **Results Table** koja sadrži samo opciju **Standard**.
2. Koristite okno **Peak Review** da biste se uverili da je integracija bila uspešna.
3. Koristite komandu **Export Calibration** da biste sačuvali kopiju kalibracije.
4. Kreirajte novu tabelu **Results Table** koja sadrži uzorke nepoznate koncentracije.
5. Primенite prethodno izvezenu kalibraciju na novu tabelu pomoću komande **Import External Calibration** ili označavanjem datoteke kalibracije.
6. Ponovite korake 4 i 5 prema potrebi.

Ako se originalna tabela **Results Table** (sa uzorcima **Standard**) promeni, onda se prethodno izvezene kalibracije ne ažuriraju automatski. Tabela **Results Table** mora ponovo da se izveze.

Opcija „Import External Calibration“

Ako se isti nazivi analita koriste u trenutnoj tabeli **Results Table** kao i u izvezenoj kalibraciji, onda se dijalog automatski popunjava i korisnik može da klikne na opciju **OK**. Ako su analiti u trenutnoj tabeli **Results Table** dodeljeni određenoj grupi i ako su analiti u izvezenoj kalibraciji dodeljeni grupama sa istim nazivima, onda se dijalog automatski popunjava. Ako ima više analita, koristite iste nazive analita u oba slučaja ili koristite konzistentne nazive za opciju **Group**.

Slika 4-1 Dijalog „Assign External Calibrations“



Oznaka	Opis
Current Analyte	Sadrži unos za svaki analit iz metoda kvantifikacije za trenutnu tabelu Results Table .
Analyte for Calibration	Sadrži listu naziva svih dostupnih analita u datoteci za eksternu kalibraciju. Za svaki od trenutnih analita izaberite odgovarajući eksterni analit na osnovu kojeg je urađena kalibracija.

Napomena: Mapa revizije se dodaje sesiji kada se prvo kreira tabela **Results Table**. Ne može se promeniti nakon što se doda.

Tabela 5-1 Meni „Audit Trail“

Stavka menija	Opis
Pregledač „Audit Trail Viewer“	Otvora opciju Audit Trail Viewer .
Dijalog „Audit Map Manager“	Bira, menja i aktivira opciju Audit Maps .
View Session Audit Map	Otvora trenutnu mapu aktivne tabele Results Table .

Pregledač „Audit Trail Viewer“

Opcija „Audit Trail Viewer“ prikazuje celu istoriju određenog uzorka u tabeli „Results Table“. Tabele „Results Table“ se čuvaju u folderu <drive>:\Analyst Data\Projects\<project name>\Results.

Napomena:

Tabela „Results Table“ ne treba da bude sakrivena kada se obavljaju druge radnje. Na primer, čuvanje traga revizije.

Da biste povećali drugo okno, kao što je okno „Peak Review“, kako biste bolje videli podatke, koristite dugme **Toggles tab mode** koje se nalazi na traci sa alatcima.

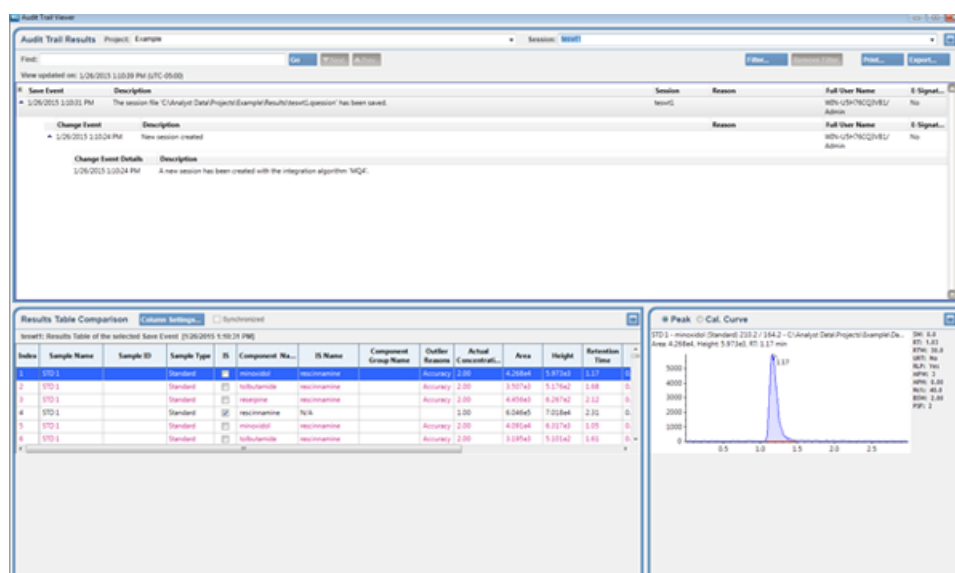
Korišćenjem opcije **Audit Trail Viewer** korisnici mogu da:

- Vide zapise traga revizija sa svaku tabelu **Results Table**.
- Obave pretraživanje ključnih reči, što obeležava svako pojavljivanje teksta.
- Filtriraju revidirane događaje u tragu revizije softvera na osnovu podešenih određenih kriterijuma.
- Izvezu zapise traga za reviziju u txt datoteku. Izvezene datoteke mogu da se urede.
- Štampaju u bezbedan PDF.

Pregled rezultata traga revizije u pregledaču „Audit Trail Viewer“

1. Otvorite tabelu „Results Table“.
2. Kliknite na opciju **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. Da biste promenili projekat, kliknite na listu **Projects** a zatim izaberite drugi projekat.
4. Da biste prikazali druge sesije, kliknite na listu **Sessions** a zatim izaberite drugu sesiju. Korisnici takođe mogu izabrati da istovremeno prikažu sve sesije u projektu.

Slika 5-1 Pregledač „Audit Trail Viewer“



Oznaka	Opis
Project	Izaberite projekat sa liste.
Session	Izaberite datoteku sesije.
Find	Pretraga ključnih reči bez filtriranja. Obeležava svako pojavljivanje teksta.
Go	Kliknite na ovu opciju da biste započeli pretragu.
Next	Kliknite na ovu opciju da biste prešli na sledeću reč.
Prev	Kliknite na ovu opciju da biste se vratili na prethodnu reč.
Filter	Kliknite da biste prikazali samo događaje koji se poklapaju sa izabranim kriterijumima.
Remove Filter	Kliknite da biste uklonili filter.
Print	Kliknite da biste štampali trag revizije.

Oznaka	Opis
Export	Kliknite na ovu opciju da biste izvezli trag revizije.
Save Event	Kada se datoteka sesije sačuva, kreira se opcija za čuvanje događaja. Opcija za čuvanje događaja čuva sve izmene izvršene od prethodno sačuvanog događaja, kao i sve vrednosti u tabeli Results Table .
Opis	Detalji izmena događaja.
Session	Prikazuje naziv datoteke sesije.
Reason	Prikazuje razlog izmene izvršene u tabeli Results Table .
Full User Name	Prikazuje ime korisnika koji je izvršio promenu u tabeli Results Table .
E-Signature	Pokazuje da li su promene u tabeli Results Table prihvaćene.
Dijalog „Column Settings“	Kliknite na ovu opciju da biste prikazali ili sakrili kolone u tabeli Results Table .
Synchronized	Izaberite ovu opciju da bi se obe tabele Results Tables istovremeno horizontalno pomerale.
Previous version	Prikazuje prethodnu verziju izabrane datoteke sesije.
Peak	Kliknite na ovu opciju da biste prikazali vršnu vrednost izabranog uzorka.
Cal Curve	Kliknite na ovu opciju da biste prikazali kalibracionu krivu izabranog uzorka.

Pretraživanje ključnih reči

Korisnici mogu da obave pretraživanje ključnih reči, čime se obeležava svako njihovo pojavljivanje u tekstu.

1. Otvorite tabelu „Results Table“.
2. Kliknite na opciju **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.
3. U polje **Find** unesite reč koju tražite, a zatim kliknite na **Go**.

Ako se pronađu rezultati, polje **Find** menja boju u zelenu, prikazuje se broj rezultata i reč se ističe žutom bojom. Ako se rezultati ne pronađu, polje **Find** menja boju u ružičastu.

4. Koristite dugmad **Next** i **Prev** za pomeranje između rezultata.

Filtriranje revidiranih događaja

Korisnici mogu da filtriraju revidirane događaje u tragu revizije na osnovu podešenih određenih kriterijuma.

1. Otvorite tabelu „Results Table“.
2. Kliknite na opciju **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.

3. Kliknite na opciju **Filter**.

Slika 5-2 Dijalog **Filter Audit Trail Events**

Stavka	Opis
1	Naziv datoteke Results Table . Mogu se filtrirati jedna datoteka Results Table ili sve datoteke Results Table za aktivan projekat.
2	Description : unesite delimičan ili potpun tip događaja. Sample Name : unesite delimičan ili potpun naziv uzorka. Full User Name : unesite delimičan ili potpun naziv korisnika. E-Signature : izaberite opciju „Yes“ ili „No“. Reason : unesite delimičan ili potpun razlog.
3	is : koristite ovu opciju da biste filtrirali prema određenoj reči ili frazi.
4	contains : koristite ovu opciju da biste filtrirali prema delimičnoj reči ili frazi.
5	Date : koristite da biste filtrirali događaje koji su se javili određenog datuma i u određeno vreme.

4. U dijalogu **Filter Audit Trail Events** koristite listu da biste izabrali kriterijume za filtriranje.

Meni „Audit Trail“

Napomena: Polje „Results Table“ se ne može izmeniti.

5. Kliknite na opciju **Clear** da biste resetovali kriterijume za filtriranje na opciju **No filter**.
6. Kliknite na opciju **OK** da biste filtrirali događaje.

Savet! Da biste uklonili filter, u opciji **Audit Trail Viewer** kliknite na opciju **Remove Filter**.

Izvoz pregledača „Audit Trail Viewer“

1. Otvorite tabelu Results Table.
2. Kliknite na **Export**, a zatim unesite naziv datoteke.

Datoteka se izvozi kao tekstualna datoteka sa tabulatorskim delimeterom.

Napomena: Izvozi se samo deo iz pregledača „Audit Trail Viewer“ u kojem su sačuvani događaji.

Štampanje pregledača „Audit Trail Viewer“

1. Otvorite tabelu Results Table.
2. Kliknite na opciju **Print**, a zatim izaberite štampač.

Korisnici mogu da štampaju zaštićeni PDF pomoću programa pdfFactory.

Napomena: Štampa se samo deo iz pregledača Audit Trail Viewer u kojem su sačuvani događaji.

Upravljač „Audit Trail Manager“

Ovaj softver grupiše događaje revidirane po kvantifikaciji u tragove revizije. Tragovi revizije su datoteke koje čuvaju zapise o revidiranim događajima. Tragovi revizije, u kombinaciji sa datotekama poput wiff datoteka, metodama kvantifikacije i datotekama **Results Table**, sastavni su deo elektronskih zapisa koji se mogu koristiti za potrebe usklađivanja.

Softver **Audit Trail Manager** čuva sve događaje kao što je definisano u mapi revizije. Softver beleži sve elektronske potpise i razloge, uključujući korisnika, datum i detalje izmene. On takođe čuva dodatne informacije kao što su komentari, u skladu sa mapom revizije.

Savet! Datoteka sesije sadrži tabelu **Results Table**, kopiju metoda kvantifikacije, kopiju mape „Audit Map“ u trenutku kreiranja, kao i kompletan trag revizije za celokupnu sesiju.

Kada softver kreira ili izmeni datoteku qsession ili qmethod, događaj se beleži u **Project Audit Trail** na kartici **History** u softveru Analyst[®] MD. Beleže se sledeći događaji:

- Datoteka metoda kvantifikacije je kreirana.
- Datoteka metoda kvantifikacije je izmenjena.
- Tabela **Results Table** sa rezultatima kvantifikacije je kreirana.
- Tabela **Results Table** sa rezultatima kvantifikacije je izmenjena.

Ako se **E-signature** ili **Reason Prompt** izabere za kreiranje ili izmenu datoteke metoda kvantifikacije, dijalog **Audit Trail** koji generiše softver Analyst[®] MD otvara se u softveru MultiQuant[™] MD.

Tabela 5-2 Tragovi revizije

Trag revizije	Primeri zapisa slučajeva
Trag revizije kvantifikacije (jedan po tabeli „Results Table“)	Izmene: <ul style="list-style-type: none"> • Kreiranje i izmena datoteka sesije. • Informacije o uzorku. • Parametri integracija vršnih vrednosti.

Informacije o mapama revizije

Softver MultiQuant[™] MD održava celokupnu istoriju promena informacija o postavkama obrade koje su povezane sa rezultatima kvantifikacije. Softver revidira sve događaje u skladu sa aktivnom mapom revizije projekta i beleži sve elektronske potpise i veze u odgovarajuće zapise.

Kreiranje mape revizije

Softver instalira nekoliko mapa revizije. Pogledajte mape revizije da biste odlučili da li bi bilo jednostavnije da modifikujete jednu ili više njih nego da kreirate potpuno novu mapu. Kreiranje ili izmena mapa revizije su događaji koji se revidiraju u tragu revizije projekta u softveru Analyst[®] MD.

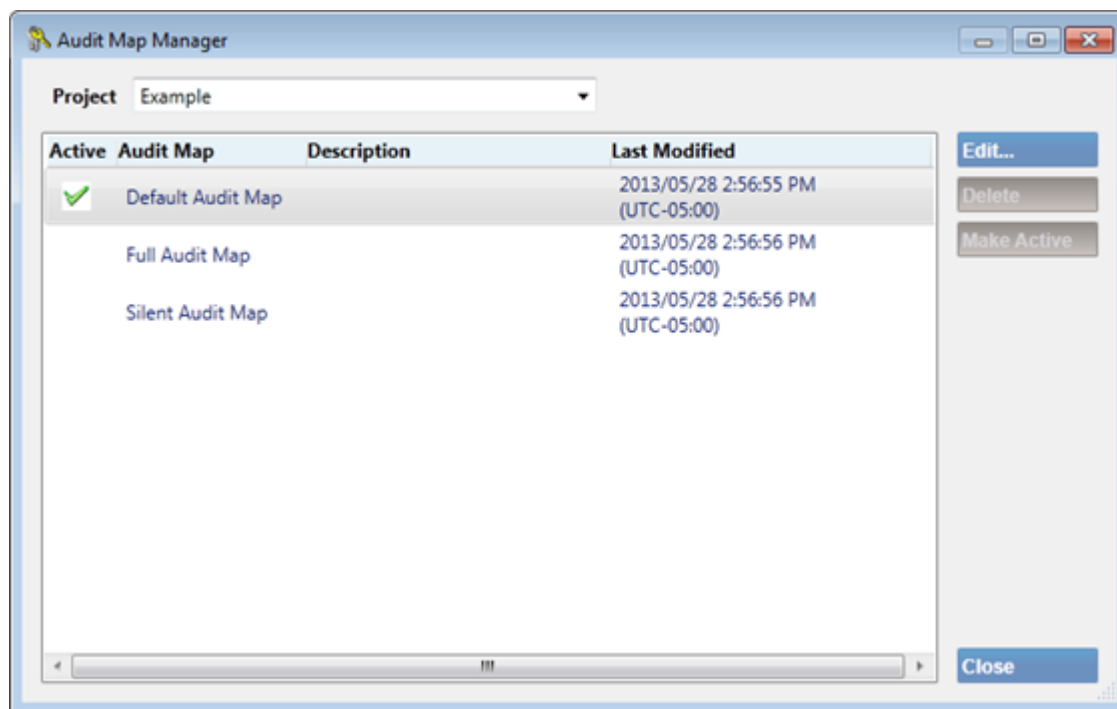
OPREZ: Ako dva korisnika istovremeno modifikuju istu mapu revizije, onda će se koristiti samo promene koje je izvršio korisnik koji je poslednji sačuvao datoteku.

Aktivna mapa revizije za projekat određuje koji događaji se snimaju u tragu revizije za bilo koje tabele **Results Tables** koje su kreirane.

Napomena: Nakon što se tabela **Results Table** sačuva, aktivna mapa revizije se čuva sa tabelom **Results Table** i ne može se modifikovati.

1. Kliknite na opciju **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Slika 5-3 Dijalog „Audit Map Manager“



Oznaka	Opis
Project	Izaberite projekat sa liste.
Edit	Kliknite da biste uredili aktivnu mapu revizije.
Delete	Kliknite na ovu opciju da biste obrisali izabranu mapu revizije.

2. Na listi **Project** izaberite projekat za koji želite da kreirate mapu revizije.
3. Izaberite mapu revizije, a zatim kliknite na opciju **Edit**.

Slika 5-4 Uređivač „Audit Map Editor“

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

Oznaka	Opis
Description	Unesite opis mape revizije.
Check	Kliknite da biste izabrali polje za potvrdu.
Uncheck	Kliknite da biste obrisali polje za potvrdu.
Add Predefined Reasons	Kliknite da biste dodali prethodno definisani razlog na listu.

4. Unesite opis mape revizije u polje **Description** ako je to potrebno.

5. U tabeli **Audit Map** konfigurirate svaki događaj kako sledi:

- Da bi se događaj revidirao, izaberite polje za potvrdu u koloni **Audited**.

Savet! Da biste popunili uzastopne ćelije u koloni vrednošću iz polja za potvrdu, pritisnite taster **Ctrl** ili **Shift**, kliknite na ćelije, a zatim kliknite na opciju **Check**.

Meni „Audit Trail“

- Da bi rukovaoci uneli prilagođeni razlog ili izabrali prethodno definisan razlog, izaberite polje za potvrdu u koloni **Reason Prompt**.
- Da bi rukovaoci izabrali samo prethodno definisan razlog za izmenu kada se javi taj događaj, izaberite polja za potvrdu u kolonama **Reason Prompt** i **Predefined Reasons Only**. U kolonama **Predefined Reason _** izaberite do deset razloga.

Savet! Da biste dodali prethodno definisan razlog, kliknite na opciju **Add Predefined Reasons**.

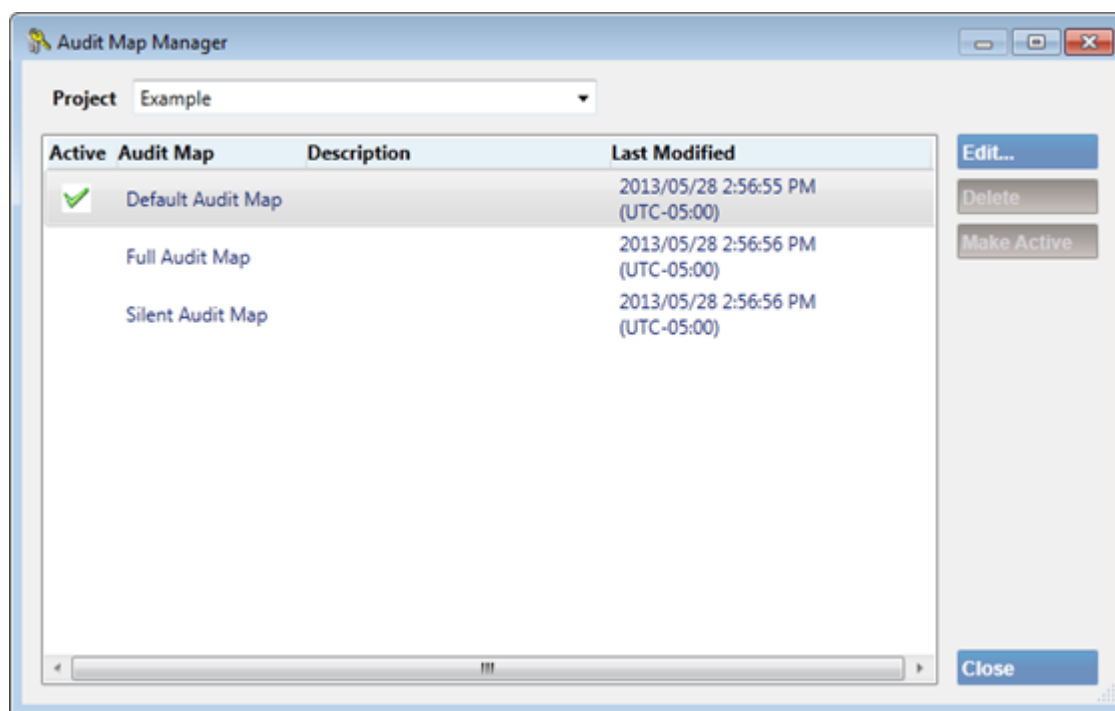
- Da bi elektronski potpis bio neophodan za događaj, izaberite polje za potvrdu u koloni **E-Sig**.
6. Kliknite na opciju **Save As**, a zatim unesite naziv u dijalog **Save Audit Map As**.
 7. Kliknite na opciju **Save**.
 8. Kliknite na opciju **Close** u dijalogu **Audit Map Editor**.
 9. Kliknite na opciju **Make Active**.

Kada se mapa revizije primeni, ona postaje aktivna mapa revizije. Konfiguracija revizije u aktivnoj mapi revizije određuje koji događaji će biti zapisani u tragovima revizije od tog trenutka.

Promena mape revizije

1. Kliknite na opciju **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Slika 5-5 Dijalog „Audit Map Manager“



Oznaka	Opis
Project	Izaberite projekat sa liste.
Edit	Kliknite da biste uredili aktivnu mapu revizije.
Delete	Kliknite na ovu opciju da biste obrisali izabranu mapu revizije.

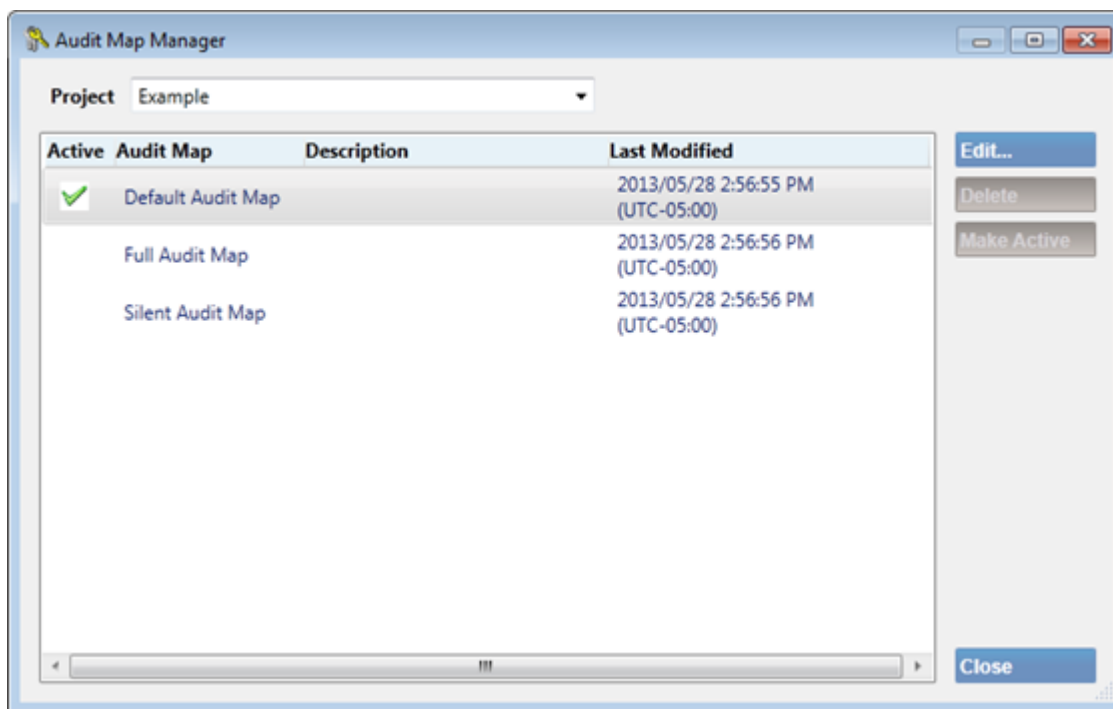
2. Na listi **Project** izaberite projekat za koji želite da promenite mapu revizije.
3. Izaberite drugu mapu, a zatim kliknite na opciju **Make Active**.
4. Kliknite na **Close**.

Uređivanje mape revizije

Sledeći slučajevi revizije se uvek snimaju i zbog toga se ne prikazuju u opciji **Audit Map Editor**: „Print Report“, „Export Results Table“ i „Transfer to LIMS“.

1. Kliknite na opciju **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Slika 5-6 Dijalog „Audit Map Manager“



Oznaka	Opis
Project	Izaberite projekat sa liste.
Edit	Kliknite da biste uredili aktivnu mapu revizije.
Delete	Kliknite na ovu opciju da biste obrisali izabranu mapu revizije.

2. Izaberite mapu revizije, a zatim kliknite na opciju **Edit**.

Slika 5-7 Uređivač „Audit Map Editor“

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

Oznaka	Opis
Description	Unesite opis mape revizije.
Check	Kliknite da biste izabrali polje za potvrdu.
Uncheck	Kliknite da biste obrisali polje za potvrdu.
Add Predefined Reasons	Kliknite da biste dodali prethodno definisani razlog na listu.

3. Unesite opis mape revizije u polje **Description** ako je to potrebno.

4. U tabeli **Audit Map** konfigurirate svaki događaj kako sledi:

- Da bi se događaj revidirao, izaberite polje za potvrdu u koloni **Audited**.

Savet! Da biste popunili uzastopne ćelije u koloni vrednošću iz polja za potvrdu, pritisnite taster **Ctrl** ili **Shift**, kliknite na ćelije, a zatim kliknite na opciju **Check**.

- Da bi rukovaoci uneli prilagođeni razlog ili izabrali prethodno definisan razlog, izaberite polje za potvrdu u koloni **Reason Prompt**.
- Da bi rukovaoci izabrali samo prethodno definisan razlog za izmenu kada se javi taj događaj, izaberite polja za potvrdu u kolonama **Reason Prompt** i **Predefined Reasons Only**. U kolonama **Predefined Reason _** izaberite do deset razloga.

Savet! Da biste dodali prethodno definisan razlog, kliknite na opciju **Add Predefined Reasons**.

- Da bi elektronski potpis bio neophodan za događaj, izaberite polje za potvrdu u koloni **E-Sig**.

5. Kliknite na opciju **Save**.

6. Kliknite na opciju **Make Active**.

Kada se mapa revizije primeni, ona postaje aktivna mapa revizije. Konfiguracija revizije u aktivnoj mapi revizije određuje koji događaji će biti zapisani u tragovima revizije od tog trenutka.

Pregled konfiguracije ugrađene revizije

Konfiguracija revizije koja se koristi u datoteci „Results Table“ je ugrađena u datoteku „Results Table“ onda kada je ona kreirana. Konfiguracija se ne može izmeniti. Vremenska oznaka prikazana pored naziva mape revizije označava kada je mapa revizije koja je korišćena za ugradnju konfiguracije poslednji put sačuvana.

1. Otvorite tabelu „Results Table“.
2. Kliknite na opciju **Audit Trail > View Session Audit Map**.

Slika 5-8 Mapa „Session Audit Map“

Session Audit Map (ResultsTable1.qsession)

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

Description:

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

Close

Meni „Help“

6

Osim stavke **About**, ovaj meni sadrži stavke navedene u [tabelu 6-1](#). Ove stavke se automatski instaliraju i takođe se mogu naći u folderu <drive>:\Program Files\AB SCIEX\MultiQuant 3\Help.

Dokumenti ili folderi (ili prečice do njih) se mogu kopirati u ovaj folder „Help“ da bi se automatski pojavile u meniju.

Tabela 6-1 Meni „Help“

Stavka menija	Opis
Install License	Kliknite da biste otvorili dijalog MultiQuant™ MD Activation.
Verify Installation	Kliknite da biste potvrdili datoteke i instalaciju.
Software Reference Guide	Opisuje funkcije i funkcionalnost softvera.
Software Release Notes	Pružuje informacije o softveru, kao i procedure za instaliranje softvera.
About	Prikazuje verziju programa, autorsko pravo i druge informacije o programu, zajedno sa informacijama o tome koje licencirane funkcije su instalirane.

Tabele sa rezultatima

7

Tabela **Results Table** je početna tačka za pregled i izvoz podataka. Koristite **čarobnjak New Results Table** ili kliknite na **File > New Results Table** da biste kreirali tabelu Results Table. Pogledajte odeljak [Dijalozi tabele „Results Table“ na stranici 43](#).

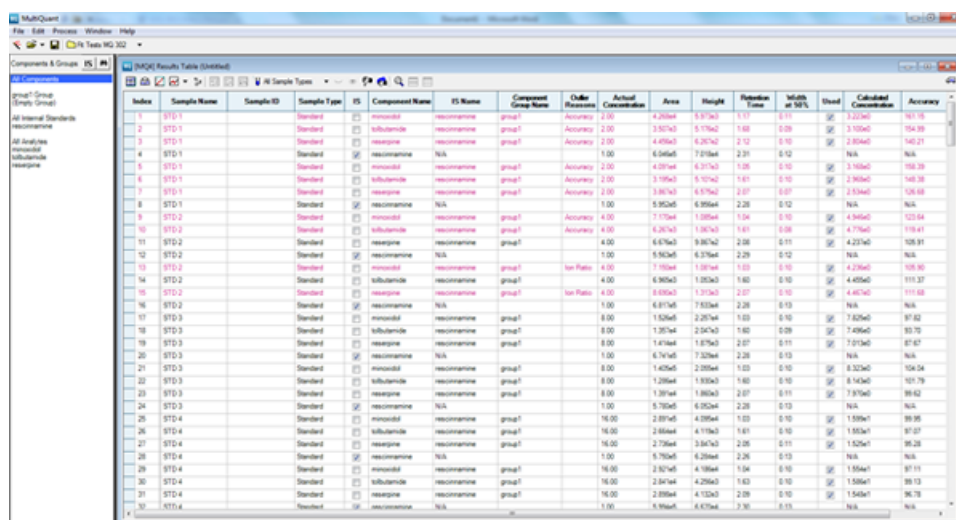
Napomena: Kolone **Sample Name** i **Sample ID** ne mogu da sadrže znakove \ / : * ? " < > | =.

Konfiguracija revizije koja se koristi za tabelu **Results Table** je ugrađena u datoteku **Results Table** onda kada je tabela **Results Table** kreirana. Konfiguracija se ne može izmeniti. Vremenska oznaka prikazana pored naziva mape revizije označava kada je mapa revizije koja je korišćena za ugradnju konfiguracije poslednji put sačuvana.

Napomena: Prilikom premeštanja podataka premestite ceo projekat da bi se održala struktura datoteke. Ako se struktura foldera ne održi, tabela **Results Table** ili hromatogrami neće moći da se pregledaju.

Postoji poseban red za svaku komponentu svakog originalno izabranog uzorka.

Slika 7-1 Primer tabele „Results Table“



- Kolone **IS**, **Component Name** i **IS Name** sadrže informacije o analitima.
- Izabrano polje za potvrdu označava interni standard za uzorak.
- Izaberite kolone koje će biti prikazane u tabeli **Results Table** pomoću dijaloga **Column Settings**. Pogledajte [Opcija „Column Settings“ na stranici 41](#).

Tabele sa rezultatima

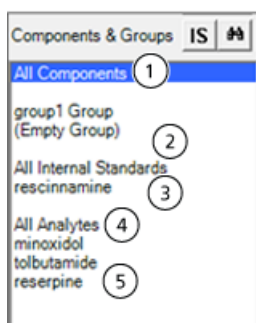
- Promenite širinu kolona povlačenjem linije koja odvaja zaglavlja dve kolone. Ova informacija se automatski čuva i primenjuje kada korisnik otvori prethodno sačuvane tabele **Results Tables**.
- Promenite redosled kolona tako što ćete kliknuti na zaglavlje kolone, a zatim je prevući na novu lokaciju. Ova informacija se automatski čuva i primenjuje kada korisnik otvori prethodno sačuvane tabele **Results Tables**.
- Korisnici mogu da ograniče tabelu „Results Table“ tako da prikazuje samo redove koji odgovaraju određenim analitima ili internim standardima. Koristite traku sa alatkama da biste ograničili tipove uzoraka koji se prikazuju. Pogledajte [Lista „Components & Groups“ na stranici 38](#) i [Filter tipa uzorka na stranici 42](#).
- Pojedine operacije, kao što je sinhronizacija sa oknom **Peak Review**, primenjuju se na red ili redove koji su trenutno izabrani. Izaberite redove klikom na oblast sa leve strane prve kolone.

Lista „Components & Groups“

Kada je tabela **Results Table** otvorena, lista trenutnih komponenata i grupa se prikazuje na levoj strani glavnog prozora. Koristite ovu listu da biste promenili komponente koje su vidljive u tabeli **Results Table**, kao i u bilo kojem povezanom oknu **Peak Review** ili na grafikonu **Calibration**.

Komponente su definisane kao pojedinačna tranzicija ili opseg mase. Grupa se definiše kao naziv grupe kojoj komponenta pripada.

Slika 7-2 Lista „Components & Groups“



Stavka	Oznaka	Opis
1	All Components	Kliknite da biste prikazali sve dostupne analite i interne standarde u tabeli Results Table , kao i u povezanim oknima Peak Review i Calibration , ako su prikazani.
2	All Internal Standards	Kliknite da biste prikazali sve interne standarde i da biste sakrili sve analite. Ova stavka nije prisutna ako nema definisanih internih standarda.

Stavka	Oznaka	Opis
3	Specific Internal Standards	Naziv svakog posebnog internog standarda nalazi se na listi. Kliknite na jednu od ovih stavki da biste prikazali taj interni standard i da biste sakrili sve druge komponente.
4	All Analytes	Kliknite da biste prikazali sve analite i da biste sakrili sve interne standarde. Ova stavka nije obuhvaćena ako nema definisanih internih standarda.
5	Specific Analytes	Naziv svakog posebnog analita nalazi se na listi. Kliknite na jednu od ovih stavki da biste prikazali taj analit i da biste sakrili sve druge komponente.

Kliknite na pojedinačnu stavku na listi da biste prikazali samo komponente za tu stavku. Pritisnite **Shift** ili **Ctrl** da biste izabrali više stavki. Ovo je korisno za prikaz npr. samo dva specijalna analita. Kada je lista aktivna, koristite tastere sa strelicama nagore i nadole da biste se kretali kroz stavke.

Savet! Proširite ili suzite listu prevlačenjem desne ivice okna ulevo ili udesno.

Filtriranje ne utiče na stvarni redosled redova u tabeli „Results Table“. Tabela „Results Table“ je unapred podešena tako da se prvo sortira prema uzorku, a zatim prema komponenti, u redosledu naznačenom u metodu kvantifikacije. Ipak, tabela se takođe može sortirati prema specifičnom redosledu kao što je opisano u [Softverske ikone na stranici 158](#).

Kontekstualni meni u tabeli „Results Table“

Desnim tasterom miša kliknite na tabelu „Results Table“ da biste pristupili kontekstualnom meniju. Dostupne su sledeće komande.

Tabela 7-1 Opcije kontekstualnog menija u tabeli „Results Table“

Opcija menija	Opis
Dijalog „Column Settings“	Koristite ovu komandu da biste uredili kolone u tabeli Results Table . Izmene se primenjuju samo na trenutnu tabelu Results Table , osim ako se ne sačuvaju kao podrazumevane za projekat.
Add Custom Column	U tabelu dodaje novu kolonu koja se može uređivati. Popunite kolonu direktnim unosom u ćelije ili lepljenjem sadržaja. Može da se unese bilo koji tekst, kao što su komentari ili rezultati prilagođenih izračunavanja.
Rename Custom Column	Menja naziv postojeće prilagođene kolone. Pre korišćenja ove komande kliknite na prilagođeni naslov da biste izabrali prilagođenu kolonu.

Tabela 7-1 Opcije kontekstualnog menija u tabeli „Results Table“ (nastavak)

Opcija menija	Opis
Remove Custom Column	Koristite za brisanje postojeće prilagođene kolone. Pre korišćenja ove komande kliknite na naslov kolone da biste izabrali prilagođenu kolonu.
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	Obezbeđuje prečicu za podešavanje polja Actual Concentration za sve analite za uzorke tipa Standard ako postoji više analita i ako su svi analiti prisutni u ovim uzorcima pri istoj koncentraciji. Pogledajte Primena trenutnih koncentracija aktuelnog analita na sve na stranici 40 .
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	Slično opciji Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All , osim što se primenjuje na interne standarde, a ne na analite.
Set 'Used'	Koristite ovu komandu za izvršavanje apsolutne kvantifikacije kako biste utvrdili da li određeni uzorak tipa Standard treba da se koristi u izračunavanju kalibracione krive za dati analit. Prve dve stavke se koriste da se izabere ili obriše polje Used za trenutno izabrane redove u tabeli Results Table . Treća i četvrta stavka su slične, osim što se operacija primenjuje na sve analite za bilo koji uzorak koji odgovara izabranom redu.
Set Peaks to 'Not Found' for Selected Rows	Koristite ovu komandu za brisanje integracije vršnih vrednosti za trenutno izabrane redove.

Primena trenutnih koncentracija aktuelnog analita na sve

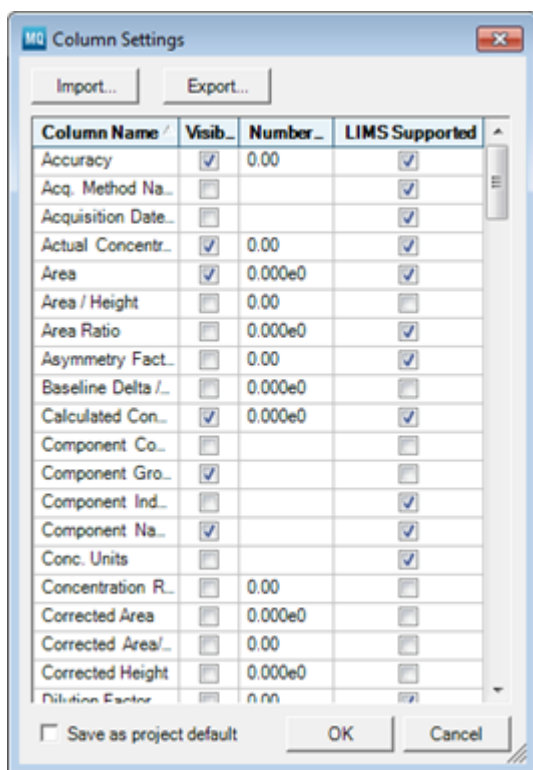
1. Koristite listu [Lista „Components & Groups“ na stranici 38](#) da biste ograničili da se u tabeli prikazuje samo jedan konkretan analit.
2. Opciono, koristite funkciju **Sample Type Filter** da biste prikazali samo uzorke tipa **Standard**. Pogledajte [Filter tipa uzorka na stranici 42](#).
3. Navedite stvarne koncentracije za analit direktnim upisivanjem u ćelije ili izborom kolone i naknadnim izborom opcije **Paste** ako su koncentracije dostupne negde drugde u tekstualnom formatu.
4. Kliknite na opciju **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All**.
5. Po potrebi se vratite na prikaz svih komponenti i svih tipova uzoraka.

Opcija „Column Settings“

Ako su nazivi kolona odsečeni, pomerite kursor preko polja da biste prikazali naziv kolone u kratkom opisu alatke.

U slučaju numeričkih polja, koristite format 0.00 za nenaučnu notaciju, a format 0.00e0 za naučnu notaciju. Pomerite decimalnu tačku da biste naveli tačnost brojeva koji se prikazuju. Samo tačka (.) može da se koristi kao separator decimala. Grupisanje cifara nije podržano.

Slika 7-3 Dijalog „Column Settings“



Polje	Opis
Import	Kliknite da biste izabrali datoteku sa podešavanjima kolone koja je prethodno sačuvana korišćenjem dugmeta Export . Polja dijaloga se ažuriraju da bi se koristile informacije iz izabrane datoteke.
Export	Kliknite da biste sačuvali trenutne postavke dijaloga u datoteku. Ovo omogućava korisniku da menja različita podešavanja kolona.
Column Name	Prikazuje nazive kolona abecednim redosledom. Pogledajte Kolone tabele sa rezultatima na stranici 55
Visible	Izaberite da biste kolone učinili vidljivim. U suprotnom je kolona sakrivena.

Tabele sa rezultatima

Polje	Opis
Number Format	U slučaju numeričkih polja, koristite format 0.00 za nenaučnu notaciju, a format 0.00e0 za naučnu notaciju. Za prikazanu preciznost pomerite decimalnu tačku.
LIMS Supported	Redovi koji prikazuju izabrane stavke „LIMS Supported“ su unapred određeni preko LIMS-a i izbori kolona se ne mogu menjati.
Save as project default	Izaberite da biste koristili podešavanja kolone u budućim tabelama Results Tables.

