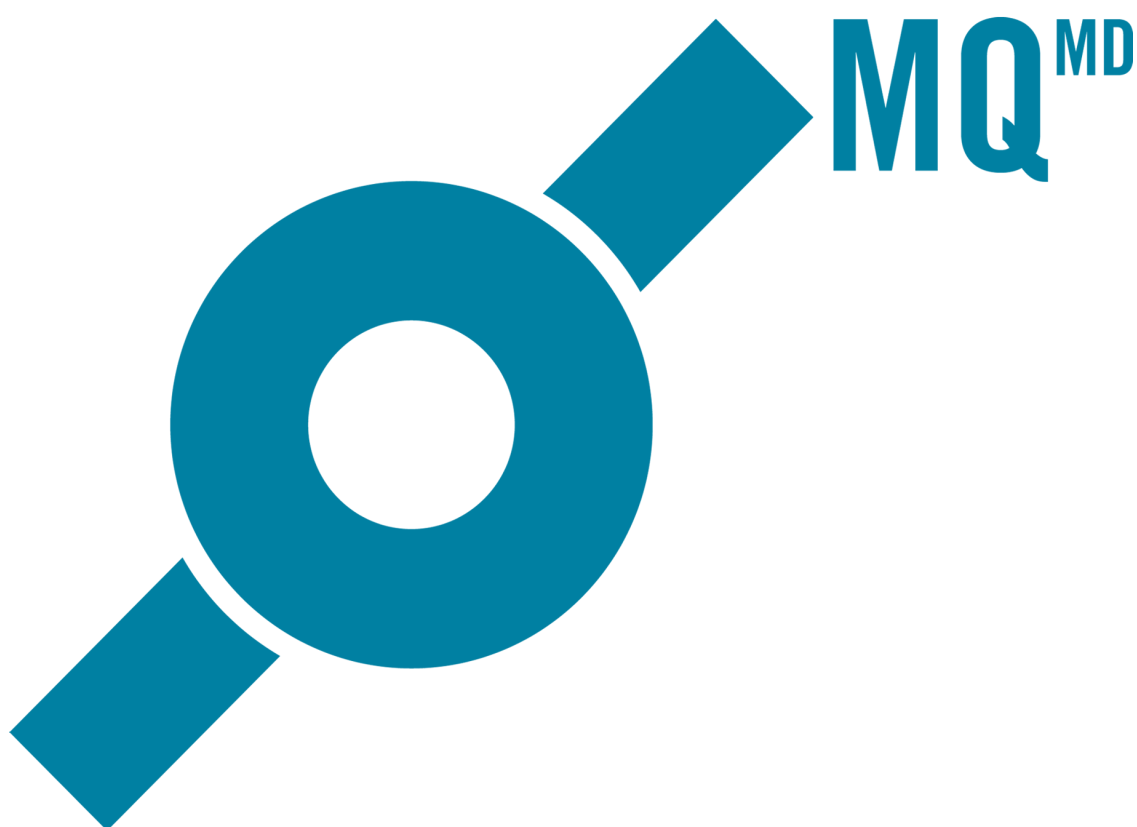

MultiQuant™ MD 3.0.3-software

Referencevejledning



Dette dokument leveres til kunder, der har købt SCIEX-udstyr, til brug for driften af dette SCIEX-udstyr. Dette dokument er ophavsretligt beskyttet, og enhver reproduktion af dette dokument eller dele af dette dokument er strengt forbudt, medmindre SCIEX skriftligt har givet tilladelse hertil.

IVD

Software, som kan være beskrevet i dette dokument, leveres i henhold til en licensaftale. Det er ulovligt at kopiere, ændre eller distribuere softwaren på ethvert medium, medmindre det specifikt er tilladt i licensaftalen. Desuden kan licensaftalen forbyde, at softwaren demonteres, omvendt manipuleres eller dekompileres til ethvert formål. Garantier er som anført i aftalen.

I dele af dette dokument kan der være henvisninger til andre producenter og/eller deres produkter, som kan indeholde dele, hvis navne er registreret som varemærker og/eller fungerer som varemærker tilhørende deres respektive ejere. Enhver sådan brug har kun til formål at betegne disse producenters produkter som leveret af SCIEX til indbygning i dets udstyr og indebærer ikke nogen ret og/eller licens til at bruge eller tillade andre at bruge sådanne producenters og/eller deres produktnavne som varemærker.

CE

SCIEX' garantier er begrænset til de udtrykkelige garantier, der gives på tidspunktet for salg eller licens af dets produkter, og er SCIEX' eneste og eksklusive erklæringer, garantier og forpligtelser. SCIEX giver ingen andre garantier af nogen art, hverken udtrykkelige eller stiltiende, herunder uden begrænsning garantier for salgbarhed eller egnethed til et bestemt formål, uanset om de følger af en lov eller på anden måde af loven eller af en handelspraksis eller handelsbrug, som alle udtrykkeligt fraskrives, og påtager sig intet ansvar eller eventualanvar, herunder indirekte eller følgeskader, for købers brug af produktet eller for eventuelle negative omstændigheder, der måtte opstå som følge heraf.

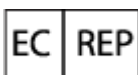
(GEN-IDV-09-10816-D)

Til *in vitro*-diagnostisk brug. Produkt(er) er ikke tilgængeligt/tilgængelige i alle lande. Kontakt din lokale salgsrepræsentant, eller se sciex.com/diagnostics for yderligere oplysninger.

Mærker og/eller registrerede varemærker, der er nævnt heri, herunder tilknyttede logoer, tilhører AB Sciex Pte. Ltd. eller deres respektive ejere i USA og/eller visse andre lande (se sciex.com/trademarks).

AB Sciex™ anvendes under licens.

© 2017 DH Tech. Dev. Pte. Ltd.



Leica Microsystems CMS GmbH
Ernst-Leitz-Strasse 17-37
35578 Wetzlar
Germany



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

Introduktion til softwaren

1

Dette dokument beskriver den funktionalitet, der er tilgængelig i MultiQuant™ MD-softwaren.

Adgang til softwaren er baseret på den rolle, brugeren er blevet tildelt i Analyst® MD-softwaren. Sørg for, at hver bruger har fået tildelt den korrekte adgang til softwaren.

Kun den engelske version af følgende Microsoft-operativsystemer understøttes:

- Windows 7 (32-bit og 64-bit) med SP1
- Windows 10

FORSIGTIG: Formatet for tal, valutaer, datoer og tid skal angives til engelsk (USA). Hvis formatet indstilles til en anden værdi, kan det resultere i fejlagtige data.

MultiQuant™ MD-software med revisionsspor og sikkerhedsfunktioner kræver, at den fulde licens og Analyst® MD

De kontrollerede måder at udlæse data fra softwaren på er eksport af resultattabeller, overførsel til LIS og rapportering. De andre kilder til outputdata, f.eks. kopiering og indsætning fra resultattabeller, er ikke kontrolleret. Brugere bør ikke bruge disse ukontrollerede outputmetoder til lovgivningsmæssige formål.

Bemærk: MultiQuant™ MD-softwaren bruger information om skærmlås fra Analyst® MD-softwaren. Der kræves ingen yderligere opsætning af MultiQuant™ MD-softwaren.

Bemærk: Fil- og mappestrukturen skal fastholdes for at få vist kromatogrammer. Hvis data skal flyttes, skal du flytte hele projektet og sørge for at fastholde filstrukturen.

Softwarehjælp

Softwaren har værktøjstips og fejlmeddelelser, der giver yderligere oplysninger om softwarefunktionaliteten.

- Hvis et felt ikke er tilgængeligt, skal du placere cursoren over feltet for at få vist værktøjstips, der forklarer, hvorfor funktionen ikke er tilgængelig. Yderligere oplysninger omfatter, hvordan man aktiverer feltet, eller hvilken sikkerhedsindstilling der kræves for at aktivere feltet.
- Fejlmeddelelser omfatter oplysninger om de sikkerhedsindstillinger, der kræves for at bruge funktionaliteten.

Filtyper

Tabel 1-1: Softwarefiltyper

Filtype	Beskrivelse
*.qsession	Resultattabel i MultiQuant-softwaren. Indeholder data om kvantificeringsrevisionsspor.
*.qmethod	Kvantificeringsmetode i MultiQuant-softwaren.
*.qmap	Revisionskort i MultiQuant-softwaren.
*.mqcal	Ekstern kalibreringsfil.
*.cset	Kolonneindstillingsfil.

Kontakt os

Support til SCIEX

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

Kundetræning

- I Nordamerika: NA.CustomerTraining@sciex.com
- I Europa: Europe.CustomerTraining@sciex.com
- Uden for EU og Nordamerika kan du besøge sciex.com/education for at få kontaktoplysninger.

Onlinelæringscenter

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

Den seneste vejledning om cybersikkerhed for SCIEX-produkter findes på sciex.com/productsecurity.

Teknisk support

SCIEX og dets repræsentanter har et personale af fuldt uddannede service- og tekniske specialister, der er placeret over hele verden. De kan besvare spørgsmål om systemet eller eventuelle tekniske problemer, der måtte opstå. For at få flere oplysninger kan du besøge SCIEX' hjemmeside på sciex.com.

Tabel 2-1: Indstillinger for menuen File

Menupunkt	Beskrivelse
New Results Table	Kvantificerer et datasæt og opretter derefter en resultattabel. Vælg de datafiler, der skal behandles, samt kvantificeringsmetoden, der skal anvendes. Se Dialogboks for resultattabel på side 38 .
New Quantitation Method	Der oprettes en tom kvantificeringsmetodeeditor, når prøven er valgt. Typisk opretter brugeren en metode som en del af guiden Ny resultattabel. Denne kommando er imidlertid nyttig, hvis brugeren ønsker at oprette en metode, men ikke ønsker straks at anvende den på en samling af prøver, der opretter en resultattabel. <ul style="list-style-type: none"> • Navigationsruden indeholder undermapper, wiff-filer og prøver, der er tilgængelige i mappen Data for det valgte projekt. • Udvid individuelle mapper for at se eventuelle undermapper eller wiff-filer. Udvid wiff-filen for at vise de tilgængelige prøver.
Open Results Table	Åbner en tidligere gemt resultattabel. Når kommandoen er valgt, åbnes standarddialogboksen Open . Se Resultattabeller på side 32 .
Open Quantitation Method	Åbner en tidligere gemt kvantificeringsmetode. Når kommandoen er valgt, åbnes standarddialogboksen Open . Se Redigeringsprogram til kvantificeringsmetode på side 78 .
Save	Bruges til at gemme den aktive resultattabel eller kvantificeringsmetodeeditor til en fil. Hvis resultattabellen eller kvantificeringsmetodeeditoren aldrig er blevet gemt, bliver brugeren bedt om filnavnet. Ellers overskrives den tidligere version.
Save As	Bruges til at gemme den aktive resultattabel eller kvantificeringsmetodeeditor til en ny fil.
Recent Results Table	Indeholder undermenelementer for hver nylig anvendt resultattabel. Vælg ét af elementerne for at åbne den tilsvarende fil.
Recent Quantitation Methods	Indeholder undermenelementer for hver nylig anvendt kvantificeringsmetode. Vælg ét af elementerne for at åbne den tilsvarende fil.

Tabel 2-1: Indstillinger for menuen File (fortsat)

Menupunkt	Beskrivelse
Import	Opretter en ny kvantificeringsmetode fra en tekstfil. Typisk opretter brugeren en metode manuelt ved hjælp af kommandoen New Quantitation Method (se Redigeringsprogram til kvantificeringsmetode på side 78) eller som en del af processen med at oprette en ny resultattabel (se Resultattabeller på side 32). Denne kommando er nyttig, hvis brugeren ønsker at oprette eller ændre en kvantificeringsmetode. I dette tilfælde skal du oprette en metode manuelt og derefter bruge kommandoen Quantitation Method as Text .
Export	Indeholder kommandoer til eksport kvantificeringsmetoder som .qmethod eller .txt filer. Se Undermenuen Export på side 7 . De kontrollerede måder at udlæse data fra softwaren er at eksportere resultattabeller, overføre til LIMS, og rapportering. De andre kilder til outputdata såsom kopiering og indsætning fra resultattabeller er ikke kontrolleret. Brugere bør ikke bruge disse ukontrollerede outputmetoder til lovgivningsmæssige formål.
Transfer to LIMS	En LIMS-licensfil er påkrævet for at aktivere funktionen. Se Transfer to LIMS på side 10 .
Export and Save Results Table	Eksport af resultattabeller er én af de kontrollerede metoder til dataoutput.
Create Report and Save Results Table	Opretter en rapport i Microsoft Word ved hjælp af Reporter-softwaren. Se Rapporter på side 128 . Hvis der oprettes en brugerdefineret skabelon, er brugeren ansvarlig for at validere skabelonen. Brugeren kan redigere talformatet i rapportskabeloneditoren. Hvis talformatet ikke er angivet i skabelonen, anvendes formatet i Results Table Column Setting i rapporten.
Exit	Afslutter programmet. Brugeren bliver bedt om at gemme data, der ikke er gemt.

Import af en kvantificeringsmetode

1. Klik på **File > Import > Quantitation Method from Text**.
2. Vælg tekstfilen.
3. Vælg en repræsentativ prøve.
Kvantificeringsmetodeeditoren åbnes.
4. Gem metoden i formatet *.qmethod, så den efterfølgende kan bruges til at kvantificere et nyt datasæt.

Undermenuen Export

De kontrollerede måder at udlæse data fra softwaren er at eksportere resultattabeller, overføre til LIMS, og rapportering. De andre kilder til outputdata, f.eks. kopiering og indsætning fra resultattabeller, er ikke kontrolleret. Brugere bør ikke bruge disse ukontrollerede outputmetoder til lovgivningsmæssige formål.

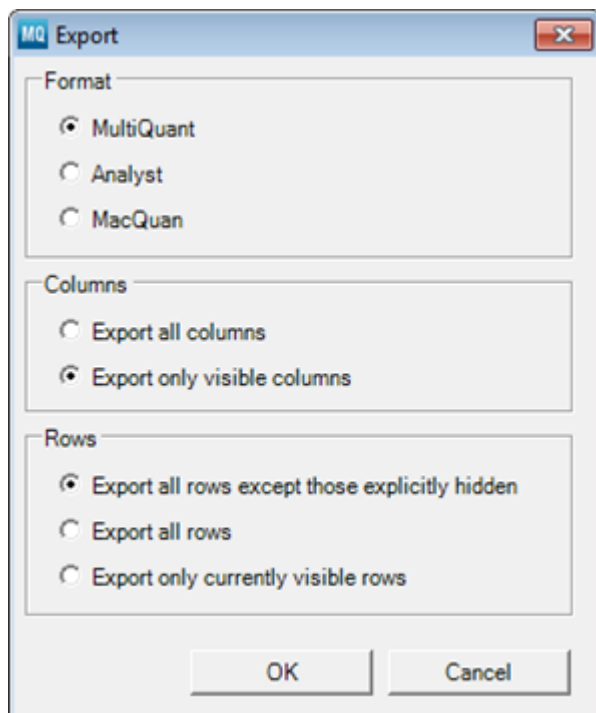
Tabel 2-2: Indstillinger i menuen Export

Menupunkt	Beskrivelse
Results Table-Metric	Opretter en tabulatorsepareret tekstfil, som indeholder oplysningerne fra den aktive resultattabel. Se Eksport af målesystem for resultattabel på side 9 .
Results Table's Quantitation Method as *.qmethod	Eksporterer kvantificeringsmetoden til en ny fil. Når der oprettes en resultattabel, gemmes en kopi af den kvantificeringsmetode, der anvendes til at generere tabellen, internt i tabellen. Dette er nyttigt, hvis den oprindelige kvantificeringsmetode blev slettet eller ændret, og brugeren ønsker at anvende den oprindelige metode på en ny batch af prøver, der opretter en resultattabel.
Results Table's Quantitation Method as Text	Eksporterer en kopi af denne metode i et tekstformat. Når der oprettes en resultattabel, gemmes en kopi af den kvantificeringsmetode, der anvendes til at generere tabellen, internt i tabellen.
Quantitation Method as Text	Disse filer indeholder en overskriftsrække og en række for hver komponent (analyt eller intern standard). Der er en kolonne for komponentnavnet, masseområdet, hver af integrationsparametrene osv. Overskriftsrækker må ikke ændres, og kolonner bør heller ikke tilføjes eller slettes, hvis kvantificeringsmetoden skal importeres til MultiQuant™ MD MD-softwaren. Hvis overskriftsrækken for en kolonne, der angiver en integrationsparameter, ændres, eller selve kolonnen slettes, anvendes standardværdien som angivet i Brugerintegrationsstandarderne for den pågældende integrationsparameter for alle komponenter. Hvis overskriftsrækken for en anden kolonne ændres eller slettes, importeres metoden ikke. Brugeren skal åbne metoden og bekræfte, at alle nødvendige ændringer er til stede i den importerede kvantificeringsmetode. Se Tabel 2-1 .

Eksport af resultattabeller

Bemærk: Producenten påtager sig intet ansvar eller ingen eventualforpligtelser, herunder indirekte skader eller følgeskader, efter at data er blevet eksporteret fra softwaren. Resultattabellen eksporteres med fuld præcision, uanset talformatet i kolonneindstillingen.

Figur 2-1: Dialogboksen Export



Etiket	Beskrivelse
Format	
MultiQuant	Vælg for at eksportere med fuld præcision. I dette format indeholder tekstfilen en overskriftsrække, der bruger de samme kolonnenavne, som vises i Results Table . Dette er det anbefalede format til at eksportere Results Tables .
Analyst	Vælg at eksportere i den præcision, der er defineret i kolonneindstillingen. Dette format er det samme som eksporteret af Analyst® MD-softwarekvantificeringen Results Tables . Forskellen mellem dette format og det tidligere format er, at kolonneoverskrifterne bruger lidt forskellige navne i nogle tilfælde (for at matche Analyst® MD-softwareformatet), og der er yderligere overskriftsrækker for hver analyt, som beskriver kalibreringen.
MacQuan	Dette format svarer til Analyst® MD-softwaren, bortset fra at kolonneoverskriftsnavnene matcher dem, der bruges af MacQuan-kvantificeringspakken.
Kolonner	
Export all columns	Vælg for at eksportere alle mulige felter, herunder de kolonner der i øjeblikket er skjult i Results Table .

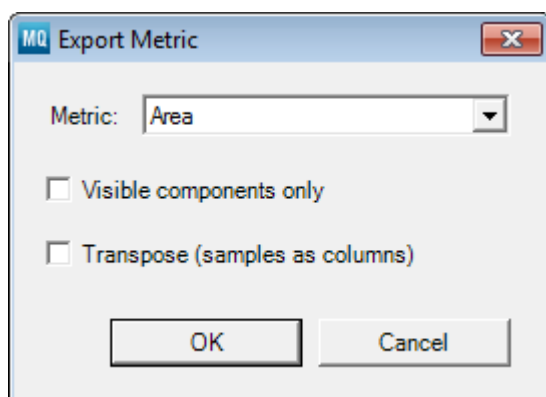
Etiket	Beskrivelse
Export only visible columns	Vælg kun at eksportere de kolonner, der aktuelt vises i Results Table . Brugeren kan også vælge, hvilke kolonner der er synlige ved hjælp af Results Table Column Settings -kommandoen. Se Højrekliksmenu i resultattabellen på side 34 .
Rækker	
Export all rows except those explicitly hidden	Vælg for at eksportere alle rækker, undtagen dem der er skjult på grund af specifik filtrering. Se Softwareikoner på side 151 . Rækker, der er skjult på grund af filtrering efter Sample Type eller Component , eksporteres.
Export all rows	Vælg for at eksportere alle rækker (dvs. alle komponenter for alle prøver).
Export only currently visible rows	Vælg kun at eksportere de rækker, der aktuelt vises i Results Table . Rækker, der er skjult på grund af filtrering efter Sample Type eller Component , medtages ikke.

Eksport af målesystem for resultattabel

Bemærk: Producenten påtager sig intet ansvar eller ingen eventualforpligtelser, herunder indirekte skader eller følgeskader, efter at data er blevet eksporteret fra softwaren. **Results Table** eksporteres med fuld præcision, uanset talformatet i kolonneindstillingen.

Bruges til at oprette en tabulatorsepareret tekstfil, der indeholder oplysningerne fra den aktive resultattabel.

Figur 2-2: Dialogboksen Export Metric



Etiket	Beskrivelse
Metric	Vælg det felt, der skal eksporteres. Se Kolonner i resultattabel på side 49 .

Etiket	Beskrivelse
Visible components only	Hvis denne indstilling er valgt, eksporteres kun de komponenter, for hvilke mindst én tilsvarende række i øjeblikket er synlig i resultattabellen, til filen. Hvis denne indstilling ikke er valgt, eksporteres information for alle komponenter.
Transpose (samples as columns)	Hvis denne indstilling vælges, har den resulterende fil en kolonne for hver prøve og en række for hver komponent (analyt eller intern standard). Hvis denne indstilling ikke vælges, er der en kolonne for hver komponent og en række for hver prøve.

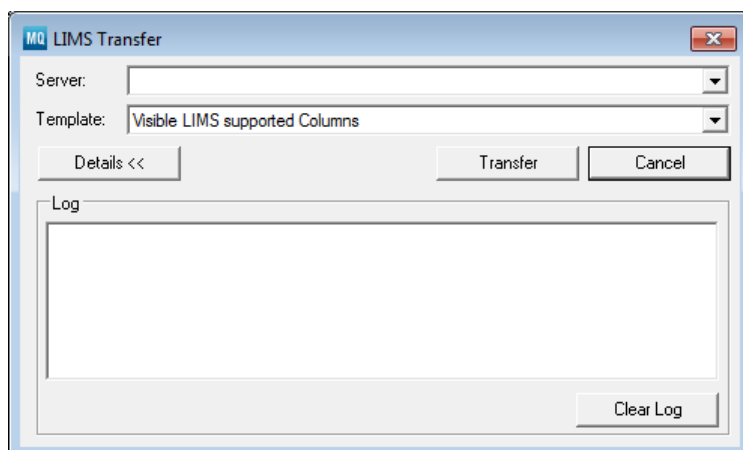
Transfer to LIMS

Denne kommando er kun tilgængelig, når en resultattabel er åben. En LIMS-licensfil er påkrævet for at aktivere funktionen.

De kontrollerede måder at udlæse data fra softwaren er at eksportere resultattabeller, overføre til LIMS, og rapportering. De andre kilder til outputdata, f.eks. kopiering og indsætning fra resultattabeller, er ikke kontrolleret. Brugere bør ikke bruge disse ukontrollerede outputmetoder til lovgivningsmæssige formål.

1. Klik på **Help > Install License** for at aktivere en licens.

Figur 2-3: Dialogboksen LIMS Transfer



2. Indtast servernavnet i feltet **Server** i følgende format: **http:\\server IP address;port number**.
3. Vælg en skabelon på listen **Template**.
4. Klik på **Transfer**.

Tabel 3-1: Indstillinger i menuen Edit

Menupunkt	Beskrivelse
Clear	Rydder den aktuelle markering. Dette gælder, når fanen Components i Quantitation Method Editor har én eller flere valgte rækker.
Copy	Når Results Table er aktiv, kopierer denne kommando den valgte del af tabellen til udklipsholderen. Når Peak Review eller Calibration -plottet er aktivt, kopieres et billede af plottet.
Paste	Når Results Table er aktiv med et redigerbart markeret område, indsætter denne kommando celler eller kolonner fra udklipsholderen.
Copy Entire Table	Når en Results Table eller Statistics Table er aktiv, kopierer denne kommando alle data til udklipsholderen. I tilfælde af en Results Table kopieres kun de aktuelt synlige rækker og kolonner.
Fill Down	Når Results Table er aktiv med et redigerbart markeret område, kopierer denne kommando oplysningerne i den første markerede række til alle efterfølgende markerede rækker.
Select all Rows	Vælger alle rækker i den aktuelt aktive Results Table eller Statistics Table . Dette er nyttigt, hvis brugeren efterfølgende ønsker at anvende en kommando, såsom Copy , der opererer på de valgte rækker.
Modify Results Table Method	<p>Foretager ændringer i den kvantificeringsmetode, der er knyttet til den aktuelt aktive Results Table. Dette er nyttigt, hvis brugeren ønsker at tilføje eller fjerne komponenter. Hvis du kun vil ændre integrationsparametre, skal du bruge Update Quantitation Method for Group. Se Topgennemgang på side 58.</p> <p>Når kommandoen er valgt, åbnes dialogboksen Quantitation Method Editor. Data behandles igen, og Results Table opdateres for at vise dataene. Se Redigeringsprogram til kvantificeringsmetode på side 78 og Dialogbokse for resultattabel på side 38.</p> <p>Genanvendelse af Quantitation Method overskriver alle manuelt modificerede toppe for den angivne komponent og fjerner derefter afkrydsningsfelterne i Modified-kolonnen i resultattabellen.</p>

Tabel 3-1: Indstillinger i menuen Edit (fortsat)

Menupunkt	Beskrivelse
Project Integration Defaults	Angiver standardtopsøgningsparametre, der bruges til at oprette en kvantificeringsmetode. Hvis der er mere end nogle få komponenter, angives standardværdierne baseret på kromatografien, så de ikke behøver at justeres individuelt for hver komponent. Der er dog ingen sæt af parametre, der vil være ideelle for alle komponenter, så det kan være nødvendigt at justere nogle af parametrene individuelt for nogle af komponenterne. Se Parametre for integrationsalgoritme på side 117 .
Project Units & Calibration Defaults	Angiver de standardkoncentrationsenheder og regressionsparametre, der bruges til at oprette en kvantificeringsmetode. Brugeren kan også angive disse parametre, når selve metoden oprettes. Men hvis de samme indstillinger bruges, så er det nemmere at angive standardværdierne efter brug af denne kommando. Se Standardindstillinger for projektenheder og kalibrering på side 14 .
Project Secure Export Settings	Hvis markeret, krypteres data i tekstfilen under eksport. Angiv en adgangskode for at aktivere kryptering. Se Indstillinger for sikker projekteksport på side 14 .
Enable Project Modified Peak Warning	Er som standard ikke valgt. Hvis valgt, når en bruger foretager en ændring af et kromatogram i en Results Table og derefter gemmer ændringerne, åbnes en advarselsmeddelelse, der angiver, at der er foretaget en ændring. Brugeren har mulighed for at fortsætte med at gemme eller vende tilbage til Results Table . Se Modify Results Table Method på side 13 .

Tabel 3-1: Indstillinger i menuen Edit (fortsat)

Menupunkt	Beskrivelse
Cache Chromatograms for Faster Peak Review	<p>Når denne funktion er aktiveret, hver gang et ekstraheret ionkromatogram (XIC) beregnes for en bestemt prøve og komponent, gemmes det til fremtidig brug, så længe den tilhørende resultattabel forbliver åben.</p> <p>Hvis brugeren for eksempel opretter en Results Table, når denne funktion er aktiveret, vises kromatogrammerne i ruden Peak Review hurtigt, da de tidligere har været cachelagret under den indledende integrationsproces for at oprette Results Table og ikke behøver at blive genberegnet fra oplysningerne i wiff-filen. Hvis brugeren åbner en tidligere gemt Results Table, skal de enkelte kromatogrammer beregnes, første gang de vises i ruden Peak Review. Imidlertid vil det være hurtigere at vende tilbage til et bestemt tidligere kromatogram.</p> <p>Der bør være tilstrækkelig computerhukommelse til at cache alle kromatogrammer. For meget store prøvesæt med et stort antal analytter bør denne mulighed dog deaktiveres for at undgå meddelelser om fuld hukommelse.</p>
Cache all Chromatograms Now	<p>Når kommandoen Cache Chromatograms for Faster Peak Review er aktiveret, bruges denne kommando til at beregne og derefter cache alle kromatogrammer for den aktive Results Table. For et stort datasæt kan denne kommando tage noget tid at udføre. Men når den er færdig, er alle kromatogrammer cachelagret, og top gennemgangsprocessen er hurtigere. Kommandoen kan stoppes, hvis det er nødvendigt.</p> <p>Udfør denne operation, hvis der skal gennemgås mange kromatogrammer. Hvis indstillingen Cache Chromatograms for Faster Peak Review oprindeligt var aktiveret, behøver denne handling ikke at blive udført igen efter oprettelse af en Results Table, da kromatogrammerne allerede er cachelagrede. Denne kommando er nyttig efter åbning af en tidligere gemt Results Table.</p>

Modify Results Table Method

Foretager ændringer i den kvantificeringsmetode, der er knyttet til den aktuelt aktive resultattabel. Dette er nyttigt, hvis brugeren ønsker at tilføje eller fjerne komponenter. Brug kommandoen **Update Quantitation Method for Group**, hvis du kun vil ændre integrationsparametre. Se [Opdatering af kvantificeringsmetode for gruppe på side 66](#).

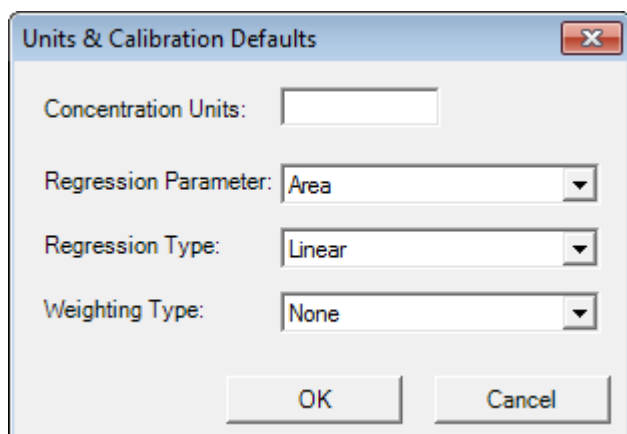
Når kommandoen vælges, åbnes dialogboksen Quantitation Method Editor. Data genbehandles, og resultattabellen opdateres for at vise de nye data. Se [Redigeringsprogram til kvantificeringsmetode på side 78](#).

Genanvendelse af kvantificeringsmetoden overskriver alle manuelt modificerede toppe for den specificerede komponent og fjerner derefter afkrydsningsfelterne i kolonnen **Modified** i **Results Table**.

Standardindstillinger for projektenheder og kalibrering

Indstil **Concentration Units**, **Regression Parameter** (område eller højde), **Regression Type** og **Weighting Type**. De forskellige regressions- og vægtningstyper er beskrevet i [Regressionsligninger på side 123](#).

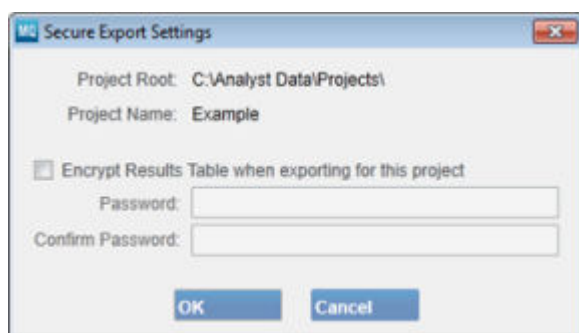
Figur 3-1: Standarder for enheder og kalibrering



Indstillinger for sikker projekteksport

Data i tekstfilen krypteres under eksport. Angiv en adgangskode for at aktivere kryptering. Se [Figur 3-2](#).

Figur 3-2: Dialogboksen Secure Export Settings



Tabel 4-1: Indstillinger i menuen Process

Menupunkt	Beskrivelse
Add Samples	Tilføjer yderligere prøver til en aktuelt aktiv Results Table . Se Vælg prøver på side 38 . Der vises en statuslinje, mens de nye prøver integreres og tilføjes til den eksisterende tabel. Brugeren skal have tilladelsen Add samples to Results Table aktiveret for at udføre denne opgave.
Remove Selected Samples	Fjerner valgte prøver fra en aktuelt aktiv Results Table . Brugeren skal have tilladelsen Fjern prøver fra resultattabellen aktiveret for at udføre denne opgave.
Show Only Outliers	Viser de rækker, der indeholder udsving. Klik på Process > Show Only Outliers . Klik på Process > Show Only Outliers igen for at vise alle rækkerne.
Go to Next Outlier	Går frem til det næste udsving i Results Table . Klik på Process > Go to Next Outlier .
Eksportér kalibrering, og gem resultattabel	Gemmer en kopi af kalibreringsligningen for alle analytter, der er tilknyttet til den aktive Results Table , til en ekstern fil (*.mqcal). Dette gør det muligt at anvende kalibreringen fra et sæt standardprøver på andre prøver, der ikke er en del af samme Results Table . Se Export Calibration på side 15 .
Import External Calibration	Anvender en tidligere eksporteret kalibrering på den aktive Results Table . Et alternativ til at bruge denne kommando er at angive den eksterne kalibreringsfil fra New Results Table -guiden som beskrevet i Definition af integration på side 44 . Se Import External Calibration på side 16 .
Remove External Calibration	Fjerner en tidligere anvendt ekstern kalibrering fra en aktiv Results Table .

Export Calibration

Gemmer en kopi af kalibreringsligningen for alle analytter, der er tilknyttet til den aktive **Results Table**, til en ekstern fil (*.mqcal). Dette gør det muligt at anvende kalibreringen fra et sæt standardprøver på andre prøver, der ikke er en del af samme **Results Table**.

Den typiske arbejdssekvens er:

Menuen Process

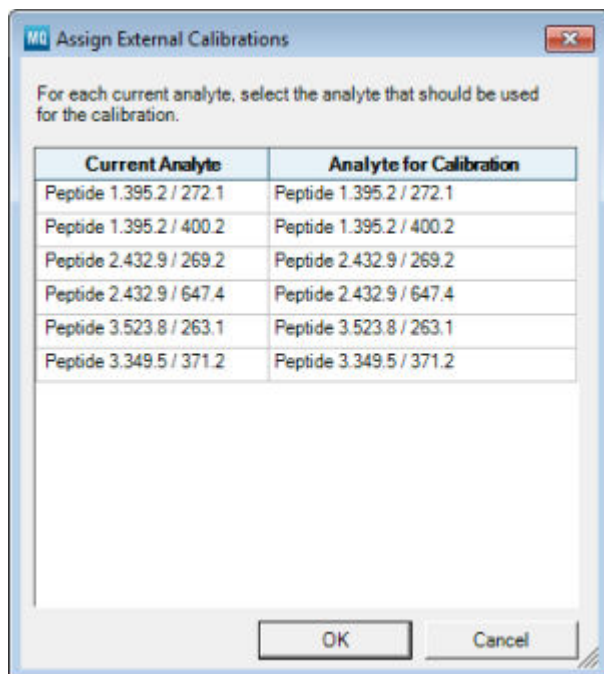
1. Opret en ny **Results Table**, der kun indeholder **Standard**.
2. Brug ruden **Peak Review** til at sikre, at integrationen blev gennemført.
3. Brug kommandoen **Export Calibration** til at gemme en kopi af kalibreringen.
4. Opret en ny **Results Table**, der indeholder prøver af ukendt koncentration.
5. Anvend den tidligere eksporterede kalibrering på den nye tabel ved hjælp af kommandoen **Import External Calibration** eller ved at angive kalibreringsfilen.
6. Gentag trin 4 og 5 efter behov.