Filter tipa uzorka

Tabela 7-2 Opisi filtera tipa uzorka

Tip filtera	Opis
All Sample Types	Prikazuje sve tipove uzorka.
Unknowns	Prikazuje samo uzorke koji su označeni kao Unknown, što su uobičajeni uzorci nepoznate koncentracije. Kada se koriste uzorci tipa Standard, njihova koncentracija se izračunava sa kalibracione krive i prijavljuje u tabeli „Results Table“ kao stavka Calculated Concentration. Pogledajte Jednačine regresije na stranici 129 .
Standards	Prikazuje samo uzorke poznate koncentracije. Ovi uzorci se koriste za kreiranje kalibracione krive.
Quality Controls	Prikazuje samo uzorke tipa Quality Control. Ovi uzorci poznate koncentracije se koriste za proveru tačnosti kalibracione krive, ali ne utiču na njenu stvarnu konstrukciju.
Standards & QCs	Prikazuje uzorke tipa Standard i Quality Control.
Unknowns, Standards & QCs	Prikazuje uzorke tipa Unknown, Standard i Quality Control.
Blanks	Prikazuje samo uzorke tipa Blank. To su obično uzorci koji sadrže jedinjenja internog standarda, ako se koriste, ali ne sadrže analite i prošli su kroz uobičajeni postupak pripreme uzorka. Ovi uzorci se ne koriste u konstrukciji kalibracione krive. Da biste ih obuhvatili, izaberite tip uzorka Standard, a zatim podesite vrednost Actual Concentration na 0.
Double Blanks	Prikazuje samo uzorke tipa Double Blank. To su uzorci koji nemaju ni interne standarde ni analite.

Tabela 7-2 Opisi filtera tipa uzorka (nastavak)

Tip filtera	Opis
Solvents	Prikazuje samo uzorke tipa Solvent. To su dvostruki prazni uzorci koji nisu prošli kroz normalan postupak pripreme uzorka.
Blanks, Double Blanks & Solvents	Prikazuje sve tipove praznih uzoraka: Blank, Double Blank i Solvent.

Opcija „View Hidden Rows“

U tabeli **Results Table**, za bilo koju datu komponentu redovi se vide samo za one uzorke za koje je dostupna odgovarajuća MRM tranzicija. Neiskorišćeni redovi, komponente sa tranzicijama koje nisu dostupne za dati uzorak, prisutni su u tabeli, ali su podrazumevano sakriveni.

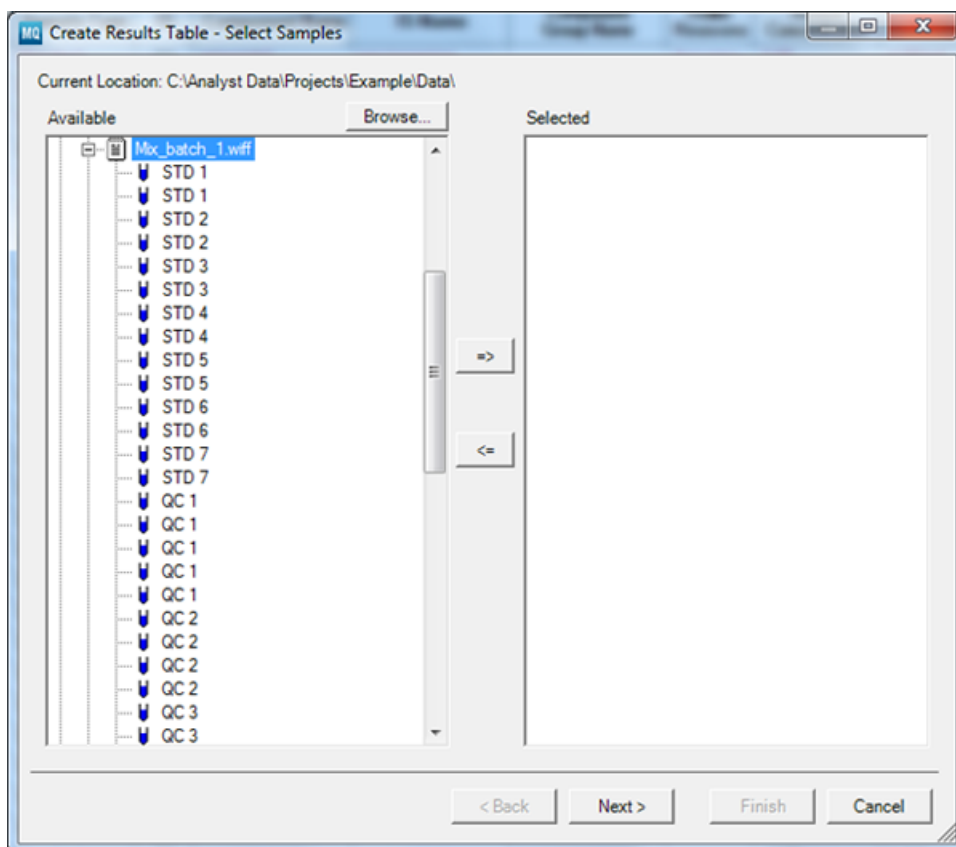
1. Prikažite **Peak Comment** kolonu u tabeli **Results Table**, ukoliko već nije vidljiva.
2. Sortirajte tabelu prema ovoj koloni.
3. Izaberite (sada susedne) redove sa komentarom **Not Present**.
4. Kliknite na ikonu **Hide selected rows(s)**. Pogledajte [Softverske ikone na stranici 158](#).

Dijalozi tabele „Results Table“

Odabir uzoraka

Izaberite uzorke iz wiff datoteka koje treba obraditi.

Slika 7-4 Stranica „Create Results Table - Select Samples“

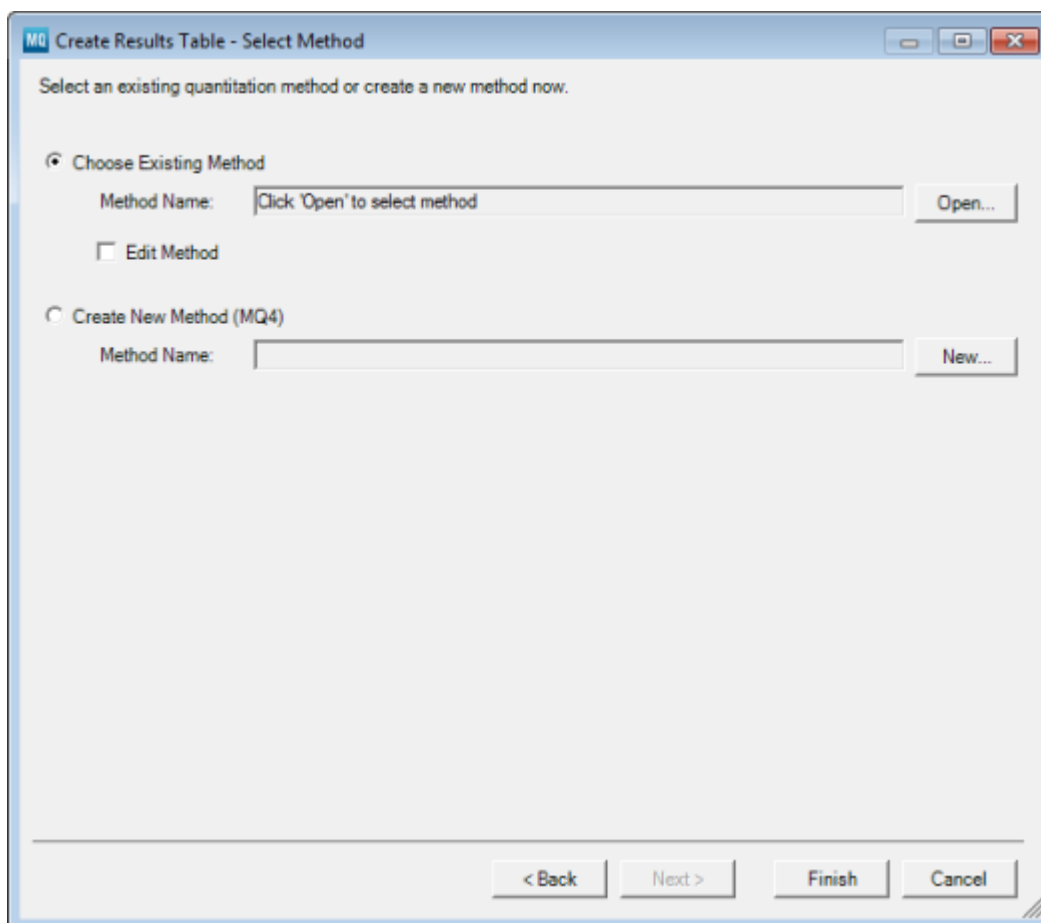


- Okno **Available** pokazuje podfascikle, wiff datoteke i uzorke koji su dostupni u fascikli **Data** za izabranu fasciklu.
- Proširite pojedinačne foldere da biste videli potfoldere ili wiff datoteke. Ako se wiff datoteka proširi, ona se otvara da bi se prikazali dostupni uzorci.
- Koristite strelice za dodavanje ili uklanjanje uzoraka.
- Izaberite uzorke dvostrukim klikom na pojedinačni uzorak, izborom uzorka ili datoteke sa podacima, a zatim klikom na dugme =>, ili prevlačenjem uzorka ili datoteke sa podacima iz levog u desno okno. Pritisnite **Shift** ili **Ctrl** da biste izabrali više datoteka ili uzoraka pre njihovog pomeranja.

Izbor metoda

Izaberite metod kvantifikacije. Ako je postojeći metod izabran, ali nije izmenjen, onda se traka toka prikazuje dok se izabrani uzorci obrađuju. Na kraju ovog procesa, kreira se tabela **Results Table**.

Slika 7-5 Stranica „Create Results Table – Select Method“



Oznaka	Opis
Choose Existing Method	Kliknite na opciju Open da biste izabrali postojeći metod kvantifikacije.
Edit Method	Izaberite ovu komandu da biste izmenili postojeći metod. Naredne stranice čarobnjaka su popunjene informacijama iz postojećeg metoda i mogu se izmeniti prema potrebi.
Create New Method	Kliknite na opciju New da biste kreirali metod kvantifikacije. Algoritam u zagradama je algoritam koji je izabran u dijalogu Integration Defaults .

Odabir reprezentativnog uzorka

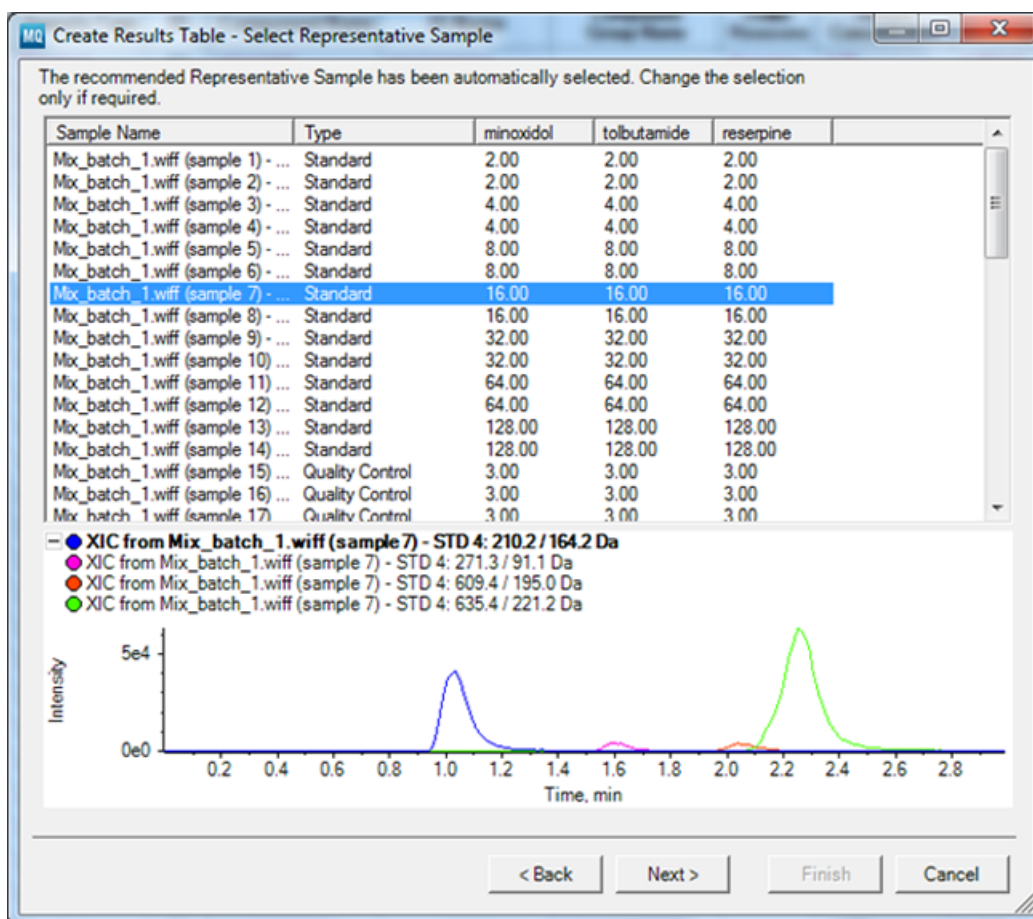
Stranica **Select Representative Sample** prikazuje odabrane reprezentativne uzorke za koje se prikazuju hromatogrami kada se vizuelno podešavaju parametri pronalaženja vršne vrednosti i integracije. Taj uzorak mora da sadrži sva jedinjenja koja će biti uključena u metod kvantifikacije.

Tabele sa rezultatima

Ako su tipovi uzoraka i koncentracije analita bili odabrani pomoću funkcije Batch Editor softvera Analyst® MD pre nego što je obavljena akvizicija uzoraka, te informacije se prikazuju kao dodatne kolone.

Softver podrazumevano bira uzorak. Ukoliko izabrani uzorak nije odgovarajući, onda izaberite drugi reprezentativni uzorak. Ako je odabran algoritam SignalFinder™, da bi se izbeglo generisanje netačnog modela integracije, softver neće preporučiti nijedan reprezentativni uzorak ako je nivo TIC veći od 1.0e6 u svim uzorcima. Korisnici mogu ručno da izaberu reprezentativni uzorak u tom slučaju.

Slika 7-6 Stranica „Create Results Table – Select Representative Sample“



Definisanje komponenti

Stranica **Define Components** sadrži red za svaki analit ili interni standard. Izaberite nazive analita ili internih standarda, ako se koriste. Pogledajte odeljak [Kontekstualni meni opcije „Define Components“ na stranici 48](#).

Slika 7-7 Stranica „Create Results Table – Define Components“

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

Experiment: **MRM (4 transitions)**

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

< Back Next > Finish Cancel

Oznaka	Opis
Experiment	Izaberite eksperiment za obradu sa liste. Za podatke iz više perioda i više eksperimenata izaberite svaki eksperiment koji mora da se obradi, a zatim popunite tabelu komponentama za odgovarajući eksperiment.
Row	Sadrži broj trenutnog reda.
IS	Pokazuje da li je komponenta koja je definisana za red analit (nije izabrano) ili interni standard (izabrano).
Name	Sadrži naziv komponente. Za MRM eksperimente naziv se automatski popunjava korišćenjem Q1/Q3 masa tranzicije. Za određeniji naziv unesite naziv u polje.
Group	<p>Sadrži naziv grupe kojoj pripada komponenta za red. Ako se analiti ili interni standardi koji nisu povezani međusobno stave u istu grupu, lakše ih je zajedno pregledati i manipulirati njima. Ovo je tačno za entitete koji imaju isto vreme zadržavanja, na primer, različite MRM tranzicije za isto jedinjenje.</p> <p>Unesite nazive grupa ili ih popunite automatski. Pogledajte Kontekstualni meni opcije „Define Components“ na stranici 48.</p>

Tabele sa rezultatima

Oznaka	Opis
IS Name	Sadrži naziv opcionog internog standarda koji treba da se koristi za analit definisan u redu. Ovo polje se ne primenjuje na same interne standarde.
Mass Info	<p>Za MRM eksperimente ova kolona ima naslov Q1/Q3 i sadrži par masa za komponentu definisanu za red. Izaberite potrebnu tranziciju iz liste koja prikazuje sve dostupne tranzicije za eksperiment. Obično se ova kolona automatski inicijalizuje pomoću dostupnih tranzicija.</p> <p>Za eksperimente profila (skeniranja) ova kolona ima naslov Start – Stop i sadrži opseg masa koje se koriste za izračunavanje XIC (ekstrahovani jonski hromatogram) za komponentu definisanu za red. Unesite opseg masa sa crticom koja razdvaja dve mase. Na primer, 200-201 ili 200-1. U slučaju druge opcije, opseg masa je 199,5-200,5.</p>

Kontekstualni meni opcije „Define Components“

Kliknite desnim tasterom miša na stranicu **Define Components** da biste pristupili kontekstualnom meniju. Dostupne su sledeće komande.

Tabela 7-3 Opcije kontekstualnog menija „Define Components“

Opcija menija	Opis
Clear	Briše sadržaj bilo kog izabranog reda ili kolone. Redovi se biraju klikom ili prevlačenjem u oblast ispred broja reda.
Copy	Kopira bilo koji izabrani red ili kolonu u ostavu.
Paste	Lepi sadržaje iz ostave.
Find Component by Name	<p>Bira komponentu čije se polje Name poklapa sa tekstom. Nije potreban tačan tekst da bi se pronašlo poklapanje. Ovo je korisno pri biranju određene komponente ako ima puno komponenti.</p> <p>Ako početno nije izabran nijedan red u unakrsnoj tabeli, pretraga počinje od prvog reda. U suprotnom, pretraga počinje od reda koji sledi izabrani red i ide do početka. Ovo je korisno ako postoji više od jedne komponente čije polje Name sadrži dati tekst. Ako se prilikom prve pretrage ne pronađe komponenta, pretražite ponovo, a prva komponenta neka ostane izabrana da biste pronašli drugo poklapanje u tabeli.</p>
Insert Row Above	Ubacuje jedan prazan red odmah iznad trenutno izabranog reda.
Delete Selected Rows	Uklanja trenutno izabrane redove iz tabele.
Sum Multiple Ions	Sabira hromatograme za više tranzicija MRM ili potpuno skenirane opsege mase. Kada se komanda izabere, dodatne kolone mase se dodaju u tabelu Components . Sve mase izabrane za dati red koriste se u konstrukciji sabranog XIC za odgovarajući analit ili interni standard. Preporučuje se da se ova funkcija uvek izabere.

Tabela 7-3 Opcije kontekstualnog menija „Define Components“ (nastavak)

Opcija menija	Opis
Groups	Pogledajte Podmeni „Groups“ na stranici 85.
Internal Standards	Pogledajte Podmeni „Internal Standards“ na stranici 87

Definisanje integracije

Izaberite očekivano vreme zadržavanja i druge parametre za pronalaženje vršne vrednosti za svaku komponentu.

Lista na levoj strani pokazuje stavku za svaku komponentu koja je definisana na prethodnoj strani čarobnjaka. Kliknite na konkretan red da biste prikazali odgovarajući hromatogram i trenutnu integraciju za odgovarajući uzorak. Prođite kroz listu koristeći tastere sa strelicama nagore i nadole ili točkić za pomeranje. U principu se preporučuje da se sve komponente pregledaju u pogledu ispravnosti integracije. Ipak, ako postoji mnogo komponenata, koristite komandu **Highlight Components with Uncertain RT** da biste ograničili broj koji treba pregledati.

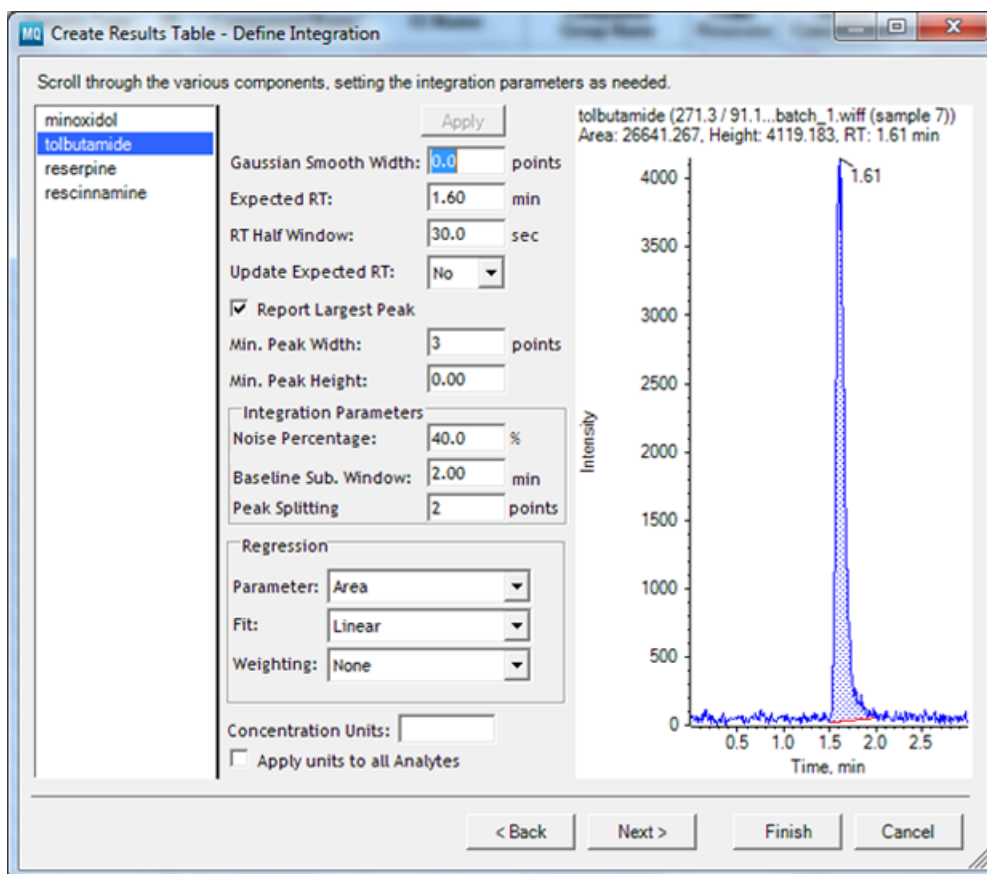
Napomena: Ako ima više komponenti, pre pokretanja čarobnjaka proverite da li su parametri za pronalaženje vršnih vrednosti podešeni na razumne podrazumevane vrednosti kako biste izbegli podešavanje parametara za svaku komponentu.

Kliknite desnim tasterom miša na stranicu da biste prikazali dostupne komande. Pogledajte odeljak [Kontekstualni meni na stranici „Define Integration“ na stranici 51.](#)

U grupi **Regression** promenite opcije kalibracije za sve ili za izabrane komponente nakon kreiranja tabele „Results Table“. Podesite podrazumevane jedinice koncentracije i parametre regresije tako da ne morate da ih podešavate svaki put.

Savet! Zumirajte grafikon prevlačenjem regiona x ose ili y ose. Vratite se na unapred podešen prikaz koristeći kontekstualni meni (**Home Graph Axes**) ili dvostrukim klikom na region ose.

Slika 7-8 Stranica „Create Results Table – Define Integration“



Oznaka	Opis
Apply	Po potrebi podešava parametre za pronalaženje vršne vrednosti za zadanu komponentu. Prilikom kreiranja nove tabele „Results Table“, navedeni parametri za zadanu komponentu se primenjuju na tu komponentu za sve uzorke kada se podaci integrišu. Pogledajte Parametri algoritma integracije na stranici 123 .
Expected RT	Prvobitno je postavljen kao vreme zadržavanja tačke sa najvećim intenzitetom za hromatogram. To je obično potrebna vršna vrednost. Ipak, ako su prisutni izomeri, ova vrednost će možda morati da se podesi. Da biste podesili vrednost, unesite novu vrednost u polje Expected RT , a zatim kliknite na Apply . Alternativno, kliknite na grafikon a zatim prevucite preko vršne vrednosti od interesa. Obratite pažnju da slučajno ne uvučete kursor u grafikon i time podesite očekivano vreme zadržavanja.
Parameter	Izaberite opciju Area ili Height .
Fit	Različiti tipovi okvira opisani su u Jednačine regresije na stranici 129 .
Weighting	Različiti tipovi merenja težine opisani su u Ponderi na stranici 130 .

Oznaka	Opis
Concentration Units	Tip jedinica koncentracije koji se koristi za analite i bilo koje interne standarde. Ovo polje ostavite prazno ako se obavlja relativna kvantifikacija. Čarobnjak pretpostavlja da se iste jedinice koriste za sve komponente. Ako to nije slučaj, koristite opciju Quantitation Method Editor .
Apply units to all Analytes	Korisnici mogu da unesu jedinicu koncentracije za pojedinačne komponente. Izaberite ovo polje za potvrdu da biste primenili istu jedinicu na sve komponente. Informacije treba da budu konzistentne sa poljem Concentration Units .

Kontekstualni meni na stranici „Define Integration“

Kliknite desnim tasterom miša na stranicu **Define Integration** da biste pristupili kontekstualnom meniju. Dostupne su sledeće komande.

Tabela 7-4 Opcije kontekstualnog menija „Define Integration“

Opcija menija	Opis
Find Component by Name	Slično komandi dostupnoj na stranici Define Components , osim razlike u tome što se umesto biranja redova u unakrsnoj tabeli Components biraju pojedinačne stavke na listi komponenti.
Highlight Components with Uncertain RT	Koristi se za obeležavanje onih komponenti kod kojih je podrazumevano očekivano vreme zadržavanja (koje se uzima kao vreme zadržavanja vršne vrednosti najvećeg intenziteta za svaki hromatogram) neispravno. Ako ima samo nekoliko komponenti, onda svaku posebno pregledajte i ne koristite ovu komandu. Međutim, ako ima puno komponenti, onda koristite ovu komandu da biste vizuelno proverili samo one za koje postoji više značajnih vršnih vrednosti u hromatogramu. Pogledajte Dijalog „Highlight Components“ na stranici 89 .
Home Graph Axes	Vraća uvećani grafik na početni pregled na kojem su vidljivi svi podaci.

Tabela 7-4 Opcije kontekstualnog menija „Define Integration“ (nastavak)

Opcija menija	Opis
Overlay Other Components for Group	<p>Koristite ovu komandu za preklapanje hromatograma ako su različite komponente dodeljene grupama i ako se očekuje da komponente dodeljene bilo kojoj datoj grupi imaju isto vreme zadržavanja. Na primer, ako predstavljaju različite tranzicije MRM istog stvarnog jedinjenja.</p> <p>Kada se izabere hromatogram za trenutnu komponentu čiji se parametri integracije definišu, on se iscrtava tamnoplavim tragom i prikazuje se njegova oblast integrisane vršne vrednosti. Hromatogrami, ali ne i oblast integrisane vršne vrednosti, za druge komponente u istoj grupi se preklapaju u vidu isprekidane linije.</p>
Update Retention Times	<p>Koristi se da bi se resetovala očekivana vremena zadržavanja prethodno kreiranog metoda kvantifikacije. Ukoliko se otvori postojeći metod kvantifikacije i odabere opcija Set New Typical Sample, prikazani hromatogrami će odgovarati novom uzorku, ali će očekivana vremena zadržavanja ostati nepromenjena.</p> <p>Za svaku komponentu se očekivano vreme zadržavanja ažurira tako da odgovara vremenu zadržavanja vršne vrednosti sa najvećim intenzitetom u okviru prozora navedene širine koji je centriran na originalno očekivano vreme zadržavanja.</p> <p>Pogledajte Dijalog „Update Retention Time“ na stranici 90.</p>

Opcija „Outlier Settings“

Korisnici mogu da označe odstupanja od preciznosti za opcije **Standards**, **QCs**, **Ion Ratio** i **Calculated Concentration**. Dostupne su sledeće komande.

Slika 7-9 Dijalog „Outlier Settings“

Set criteria for flagging outliers.

☒ Accuracy for Standards

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

Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ: %

☒ Accuracy for QCs

Max. Accuracy Tolerance for QC: %

☒ Ion Ratio ☒ Calculated Concentration

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

< Back Next > Finish Cancel

Oznaka	Opis
Accuracy for Standards	Menja toleranciju preciznosti za uzorke Standard .
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Menja toleranciju preciznosti za uzorke Standard vrednošću koja je konzistentna sa standardnim operativnim postupcima laboratorije.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Menja toleranciju preciznosti za najmanju koncentraciju uzorka Standard ako standardni operativni postupci laboratorije imaju različitu toleranciju za ovaj uzorak Standard .
Accuracy for QCs	Menja toleranciju preciznosti za uzorke Quality Control .
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Menja toleranciju preciznosti za uzorke Quality Control vrednošću koja je konzistentna sa standardnim operativnim postupcima laboratorije.

Tabele sa rezultatima

Oznaka	Opis
Ion Ratio	Dostupno je samo ako su komponente dodeljene grupama. Izaberite ovu opciju da biste koristili odnos jona oblasti vršne vrednosti ili visine vršne vrednosti. Oblast vršne vrednosti ili visina vršne vrednosti se podešavaju kada se izabere parametar regresije tokom razvoja metoda kvantifikacije.
Calculated Concentration	Kada se koriste uzorci Standard poznate koncentracije, ovo je koncentracija izračunata unazad sa kalibracione krive. Jednačine regresije opisuju kako se obavlja regresija za regresije različitih tipova i težine.
Component	Analiti ili interni standardi za sve uzorke.
IS	Izabrani interni standard. Dostupno je samo ako je polje za potvrdu Ion Ratio izabrano.
Group	Mogu se grupisati komponente koje imaju isto vreme zadržavanja (to jest, različite tranzicije za isto jedinjenje). Dostupno je samo ako je polje za potvrdu Ion Ratio izabrano.
Ion Ratio Tolerance (%)	Koristite podrazumevano podešavanje ili izmenite ovo podešavanje u skladu sa standardnim operativnim postupcima laboratorije. Dostupno je samo ako je polje za potvrdu Ion Ratio izabrano.
Lower Limit of Calculated Concentration	Unesite donju granicu prihvatljivog opsega koncentracije. Svi uzorci kod kojih je polje Calculated Concentration niže od ove vrednosti označavaju se kao odstupanje od koncentracije.
Upper Limit of Calculated Concentration	Unesite gornju granicu prihvatljivog opsega koncentracije. Svi uzorci kod kojih je polje Calculated Concentration više od ove vrednosti označavaju se kao odstupanje od koncentracije.

Kliknite desnim tasterom miša u stranici **Outlier Settings** da biste pristupili kontekstualnom meniju.

Tabela 7-5 Opcije kontekstualnog menija „Outlier Settings“

Oznaka	Opis
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Primenjuje donju granicu izračunate koncentracije na sve analite, ako svi analiti imaju iste kriterijume.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Primenjuje gornju granicu izračunate koncentracije na sve analite, ako svi analiti imaju iste kriterijume.

Kolone tabele sa rezultatima

Napomena: Neke kritične kolone u informacijama o uzorku, kao što su **Sample Name**, **Sample ID** itd. ne treba da budu skrivene kada korisnici prilagođavaju postavke kolona u tabeli **Results Table**.

U slučaju numeričkih polja, koristite format 0.00 za nenaučnu notaciju, a format 0.00e0 za naučnu notaciju. Pomerite decimalnu tačku da biste naveli tačnost brojeva koji se prikazuju. Samo tačka (.) može da se koristi kao separator decimala. Grupisanje cifara nije podržano.

Tabela 7-6 Kolone tabele sa rezultatima

Oznaka	Opis
Accuracy	Kada se koriste uzorci Standard poznate koncentracije za uzorke Standard i uzorke Quality Control , ovo se definiše kao: $100\% * (\text{izračunata koncentracija}) / (\text{stvarna koncentracija})$ U slučaju drugih tipova uzoraka, vrednost je N/A.
Acq. Method Name	Naziv metoda akvizicije koji je korišćen za prikupljanje uzoraka.
Acquisition Date & Time	Datum i vreme akvizicije wiff uzorka.
Actual Concentration	Za uzorke Standard i Quality Control ovo je očekivana poznata koncentracija.
Area	Detektovana površina vršne vrednosti. Ako nijedna vršna vrednost nije detektovana, vrednost je N/A.
Area / Height	Detektovana površina vršne vrednosti podeljena sa visinom. Ako nijedna vršna vrednost nije detektovana, vrednost je N/A.
Area Ratio	Za analite koji koriste interni standard ovo je odnos između vrednosti Area i IS Area . Za interne standarde ili za analite bez internog standarda vrednost je N/A.
Asymmetry Factor	Rastojanje od centralne linije vršne vrednosti do zadnjeg nagiba podeljeno sa rastojanjem od centralne linije vršne vrednosti do prednjeg nagiba, tako da su sva merenja obavljena na 10% maksimalne visine vršne vrednosti.
Baseline Delta / Height	Apsolutna vrednost razlike visine osnovne linije (na početku vršne vrednosti i na kraju vršne vrednosti) u odnosu na stvarnu visinu vršne vrednosti. Vrednosti koje su veće od približno 0,1 označavaju da osnovna linija možda nije ispravno integrisana i vršna vrednost treba da se proveri.

Tabele sa rezultatima

Tabela 7-6 Kolone tabele sa rezultatima (nastavak)

Oznaka	Opis
Calculated Concentration	Kada se koriste uzorci Standard poznate koncentracije, ovo je koncentracija izračunata unazad sa kalibracione krive. Pogledajte Jednačine regresije na stranici 129 za informacije o tome kako se obavlja regresija za regresije različitih tipova i težine.
Component Comment	Proizvoljan komentar koji se odnosi na analit ili interni standard za sve uzorke.
Component Group Name	Naziv grupe (ako postoji) povezan sa analitom ili internim standardom.
Component Index	Indeks analita ili internog standarda u originalnom metodu kvantifikacije. Može biti korisno sortiranje tabele na osnovu ovog polja.
Component Name	Naziv analita ili internog standarda.
Conc. Units	Jedinice koncentracije.
Concentration Ratio	Za analite koji koriste interni standard ovo je odnos između vrednosti Actual Concentration i IS Actual Concentration . Za interne standarde ili za analite bez internog standarda vrednost je N/A.
Corrected Area	Detektovana površina vršne vrednosti. Ako nijedna vršna vrednost nije detektovana, vrednost je N/A.
Corrected Area / Height	Detektovana površina vršne vrednosti podeljena sa visinom. Ako nijedna vršna vrednost nije detektovana, vrednost je N/A.
Corrected Height	Detektovana visina vršne vrednosti. Ako nijedna vršna vrednost nije detektovana, vrednost je N/A.
Dilution Factor	Faktor razblaživanja uzorka. Ovaj faktor se koristi u izračunavanju kalibracione krive. Pogledajte Jednačine regresije na stranici 129 .
End Time	Završno vreme zadržavanja detektovane vršne vrednosti, izraženo u minutima.
End Time at 10%	Vreme izraženo u minutima duž zadnje strane vršne vrednosti gde je intenzitet na 10% visine vršne vrednosti.
End Time at 5%	Vreme izraženo u minutima duž zadnje strane vršne vrednosti gde je intenzitet na 5% visine vršne vrednosti.
Expected Ion Ratio	Očekivani odnos jona za sve tipove uzoraka.
Expected RT	Originalno očekivano vreme zadržavanja iz metoda kvantifikacije, izraženo u minutima.
Height	Detektovana visina vršne vrednosti. Ako nijedna vršna vrednost nije detektovana, vrednost je N/A.

Tabela 7-6 Kolone tabele sa rezultatima (nastavak)

Oznaka	Opis
Height Ratio	Za analite koji koriste interni standard ovo je odnos između vrednosti Height i IS Height . Za interne standarde ili za analite bez internog standarda vrednost je N/A.
Index	Ovo je indeks reda u originalnom, nesortiranom redosledu. Ako je tabela sortirana na osnovu neke druge kolone, može da se vrati na originalni redosled sortiranjem ove kolone.
Injection Volume	Zapremina uzorka koju ubrizgava uređaj za automatsko uzorkovanje, izraženo u ml.
Integration Type	<ul style="list-style-type: none">Vrednost Baseline označava da je samostalna vršna vrednost integrisana na uobičajeni način.Vrednost Valley označava da postoje dve susedne vršne vrednosti i da se signal nije vratio na vrednost osnovne linije između njih.Vrednost Manual označava da je vršna vrednost ručno integrisana.Vrednost N/A označava da nijedna vršna vrednost nije detektovana.

Tabela 7-6 Kolone tabele sa rezultatima (nastavak)

Oznaka	Opis
Ion Ratio	<ul style="list-style-type: none"> Vrednosti Ion Ratio se određuju kada su bar dve MRM tranzicije iz jednog analita prikupljene u grupu. Prva komponenta u podgrupi će se koristiti kao joni Quantifier. Ostale komponente u podgrupi će se koristiti kao joni Qualifier. $\text{Ion Ratio} = (\text{Peak Area ili Height of Qualifier}) / (\text{Peak Area ili Height of Quantifier})$ Subgroups <ul style="list-style-type: none"> Svi analiti u grupi konstituišu podgrupu Analyte. Interni standardi grupe konstituišu podgrupu IS. Ako komponenta nije član grupe, onda je vrednost Ion Ratio N/A. Ako vršna vrednost nije pronađena, onda je vrednost Ion Ratio N/A. Primenjuje se na sve komponente u podgrupama Analyte i IS za vrednost Quantifier, a vrednost Qualifier je zasebna. Ako se promeni integracija za vršnu vrednost Quantifier ili Qualifier, vrednost Ion Ratio se ponovo izračunava. Može da se izračuna za površinu vršne vrednosti ili za visinu vršne vrednosti. Ako se vrednost Area koristi u delu regresije funkcije .qmethod za prvu komponentu („Component Index“ je 1) u tabeli Results Table, površina vršne vrednosti se koristi za izračunavanje vrednosti Ion Ratio za celu tabelu Results Table. Ako se vrednost Height koristi u regresiji prve komponente, visina vršne vrednosti se koristi za izračunavanje.
IS	Označeno polje za potvrdu označava da je komponenta za red interni standard, a ne analit.
IS Actual Concentration	Stvarna koncentracija za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Area	Površina za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Area / Height	Odnos između vrednosti Area i Height za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Baseline Delta / Height	Odnos Baseline Delta / Height za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.

Tabela 7-6 Kolone tabele sa rezultatima (nastavak)

Oznaka	Opis
IS Comment	Proizvoljni komentar za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Corrected Area	Ispravljena površina za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Corrected Area / Height	Vrednost Corrected Area / Corrected Height za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Corrected Height	Vrednost Corrected Height za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS End Time	Vrednost End Time za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Expected RT	Vrednost Expected RT za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Height	Vrednost Height za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Integration Type	Vrednost Integration Type za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Mass Info	Vrednost Mass Info za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Name	Vrednost Component Name za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Peak Comment	Vrednost Peak Comment za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Quality	Kvalitet za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Region Height	Metrika kvaliteta za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Retention Time	Vrednost Retention Time za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.

Tabele sa rezultatima

Tabela 7-6 Kolone tabele sa rezultatima (nastavak)

Oznaka	Opis
IS Signal / Noise	Vrednost Signal / Noise za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Start Time	Vrednost Start Time za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Total Width	Vrednost Total Width za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
IS Width at 50%	Širina na 50% za interni standard povezan sa trenutnim analitom, odnosno N/A za interne standarde ili za analite bez internih standarda.
Mass Info	Informacije o masi koja je povezana sa komponentom. Za MRM eksperimente ovo je Q1/Q3 , a za eksperimente profila (potpuno skeniranje) ovo je Start - Stop .
Modified	Znak za potvrdu označava da su parametri za pronalaženje vršnih vrednosti promenjeni korišćenjem okna Peak Review u odnosu na originalne vrednosti navedene u metodu kvantifikacije.
Operator Name	Ime rukovaoca instrumentom koji je prikupio uzorak.
Original Filename	Naziv wiff datoteke.
Outlier Reasons	<p>Kada se postave kriterijumi odstupanja u metodu kvantifikacije, ova kolona označava koji kriterijum je van unapred određenih granica za komponentu.</p> <p>Kolona Outlier Reasons je povezana sa opcijom Outlier Settings samo u metodu kvantifikacije i to je prethodno postavljena kolona u tabeli Results Table.</p> <p>Razlog odstupanja je označen:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Accuracy • Concentration • Ion Ratio Ako postoji vršna vrednost za kvantifikator, ali ne i za kvalifikator, odnos jona će biti označen za obe komponente. Ako postoji vršna vrednost za kvalifikator, ali ne i za kvantifikator, odnos jona će biti označen za obe komponente. Ako nijedan nema vršnu vrednost, nijedna komponenta nema oznaku. • Cannot calculate the Expected Ion Ratio.
Peak Comment	Proizvoljan komentar za red.

Tabela 7-6 Kolone tabele sa rezultatima (nastavak)

Oznaka	Opis
Plate Number	Broj ploče uređaja za automatsko uzorkovanje koji je originalno naveden u funkciji Batch Editor koja se koristi za prikupljanje podataka.
Points Across Baseline	Broj skeniranja od početka do zaustavljanja vršne vrednosti.
Points Across Half Height	Broj skeniranja duž vršne vrednosti na približno 50% visine.
Quality	Ova metrika ima za cilj da prikaže kvalitet integrisane vršne vrednosti. <ul style="list-style-type: none"> Vrednosti blizu nule označavaju da je vršna vrednost loše integrisana (ili da nije prisutna). Vrednosti blizu 1,0 označavaju da je vršna vrednost dobro integrisana i da ne treba da se proverí.
Rack Number	Broj rafa uređaja za automatsko uzorkovanje koji je originalno naveden u funkciji Batch Editor koja se koristi za prikupljanje podataka.
Region Height	Visina vršne vrednosti najveće vršne vrednosti u blizini stvarne detektovane vršne vrednosti. Ovo je korisno jer je povezano sa poljem Quality . Vršne vrednosti lošeg kvaliteta koje takođe imaju realističnu vrednost Region Height treba da se provere. Ako je vrednost Region Height mala, nije prisutna nijedna značajna vršna vrednost.
Relative RT	Za analite koji koriste interni standard ovo je odnos između vrednosti Retention Time i IS Retention Time . Za interne standarde ili za analite bez internog standarda vrednost je N/A.
Retention Time	Stvarno vreme zadržavanja detektovane vršne vrednosti, izraženo u minutima.
Sample Comment	Proizvoljan komentar za uzorak.
Sample ID	Proizvoljan identifikator za uzorak. On se inicijalizuje iz vrednosti koja je originalno navedena u funkciji Batch Editor koja se koristi za prikupljanje podataka.
Sample Index	Indeks trenutnog uzorka.
Sample Name	Proizvoljan naziv uzorka. On se inicijalizuje iz vrednosti koja je originalno navedena u funkciji Batch Editor koja se koristi za prikupljanje podataka.
Sample Type	Tip uzorka. Pogledajte Filter tipa uzorka na stranici 42 .