Hvis du ændrer den oprindelige **Results Table** (med **Standard**-prøverne), opdateres eventuelle tidligere eksporterede kalibreringer ikke automatisk. **Results Table** skal eksporteres igen.

Import External Calibration

Hvis de samme analytnavne anvendes i den aktuelle **Results Table** som i den eksporterede kalibrering, afsluttes dialogboksen automatisk, og brugeren kan klikke på **OK**. Hvis analytterne i den aktuelle **Results Table** er tildelt til specifikke grupper, og hvis analytterne i den eksporterede kalibrering er tildelt til grupper med de samme navne, afsluttes dialogboksen automatisk. Hvis der er mere end et par analytter, skal du bruge de samme analytnavne i begge tilfælde eller bruge konsistente **Group**-navne.

Figur 4-1: Dialogboksen Assign External Calibrations



Etiket	Beskrivelse
Current Analyte	Indeholder en post for hver analyt fra kvantificeringsmetoden for den aktuelle Results Table .

Etiket	Beskrivelse
Analyte for Calibration	Indeholder en liste over navnene på alle analytter, der er tilgængelige i den eksterne kalibreringsfil. For hver af de aktuelle analytter skal du vælge den tilsvarende eksterne analyt, som kalibreringen er taget fra.

Bemærk: Revisionskortet tilføjes til sessionen, når **Results Table** først oprettes. Det kan ikke ændres, efter at det er blevet tilføjet.

Tabel 5-1: Menuen Audit Trail

Menupunkt	Beskrivelse
Audit Trail Viewer	Åbner Audit Trail Viewer .
Audit Map Manager	Vælger, ændrer og aktiverer Audit Maps .
View Session Audit Map	Åbner det aktuelle kort for den aktive Results Table .

Audit Trail Viewer

Audit Trail Viewer viser den komplette historik for en bestemt prøve i resultattabellen. Resultattabeller gemmes i mappen <drive>:\Analyst Data\Projects\<project name>\Results.

Bemærk:

Resultattabellen bør ikke skjules, når der udføres andre handlinger. For eksempel ved lagring af et revisionsspor.

Hvis du vil maksimere en anden rude, f.eks. ruden Peak Review, for at få vist dataene bedre, skal du bruge knappen **Toggles tab mode** på værktøjslinjen.

Ved hjælp af **Audit Trail Viewer** kan brugere:

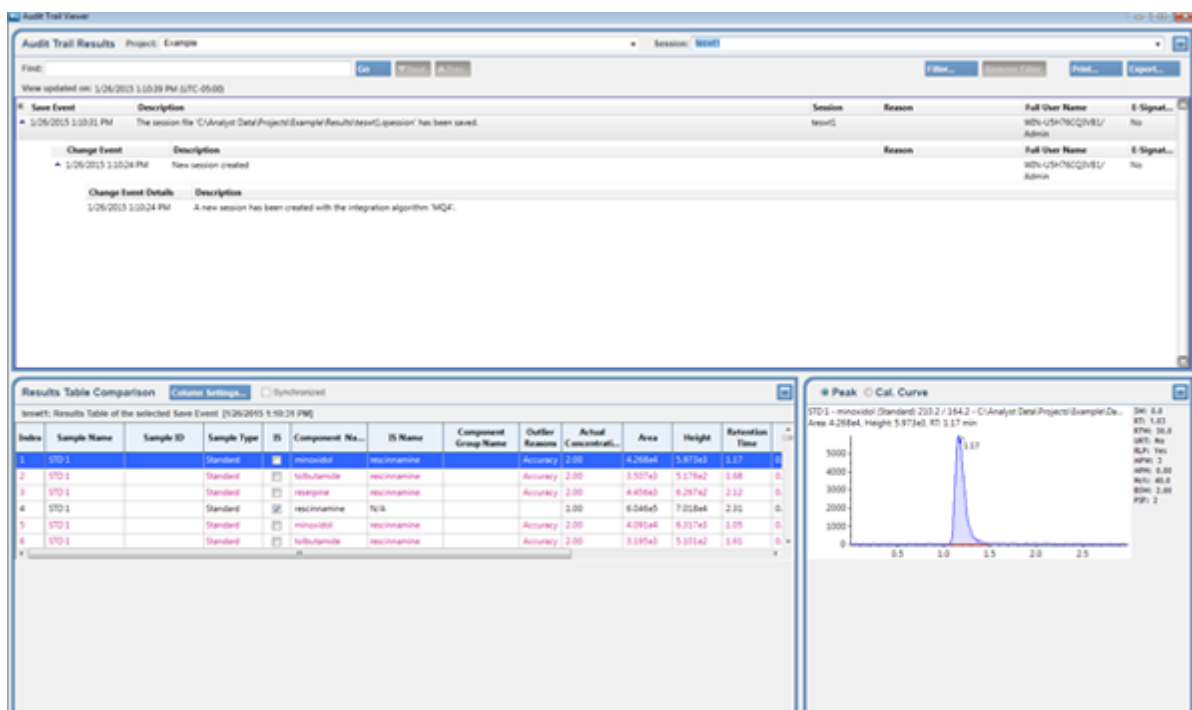
- Se revisionssporposter for hver **Results Table**.
- Udføre en søgning efter nøgleord, som fremhæver hver forekomst af teksten.
- Filtrere de reviderede begivenheder i softwarerevisionssporet baseret på et sæt specifikke kriterier.
- Eksportere revisionssporposter til en txt-fil. Eksporterede filer kan redigeres.
- Udskrive til en sikker PDF.

Visning af resultaterne af revisionssporet i Audit Trail Viewer

1. Åbn en resultattabel.
2. Klik på **Audit Trail > Audit Trail Viewer**.

3. Hvis du vil ændre projekter, skal du klikke på listen **Projects** og derefter vælge et andet projekt.
4. Hvis du vil have vist andre sessioner, skal du klikke på listen **Sessions** og derefter vælge en anden session. Brugere kan også vælge at få vist alle sessionerne i projektet på samme tid.

Figur 5-1: Audit Trail Viewer



Etiket	Beskrivelse
Project	Vælg et projekt på listen.
Session	Vælg en sessionsfil
Find	En søgning efter nøgleord uden filtrering. Fremhæver alle forekomster af teksten.
Go	Klik for at starte søgningen.
Next	Klik for at gå til næste ord.
Prev	Klik for at gå til forrige ord.
Filter	Klik for kun at vise de hændelser, der matcher de valgte kriterier.
Remove Filter	Klik for at fjerne filteret.
Print	Klik for at udskrive revisionssporet
Export	Klik for at eksportere revisionssporet.

Etiket	Beskrivelse
Save Event	Når en sessionsfil gemmes, oprettes en lagringshændelse. Den gemte hændelse fastholder alle ændringer, der er foretaget fra den tidligere gemte hændelse, samt alle værdier i Results Table .
Description	Oplysninger om ændringshændelsen.
Session	Viser navnet på sessionsfilen.
Reason	Viser årsagen til ændringen, der er foretaget i Results Table .
Full User Name	Viser navnet på den bruger, der har foretaget ændringen i Results Table .
E-Signature	Angiver, om ændringer i Results Table blev accepteret.
Column Settings	Klik for at få vist eller skjule kolonner i Results Table .
Synchronized	Vælg for at få begge Results Tables til at rulle vandret samtidigt.
Previous version	Viser den foregående version af den valgte sessionsfil.
Top	Klik for at vise toppen af den valgte prøve.
Cal Curve	Klik for at få vist kalibreringskurven for den valgte prøve.

Gennemførelse af en søgning efter nøgleord

Brugere kan udføre en søgning efter nøgleord, som fremhæver alle forekomster af teksten.

1. Åbn en resultattabel.
2. Klik på **Audit Trail** > **Audit Trail Viewer**.
3. I feltet **Find** skal du indtaste det ord, der skal søges efter, og derefter klikke på **Go**. Hvis der findes matchende resultater, bliver feltet **Find** grønt, antallet af søgeresultater vises, og ordet fremhæves med gult. Hvis der ikke findes nogen matchende resultater, bliver feltet **Find** lyserødt.
4. Brug knapperne **Next** og **Prev** til at skifte mellem søgeresultaterne.

Filtrering af reviderede begivenheder

Brugere kan filtrere de reviderede begivenheder i revisionssporet baseret på et sæt specifikke kriterier.

1. Åbn en resultattabel.
2. Klik på **Audit Trail** > **Audit Trail Viewer**.
3. Klik på **Filter**.

Figur 5-2: Dialogboksen Filter Audit Trail Events

Element	Beskrivelse
1	Navnet på Results Table -filen. Du kan filtrere en enkelt Results Table -fil eller alle Results Table -filerne for det aktive projekt.
2	Description: Indtast den delvise eller fulde hændelsestype. Sample Name: Indtast det delvise eller fulde prøvenavn. Full User Name: Indtast brugerens fulde eller delvise navn. E-Signature: Vælg Yes eller No. Reason: Indtast den delvise eller fulde årsag.
3	is: Bruges til at filtrere efter et bestemt ord eller sætning.
4	contains: Bruges til at filtrere efter et delvist ord eller sætning.
5	Date: Bruges til at filtrere efter hændelser, der fandt sted på en bestemt dato og et bestemt tidspunkt.

- Brug listerne til at udvælge filterkriterier i **Filter Audit Trail Events** dialog.

Bemærk: Feltet Results Table kan ikke redigeres.

- Klik på **Clear** for at nulstille filterkriterierne til **No filter**.

6. Klik på **OK** for at filtrere hændelserne.

Tip! Hvis du vil fjerne filteret, skal du klikke på **Remove Filter** i **Audit Trail Viewer**.

Eksport af Audit Trail Viewer

1. Åbn en resultattabel.
2. Klik på **Export**, og indtast derefter et filnavn.
Filen eksporteres som en tabulatorsepareret tekstfil.

Bemærk: Kun den gemte del med hændelser i Audit Trail Viewer eksporteres.

Udskrivning af Audit Trail Viewer

1. Åbn en resultattabel.
2. Klik på **Print**, og vælg derefter en printer.
Brugere kan udskrive en sikker PDF ved hjælp af pdfFactory.

Bemærk: Kun den gemte del med hændelser i Audit Trail Viewer udskrives.

Audit Trail Manager

Softwaren grupperer de reviderede kvantificeringshændelser i revisionsspor. Revisionsspor er filer, der gemmer poster over de reviderede begivenheder. Revisionsspor, kombineret med filer, f.eks. wiff-filer, kvantificeringsmetoder og **Results Table**-filer, udgør gyldige elektroniske poster, der kan bruges til overensstemmelsesformål.

Audit Trail Manager-softwaren vedligeholder alle begivenhederne som defineret på revisionskortet. Softwaren registrerer de elektroniske signaturer og årsager, herunder bruger, dato og detaljer om ændringerne. Den registrerer også yderligere oplysninger, såsom kommentarer, i henhold til revisionskortet.

Tip! En sessionsfil indeholder **Results Table**, en kopi af kvantificeringsmetoden, en kopi af revisionskortet på tidspunktet for oprettelsen samt hele revisionssporet for hele sessionen.

Når softwaren opretter eller ændrer en qsession- eller qmethod-fil, registreres hændelsen i **Project Audit Trail** på fanen **History** i Analyst[®] MD-softwaren. Følgende hændelser registreres:

- Kvantificeringsmetodefilen er blevet oprettet.
- Kvantificeringsmetodefilen er blevet ændret.
- Kvantificering af **Results Table** er blevet oprettet.
- Kvantificering af **Results Table** er blevet ændret.

Hvis **E-signature** eller **Reason Prompt** vælges til at oprette eller ændre kvantificeringsmetodefilen, åbnes dialogboksen **Audit Trail**, der genereres af Analyst[®] MD-softwaren, i MultiQuant[™] MD-softwaren.

Tabel 5-2: Revisionsspor

Revisionsspor	Eksempler på registrerede begivenheder
Kvantificeringsrevisionsspor (ét pr. resultattabel)	Ændringer af: <ul style="list-style-type: none">• Oprettelse og ændring af sessionsfiler.• Prøveoplysninger.• Topintegrationsparametre.

Om revisionskort

MultiQuant™ MD-softwaren vedligeholder al ændringshistorik for oplysningerne om behandlingsindstillinger, der er forbundet med kvantificeringsresultaterne. Softwaren reviderer alle hændelserne i henhold til revisionskortet for det aktive projekt og registrerer alle elektroniske signaturer og links til de respektive optegnelser.

Oprettelse af et revisionskort

Softwaren installerer flere revisionskort. Få vist revisionskortene for at afgøre, om det vil være nemmere at ændre ét eller flere af dem end at oprette et helt nyt. Oprettelse eller ændring af revisionskort er auditerede hændelser i Analyst® MD-softwareprojektets revisionsspor.

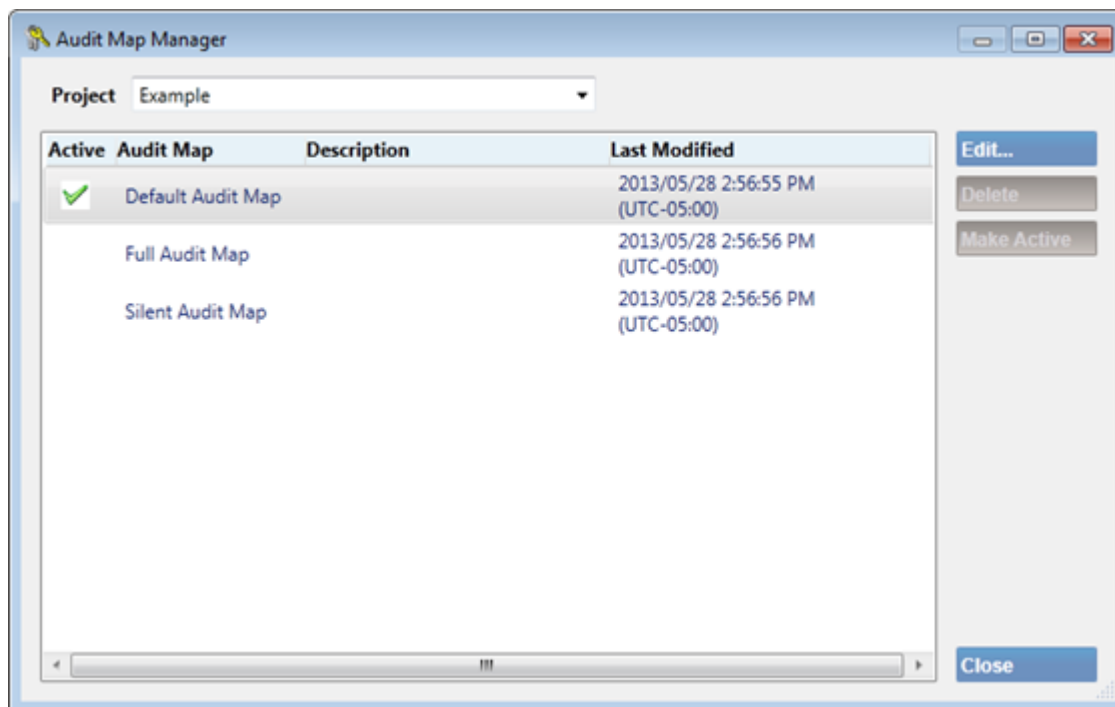
FORSIGTIG: Hvis to brugere ændrer det samme revisionskort på samme tid, anvendes kun de ændringer, der er foretaget af den bruger, der sidst gemte filen.

Det aktive revisionskort for projektet afgør, hvilke hændelser der registreres i revisionssporet for alle **Results Tables**, der oprettes.

Bemærk: Når en **Results Table** gemmes, gemmes det aktive revisionskort sammen med **Results Table**, og revisionskortet kan ikke ændres.

1. Klik på **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Figur 5-3: Audit Map Manager



Etiket	Beskrivelse
Project	Vælg et projekt på listen.
Edit	Klik for at redigere det aktive revisionskort.
Delete	Klik for at slette det valgte revisionskort.

2. Vælg et projekt, som du vil oprette et revisionskort for, på **Project**-listen.
3. Vælg et revisionskort, og klik derefter på **Edit**.

Figur 5-4: Audit Map Editor

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

Etiket	Beskrivelse
Description	Indtast en beskrivelse af revisionskortet.
Check	Klik for at markere et afkrydsningsfelt.
Uncheck	Klik for at rydde afkrydsningsfeltet.
Add Predefined Reasons	Klik for at tilføje en foruddefineret årsag til listen.

4. Indtast en beskrivelse af revisionskortet i feltet **Description**, hvis det er nødvendigt.
5. I tabellen **Audit Map** skal du konfigurere alle hændelser som følger:
 - Hvis du vil revidere hændelsen, skal du markere afkrydsningsfeltet i kolonnen **Audited**.

Tip! Hvis du vil udfylde på hinanden følgende celler i en kolonne med værdien i afkrydsningsfeltet, skal du trykke på **Ctrl** eller **Shift**, klikke på cellerne og derefter klikke på **Check**.

Menuen Audit Trail

- Hvis operatørerne skal indtaste en brugerdefineret årsag eller vælge en foruddefineret årsag, skal du markere afkrydsningsfeltet i kolonnen **Reason Prompt**.
- Hvis operatørerne kun skal vælge en foruddefineret årsag til ændringen, når hændelsen indtræffer, skal du markere afkrydsningsfelterne i kolonnerne **Reason Prompt** og **Predefined Reasons Only**. Vælg op til ti årsager i kolonnerne **Predefined Reason** _ .

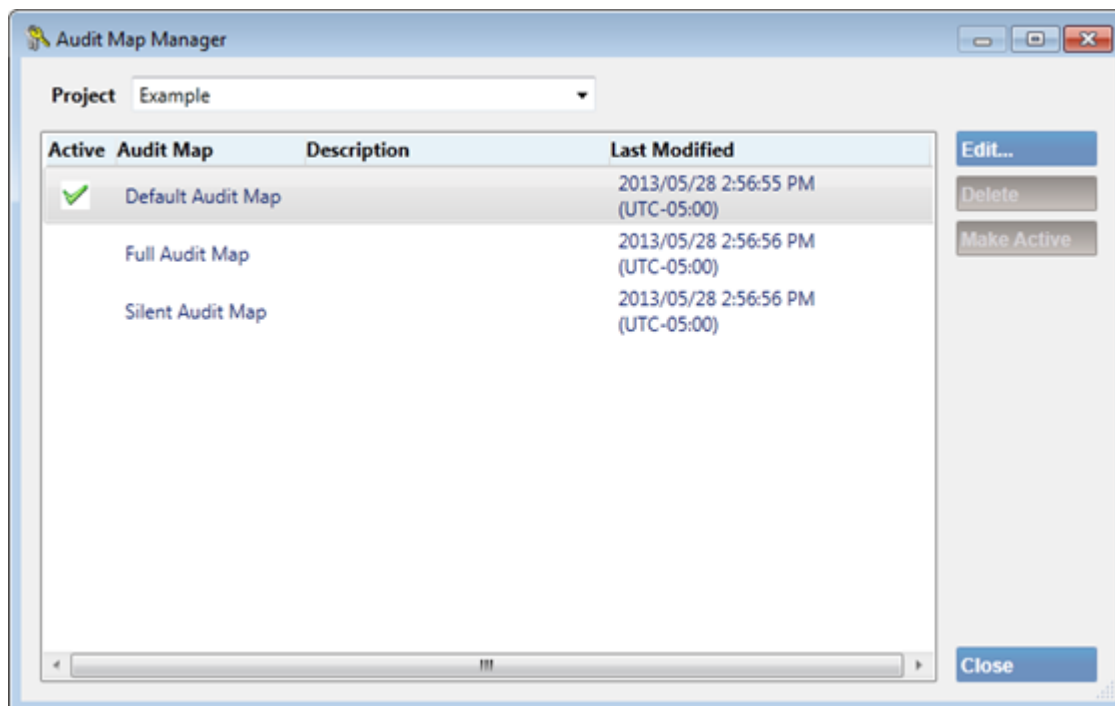
Tip! Hvis du vil tilføje en foruddefineret årsag, skal du klikke på **Add Predefined Reasons**.

- Hvis du vil kræve elektroniske signaturer for hændelsen, skal du markere afkrydsningsfeltet i kolonnen **E-Sig**.
6. Klik på **Save As**, og indtast derefter et navn i dialogboksen **Save Audit Map As**.
 7. Klik på **Save**.
 8. Klik på **Close** i dialogboksen **Audit Map Editor**.
 9. Klik på **Make Active**.
Når der anvendes et revisionskort, bliver dette revisionskort det aktive revisionskort. Revisionskonfigurationen i det aktive revisionskort bestemmer, hvilke hændelser der registreres i revisionssporene fra dette punkt.

Skift af revisionskortet

1. Klik på **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Figur 5-5: Audit Map Manager



Etiket	Beskrivelse
Project	Vælg et projekt på listen.
Edit	Klik for at redigere det aktive revisionskort.
Delete	Klik for at slette det valgte revisionskort.

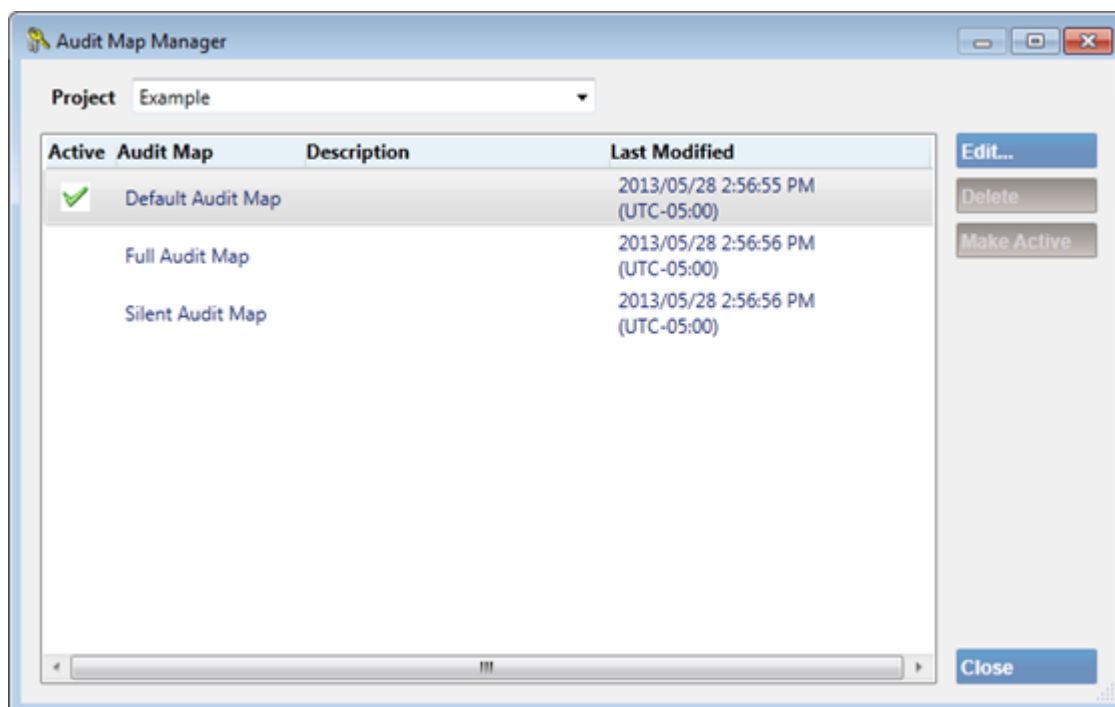
2. Vælg et projekt, som revisionskortet skal ændres til, på listen **Project**.
3. Vælg et andet kort, og klik derefter på **Make Active**.
4. Klik på **Close**.

Redigering af revisionskortet

Følgende revisionshændelser registreres altid og vises derfor ikke i **Audit Map Editor**: Print Report, Export Results Table og Transfer to LIMS.

1. Klik på **Audit Trail > Audit Map Manager**.

Figur 5-6: Audit Map Manager



Etiket	Beskrivelse
Project	Vælg et projekt på listen.
Edit	Klik for at redigere det aktive revisionskort.
Delete	Klik for at slette det valgte revisionskort.

2. Vælg et revisionskort, og klik derefter på **Edit**.

Figur 5-7: 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"/>		

Etiket	Beskrivelse
Description	Indtast en beskrivelse af revisionskortet.
Check	Klik for at markere et afkrydsningsfelt.
Uncheck	Klik for at rydde afkrydsningsfeltet.
Add Predefined Reasons	Klik for at tilføje en foruddefineret årsag til listen.

3. Indtast en beskrivelse af revisionskortet i feltet **Description**, hvis det er nødvendigt.
4. I tabellen **Audit Map** skal du konfigurere alle hændelser som følger:
 - Hvis du vil revidere hændelsen, skal du markere afkrydsningsfeltet i kolonnen **Audited**.

Tip! Hvis du vil udfylde på hinanden følgende celler i en kolonne med værdien i afkrydsningsfeltet, skal du trykke på **Ctrl** eller **Shift**, klikke på cellerne og derefter klikke på **Check**.

- Hvis operatørerne skal indtaste en brugerdefineret årsag eller vælge en foruddefineret årsag, skal du markere afkrydsningsfeltet i kolonnen **Reason Prompt**.
- Hvis operatørerne kun skal vælge en foruddefineret årsag til ændringen, når hændelsen indtræffer, skal du markere afkrydsningsfelterne i kolonnerne **Reason Prompt** og **Predefined Reasons Only**. Vælg op til ti årsager i kolonnerne **Predefined Reason _**.

Tip! Hvis du vil tilføje en foruddefineret årsag, skal du klikke på **Add Predefined Reasons**.

- Hvis du vil kræve elektroniske signaturer for hændelsen, skal du markere afkrydsningsfeltet i kolonnen **E-Sig**.
5. Klik på **Save**.
 6. Klik på **Make Active**.
Når der anvendes et revisionskort, bliver dette revisionskort det aktive revisionskort. Revisionskonfigurationen i det aktive revisionskort bestemmer, hvilke hændelser der registreres i revisionssporene fra dette punkt.

Visning af den indlejrede kontrolkonfiguration

Den revisionskonfiguration, der anvendes til en resultattabel, indlejres i resultattabellen, når resultattabellen oprettes. Denne konfiguration kan ikke ændres. Tidsstemplet, der vises ved siden af revisionskortets navn, angiver, hvornår revisionskortet, der blev brugt til at indlejre konfigurationen, sidst blev gemt.

1. Åbn en resultattabel.
2. Klik på **Audit Trail > View Session Audit Map**.

Figur 5-8: Session Audit Map

Session Audit Map (ResultsTable1.qsession)

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

Description:

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

Close

Bortset fra punktet **About** indeholder denne menu de punkter, der er angivet i [Tabel 6-1](#). Disse filer installeres automatisk, og de findes også i mappen <drive>:\Program Files\AB SCIEX\MultiQuant 3\Help.

Dokumenter eller mapper (eller genveje til dem) kan kopieres til denne Help-mappe, så de automatisk vises i menuen.

Tabel 6-1: Menuen Help

Menupunkt	Beskrivelse
Install License	Klik for at åbne dialogboksen MultiQuant™ MD Activation.
Verify Installation	Klik for at bekræfte filerne og installationen.
Software Reference Guide	Beskriver softwarens funktioner og funktionalitet.
Software Release Notes	Indeholder oplysninger om softwaren samt om procedurer for installation af softwaren.
About	Indeholder programversionen, ophavsret og andre programoplysninger sammen med oplysninger om, hvilke licensfunktioner, der er installeret.

Resultattabeller

7

En **Results Table** er udgangspunktet for gennemgang og eksport af data. Brug **New Results Table wizard**, eller klik på **File > New Results Table** for at oprette en resultattabel. Se [Dialogboks for resultattabel på side 38](#).

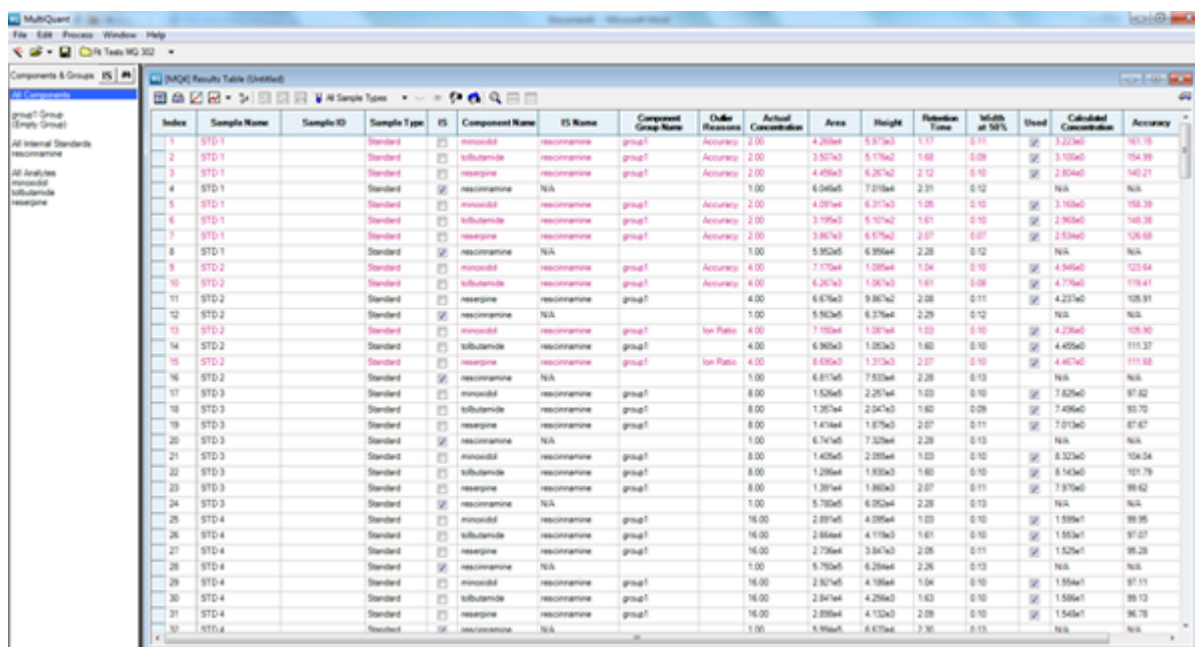
Bemærk: Kolonnerne **Sample Name** og **Sample ID** må ikke indeholde : \ / : * ? " < > |=.

Den revisionskonfiguration, der anvendes til en **Results Table**, indlejres i **Results Table**-filen, når **Results Table** er oprettet. Denne konfiguration kan ikke ændres. Tidsstempet, der vises ved siden af navnet på revisionskortet, angiver, hvornår revisionskortet, der blev brugt til at indlejre konfigurationen, sidst blev gemt.

Bemærk: Når du flytter data, skal du flytte hele projektet for at opretholde filstrukturen. Hvis fil- og mappestrukturen ikke opretholdes, kan **Results Table** eller kromatogrammer ikke vises.

Der er en separat række for hver komponent for hver af de oprindeligt valgte prøver.

Figur 7-1: Eksempel på resultattabel



Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Outer Reactions	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	monoclonal	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	4.26e4	5.97e3	5.17	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	3.22e3	161.16
2	STD 1		Standard	<input type="checkbox"/>	follicular	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	3.97e3	5.17e3	5.68	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.10e3	154.99
3	STD 1		Standard	<input type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	4.49e3	6.30e3	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.80e3	140.21
4	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.56e3	7.01e4	2.91	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	STD 1		Standard	<input type="checkbox"/>	monoclonal	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	4.09e4	6.31e3	1.06	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.16e3	158.29
6	STD 1		Standard	<input type="checkbox"/>	follicular	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	3.19e3	5.10e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.96e3	148.38
7	STD 1		Standard	<input type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	2.00	3.80e3	6.57e3	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.53e3	126.68
8	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.95e3	6.99e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	STD 2		Standard	<input type="checkbox"/>	monoclonal	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	7.17e4	1.08e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.94e3	123.64
10	STD 2		Standard	<input type="checkbox"/>	follicular	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	6.26e3	1.06e3	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.77e3	119.41
11	STD 2		Standard	<input type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	4.00	6.67e3	9.86e3	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.23e3	108.91
12	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.96e3	6.37e4	2.29	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	STD 2		Standard	<input type="checkbox"/>	monoclonal	recombinant	group 1	Ion Ratio	4.00	7.15e4	1.08e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.23e3	108.90
14	STD 2		Standard	<input type="checkbox"/>	follicular	recombinant	group 1	Ion Ratio	4.00	6.96e3	1.06e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.45e3	111.37
15	STD 2		Standard	<input type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group 1	Ion Ratio	4.00	6.69e3	1.31e3	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.40e3	111.68
16	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.81e3	7.53e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	STD 3		Standard	<input type="checkbox"/>	monoclonal	recombinant	group 1	Accuracy	8.00	1.52e5	2.20e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.82e3	97.82
18	STD 3		Standard	<input type="checkbox"/>	follicular	recombinant	group 1	Accuracy	8.00	1.35e4	2.04e3	1.60	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	7.49e3	93.70
19	STD 3		Standard	<input type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	8.00	1.41e4	1.87e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.01e3	87.67
20	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	6.74e3	7.32e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	STD 3		Standard	<input type="checkbox"/>	monoclonal	recombinant	group 1	Accuracy	8.00	1.40e5	2.09e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.32e3	104.04
22	STD 3		Standard	<input type="checkbox"/>	follicular	recombinant	group 1	Accuracy	8.00	1.28e4	1.93e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.14e3	101.79
23	STD 3		Standard	<input type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	8.00	1.39e4	1.86e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.87e3	98.62
24	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.79e3	6.05e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	STD 4		Standard	<input type="checkbox"/>	monoclonal	recombinant	group 1	Accuracy	16.00	2.89e5	4.09e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.89e4	99.95
26	STD 4		Standard	<input type="checkbox"/>	follicular	recombinant	group 1	Accuracy	16.00	2.86e4	4.11e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.85e4	97.07
27	STD 4		Standard	<input type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	16.00	2.79e4	3.84e3	2.06	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.82e4	96.28
28	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.79e3	6.05e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	STD 4		Standard	<input type="checkbox"/>	monoclonal	recombinant	group 1	Accuracy	16.00	2.92e5	4.18e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.89e4	97.11
30	STD 4		Standard	<input type="checkbox"/>	follicular	recombinant	group 1	Accuracy	16.00	2.84e4	4.29e3	1.62	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.88e4	98.13
31	STD 4		Standard	<input type="checkbox"/>	recombinant	recombinant	group 1	Accuracy	16.00	2.89e4	4.13e3	2.09	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.84e4	96.78
32	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recombinant	N/A		Accuracy	1.00	5.96e3	6.07e4	2.30	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

- Kolonnerne **IS**, **Component Name** og **IS Name** indeholder oplysninger om analytterne.
- Det valgte afkrydsningsfelt angiver den interne standard for prøven.
- Vælg, hvilke kolonner der vises i **Results Table** ved hjælp af dialogboksen **Column Settings**. Se [Column Settings på side 35](#).