Tabele sa rezultatima

Tabela 7-6 Kolone tabele sa rezultatima (nastavak)

Oznaka	Opis
Signal / Noise	<p>Procena odnosa visine vršne vrednosti za detektovanu vršnu vrednost prema šumu koji je prisutan u hromatogramu.</p> <p>Kada se koristi algoritam integracije SignalFinder, šum se procenjuje pomoću izračunatog relativnog šuma i osnovne linije u položaju apeksa vršne vrednosti. Algoritam integracije MQ4 koristi sličan pristup, osim što se osnovna linija procenjuje pomoću celog hromatograma.</p> <p>Pogledajte Izračunavanja relativnog šuma i odnosa signala i šuma na stranici 153.</p>
Slope of Baseline	Ukazuje na kretanje osnovne linije.
Start Time	Početno vreme zadržavanja detektovane vršne vrednosti, izraženo u minutima.
Start Time at 10%	Vreme u minutima duž prednje strane vršne vrednosti gde je intenzitet na 10% visine vršne vrednosti.
Start Time at 5%	Vreme u minutima duž prednje strane vršne vrednosti gde je intenzitet na 5% visine vršne vrednosti.
Tailing Factor	Rastojanje od prednjeg nagiba vršne vrednosti do zadnjeg nagiba podeljeno sa dvostrukim rastojanjem od centralne linije vršne vrednosti do prednjeg nagiba, tako da su sva merenja obavljena na 5% maksimalne visine vršne vrednosti.
Total Width	Širina hromatografske vršne vrednosti, izražena u minutima, na osnovnoj liniji.
Used	Za uzorke Standard znak za potvrdu označava da se odgovarajući analit trenutno koristi za konstrukciju kalibracione krive. Za uzorke Quality Control znak za potvrdu označava da se analit koristi za izračunavanje QC statistike. Za druge tipove uzoraka ovo polje služi samo u informativne svrhe.
Vial Number	Broj bočice uređaja za automatsko uzorkovanje koji je originalno naveden u funkciji Batch Editor koja se koristi za prikupljanje podataka.
Width at 10%	Širina vršne vrednosti izmerena na 10% visine vršne vrednosti.
Width at 5%	Širina vršne vrednosti izmerena na 5% visine vršne vrednosti.
Width at 50%	Hromatografska širina vršne vrednosti, izražena u minutima, detektovane vršne vrednosti izmerene na polovini intenziteta apeksa.

Pregled vršne vrednosti

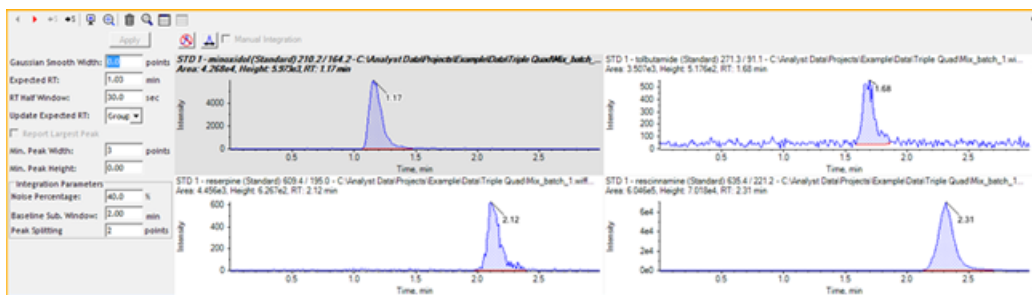
8

Koristite okno **Peak Review** za vizuelni pregled neobrađenih hromatograma tako da se može odrediti kvalitet procesa pronalaženja vršne vrednosti. Kada je tabela **Results Table** aktivna, kliknite na ikonu **Show Peak Review** na traci sa alatima tabele „Results Table“ da biste otvorili okno „Peak Review“. Revizori treba da pregledaju kvantitativne podatke prema kriterijumima integracije vršnih vrednosti i prihvatljivosti podataka u sopstvenim standardnim operativnim postupcima (SOP).

Grupisanje brojeva nije podržano. Korisnici ne bi trebalo da grupišu brojeve ni u jednom tekstualnom polju (na primer, parametri integracije) i mreži (na primer, tabele **Results Tables**).

Komanda Enhanced **Peak Review** pokazuje prihvatljivost opcije **Ion Ratio** na preklopljenom hromatogramu. Korisnici takođe mogu da uvećaju jedan hromatogram.

Slika 8-1 Okno „Peak Review“



Koristite okno **Peak Review** za ispravljanje hromatograma koji se nisu pravilno integrirali podešavanjem parametara za pronalaženje vršne vrednosti ili ručnom selekcijom početne i krajnje tačke integracije. Nakon integracije hromatograma, tabela **Results Table** se automatski ažurira novom oblašću vršne vrednosti i drugim parametrima.

Metodi kvantifikacije uključuju kriterijume korišćene za kvantifikaciju vršnih vrednosti izabranih za integraciju. Revizori treba da pregledaju kvantitativne podatke prema kriterijumima integracije vršnih vrednosti i prihvatljivosti podataka u sopstvenim standardnim operativnim postupcima (SOP).

Ručna integracija

Nakon što se vršna vrednost u određenom hromatogramu ručno integriše, izaberite ovo polje za potvrdu da biste naznačili da je hromatogram ručno integrisan. Kada je u ovoj fazi, ako korisnik obriše polje za potvrdu, ručna integracija vršne vrednosti se otkazuje i vršna vrednost se automatski ponovo integriše korišćenjem parametara metoda.

Pregled vršne vrednosti

Razlika između ovog polja za potvrdu i dugmeta **Enable Manual Integration Mode** je u tome što ovo polje za potvrdu prikazuje status trenutne vršne vrednosti, dok dugme prikazuje ponašanje prilikom prevlačenja hromatograma.

Napomena: Nakon što se omogući režim ručne integracije, on ostaje omogućen za sva okna dok se ne obriše.

Dugme „Apply“

Ukoliko je korisnik podešavao bilo koji od parametara za pronalaženje vršne vrednosti, onda je dugme **Apply** omogućeno. Kliknite na ovo dugme da biste primenili izmenjene parametre pronalaženja vršne vrednosti na aktivni hromatogram.

Osim u ručnom režimu integracije, prevlačenje preko određene vršne vrednosti u hromatogramu jednako je podešavanju parametra **Expected RT** i kliku na **Apply** nakon toga.

Napomena: Ukoliko korisnik izmeni parametre pronalaženja vršne vrednosti, a zatim aktivira drugi hromatogram bez klika na **Apply**, onda parametri neće biti primenjeni i izmene će se izgubiti.

Saveti za pregledanje vršnih vrednosti

- Sortirajte tabelu **Results Table** po posebnoj koloni i pregledajte samo one hromatograme koji su sortirani na vrhu ili na dnu tabele.
- Okno **Peak Review** je uvek sinhronizovano sa svojom odgovarajućom tabelom **Results Table** i prikazuje hromatograme za iste vršne vrednosti, istim redosledom, kao i tabela **Results Table**. Sve izmene (kao što je sortiranje redova, filtriranje tipova uzoraka ili biranje komponenti) koje se izvrše u tabeli **Results Table** automatski se prenose na okno **Peak Review**.
- Izaberite broj hromatograma koje želite da pregledate u tom trenutku.
- Koristite traku za pomeranje na desnoj strani okna da biste se kretali kroz dostupne hromatograme. Kada je okno **Peak Review** aktivno, koristite tastere sa strelicama nagore i nadole na tastaturi ili točkić miša da biste se kretali kroz hromatograme.
- U bilo kom trenutku, jedan određeni hromatogram se smatra aktivnim i naznačen je podebljanim slovima naslova. Aktivirajte određeni hromatogram klikom bilo gde u okviru njega.
- Kada hromatogram postane aktivan, parametri integracije koji su prikazani na levoj strani okna se ažuriraju tako da se odnose na novi aktivni hromatogram. Ako korisnik podesi parametre integracije vršne vrednosti i zatim klikne na opciju **Apply**, to se odnosi na hromatogram koji je trenutno aktivan.

- Izaberite red u tabeli **Results Table** klikom na sivu oblast sa leve strane prve kolone da bi se prikazala odgovarajuća vršna vrednost u oknu **Peak Review**. Ako se korisnik kreće kroz određeni hromatogram u oknu **Peak Review**, tabela **Results Table** označava odgovarajući red, a zatim ga stavlja na pregledanje.
- Ako korisnik prevlači preko određene vršne vrednosti u hromatogramu, onda se parametar integracije **Expected RT** ažurira stvarnim vremenom zadržavanja vršne vrednosti. Novo vreme zadržavanja se onda automatski primenjuje i vršna vrednost se ponovo integriše, ažurirajući tabelu **Results Table**.
- Ako korisnik pregleda vršne vrednosti u režimu ručne integracije, onda će prevlačenje preko vršne vrednosti ručno integrirati izabranu vršnu vrednost.
- Proces pregledanja vršne vrednosti se može ubrzati keširanjem prethodno izračunatih hromatograma. Pogledajte [Meni „Edit“ na stranici 15](#).

Kontekstualni meni opcije „Peak Review“

Ove funkcije kontrolišu pojavljivanje parametara integracije koji se prikazuju sa leve strane hromatograma. Kliknite desnim tasterom miša u oknu **Peak Review** da biste pristupili kontekstualnom meniju. Dostupne su sledeće komande.

Tabela 8-1 Parametri „Peak Review“

Zadatak	Komande
Promena izgleda okna Peak Review .	Dijalog „Peak Review Options“: kartica „Appearance“ na stranici 66 ili Dijalog „Peak Review Options“: kartica „Zooming“ na stranici 68.
Podešavanje formata naziva „Peak Review“.	Podešavanje formata naslova pregleda vršne vrednosti na stranici 70.
Prikazivanje parametara pomoću opisnih naziva za pojedinačne parametre.	Podrazumevano je postavljena opcija Show Parameters-Normal Width .
Kopiranje parametara.	Kopiranje parametara na stranici 70.
Lepljenje parametara.	Lepljenje parametara na stranici 71.
Podešavanje vršne vrednosti na „Not Found“.	Podešavanje vršne vrednosti na „Not Found“ na stranici 71.
Korišćenje vršne vrednosti.	Korišćenje vršne vrednosti na stranici 71.
Ažuriranje metoda kvantifikacije za komponentu.	Ažuriranje metoda kvantifikacije za komponentu na stranici 71.
Ažuriranje metoda kvantifikacije za grupu.	Ažuriranje metoda kvantifikacije za grupu na stranici 71.

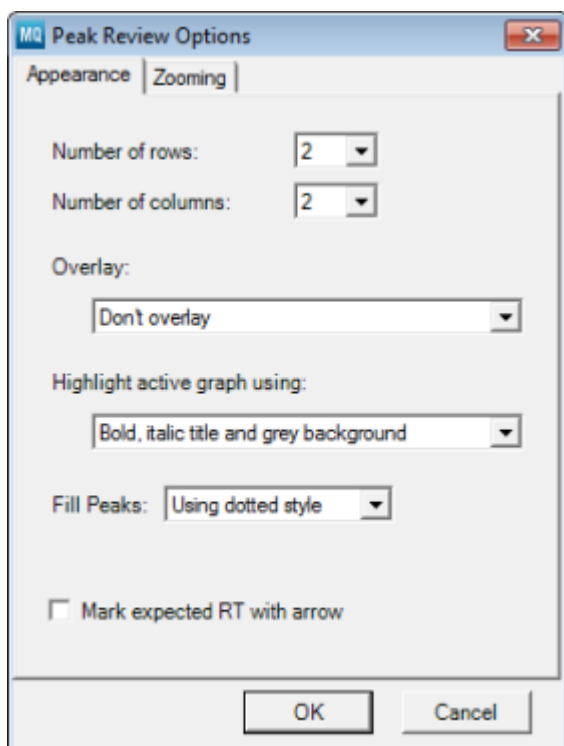
Tabela 8-1 Parametri „Peak Review“ (nastavak)

Zadatak	Komande
Primena parametara integracije na uzorak u grupi.	Primena parametara integracije na uzorak u okviru grupe na stranici 72.
Vraćanje vršne vrednosti na originalni metod.	Vraćanje vršne vrednosti na originalni metod na stranici 72.
Vraćanje svih vršnih vrednosti za komponentu.	Vraćanje svih vršnih vrednosti za komponentu na stranici 72.

Dijalog „Peak Review Options“: kartica „Appearance“

Kliknite desnim tasterom miša u oknu **Peak Review** da biste izabrali podešavanje opcija koje utiču na izgled okna **Peak Review**. Preporučuje se da ne bude podešeno više od četiri reda i četiri kolone.

Slika 8-2 Dijalog „Peak Review Options“: kartica „Appearance“



Oznaka	Opis
Number of rows i Number of columns	Kontroliše broj hromatograma koji su istovremeno vidljivi. Osim ako hromatogrami nisu već sačuvani, biće potrebno više vremena za listanje između stranica ako je prikazano mnogo hromatograma. Pogledajte Meni „Edit“ na stranici 15 .
Overlay	<p>Određuje da li drugi hromatogrami treba da budu preklopljeni preko glavnog hromatograma u svakom podoknu.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Don't Overlay: sprečava preklapanje drugih hromatograma. • All components for group: preklapa sve hromatograme za komponente iz iste grupe iz koje je glavna komponenta (za trenutni uzorak). • Analytes and IS's separately for group: slično prethodnoj opciji, osim što su analiti i interni standardi odvojeni umesto da se preklapaju sve komponente iz iste grupe. • Internal Standard with Analyte: za analite, preklapa interni standard kojeg koristi analit (hromatogrami internog standarda nemaju druga preklapanja). • Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines: prikazuje linije odnosa jona. Izaberite ovu opciju da biste pregledali prihvatanje odnosa jona u tabeli Results Table. Korisnici mogu prikazati prihvatanje odnosa jona kada u metodu kvantifikacije postoje definisane grupe. Ipak, linije Ion Ratio Lines predstavljaju samo pokazatelj prihvatanja a ne krajnji rezultat. Linije su prikazane u hromatogramu kao visina vršne vrednosti ali linije se izračunavaju na osnovu oblasti ili visine vršne vrednosti u zavisnosti od podešavanja definisanih u metodu kvantifikacije. Ako između visine i oblasti postoji razlika, korisnik mora da potvrdi vrednost Ion Ratio u tabeli Results Table.
Highlight active graph using:	Pokazuje kako treba da se prikazuje trenutno aktivan hromatogram. Podesite da biste koristili podebljana slova, naslov u kurzivu i sivu pozadinu.

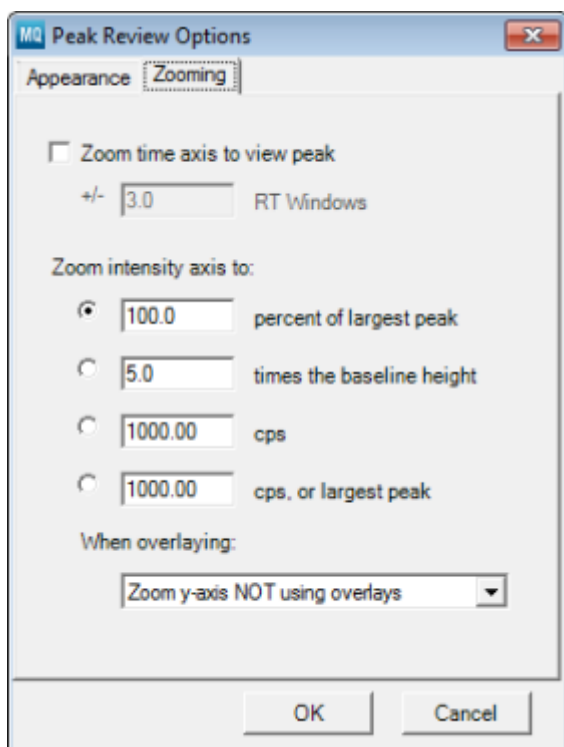
Pregled vršne vrednosti

Oznaka	Opis
Fill peaks	<p>Pokazuje kako treba da se prikazuje integrisana oblast za vršne vrednosti. Izbori su:</p> <ul style="list-style-type: none">• Upotrebite isprekidanu liniju kao na snimcima ekrana u ovom dokumentu.• Upotrebite punu liniju.• Upotrebite liniju bez ispune. U svim slučajevima se iscrtava i osnovna vrednost vršne vrednosti (crvenom bojom). <p>Kada se koristi treća opcija, iscrtava se samo osnovna vrednost a vršna vrednost se ne ispunjava.</p>
Mark expected RT with arrow	<p>Pokazuje vrednost Expected Retention Time plavom strelicom iscrtanom ispod vremenske ose. To može biti korisno za utvrđivanje da li je integrisana vršna vrednost blizu očekivanog RT.</p>

Dijalog „Peak Review Options“: kartica „Zooming“

Kliknite desnim tasterom miša u oknu **Peak Review** da biste izabrali podešavanje opcija koje utiču na izgled okna **Peak Review**. Funkcije **Zoom intensity axis to** koriste se da automatski podese y-osu hromatograma.

Slika 8-3 Dijalog „Peak Review Options“: kartica „Zooming“



Oznaka	Opis
Zoom time axis to view peak	Kada se izabere, x-osa hromatograma se automatski podešava tako da je vidljiv samo deo celokupnog postupka. Ovo je korisno za dugačke LC postupke, tako da oblast od interesa može da se vidi jasnije. Širina prozora se izražava u vidu sadržatelja parametra integracije prozora vremena zadržavanja. Ukupna širina uvećane oblasti dva puta je veća od navedenog broja sadržatelja RT Window .
Zoom intensity axis to percent of largest peak	Koristi se da automatski podesi y-osu hromatograma. Menja veličinu y-ose na navedeni procenat najviše vršne vrednosti u okviru vidljivog x-opsega hromatograma. Ovo će biti manje od ukupne dužine LC postupka ukoliko se koristi funkcija „Zoom time axis to view peak“.
Zoom intensity axis to times the baseline height	Koristi se da automatski podesi y-osu hromatograma. Koristi se da se fokusira na samu regiju osnovne linije.
Zoom intensity axis to cps	Menja veličinu y-ose direktno na navedenu vrednost.
Zoom intensity axis to cps, or largest peak	Menja veličinu y-ose na manju vrednost od navedene vrednosti ili na najveću vršnu vrednost.
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays	Održava podešavanja iz „Zoom intensity axis to the section“ koristeći samo glavni skup podataka. Ovo podešavanje može da dovede do toga da preklapanja budu samo delimično vidljiva, ako su intenzivnija od glavnog skupa podataka.
When overlaying Zoom y-axis using overlays	Koristi glavni skup podataka i sva preklapanja i koristi najveću ukupnu y-vrednost. Ova funkcija uvek drži preklapanja vidljivim.
When overlaying Use a percentage y-axis	Odvojeno menja veličinu glavnog skupa podataka i preklapanja koristeći procentualnu skalu. Ovo uzrokuje da svaki trag koristi punu raspoloživu visinu. Međutim, relativne visine vršnih vrednosti ne mogu direktno vizuelno da se upoređuju.

Savet! Dva puta kliknite u okviru y-ose da biste promenili veličinu ose u skladu sa najintenzivnijom vršnom vrednosti u okviru kompletnog skupa podataka.

Kada se izabere, hromatogram za vršnu vrednost koja se trenutno pregleda iscrtava se koristeći neprekinut plavi trag i prikazuje se njegova oblast integrisane vršne vrednosti. Hromatogrami (ne i oblast integrisane vršne vrednosti) za druge komponente (istog uzorka) postavljaju se preko njega iscrtani isprekidanom linijom.

Kada grafikon prikazuje preklapanja na ovaj način, kliknite dva puta bilo gde u oblasti naziva da biste prebacivali između prikazivanja naziva za sve hromatograme ili samo za onaj koji je aktivan.

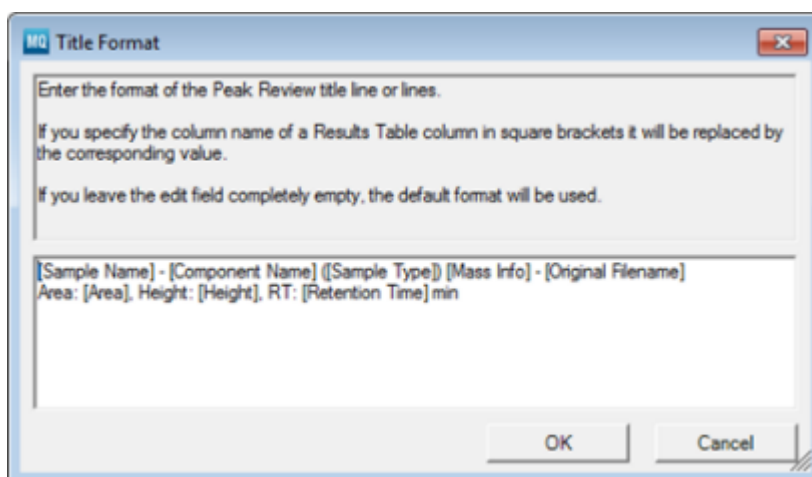
Savet! Dva puta kliknite u okviru x-ose da biste vratili grafikon na njegov početni pregled gde su vidljivi svi podaci. Uvećajte prevlačenjem u okviru ose da biste izabrali vremenski opseg.

Podešavanje formata naslova pregleda vršne vrednosti

Koristite dijalog da biste prilagodili informacije koje se pojavljuju u naslovu grafika svakog hromatograma. Ako korisnik unese naziv kolone u tabeli **Results Table** u uglastim zagradama, onda se on menja vrednošću polja za trenutni uzorak i komponentu. Korisnik takođe može da unese dodatni tekst koji ostaje kakav jeste. Preporučuje se da naziv uzorka [Sample Name] bude uključen u naslov pregleda vršne vrednosti.

- Desnim tasterom miša kliknite na okno **Peak Review**, a zatim kliknite na opciju **Set Peak Review Title Format**

Slika 8-4 Dijalog „Title Format“



Kopiranje parametara

Kliknite desnim tasterom miša u oknu **Peak Review** da biste pristupili ovoj komandi. Koristite ovu komandu zajedno sa komandom **Paste Parameters** da biste kopirali parametre za pronalaženje vršnih vrednosti sa jednog hromatograma na drugi. Ova komanda se može koristiti ako je isto podešavanje parametara potrebno izvršiti na nekoliko hromatograma.

1. U grafiku u kojem je otvoren aktivni hromatogram kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na opciju **Copy Parameters**.
2. Koristite komandu **Update Quantitation Method for Component** da biste primenili izmene na sve hromatograme za datu komponentu.

Lepljenje parametara

1. U grafikonu u kojem je otvoren aktivni hromatogram, kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na **Copy Parameters**.
2. Kliknite desnim tasterom miša u drugi hromatogram, a zatim kliknite na **Paste Parameters**.

Prethodno iskopirani parametri primenjuju se na novi hromatogram.

Podešavanje vršne vrednosti na „Not Found“

- Na grafiku sa otvorenim aktivnim hromatogramom kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na opciju **Set Peak to 'Not Found'** da biste uklonili integraciju sa izabranog hromatograma.

Korišćenje vršne vrednosti

- U grafikonu u kojem je otvoren aktivni hromatogram, kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na opciju **Use Peak** da biste uključili aktivnu vršnu vrednost u kalibracionu krivu ili je isključili iz nje.

Ažuriranje metoda kvantifikacije za komponentu

Nakon podešavanja parametara za pronalaženje vršne vrednosti za određeni hromatogram, izaberite ovu funkciju da biste podesili kopiju metoda kvantifikacije koja je sačuvana u tabeli „Results Table“ za korišćenje tih parametara za ovu komponentu.

- Podesite parametre za pronalaženje vršne vrednosti, kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na opciju **Update Quantitation Method for Component**.

Za određenu komponentu, svi uzorci se automatski integrišu za korišćenje novih parametara, a okno **Peak Review** i tabela **Results Table** se ažuriraju. Ako je bilo koja vršna vrednost ručno integrisana, korisniku se postavlja pitanje da li ponovnu integraciju treba primeniti na sve vršne vrednosti ili samo na one koje nisu ručno integrisane.

Ažuriranje metoda kvantifikacije za grupu

Slično komandi **Update Quantitation Method for Component**, osim što se integracija primenjuje na sve komponente koje pripadaju istoj grupi kojoj pripada komponenta za trenutno aktivni hromatogram. Ako je korisnik dodelio različite komponente grupama i ako se očekuje da komponente dodeljene bilo kojoj datoj grupi imaju isto vreme zadržavanja, onda je ova funkcija korisna za korisnika da može da resetuje parametre, uključujući očekivano vreme

zadržavanja, za sve komponente za grupu odjednom. Ova funkcija nije korisna ako komponente za grupe nemaju ista vremena zadržavanja.

- Podesite parametre za pronalaženje vršne vrednosti, kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na opciju **Update Quantitation Method for Group**.

Primena parametara integracije na uzorak u okviru grupe

Nakon podešavanja parametara za pronalaženje vršne vrednosti za određeni hromatogram, koristite ovu funkciju da biste primenili originalne parametre iz kopije metoda kvantifikacije koja je sačuvana u tabeli „Results Table“ na hromatogram.

- Nakon podešavanja parametara za pronalaženje vršne vrednosti za određeni hromatogram, kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na opciju **Apply Integration Parameters to Sample Within Group**.

Vraćanje vršne vrednosti na originalni metod

Nakon podešavanja parametara za pronalaženje vršne vrednosti za određeni hromatogram, koristite ovu funkciju da biste primenili originalne parametre sa kopije metoda kvantifikacije koja je sačuvana u tabeli **Results Table** na hromatogram.

- Kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na opciju **Revert Peak to Original Method**.

Vraćanje svih vršnih vrednosti za komponentu

Nakon podešavanja parametara za pronalaženje vršne vrednosti za neke hromatograme, koristite ovu funkciju da biste primenili originalne parametre sa kopije metoda kvantifikacije koja je sačuvana u tabeli **Results Table** na sve hromatograme koji imaju istu komponentu kao i aktivni hromatogram. Ako je bilo koja vršna vrednost ručno integrisana, korisniku se postavlja pitanje da li ponovnu integraciju treba primeniti na sve vršne vrednosti ili samo na one koje nisu ručno integrisane.

- Kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na opciju **Revert All Peaks for Component**.

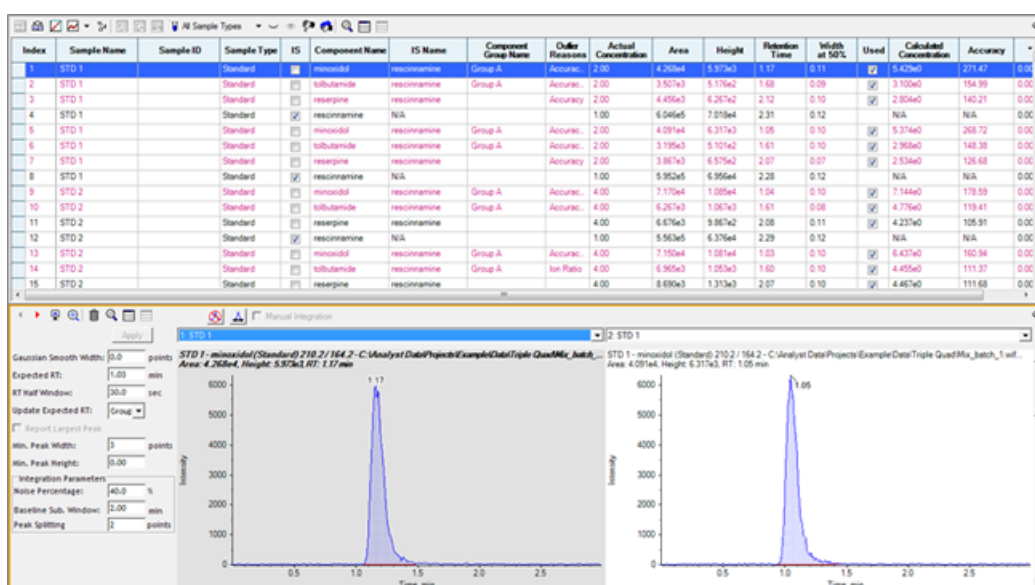
Uporedni pregled uzoraka

9

Koristite funkciju **Side-by-side Sample Review** da biste pretražili određena ciljna jedinjenja. Korisnici mogu da izaberu do šest uzoraka za upoređivanje odgovora vršnih vrednosti preko uzoraka. Revizori treba da pregledaju kvantitativne podatke prema kriterijumima integracije vršnih vrednosti i prihvatljivosti podataka u sopstvenim standardnim operativnim postupcima (SOP).

Kada je tabela **Results Table** aktivna, kliknite na ikonu **Side by Side Sample Review** na traci sa alatkama **Results Table** da biste otvorili okno **Side by Side Sample Review**.

Slika 9-1 Okno „Side by Side Sample Review“



Metodi kvantifikacije uključuju kriterijume korišćene za kvantifikaciju vršnih vrednosti izabranih za integraciju. Revizori treba da pregledaju kvantitativne podatke prema kriterijumima integracije vršnih vrednosti i prihvatljivosti podataka u sopstvenim standardnim operativnim postupcima (SOP).

Obavljanje uporednog pregleda uzoraka

1. Otvorite tabelu „Results Table“.
2. Kliknite na ikonu **Side by Side Sample Review**.
3. Izaberite uzorak iz liste u oknu **Side by Side Sample Review**.

Prikazuju se parametri integracije.

Uporedni pregled uzoraka

Savet! Kliknite desnim tasterom miša na okno **Side by Side Sample Review**, a zatim kliknite na stavku **Options** da biste promenili broj redova ili kolona u naporednom pregledu.

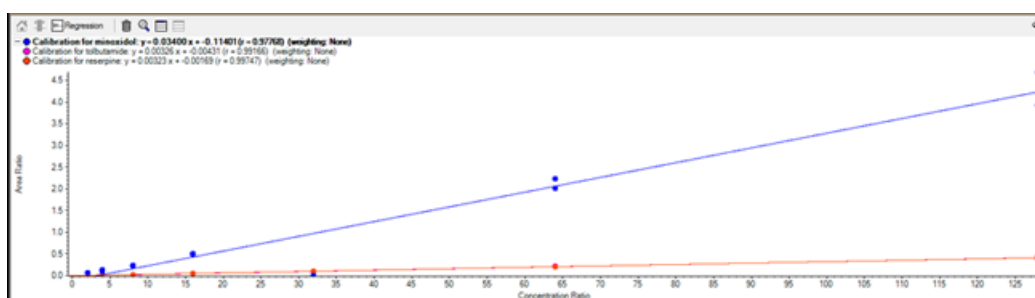
4. Izaberite neki drugi uzorak sa neke druge liste.

Okno „Calibration“

10

Koristite okno **Calibration** da biste vizuelno proverili regresiju svakog analita ako se koriste uzorci **Standard** u poznatoj koncentraciji. Ovo okno nije primenljivo ako korisnik vrši relativnu kvantifikaciju i nema uzorke **Standard**. Kada je tabela **Results Table** aktivna, kliknite na alatku **Show Calibration** na traci sa alatkama.

Slika 10-1 Okno „Calibration“

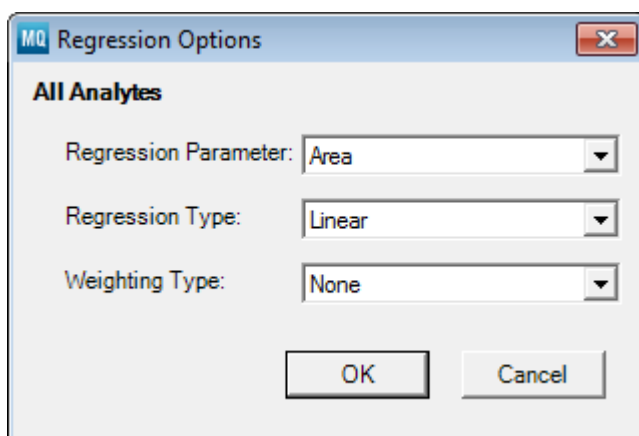


Pored proveravanja regresije, korisnik može da isključi uzorke **Standard** tako da se oni ne koriste za regresiju. Nakon završetka podešavanja, nova regresija se automatski izračunava, a parametri kao što su **Calculated Concentration** i **Accuracy** se ponovo izračunavaju za sve uzorke analita. Pogledajte odeljak [Jednačine regresije na stranici 129](#).

Dijalog „Regression Options“

Ako postoji mnogo analita, onda je jednostavnije primeniti promene pomoću dijaloga **Regression Options** nego vršiti promene pojedinačnih parametara regresije.

Slika 10-2 Dijalog „Regression Options“



Saveti za kalibraciju

- Za analite bez dodeljenog internog standarda, y-osa je vršna vrednost **Area** ili **Height**, kako je izabrano u metodu kvantifikacije. Za analite sa internim standardom, y-osa je vršna vrednost odnosa **Area** ili **Height** (analita prema internom standardu).
- Za analite bez dodeljenog internog standarda, x-osa je **Actual Concentration**. U suprotnom, ona je odnos **Actual Concentration** (analita prema internom standardu).
- Ukoliko je izabrano više analita sa liste **Components & Groups List**, onda se kalibracije za sve analite preklapaju. U suprotnom, prikazuje se kalibracija za izabrani analit.
- Oblast naslova uvek prikazuje naziv aktivnog analita i jednačinu regresije u vezi sa njim, zajedno sa koeficijentom korelacije. Ukoliko regresija nije mogla da se izračuna, na primer, ako nema **Standard** uzoraka, onda će naslov to označavati. Ukoliko su preklapljene kalibracije za više analita, onda naslov može da se prebacuje između prikazivanja informacije za sve analite ili samo za aktivni, tako što ćete dva puta kliknuti bilo gde u oblasti naslova. Ukoliko ima puno preklapljenih analita, možda neće biti moguće da se prikažu sve informacije. U tom slučaju, pomerite prikaz naslova tako što ćete vući unutar njega.
- Tačke podataka za uzorke **Standard** koji su u upotrebi uvek se iscrtavaju, kao i jednačina kalibracije koja koristi ove tačke. Korisnik opciono može da prikaže tačke podataka isključenih uzoraka **Standard** i uzoraka **Quality Control**.
- Ako korisnik klikne na tačku podataka, onda će odgovarajući red u tabeli **Results Table** biti automatski izabran i pomeren u prikaz, pod uslovom da je taj red trenutno vidljiv negde u tabeli i da nije sakriven.

Kontekstualni meni „Calibration“

Kliknite desnim tasterom miša na okno **Calibration** da biste pristupili kontekstualnom meniju. Dostupne su sledeće komande.

Tabela 10-1 Opcije menija okna „Calibration“

Opcija menija	Opis
Exclude (or Include)	Ako korisnik direktno klikne desnim tasterom miša na tačku podataka za standard koji je isključen, onda se ova opcija koristi da bi se isključio uzorak iz izračunavanja regresije (za uzorak i analit pod tačkom podataka na koju je kliknuo). Ako je uzorak već isključen, onda tekst stavke menija glasi Include i njegovo biranje uključuje tu tačku. Nakon biranja izračunava se regresija i ažurira se tabela Results Table . Ova funkcija je jednaka brisanju ili biranju polja za potvrdu Used u tabeli „Results Table“ za odgovarajući red.
Exclude – All Analytes (or Include – All Analytes)	Isključuje ili uključuje sve analite, a ne samo analit koji odgovara izabranoj tački podataka.

Tabela 10-1 Opcije menija okna „Calibration“ (nastavak)

Opcija menija	Opis
Show Excluded Standards	Kada se izaberu, tačke podataka za isključene standarde (ako postoje) iscrtavaju se pomoću otvorenih krugova. Kada se obrišu, isključeni standardi se ne prikazuju.
Show QCs	Kada se izaberu, tačke podataka za uzorke Quality Control (QC) iscrtavaju se pomoću otvorenog romba. Kada se obrišu, uzorci QC se ne prikazuju.
Show Legend	<p>Kada se izabere, legenda se iscrtava sa leve strane grafikona koji prikazuje simbole tačke za različite tipove uzoraka (zatvoreni krugovi za uzorke Standard, otvoreni krugovi za isključene uzorke „Standards“ i otvoreni rombovi za uzorke Quality Control).</p> <p>Napomena: Ako korisnik ne pregleda određene tipove uzoraka, na primer ako opcija Show QCs nije izabrana, onda unos za ove tipove uzoraka ne postoji. Ako se ne prikazuju ni uzorci QC ni isključeni standardi, onda ova opcija nije dostupna i legenda se ne iscrtava.</p>
Use Percent Y-Axis	<p>Kada nije izabrana, y-osa grafikona je u jedinicama apsolutne vršne vrednosti Area ili Height (ili odnosa vršne vrednosti Area ili Height ako se koristi interni standard). Kada se izabere, y-osa je izražena kao procenat tačke podataka sa najvećom vrednošću za y za svaki analit nezavisno.</p> <p>Korišćenje procentne ose je korisno ako je preklopljeno više od jednog analita i ako se njihovi apsolutni odgovori značajno razlikuju, budući da to dozvoljava da svaki trag bude premeren za korišćenje cele dostupne vertikalne oblasti. U suprotnom, analiti sa niskim odgovorom se nalaze blizu x-ose i potrebno je uvećati grafikon da bi se detaljno pregledali.</p>
Log-Log Plot	Koristi se za pomeranje pregleda između ucrtavanja Area naspram Concentration i ucrtavanja Log(Area) naspram Log(Concentration) .

Tabele „Statistics“

11

Koristite tabelu **Statistics Table** za prikazivanje informacija koje su povezane sa ponovljivošću analize. Svaki red u tabeli sumira informacije, kao što su prosečno i standardno odstupanje za grupu povezanih vršnih vrednosti iz istog analita, za koje bi se idealno očekivalo da imaju isti odgovor.

Slika 11-1 Okno „Statistics“

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	miconidol	2.00	2 of 2	5.422e0	3.884e-2	0.72	270.59	5.422e0	5.371e0
2	miconidol	4.00	2 of 2	6.791e0	4.993e-1	7.35	189.76	7.144e0	6.437e0
3	miconidol	8.00	2 of 2	1.026e1	3.500e-1	3.41	128.21	1.001e1	1.050e1
4	miconidol	16.00	2 of 2	1.791e1	3.199e-1	1.79	111.94	1.814e1	1.768e1
5	miconidol	32.00	1 of 2	3.396e0	N/A	N/A	10.49	N/A	3.396e0
6	miconidol	64.00	2 of 2	6.980e1	4.479e0	7.11	182.82	6.911e1	6.292e1
7	miconidol	128.00	2 of 2	1.302e2	1.583e1	12.16	101.69	1.414e2	1.190e2
8	tolbutamide	2.00	2 of 2	3.034e0	9.352e-2	3.08	151.69	3.100e0	2.965e0
9	tolbutamide	4.00	2 of 2	4.616e0	2.274e-1	4.93	115.39	4.775e0	4.495e0
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	90.32	2.902e1	3.070e1
13	tolbutamide	64.00	2 of 2	6.485e1	3.373e0	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	1.146e2
15	nesequine	2.00	2 of 2	2.663e0	1.912e-1	7.16	133.44	2.804e0	2.534e0
16	nesequine	4.00	2 of 2	4.352e0	1.633e-1	3.75	108.80	4.237e0	4.467e0
17	nesequine	8.00	2 of 2	7.491e0	6.761e-1	9.03	93.64	7.013e0	7.970e0
18	nesequine	16.00	2 of 2	1.536e1	1.693e-1	1.10	96.03	1.525e1	1.548e1

Oznaka	Opis
Row	Broj reda. Kliknite na naslov jedne od kolona da biste sortirali tabelu. Vratite tabelu u originalan prikaz klikom na njen naslov.
Component Name	Naziv analita.
Actual Concentration (ili Sample Name)	Ako se grupisanje vrši po stvarnoj koncentraciji, onda ova kolona prikazuje koncentraciju. Ako se grupisanje vrši po nazivu uzorka, onda se naziv kolone menja i prikazuje se naziv uzorka.
Num. Values	Pokazuje m od n, pri čemu je n ukupan broj uzoraka pri stvarnoj koncentraciji (ili sa istim nazivom uzorka) a m broj ovih uzoraka koji se koriste za izračunavanja. Uzorci se ne koriste ako se odgovarajuća vršna vrednost ne može integrisati ili ako je polje Used ručno obrisano.
Mean	Prosek za korišćene uzorke.
Standard Deviation	Standardno odstupanje korišćenih uzoraka.
Percent CV	Koeficijent varijanse izražen u procentima: $100 * (\text{standardno odstupanje}) / \text{srednja vrednost}$.