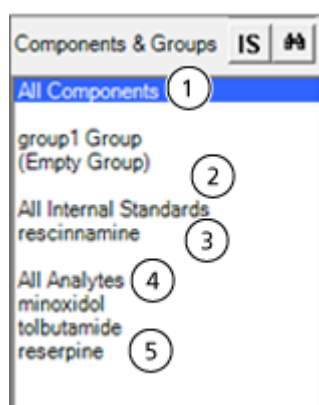
- Skift bredden på kolonnerne ved at trække i linjen, der adskiller de to kolonneoverskrifter. Disse oplysninger gemmes automatisk og anvendes, når brugeren åbner tidligere gemte **Results Tables**.
- Skift rækkefølgen af kolonnerne ved at klikke på en kolonneoverskrift og derefter trække den til en ny placering. Disse oplysninger gemmes automatisk og anvendes, når brugeren åbner tidligere gemte **Results Tables**.
- Brugere kan begrænse resultattabellen, så den kun viser rækker, der svarer til bestemte analytter eller interne standarder. Brug værktøjslinjen til at begrænse de prøvetyper, der vises. Se [Liste over komponenter og grupper på side 33](#) og [Filtrering af prøvetype på side 37](#).
- Visse handlinger såsom synkronisering med ruden **Peak Review**, anvendes på den eller de aktuelt valgte rækker. Vælg rækker ved at klikke på området til venstre for den første kolonne.

Liste over komponenter og grupper

Når en **Results Table** er åben, vises en liste over de aktuelle komponenter og grupper i venstre side af hovedvinduet. Brug denne liste til at ændre, hvilke komponenter der er synlige i **Results Table** samt i en vilkårlig sammenkædet **Peak Review**-rude eller **Calibration**-plot.

Komponenter defineres som en enkelt overgang eller et masseområde. En gruppe defineres som navnet på den gruppe, som komponenten tilhører.

Figur 7-2: Liste over komponenter og grupper



Element	Etiket	Beskrivelse
1	All Components	Klik for at få vist alle tilgængelige analytter og interne standarder i Results Table samt de relaterede Peak Review og Calibration , hvis disse vises.
2	All Internal Standards	Klik for at få vist alle interne standarder og for at skjule alle analytter. Dette element er ikke til stede, hvis der ikke er defineret nogen interne standarder.

Resultattabeller

Element	Etiket	Beskrivelse
3	Specific Internal Standards	Navnet på hver enkel intern standard er medtaget på listen. Klik på et af disse elementer for at få vist den interne standard og for at skjule alle andre komponenter.
4	All Analytes	Klik for at få vist alle analytter og for at skjule alle interne standarder. Dette element medtages ikke, hvis der ikke er defineret nogen interne standarder.
5	Specific Analytes	Navnet på hver enkelt analyt er inkluderet på listen. Klik på ét af disse elementer for at få vist denne analyt og for at skjule alle andre komponenter.

Klik på et individuelt element på listen for kun at vise komponenterne for det pågældende element. Tryk på **Shift** eller **Ctrl** for at vælge flere elementer. Dette er nyttigt til for eksempel kun at få vist to specifikke analytter. Brug piletasterne op og ned, når listen er aktiv, for at navigere igennem elementerne.

Tip! Gør listen bredere eller smallere ved at trække rudens højre kant til venstre eller højre.

Den faktiske rækkefølge af rækkerne i resultattabellen påvirkes ikke af filtrering. Resultattavlen er på forhånd indstillet til at være sorteret efter prøve først og derefter efter komponent i den rækkefølge, der er angivet i kvantificeringsmetoden. Tabellen kan dog også sorteres i en bestemt rækkefølge som beskrevet i [Softwareikoner på side 151](#).

Højrekliksmenu i resultattabellen

Højreklik i resultattabellen for at få adgang til en kontekstmenu. Følgende kommandoer er tilgængelige.

Tabel 7-1: Indstillinger for højrekliksmenuen i resultattabellen

Menupunkt	Beskrivelse
Column Settings	Brug denne kommando til at redigere kolonnerne i Results Table . Ændringerne anvendes kun på den aktuelle Results Table , medmindre den er gemt som projektstandard.
Add Custom Column	Tilføjer en ny redigerbar kolonne til tabellen. Udfyld kolonnen ved at skrive direkte i cellerne eller ved at indsætte indhold. Enhver tekst kan indtastes såsom kommentarer eller resultaterne af brugerdefinerede beregninger.
Rename Custom Column	Omdøber en eksisterende brugerdefineret kolonne. Før du bruger denne kommando, skal du klikke på den brugerdefinerede overskrift for at vælge den brugerdefinerede kolonne.

Tabel 7-1: Indstillinger for højrekliksmenuen i resultattabellen (fortsat)

Menupunkt	Beskrivelse
Remove Custom Column	Sletter en eksisterende brugerdefineret kolonne. Før du bruger denne kommando, skal du klikke på kolonneoverskriften for at vælge den brugerdefinerede kolonne.
Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All	Indeholder en genvej til at indstille feltet Actual Concentration for alle analytter for prøver af typen Standard , hvis der er mere end én analyt, og alle analytter er til stede i disse prøver i samme koncentration. Se Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All på side 35.
Apply Current IS's Actual Concentrations to All	Ligner Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All , bortset fra at det gælder for interne standarder og ikke analytter.
Set 'Used'	Brug denne kommando til at udføre absolut kvantificering for at bestemme, om en bestemt Standard -prøve skal anvendes til beregning af kalibreringskurven for en given analyt. De første to elementer bruges til at markere eller rydde feltet Used for de aktuelt markerede rækker i Results Table . Det tredje og fjerde element er magen til, bortset fra at handlingen gælder for alle analytter for alle prøver, der svarer til en udvalgt række.
Set Peaks to 'Not Found' for Selected Rows	Brug denne kommando til at rydde topintegrationen for de aktuelt markerede rækker.

Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All

1. Brug [Liste over komponenter og grupper på side 33](#) for at begrænse tabellen til kun at vise en bestemt analyt.
2. Brug eventuelt **Sample Type Filter** for kun at se **Standard**-prøver. Se [Filtrering af prøvetype på side 37](#).
3. Angiv analyttens faktiske koncentrationer, enten ved at skrive direkte ind i cellerne eller ved at vælge kolonnen og derefter vælge **Paste**, hvis koncentrationerne er tilgængelige andetsteds i et tekstformat.
4. Klik på **Apply Current Analyte's Actual Concentrations to All**.
5. Vend tilbage til visning af alle komponenter og alle prøvetyper efter behov.

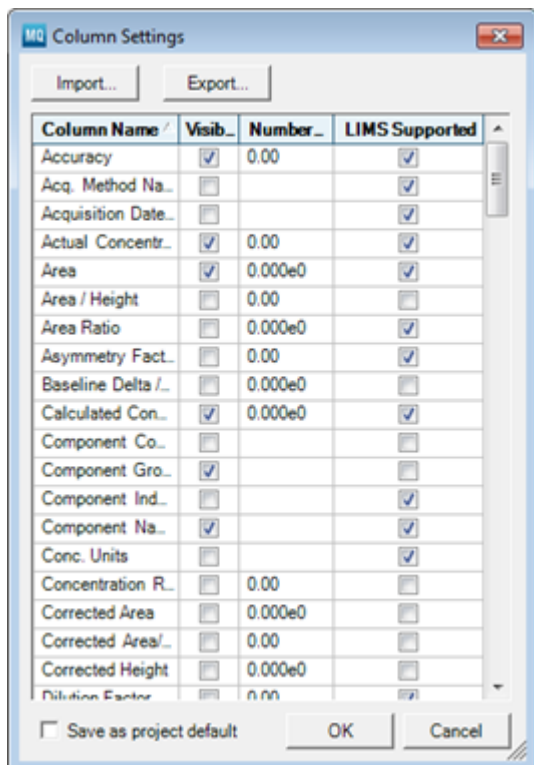
Column Settings

Hvis kolonnenavne er afkortet, skal du flytte markøren over feltet for at vise kolonnenavnet i et værktøjstip.

Resultattabeller

For numeriske felter anvendes formatet 0.00 for ikke-videnskabelige notationer og formatet 0.00e0 for videnskabelige notationer. Rediger decimaltegnene for at angive præcisionen af de tal, der vises. Der kan kun anvendes punktum (.) som decimalseparator. Ciffergruppering understøttes ikke.

Figur 7-3: Dialogboksen Column Settings



Felt	Beskrivelse
Import	Klik for at vælge en kolonneindstillingsfil, der tidligere er gemt ved hjælp af Export . Dialogfelterne opdateres for at bruge oplysningerne fra den valgte fil.
Export	Klik for at gemme de aktuelle dialogindstillinger i en fil. Dette giver brugeren mulighed for at skifte mellem forskellige kolonneindstillinger.
Column Name	Viser navnet på kolonnerne i alfabetisk rækkefølge. Se Kolonner i resultattabel på side 49 .
Visible	Vælg for at gøre kolonnen synlig. Ellers er kolonnen skjult.
Number Format	For numeriske felter anvendes formatet 0.00 for ikke-videnskabelige notationer og formatet 0.00e0 for videnskabelige notationer. For at få vist præcision skal decimalpunkterne ændres.
LIMS Supported	Rækkerne, der viser, at LIMS-understøttet er valgt, er foruddefineret af LIMS, og kolonnevalget kan ikke ændres.

Felt	Beskrivelse
Save as project default	Vælg for at bruge kolonneindstillingerne i fremtidige resultattabeller.

Filtrering af prøvetype

Tabel 7-2: Beskrivelser af filtrering af prøvetype

Filtertype	Beskrivelse
All Sample Types	Viser alle prøvetyper.
Unknowns	Viser kun ukendte prøver, som er normale prøver af ukendt koncentration. Når der anvendes standardprøver, beregnes deres koncentration igen ud fra kalibreringskurven og rapporteres i resultattabellen som den beregnede koncentration. Se Regressionsligninger på side 123 .
Standards	Viser kun prøver af kendt koncentration. Disse prøver anvendes til at oprette kalibreringskurven.
Quality Controls	Viser kun kvalitetskontrolprøver. Disse prøver af kendt koncentration anvendes til at kontrollere kalibreringskurvens nøjagtighed, men påvirker ikke dens faktiske konstruktion.
Standards & QCs	Viser både standard- og kvalitetskontrolprøver.
Unknowns, Standards & QCs	Viser ukendte prøver, standardprøver og kvalitetskontrolprøver.
Blanks	Viser kun blindprøver. Der er generelt tale om prøver, der indeholder de interne standardforbindelser, hvis de anvendes, men ingen analytter, og som har været underkastet den normale prøveklargøringsprocedure. Disse prøver anvendes ikke ved konstruktionen af kalibreringskurven. For at medtage dem skal du vælge standardprøvens type og derefter angive den faktiske koncentration til 0.
Double Blanks	Viser kun dobbelte blindprøver. Der er tale om prøver, der hverken har interne standarder eller analytter.
Solvents	Viser kun prøver af opløsningsmiddel. Der er tale om dobbelte blindprøver, som ikke har været igennem den normale prøveopbejdningssprocedure.
Blanks, Double Blanks & Solvents	Viser alle de blanke prøvetyper: Blanke prøver, dobbeltblanke prøver og opløsningsmiddelprøver.

Visning af skjulte rækker

For en given komponent i **Results Table** vises der kun rækker for de prøver, for hvilke den tilsvarende MRM-overgang er tilgængelig. De ubrugte rækker, komponenter med overgange,

Resultattabeller

der ikke er tilgængelige for en given prøve, er til stede i tabellen, men de er som standard skjult.

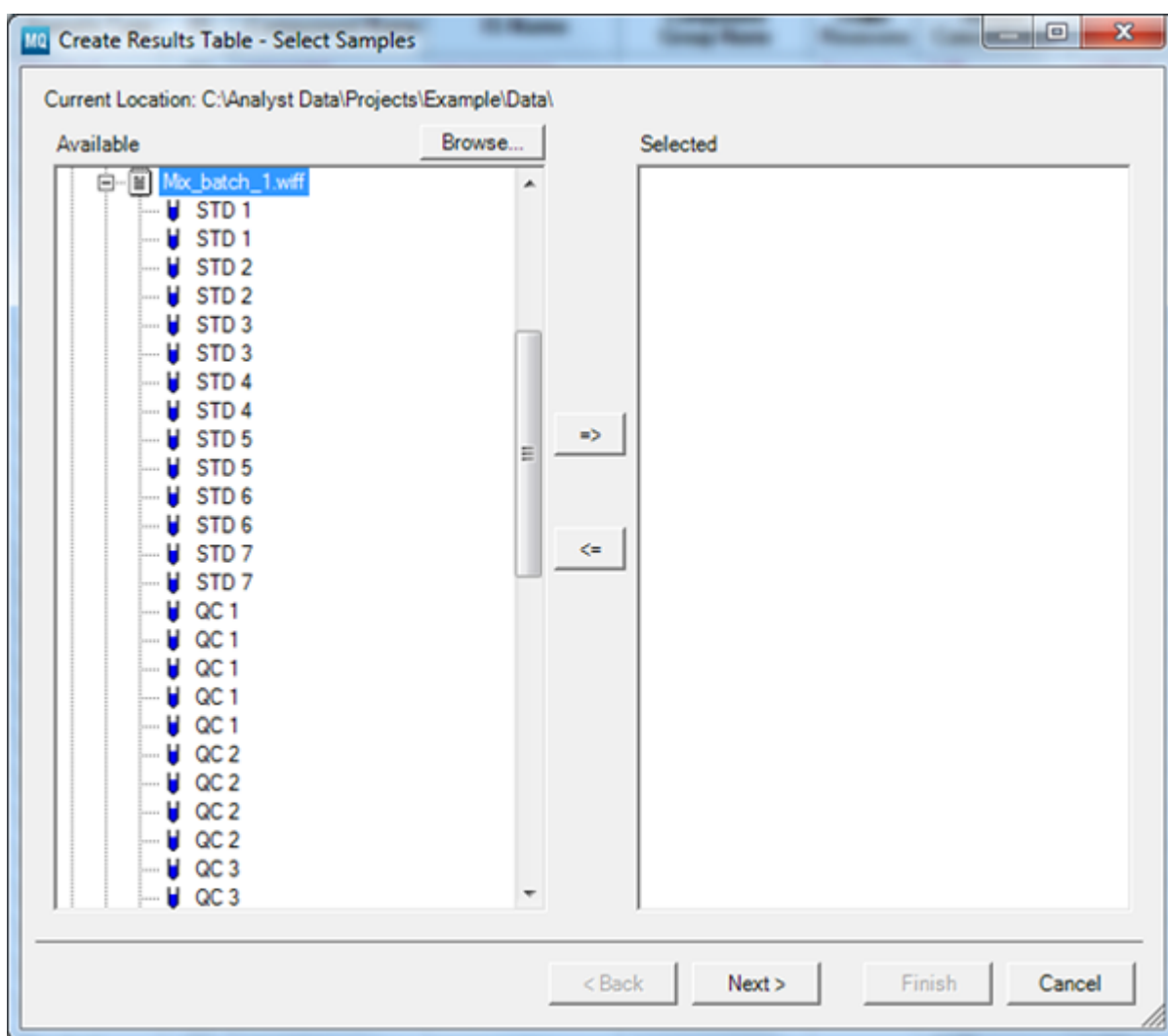
1. Få vist kolonnen **Peak Comment** i **Results Table**, hvis den ikke allerede er synlig.
2. Sortér tabellen ved hjælp af denne kolonne.
3. Vælg de (nu tilstødende) rækker med kommentaren **Not Present**.
4. Klik på ikonet **Hide selected rows(s)**. Se [Softwareikoner på side 151](#).

Dialogbokse for resultattabel

Vælg prøver

Vælg prøverne fra de wiff-filer, der skal behandles.

Figur 7-4: Create Results Table - siden Select Samples



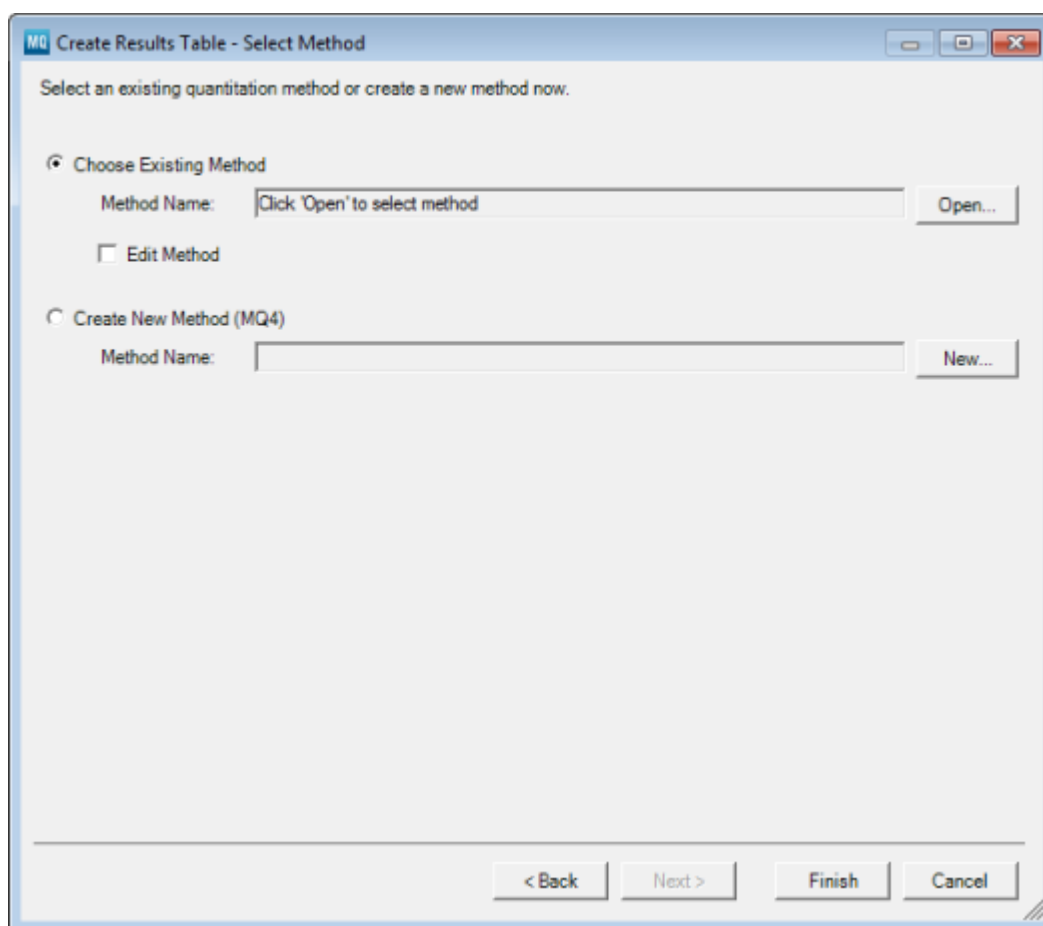
- Ruden **Available** viser de undermapper, wiff-filer og prøver, der er tilgængelige i mappen **Data** for den valgte mappe.

- Udvid individuelle mapper for at se eventuelle undermapper eller wiff-filer. Hvis wiff-filen udvides, åbnes den for at vise de tilgængelige prøver.
- Brug pilene for at tilføje eller fjerne prøver.
- Vælg prøver ved at dobbeltklikke på en enkelt prøve, ved at vælge en prøve- eller datafil og derefter klikke på knappen => eller ved at trække en prøve- eller datafil fra venstre rude til højre. Tryk på **Shift** eller **Ctrl** for at vælge flere filer eller prøver, før du flytter dem.

Valg af metode

Vælg kvantificeringsmetoden. Hvis en eksisterende metode er vælges, men ikke redigeres, vises en statuslinje, mens de valgte prøver behandles. Ved afslutningen af denne proces oprettes en **Results Table**.

Figur 7-5: Create Results Table - siden Select Method



Etiket	Beskrivelse
Choose Existing Method	Klik på Open for at vælge en eksisterende kvantificeringsmetode.

Etiket	Beskrivelse
Edit Method	Vælg denne kommando for at redigere en eksisterende metode. De efterfølgende sider i guiden er udfyldt med oplysninger fra den eksisterende metode, der kan ændres efter behov.
Create New Method	Klik på New for at oprette en kvantificeringsmetode. Algoritmen i parentes er den algoritme, der er valgt i dialogboksen Integration Defaults .

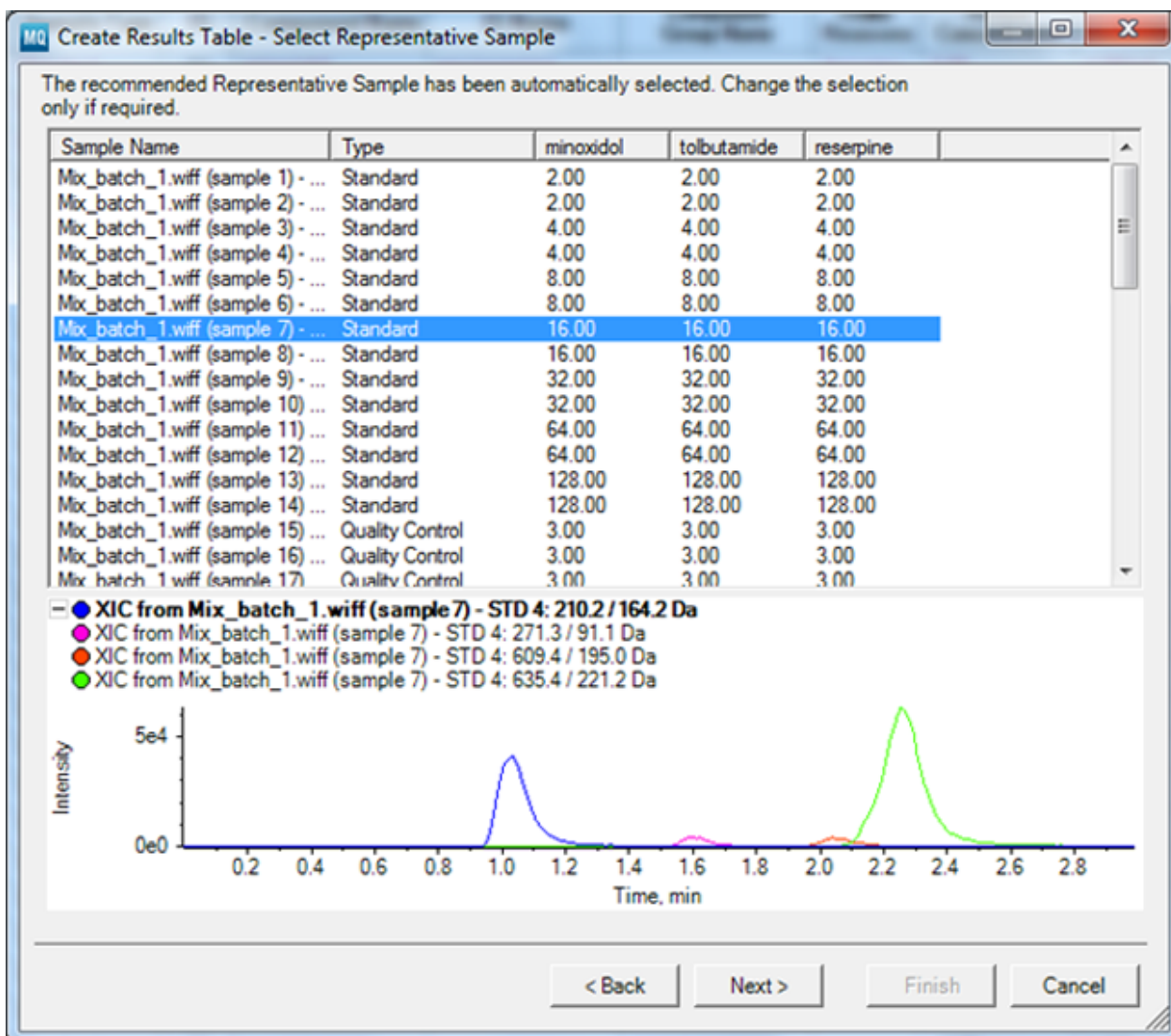
Valg af repræsentativ prøve

Siden **Select Representative Sample** viser den valgte repræsentative prøve, som kromatogrammerne vises for, når topsøgnings- og integrationsparametrene angives visuelt. Denne prøve skal indeholde alle de forbindelser, der kommer til at indgå i kvantificeringsmetoden.

Hvis prøvetyper og analytkoncentrationer blev valgt ved hjælp af Analyst® MD-softwarens Batch Editor, før prøverne blev indsamlet, vises disse oplysninger som yderligere kolonner.

Softwareen vælger en prøve som standard. Hvis den valgte prøve ikke er hensigtsmæssig, skal du vælge en anden repræsentativ prøve. Hvis SignalFinder™-algoritmen er valgt, fraråder softwaren en repræsentativ prøve, for at undgå at generere en forkert integrationsmodel, hvis TIC-niveauet er over 1,0e6 i alle prøver. Brugere kan manuelt vælge en repræsentativ prøve i dette scenario.

Figur 7-6: Create Results Table - siden Select Representative Sample



Definition af komponenter

Siden **Define Components** indeholder en række for hver analyt eller intern standard. Vælg navnene på analytterne og interne standarder, hvis de anvendes. Se [Højrekliksmenu i Define Components](#) på side 43.

Figur 7-7: Create Results Table - siden 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

Etiket	Beskrivelse
Experiment	Vælg et eksperiment, der skal behandles, på listen. Ved data for flere perioder eller flere eksperimenter vælges hvert af de eksperimenter, der skal behandles, og derefter udfyldes tabellen med komponenterne til det tilsvarende eksperiment.
Row	Indeholder det aktuelle række nummer.
IS	Angiver, om den komponent, der er defineret for rækken, er en analyt (ikke markeret) eller en intern standard (markeret).
Name	Indeholder navnet på komponenten. Ved MRM-eksperimenter udfyldes navnet automatisk ved hjælp af Q1/Q3 -overgangsmasserne. Hvis du vil bruge et mere specifikt navn, skal du indtaste et navn i feltet.

Etiket	Beskrivelse
Group	<p>Indeholder navnet på den gruppe, som komponenten for rækken tilhører. Hvis analytter eller interne standarder, der er relateret til hinanden, placeres i samme gruppe, kan de lettere revideres og manipuleres sammen. Dette gælder for enheder, der har samme retentionstid som hinanden, f.eks. forskellige MRM-overgange for samme forbindelse.</p> <p>Indtast gruppenavne, eller udfyld dem automatisk. Se Højrekliksmenu i Define Components på side 43.</p>
IS Name	Indeholder navnet på den valgfrie interne standard, der skal bruges til den analyt, der er defineret for rækken. Dette felt gælder ikke for interne standarder i sig selv.
Mass Info	<p>I forbindelse med MRM-eksperimenter har denne kolonne titlen Q1/Q3 og indeholder masseparret for den komponent, der er defineret for rækken. Vælg den nødvendige overgang på listen, der viser alle de tilgængelige overgange for eksperimentet. Normalt initialiseres kolonnen automatisk med de tilgængelige overgange.</p> <p>I forbindelse med "profil (scanning)"-eksperimenter er denne kolonne benævnt Start - Stop og indeholder det masseområde, der anvendes til at beregne et XIC (ekstraheret ion-kromatogram) for den komponent, der er defineret for rækken. Masseområdet indtastes med en bindestreg, der adskiller de to masser. Eksempel: 200-201 eller 200-1. Ved sidstnævnte mulighed er masseområdet 199,5-200,5.</p>

Højrekliksmenu i Define Components

Højreklik på siden **Define Components** for at få adgang til en kontekstmenu. Følgende kommandoer er tilgængelige.

Tabel 7-3: Indstillinger for højrekliksmenuen i Define Components

Menupunkt	Beskrivelse
Clear	Rydder indholdet af markerede rækker eller kolonner. Rækker vælges ved at klikke eller trække i området før rækkeenumrene.
Copy	Kopierer markerede rækker eller kolonner til udklipsholderen.
Paste	Indsætter udklipsholderens indhold.

Tabel 7-3: Indstillinger for højrekliksmenuen i Define Components (fortsat)

Menupunkt	Beskrivelse
Find Component by Name	Vælger den komponent, hvis Name matcher teksten. Den nøjagtige tekst er ikke nødvendig for at finde et match. Dette er nyttigt for at vælge en bestemt komponent, hvis der er mange komponenter. Hvis der ikke oprindeligt er valgt en række i regnearket, starter søgningen fra den første række. Ellers starter søgningen fra rækken efter den valgte række og går derefter tilbage til begyndelsen. Dette er nyttigt, hvis der er mere end én komponent, hvis Name indeholder teksten. Hvis den første søgning ikke finder komponenten, skal du søge igen og lade den første komponent være valgt for at finde et andet match i tabellen.
Insert Row Above	Indsætter en enkelt tom række umiddelbart over den aktuelt markerede række.
Delete Selected Rows	Fjerner de aktuelt markerede rækker fra tabellen.
Sum Multiple Ions	Sammenlægger kromatogrammer for flere MRM-overgange eller masseintervaller med fuld scanning. Når kommandoen er valgt, føjes der flere massesøjler til tabellen Components . Masser, der vælges til en given række, anvendes ved konstruktionen af det sammenfattede XIC for den tilsvarende analyt eller interne standard. Det anbefales, at denne funktion altid vælges.
Groups	Se Undermenuen i Groups på side 79 .
Internal Standards	Se Undermenuen Internal Standards på side 80 .

Definition af integration

Vælg den forventede retentionstid og andre parametre for topsøgning for hver af komponenterne.

Listen til venstre viser en post for hver komponent, der er defineret på forrige side i guiden. Klik på en bestemt række for at få vist det tilsvarende kromatogram og den aktuelle integration for den repræsentative prøve. Rul gennem listen ved hjælp af piletasterne op og ned eller ved hjælp af rullehjulet. Generelt anbefales det, at alle komponenter gennemgås for at sikre, at integrationen er korrekt. Men hvis der er mange komponenter, kan du bruge kommandoen **Highlight Components with Uncertain RT** for at begrænse antallet, der skal gennemgås.

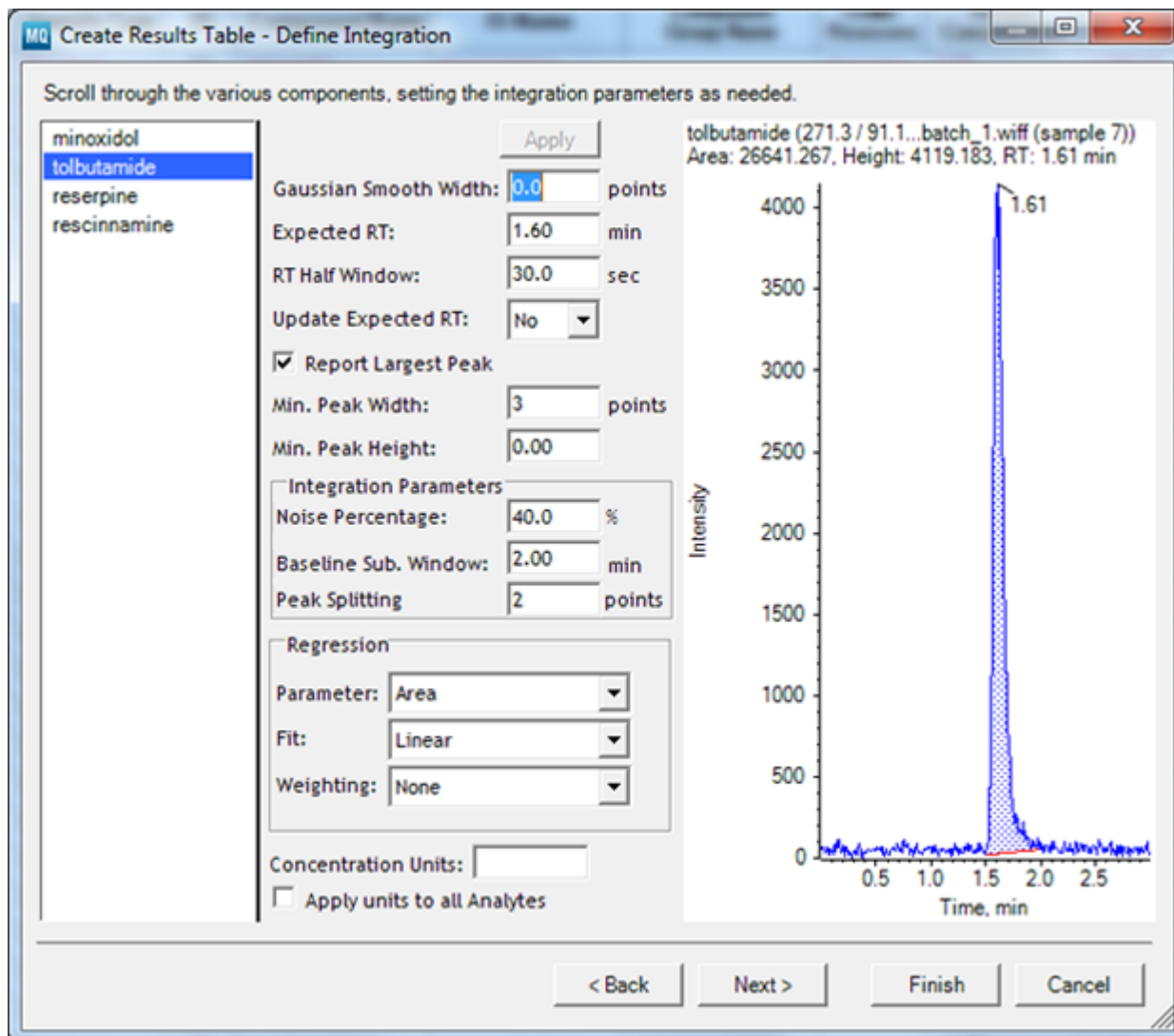
Bemærk: Hvis der er mere end nogle få komponenter, skal du sørge for, at topsøgningsparametrene er angivet til rimelige standardværdier, før du kører guiden, for at undgå at justere parametrene for hver komponent.