Oznaka	Opis
Accuracy	Srednja vrednost podeljena sa stvarnom koncentracijom, izraženo u procentima: $100 * \text{srednja vrednost} / (\text{stvarna koncentracija})$. Polje se prikazuje samo kada se grupisanje vrši po stvarnoj koncentraciji, a ne kada se grupisanje vrši po nazivu uzorka.
Values	Pojedinačne vrednosti za uzorak prikazuju se u dodatnim kolonama. Ako odgovarajući uzorak nije mogao da se integriše, onda je vrednost N/A. Ako je polje Used ručno obrisano, vrednost se prikazuje kao precrtana.

Saveti za „Statistics Table“

- Tabela **Statistics Table** povezuje se sa listom **Components & Groups List** radi prikazivanja redova koji odgovaraju izabranim analitima. Ako se izaberu stavke **All Components** ili **All Analytes**, postoje stavke za unos za sve analite. Ako se izabere pojedinačni analit, postoje stavke za unos samo za taj analit. Ako se na listi izabere pojedinačni interni standard, tabela **Statistics Table** će biti prazna. Pogledajte [Lista „Components & Groups“ na stranici 38](#).
- Ako korisnik klikne na jednu od ćelija **Value**, onda će u tabeli **Results Table** biti izabran odgovarajući red za analit i uzorak, pod uslovom da je taj red trenutno vidljiv u tabeli **Statistics Table**. Prikazuju se samo uzorci **Unknown** u tabeli **Results Table**. Ako tabela **Statistics Table** sadrži informacije o uzorcima tipa **Standard**, odgovarajući redovi neće biti vidljivi u tabeli **Results Table**. Ako je okno **Peak Review** vidljivo, ono se povezuje sa tabelom **Results Table** i ažurira se kada se klikne na ćeliju.
- Kliknite na naslov jedne od kolona da biste sortirali tabelu **Statistics Table**.
- Korisnik može kopirati ili celu tabelu **Statistics Table** ili samo redove od interesa.
 - Da biste kopirali celu tabelu, kliknite na **Edit > Copy**.
 - Da biste kopirali samo redove od interesa, ručno izaberite redove a zatim kliknite na **Edit > Copy**.
- Ako su širine kolona podešene, te širine se obnavljaju sledeći put kada se prikaže tabela **Statistics Table**.
- Format i preciznost su isti kao u tabeli **Results Table**.
- Opcija **Group by Concentration for Standards and QCs** se bazira na vrednosti **Displayed Actual Concentration** a ne na vrednosti **Actual Concentration** koja je sačuvana u tabeli **Results Table**. Ako je koncentracija Std 1 jednaka 0,001, koncentracija Std 2 je 0,005, a format prikaza je 0, tada su vrednosti Std 1 i Std 2 grupisane zajedno jer se obe posmatraju kao 0. Da biste ih grupisali odvojeno, u dijalogu **Column Settings** podesite preciznost za **Analyte Concentration** na vrednost 0,000. Ako je Std 1 jednaka 0,500, a Std 2 jednaka 0,499, podesite preciznost na 0,00 da biste ih grupisali zajedno.

Kontekstualni meni „Statistics Table“

Desnim tasterom miša kliknite na tabelu **Statistics Table** da biste pristupili komandi **Use Peak**. Koristite ovu komandu da biste podesili polje **Used** za uzorak i analit koji odgovara izabranoj ćeliji u jednoj od kolona **Value**. Pre nego što kliknete desnim tasterom miša da biste pristupili meniju, kliknite na odgovarajuću ćeliju u jednoj od kolona **Value** da biste je izabrali.

Koristite opciju Metric Plots za iscrtavanje vrednosti iz kolone Results Table bilo prema broju reda ili druge kolone. Ovi grafikoni su značajna pomoć za vizuelni pregled podataka, naročito ako korisnici ne žele da ručno pregledaju svaki hromatogram koristeći okno Peak Review.

Generisanje metričkog grafikona

1. Izaberite jednu ili dve kolone u tabeli **Results Table**.
2. Kliknite na **Show Metric Plot**.

Ako se izabere jedna kolona, onda rezultirajući grafikon prikazuje vrednosti iz kolone kao funkciju broja reda u tabeli. Ako su izabrane dve kolone, onda se vrednosti iz kolona iscrtavaju jedna u odnosu na drugu. Prva od dve izabrane kolone sadrži vrednosti za „X“, a druga sadrži vrednosti za „Y“.

Čuvanje podataka metričkog grafikona

1. Otvorite metrički grafikon tako što ćete prvo izabrati kolonu, a zatim kliknuti na opciju **Show Metric Plot**.
2. Kliknite desnim tasterom miša na grafikon, a zatim kliknite na opciju **Save Setting**.

Ovo korisniku omogućava da brzo generiše grafikone **Metric Plots** koji se često koriste, a da ne mora da bira odgovarajuću kolonu svaki put.

Saveti za metričke grafikone

- Kada korisnici kliknu levim tasterom miša na tačku podataka, automatski se bira i pomera u prikaz odgovarajući red iz tabele Results Table. Ako je okno Peak Review otvoreno, onda se ono takođe ažurira kako bi prikazalo odgovarajući hromatogram. To nudi pogodno sredstvo za obavljanje pregleda vršne vrednosti u pogledu odstupanja.
- Ako se izabere više komponenti na listi Components & Groups, preklapaju se tragovi za sve komponente. U protivnom, prikazuje se trag za jednu izabranu komponentu.
- Oblast naslova uvek prikazuje naziv aktivnog traga. Ako su preklapljeni tragovi za više komponenti, prebacujte naslov između prikazivanja informacija za sve tragove ili samo za aktivni trag tako što ćete dva puta kliknuti bilo gde u oblasti naslova. Aktivirajte određeni trag klikom na tačku u boji sa leve strane odgovarajućeg naslova.

- Sačuvajte podešavanja za metrički grafikon da biste ih ponovo koristili. Kliknite desnim tasterom miša na metrički grafikon, a zatim kliknite na **Save Settings As**.

Kontekstualni meni „Metric Plot“

Desnim tasterom miša kliknite na metrički grafikon da biste pristupili kontekstualnom meniju. Dostupne su sledeće komande.

Tabela 12-1 Opcije kontekstualnog menija „Metric Plot“

Opcija menija	Opis
Regression	Prikazuje liniju regresije na metričkom dijagramu. <ul style="list-style-type: none">• Regression Type• Weighting Type• Include standard deviation lines and Multiplier Pogledajte Dijalog „Regression“ na stranici 83 .
Display “N/A” as 0.0	Kada je ova opcija izabrana, pravi se grafikon od vrednosti koje nisu numeričke korišćenjem y-vrednosti nule. U suprotnom, takve tačke se izostavljaju sa grafikona. Na primer, vrednost Retention Time se prijavljuje kao N/A za vršne vrednosti koje se ne mogu integrisati. Za ovu funkciju, tačka je prisutna za takve vršne vrednosti tako da korisnik može da vidi ove potencijalno problematične uzorke i zatim ih poveže sa oknom Peak Review klikom na tačku.
Show Legend	Menja legendu koja označava simbole tačke koji se koriste za različite tipove uzorka.
Label Active Series (using sample names)	Određuje da li su tačke podataka označene korišćenjem teksta iz polja Sample Name u tabeli Results Table . Ako postoji više preklapljenih tragova, označava se samo trenutno aktivan trag.
Use Percent Y-Axis	Određuje da li y-osa koristi apsolutne jedinice ili procenat maksimalne y-vrednosti. Kada se koristi funkcija sa procentima, procenat se izračunava nezavisno od svakog preklapljenog traga. Ova funkcija se može koristiti za iscrtavanje preklapljenih tragova za više komponentata, a odziv za metriku komponentata se značajno razlikuje.
Start Y-Axis at Zero	Određuje da li y-osa počinje u tački y=0 ili u minimalnoj y-vrednosti za koju treba iscrtati grafikon.
Connect Points With Lines	Određuje da li su tačke podataka povezane linijama.
Save Setting	Ako je grafikon trenutno povezan sa podešavanjem, ova funkcija čuva trenutne funkcije. Inače se ova funkcija ponaša na isti način kao i funkcija Save Setting As .

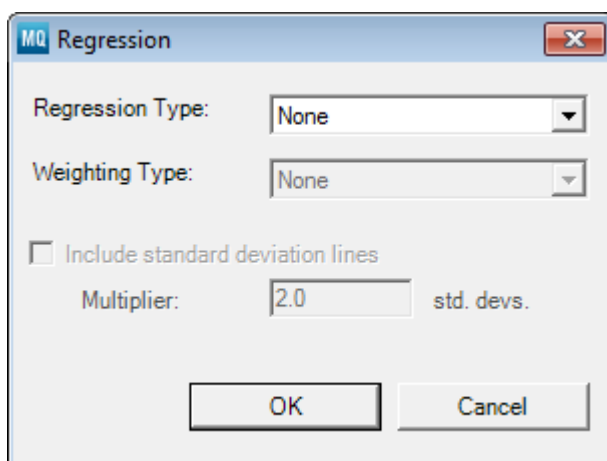
Tabela 12-1 Opcije kontekstualnog menija „Metric Plot“ (nastavak)

Opcija menija	Opis
Save Setting As	Ako se grafikon često iscrtava za iste kolone, korisnik može sačuvati opcije iscrtavanja kao podešavanje. Ovo korisniku omogućava da brzo generiše grafikon čak i ako potrebne kolone nisu trenutno vidljive u tabeli Results Table . Pored kolona, čuvaju se i različite opcije iscrtavanja grafikona. Nakon što se podešavanje sačuva, naziv se prikazuje u meniju Metric Plot .
Delete Setting	Ako je trenutni grafikon povezan sa podešavanjem, koristite ovu funkciju za brisanje podešavanja.

Dijalog „Regression“

Kliknite da biste prikazali liniju regresije na metričkom grafikonu.

Slika 12-1 Dijalog „Regression“



Oznaka	Opis
Regression Type	Sadrži različite tipove regresije (linearna, kvadratna i tako dalje). Tip regresije Mean kao rezultat ima horizontalnu liniju na mestu prosečne y-vrednosti za sve tačke podataka, a za tip regresije Median kao rezultat ima horizontalnu liniju na mestu srednje y-vrednosti za tačke. Osim toga, postoji funkcija None koja uklanja sve prethodne regresije.
Weighting Type	Različiti tipovi merenja težine opisani su u Ponderi na stranici 130 .
Include standard deviation lines i Multiplier	Ove opcije su dostupne kada je izabran bilo Mean ili Median tip regresije. Kada je izabran, dodaju se dodatne isprekidane horizontalne linije koje iscrtaju navedeni broj standardnih devijacija iznad i ispod glavne linije. Koristite ovu opciju kako biste videli tačke koje su, na primer, više od dve ili tri standardne devijacije od proseka.

Uređivač „Quantitation Method Editor“

13

Koristite uređivač **Quantitation Method Editor** da biste kreirali metod kvantifikacije ili uredili postojeći.

Tipičan radni proces je kreiranje metoda kvantifikacije upotrebom čarobnjaka **New Results Table wizard**. Međutim, korisnik može da iskoristi uređivač **Quantitation Method Editor** da bi kreirao metod kvantifikacije koji može da se koristi po potrebi.

Kartica „Components“

Desnim tasterom miša kliknite na karticu **Components** da biste pristupili kontekstualnom meniju. Dostupne su sledeće komande.

Tabela 13-1 Opcije kontekstualnog menija „Components“

Opcija menija	Opis
Find Component by Name	Koristi se za biranje komponente čije se polje Name poklapa sa tekstom. Nije potreban tačan tekst da bi se pronašlo poklapanje. Ovo je korisno pri biranju određene komponente ako ima puno komponenti. Ako početno nije izabran nijedan red u unakrsnoj tabeli, onda pretraga počinje od prvog reda. U suprotnom, pretraga počinje od reda koji sledi izabrani red i ide do početka. Ovo je korisno ako postoji više komponenti čije polje Name sadrži tekst. Ako se prilikom prve pretrage ne pronađe komponenta, pretražite ponovo, a prva komponenta neka ostane izabrana da biste pronašli drugo poklapanje u tabeli.
Insert Row Above	Ubacuje jedan prazan red odmah iznad trenutno izabranog reda.
Delete Selected Rows	Uklanja trenutno izabrane redove iz tabele.
Sum Multiple Ions	Sabira hromatograme za više tranzicija MRM ili potpuno skenirane opsege mase. Kada se ova komanda izabere, dodatne kolone mase se dodaju u tabelu Components . Sve mase izabrane za dati red koriste se u konstrukciji sabranog XIC za odgovarajući analit ili interni standard. Preporučuje se da se ova funkcija uvek izabere.
Groups	Pogledajte Podmeni „Groups“ na stranici 85 .
Internal Standards	Pogledajte Podmeni „Internal Standards“ na stranici 87

Podmeni „Groups“

Tabela 13-2 Opcije menija „Groups“

Opcija menija	Opis
Using Constant Group Size	Otvora dijalog Set Automatic Groups koji se koristi za automatsko popunjavanje kolone Group uz korišćenje naziva prve komponente za svaku grupu, pod pretpostavkom da svaka grupa sadrži isti broj komponenata za svaku grupu. Pogledajte Dijalog „Set Automatic Groups“ na stranici 86 .
By Filling Down Existing Groups	Automatski popunjava isti naziv grupe za niz uzastopnih komponenti. Da biste koristili ovu komandu, ručno navedite ime grupe za prvu komponentu za svaku odvojenu grupu, a zatim izaberite ovu komandu. Navedeni nazivi grupa popunjavaju se nadole za sve naredne komponente za koje je naziv grupe prazan. U obzir se uzimaju samo redovi za koje je polje Name popunjeno.
Using Q1 Masses	Samo za dostupne MRM eksperimente. Koristi se za popunjavanje kolone Group uz korišćenje mase Q1. Ovo je korisno ako je ista Q1 masa navedena za višestruke tranzicije za isto jedinjenje, a praćeni su različiti fragmenti. Ako je broj jedinjenja veliki, a neka od njih slučajno dele istu masu Q1, dodeljuju se istoj grupi.
Using Q3 Masses	Samo za dostupne MRM eksperimente. Koristi se za popunjavanje kolone Group uz korišćenje mase Q3. Ovo je korisno ako su praćeni različiti izotopski oblici jedinjenja (različitih Q1 masa), ali je praćena konstantna Q3 masa. Ako je broj jedinjenja veliki, a neka od njih slučajno dele istu masu Q3, dodeljuju se istoj grupi.
Using (Q1 – Q3) Mass Differences	Koristi se za popunjavanje kolone Group uz korišćenje razlike između masa Q1 i Q3 (dostupno je samo za MRM eksperimente). Ovo je korisno ako su praćeni različiti izotopski oblici jedinjenja (različitih Q1 masa), ali je praćen konzistentan Q3 fragment koji sadrži sve izmenjene izotope. Ako ima puno jedinjenja, a neka od njih slučajno dele istu razliku mase, onda se ona dodeljuju istoj grupi.
Add Group to Start of Component Name	Dodaje naziv grupe na početak naziva analita ili internog standarda. Ovo može da bude korisno ukoliko prvobitni nazivi nisu jedinstveni.

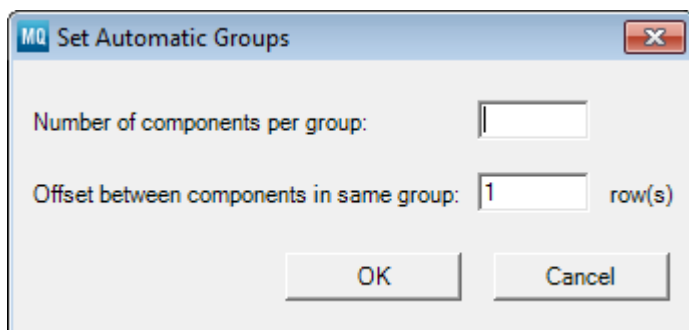
Tabela 13-2 Opcije menija „Groups“ (nastavak)

Opcija menija	Opis
Remove Group from Start of Component Name	Uklanja naziv grupe, ako je prisutan, sa početka naziva analita ili internog standarda.
Append Summed Ions for Groups	Kada je omogućena opcija Sum Multiple Ions, ova komanda dodaje novu komponentu za svaku grupu koja za grupu koristi zbirni hromatogram. Zasebne komponente se dodaju analizima i internim standardima za grupe, ako su oba definisana. Podrazumevano podešavanje naziva za nove analite je naziv grupe, a za interne standarde je naziv grupe kojem se dodaje „.IS“. Ukoliko su potrebne sumarne komponente, a ne originalne komponente jedinične mase, onda se potonje mogu obrisati.

Dijalog „Set Automatic Groups“

Automatski popunjava kolonu Group koristeći nazive prve komponente za svaku grupu, pod pretpostavkom da svaka grupa sadrži isti broj komponentenata.

Slika 13-1 Dijalog „Set Automatic Groups“



Oznaka	Opis
Number of components per group	Ukupan broj komponentenata za svaku grupu.
Offset between components in same group	Odstupanje u redovima između niza komponenti u istoj grupi. Ova vrednost je obično 1, ali može biti veća ako komponente u grupi nisu u susednim redovima.

Podmeni „Internal Standards“

Tabela 13-3 Opcije menija „Internal Standards“

Opcija menija	Opis
Set IS for All Analytes	Podešava polje IS Name za sve redove analita. Ako je definisan jedan interni standard, onda se koristi njegov naziv. U suprotnom, izaberite zahtevani interni standard u dijalogu koji se otvara.
Set IS for Selected Analytes	Ako se za više analita koristi isti interni standard, obezbedite prečicu za podešavanje internog standarda zasebno za svaki analit jedan po jedan. Pogledajte Set IS for Selected Analytes na stranici 87 .
Set Last Component of Group as IS	Koristite ovu komandu ako su različite komponente dodeljene opciji Groups, bilo ručno ili pomoću stavki iz podmenija Set Groups. Polje za potvrdu IS za poslednju komponentu svake grupe je izabrano a sve druge komponente iz te grupe, za koje se pretpostavlja da su analiti, podešene su da koriste tu poslednju komponentu kao interni standard.
Set for All Groups as for Selected Group	Koristi se za kopiranje rasporeda internih standarda za grupu koja odgovara trenutno izabranom redu u svim drugim grupama na simetričan način. Ovo je korisno ako postoji više internih standarda za svaku od grupa. Pogledajte Set for All Groups as for Selected Group na stranici 87 .

Set IS for Selected Analytes

1. Proverite da li je definisan neophodni interni standard (izabrano je i **Name** i **IS** polje za potvrdu).
2. Izaberite redove za analite za koje će se koristiti interni standard.
3. Izaberite stavku menija.

Ako je definisano više internih standarda, otvara se dijalog koji od korisnika zahteva da izabere onaj koji je neophodan.

Set for All Groups as for Selected Group

1. Dodelite grupe.
2. Ručno naznačite koje komponente su interni standardi izborom polja u prvoj koloni za prvu grupu.
3. Ručno naznačite interne standarde za svaki analit za prvu grupu izborom iz kombinovanog okvira u koloni **IS Name**.
4. Izaberite bilo koji pojedinačni red koji odgovara prvoj grupi.
5. Kliknite na **Set for All Groups as for Selected Group**.

Kartica „Integration“

Desnim tasterom miša kliknite na karticu **Integration** da biste pristupili kontekstualnom meniju. Dostupne su sledeće komande.

Tabela 13-4 Opcije kontekstualnog menija kartice „Integration & Regression“

Opcija menija	Opis
Find Component by Name	Slično komandi dostupnoj na kartici Components , osim razlike u tome što se umesto biranja redova u unakrsnoj tabeli Components biraju pojedinačne stavke na listi komponenti.
Highlight Components with Uncertain RT	Koristi se za obeležavanje onih komponenti kod kojih je podrazumevano očekivano vreme zadržavanja (koje se uzima kao vreme zadržavanja vršne vrednosti najvećeg intenziteta za svaki hromatogram) neispravno. Ako ima samo nekoliko komponenti, onda svaku posebno pregledajte i ne koristite ovu komandu. Međutim, ako ima puno komponenti, onda koristite ovu komandu da biste vizuelno proverili samo one za koje postoji više značajnih vršnih vrednosti u hromatogramu. Pogledajte Dijalog „Highlight Components“ na stranici 89 .
Home Graph Axes	Vraća uvećani grafik na početni pregled na kojem su vidljivi svi podaci.
Overlay Other Components for Group	Koristite ovu komandu za preklapanje hromatograma ako su različite komponente dodeljene grupama i ako se očekuje da komponente dodeljene bilo kojoj datoj grupi imaju isto vreme zadržavanja. Na primer, ako predstavljaju različite tranzicije MRM istog stvarnog jedinjenja. Kada se izabere hromatogram za trenutnu komponentu čiji se parametri integracije definišu, on se iscrtava tamnoplavim tragom i prikazuje se njegova oblast integrisane vršne vrednosti. Hromatogrami, ali ne i oblast integrisane vršne vrednosti, za druge komponente u istoj grupi se preklapaju u vidu isprekidane linije.

Tabela 13-4 Opcije kontekstualnog menija kartice „Integration & Regression“ (nastavak)

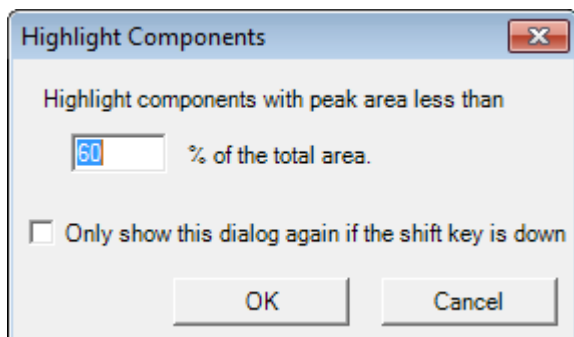
Opcija menija	Opis
Update Retention Times	Koristi se da bi se resetovala očekivana vremena zadržavanja prethodno kreiranog metoda kvantifikacije. Ukoliko se otvori postojeći metod kvantifikacije i odabere opcija Set New Typical Sample onda će prikazani hromatogrami odgovarati novom uzorku, ali će očekivana vremena zadržavanja ostati nepromenjena. Za svaku komponentu se očekivano vreme zadržavanja ažurira tako da odgovara vremenu zadržavanja vršne vrednosti sa najvećim intenzitetom u okviru prozora navedene širine koji je centriran na originalno očekivano vreme zadržavanja. Pogledajte Dijalog „Update Retention Time“ na stranici 90.
Set New Typical Sample	Koristi se za povezivanje reprezentativnog uzorka sa metodom. Ovo potencijalno utiče na odabire dostupne u koloni Q1/Q3 (za eksperimente MRM) ili koloni Start – Stop (za eksperimente profila). Ovo takođe utiče i na hromatograme koji su prikazani na kartici Integration .

Dijalog „Highlight Components“

Nazivi bilo kojih komponenata za koje automatski izabrana vršna vrednost ne čini najmanje navedeni procenat ukupne oblasti vršne vrednosti u hromatogramu prikazani su korišćenjem podebljanog tipa slova. Na primer, kao što prikazuje [sliku 13-2](#), ako podrazumevana izabrana vršna vrednost čini 70% do 100% ukupne površine, onda se ona ne označava. Pregledajte samo te vršne vrednosti tako što ćete ih izabrati na listi komponenata.

Ako je izabrano polje za potvrdu **Only show this dialog again if the shift key is down**, dijalog se ne otvara sledeći put kada se komanda izabere, osim ako korisnik ne pritisne taster **Shift**. Prethodno navedeni parametar procenta ukupne oblasti koristi se automatski.

Slika 13-2 Dijalog „Highlight Components“



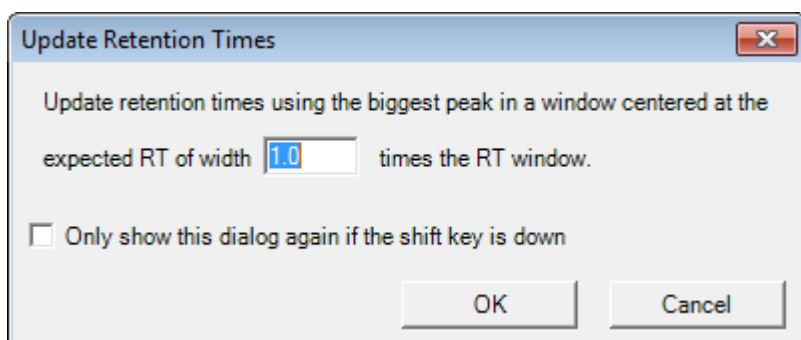
Dijalog „Update Retention Time“

Koristi se za resetovanje očekivanih vremena zadržavanja za prethodno kreirani metod kvantifikacije. Ako se otvori postojeći metod kvantifikacije i odabere opcija Set New Typical Sample, prikazani hromatogrami će odgovarati novom uzorku, ali će očekivana vremena zadržavanja ostati nepromenjena.

Za svaku komponentu se očekivano vreme zadržavanja ažurira tako da odgovara vremenu zadržavanja vršne vrednosti sa najvećim intenzitetom u okviru prozora navedene širine koji je centriran na originalno očekivano vreme zadržavanja.

Ako je izabrano polje za potvrdu **Only show this dialog again if the shift key is down**, dijalog se ne otvara sledeći put kada se komanda izabere, osim ako korisnik ne pritisne taster **Shift**. Automatski se koristi prethodno definisano vreme zadržavanja.

Slika 13-3 Dijalog „Highlight Components“



Kartica „Outlier Settings“

Desnim tasterom miša kliknite na karticu **Outlier Settings** da biste pristupili kontekstualnom meniju. Dostupne su sledeće komande.

Oznaka	Opis
Accuracy for Standards	Menja toleranciju preciznosti za uzorke Standard .
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Menja toleranciju preciznosti za uzorke Standard vrednošću koja je konzistentna sa standardnim operativnim postupcima laboratorije.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Menja toleranciju preciznosti za najmanju koncentraciju uzorka Standard ako standardni operativni postupci laboratorije imaju različitu toleranciju za ovaj uzorak Standard .
Accuracy for QCs	Menja toleranciju preciznosti za uzorke Quality Control .

Oznaka	Opis
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Menja toleranciju preciznosti za uzorke Quality Control vrednošću koja je konzistentna sa standardnim operativnim postupcima laboratorije.
Ion Ratio	Dostupno je samo ako su komponente dodeljene grupama. Izaberite ovu opciju da biste koristili odnos jona oblasti vršne vrednosti ili visine vršne vrednosti. Oblast vršne vrednosti ili visina vršne vrednosti se podešavaju kada se izabere parametar regresije tokom razvoja metoda kvantifikacije.
Calculated Concentration	Kada se koriste uzorci Standard poznate koncentracije, ovo je koncentracija izračunata unazad sa kalibracione krive. Jednačine regresije opisuju kako se obavlja regresija za regresije različitih tipova i težine.
Component	Analiti ili interni standardi za sve uzorke.
IS	Izabrani interni standard. Dostupno je samo ako je polje za potvrdu Ion Ratio izabrano.
Group	Mogu se grupisati komponente koje imaju isto vreme zadržavanja (to jest, različite tranzicije za isto jedinjenje). Dostupno je samo ako je polje za potvrdu Ion Ratio izabrano.
Ion Ratio Tolerance (%)	Koristite podrazumevano podešavanje ili izmenite ovo podešavanje u skladu sa standardnim operativnim postupcima laboratorije. Dostupno je samo ako je polje za potvrdu Ion Ratio izabrano.
Lower Limit of Calculated Concentration	Unesite donju granicu prihvatljivog opsega koncentracije. Svi uzorci kod kojih je polje Calculated Concentration niže od ove vrednosti označavaju se kao odstupanje od koncentracije.
Upper Limit of Calculated Concentration	Unesite gornju granicu prihvatljivog opsega koncentracije. Svi uzorci kod kojih je polje Calculated Concentration više od ove vrednosti označavaju se kao odstupanje od koncentracije.

Tabela 13-5 Opcije kontekstualnog menija „Outlier Settings“

Oznaka	Opis
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Primenjuje donju granicu izračunate koncentracije na sve analite, ako svi analiti imaju iste kriterijume.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Primenjuje gornju granicu izračunate koncentracije na sve analite, ako svi analiti imaju iste kriterijume.

Ciljevi:

- Saznajte kako da obradite podatke pomoću algoritma SignalFinder™.
- Saznajte kako da obradite podatke pomoću algoritma integracije MQ4.
- Saznajte kako da koristite parametre algoritama integracije MQ4 i SignalFinder™.

Metodi kvantifikacije uključuju niz uputstava o tome kako da kvantifikujete vršne vrednosti odabrane za integraciju. U ovom vodiču se metod kvantifikacije kreira u isto vreme kada i tabela „Results Table“.

Takođe su obuhvaćeni dodatni zadaci koji se mogu koristiti za manipulaciju podataka u tabeli **Results Table**, kao i informacije o dostupnim ikonama softvera.

Napomena: Korisnici verzije sa opcijama „Audit Trail“ i „Security“ su ograničeni na korišćenje strukture foldera „Analyst Data“. Korisnici mogu da obrađuju samo datoteke sa podacima koje se nalaze u strukturi datoteka softvera Analyst® MD. Ako se struktura datoteka i foldera ne održava, korisnik onda možda neće moći da prikaže hromatograme.

O kalibracionim krivama

Kalibraciona kriva (poznata i kao kriva standardne koncentracije) je metod za određivanje koncentracije supstance u **Unknown** uzorku upoređivanjem **Unknown** uzorka sa skupom **Standard** uzoraka poznate koncentracije. Kalibraciona kriva je grafički prikaz reagovanja instrumenta (analitički signal) na promene u koncentraciji analita (supstance koja se meri). Korisnik priprema seriju **Standard** uzoraka koji obuhvataju veliki opseg koncentracija blizu očekivane koncentracije analita u **Unknown** uzorku.

Preduslovi

Neophodno je da u softveru Analyst® MD izaberete projekat **Example**.

Mix_batch_1. Wiff datoteka se nalazi u folderu Analyst Data\Projects\Example\Data\Triple Quad.

Izmena kolona prikazanih u tabeli „Results Table“

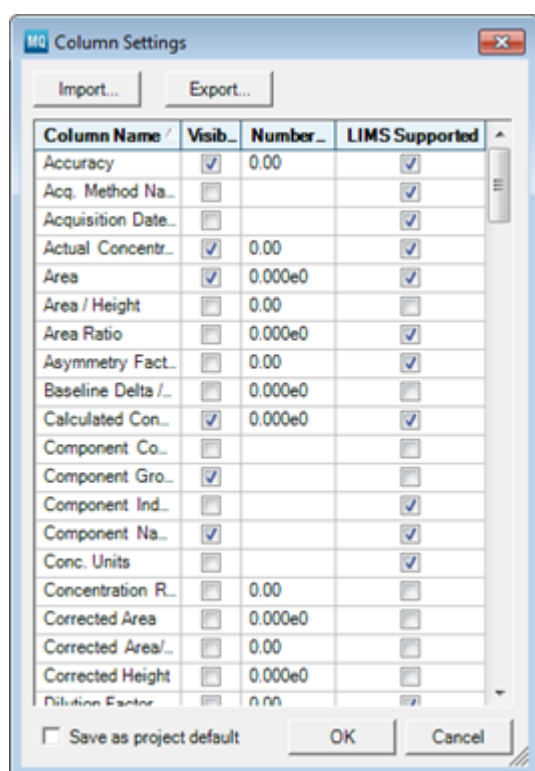
Koristite ovaj postupak za prikaz ili skrivanje kolona u tabeli **Results Table** ili za promenu preciznosti formata broja. U slučaju numeričkih polja, koristite format 0.00 za nenaučnu notaciju, a format 0.00e0 za naučnu notaciju. Pomerite decimalnu tačku da biste naveli tačnost brojeva

koji se prikazuju. Samo tačka (.) može da se koristi kao separator decimala. Grupisanje cifara nije podržano.

Napomena: Neke kritične kolone u informacijama o uzorku, kao što su **Sample Name**, **Sample ID** itd. ne treba da budu skrivene kada korisnici prilagođavaju postavke kolona u tabeli **Results Table**.

1. Desnim tasterom miša kliknite na tabelu **Results Table**, a zatim kliknite na opciju **Column Settings**.

Slika 14-1 Dijalog „Column Settings“



2. Po potrebi izaberite ili uklonite oznaku iz polja za potvrdu u koloni **Visible**.
3. U koloni **Number Format** promenite format u celobrojnu ili naučnu notaciju. Takođe, može se promeniti i broj decimalnih mesta koje treba prikazati.

Save! Da bi se podešavanja kolone primenila na sve tabele **Results Tables** u projektu, izaberite polje za potvrdu **Save as project default**.

4. Kliknite na **OK**.

Obrada podataka pomoću algoritma integracije SignalFinder™ Integration Algorithm

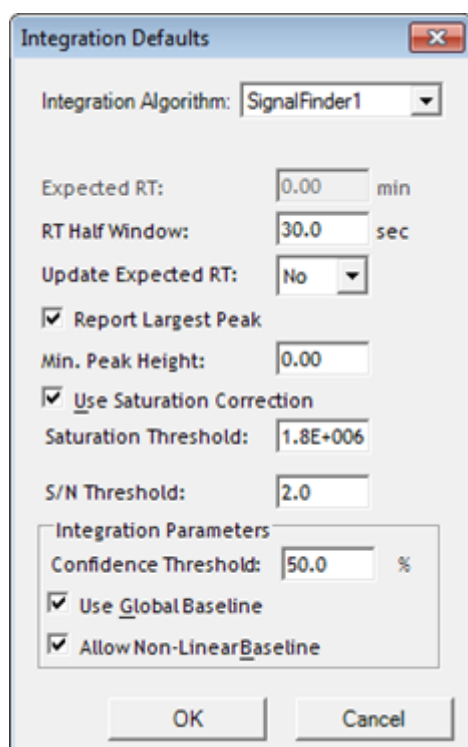
Nasuprot algoritmu integracije MQ4 ili algoritmima dostupnim u softveru Analyst® MD, SignalFinder™ pravi model vršne vrednosti koristeći izabrani uzorak prilikom kreiranja metoda kvantifikacije. Ovaj model opisuje oblik izabrane vršne vrednosti koju je koristio algoritam. Za vreme integracije, algoritam integracije SignalFinder primenjuje ovaj model na druge uzorke, uz razvlačenje ili nakrivljavanje uzorka. Ovo ide u prilog činjenici da je oblik vršne vrednosti sličan, ali ne identičan, za dati analit ili interni standard za više uzoraka.

Podešavanje parametara integracije vršnih vrednosti

Koristite sledeću proceduru da biste proverili ili podesili algoritam integracije pre obrade podataka. Pogledajte [O algoritmu „SignalFinder Integration Algorithm“ na stranici 111](#)

1. Neophodno je da u softveru Analyst® MD, na traci **Navigation**, pod stavkom **Companion Software**, kliknete dvaput na **MultiQuant 3.0.3**.
2. Kliknite na **Edit > Project Integration Defaults**.
3. U dijalogu **Integration Defaults** izaberite opciju **SignalFinder1** iz liste **Integration Algorithm**.
4. Izaberite polje za potvrdu **Use Saturation Correction**, a zatim postavite opciju **Saturation Threshold** na **1.8E+006**.

Slika 14-2 Dijalog „Integration Defaults“



Napomena: Vršne vrednosti iznad vrednosti **Saturation Threshold** se smatraju zasićenim. Ova vrednost zavisi od detektora.

5. Kliknite na **OK**.

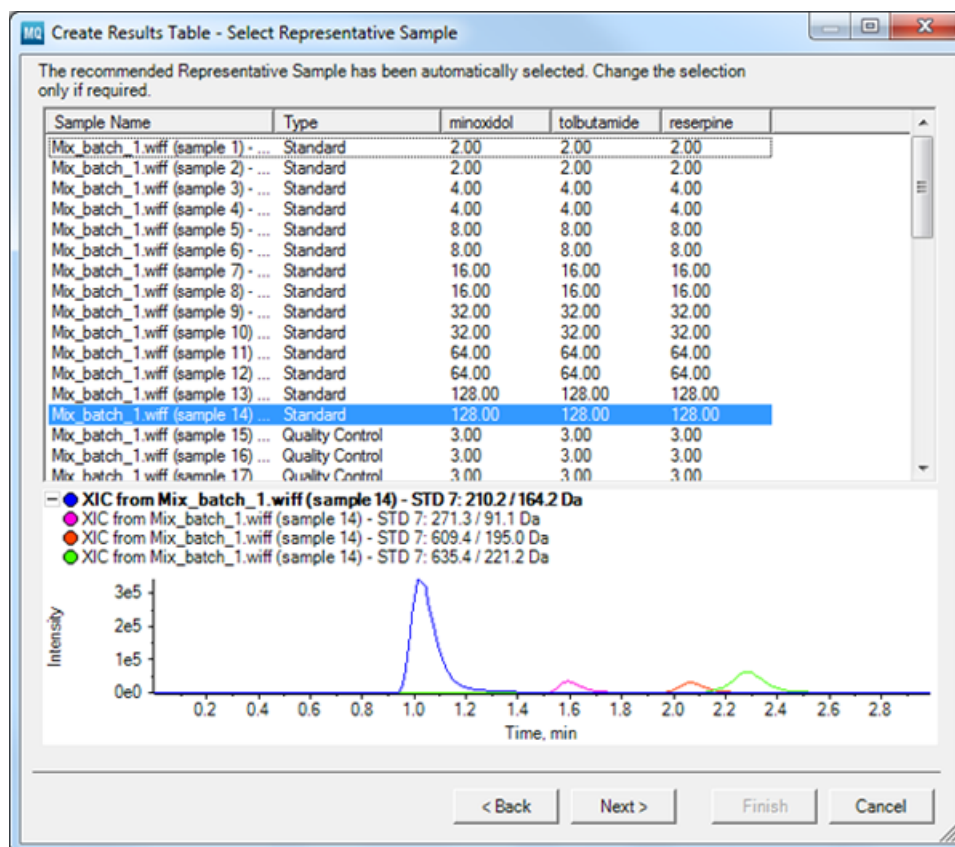
Kreiranje tabele „Results Table“

1. Kliknite na opciju **File > New Results Table**.
2. Na stranici **Create Results Table – Select Samples** proširite folder **Example Data**, a zatim prevucite datoteku **Mix_batch_1.wiff** u okno **Selected**.
3. Kliknite na opciju **Next**.
4. Kliknite na opciju **Create New Method (SignalFinder1)**.
5. Kliknite na opciju **New**.
6. Unesite naziv metoda u dijalog **Save Quantitation Method As**, a zatim kliknite na opciju **Save**.
7. Kliknite na opciju **Next**.

Na stranici **Create Results Table – Select Representative Sample** izabran je reprezentativni uzorak. Softver preporučuje reprezentativni uzorak na osnovu izbora hromatograma koji pruža najbolju mogućnost za biranje parametara integracije koji odgovaraju čitavom paketu. Preporučuje se izbor nezasićenog, visokokoncentrovanog standarda ili uzorka **QC** (TIC ispod 1E+006 cps).

Savet! Tokom pregleda vršne vrednosti može se izabrati drugi uzorak na osnovu kojeg će se izgraditi model vršne vrednosti tokom pregleda vršne vrednosti.

Slika 14-3 Stranica „Create Results Table – Select Representative Sample“



8. Na stranici **Create Results Table – Define Components** page potvrdite analite i interne standarde.
9. Kliknite na opciju **Next**.

Slika 14-4 Stranica „Create Results Table – Define Components“

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

Experiment: MRM (4 transitions)

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

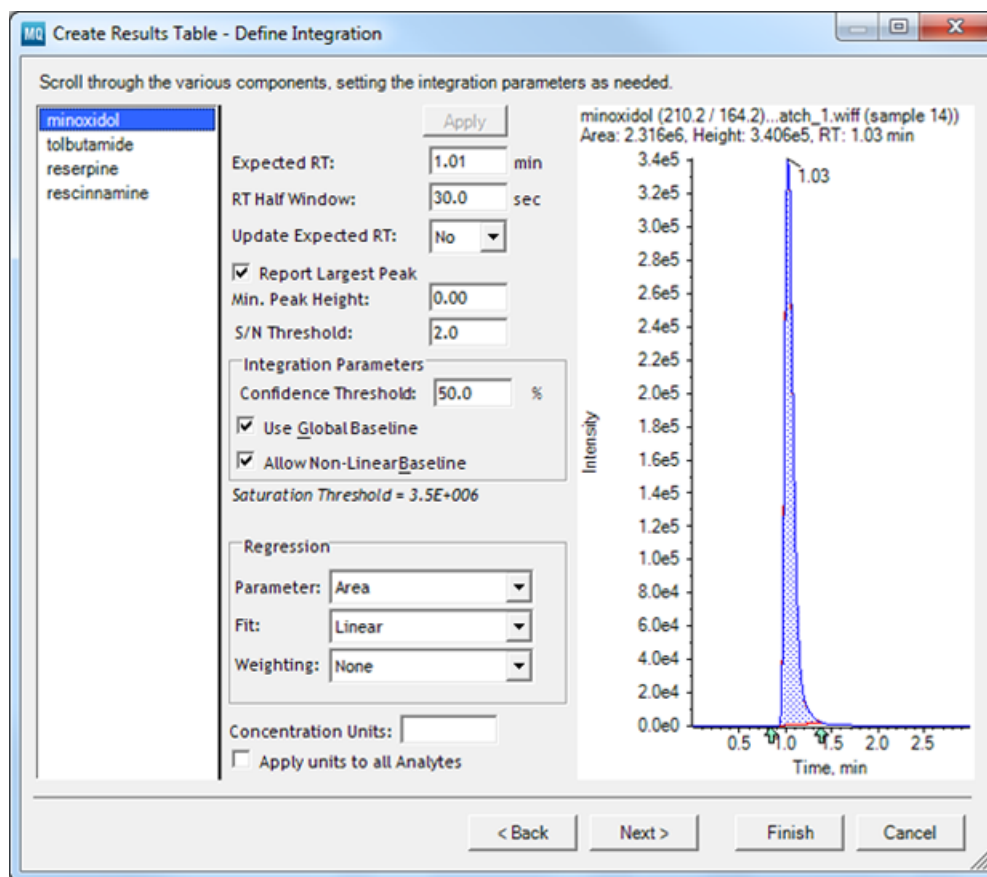
< Back Next > Finish Cancel

Napomena: Kada se kreira metod akvizicije, ako je naziv kolone uključen u kolonu **ID** na tabeli sa opsezima masa, onda se taj naziv automatski popunjava na stranici **Define Components**. Ako naziv komponente nije uključen, onda ručno ažurirajte tabelu unosom naziva komponente.

Na stranici **Create Results Table – Define Integration**, analiti i interni standardi se prikazuju sa leve strane. Trenutni parametri integracije se primenjuju na reprezentativni uzorak i prikazuje se hromatogram.

Komponente reprezentativnog uzorka koji je prethodno izabran prikazuju se u oknu **Integration**. Vršne vrednosti u ovom reprezentativnom uzorku se pronalaze i integrišu korišćenjem parametara koji su podešeni u dijalogu **Integration Defaults**.

Slika 14-5 Stranica „Create Results Table – Define Integration“



Ako je potrebno, podesite parametre za pronalaženje vršne vrednosti i položaje zelenih strelica na x-osi hromatograma. Ovo omogućava korisniku da preciznije podesi zahtevani početni i završni položaj integracije vršne vrednosti. Efektivno, ovo je vizuelni način podešavanja dva parametra za pronalaženje vršne vrednosti koji se čuvaju sa metodom kvantifikacije i primenjuju na sve vršne vrednosti koje treba integrisati. Softver ograničava granice ovih parametara u okviru onoga što se smatra razumnim granicama za vršne vrednosti.

Ako ima više vršnih vrednosti u hromatogramu, a ispravna vršna vrednost nije automatski izabrana, onda prevucite mišem preko vršne vrednosti da biste podesili očekivano vreme zadržavanja. Prevucite mišem od stvarnog početka do stvarnog kraja vršne vrednosti i ne birajte previše široku ili previše usku oblast. Razlog je taj što algoritam podrazumeva da postoji samo jedna vršna vrednost u okviru odabira. Na primer, ako su podešeni podaci sa šumom i algoritam pronađe dve objedinjene vršne vrednosti tamo gde postoji samo jedna vršna vrednost, onda izaberite oblast koja sadrži obe vršne vrednosti da bi algoritam podesio svoje interne parametre tako da bude pronađena samo jedna vršna vrednost. Umesto toga, ako je algoritam pronašao samo jednu vršnu vrednost tamo gde se pretpostavlja da postoje dve ili više vršnih vrednosti, onda izaberite oblast koja sadrži samo potrebnu vršnu vrednost.

10. U grupi **Integration Parameters** izaberite polje za potvrdu **Global Baseline** da bi se ceo hromatogram koristio kao osnovna linija.

Ako ova opcija nije izabrana, onda softver uzima u obzir samo usku oblast oko potrebne vršne vrednosti.

11. Izaberite polje za potvrdu **Allow Non-Linear Baseline** da biste birali između linearne i nelinearne osnovne linije. Nelinearna osnovna linija procenjuje osnovnu liniju ispod svake vršne vrednosti. Linearna osnovna linija se poklapa sa linijom između tačaka na početku i na kraju te specifične grupe vršnih vrednosti.
12. Pregledajte integraciju vršnih vrednosti za svaku komponentu klikom na naziv komponente u levom oknu. Podesite parametre integracije tako da se reprezentativna vršna vrednost pravilno integriše.
13. Za komponente **Minoxidol**, **Tolbutamide** i **Reserpine** koristite grupu parametara **Regression** da biste podesili sledeće, a zatim kliknite na opciju **Apply**:
- **Parameter**: Area
 - **Fit**: Linear
 - **Weighting**: None
14. Podesite opciju **Concentration Units** na **ng/mL**, a zatim izaberite polje za potvrdu **Apply units to all Analytes**.
15. Kliknite na opciju **Apply**.
16. Kliknite na opciju **Finish**.

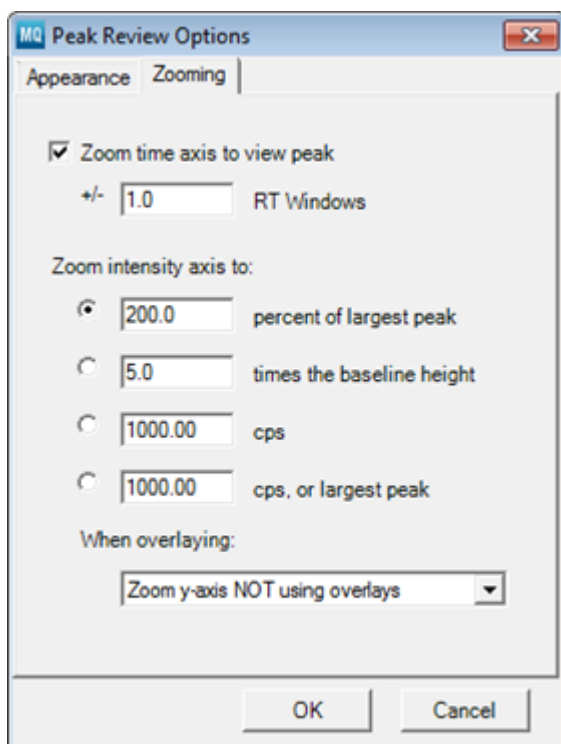
Datoteke uzoraka se automatski integrišu i generiše se tabela **Results Table**.

Pogledajte [Pregled vršnih vrednosti na stranici 99](#) za upravljanje podacima u tabeli **Results Table**. Pogledajte [Izveštaji na stranici 135](#) za informacije o kreiranju izveštaja.

Pregled vršnih vrednosti

1. Kliknite na ikonu **Peak Review**.
2. Desnim tasterom miša kliknite na tabelu, a zatim kliknite na opciju **Column Settings**.
3. Postavite kolonu **SF Saturated** tako da bude vidljiva.
4. Desnim tasterom miša kliknite na okno **Peak Review**, a zatim kliknite na opciju **Options**.
5. Na kartici **Zooming** izmenite opciju **Zoom time axis to view peak** na **1**.
6. Podesite opciju **Zoom intensity axis** na **200 percent of largest peak**.

Slika 14-6 Dijalog „Peak Review Options“



7. Koristite crvene strelice da biste se pomerali kroz vršne vrednosti.

Ako je detektor zasićen, onda vršna vrednost izgleda ravnije nego što je uobičajeno. Na primer, ova vršna vrednost bi imala crveni profil oko vršne vrednosti i opcija **Yes** se pojavljuje u koloni **SF Saturated**, jer je intenzitet vršne vrednosti iznad ograničenja zasićenosti od 1.8^6 cps.

Napomena: Može da se dogodi da reprezentativni uzorak ne bude pogodan za sve komponente. Novi reprezentativni uzorak sa može izabrati tokom pregleda vršne vrednosti i novog generisanog modela.

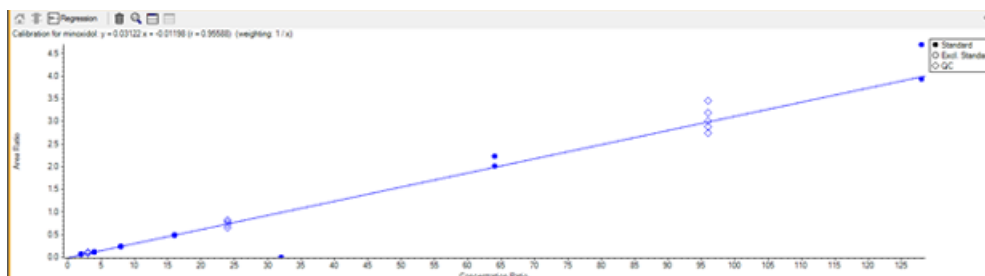
8. Da biste kreirali nov model, izaberite novu vršnu vrednost, a zatim kliknite na ikonu **Update Peak Model**. Izaberite vršnu vrednost koja je po obliku slična drugim vršnim vrednostima i koja nije zasićena.
9. Kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na opciju **Update Quantitation Method for Component** da biste primenili izmene na sve uzorke u komponenti.

Izmena kalibracione krive

1. Kliknite na ikonu **Show Calibration Curve** da biste videli kalibracionu krivu.

2. Da biste dodali legendu, kliknite desnim tasterom miša u okno **Calibration**, a zatim kliknite na **Show Legend**.

Slika 14-7 Kalibraciona kriva



3. Da biste dodali kontrole kvaliteta (QC) na krivu, kliknite ponovo desnim tasterom miša u okno **Calibration**, a zatim kliknite na **Show QCs**.

Savet! Da biste izuzeli tačku iz krive, kliknite desnim tasterom miša na tačku na krivoj, a zatim kliknite na **Exclude**.

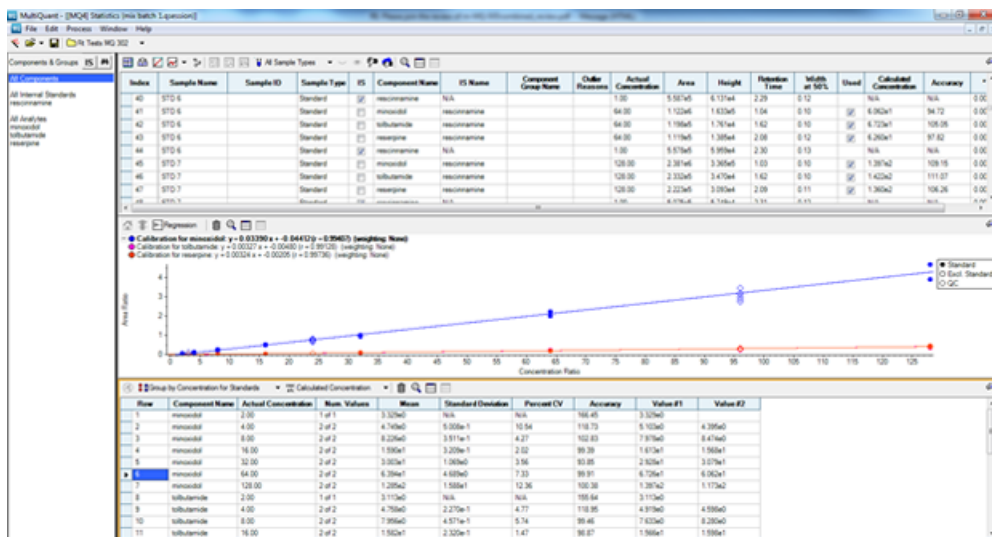
4. Da biste potvrdili ili uredili parametre regresije za pojedinačni analit, odaberite analit sa liste **Components and Group**, a zatim kliknite na dugme **Regression** na traci sa alatima.

Pregled statističkih podataka za uzorke

Korisnici mogu da pregledaju statističke podatke za jednu tabelu „Results Table“. Pregled integracije vršne vrednosti, kalibracione krive i statističkih podataka za uzorke predstavlja repetitivan postupak.

1. Dok je tabela „Results Table“ otvorena, kliknite na ikonu **Show Statistics Table**.
2. Na listi **Sample Grouping** kliknite na stavku da biste zadali način grupisanja uzorka (za dati analit) radi izračunavanja statistike.

Slika 14-8 Okno „Statistics”



3. Na listi **Metric** kliknite na stavku da biste zadali stvarnu metriku koja se koristi za izračunavanje statistike.
4. Pregledajte kolone **Value**. Istaknute tačke pokazuju isključene tačke podataka.

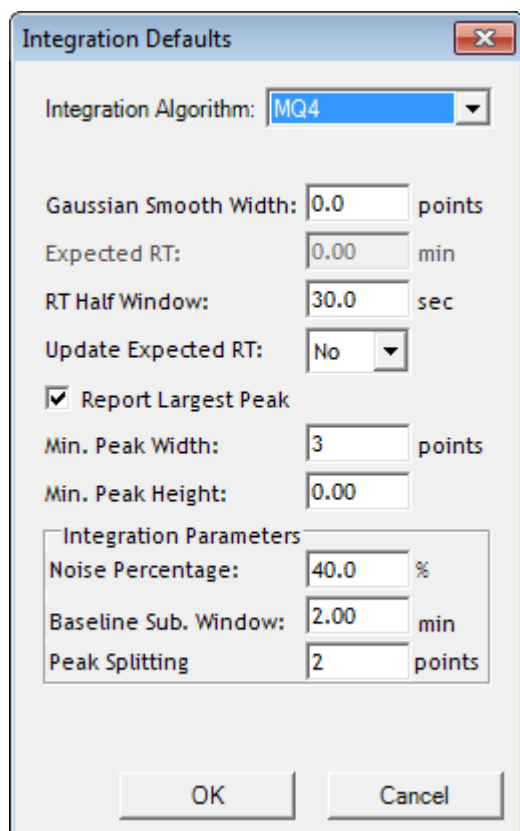
Obrada podataka korišćenjem algoritma integracije MQ4

Podešavanje parametara integracije vršnih vrednosti

Koristite sledeću proceduru da biste proverili ili podesili algoritam integracije pre obrade podataka. Pogledajte [Parametri algoritma integracije MQ4 na stranici 118](#).

1. Neophodno je da u softveru Analyst[®] MD, na traci **Navigation**, pod stavkom **Companion Software** kliknete dvaput na **MultiQuant 3.0.3**.
2. Kliknite na opciju **Edit > Project Integration Defaults**.
3. U dijalogu **Integration Defaults**, na listi **Integration Algorithm**, izaberite opciju **MQ4**.

Slika 14-9 Dijalog „Integration Defaults“



4. Ako je potrebno, izmenite parametre za projekat, a zatim kliknite na opciju **OK**.

Podešavanja algoritma integracije MQ4 i parametara se koriste za sve nove metode kreirane u ovom folderu projekta **Example**. Ova podrazumevana podešavanja se zasnivaju na projektu. Da biste izmenili podrazumevana podešavanja za druge projekte, ponovite ovu proceduru za izabrani projekat.

Kreiranje tabele „Results Table“

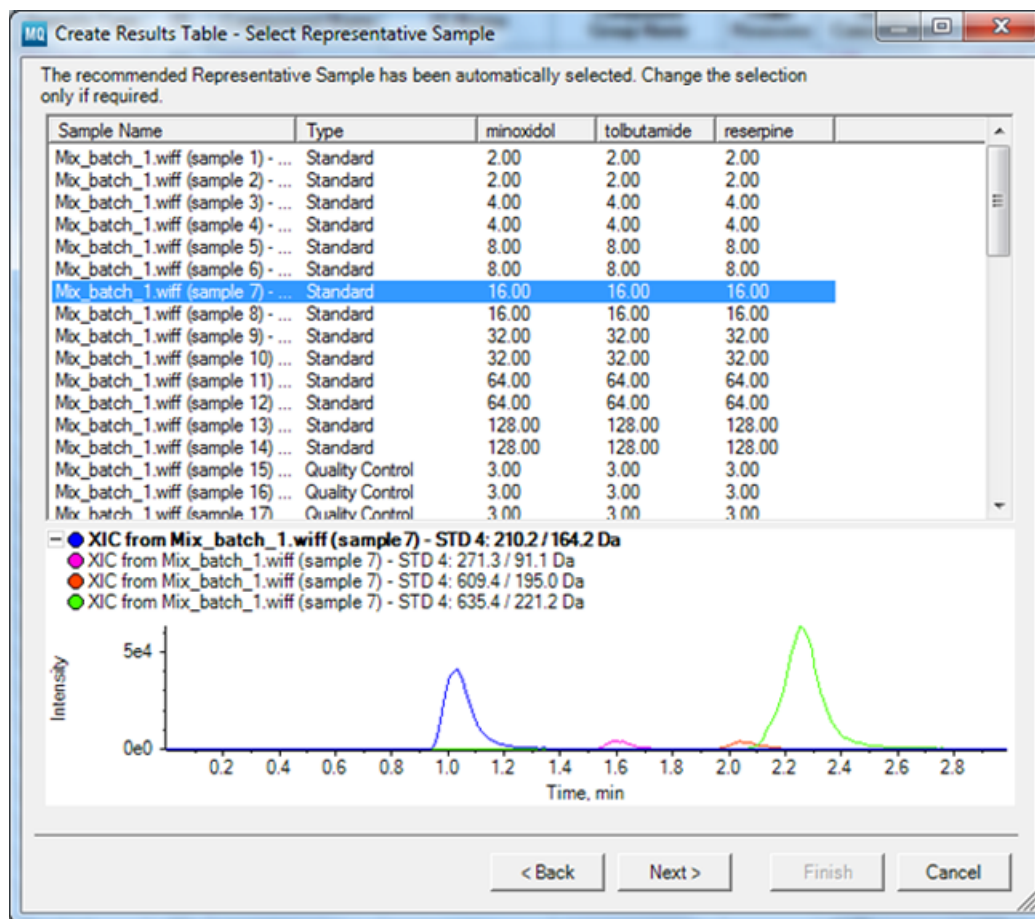
1. Kliknite na opciju **File > New Results Table**.
2. Na stranici **Create Results Table – Select Samples** proširite folder **Example Data**, a zatim prevucite datoteku **Mix_batch_1.wiff** u okno **Selected**.
3. Kliknite na opciju **Next**.
4. Kliknite na opciju **Create New Method (MQ4)**.
5. Kliknite na opciju **New**.
6. Unesite naziv metoda u dijalog **Save Quantitation Method As**, a zatim kliknite na opciju **Save**.

U ovom vodiču se kreira metod. Kreiranje metoda daje vam mogućnost da pregledate i primenite različite parametre za integraciju podataka.

Ako metod već postoji, izaberite opciju **Choose Existing Method**, a zatim izaberite polje za potvrdu **Edit Method** da biste pregledali i primenili različite parametre na metod. Ako polje za potvrdu **Edit Method** nije izabrano, čarobnjak će kreirati tabelu **Results Table** korišćenjem postojećeg metoda.

7. Na stranici **Create Results Table - Select Representative Sample** preporučen je i izabran reprezentativni uzorak.

Slika 14-10 Stranica „Create Results Table – Select Representative Sample“



8. Kliknite na **Next**.

Softver preporučuje reprezentativni uzorak na osnovu izbora hromatograma koji pruža najbolju mogućnost za biranje parametara integracije koji odgovaraju čitavom paketu. Preporučuje se da se izabere drugi najniži standard koncentracije ili QC uzorak za algoritam integracije MQ4 ako su informacije o koncentraciji analita ugrađene u .wiff datoteku. Na primer, ako je opseg koncentracija od jedan do osam, druga najniža koncentracija je dva. Ako podrazumevani reprezentativni uzorak nema dovoljan intenzitet, izaberite drugi reprezentativni uzorak klikom na dugme **Back** u čarobnjaku i naknadnim izborom drugog

uzorka. Drugi uzorak sa može izabrati tokom pregleda vršne vrednosti. Pogledajte [Pregled vršnih vrednosti na stranici 107](#).

9. Na stranici **Create Results Table – Define Components** page potvrdite analite i interne standarde.

Slika 14-11 Stranica „Create Results Table – Define Components“

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

Experiment: MRM (4 transitions)

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

< Back Next > Finish Cancel

10. Kliknite na opciju **Next**.

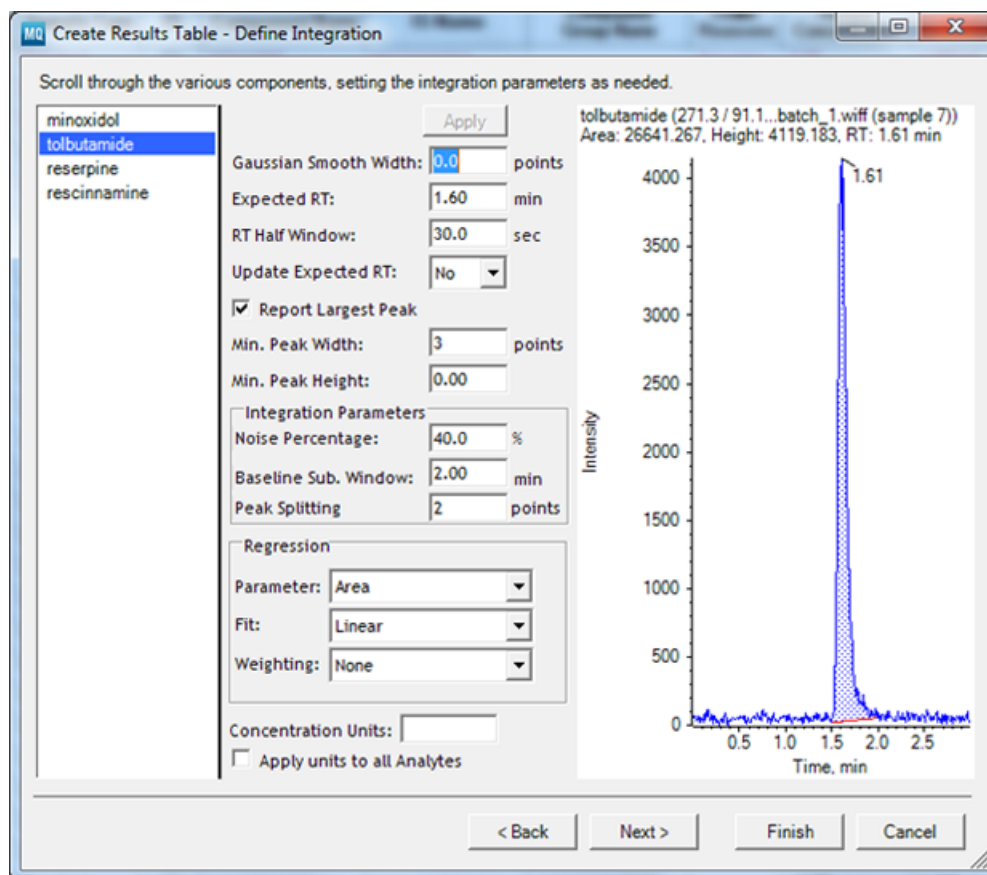
Napomena: Kada se kreira metod akvizicije, ako je naziv kolone uključen u kolonu **ID** na tabeli sa opsezima masa, onda se taj naziv automatski popunjava na stranici **Define Components**. Ako naziv komponente nije uključen, onda ručno ažurirajte tabelu unosom naziva komponente. Ako se ekstenzija .IS doda nazivu komponente, softver identifikuje komponentu kao interni standard i dodeljuje .IS komponentu kao interni standard njenom odgovarajućem analitu.

Na stranici **Create Results Table - Define Integration** analiti i interni standardi se prikazuju sa leve strane. Trenutni parametri integracije se primenjuju na reprezentativni uzorak i prikazuje se hromatogram.

Komponente reprezentativnog uzorka koji je prethodno izabran prikazuju se u oknu **Integration**. Vršne vrednosti u ovom reprezentativnom uzorku se pronalaze i integrišu korišćenjem parametara koji su podešeni u dijalogu **Integration Defaults**.

11. Pregledajte integraciju vršnih vrednosti za svaku komponentu klikom na naziv komponente u levom oknu. Podesite parametre integracije tako da se reprezentativna vršna vrednost pravilno integriše. Pogledajte [Podešavanje parametara integracije vršnih vrednosti na stranici 102](#).

Slika 14-12 Stranica „Create Results Table – Define Integration“



12. Za komponente **Minoxidol**, **Tolbutamide** i **Reserpine** koristite grupu parametara **Regression** da biste podesili sledeće, a zatim kliknite na opciju **Apply**:

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

13. Podesite opciju **Concentration Units** na **ng/mL**, a zatim izaberite polje za potvrdu **Apply units to all Analytes**.

14. Kliknite na opciju **Apply**.

15. Kliknite na opciju **Finish**.

Datoteke uzoraka se automatski integrišu i generiše se tabela „Results Table“.

Slika 14-13 Results Table

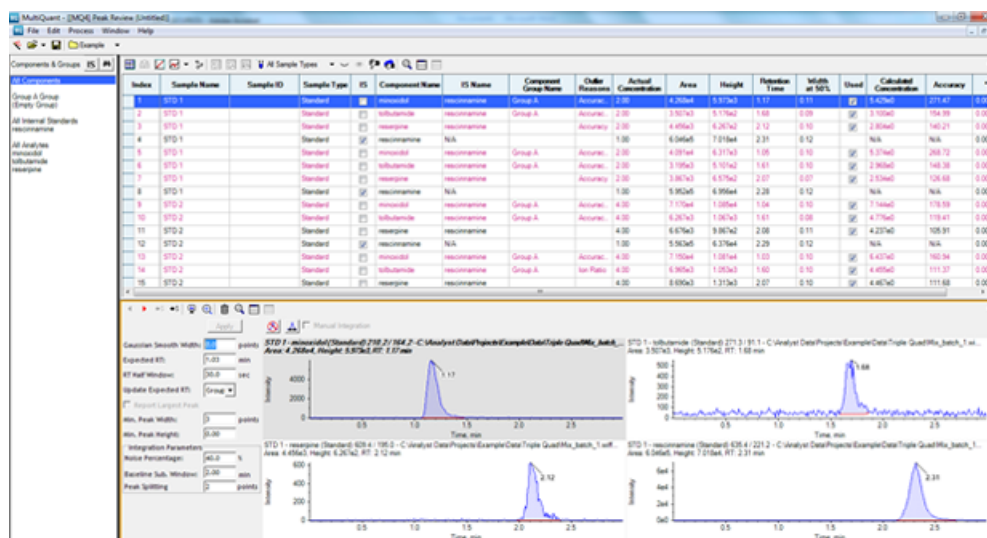
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Order	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.205e4	5.517e3	1.17	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	3.223e4	167.16
2	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	influenza	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.507e3	5.175e2	1.68	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.159e4	154.39
3	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.495e4	6.267e2	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.854e4	140.21
4	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A	group1	Accuracy	1.00	6.945e4	7.018e4	2.31	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	4.037e4	6.317e2	1.06	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.159e4	154.39
6	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	influenza	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.195e4	5.107e2	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.965e4	148.38
7	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	2.00	3.867e4	6.576e2	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.854e4	140.21
8	STD-1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A	group1	Accuracy	1.00	5.902e4	6.956e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	7.175e4	1.085e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.945e4	123.84
10	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	influenza	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.267e4	1.367e3	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.775e4	119.41
11	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	4.00	6.675e4	9.867e2	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.227e4	105.91
12	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A	group1	Accuracy	1.00	5.902e4	6.956e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	7.175e4	1.085e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.945e4	123.84
14	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	influenza	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.267e4	1.367e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.475e4	111.68
15	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Ion Ratio	4.00	6.675e4	1.315e3	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.475e4	111.68
16	STD-2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A	group1	Accuracy	1.00	4.037e4	7.018e4	2.31	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.505e4	2.267e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.225e4	154.39
18	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	influenza	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.307e4	2.267e4	1.60	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	7.625e4	97.62
19	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.475e4	1.675e4	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.015e4	87.67
20	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A	group1	Accuracy	1.00	6.374e4	7.325e4	2.28	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.475e4	2.267e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.225e4	154.39
22	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	influenza	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.205e4	1.935e4	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.145e4	101.79
23	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	8.00	1.307e4	1.865e4	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.915e4	89.42
24	STD-3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A	group1	Accuracy	1.00	5.705e4	6.956e4	2.28	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.807e4	4.095e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.585e4	89.95
26	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	influenza	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.645e4	4.176e4	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.585e4	89.95
27	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.705e4	3.547e4	2.06	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.525e4	86.28
28	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A	group1	Accuracy	1.00	5.705e4	6.956e4	2.28	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.807e4	4.095e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.585e4	87.11
30	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	influenza	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.645e4	4.296e4	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.585e4	89.13
31	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group1	Accuracy	16.00	2.885e4	4.125e4	2.09	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.545e4	86.78
32	STD-4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A	group1	Accuracy	1.00	5.902e4	6.956e4	2.30	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

Pogledajte [Pregled vršnih vrednosti na stranici 99](#) za upravljanje podacima u tabeli „Results Table“. Pogledajte [Izveštaji na stranici 135](#) za informacije o kreiranju izveštaja.

Pregled vršnih vrednosti

1. Kliknite na ikonu **Peak Review**.

Slika 14-14 Okno „Peak Review“



2. Desnim tasterom miša kliknite na tabelu, a zatim kliknite na opciju **Column Settings**.

3. Desnim tasterom miša kliknite na okno **Peak Review**, a zatim kliknite na opciju **Options**.
4. Na kartici **Zooming** promenite vrednost **Zoom time axis to view peak** u **3 RT Windows**.
5. Ako hromatogram sadrži više vršnih vrednosti i ako je integrisana neispravna vršna vrednost, prevucite mišem preko ispravne vršne vrednosti da biste podesili novu vrednost za **Expected RT**. Ako je potrebno, podesite parametre za pronalaženje vršne vrednosti i integraciju. Pogledajte [Algoritmi integracije na stranici 110](#).
6. Da biste primenili nove parametre na sve druge uzorke, za istu komponentu, desnim tasterom miša kliknite na hromatogram, a zatim kliknite na opciju **Update Quantitation Method for Component**.
7. Ugrađeni metod kvantifikacije se može izmeniti tokom prikazivanja tabele **Results Table** klikom na opciju **Edit > Modify Results Table Method**. Korisnik može da promeni opcije regresije parametra integracije i informacija o komponenti za svaku komponentu.

Ako se opcije regresije parametra integracije i informacija o komponenti za svaku komponentu promene, onda se menja samo metod kvantifikacije koji je ugrađen u tabelu **Results Table**. Stvarna datoteka metoda kvantifikacije koja se koristi za kreiranje tabele **Results Table** se ne menja. Da biste koristili ovaj ugrađeni metod kvantifikacije za obradu drugih datoteka sa podacima, izvezite ovaj ugrađeni metod u datoteku metoda koristeći funkciju **Export**.

Napomena: Obrišite integraciju klikom na opciju **Set Peak to Not Found** da biste prikazali neobrađene podatke pre ručne integracije vršne vrednosti.

8. Da biste koristili režim ručne integracije, kliknite na ikonu **Enable Manual Integration Mode** u oknu **Peak Review**. Prevucite kursor sa baze jedne strane željene vršne vrednosti na drugu stranu. Vršna vrednost je sada ručno integrisana i prethodno korišćeni integracioni parametri više nisu dostupni.

Savet! Ako je vršna vrednost upravo izmenjena, vratite vršnu vrednost na originalni metod klikom desnim tasterom miša, a zatim klikom mišem na **Revert Peak to Original Method**.

Napomena: Polje **Calculated Concentration** u tabeli **Results Table** oslikava sve promene od postavljanja krive do tačaka standarda.

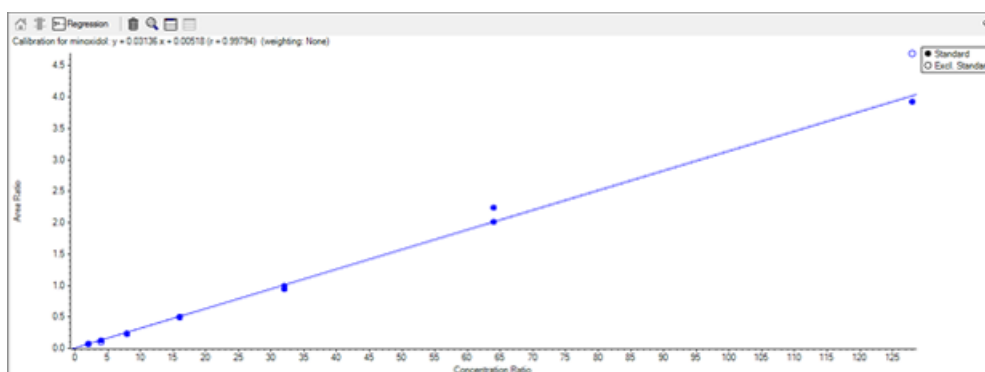
Izmena kalibracione krive

1. Kliknite na ikonu **Show Calibration Curve** da biste videli kalibracionu krivu.
2. Da biste dodali legendu, kliknite desnim tasterom miša u okno **Calibration**, a zatim kliknite na **Show Legend**.
3. Da biste dodali kontrole kvaliteta (QC) na krivu, kliknite ponovo desnim tasterom miša u okno **Calibration**, a zatim kliknite na **Show QCs**.

Savet! Da biste izuzeli tačku iz krive, kliknite desnim tasterom miša na tačku na krivoj, a zatim kliknite na **Exclude**.

4. Da biste potvrdili ili uredili parametre regresije za pojedinačni analit, odaberite analit u oknu **Components and Group**, a zatim kliknite na dugme **Regression** na traci sa alatima.
5. Da bi kalibraciona kriva bolje odgovarala, isključite drugi STD 2 uzorak (koncentracija 4,00 ng/ml) i prvi STD 7 uzorak (koncentracija 128,00 ng/ml). Da biste to uradili, koristite kolonu **Actual Concentration** i kolonu **Used** da biste isključili uzorke. Uklonite znak za potvrdu u koloni „Used“ kako biste uklonili tačku iz krive. Kalibraciona kriva bi sada trebala da izgleda kao ona koju prikazuje [sliku 14-15](#).

Slika 14-15 Kalibraciona kriva sa izuzetim uzorcima



Pregled statističkih podataka za uzorke

Korisnici mogu da pregledaju statističke podatke za jednu tabelu „Results Table“. Pregled integracije vršne vrednosti, kalibracione krive i statističkih podataka za uzorke predstavlja repetitivan postupak.

1. Dok je tabela „Results Table“ otvorena, kliknite na ikonu **Show Statistics Table**.

Slika 14-16 Tabela „Statistics“

MultiQuant - [M04] Statistics (Untitled) - [Sample Name] - [Sample ID]

File Edit Process Window Help

Components & Groups

IS #1

IS Sample Types

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

IS

- Na listi **Sample Grouping** kliknite na stavku da biste zadali način grupisanja uzorka (za dati analit) radi izračunavanja statistike.
- Kliknite na kolonu **Value #1**.

Napomena: Opcija **Group by Concentration for Standards and QCs** se u stvari bazira na vrednosti **Displayed Actual Concentration**, a ne na vrednosti **Actual Concentration** koja je sačuvana u tabeli „Results Table“. Ako je koncentracija Std 1 jednaka 0,001, koncentracija Std 2 je 0,005 i format prikaza je 0, tada su vrednosti Std 1 i Std 2 grupisane zajedno, jer se obe posmatraju kao 0. Da biste ih grupisali odvojeno, u dijalogu **Column Settings** podesite preciznost za **Analyte Concentration** na vrednost 0,000. Ako je Std 1 jednaka 0,500 i Std 2 jednaka 0,499, da biste ih grupisali zajedno podesite preciznost na 0,00. Pogledajte [Izmena kolona prikazanih u tabeli „Results Table“ na stranici 92](#).

- Kliknite na stavku na listi **Metric** da biste zadali stvarnu metriku koja se koristi za izračunavanje statistike.
- Pregledajte kolone **Value**. Istaknute tačke pokazuju isključene tačke podataka.

Algoritmi integracije

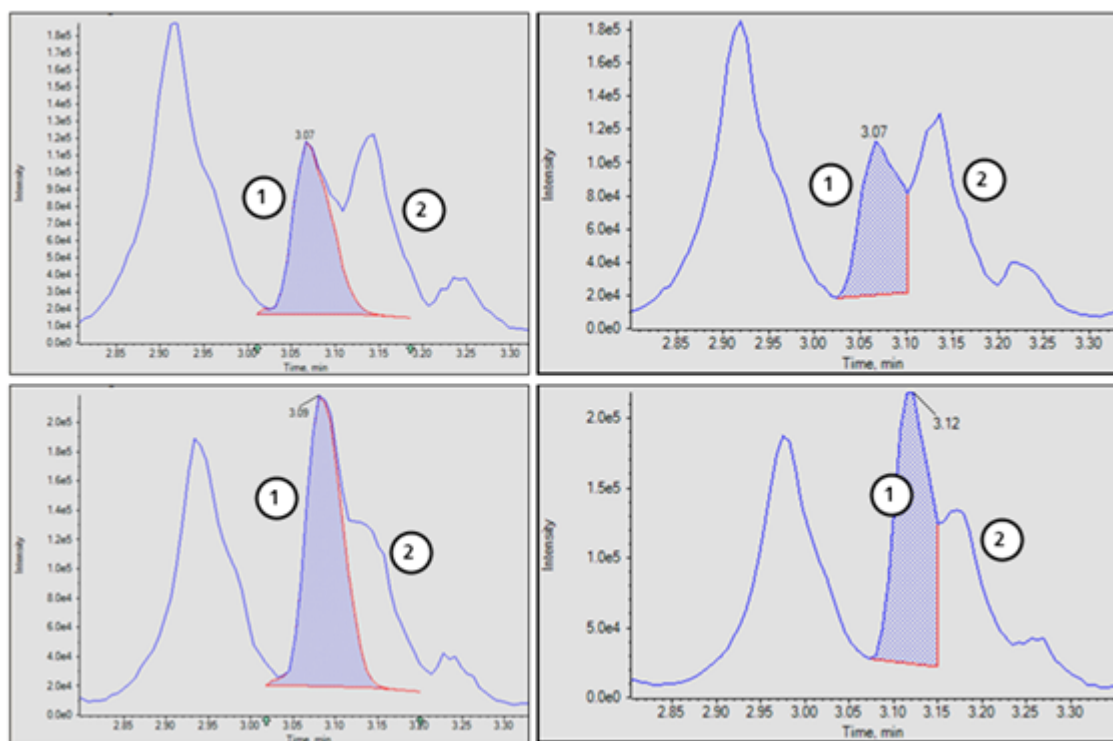
U ovom odeljku su opisani različiti parametri koji su dostupni za svaki algoritam.

O algoritmu „SignalFinder Integration Algorithm“

Blisko eluirane vršne vrednosti

Algoritam SignalFinder™ daje precizniji prikaz površine vršne vrednosti blisko eluiranih vršnih vrednosti. [sliku 14-17](#) pokazuje primer kako MQ4 (grafikon s desne strane) i SignalFinder (grafikon s leve strane) algoritmi integracije obrađuju blisko eluirane vršne vrednosti. U ovom primeru, pozadinska vršna vrednost (stavka 2) ometa vršnu vrednost od interesa (stavka 1). Pošto vršna vrednost ometanja potiče ili od LC ili od matrice, ona je prilično konstantna kroz celokupan paket. Međutim, intenzitet vršne vrednosti analita povećava se kako se povećava koncentracija analita, što dovodi do dramatične promene oblika kombinovanih vršnih vrednosti. Algoritam integracije SignalFinder, koji se zasniva na modelu vršne vrednosti koji je korisnički definisan, može dosledno da identifikuje vršnu vrednost od interesa na svim nivoima koncentracije, dok algoritam integracije MQ4 može samo da izvuče vertikalnu liniju od doline do osnovne linije. Time se integriše samo delimična vršna vrednost, što uvodi greške u oblast vršne vrednosti.

Slika 14-17 Blisko eluirane vršne vrednosti



Stavka	Opis
1	Vršna vrednost od interesa
2	Koeluirajuća pozadinska vršna vrednost

Vršne vrednosti pomerene unazad

Za vršne vrednosti pomerene unazad, prethodni algoritmi često nisu konzistentni prilikom biranja vremena zadržavanja kada se vršna vrednost završava. U zavisnosti od tačne prirode šuma u ovoj oblasti, dve vršne vrednosti koje slično izgledaju mogu imati različite prijavljene završetke vršne vrednosti. Integracija obično može postati konzistentnija podešavanjem parametara za pronalaženje vršne vrednosti. Ipak, ovo zahteva vreme i trud. Uz pristupanje pomoću modela, integracija se prekida kada model padne ispod ograničenja, tako da na njega šum znatno manje utiče.