Højreklik på siden for at få vist de tilgængelige kommandoer. Se [Højrekliksmenu i Define Integration på side 46](#).

I gruppen **Regression** ændres kalibreringsindstillingerne for alle eller valgte komponenter, når resultattabellen er oprettet. Angiv standardkoncentrationsenhederne og regressionsparametrene, så de ikke skal justeres hver gang.

Tip! Zoom ind på grafen ved at trække i x- eller y-akseområderne. Gå tilbage til den forudindstillede visning ved hjælp af kontekstmenuen (**Home Graph Axes**) eller ved at dobbeltklikke i akseområdet.

Figur 7-8: Create Results Table - siden Define Integration



Etiket	Beskrivelse
Apply	Justerer om nødvendigt parametrene for topsøgning for en given komponent. Når du oprettet den nye resultattabel, anvendes de parametre, der er angivet for en given komponent, på den pågældende komponent for alle prøver, når dataene integreres. Se Parametre for integrationsalgoritme på side 117 .

Etiket	Beskrivelse
Expected RT	Oprindeligt angivet som retentionstiden for det punkt med den største intensitet for kromatogrammet. Normalt er dette den påkrævede top. Hvis der er isomerer til stede, kan det imidlertid være nødvendigt at justere denne værdi. For at justere værdien skal du indtaste en ny værdi i feltet Expected RT og derefter klikke på Apply . Alternativt kan du klikke på grafen og derefter trække hen over den ønskede top. Vær opmærksom på ikke ved et uheld at trække cursoren ind i grafen og justere den forventede retentionstid.
Parameter	Vælg Area eller Height .
Fit	De forskellige typer af tilpasning er beskrevet i Regressionsligninger på side 123 .
Weighting	De forskellige vægtningstyper er beskrevet i Vægtningsfaktorer på side 123 .
Concentration Units	Indtast de koncentrationsenheder, der anvendes til analytterne og eventuelle interne standarder. Hvis du udfører en relativ kvantificering, efterlades dette felt tomt. Guiden antager, at de samme enheder anvendes til alle komponenter. Brug Quantitation Method Editor , hvis dette ikke er tilfældet.
Apply units to all Analytes	Brugere kan indtaste en koncentrationsenhed for individuelle komponenter. Hvis du vil anvende den samme enhed på alle komponenterne, skal du markere dette afkrydsningsfelt. Oplysningerne skal være i overensstemmelse med Concentration Units .

Højrekliksmenu i Define Integration

Højreklik på siden **Define Integration** for at få adgang til en kontekstmenu. Følgende kommandoer er tilgængelige.

Tabel 7-4: Indstillinger for højrekliksmenuen i Define Integration

Menupunkt	Beskrivelse
Find Component by Name	Svarer til kommandoen på siden Define Components , men med den forskel, at der i stedet for at vælge rækker i Components -regnearket vælges enkelte elementer på komponentlisten.
Highlight Components with Uncertain RT	Anvendes til at fremhæve de komponenter, for hvilke den forventede standardretentionstid (taget som RT for toppen med den største intensitet for hvert kromatogram) er ukorrekt. Hvis der kun er nogle få komponenter, skal du gennemgå hver individuelt og ikke bruge denne kommando. Men hvis der er mange komponenter, skal du bruge denne kommando til visuelt kun at kontrollere dem, hvor der findes mere end én signifikant top i kromatogrammet. Se Dialogboksen Highlight Components på side 83 .

Tabel 7-4: Indstillinger for højrekliksmenuen i Define Integration (fortsat)

Menupunkt	Beskrivelse
Home Graph Axes	Returnerer den zoomede graf til sin startvisning, hvor alle data er synlige.
Overlay Other Components for Group	<p>Brug denne kommando til at overlejre kromatogrammer, hvis forskellige komponenter er blevet tildelt grupper, og hvis komponenterne, der er tildelt en given gruppe, forventes at have samme retentionstid. Hvis de f.eks. repræsenterer forskellige MRM-overgange af den samme faktiske forbindelse.</p> <p>Når den er valgt, tegnes kromatogrammet for den aktuelle komponent, hvis integrationsparametre er ved at blive defineret, ved hjælp af et fast blå spor, og dets integrerede topområde vises. Kromatogrammerne og ikke det integrerede topområde for de øvrige komponenter i samme gruppe overlejres ved hjælp af en stiplet linjestil.</p>
Update Retention Times	<p>Bruges til at nulstille de forventede retentionstider for en tidligere oprettet kvantificeringsmetode. Hvis en eksisterende kvantificeringsmetode åbnes, og Set New Typical Sample vælges, svarer de viste kromatogrammer til den nye prøve, men de forventede retentionstider forbliver uændrede.</p> <p>For hver komponent opdateres den forventede retentionstid til at svare til retentionstiden for toppen med den største intensitet i et vindue, hvor den specificerede bredde er centreret på den oprindelige forventede retentionstid.</p> <p>Se Dialogboksen Update Retention Time på side 83.</p>

Indstillinger for udsving

Brugere kan markere udsving i nøjagtigheden for **Standards**, **QCs**, **Ion Ratio** og **Calculated Concentration**. Følgende kommandoer er tilgængelige.

Figur 7-9: Dialogboksen Outlier Settings

MQ Create Results Table - 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

Etiket	Beskrivelse
Accuracy for Standards	Redigerer nøjagtighedstolerancen for Standard -prøverne.
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Redigerer nøjagtighedstolerancen for Standard -prøverne med en værdi, der er i overensstemmelse med laboratoriets standardprocedurer.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Redigerer nøjagtighedstolerancen for den laveste koncentration Standard , hvis laboratoriets standardprocedure angiver en anden tolerance for denne Standard .
Accuracy for QCs	Redigerer nøjagtighedstolerancen for Quality Control -prøverne.
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Redigerer nøjagtighedstolerancen for Quality Control -prøverne med en værdi, der er i overensstemmelse med laboratoriets standardprocedurer.

Etiket	Beskrivelse
Ion Ratio	Kun tilgængelig, hvis komponenterne er tildelt grupper. Vælg at bruge ionforholdet for topområdet eller tophøjden. Topområde eller tophøjde indstilles, når regressionsparameteren vælges under udviklingen af kvantificeringsmetoden.
Calculated Concentration	Når der anvendes Standard -prøver med kendt koncentration, er dette den bagudberegnete koncentration fra kalibreringskurven. Regressionsligninger beskriver, hvordan regressionen udføres for de forskellige regressionstyper og vægtning.
Component	Analytterne eller de interne standarder for alle prøver.
IS	Den valgte interne standard. Kun tilgængelig, hvis afkrydsningsfeltet Ion Ratio er markeret.
Group	Komponenter, der har samme retentionstid (dvs. forskellige overgange for samme forbindelse), kan grupperes. Kun tilgængelig, hvis afkrydsningsfeltet Ion Ratio er markeret.
Ion Ratio Tolerance (%)	Brug standardindstillingen, eller rediger denne indstilling i henhold til laboratoriets standardprocedurer. Kun tilgængelig, hvis afkrydsningsfeltet Ion Ratio er markeret.
Lower Limit of Calculated Concentration	Indtast den nedre grænse for det acceptable koncentrationsområde. Alle prøver, hvor Calculated Concentration er lavere end denne værdi, markeres som et koncentrationsudsving.
Upper Limit of Calculated Concentration	Indtast den øvre grænse for det acceptable koncentrationsområde. Alle prøver, hvor Calculated Concentration er højere end denne værdi, markeres som et koncentrationsudsving.

Højreklik på siden **Outlier Settings** for at få adgang til en kontekstmenu.

Tabel 7-5: Indstillinger for højrekliksmenu i Outlier Settings

Etiket	Beskrivelse
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Anvender den nedre grænse for den beregnede koncentration på alle analytterne, hvis alle analytterne har samme kriterier.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Anvender den øvre grænse for den beregnede koncentration på alle analytterne, hvis alle analytterne har samme kriterier.

Kolonner i resultattabel

Bemærk: Nogle kritiske kolonner med prøveoplysninger, som f.eks. **Sample Name**, **Sample ID** osv., bør ikke skjules, når brugerne tilpasser kolonneindstillingerne i **Results Table**.

Resultattabeller

For numeriske felter anvendes formatet 0.00 for ikke-videnskabelige notationer og formatet 0.00e0 for videnskabelige notationer. Rediger decimaltegnene for at angive præcisionen af de tal, der vises. Der kan kun anvendes punktum (.) som decimalseparator. Ciffergruppering understøttes ikke.

Tabel 7-6: Kolonner i resultattabel

Etiket	Beskrivelse
Accuracy	Når der anvendes Standard -prøver med kendt koncentration for Standard -prøver og Quality Control , defineres denne som: $100 \% * (\text{beregnet koncentration})/(\text{faktisk koncentration})$ For andre prøvetyper er værdien N/A.
Acq. Method Name	Navnet på den dataopsamlingsmetode, der er anvendt til at opsamle prøven.
Acquisition Date & Time	Dato og klokkeslæt for opsamling af wiff-prøven.
Actual Concentration	For Standard -prøver og Quality Control -prøver er dette den forventede kendte koncentration.
Area	Det registrerede topområde. Hvis der ikke blev registreret nogen top, er værdien N/A.
Area / Height	Det registrerede topområde divideret med højden. Hvis der ikke blev registreret nogen top, er værdien N/A.
Area Ratio	For analyttyper, som anvender en intern standard, er dette forholdet mellem Area og IS Area . For interne standarder eller for analytter uden en intern standard er værdien N/A.
Asymmetry Factor	Afstanden mellem toppens midterlinje og den bageste hældning divideret med afstanden mellem toppens midterlinje og den forreste hældning, med alle målinger foretaget ved 10 % af den maksimale tophøjde.
Baseline Delta / Height	Den absolutte værdi af højdeforskellen mellem baseline (ved toppens start og toppens slutning) og den faktiske tophøjde. Værdier, som er større end ca. 0,1, indikerer, at baseline muligvis ikke er integreret korrekt, og at toppen skal gennemgås.
Calculated Concentration	Når der anvendes Standard -prøver med kendt koncentration, er dette den bagudberegnete koncentration fra kalibreringskurven. Se Regressionsligninger på side 123 for at få oplysninger om, hvordan regressionen udføres for de forskellige regressionstyper og vægtning.
Component Comment	En vilkårlig kommentar, som gælder for analytten eller den interne standard, for alle prøver.
Component Group Name	Det gruppennavn (hvis relevant), som er tilknyttet til analytten eller den interne standard.

Tabel 7-6: Kolonner i resultattabel (fortsat)

Etiket	Beskrivelse
Component Index	Indekset for analytten eller den interne standard i den oprindelige kvantificeringsmetode. Det kan være nyttigt at sortere tabellen på baggrund af dette felt.
Component Name	Navnet på analytten eller den interne standard.
Conc. Units	Koncentrationsenhederne.
Concentration Ratio	For analyttyper, som anvender en intern standard, er dette forholdet mellem Actual Concentration og IS Actual Concentration . For interne standarder eller for analytter uden en intern standard er værdien N/A.
Corrected Area	Det registrerede topområde. Hvis der ikke blev registreret nogen top, er værdien N/A.
Corrected Area / Height	Det registrerede topområde divideret med højden. Hvis der ikke blev registreret nogen top, er værdien N/A.
Corrected Height	Den registrerede tophøjde. Hvis der ikke blev registreret nogen top, er værdien N/A.
Dilution Factor	Den faktor, som prøven blev fortyndet med. Denne faktor anvendes til beregning af kalibreringskurven. Se Regressionsligninger på side 123 .
End Time	Slutretentionstiden for den registrerede top i minutter.
End Time at 10%	Tiden i minutter på bagsiden af toppen, hvor intensiteten er ved 10 % af tophøjden.
End Time at 5%	Tiden i minutter på bagsiden af toppen, hvor intensiteten er ved 5 % af tophøjden.
Expected Ion Ratio	Det forventede ionforhold for alle prøvetyper.
Expected RT	Den oprindelige forventede retentionstid fra kvantificeringsmetoden i minutter.
Height	Den registrerede tophøjde. Hvis der ikke blev registreret nogen top, er værdien N/A.
Height Ratio	For analyttyper, som anvender en intern standard, er dette forholdet mellem Height og IS Height . For interne standarder eller for analytter uden en intern standard er værdien N/A.
Index	Dette er indekset for rækken i den oprindelige usorterede rækkefølge. Hvis tabellen er sorteret på baggrund af en anden kolonne, kan den returneres til den oprindelige rækkefølge ved at sortere efter denne kolonne.
Injection Volume	Viser volumen for den prøve, der er injiceret af autosampleren, i ml.

Tabel 7-6: Kolonner i resultattabel (fortsat)

Etiket	Beskrivelse
Integration Type	<ul style="list-style-type: none"> En værdi for Baseline angiver, at der blev integreret en enkeltstående top på sædvanlig måde. En værdi for Valley angiver, at der var to tilstødende toppe, og at signalet ikke vendte tilbage til baselineværdien mellem dem. En værdi for Manual angiver, at toppen blev integreret manuelt. En værdi for N/A angiver, at der ikke blev registreret nogen top.
Ion Ratio	<ul style="list-style-type: none"> Ion Ratios bestemmes, når mindst to MRM-overgange fra en enkelt analyt er blevet opsamlet i en gruppe. Den første komponent i en undergruppe anvendes som Quantifier-ioner. De resterende komponenter i undergruppen anvendes som Qualifier-ioner. Ionforhold = (topområde eller kvalifikatorhøjde)/(topområde eller kvantifikatorhøjde) Undergrupper <ul style="list-style-type: none"> Alle analytter i en gruppe udgør en Analyte-undergruppe. Alle interne standarder i en gruppe udgør en IS-undergruppe. Hvis en komponent ikke er medlem af en gruppe, er Ion Ratio N/A. Hvis toppen ikke findes, er Ion Ratio N/A. Anvendes for alle komponenter i både undergruppen Analyte og IS, for Quantifier er Qualifier sig selv. Hvis integrationen ændres for enten toppen Quantifier eller Qualifier, beregnes Ion Ratio igen. Kan beregnes for enten topområdet eller tophøjden. Hvis Area anvendes i regressionsdelen af en .qmethod for den første komponent (komponentindekset er 1) i Results Table, anvendes topområdet til beregningen af Ion Ratio for hele Results Table. Hvis Height anvendes i regressionen af den første komponent, anvendes tophøjden til beregningen.
IS	Et markeret afkrydsningsfelt angiver, at komponenten for rækken er en intern standard, ikke en analyt.
IS Actual Concentration	Den faktiske koncentration for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.

Tabel 7-6: Kolonner i resultattabel (fortsat)

Etiket	Beskrivelse
IS Area	Område for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Area / Height	Forholdet mellem Area og Height for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Baseline Delta / Height	Baseline Delta / Height for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Comment	En vilkårlig kommentar til den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Corrected Area	Korrigeret område for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Corrected Area / Height	Corrected Area / Corrected Height for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Corrected Height	Corrected Height for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS End Time	End Time for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Expected RT	Expected RT for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Height	Height for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Integration Type	Integration Type for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Mass Info	Mass Info for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Name	Component Name for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.

Tabel 7-6: Kolonner i resultattabel (fortsat)

Etiket	Beskrivelse
IS Peak Comment	Peak Comment for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Quality	Kvalitet for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Region Height	Kvalitetsmetrik for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Retention Time	Retention Time for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Signal / Noise	Signal / Noise for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Start Time	Start Time for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Total Width	Total Width for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
IS Width at 50%	Bredden ved 50 % for den interne standard, som er tilknyttet til den aktuelle analyt, eller N/A for interne standarder eller for analytter uden en intern standard.
Mass Info	Masseoplysninger, der er knyttet til komponenten. For MRM-eksperimenter er dette Q1/Q3 og for profileksperimenter (fuld scanning) er det Start - Stop .
Modified	Et afkrydsningsmærke angiver, at parametrene for topsøgning er blevet ændret ved hjælp af ruden Peak Review fra de oprindelige værdier, som er angivet i kvantificeringsmetoden.
Operator Name	Navnet på den instrumentoperatør, som har opsamlet prøven.
Original Filename	Navnet på wiff-filen.