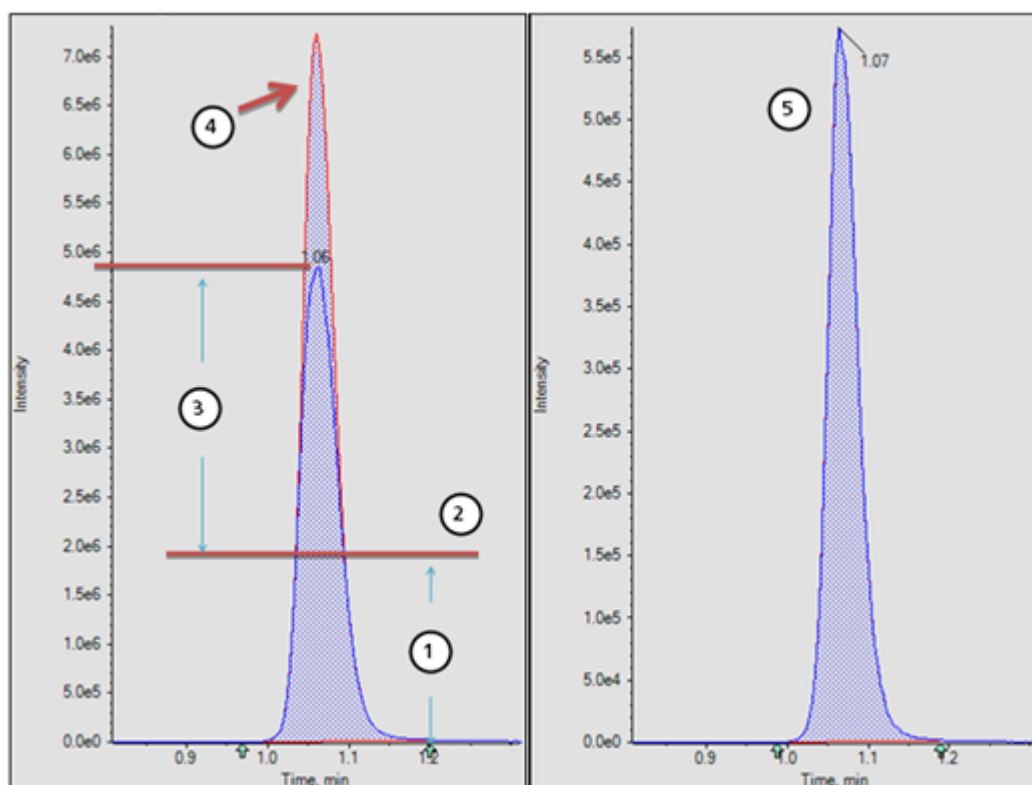
Zasićene vršne vrednosti

Kada algoritam detektuje da je vršna vrednost zasićena, on koristi model da bi predvideo kako bi vršna vrednost mogla da izgleda kada detektor ne bi bio zasićen. To se prikazuje kao crveni profil koji se širi iznad vršne vrednosti tako da bude približan odgovoru koji bi se postigao da detektor nije zasićen. Ova funkcija ispravlja samo zasićenje detektora, a ne zasićenje izvora jona ili zasićenje kolone. [sliku 14-18](#) pokazuje primer ispravke zasićenja.

Pre korišćenja algoritma SignalFinder™ izaberite nezasićeni uzorak za upotrebu u pravljenju modela vršne vrednosti a zatim podesite granicu zasićenosti na vrednost koja je odgovarajuća za detektor. U ovom primeru, koristi se granica zasićenja od 1.8E+006 cps. Algoritam upoređuje nezasićeni deo vršne vrednosti koja je ostala sa modelom vršne vrednosti, gde je vršna vrednost ispod 1.8E+006 cps. Algoritam zatim predviđa ostatak vršne vrednosti, što je prikazano crvenim tragom na osnovu izabranog modela vršne vrednosti.

Napomena: Granica zasićenja zavisi od velikog broja faktora, uključujući tip detektora, starost detektora i jedinjenja od interesa. Za optimalne rezultate, granica zasićenja mora da se podesi na odgovarajući način.

Slika 14-18 Korekcija zasićenja detektora



Stavka	Opis
1	Nezasićeni deo (model upoređene vršne vrednosti)
2	Granica 1.8e6 cps
3	Zasićeni deo
4	Ispravljeni profil vršne vrednosti
5	Model vršne vrednosti

Napomene o upotrebi

Neki radni procesi nemaju tipičan uzorak koji sadrži sve komponente od interesa. Na primer, pri radu na otkrivanju lekova korisnici mogu tražiti oksidacione metabolite dodavanjem +16 na masu Q1 matičnog leka i dodavanjem +0 ili +16 na masu Q3. Ovi metaboliti su obično prisutni za neke uzorke, ali ne nužno u uzorku koji je izabran kao model koji se koristi za kreiranje metoda kvantifikacije. U ovoj situaciji, algoritam SignalFinder™ će koristiti podrazumevani model ako za zadatu MRM tranziciju u tipičnom uzorku ne postoji razumna vršna vrednost. U mnogim slučajevima, ovaj podrazumevani model biće dovoljno tačan. Ipak, moguće je i kreirati novi model tokom sledećeg pregleda vršne vrednosti pomoću uzorka koji sadrži vršnu vrednost od interesa.

Parametri algoritma integracije SignalFinder™ Integration Algorithm

Sledeći parametri se koriste za identifikaciju i izveštavanje o vršnoj vrednosti od interesa. Pogledajte odeljak [Parametri algoritma integracije na stranici 123](#) za kompletnu listu dostupnih parametara.

Use Saturation Correction

Ova opcija je dostupna samo prilikom podešavanja opštih podrazumevanih vrednosti algoritma, a ne tokom kreiranja metoda kvantifikacije ili pregleda pojedinačne vršne vrednosti, jer nije korisno upotrebljavati ovo podešavanje samo za neke vršne vrednosti.

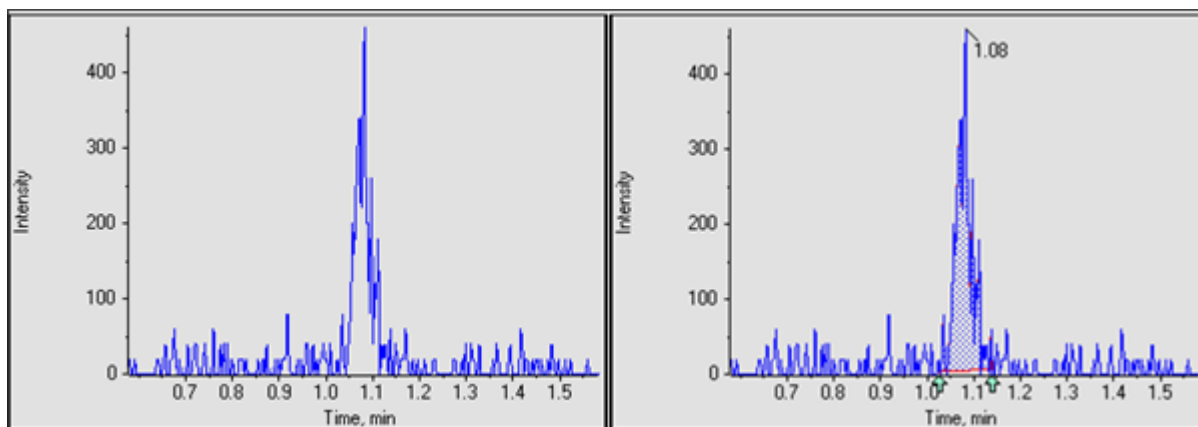
Saturation Threshold

Vršne vrednosti iznad ovog ograničenja se smatraju zasićenim. Ova vrednost zavisi od detektora.

S/N Threshold

Kako prikazuje [sliku 14-19](#), ako je opcija „S/N Threshold“ podešena na sedam (grafik sa leve strane), onda se vršna vrednost ne prijavljuje. Ako je opcija „S/N Threshold“ podešena na dva (grafik sa desne strane), onda se vršna vrednost prijavljuje. Ovaj parametar ne utiče na integraciju.

Slika 14-19 S/N Threshold



Confidence Threshold

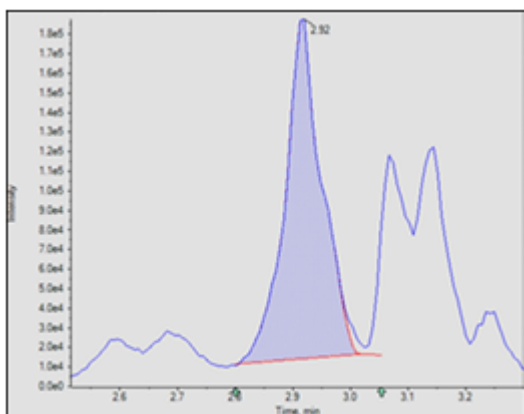
Ovaj parametar se koristi za filtriranje potencijalnih vršnih vrednosti za koje je potvrđeno da su greške. Podrazumevana vrednost je 50 %, što je obično odgovarajuće. Međutim, može biti potrebno da koristite veću vrednost za podatke sa velikim šumovima ili za podatke kod kojih se širina vršnih vrednosti znatno razlikuje od uzorka do uzorka.

[sliku 14-20](#) i [sliku 14-21](#) prikazuju kako opcija **Confidence Threshold** utiče na broj identifikovanih vršnih vrednosti. Kada je opcija **Confidence Threshold** podešena na 50%, vršna vrednost sa malom ivicom se identifikuje kao jedna vršna vrednost. Kada se vrednost

Confidence Threshold spusti na 16%, algoritam SignalFinder™ pronalazi dve vršne vrednosti. Prevucite mišem preko oblasti dve vršne vrednosti da biste pregledali te vršne vrednosti.

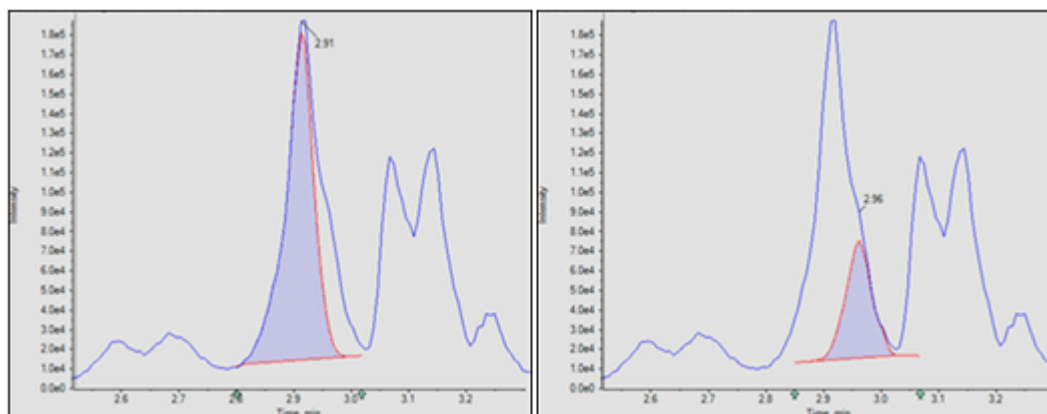
Da biste utvrdili koje druge vršne vrednosti su potencijalno prisutne u ovoj jednoj vršnoj vrednosti i ako nije poznata ispravna opcija **Confidence Threshold**, pritisnite taster **Ctrl**, a zatim prevucite mišem preko oblasti date vršne vrednosti. Ovo automatski snižava opciju **Confidence Threshold** tako da se otkrije druga data vršna vrednost koja se ne pojavljuje kada je opcija **Confidence Threshold** podešena na 50%.

Slika 14-20 Pouzdanost od 50%

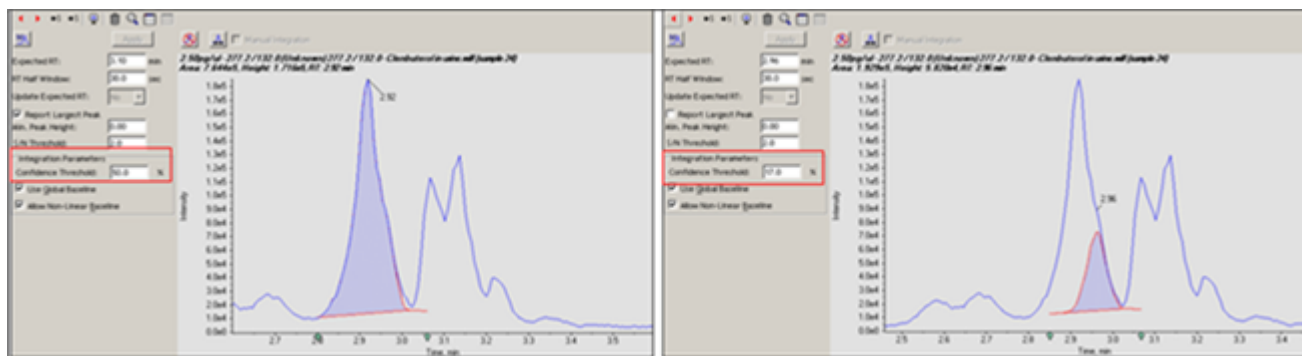


Kada je pouzdanost 16%, pronađene su dve vršne vrednosti. Prevucite mišem preko oblasti vršne vrednosti da biste identifikovali dve vršne vrednosti.

Slika 14-21 Pouzdanost od 16%



Slika 14-22 Parametar „Confidence Threshold“

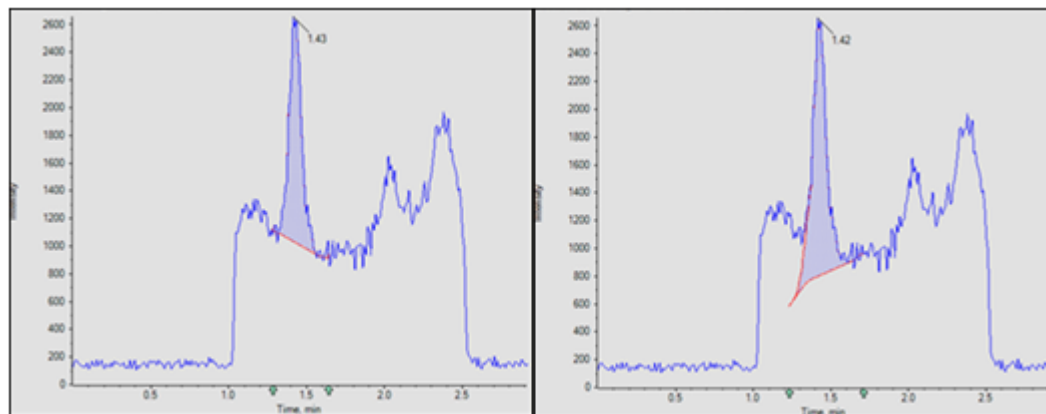


Use Global Baseline

Izaberite ovu opciju da biste koristili ceo hromatogram kao osnovnu liniju. Ako ova opcija nije izabrana, softver za kvantifikaciju pristupa izmenama osnovne linije na lokalnom nivou. [sliku 14-23](#) prikazuje primer slučaja kada treba koristiti lokalnu osnovnu liniju.

Levi grafikon prikazuje hromatogram koji je pravilno integrisan korišćenjem lokalne osnovne linije. Desni grafikon prikazuje isti hromatogram, nepravilno integrisan korišćenjem globalne osnovne linije.

Slika 14-23 Use Global Baseline

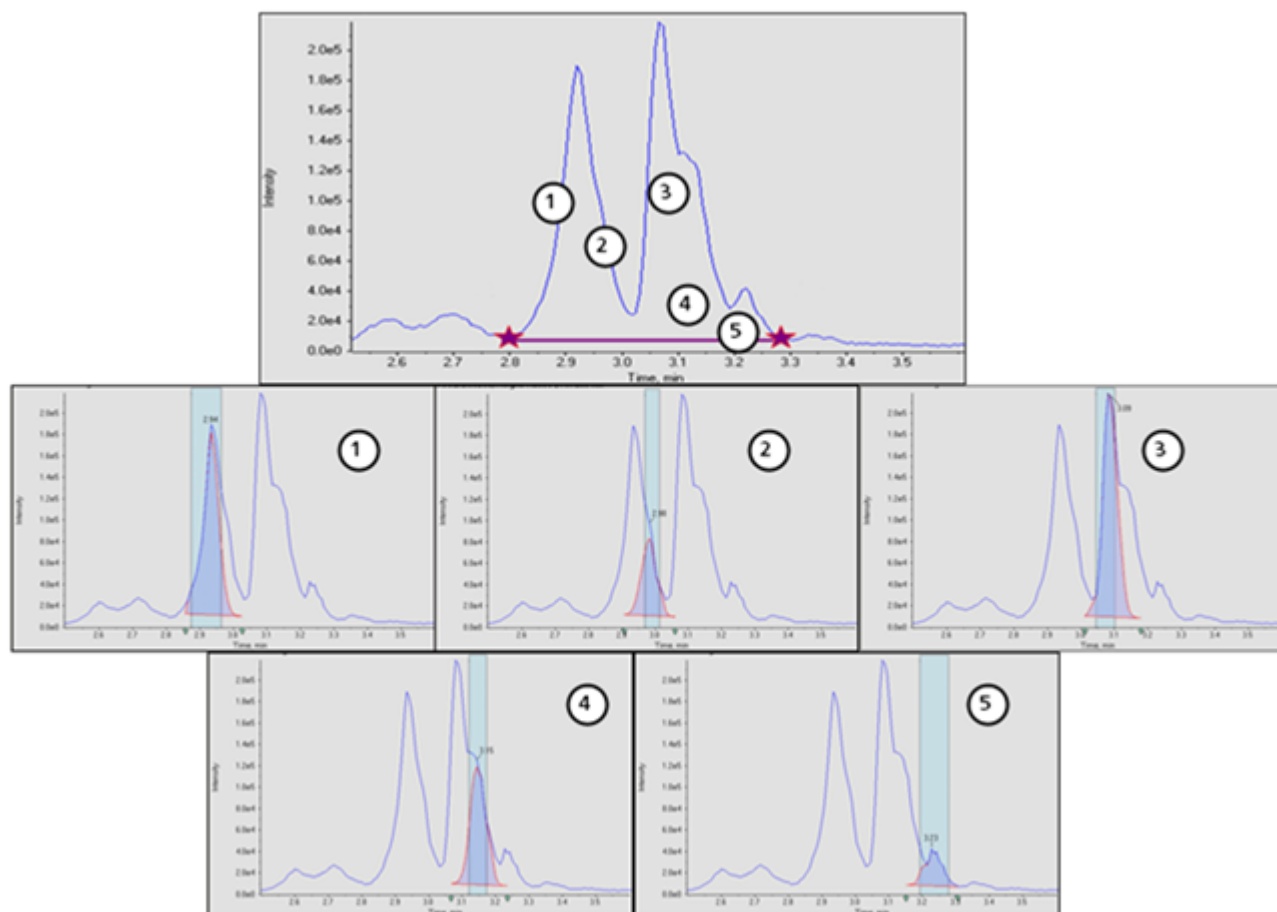


Allow Non-Linear Baseline

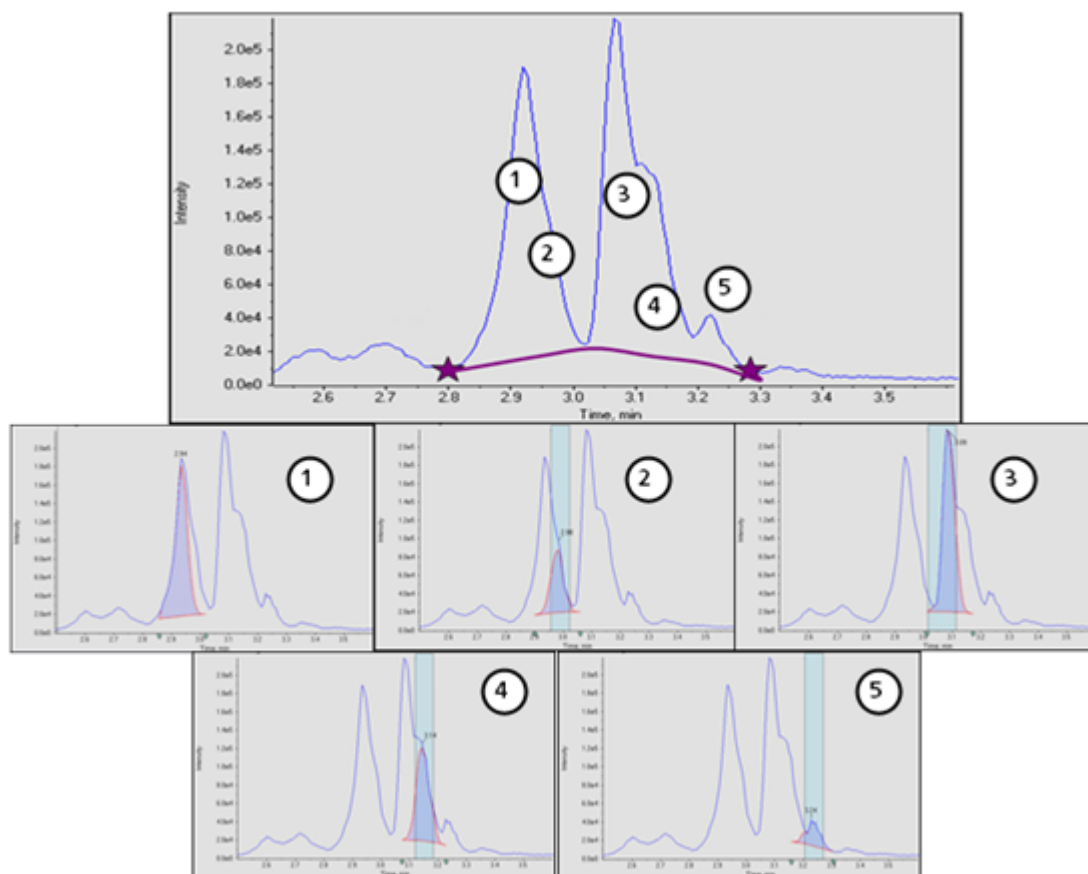
Koristite ovu opciju da biste birali između linearne i nelinearne osnovne linije. Nelinearna osnovna linija procenjuje osnovnu liniju ispod svake vršne vrednosti. Linearna opcija se poklapa sa linijom između tačaka na početku i na kraju te specifične grupe vršnih vrednosti. [sliku 14-24](#) i [sliku 14-25](#) prikazuju primere linearne i nelinearne osnovne linije za koeluirajuće vršne vrednosti. Stavke od 1 do 4 su vršne vrednosti koje su spojene.

Nelinearna osnovna linija se preporučuje za više vršnih vrednosti. U slučaju jedne vršne vrednosti, razlika između linearne i nelinearne vršne vrednosti je beznačajna.

Slika 14-24 Primer linearne osnovne linije



Slika 14-25 Primer nelinearne osnovne linije



Saveti za korišćenje algoritma integracije SignalFinder™ Integration Algorithm

- Objedinite dve vršne vrednosti: povremeno, algoritam integracije „SignalFinder“ detektuje dve vršne vrednosti. Da biste objedinili dve vršne vrednosti, pritisnite taster **Ctrl**, a zatim prevucite preko dve vršne vrednosti. Softver pokušava da objedini vršne vrednosti smanjivanjem osetljivosti konvolucije, osim ako te dve vršne vrednosti nisu suviše udaljene.
- Promenite vreme početka i završetka vršne vrednosti: da biste promenili vreme početka i završetka vršne vrednosti bilo kreiranjem tabele **Results Table** ili tokom pregleda vršne vrednosti, prevucite strelice za početak i završetak vršne vrednosti.

Napomena: Korisnici mogu da promene strelice za početak i završetak samo u okviru razumnih granica.

Parametri algoritma integracije MQ4

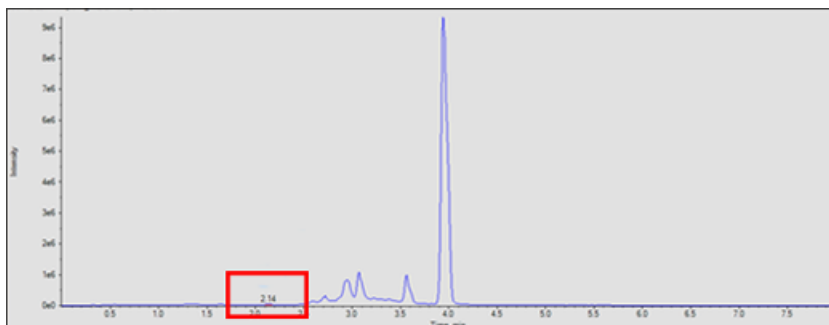
Sledeći parametri se koriste za identifikaciju i izveštavanje o vršnoj vrednosti od interesa. Pogledajte odeljak [Parametri algoritma integracije na stranici 123](#) za kompletnu listu dostupnih parametara.

Procenat šuma

Ovaj parametar se koristi da bi se procenio nivo šuma u hromatogramu. Za navedeni procenat tačaka podataka sa najmanjim intenzitetom smatra se da je šum.

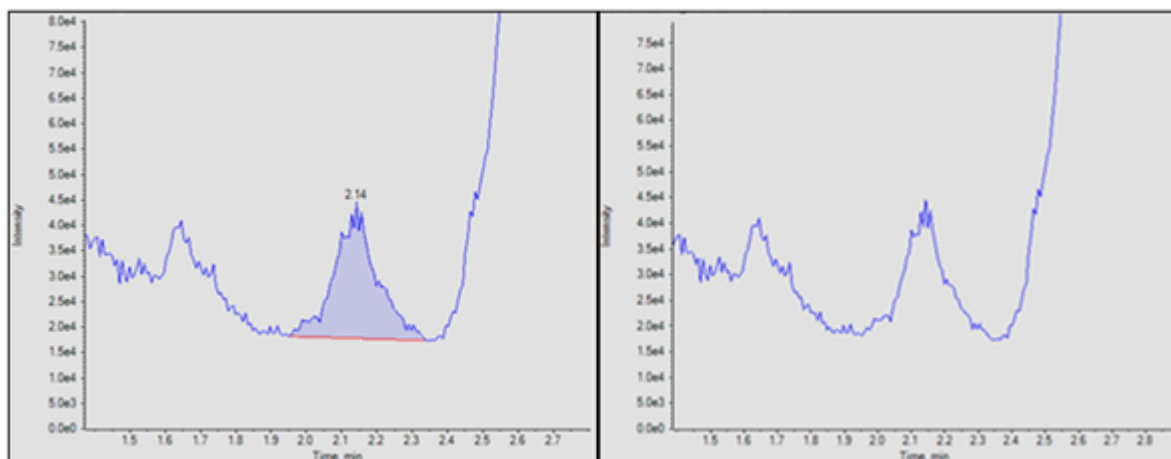
Uobičajene vrednosti variraju od 20 % do 60 %. Ukoliko se male vršne vrednosti ne pronalaze u prisustvu većih vršnih vrednosti, onda bi procenat šuma trebalo spustiti. [sliku 14-26](#) je primer male vršne vrednosti u prisustvu izuzetno velike vršne vrednosti. Ova vršna vrednost se ne pronalazi kada je procenat šuma postavljen na 90%, ali se nalazi kada je procenat šuma postavljen na 40%.

Slika 14-26 Vršna vrednost od interesa



[sliku 14-27](#) prikazuje levi grafikon sa procentom šuma postavljenim na 40%. Desni grafikon postavljen je na 90%.

Slika 14-27 Nivoi šuma

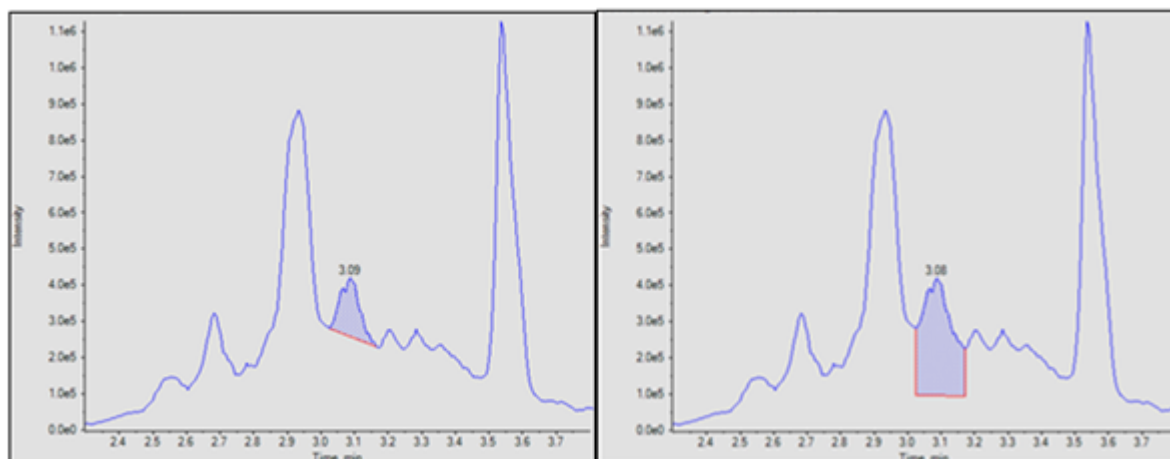


Baseline Sub. Window

Nakon ravnjanja, ali pre drugog obrađivanja, na hromatogramima se skida osnovna linija kako bi se uklonila ispupčenja u podacima. Za svaku tačku podataka, osnovna linija se izračunava pomoću tačaka podataka i na levoj i na desnoj strani trenutne tačke sa maksimalnim intenzitetom (unutar prozora za skidanje).

Tačna vrednost ovog parametra nije kritična, pod uslovom da se podesi na vrednost koja je najmanje nekoliko puta veća od očekivane širine vršne vrednosti.

Slika 14-28 Baseline Sub. Window



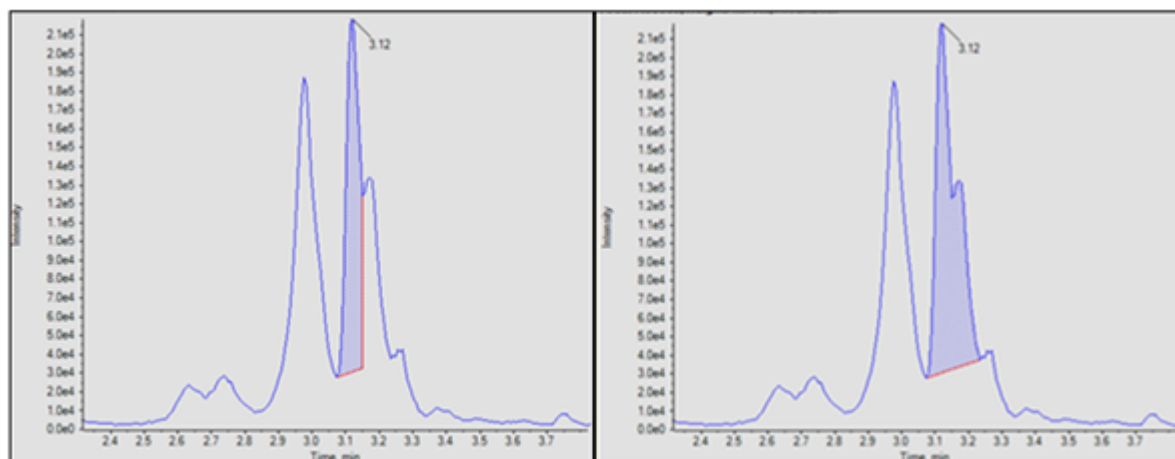
Peak Splitting

Ovaj parametar kontroliše da li će vršna vrednost koja potencijalno sadrži šum biti pronađena kao pojedinačna vršna vrednost ili kao dve (ili više) odvojenih vršnih vrednosti. Ako je nagib između dve potencijalne vršne vrednosti manji od navedene vrednosti, onda će biti pronađena pojedinačna vršna vrednost. U suprotnom, biće pronađene dve vršne vrednosti.

Postavljanje ovog parametra na veliku vrednost sprečiće da vršne vrednosti sa puno šuma budu podeljene i pronađene kao dve odvojene vršne vrednosti. Međutim, manja vrednost treba da se upotrebi ako postoje dve zasebne vršne vrednosti koje su blisko eluirane (preklopljene).

Grafikon s leve strane pokazuje deljenje vršne vrednosti podešeno na dve tačke. Grafikon s desne strane pokazuje deljenje vršne vrednosti podešeno na tri tačke.

Slika 14-29 Peak Splitting



Opcioni zadaci

Ovaj odeljak sadrži opcione zadatke koji mogu da se koriste da se unapredi analiza podataka.

Kreiranje metričkih grafikona

Koristite opciju **Metric Plot** za iscrtavanje vrednosti u kolonu **Results Table** bilo pod brojem reda ili druge kolone. Ovi grafikoni su značajna pomoć za vizuelni pregled podataka, naročito ako nije potrebno svaki hromatogram ručno pregledati koristeći okno **Peak Review**.

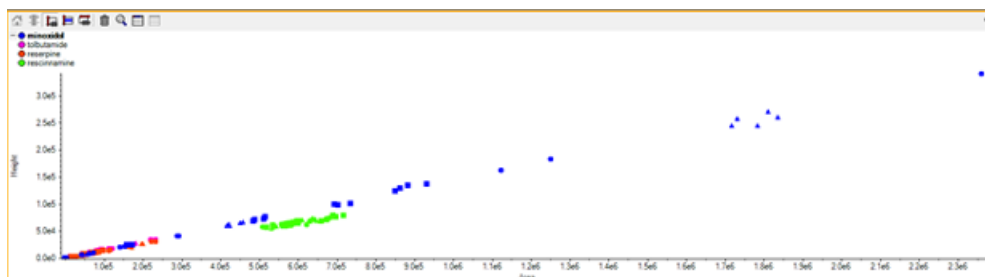
Napomena: Metrički grafikoni koriste iste formule regresije kao i kalibracione krive. Za metričke grafikone postoje dve dodatne formule, prosečna i srednja.

1. Otvorite tabelu **Results Table**.
2. Izaberite jednu ili dve kolone, a zatim kliknite na ikonu **Metric Plot**. Za ovaj primer, izaberite kolonu **IS Area**.

Ako se izabere jedna kolona, onda rezultirajući grafikon prikazuje vrednosti iz kolone kao funkciju broja reda u tabeli. Ako su izabrane dve kolone, onda se vrednosti iz kolona iscrtavaju jedna u odnosu na drugu. Prva od dve izabrane kolone sadrži vrednosti za „x“, a druga sadrži vrednosti za „y“.

3. Desnim tasterom miša kliknite na okno grafikona, a zatim kliknite na opciju **Show Legend** da biste videli objašnjenje simbola koji su korišćeni u grafikonu.

Slika 14-30 Metrički grafikon



Kreiranje prilagođenih kolona

1. Dok je tabela **Results Table** otvorena i aktivna, kliknite desnim tasterom miša, a zatim kliknite na **Add Custom Column**.

Kolona će se dodati na kraj tabele.

2. Unesite naziv kolone u dijalogu **Custom Column Name**.
3. Kliknite na **OK**.

O datotekama metoda kvantifikacije i ugrađenim metodima

Metode kvantifikacije mogu da se kreiraju korišćenjem jedne od sledećih opcija:

- Koristite čarobnjak **Quantitation wizard**.
- Izmenite postojeći metod u čarobnjaku **Quantitation wizard** sa izabranim poljem za potvrdu **Edit**.
- Otvorite i uredite postojeći metod kvantifikacije.

Metode kvantifikacije čuvaju se u folderu **Quantitation Method**.

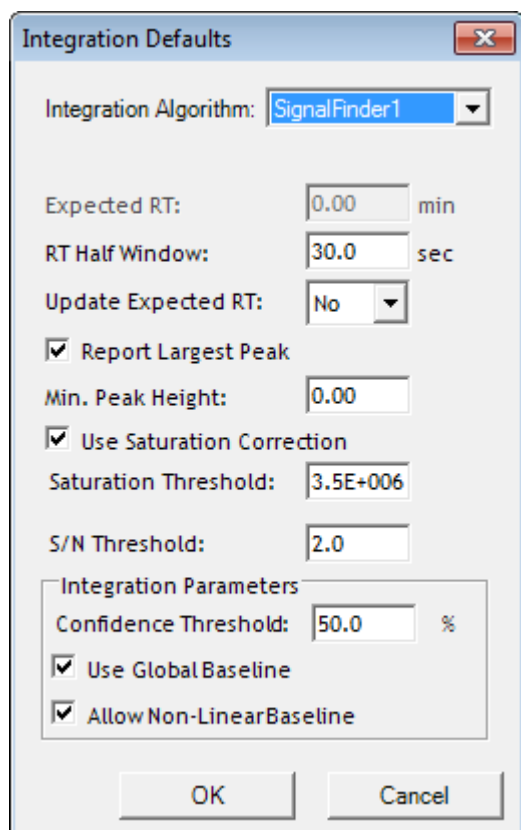
Kada se kreira tabela **Results Table**, metod kvantifikacije koji se koristi za kreiranje tabele **Results Table** ugrađen je u tabelu **Results Table**. Uredite ugrađeni metod kvantifikacije, međutim, bilo koje izmene u metodu kvantifikacije primenjuju se samo na metod ugrađen u tabelu **Results Table**, a ne na metode u folderu **Quantitation Method**.

Savet! Ovaj izmenjeni ugrađeni metod može da se izveze za buduću upotrebu.

Parametri algoritma integracije SignalFinder Integration Algorithm

Softver SignalFinder™ stvara model vršne vrednosti korišćenjem izabranog uzorka prilikom kreiranja novog metoda kvantifikacije. Ovaj model opisuje oblik izabrane vršne vrednosti koja je korišćena za izračunavanje algoritma.

Slika A-1 Dijalog „Integration Defaults“



Parametri algoritma integracije

Oznaka	Opis
Integration Algorithm	Izabrani algoritam integracije.
Expected RT	Očekivano vreme zadržavanja u minutima. Ova vrednost je na početku podešena na vreme zadržavanja najveće vršne vrednosti na hromatogramu za reprezentativni uzorak koji je korišćen za pravljenje metoda kvantifikacije. To polje ne može da se menja. Ono se ažurira u zavisnosti od jedinjenja u metodu kvantifikacije.
RT Half Window	Prozor za polovinu ukupnog vremena zadržavanja izraženog u sekundama. Da bi vršna vrednost bila detektovana i prijavljena, razlika između apeksa i očekivanog vremena zadržavanja mora biti jednaka ovoj vrednosti ili manja od nje.
Update Expected RT	<p>Pokazuje da li očekivano vreme zadržavanja treba da se podesi tokom rada korišćenjem drugih komponenti. Iskorišćava dodatne informacije da bi se kompenzovalo pomeranje u vremenu zadržavanja od uzorka do uzorka. Izbori su:</p> <ul style="list-style-type: none">• No: očekivano vreme zadržavanja se koristi takvo kakvo je.• Group: primenljivo za komponente koje su dodeljene grupama za koje sve komponente date grupe imaju isto vreme zadržavanja (tj. različite tranzicije za isto jedinjenje). Očekivano vreme zadržavanja je ažurirano korišćenjem pozicije maksimalnog preklapanja individualnih hromatograma za grupu (za dati uzorak) unutar prozora vremena zadržavanja. Ideja je da se očekivano vreme zadržavanja postavi na stvarno vreme zadržavanja za datu komponentu (tamo gde se očekuje vršna vrednost u svakom hromatogramu). <p>Ukoliko postoje najmanje dva interna standarda definisana za grupu, koriste se samo njihovi hromatogrami za utvrđivanje novog vremena zadržavanja. U suprotnom, koriste se svi hromatogrami za grupu. Namera je da se koriste samo oni hromatogrami za koje je najverovatnije da će komponenta biti prisutna u razumnom nivou.</p> <ul style="list-style-type: none">• IS: za analite koji koriste interni standard prvo se određuje stvarno vreme zadržavanja vršne vrednosti internog standarda (za odgovarajući uzorak). Očekivano vreme zadržavanja za analit određuje se množenjem navedenog očekivanog vremena zadržavanja odnosom stvarnog i očekivanog vremena zadržavanja internog standarda. Ova opcija se ponekad naziva relativno vreme zadržavanja. <hr/> <p>Napomena: Ova opcija se ne primenjuje na interne standarde ili na analite koji ne koriste interne standarde.</p>

Oznaka	Opis
Report Largest Peak	Ako je u hromatogramu pronađeno više vršnih vrednosti, onda u prozoru zadržavanja vremena, poštujući minimalnu širinu i visinu, ovaj parametar kontroliše koja vršna vrednosti se prijavljuje. Kada se izabere polje za potvrdu, prijavljuje se vršna vrednost sa najvećom oblašću. Kada se polje za potvrdu obriše, prijavljuje se vršna vrednost sa vremenom zadržavanja koje je najbliže očekivanom vremenu. Preporučuje se da se ova opcija omogući, osim ako vremena zadržavanja nisu veoma ponovljiva.
Min. Peak Height	Ovaj parametar ne utiče na integraciju. Koristi se samo za izveštavanje. Sve potencijalne vršne vrednosti koje su manjeg intenziteta od ove vrednosti ne smatraju se za bitne i ne koriste se.
Use Saturation Correction	Kada algoritam detektuje da je vršna vrednost zasićena, on koristi model da bi predvideo kako bi vršna vrednost mogla da izgleda kada detektor ne bi bio zasićen. Ovo dovodi do toga da se profil proširi iznad vrha vršne vrednosti tako da bude približan odgovoru koji bi se postigao da detektor nije zasićen. Time može da se proširi linearni dinamički opseg kalibracionih krivih. Ova opcija je dostupna samo prilikom podešavanja opštih podrazumevanih vrednosti algoritma, a ne tokom kreiranja metoda kvantifikacije ili pregleda pojedinačne vršne vrednosti, jer nije korisno upotrebljavati ovo podešavanje samo za neke vršne vrednosti.
Saturation Threshold	Vršne vrednosti iznad ovog ograničenja se smatraju zasićenim. Ova vrednost zavisi od detektora.
S/N Threshold	Ovaj parametar ne utiče na integraciju. Koristi se samo za izveštavanje. Vršne vrednosti koje su ispod ograničenja se ne prijavljuju.
Confidence Threshold	Koristi se za filtriranje potencijalnih vršnih vrednosti za koje je potvrđeno da su greške. Podrazumevana vrednost je 50 %, što je obično odgovarajuće. Međutim, može se koristiti veća vrednost za podatke sa velikim šumovima ili za podatke kod kojih se širina vršnih vrednosti znatno razlikuje od uzorka do uzorka.
Use Global Baseline	Izaberite ovu opciju da biste koristili ceo hromatogram kao osnovnu liniju. Ako polje za potvrdu nije izabrano, softver lokalno pristupa izmenama osnovne linije.
Allow Non-Linear Baseline	Koristite ovu opciju da biste birali između linearne i nelinearne osnovne linije. Nelinearna osnovna linija procenjuje osnovnu liniju ispod svake vršne vrednosti. Linearna osnovna linija se poklapa sa linijom između tačaka na početku i na kraju te specifične grupe vršnih vrednosti.

Parametri algoritma integracije MQ4

Slika A-2 Dijalog „Integration Defaults“

Integration Defaults

Integration Algorithm: MQ4

Gaussian Smooth Width: 0.0 points

Expected RT: 0.00 min

RT Half Window: 30.0 sec

Update Expected RT: No

☒ Report Largest Peak

Min. Peak Width: 3 points

Min. Peak Height: 0.00

Integration Parameters

Noise Percentage: 40.0 %

Baseline Sub. Window: 2.00 min

Peak Splitting: 2 points

OK Cancel

Oznaka	Opis
Integration Algorithm	Izabrani algoritam integracije.
Gaussian Smoothing Width	Standardni Gausov algoritam za ravnanje sa poluširinom jednakom naznačenoj primenjenoj vrednosti (u tačkama). Za hromatograme sa šumovima dobar izbor je vrednost blizu stvarne širine vršne vrednosti (na pola visine). Za podatke sa manje šumova može se koristiti manja vrednost.
Expected RT	Očekivano vreme zadržavanja u minutima. Ova vrednost je početno podešena na vreme zadržavanja najveće vršne vrednosti na hromatogramu za reprezentativni uzorak koji je korišćen za izgradnju metoda kvantifikacije.
RT Half Window	Prozor za polovinu ukupnog vremena zadržavanja izraženog u sekundama. Da bi vršna vrednost bila detektovana i prijavljena, razlika između apeksa i očekivanog vremena zadržavanja mora biti jednaka ovoj vrednosti ili manja od nje.

Oznaka	Opis
Update Expected RT	<p>Pokazuje da li očekivano vreme zadržavanja treba da se podesi tokom rada korišćenjem drugih komponenti. Iskorišćava dodatne informacije da bi se kompenzovalo pomeranje u vremenu zadržavanja od uzorka do uzorka. Izbori su:</p> <ul style="list-style-type: none"> • No: očekivano vreme zadržavanja se koristi takvo kakvo je. • Group: primenljivo za komponente koje su dodeljene grupama za koje sve komponente date grupe imaju isto vreme zadržavanja (tj. različite tranzicije za isto jedinjenje). Očekivano vreme zadržavanja je ažurirano korišćenjem pozicije maksimalnog preklapanja individualnih hromatograma za grupu (za dati uzorak) unutar prozora vremena zadržavanja. Ideja je da se očekivano vreme zadržavanja postavi na stvarno vreme zadržavanja za datu komponentu (tamo gde se očekuje vršna vrednost u svakom hromatogramu). <p>Ukoliko postoje najmanje dva interna standarda definisana za grupu, koriste se samo njihovi hromatogrami za utvrđivanje novog vremena zadržavanja. U suprotnom, koriste se svi hromatogrami za grupu. Namera je da se koriste samo oni hromatogrami za koje je najverovatnije da će komponenta biti prisutna u razumnom nivou.</p> <ul style="list-style-type: none"> • IS: Za analite koji koriste interni standard, prvo se određuje stvarno vreme zadržavanja vršne vrednosti internog standarda (za odgovarajući uzorak). Očekivano vreme zadržavanja za analit određuje se množenjem navedenog očekivanog vremena zadržavanja odnosom stvarnog i očekivanog vremena zadržavanja internog standarda. Ova opcija se ponekad naziva relativno vreme zadržavanja.
Report Largest Peak	<p>Ako je u hromatogramu pronađeno više vršnih vrednosti koje su unutar prozora vremena zadržavanja i koje zadovoljavaju zahteve za minimalnu širinu i visinu, onda ovaj parametar kontroliše koja vršna vrednosti se prijavljuje. Kada se izabere polje za potvrdu, prijavljuje se vršna vrednost sa najvećom oblašću. Kada se polje za potvrdu obriše, prijavljuje se vršna vrednost sa vremenom zadržavanja koje je najbliže očekivanom vremenu.</p> <p>Preporučuje se da se ova opcija omogući, osim ako vremena zadržavanja nisu veoma ponovljiva.</p>
Min. Peak Height	<p>Ovaj parametar ne utiče na integraciju. Koristi se samo za izveštavanje. Sve potencijalne vršne vrednosti koje su manjeg intenziteta od ove vrednosti ne smatraju se za bitne i ne koriste se.</p>
Min. Peak Width	<p>Sve potencijalne vršne vrednosti koje su uže od ove vrednosti se posmatraju kao šum i ne koriste se.</p>

Parametri algoritma integracije

Oznaka	Opis
Noise Percentage	<p>Ovaj parametar se koristi da bi se procenio nivo šuma u hromatogramu. Za navedeni procenat tačaka podataka sa najmanjim intenzitetom smatra se da je šum.</p> <p>Uobičajene vrednosti variraju od 20 % do 60 %. Ukoliko se male vršne vrednosti ne pronalaze u prisustvu većih vršnih vrednosti, onda bi ovu vrednost trebalo spustiti.</p>
Baseline Sub. Window	<p>Nakon ravnanja, ali pre drugog obrađivanja, na hromatogramima se skida osnovna linija kako bi se uklonila ispupčenja u podacima. Za svaku tačku podataka, osnovna linija se izračunava pomoću tačaka podataka i na levoj i na desnoj strani trenutne tačke sa maksimalnim intenzitetom (unutar prozora za skidanje).</p> <p>Tačna vrednost ovog parametra nije kritična, pod uslovom da se podesi na vrednost koja je najmanje nekoliko puta veća od očekivane širine vršne vrednosti.</p>
Peak Splitting	<p>Ovaj parametar kontroliše da li će vršna vrednost koja potencijalno sadrži šum biti pronađena kao pojedinačna vršna vrednost ili kao dve (ili više) odvojenih vršnih vrednosti. Ako je nagib između dve potencijalne vršne vrednosti manji od navedene vrednosti, onda će biti pronađena pojedinačna vršna vrednost. U suprotnom, biće pronađene dve vršne vrednosti.</p> <p>Postavljanje ovog parametra na veliku vrednost sprečava da vršne vrednosti sa puno šuma budu podeljene i pronađene kao dve odvojene vršne vrednosti. Međutim, manja vrednost treba da se upotrebi ako postoje dve zasebne vršne vrednosti koje su blisko eluirane (preklopljene).</p>

Jednačine regresije

B

U ovom odeljku su opisane jednačine koje se koriste za izračunavanje regresionih krivih. U sledećim jednačinama x označava koncentraciju analita za uzorke tipa **Standard**, a y označava odgovarajuću oblast ili visinu vršne vrednosti. Tačne varijable koje se koriste za regresiju zavise od toga da li se koristi interni standard ili ne i da li se koriste oblast ili visina vršne vrednosti onako kako prikazuje [tabelu B-1](#).

Tabela B-1 Varijable regresije

Da li se koristi interni standard?	Da li se koristi oblast?	x	y
Da	Da	$C_a / C_{is} / DF$	A_a / A_{is}
Da	Ne	$C_a / C_{is} / DF$	H_a / H_{is}
Ne	Da	C_a / DF	A_a
Ne	Ne	C_a / DF	H_a

gde je:

- C_a = stvarna koncentracija analita
- C_{is} = koncentracija internog standarda
- DF = faktor razblaživanja
- A_a = oblast vršne vrednosti analita
- A_{is} = oblast vršne vrednosti internog standarda
- H_a = visina vršne vrednosti analita
- H_{is} = visina vršne vrednosti internog standarda

Ponderi

tabelu B-2 prikazuje kako se izračunava ponder (w u jednačinama) za svaki od sedam tipova ponderisanja.

Tabela B-2 Ponderi

Tip merenja težine	Težina (w)
Nema	Uvek 1.0.
1 / x	Ako je $ x < 10^{-5}$, onda je $w = 10^5$. U suprotnom, $w = 1 / x $
1 / x ²	Ako je $ x < 10^{-5}$, onda je $w = 10^{10}$. U suprotnom, $w = 1 / x^2$.
1 / y	Ako je $ y < 10^{-8}$, onda je $w = 10^8$. U suprotnom, $w = 1 / y $
1 / y ²	Ako je $ y < 10^{-8}$, onda je $w = 10^{16}$. U suprotnom, $w = 1 / y^2$.
ln x	Ako je $x < 0$, generiše se greška. Ako je $x < 10^{-5}$, onda je $w = \ln 10^5$. U suprotnom, $w = \ln x $.
ln y	Ako je $y < 0$, generiše se greška. Ako je $y < 10^{-8}$, onda je $w = \ln 10^8$. U suprotnom, $w = \ln y $.

Regresije

U ovom odeljku su navedene jednačine za svaki tip regresije. U sledećim jednačinama, parametri x, y i w su onakvi kakvi su prethodno definisani. Svi zbrovi se izračunavaju nad svim uzorcima tipa **Standard**, uz izuzetak onih uzoraka tipa **Standard** koji su označeni kao nekorišćeni.

Koeficijent korelacije se izračunava na sledeći način:

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

gde je:

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

y_c = Izračunava y-vrednost uz korišćenje odgovarajuće jednačine u nastavku

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

Linearna

Jednačina linearne kalibracije je:

$$y = mx + b$$

Nagib i odsečak se izračunavaju na sledeći način:

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

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

gde je:

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

Linearna do nule

Jednačina kalibracije linearne regresije do nule je:

$$y = mx$$

Nagib se izračunava kao:

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

Srednji faktor odgovora

Kalibracija srednjeg faktora odgovora je:

$$y = mx$$

Ovo je ista jednačina kao i ona u slučaju linearne regresije do nule. Ipak, nagib se izračunava drugačije kao:

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

a standardno odstupanje faktora vrednosti je:

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

gde je:

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

Napomena: Tačke gde je vrednost x jednaka nuli isključene su iz zbirova.

Ako ima i linearnosti i zakrivljenosti u liniji tačaka, koristite stepenovanu regresiju umesto linearne ili kvadratne regresije da biste dobili liniju koja je negde između ova dva okvira.

Kvadratna

Jednačina za kvadratnu kalibraciju je:

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

Polinomni koeficijenti se izračunavaju na sledeći način:

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

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

$$a_0 = (\sum w_i y_i - a_1 \sum w_i x_i - a_2 \sum w_i x_i^2) / \sum w_i$$

gde je:

$$b_0 = \sum w_i x_i / \sum w_i - \sum w_i x_i^2 / \sum w_i x_i$$

$$b_1 = \sum w_i x_i^2 / \sum w_i - \sum w_i x_i^3 / \sum w_i x_i$$

$$b_2 = \sum w_i x_i / \sum w_i - \sum w_i x_i y_i / \sum w_i x_i$$

$$b_3 = \sum w_i x_i^2 / \sum w_i x_i - \sum w_i x_i^3 / \sum w_i x_i^2$$

$$b_4 = \sum w_i x_i^3 / \sum w_i x_i - \sum w_i x_i^4 / \sum w_i x_i^2$$

$$b_5 = \sum w_i x_i y_i / \sum w_i x_i - \sum w_i x_i^2 y_i / \sum w_i x_i^2$$

Stepenovana

Jednačina kalibracije stepenovane funkcije je:

$$y = ax^p$$

Jednačine za linearnu kalibraciju se koriste onako kako je prethodno opisano za izračunavanje nagiba (m) i odsečka (b), osim što je „x“ u tim jednačinama zamenjeno sa „ln x“ a „y“ je zamenjeno sa „ln y“. Kada se to uradi, „a“ i „p“ se izračunavaju kao:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Ukoliko je bilo koja od „x“ ili „y“ vrednosti negativna ili nula, pojaviće se greška.

„Wagner“

Jednačina Wagner kalibracije je:

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

Jednačine za linearnu kalibraciju se koriste onako kako je prethodno opisano za izračunavanje a_0 , a_1 i a_2 , osim što je x u tim jednačinama zamenjeno sa „ln x“ a y je zamenjeno sa „ln y“.

Ukoliko je bilo koja od „x“ ili „y“ vrednosti negativna ili nula, pojaviće se greška.

„Hill“

Jednačina kalibracije „Hill“ je:

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

Nije moguće dati analitičku funkciju za rešavanje nepoznatih a, b, c i n. Umesto toga, koeficijenti se određuju korišćenjem iterativnog Lavenberg-Markvartovog metoda.

Izračunavanje konačnih koncentracija

U ovom odeljku je objašnjeno kako se izračunava konačna koncentracija iz dobijenih jednačina regresije, uz korišćenje IS koncentracije i faktora razblaživanja koji se koriste u originalnoj koncentraciji.

Linearna

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

Linearna regresija do nule i faktor srednje vrednosti odziva

$$x = y / m$$

Kvadratna

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

- Ako su koreni i „+“ i „-“ u okviru opsega standarda, onda se generiše greška, jer nema jedinstvenog rešenja.
- Ako je tačno jedna od dva korena u okviru opsega koncentracije standarda, onda se prijavljuje ta vrednost.
- Ako su oba korena ispod najniže koncentracije standarda, onda se prijavljuje „+“ koren.
- Ako su oba korena iznad najviše koncentracije standarda, onda se prijavljuje „-“ koren.
- Ako je „-“ koren ispod najnižeg standarda, a „+“ koren iznad najvišeg standarda, onda se prijavljuje „-“ koren ako je njegova razlika od najniže koncentracije standarda manja od razlike „+“ korena od najviše koncentracije. U suprotnom, prijavljuje se „+“ koren.

Stepenovana

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

„Wagner“

Ista jednačina kao i za kvadratni slučaj se koristi za glavno izračunavanje, osim što je „x“ zamenjeno sa „ln x“, a „y“ sa „ln y“.

„Hill“

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

Ovaj odeljak opisuje kako se koristi funkcija izveštavanja u softveru da bi se kreirali oblikovani izveštaji iz tabela **Results Tables**.

Kreiranje izveštaja

Ovaj softver koristi Microsoft Word dokumenta kao unapred definisane šablone. Kada se kreira izveštaj, vrednosti se izvlače iz najaktuelnije tabele „Results Table“ i iz povezanih datoteka.

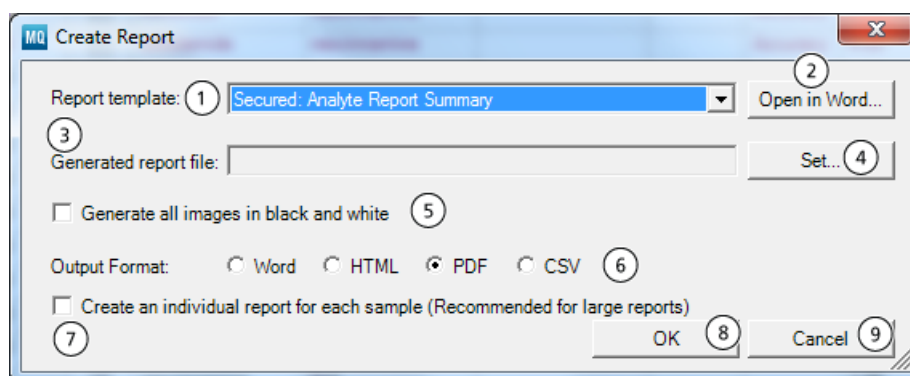
Korisnici su odgovorni za proveru prilagođenih šablona. Korisnik može da izmeni format broja u uređivaču šablona izveštaja. Ako format broja nije naznačen u šablonu, onda se format iz opcije **Results Table Column Setting** koristi u izveštaju. Vodite računa da se koristi ispravan broj decimalnih mesta.

Kontrolisani načini za izvoz podataka iz softvera su izvoz tabela **Results Tables**, prenos u LIMS i izveštavanje. Drugi izvori izlaznih podataka, kao što je kopiranje i lepljenje iz tabela **Results Tables**, nisu kontrolisani. Korisnici ne treba da koriste ove nekontrolisane izlazne metode u svrhe koje su regulisane.

Pretražite bilo koji folder da biste pristupili podacima i sačuvali ih. Prethodne lokacije sa kojih su otvoreni šabloni i na kojima se čuvaju izveštaji se podrazumevano otvaraju.

1. Otvorite tabelu **Results Table**.
2. Kliknite na opciju **File > Create Report and Save Results Table**.

Slika C-1 Dijalog „Create Report“



Stavka	Opis
1	Report template: izaberite šablon sa liste.
2	Open in Word: kliknite na ovu opciju da biste otvorili određeni šablon izveštaja direktno u programu „Microsoft Word“ i da biste ga potvrdili ili uredili.
3	Generated report file: prikazuje naziv datoteke izveštaja.
4	Set: kliknite na ovu opciju da biste naznačili naziv datoteke izveštaja koji treba generisati.
5	Generate all images in black and white: izaberite ovo polje za potvrdu štampanja crno-belom tehnikom.
6	Output Format: Word, HTML, PDF ili CSV. PDF je najsigurniji metod izvoza, jer se izveštaj ne može izmeniti.
7	Kreirajte poseban izveštaj za svaki uzorak (preporučuje se za velike izveštaje)
8	Kliknite na opciju OK da biste odštampali izveštaj.
9	Kliknite na opciju Cancel da biste zatvorili dijalog bez kreiranja izveštaja.

3. Izaberite šablon sa liste „Report template“. Šabloni izveštaja se čuvaju na sledećim lokacijama:

- Za Windows 7 i 10: C:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

Pogledajte [Predložci izveštaja na stranici 138](#) za opis ovih šablona.

4. Kliknite na opciju **Set** da biste kreirali naziv i lokaciju izveštaja.

5. Kliknite na opciju **OK** da biste generisali izveštaj.

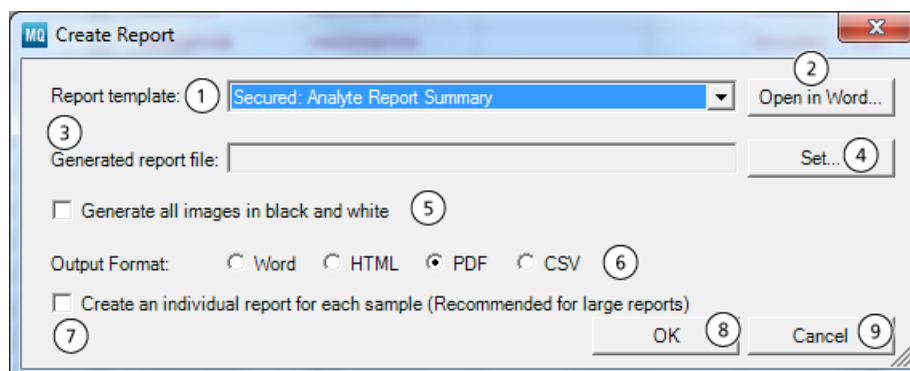
Kreiranje šablona zaštićenog izveštaja

Kontrolisani načini za izvoz podataka iz softvera su izvoz tabela **Results Tables**, prenos u LIMS i izveštavanje. Drugi izvori izlaznih podataka, kao što je kopiranje i lepljenje iz tabele **Results Tables**, nisu kontrolisani. Korisnici ne treba da koriste ove nekontrolisane izlazne metode u svrhe koje su regulisane.

1. Otvorite ili kreirajte tabelu **Results Table**.

2. Kliknite na opciju **File > Create Report and Save Results Table**.

Slika C-2 Dijalog „Create Report“



Stavka	Opis
1	Report template: izaberite šablon sa liste.
2	Open in Word: kliknite na ovu opciju da biste otvorili određeni šablon izveštaja direktno u programu „Microsoft Word“ i da biste ga potvrdili ili uredili.
3	Generated report file: prikazuje naziv datoteke izveštaja.
4	Set: kliknite na ovu opciju da biste naznačili naziv datoteke izveštaja koji treba generisati.
5	Generate all images in black and white: izaberite ovo polje za potvrdu štampanja crno-belom tehnikom.
6	Output Format: Word, HTML, PDF ili CSV. PDF je najsigurniji metod izvoza, jer se izveštaj ne može izmeniti.
7	Kreirajte poseban izveštaj za svaki uzorak (preporučuje se za velike izveštaje)
8	Kliknite na opciju OK da biste odšampali izveštaj.
9	Kliknite na opciju Cancel da biste zatvorili dijalog bez kreiranja izveštaja.

3. Izaberite šablon sa liste **Report template**.

4. Kliknite na opciju **Open in Word**.

Otvora se predložak u formatu docx i uređivač predložaka Reporter se prikazuje na desnoj strani. Uređivač šablona se automatski popunjava informacijama o oznakama.

5. Izmenite šablon prema potrebi.

6. Sačuvajte šablon.

Predlošci izveštaja

Sledeća tabela opisuje šablone dostupne u folderu <drive>:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

U slučaju kreiranja prilagođenog šablona, korisnik je odgovoran za proveru šablona. Korisnik može da izmeni format broja u uređivaču „Report Template Editor“. Ako format broja nije naznačen u šablonu, onda se format iz dijaloga **Results Table Column Settings** koristi u izveštaju. Odgovornost korisnika je da proveri valjanost prilagođenog šablona izveštaja.

Neki šabloni izveštaja koriste upite. Korisnici mogu da kreiraju upite korišćenjem Microsoft Excel formula za evaluaciju, manipulisanje i prikazivanje podataka iz tabele „Results Table“ u izveštaju. Oznaka Metafield u šablonu izveštaja saopštava izveštaju naziv datoteke query koju treba da koristi. Da biste koristili upite, naziv datoteke upita mora da se navede u oznaci MetaField u šablonu izveštaja. Upiti takođe moraju da imaju ekstenziju „.query“ da bi bili prepoznati kao upit. Upiti moraju da se skladište u folderu „Reporter“ gde se skladište šabloni izveštaja.

Preporučujemo da korisnik proveri ispravnost generisanih rezultata ako je korišćen predložak iz softvera Reporter, pogotovo ako se u predlošku koriste upiti. Ako se šablon izveštaja izmeni posle provere ispravnosti, treba ponovo proveriti njegovu ispravnost. Promene šablona izveštaja uključuju izmene oznaka ili upita iz softvera „Reporter“.

Tabela C-1 Opisi šablona izveštaja

Šablon	Opis
Analyte Report Summary	Sigurnosni izveštaj koji prikazuje „Samples Summary Table“ za svaki analit. Ovaj šablon izveštaja je pogodan za tabelu „Results Table“ sa definisanim grupama.
Calibration Curves Template	Izveštaj koji prikazuje stavke „File Information“, „Statistics Table“ (standardi) i „Calibration Curve“ za analite, jednu stranicu po analitu.
Metric Plot_IS Area	Sigurnosni izveštaj koji prikazuje, za svaki interni standard, odeljak koji uključuje stavke „File Information“ i metrički grafikon oblasti vršne vrednosti internog standarda.
Per Analyte Ion Ratio Report	Sigurnosni izveštaj koji prikazuje, za svaki analit, odeljak koji uključuje stavke „File Information“, „Results Table“ i „Calibration Curves“ za svaki analit i hromatograme uključujući interni standard i svaki analit. Ovaj šablon je pogodan za „Results Table“ sa definisanim grupama.
Per Analyte Report	Sigurnosni izveštaj koji prikazuje, za svaki analit, odeljak koji uključuje stavke „File Information“, „Results Table“ i „Calibration Curves“ za svaki analit i hromatograme uključujući interni standard i svaki analit. Ovaj šablon je pogodan za „Results Table“ bez definisanih grupa.

Tabela C-1 Opisi šablona izveštaja (nastavak)

Šablon	Opis
Per Sample Ion Ratio Report	Sigurnosni izveštaj koji prikazuje, za svaki uzorak, odeljak koji uključuje stavke „File Information“, „Sample Information“, „Analyte Results Table“ i „Calibration Curves“ za svaki analit i hromatograme uključujući interni standard i svaki analit. Ovaj šablon je pogodan za „Results Table“ sa definisanim grupama.
Per Sample Report	Sigurnosni izveštaj koji prikazuje, za svaki uzorak, odeljak koji uključuje stavke „File Information“, „Sample Information“, „Analyte Results Table“ i „Calibration Curves“ za svaki analit i hromatograme uključujući interni standard i svaki analit. Ovaj šablon je pogodan za „Results Table“ bez definisanih grupa.
Sample Report Summary	Sigurnosni izveštaj koji prikazuje „Analyte Summary Table“ za svaki uzorak. Ovaj šablon izveštaja je pogodan za tabelu „Results Table“ sa definisanim grupama.
Sample Report with Concentration Threshold.docx	Izveštaj koji prikazuje stavke „File Information“, „Sample Information“ i „Results Summary Table“ za svaki nepoznati uzorak. „Results Summary Table“ uključuje ograničenja koncentracije za određeni analit. Analiti su označeni kao pozitivni ako je koncentracija iznad ograničenja. Ovaj šablon se odnosi na datoteku Sample Report With Concentration Threshold.query. Korisnik može da izmeni datoteku sa upitom da bi naveo nazive analita, grupe analita (na primer, klasu jedinjenja) i ograničenja koncentracije analita.

Oznake predloška izveštaja

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja

Tip	Tip polja	Opis oznake
Oznake iz šeme dobavljača podataka softvera Analyst [®] MD		
Analit	ForEach	Vrti ispočetka sve analite, onim redom kojim su definisani u tabeli „Results Table“.
AnalyteGroup	ForEach	Vrti ispočetka samo različite grupe analita. Oznake „TextField“ ili „PictureField“ preuzimaju vrednosti za jon „Quantifier“. Ako oznake ovog tipa sadrže dodatnu oznaku „For_Each“ koja navodi „Ratiolons“ atribut, onda je unutrašnje kruženje samo za „Qualifier“ jone koji su deo tekuće grupe.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
InternalStandard	ForEach	Vrti ispočetka sve interne standarde.
QCStatistics	ForEach	Vrti ispočetka sve statističke podatke o kontroli kvaliteta.
Ratiolons	ForEach	Pogledajte AnalyteGroup.
Sample	ForEach	Vrti ukug svaki od pojedinačnih uzoraka. Na primer, ovo se koristi u vezi sa podešavanjem oznake „TextField” da bi se umetnulo ime uzorka.
Statistics	ForEach	Vrti ukug sve statističke podatke o funkciji „Standards”.
MQ_Group	ForEach	Vrti ukug različite grupe, uključujući „IS” grupe ili podgrupe. Oznake „TextField” ili „PictureField” preuzimaju vrednosti za jon „Quantifier”. Ako oznake ovog tipa sadrže dodatnu oznaku „For_Each” koja navodi „Ratiolons” atribut, onda je unutrašnje kruženje samo za „Qualifier” jone koji su deo tekuće grupe.
MQ_AnalyteRatiolons	ForEach	Pogledajte MQ_Group samo za kvalifikator analita.
MQ_ISRatiolons	ForEach	Pogledajte MQ_Group samo za kvalifikator „IS”.
AnalyteRatio	PictureField	Prikazuje preklapanja hromatograma kvantifikatora i kvalifikatora podgrupe analita. Prikazuje podebljanu liniju u sredini da bi označila „Expected Ion Ratio”. Srednja linija = visina vršne vrednosti funkcija „Quantifier” x „Expected Ion ratio”. Prikazuje donje i gornje granice prihvatljivog opsega „Ion Ratio” sa tačkastim linijama. Donja granica = visina vršne vrednosti funkcija „Quantifier” x „Expected Ion Ratio” x ((100-tolerancija)/100). Gornja granica = visina vršne vrednosti funkcija „Quantifier” x „Expected Ion Ratio” x ((100+tolerancija)/100).
AnalyteRatioNoLines	PictureField	Prikazuje preklapanja hromatograma kvantifikatora i kvalifikatora podgrupe analita bez linija.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
Calibration	PictureField	Prikazuje kalibracionu krivu analita
IS_AnalyteRatio	PictureField	Prikazuje preklapanja hromatograma kvantifikatora i kvalifikatora podgrupe internog standarda. Prikazuje podebljanu liniju u sredini da bi označila „Expected Ion Ratio”. Srednja linija = visina vršne vrednosti funkcija „Quantifier” x „Expected Ion ratio”. Prikazuje donje i gornje granice prihvatljivog opsega „Ion Ratio” sa tačkastim linijama. Donja granica = visina vršne vrednosti funkcija „Quantifier” x „Expected Ion Ratio” x ((100-tolerancija)/100) Gornja granica = visina vršne vrednosti funkcija „Quantifier” x „Expected Ion Ratio” x ((100+tolerancija)/100).
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField	Prikazuje preklapanja hromatograma kvantifikatora i kvalifikatora podgrupe internog standarda bez linija.
IS_PeakReview	PictureField	Prikazuje hromatogram internog standarda.
Overlay_All_XIC	PictureField	Prikazuje preklapanje hromatograma svih analita u uzorku.
Overlay_All_XIC_with_IntStds	PictureField	Prikazuje preklapanje hromatograma svih analita i internih standarda u uzorku.
Overlay_All_XIC_with_IntStds_NoLegend	PictureField	Prikazuje preklapanje hromatograma svih analita i internih standarda u uzorku, bez legende.
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField	Prikazuje preklapanje hromatograma svih analita u uzorku, bez legende.
PeakReview	PictureField	Prikazuje hromatogram analita.
TIC	PictureField	Prikazuje TIC uzorka.
Acquisition_Date	TextField	Datum kada je uzorak prikupljen. Prikazuje „Acquisition Date & Time“.
Acquisition_Duration_Minutes	TextField	Prikazuje vremenski period prikupljanja podataka o uzorku, prikazano u minutima.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
Acquisition_Method	TextField	Metod akvizicije koji je korišćen za prikupljanje podataka o uzorku. Prikazuje „Acq. Method Name“.
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField	Prikazuje „Component Comment“.
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField	Prikazuje R vrednost regresije.
Analyte_AnalyteRegression	TextField	Prikazuje jednačinu regresije, uključujući R vrednost i merenje težine.
Analyte_Concentration	TextField	Stvarna koncentracija analita, kao što je to korisnik definisao u tabeli „Results Table“. Prikazuje „Actual Concentration“.
Analyte_Expected_RT	TextField	Očekivano vreme zadržavanja određenog analita, u minutima. Prikazuje „Expected RT“.
Analyte_Integration_Type	TextField	Tip integracije koji je korišćen za određene vršne vrednosti analita. Vršne vrednosti se mogu ručno integrisati ili se mogu integrisati pomoću dostupnih parametara. Prikazuje „Integration Type“.
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField	Odnos oblasti vršne vrednosti analita prema oblasti vršne vrednosti rastvora internog standarda. Izračunato kao „Analyte Peak Area” / „IS Peak Area”. Prikazuje „Area Ratio“.
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField	Odnos visine izražen tačkama u sekundi (cps) vršne vrednosti analita u odnosu na vršnu vrednost iz rastvora internog standarda. Izračunato kao „Analyte Peak Height” / „IS Peak Height”. Prikazuje „Height Ratio“.
Analyte_Mass_Ranges	TextField	Korisnički definisana MRM tranzicija analita, definisana u korišćenom metodu akvizicije. Prikazuje „Mass Info“.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
Analyte_Peak_Area	TextField	Oblast vršne vrednosti analita u hromatogramu. Prikazuje „Area“.
Analyte_Peak_Height	TextField	Visina vršne vrednosti analita, izražena u tačkama u sekundi (cps). Prikazuje „Height“.
Analyte_Peak_Name	TextField	Korisnički definisan naziv dodeljen određenim uzorcima prilikom kreiranja tabele „Results Table”. Prikazuje „Component Name“.
Analyte_Peak_Width	TextField	Širina vršne vrednosti analita, izražena u minutima. Prikazuje „Total Width“.
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	Širina pri 50% visine vršne vrednosti za vršnu vrednost analita, izražena u minutima. Prikazuje „Width at 50%“.
AnalyteQuantPeak_info	TextField	Prikazuje informacije o integraciji, uključujući algoritam i parametre.
Analyte_QTY	TextField	Količina analita izračunata iz izračunate koncentracije analita i odnosa težine prema zapremini (na primer, ng analita po gramu uzorka). Prikazuje „Quality“.
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField	Prvi je analit u grupi.
Analyte_Processing_Alg	TextField	Prikazuje algoritam integracije.
Analyte_Retention_Time	TextField	Stvarno vreme zadržavanja analita u hromatogramu korišćeno za kreiranje tabele „Results Table”. Prikazuje „Retention Time“.
Analyte_R_Squared	TextField	Prikazuje R^2 vrednost regresije.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
Analyte_RT_Window	TextField	Vremenski raspon, izražen u sekundama, tokom kojeg se očekuje da se pojavi vršna vrednost analita. Sredina ovog opsega je očekivano vreme zadržavanja analita. Prikazuje vrednost „RT Half Window“ parametara integracije.
Analyte_Signal_To_Noise	TextField	Odnos signala i šuma za određenu vršnu vrednost analita. Prikazuje „Signal/Noise“.
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField	Nagib osnovne linije analita, zabeležen u % intenziteta/minut. Prikazuje „Slope of Baseline“ za analit.
Analyte_Start_Scan	TextField	Skeniranje početka analita.
Analyte_Start_Time	TextField	Vreme kada počinje vršna vrednost analita, izraženo u minutima. Prikazuje „Start Time“.
Analyte_Stop_Scan	TextField	Skeniranje zaustavljanja analita.
Analyte_Stop_Time	TextField	Vreme kada se završava vršna vrednost analita, izraženo u minutima. Prikazuje „End Time“.
Analyte_Unit	TextField	Jedinice koje se koriste za predstavljanje koncentracije analita. Standardna jedinica za tabelu „Results Tables“ je ng/ml. Prikazuje „Conc. Units“.
Analyte_Use_Record	TextField	Okvir za izbor koji određuje da li će se određeni zapis koristiti za naknadnu analizu kao što su kalibracione krive. Prikazuje „Used“.
Analyte_Count	TextField	Prikazuje ukupan broj analita.
Analyte_Index	TextField	Prikazuje broj redosleda analita u uzorku, počevši od nule.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
Calculated_Accuracy	TextField	Preciznost vršne vrednosti analita, dobijena poređenjem stvarne koncentracije analita sa izračunatom koncentracijom analita. Prikazuje „Accuracy“.
Calculated_Concentration	TextField	Izračunata koncentracija vršne vrednosti analita dobijena pomoću softvera Analyst® MD uz korišćenje površine vršne vrednosti. Prikazuje „Calculated Concentration“.
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField	Vreme zadržavanja analita ili određeni zapis internog standarda u tabeli „Results Table“. Prikazuje „Relative RT“.
IS_Concentration	TextField	Stvarna koncentracija internog standarda, kao što je to korisnik definisao u tabeli „Results Table“. Prikazuje „IS Actual Concentration“.
IS_Expected_RT	TextField	Očekivano vreme zadržavanja vršne vrednosti internog standarda, izraženo u minutima. Prikazuje „IS Expected RT“.
IS_Integration_Type	TextField	Tip integracije korišćen za određene vršne vrednosti internog standarda. Vršne vrednosti se mogu ručno integrisati ili se mogu integrisati pomoću dostupnih parametara. Prikazuje „IS Integration Type“.
IS_Mass_Ranges	TextField	Korisnički definisana MRM tranzicija internog standarda, definisana u korišćenom metodu akvizicije. Prikazuje „IS Mass Info“.
IS_Peak_Area	TextField	Oblast vršne vrednosti internog standarda. Prikazuje „IS Area“.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
IS_Peak_Height	TextField	Visina vršne vrednosti internog standarda, izražena u tačkama u sekundi (cps). Prikazuje „IS Height“.
IS_Peak_Name	TextField	Korisnički definisan naziv dat određenom internom standardu prilikom kreiranja tabele „Results Table“. Prikazuje „IS Name“.
IS_Peak_Width	TextField	Širina vršne vrednosti analita, izražena u minutima. Prikazuje „IS Total Width“.
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	Širina vršne vrednosti za vršnu vrednost internog standarda na polovini njegove visine, izražena u tačkama u sekundi (cps). Prikazuje „IS Width at 50%“.
IS_Retention_Time	TextField	Stvarno vreme zadržavanja internog standarda. Prikazuje „IS Retention Time“.
IS_RT_Window	TextField	Vremenski raspon, izražen u sekundama, tokom kojeg se očekuje da se pojavi vršna vrednost internog standarda. Sredina ovog opsega je očekivano vreme zadržavanja internog standarda. Prikazuje vrednost „RT Half Window“ parametara integracije za „IS“
ISQuantPeak_Info	TextField	Prikazuje informacije o integraciji, uključujući algoritam i parametre.
IS_Signal_To_Noise	TextField	Odnos signala i šuma vršne vrednosti internog standarda. Prikazuje „IS Signal/Noise“.
IS_Slope_of_Baseline	TextField	Nagib osnovne linije internog standarda, zabeležen u % intenziteta/minut. Prikazuje „Slope of Baseline“ internog standarda.
IS_Start_Scan	TextField	Skeniranje početka internog standarda.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
IS_Start_Time	TextField	Vreme kada počinje vršna vrednost internog standarda, izraženo u minutima. Prikazuje „IS Start Time“.
IS_Stop_Scan	TextField	Skeniranje zaustavljanja internog standarda.
IS_Stop_Time	TextField	Vreme kada se završava vršna vrednost internog standarda, izraženo u minutima. Prikazuje „IS End Time“.
IS_Units	TextField	Jedinice koje se koriste za predstavljanje koncentracije internih standarda. Standardna jedinica za tabelu „Results Tables“ je ng/ml. Prikazuje „Conc. Units“ for IS.
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField	Prikazuje vrednost maks. tolerancije preciznosti za LLOQ u dijalogu „Outlier Setting“ metoda kvantifikacije.
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField	Prikazuje vrednost maks. tolerancije preciznosti za opciju „Standards“ u dijalogu „Outlier Setting“ metoda kvantifikacije.
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField	Prikazuje vrednost maks. tolerancije preciznosti za opciju „QCs“ u dijalogu „Outlier Setting“ metoda kvantifikacije.
MQ_Analyte_Group_Name	TextField	Prikazuje naziv grupe analita.
MQ_Created_With	TextField	Prikazuje naziv proizvoda pomoću kojeg se generiše izveštaj.
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField	Prikazuje „Expected Ion Ratio“.
MQ_Group_Index	TextField	Prikazuje broj redosleda grupe u uzorku, počevši od 1. Koristiti sa kruženjem ForEach MQ_Group.
MQ_Group_Name	TextField	Prikazuje naziv grupe. Koristiti sa kruženjem ForEach MQ_Group.
MQ_Ion_Ratio	TextField	Prikazuje „Ion Ratio“.
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField	Prikazuje vrednost maks. tolerancije za opciju „Ion Ratio“ za analit u dijalogu „Outlier Setting“ metoda kvantifikacije.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
MQ_IS_Group_Name	TextField	Prikazuje naziv grupe internog standarda.
MQ_IsRowHidden	TextField	Prikazuje skriveni red u tabeli „Results Table“.
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField	Prikazuje vrednost donje granice izračunate koncentracije u dijalogu „Outlier Setting“ metoda kvantifikacije.
MQ_Outlier_Reasons	TextField	Prikazuje „Outlier Reasons“.
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField	Prikazuje „Asymmetry Factor“.
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField	Prikazuje „Baseline Delta/Height“.
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField	Prikazuje „End Time at 10%“.
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField	Prikazuje „End Time at 5%“.
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField	Prikazuje „Points Across Baseline“.
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField	Prikazuje „Points Across Half Height“.
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField	Prikazuje „Start Time at 10%“.
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField	Prikazuje „Start Time at 5%“.
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField	Prikazuje „Tailing Factor“.
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField	Prikazuje „Width at 10%“.
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField	Prikazuje „Width at 5%“.
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField	Prikazuje „Mass Range“ za kvantifikator u grupi analita.
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField	Prikazuje „Area“ za kvantifikator u grupi analita.
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField	Prikazuje „Calculated Concentration“ za kvantifikator u grupi analita.
MQ_Report_Generation_Date	TextField	Prikazuje datum generisanja izveštaja koji odražava podešavanja za kulturu iz softvera.
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField	Prikazuje vrednost gornje granice izračunate koncentracije u dijalogu „Outlier Setting“ metoda kvantifikacije.
Query_Name	TextField	Naziv upita koji je naveden u predlošku izveštaja (ako je primenjivo).

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
Record_Modified	TextField	Prikazuje „Modified“.
Reporter_Template_Name	TextField	Naziv predloška izveštaja koji je korišćen za kreiranje izveštaja.
ResultTbl_CreateDate	TextField	Prikazuje datum kada je kreirana tabela „Results Table“.
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField	Prikazuje algoritam obrade koji se koristi za obradu tabele „Results Table“ (na primer, MQ4, SignalFinder1).
ResultTbl_Name	TextField	Prikazuje naziv datoteke za tabelu „Results Table“.
ResultTbl_ProjName	TextField	Prikazuje naziv projekta u kojem je sačuvana tabela „Results Table“.
Sample_Comment	TextField	Komentar u vezi sa uzorkom. Prikazuje „Sample Comment“.
Sample_Dilution_Factor	TextField	Ukupan broj zapremina jedinica u kojima je uzorak rastvoren. Prikazuje „Dilution Factor“.
Sample_File_Name	TextField	Naziv datoteke sa podacima u kojoj se čuvaju neobrađeni podaci o određenom uzorku. Prikazuje „Original Filename“.
Sample_ID	TextField	Korisnički definisana vrednost za navođenje određenih ID za svaki uzorak ili analit u tabeli „Results Table“. Prikazuje „Sample ID“.
Sample_Index	TextField	Prikazuje „Index“.
Sample_Count	TextField	Prikazuje ukupan broj analita.
Sample_InjectionVolume	TextField	Zapremina ubrizgavanja korišćena u uređaju za automatsko uzorkovanje koja se koristi prilikom ubrizgavanja prvobitnog uzorka, kao što je definisano metodom akvizicije. Prikazuje „Injection Volume“.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
Sample_Instrument	TextField	Prikazuje tip instrumenta korišćenog za akviziciju uzorka koji je izdvojen iz wiff datoteke.
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField	Prikazuje serijski broj instrumenta korišćenog za akviziciju uzorka koji je izdvojen iz wiff datoteke.
Sample_Name	TextField	Korisnički definisan naziv dodeljen određenom uzorku prilikom kreiranja tabele „Results Table“. Prikazuje „Sample Name“.
Sample_Operator	TextField	Prijavljeni korisnik u vreme akvizicije. Prikazuje „Operator Name“.
Sample_Plate_Number	TextField	Položaj ploče za uzorke u uređaju za automatsko uzorkovanje korišćeno prilikom uzimanja uzoraka. Prikazuje „Plate Number“.
Sample_Rack_Number	TextField	Položaj rafa za uzorke u uređaju za automatsko uzorkovanje korišćen prilikom prikupljanja uzoraka. Prikazuje „Rack Number“.
Sample_Type	TextField	Korisnički definisana vrednost koja označava tip uzorka od kojeg potiče svako pojedinačno ubrizgavanje. Na primer „Blank“, „Standard“ i tako dalje. Prikazuje „Sample Type“.
Sample_Vial_Position	TextField	Pozicija bočice definisana u akvizicionom paketu korišćena u uređaju za automatsko uzorkovanje da bi se odredilo koja bočica sadrži uzorak. Prikazuje „Vial Number“.
Sample_File_Full_Name	TextField	Prikazuje naziv datoteke sa kompletnom putanjom.
Sample_Index_In_Wiff	TextField	Prikazuje redni broj uzorka u wiff datoteci, počevši od nule.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
Sta_Accuracy	TextField	Preciznost vršne vrednosti analita, određena poređenjem stvarne koncentracije analita sa izračunatom koncentracijom analita. Prikazuje „Accuracy“.
Sta_CV	TextField	Prikazuje uslovni procenat varijacije koji diktira koliko blizu ili daleko u procentima vrednost izračunate koncentracije odstupa od srednje vrednosti koncentracije. Izračunato pomoću standardnog odstupanja/srednje vrednosti.
Sta_ExpectedConcent	TextField	Očekivana koncentracija analita izračunata pomoću softvera Analyst® MD uz korišćenje površine vršne vrednosti. Prikazuje „Actual Concentration“.
Sta_Mean	TextField	Prikazuje srednju vrednost (prosek) izračunatih koncentracija koje su izračunate pomoću softvera Analyst® MD.
Sta_NumVal	TextField	Prikazuje broj vrednosti koje čine statističke podatke. Broj uzoraka koji se uzima u obzir prilikom izračunavanja proseka.
Sta_QCAccuracy	TextField	Preciznost koja se određuje poređenjem očekivane koncentracije sa stvarnom koncentracijom uzorka za kontrolu kvaliteta kao što je to korisnik definisao u koloni tipa uzorka. Prikazuje „Accuracy“.
Sta_QCCV	TextField	Prikazuje uslovni procenat varijacije koji diktira koliko blizu ili daleko u procentima vrednost izračunate koncentracije odstupa od srednje vrednosti koncentracije. Izračunato pomoću standardnog odstupanja/srednje vrednosti. Primenjuje se na uzorak za kontrolu kvaliteta.

Tabela C-2 Oznake predloška izveštaja (nastavak)

Tip	Tip polja	Opis oznake
Sta_QCExpectedConcent	TextField	Očekivana koncentracija uzorka za kontrolu kvaliteta, kao što je to definisao korisnik. Prikazuje „Actual Concentration“ uzorka za kontrolu kvaliteta.
Sta_QCMean	TextField	Prikazuje srednju vrednost (prosek) izračunatih koncentracija koje su izračunate pomoću softvera Analyst® MD za uzorak tipa Quality Control.
Sta_QCNumVal	TextField	Prikazuje broj vrednosti uzetih u obzir za srednju vrednost koncentracije uzorka za kontrolu kvaliteta prilikom izračunavanja proseka.
Sta_QCStdDev	TextField	Prikazuje standardno odstupanje vrednosti koncentracije za svaki uzorak. Standardno odstupanje predstavlja meru širenja skupa vrednosti od srednje vrednosti.
Sta_StdDev	TextField	Prikazuje standardno odstupanje od standardnog uzorka. Standardno odstupanje predstavlja meru širenja skupa vrednosti od srednje vrednosti.
CUSTOM	TextField	Prikazuje vrednost prilagođenih kolona tabele „Results Table“.

Izračunavanja relativnog šuma i odnosa signala i šuma

D

Ako se obrađuju podaci kvantitativne masene spektrometrije, važno je odrediti da li je data vršna vrednost značajna ili nije, pri čemu „značajno“ obično znači „da li ovaj signal premašuje pozadinski šum?“.

Obično se visina vršne vrednosti upoređuje sa pozadinskim šumom izmerenim u oblasti bez vršnih vrednosti gde se šum obično procenjuje ili kao jedna standardna devijacija tačaka podataka u ovom opsegu ili kao tri standardne devijacije. Ovaj pristup nije idealan iz tri razloga:

- On je subjektivan, pošto se oblast šuma bira ručno.
- Pozadinska oblast bez vršnih vrednosti možda ne postoji ili je možda oblast suviše uska da bi se precizno procenio šum.
- Šum u položaju vršne vrednosti može se veoma razlikovati od onog u izabranoj oblasti šuma.
- Faktor „jedan ili tri“ takođe je subjektivan i različita nadležna tela imaju različite preporuke.
- Primetan šum može da se promeni ako su podaci unapred obrađeni. Na primer, izravnati su ili su ograničeni.

Ako se koristi koncept relativnog šuma (R_n), lako je razviti jednostavan metod izračunavanja očekivanog šuma u svakoj tački podataka radi poređenja sa izmerenim signalom. Ovo je robusna, objektivna metrika koja može da se koristi za izračunavanje odnosa signala i šuma (S/N), kao i za procenu i poređenje performansi instrumenta i testa. Postoji puno primena koncepta relativnog šuma, a jedna od njih je izračunavanje vrednosti S/N .

Osnovni algoritam funkcioniše na sledeći način:

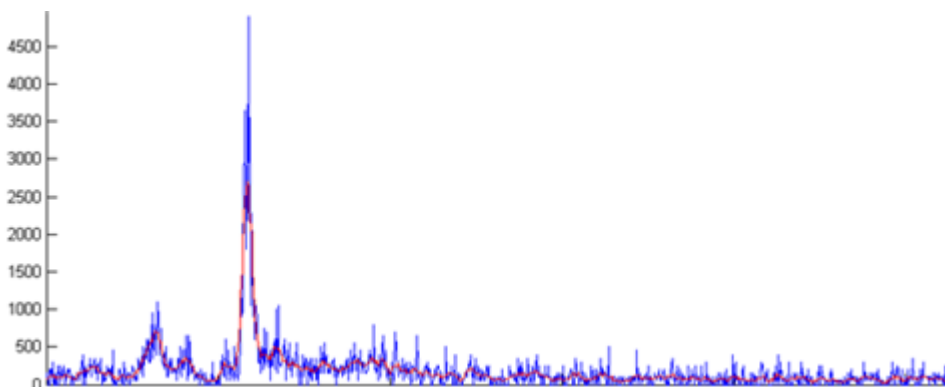
1. Napravite model šuma koji će omogućiti korisniku da izračuna očekivani šum u svakoj tački zapisa podataka ako je dat nivo pozadinskog signala u toj tački.

Model šuma može da se odredi iz teorijskih razmatranja ili može da se napravi iz stvarnih merenja datog sistema. U slučaju detektora koji broje impulse, standardna devijacija signala, a samim tim i očekivani šum, proporcionalna je kvadratnom korenu signala i menja se sa signalom. U drugim sistemima će postojati konstantna komponenta „belog šuma“, koja može da se kombinuje sa komponentom koja zavisi od intenziteta.

2. Procenite pozadinski signal iz izmerenog signala.

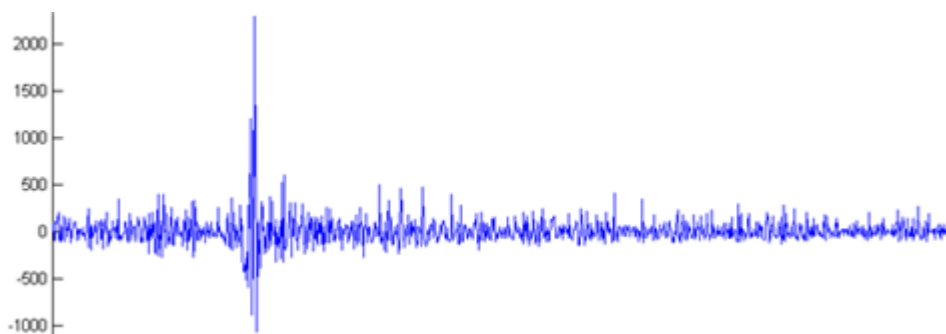
Ovo može da se ostvari na mnogo načina, ali najjednostavniji je generisanje izravnete verzije podataka kao što prikazuje [sliku D-1](#).

Slika D-1 Preklapanje neobrađenih i izravnatih podataka



3. Izmerite stvarni šum u podacima korišćenjem svih tačaka (vršnih vrednosti i pozadine). Ovo se ostvaruje oduzimanjem procene pozadinskog signala od izmerenog signala u svakoj tački u podacima gde je izravnati signal oduzet od originalnog. Ovo je poznato kao delta šum. Opseg delta šuma je razumno konstantan osim kada postoje velike vršne vrednosti, pošto šum zavisi od signala i povećava se sa povećanjem signala. Pogledajte [sliku D-2](#).

Slika D-2 Grafikon vrednosti delta šuma svake tačke podataka



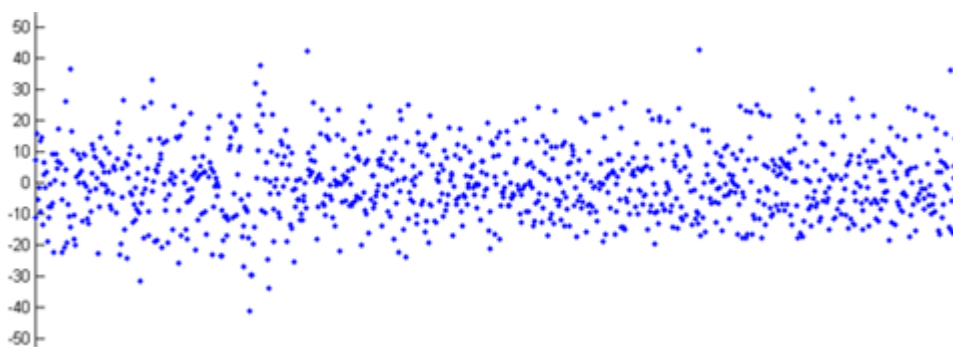
4. U svakoj tački podataka izračunajte odnos između izmerenog šuma i očekivanog šuma.

To jest, u svakoj tački podataka podelimo šum koji smo izmerili u 3. koraku vrednošću koju predviđa naš model šuma (u našem slučaju to je kvadratni koren intenziteta). Ako je model šuma dobar, generiše se niz vrednosti na koje uglavnom utiču ista ograničenja kao što prikazuje [sliku D-3](#). [sliku D-3](#) takođe prikazuje grafikon za

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

Napomena: Ovo smanjuje velike varijacije delta šuma i daje dobro ograničen skup podataka.

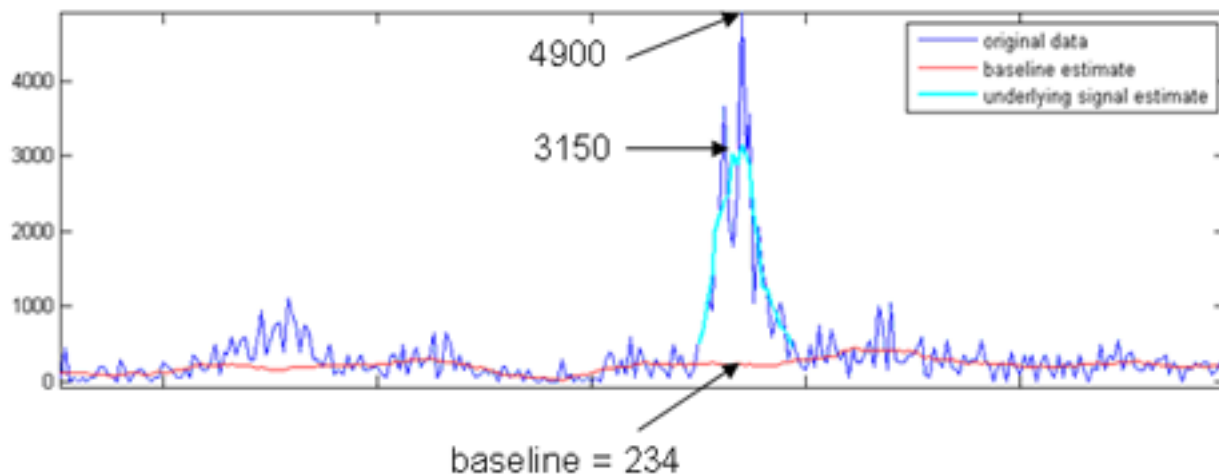
Slika D-3 Model šuma



5. Izračunajte standardnu devijaciju vrednosti odnosa. Ovo je vrednost R_n , procena najverovatnijeg odnosa između stvarnog delta šuma i onog koji je predvideo model. [sliku D-3](#) prikazuje ovo kao vrednost od 9,5.

[sliku D-4](#) prikazuje primer kako relativni šum može da se koristi za izračunavanje vrednosti S/N.

Slika D-4 Preklapanje neobrađenih podataka, procena pozadinskog signala i procena osnovne linije



Kao što je prethodno opisano:

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

u ovom primeru:

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

Ako se apeks vršne vrednosti koristi kao signal, to daje vrednost S/N od 34 (4900/145), a ako se koristi visina izravnatog signala, to daje vrednost S/N od 22 (3150/145).

Kada prikazuje vrednost S/N, MQ4 algoritam integracije koristi proceduru opisanu ovde i vršnu vrednost apeksa kao signal. Pošto SignalFinder™ algoritam integracije uklapa model u vršnu vrednost, on koristi visinu uklopljenog profila. Ovo stvara manje prikazane vrednosti S/N. Međutim, ovo je preciznija vrednost zato što na nju manje utiču mogući skokovi šuma. SignalFinder algoritam integracije takođe ima sofisticiraniji pristup proceni osnovne vrednosti, pa iz ta dva razloga vrednosti S/N koje prikazuju dva algoritma nisu identične, iako će obično biti slične.

Kao rezime, u poređenju sa uobičajenim pristupom proceni šuma kao standardne devijacije pozadinske oblasti, pristup relativnog šuma izračunavanju vrednosti S/N ima sledeće prednosti:

- Mnogo je manje subjektivan, pošto pozadinska oblast ne treba da se izabere ručno.
- Tačna vrednost S/N može da se predvidi čak i ako na hromatogramu ne postoje oblasti bez vršnih vrednosti.

- Osnovna linija, a samim tim i šum, procenjuje se blizu vršne vrednosti od interesa. Ovo može veoma da utiče na prikazanu vrednost S/N, pošto izabrana pozadinska oblast za uobičajeni pristup može biti sa mnogo manje šuma od pozadine blizu vršne vrednosti. Kao što je prethodno opisano, vrednost S/N koja je izračunata pomoću pristupa **relativnog šuma** može da pruži manje vrednosti od uobičajenog pristupa. Međutim, ove vrednosti su preciznije i upotrebljivije. Pogledajte [sliku D-4](#).

Da biste prikazali kolonu **Signal / Noise** u tabeli **Results Table**, pogledajte [Izmena kolona prikazanih u tabeli „Results Table“ na stranici 92](#).

Napomena o odnosu signala i šuma pri korišćenju algoritma integracije SignalFinder

Pošto SignalFinder™ izračunava odnos signala i šuma preciznije (i prema tome preciznije predviđa CV-e); ako se koristi pristup 1-sigma signal-šum, razmotrite smanjenje minimalne prihvatljive vrednosti odnosa signala i šuma u bilo kom standardnom operativnom postupku (SOP) na osnovu empirijskih podataka iz laboratorije.

Softverske ikone

E

U svakom trenutku je aktivno samo jedno okno. Aktivna okna imaju narandžasti okvir i korisnik može da aktivira okno tako što će kliknuti bilo gde unutar njega. Mnoge komande menija se odnose na aktivno okno.

Ikone na traci sa alatkama koje su opisane u ovom odeljku se pojavljuju u traci sa alatkama koja je specifična za sve tipove okna. Dostupne su, takođe, dodatne ikone koje su specifične za svaki pojedinačni tip okna.

Tabela E-1 Ikone na traci sa alatkama









Ikona	Naziv	Opis
	New Results Table	Otvora čarobnjak New Results Table wizard .
	Open	Otvora tabelu Results Table .
	Save	Čuva sve datoteke koje su otvorene.
	Select Analyst Project	Bira folder projekta.
	Screen Lock	Zaključava ekran. Ova funkcija je dostupna samo kada je softver Analyst [®] MD u režimu „Mixed“ i kada je opcija za zaključavanje ekrana omogućena.
	Show Internal Standard with Analyte	Prikazuje redove u tabeli Results Table i za trenutno izabrani analit i za odgovarajući interni standard. Kada je ova opcija izabrana, korisnik može da klikne na naziv analita i da ga pregleda sa internim standardom. To je isto kao kada se klikne na analit a potom klikne na interni standard uz pritisnut taster Ctrl (tako da budu oba izabrana).
	Find Component or Group	Bira stavke u listi koje odgovaraju određenom tekstu.
	Arranging Panes	Menja relativne položaje okna. Kliknite na ikonu u jednom oknu, a zatim je prevucite u gornji, donji, levi ili desni deo drugog okna. U zavisnosti od toga gde se kursor otpusti, prvo okno menja položaj u odnosu na drugo. Dok se kursor prevlači, jedna strana drugog okna se naznačava crvenom bojom da bi se pokazalo gde će prvo okno biti prevučeno.

Tabela E-1 Ikone na traci sa alatcima (nastavak)





Ikona	Naziv	Opis
	Delete Pane	Briše okno. Ako se tabela Results Table obriše, onda se i sva povezana okna (Peak Review i Calibration) takođe brišu i ceo prozor se zatvara.
	Toggles tab mode	Maksimalno uvećava okno da bi se popunio ceo prozor (ili obrnuto). Ovo je korisno ako postoji više okana u prozoru da bi korisnik privremeno mogao da se fokusira na jedno. U uvećanom režimu, na vrhu prozora se za svako okno pojavljuje zasebna kartica. Prikaz se sa okna na okno prebacuje klikom na odgovarajuću karticu. Iz uvećanog režima vratite se na originalni prikaz u kojem su prikazana sva okna ponovnim klikom na opciju Zoom Pane . Klikom na ikonu prebacujete prikaz između dva navedena stanja.
	Hide Pane	Sakriva okno tako da druga okna u prozoru popunjavaju dostupan prostor.
	Show Hidden Panes	Prikazuje sva okna koja su prethodno bila sakrivena.

Tabela E-2 Ikone na traci sa alatcima za vršnu vrednost





Ikona	Naziv	Opis
	Display Previous Page	Prikazuje prethodni skup hromatograma. Ovo je jednako pritiskanju tastera sa strelicom nagore ili nalevo ili kliku na gornju strelicu na traci za pomeranje.
	Display Next Page	Prikazuje sledeći skup hromatograma. Ovo je jednako pritiskanju tastera sa strelicom nadole ili nadesno ili kliku na donju strelicu na traci za pomeranje.
	Display Previous Sample	Pomera prikaz unazad u oknu Peak Review . Ovo je jednako klikanju na gornju strelicu na traci za pomeranje dok se ne prikaže prvi uzorak koji se razlikuje od prvog trenutnog vidljivog hromatograma.
	Display Next Sample	Pomera prikaz na sledeći uzorak.

Tabela E-2 Ikone na traci sa alatkama za vršnu vrednost (nastavak)







Ikona	Naziv	Opis
	Starts Slide Show Peak Review mode	Pokreće prikazivanje slajdova. Prilikom prve upotrebe otvara se dijalog Slide Show Options . Podesite vreme odlaganja u sekundama između vršnih vrednosti. Da biste sprečili da se dijalog ponovo otvori, izaberite polje za potvrdu Only show this dialog again if the shift key is down . Kliknite bilo gde u oknu Peak Review da biste zaustavili prikazivanje slajdova.
	Peak Magnifier	Uvećava izabranu vršnu vrednost.
	Peak Demagnifier	Vraća uvećanu vršnu vrednost na originalnu veličinu.
	Podešavanje vršne vrednosti na „Not Found“	<p>Kliknite da naznačite da ne postoji vršna vrednost u aktivnom hromatogramu. U nekim slučajevima kada zapravo ne postoji značajna vršna vrednost, vršne vrednosti sa šumom mogu da se integrišu i prijave. Kliknite na ovu ikonu da biste zanemarili ovo ponašanje. Oblast vršne vrednosti se prikazuje u tabeli Results Table kao nedostupna.</p> <p>Nakon što korisnik označi vršnu vrednost opcijom Not Found, parametri za pronalaženje vršne vrednosti sa leve strane okna nisu dostupni za hromatogram, jer se ne koriste. Kliknite ponovo na ikonu da biste se vratili na automatski režim.</p>
	Enable Manual Integration Mode	<p>Kliknite da biste pristupili režimu ručne integracije. Kada je softver u režimu ručne integracije, prevucite mišem u grafikonu hromatograma da biste naznačili tačnu oblast za integraciju. Integracija počinje od (vreme, intenzitet) tačke u kojoj se klikne na kursor i nastavlja se do tačke u kojoj se kursor otpusti. Ponovo kliknite na ikonu da izađete iz režima ručne integracije.</p> <p>Nakon što korisnik ručno integriše vršnu vrednost, parametri za pronalaženje vršne vrednosti sa leve strane okna nisu dostupni za hromatogram, jer se ne koriste. Kliknite ponovo na ikonu da biste se vratili na automatski režim.</p>
	Recalculate Peak Model	Ponovo izračunava model vršne vrednosti koristeći aktivni hromatogram i primenjuje ga na taj hromatogram (samo algoritam integracije SignalFinder™).

Tabela E-3 Ikone na traci sa alatkama za kalibraciju

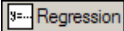
Ikona	Naziv	Opis
	Edit Regression and Weighting	Koristi se da se promene parametri kalibracije. To uključuje i stvarni parametar koji se koristi za regresiju (oblast ili visina), kao i tip regresije i merenje težine. Pogledajte Jednačine regresije na stranici 129 .

Tabela E-4 Ikone na traci sa alatkama za statistiku



Ikona	Naziv	Opis
	Remove Trailing Index from Sample Name	Tabela Statistics Table se može urediti tako da se uzorci (za dati analit) grupišu prema stvarnoj koncentraciji ili prema nazivu uzorka. Prilikom grupisanja prema nazivu uzorka, opcija Remove Trailing Index from Sample Name kontroliše da li nazivi uzorka moraju biti tačno upareni kako bi bili grupisani ili da li treba ukloniti prateći numerički indeks iza crtice (-). Na primer, dva uzorka sa nazivima Sample 1 - 001 i Sample 1 - 002 bi bila grupisana zajedno ako bi ova opcija bila izabrana, ali ne drugačije.
	Sample Grouping	<p>Stavke na ovoj listi određuju kako uzorak za dati analit treba grupisati za izračunavanje statistike. Dostupne su sledeće opcije za izbor:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Group by Concentration for Standards: uzorci tipa Standard se grupišu prema stvarnoj koncentraciji. • Group by Concentration for QCs: uzorci tipa Quality Control se grupišu prema stvarnoj koncentraciji. • Group by Sample Name for Standards: ponovljeni uzorci tipa Standard se grupišu prema polju Sample Name. Kao što je prethodno opisano, ako se opcija Remove Trailing Index from Sample Name ne koristi, nazivi uzoraka moraju biti tačno upareni. Inače, nazivi se mogu razlikovati po pratećem broju (iza crtice). • Group by Sample Name for QCs: slično prethodnoj opciji, osim što se koriste samo uzorci tipa Quality Control. • Group by Sample Name for All Samples: slično prethodnoj opciji, osim što se koriste svi uzorci.

Tabela E-4 Ikone na traci sa alatkama za statistiku (nastavak)


Ikona	Naziv	Opis
	Metric	<p>Stavke na ovoj listi određuju stvarnu metriku koja se koristi za izračunavanje statistike. Dostupne su sledeće opcije za izbor:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Calculated Concentration: koristi se polje Calculated Concentration tabele Results Table. • Area: koristi se polje Area tabele Results Table. • Height: koristi se polje Height tabele Results Table. • Calibration Y-Value: koristi se parametar regresije koji je zadat za analit. Ovo je ili opcija Area ili opcija Height za analit koji nema odgovarajući interni standard ili opcija Area Ratio ili opcija Height Ratio za analit koji koristi interni standard.

Tabela E-5 Ikone na traci sa alatkama tabele „Results Table“






Ikona	Kratak opis alatke	Opis
	Displays the peak review	Prikazuje okno Peak Review tako da se kvalitet integracija vršnih vrednosti može proveriti i po potrebi izmeniti.
	Displays the side by side sample review	Prikazuje dve liste uzoraka tako da korisnici mogu da izaberu do šest uzoraka za upoređivanje odgovora vršnih vrednosti preko uzoraka.
	Displays the calibration curve	Prikazuje kalibracionu krivu (ovo je primenljivo samo ako se koriste uzorci tipa Standard poznate koncentracije). Ovo okno omogućava korisniku da pregleda kalibraciju i podesi tip regresije i merenje težine.
	Creates a metric plot	Prikazuje metrički grafikon za trenutno izabranu kolonu ili kolone. Ovi grafikoni mogu biti veoma korisni za pronalaženje odstupanja. Meni desno od dugmeta izlistava sva sačuvana podešavanja grafikona.
	Displays the statistics pane	Prikazuje okno Statistics . Ova tabela prikazuje prosečnu izračunatu koncentraciju, standardno odstupanje i CV za svaki nivo koncentracije.

Tabela E-5 Ikone na traci sa alatkama tabele „Results Table“ (nastavak)




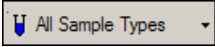






Ikona	Kratak opis alatke	Opis
	Sort selected column from smallest to largest	Sortira tabelu Results Table tako da su vrednosti u izabranoj koloni prikazane po rastućem redosledu. Ova ikona je dostupna samo nakon što se klikne na naslov kolone.
	Sort selected column from largest to smallest	Sortira tabelu Results Table tako da su vrednosti u izabranoj koloni prikazane po opadajućem redosledu. Ova ikona je dostupna samo nakon što se klikne na naslov kolone.
	Removes any previous sorting	Ako je tabela sortirana, vraća tabelu Results Table u podrazumevani redosled.
	Shows only the selected sample type(s)	Filtrira tabelu Results Table tako da su vidljivi samo uzorci određenog tipa. Ovo je korisno samo ako postoje uzorci tipa Standard poznate koncentracije i ako nisu svi uzorci tipa Unknowns .
	Hide selected row(s)	Sakriva izabrane redove u tabeli Results Table . Izaberite redove koje želite da sakrijete, a zatim kliknite na ikonu. Pošto se okno Peak Review sinhronizuje sa tabelom Results Table , sakrivanje redova za vršne vrednosti koje ne treba revidirati ubrzava proces pregleda. Na primer, korisnik može da sortira tabelu prema koloni Quality i sakrije sve redove u kojima je kvalitet veći od određene vrednosti (na primer 0,8). Tabela se zatim može sortirati prema koloni Region Height i svim redovima sa sakrivenom malom vrednošću (da biste sakrili redove za koje vršna vrednost definitivno nije prisutna). Rezultat je da su vidljive samo vršne vrednosti malog kvaliteta, ali su to one za koje je vršna vrednost zaista prisutna. Korisnik zatim može proći kroz ove vidljive redove iz okna Peak Review za kraće vreme nego što bi mu trebalo da pregleda sve moguće vršne vrednosti.
	Show previously hidden row(s)	Prikazuje sve redove. Prikazani redovi mogu i dalje biti ograničeni filterom Sample Type Filter i odabirom opcije Components & Groups List .
	Show only outliers	Prikazuje redove koji sadrže odstupanja.

Tabela E-5 Ikone na traci sa alatkama tabele „Results Table“ (nastavak)

Ikona	Kratak opis alatke	Opis
	Go to next outlier	Prelazi na sledeće odstupanje u tabeli Results Table .
	Lock and Save	Zaključava tabelu Results Table nakon njenog čuvanja. Promene u tabeli Results Table neće biti sačuvane osim ako datoteka nije otključana.
	Review and Save	Kliknite da biste sačuvali tabelu Results Table nakon njenog pregleda. Ikona nije dostupna ako je tabela Results Table samo za čitanje.

MultiQuant™ MD – pristup

F

Napomena: Kada softver MultiQuant™ MD deinstalira, bezbednosne stavke softvera MultiQuant™ MD u softveru Analyst® MD ostaju. Bezbednosne dozvole mogu se naći u kartici **Roles** u dijalogu **Security Configuration**.

Prethodno postavljen pristup	Opis
Create session file	Omogućava korisnicima da kreiraju tabelu Results Table .
Create quantitation method	Omogućava korisnicima da kreiraju metode kvantifikacije.
Modify quantitation method files	Omogućava korisnicima da menjaju metode kvantifikacije koje se nalaze u folderu Quantitation Methods u folderu Analyst Data .
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Omogućava korisnicima da izvezu ili kreiraju izveštaje otključanih tabela Results Tables .
Replace existing Results Table when saved	Omogućava korisnicima da ažuriraju postojeće tabele Results Tables , ali im ne dozvoljava da kreiraju novu tabelu Results Table koristeći postojeći naziv tabele Results Table . Na primer, ako je kreirana tabela Results Table sa nazivom RT1, onda korisnici mogu da je ažuriraju, ali ne mogu da kreiraju novu tabelu Results Table koristeći naziv RT1. Korisnici ne mogu da daju naziv tabeli Results Table bez naziva, koristeći naziv postojeće tabele Results Table .
Change default quantitation method integration algorithm	U dijalogu Integration Default omogućava korisnicima da menjaju algoritam. Kliknite na Edit > Project Integration Defaults .
Change default quantitation method integration parameters	U dijalogu Integration Default omogućava korisnicima da menjaju podrazumevane parametre algoritma. Kliknite na Edit > Project Integration Defaults .
Omogućavanje upozorenja na izmenjenu vršnu vrednost projekta	Omogućava korisnicima da aktiviraju ili deaktiviraju oznaku koja uključuje opciju Project Modified Peak Warning u meniju Edit .
Omogućavanje podešavanja bezbednog izvoza projekta	Ukoliko je ova opcija omogućena, onda će podaci u tekstualnoj datoteci biti šifrovani tokom izvoza. Podesite lozinku da biste omogućili šifrovanje.

Prethodno postavljen pristup	Opis
Add samples to Results Table	Omogućava korisnicima da dodaju uzorke. Kliknite na Process > Add Samples .
Remove samples from Results Table	Omogućava korisnicima da uklone izabrane uzorke. Kliknite na Process > Remove Selected Samples .
Export, import, or remove External Calibration	Omogućava korisnicima da izvezu, uvezu ili uklone eksternu kalibraciju koristeći jednu od sledećih opcija: <ul style="list-style-type: none"> Kliknite na Process > Export Calibration. Kliknite na Process > Import External Calibration. Kliknite na Process > Remove External Calibration.
Change Audit Map settings	Omogućava korisnicima da izmene mapu revizije projekta i da izmene definiciju mape revizije. Kliknite na Audit Trail > Audit Map Manager .
Modify Sample Name	Omogućava korisnicima da izmene naziv uzorka u tabeli Results Table .
Modify Sample Type	Omogućava korisnicima da izmene tip uzorka (Standard , QC , Unknown) u tabeli Results Table .
Modify Sample ID	Omogućava korisnicima da izmene ID uzorka u tabeli Results Table .
Modify Actual Concentration	Omogućava korisnicima da izmene stvarnu koncentraciju Standard i QC u tabeli Results Table .
Modify Dilution Factor	Omogućava korisnicima da izmene faktor razblaživanja u tabeli „Results Table“.
Modify Comment Fields	Omogućava korisnicima da izmene polja sa komentarima: <ul style="list-style-type: none"> Component Comment IS Comment IS Peak Comment Peak Comment Sample Comments
Allow manual integration	Omogućava korisnicima da omoguće režim ručne integracije u oknu Peak Review . Ukoliko je ova dozvola omogućena, onda dozvola Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram takođe mora da bude omogućena. Komanda Allow manual integration može da bude onemogućena ukoliko je dozvola Modify Results Table integration parameters omogućena.

Prethodno postavljen pristup	Opis
Allow set to Peak Not Found	Omogućava korisnicima da koriste opciju Set peak to not found . Da biste to obavili, kliknite desnim tasterom miša u oknu Peak Review .
Include or exclude a peak from the Results Table	Omogućava korisnicima da uključe ili isključe vršne vrednosti iz tabela Results Tables , Statistics Tables i kalibracionih krivih.
Modify regression settings for fit and weight	Omogućava korisnicima da izmene podešavanja regresije u oknu kalibracione krive kada koriste funkciju Modify Results Table Method i kada koriste čarobnjak New Quantitation Method wizard .
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Omogućava korisnicima da izmene pojedinačni hromatogram.
Modify quantitation method for the Results Table component	Omogućava korisnicima da primene izmene iz pojedinačnog hromatograma na komponentu. Korisnici moraju da imaju ovu dozvolu i dozvolu Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram ako žele da ažuriraju, a zatim da primene pojedinačne izmene na komponente.
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Omogućava korisnicima da kreiraju i koriste metričke grafikone u tabeli Results Table (Metric Plot dugme je omogućeno) ili da izvezu metričke grafikone. Kliknite na File > Export .
Set Peak Review Title Format	Omogućava korisnicima da izmene Peak Review Title Format in Peak Review . Da biste to obavili, kliknite desnim tasterom miša u oknu Peak Review .
Add, Rename, or Modify custom column	Omogućava korisnicima da dodaju, promene naziv ili izmene pojedinačnu kolonu. Čak i bez ove dozvole, korisnici mogu da izvršavaju upite koji će automatski kreirati prilagođene kolone. Ukoliko je ova dozvola onemogućena, onda dozvola Remove custom column takođe mora da bude onemogućena. Dozvola Remove custom column može da se onemogući ukoliko je dozvola Add, Rename, or Modify custom column omogućena.
Remove custom column	Omogućava korisnicima da obrišu prilagođenu kolonu iz tabele Results Table .
Modify Results Table column settings	Omogućava korisnicima da izmene Results Table podešavanja kolone unutar tabele Results Table .
Save Column Settings as Project Default	Omogućava korisnicima da primene podešavanja kolone na projekat.

Prethodno postavljen pristup	Opis
Lock and save Results Table	Omogućava korisnicima da zaključaju i sačuvaju tabelu Results Table .
Unlock and save Results Table	Omogućava korisnicima da otključaju i sačuvaju tabelu Results Table .
Review and save Results Table	Omogućava korisnicima da pregledaju i sačuvaju tabelu Results Table .
Edit Report Template	Omogućava korisnicima da urede šablone izveštaja.
Transfer to LIMS	Omogućava korisnicima da prenesu sačuvane i zaključane tabele Results Tables u LIMS. Događaj se zapisuje u trag revizije.

Podešavanja bezbednosti

tabelu F-1 sadrži preporučena podešavanja bezbednosti za korisničke uloge.

Tabela F-1 Podešavanja bezbednosti na osnovu korisničkih uloga

Podešavanje bezbednosti	Administrator	Supervizor	Analitičar	Revizor
Kreiranje datoteke sesije	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Kreiranje metoda kvantifikacije	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Izmena datoteka metoda kvantifikacije	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Dozvoljen izvoz i kreiranje izveštaja na osnovu otključane tabele „Results Table“	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Zamena postojeće tabele „Results Table“ prilikom čuvanja	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Ima pristup

Tabela F-1 Podešavanja bezbednosti na osnovu korisničkih uloga (nastavak)

Podešavanje bezbednosti	Administrator	Supervizor	Analitičar	Revizor
Promena algoritma integracije podrazumevanog metoda kvantifikacije	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Promena parametara integracije podrazumevanog metoda kvantifikacije	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Omogućavanje upozorenja na izmenjenu vršnu vrednost projekta	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup	Nema pristup
Omogućavanje podešavanja bezbednog izvoza projekta	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup	Nema pristup
Dodavanje uzoraka tabeli „Results Table“	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Uklanjanje uzoraka iz tabele „Results Table“	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Promena naziva uzorka	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Promena tipa uzorka	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Promena ID oznake uzorka	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Promena stvarne koncentracije	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Promena faktora razblaživanja	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Promena polja sa komentarima	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup

Tabela F-1 Podešavanja bezbednosti na osnovu korisničkih uloga (nastavak)

Podešavanje bezbednosti	Administrator	Supervizor	Analitičar	Revizor
Dozvoljavanje ručne integracije	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Dozvoljavanje podešavanja na „Peak Not Found“	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Uključivanje ili isključivanje vršne vrednosti iz tabele „Results Table“	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Izmena podešavanja regresije za odgovaranje i težinu	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Izmena parametara integracije tabele „Results Table“ za pojedinačni hromatogram	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Izmena metoda kvantifikacije za komponentu tabele „Results Table“	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup
Kreiranje, upotreba ili izvoz metričkih grafikona u tabelama „Results Tables“	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup
Podešavanje formata naslova pregleda vršne vrednosti	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup	Nema pristup
Dodavanje, promena imena ili izmena prilagođene kolone	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Uklanjanje prilagođene kolone	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup

Tabela F-1 Podešavanja bezbednosti na osnovu korisničkih uloga (nastavak)

Podešavanje bezbednosti	Administrator	Supervizor	Analitičar	Revizor
Izmena podešavanja kolone tabele „Results Table“	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Čuvanje podešavanja kolone kao podrazumevanih podešavanja projekta	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Zaključavanje i čuvanje tabele „Results Table“	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup	Ima pristup
Otključavanje i čuvanje tabele „Results Table“	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Pregled i čuvanje tabele „Results Table“	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Ima pristup
Izmena šablona izveštaja	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Prenos u LIMS (takođe kontroliše i pokretanje prenosa u Watson LIMS)	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Ima pristup
Izvoz, uvoz ili uklanjanje eksterne kalibracije	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup
Izmena podešavanja mape revizije	Ima pristup	Ima pristup	Nema pristup	Nema pristup

Podaci o revizijama

Revizija	Razlog izmene	Datum
A	Prvo izdanje dokumenta.	Septembar 2013.
B	Ažuriran odeljak menija „File“. Ažuriran odeljak menija „Audit Trail“. Ažurirana tabela „Results Table Columns“. Ažuriran odeljak „Reports“.	Januar 2015.
C	Logotip AB SCIEX na naslovnoj strani izmenjen je u SCIEX Diagnostics. Stranica o autorskim pravima je ažurirana, a AB Sciex je izmenjeno u SCIEX gde je to bilo potrebno. U poglavlje „Predstavljanje softvera“ dodat je Windows 10. Ažuriran je odeljak „Kontaktirajte nas“. Naslov teme „Upravljač „Audit Map Manager““ izmenjen je u „O mapama revizije“. Ažuriran je opis opcije menija Set Last Component of Group as IS u odeljku „Podmeni Interni standardi“. U odeljku „Dijalog Update Retention Time“, „parametar procenta ukupne površine“ zamenjen je sa „vreme zadržavanja“. Ažuriran je opis stavke Expected RT u odeljku „SignalFinder Integration Algorithm Parameters“. U odeljak „Kreiranje izveštaja“ dodat je Windows 10. Ažuriran je sadržaj odeljka „Oznake predložka izveštaja“. Izmenjen je snimak prikaza na ekranu na slici 7-3. Na sadržaj su primenjeni novi predlošci, što je dovelo do izvesnih izmena samog sadržaja. Uklonjena su sva spominjanja operativnog sistema Windows XP.	Jun 2017.