Tabel 7-6: Kolonner i resultattabel (fortsat)

Etiket	Beskrivelse
Outlier Reasons	<p>Når udsvingskriterierne er blevet fastsat i kvantificeringsmetoden, angiver denne kolonne, hvilket kriterium der blev fundet at være uden for de forudbestemte grænser for komponenten.</p> <p>Kolonnen Outlier Reasons er kun tilknyttet til Outlier Settings i kvantificeringsmetoden, og det er en forudindstillet kolonne i Results Table.</p> <p>Årsagen til, at udsvinget er markeret:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Accuracy • Concentration • Ion Ratio <p>Hvis der er en top for kvantifikatoren, men ikke kvalifikatoren, markeres ionforholdet for begge komponenter. Hvis der er en top for kvalifikatoren, men ikke kvantifikatoren, markeres ionforholdet for begge komponenter. Hvis ingen af dem har toppe, er der intet flag for nogen af komponenterne.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Cannot calculate the Expected Ion Ratio.
Peak Comment	En vilkårlig kommentar til rækken.
Plate Number	Autosamplerens pladenummer, som oprindeligt angivet i Batch Editor , der anvendes til at opsamle data.
Points Across Baseline	Antallet af scanninger fra starten til slutningen af toppen.
Points Across Half Height	Antallet af scanninger på tværs af toppen ved ca. 50 % af højden.
Quality	<p>Denne metrik forsøger at angive kvaliteten af den integrerede top.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Værdier nær nul angiver, at toppen er dårligt integreret (eller at der ikke er nogen faktisk topværdi til stede). • Værdier nær 1,0 indikerer, at toppen er godt integreret og ikke behøver at blive gennemgået.
Rack Number	Autosamplerens racknummer, som oprindeligt angivet i Batch Editor , der anvendes til at opsamle data.
Region Height	<p>Tophøjden for den største top i nærheden af den faktiske registrerede top. Dette er nyttigt i forbindelse med feltet Quality. Toppe med lav kvalitet, som også har en rimelig Region Height, skal gennemgås. Hvis Region Height er lille, er der ingen signifikant top til stede.</p>

Tabel 7-6: Kolonner i resultattabel (fortsat)

Etiket	Beskrivelse
Relative RT	For analytter, som anvender en intern standard, er dette forholdet mellem Retention Time og IS Retention Time . For interne standarder eller for analytter uden en intern standard er værdien N/A.
Retention Time	Den faktiske retentionstid for den registrerede top i minutter.
Sample Comment	En vilkårlig kommentar til prøven.
Sample ID	Et vilkårligt id for prøven. Det initialiseres fra den værdi, som oprindeligt blev angivet i Batch Editor , der anvendes til at opsamle data.
Sample Index	Indekset for den aktuelle prøve.
Sample Name	Et vilkårligt navn til prøven. Det initialiseres fra den værdi, som oprindeligt blev angivet i Batch Editor , der anvendes til at opsamle data.
Sample Type	Prøvetypen. Se Filtrering af prøvetype på side 37 .
Signal / Noise	<p>Et skøn over forholdet mellem tophøjden for den registrerede top og den støj, der er til stede i kromatogrammet.</p> <p>Når Signalfinder-integrationsalgoritmen anvendes, estimeres støjen ved hjælp af den beregnede relative støj og baseline ved toppositionen. MQ4-integrationsalgoritmen anvender en tilsvarende metode, bortset fra at baseline estimeres ved hjælp af hele kromatogrammet.</p> <p>Se Beregning af relativ støj og signal/støj-forhold på side 147.</p>
Slope of Baseline	Angiver drift af baseline.
Start Time	Startretentionstiden for den registrerede top i minutter.
Start Time at 10%	Tiden i minutter på forsiden af toppen, hvor intensiteten er ved 10 % af toppen.
Start Time at 5%	Tiden i minutter på forsiden af toppen, hvor intensiteten er ved 5 % af toppen.
Tailing Factor	Afstanden mellem toppens forreste og bageste hældning divideret med to gange afstanden mellem toppens midterlinje og den forreste hældning, med alle målinger foretaget ved 5 % af den maksimale tophøjde.
Total Width	Bredden af den kromatografiske top i minutter ved baseline.

Tabel 7-6: Kolonner i resultattabel (fortsat)

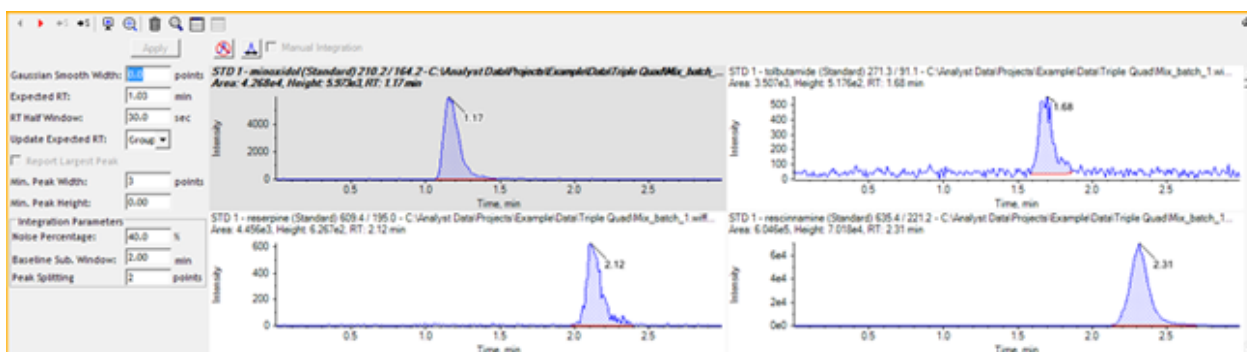
Etiket	Beskrivelse
Used	For Standard -prøver angiver et afkrydsningsmærke, at den tilsvarende analyt aktuelt anvendes til konstruktion af kalibreringskurven. For Quality Control -prøver angiver et afkrydsningsmærke, at analytten anvendes til beregning af QC -statistikken. For andre prøvetyper er dette felt kun til orientering.
Vial Number	Autosamplerens hætteglasnummer, som oprindeligt angivet i Batch Editor , der anvendes til at opsamle data.
Width at 10%	Bredden af toppen målt ved 10 % af tophøjden.
Width at 5%	Bredden af toppen målt ved 5 % af tophøjden.
Width at 50%	Bredden af den kromatografiske top i minutter af den registrerede top målt ved halvdelen af topintensiteten.

Brug ruden **Peak Review** til visuelt at inspicere de rå kromatogrammer, således at kvaliteten af topsøgningsprocessen kan bestemmes. Når en **Results Table** er aktiv, skal du klikke på ikonet **Show Peak Review** i resultattabellens værktøjslinje for at åbne ruden Peak Review. Anmelderen skal gennemse de kvantitative data i overensstemmelse med kriterierne for topintegration og dataaccept i deres egne standarddriftsprocedurer.

Grupperingen af numre understøttes ikke. Brugere bør ikke gruppere tal i nogen tekstbokse (for eksempel integrationsparametre) og gitre (for eksempel **Results Tables**).

Forbedret **Peak Review** angiver accepten af **Ion Ratio** på et overlejret kromatogram. Brugere kan også forstørre et enkelt kromatogram.

Figur 8-1: Ruden Peak Review



Brug ruden **Peak Review** til at korrigere kromatogrammer, der ikke er integreret korrekt, enten ved at justere parametrene for topsøgning eller ved manuelt at vælge start- og slutpunkter for integration. Når et kromatogram er integreret, opdateres **Results Table** automatisk med det nye topområde og andre parametre.

Kvantificeringsmetoder omfatter de kriterier, der anvendes til at kvantificere de toppe, der er udvalgt til integration. Anmelderen skal gennemgå de kvantitative data i overensstemmelse med kriterierne for topintegration og dataaccept i deres egne standardprocedurer.

Manuel integration

Når en top i et bestemt kromatogram er manuelt integreret, markeres dette afkrydsningsfelt for at angive, at kromatogrammet er manuelt integreret. Hvis brugeren rydder afkrydsningsfeltet, mens systemet er i denne tilstand, annulleres den manuelle integration for toppen, og toppen reintegreres automatisk ved hjælp af metodeparametrene.

Forskellen mellem dette afkrydsningsfelt og knappen **Enable Manual Integration Mode** er at dette afkrydsningsfelt afspejler status for den aktuelle top, mens knappen angiver adfærden, når man trækker et kromatogram.

Bemærk: Når manuel integrationstilstand er aktiveret, forbliver den aktiveret for alle ruder, indtil den deaktiveres.

Apply

Hvis brugeren har justeret nogle af topsøgningsparametrene, er knappen **Apply** aktiveret. Klik på knappen for at anvende de modificerede topsøgningsparametre på det aktive kromatogram.

Bortset fra, når systemet er i manuel integrationstilstand, svarer det at trække over en bestemt top i et kromatogram til at justere parameteren **Expected RT** og derefter klikke på **Apply**.

Bemærk: Hvis brugeren ændrer topsøgningsparametrene og derefter aktiverer et andet kromatogram uden at klikke **Apply**, anvendes parametrene ikke, og ændringerne går tabt.

Tip til gennemgang af toppe

- Sortér **Results Table** efter en bestemt kolonne, og gennemgå kun de kromatogrammer, der sorteres øverst eller nederst i tabellen.
- Ruden **Peak Review** er altid synkroniseret med dens tilsvarende **Results Table** og viser kromatogrammerne for de samme toppe og i samme rækkefølge som i **Results Table**. Eventuelle ændringer (f.eks. sortering af rækker, filtrering af prøvetyper eller valg af komponenter), der foretages i **Results Table**, vises automatisk i ruden **Peak Review**.
- Vælg antallet af kromatogrammer, som du vil have vist på én gang.
- Brug rullepanelet til højre for ruden til at rulle gennem de tilgængelige kromatogrammer. Når ruden **Peak Review** er aktiv, kan du bruge piletasterne op og ned på tastaturet eller rullehjulet til at navigere igennem kromatogrammerne.
- Et bestemt kromatogram anses til enhver tid for at være aktivt og angives med titlen i fed skrift. Gør et bestemt kromatogram aktivt ved at klikke et vilkårligt sted i det.
- Når et kromatogram bliver aktivt, opdateres integrationsparametrene, der vises til venstre for ruden, for at afspejle det nyligt aktiverede kromatogram. Hvis brugeren justerer topintegrationsparametrene og derefter klikker på **Apply**, påvirker dette det aktuelt aktive kromatogram.
- For at få vist den tilsvarende top i ruden **Peak Review** skal du vælge en række i **Results Table** ved at klikke i det grå område til venstre for den første kolonne. Hvis brugeren ruller til et bestemt kromatogram i ruden **Peak Review**, fremhæver **Results Table** den tilsvarende række og ruller den derefter ind i visningen.
- Hvis brugeren trækker på tværs af en bestemt top i et kromatogram, opdateres integrationsparameteren **Expected RT** med den faktiske retentionstid for toppen. Den nye retentionstid anvendes derefter automatisk, og toppen integreres igen, hvilket opdaterer **Results Table**.
- Hvis brugeren gennemgår toppe i manuel integrationstilstand, vil træk på tværs af toppe manuelt integrere den valgte top.

Topgennemgang

- Topgennemgangsprocessen kan gøres hurtigere ved at cache tidligere beregnede kromatogrammer. Se [Menuen Edit på side 11](#).

Højrekliksmenu i Peak Review

Disse funktioner styrer udseendet af de integrationsparametre, der vises til venstre for kromatogrammerne. Højreklik i ruden **Peak Review** for at få adgang til en kontekstmenu. Følgende kommandoer er tilgængelige.

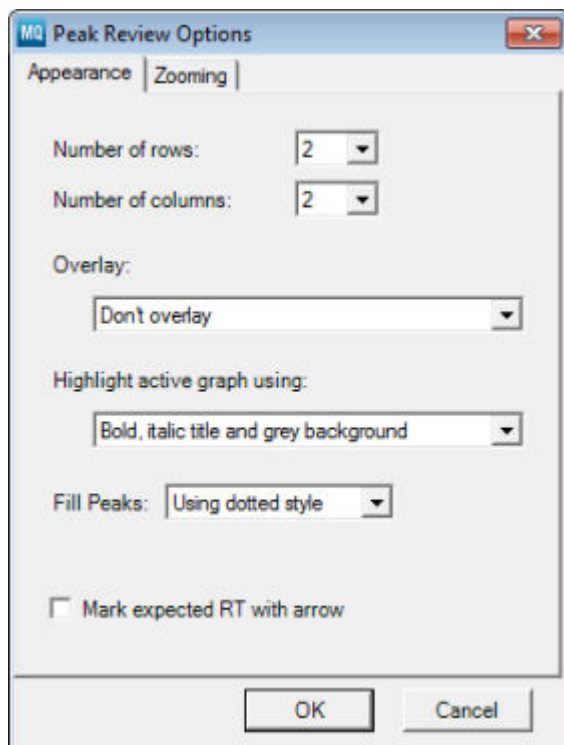
Tabel 8-1: Topgennemgangsparametre

Opgave	Kommandoer
Skift udseende af ruden Peak Review .	Dialogboksen Peak Review Options: Fanen Appearance på side 60 eller Dialogboksen Peak Review Options: Fanen Zooming på side 63 .
Angiv titelformatet for topgennemgang.	Set Peak Review Title Format på side 64 .
Vis parametrene ved hjælp af beskrivende navne for de enkelte parametre.	Som standard er Show Parameters-Normal Width altid indstillet.
Kopier parametrene.	Copy Parameters på side 65 .
Indsæt parametrene.	Paste Parameters på side 65 .
Angiv toppen til "Ikke fundet".	Angivelse af top til "Not found" på side 65 .
Brug toppen.	Use Peak på side 65 .
Opdater kvantificeringsmetoden for komponenten.	Opdatering af kvantificeringsmetode for komponent på side 66 .
Opdater kvantificeringsmetoden for gruppen.	Opdatering af kvantificeringsmetode for gruppe på side 66 .
Anvend integrationsparametrene på en prøve i gruppen.	Apply Integration Parameters to Sample Within Group på side 66 .
Før toppen tilbage til den oprindelige metode.	Revert Peak to Original Method på side 66 .
Før alle toppe for komponenten tilbage.	Revert All Peaks for Component på side 66 .

Dialogboksen Peak Review Options: Fanen Appearance

Højreklik i ruden **Peak Review** for at vælge at justere de indstillinger, der påvirker udseendet af ruden **Peak Review**. Det anbefales, at der ikke angives mere end fire rækker og fire kolonner.

Figur 8-2: Dialogboksen Peak Review Options: Fanen Appearance



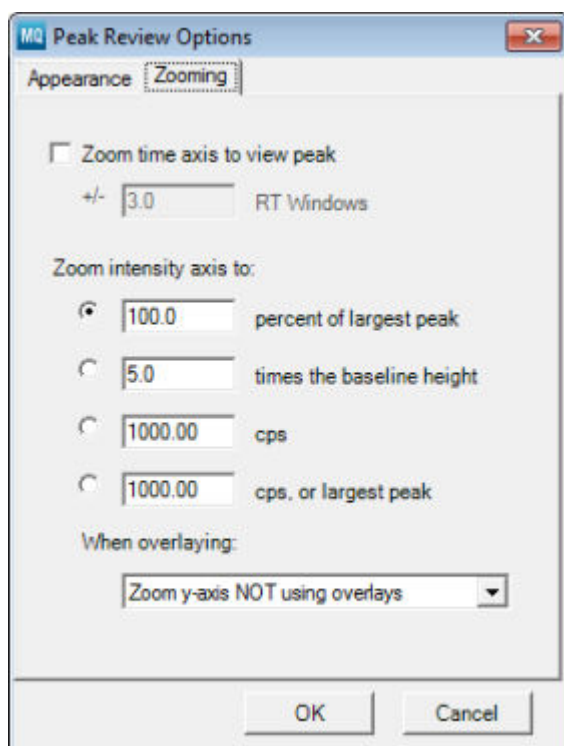
Etiket	Beskrivelse
Number of rows and Number of columns	Styrer antallet af kromatogrammer, der er synlige samtidigt. Medmindre kromatogrammerne allerede er cachelagret, vil det tage længere tid at rulle mellem sider, hvis der vises mange kromatogrammer. Se Menuen Edit på side 11 .

Etiket	Beskrivelse
Overlay	<p>Bestemmer, om andre kromatogrammer skal overlejres oven på hovedkromatogrammet i hver af underruderne.</p> <ul style="list-style-type: none"> • Don't Overlay: Forhindrer overlejring af andre kromatogrammer. • All components for group: Overlejrer alle kromatogrammer for komponenter fra samme gruppe som hovedkomponenten (for den aktuelle prøve). • Analytes and IS's separately for group: Magen til den foregående mulighed, bortset fra at i stedet for at overlejre alle komponenter fra samme gruppe, holdes analytter og interne standarder adskilt. • Internal Standard with Analyte: For analytter overlejres den interne standard, der anvendes af analytten (interne standardkromatogrammer har ikke andre overlejringer). • Qualifier and Quantifier with Ion Ratio Lines: Viser linjerne for ionforhold. Vælg denne indstilling for at se accepten af ionforholdet i Results Table. <p>Brugerne kan se accepten af ionforholdet, når grupper er defineret i kvantificeringsmetoden. Ion Ratio Lines er imidlertid kun en indikation af accepten og ikke det endelige resultat. Linjerne vises i kromatogrammet som tophøjde, men linjerne beregnes på grundlag af topområdet eller højden afhængigt af de indstillinger, der er defineret i kvantificeringsmetoden. Hvis der er en uoverensstemmelse mellem højde og område, skal brugeren bekræfte udsvinget i Ion Ratio i Results Table.</p>
Highlight active graph using:	Angiver, hvordan det aktuelt aktive kromatogram skal vises. Indstil til at bruge titlen i fed, kursiv skrift og den grå baggrund.
Fill peaks	<p>Angiver, hvordan det integrerede område for toppe skal vises. Valgmulighederne er:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Brug en stiplet linje som vist på screenshottene i dette dokument. • Brug en ubrudt linje. • Ingen udfyldning. I alle tilfælde er baseline for toppen også tegnet (med rødt). <p>Hvis du vælger den tredje valgmulighed, tegnes kun baseline, og toppen udfyldes ikke.</p>
Mark expected RT with arrow	Angiver Expected Retention Time med en blå pil tegnet under tidsaksen. Dette kan være nyttigt for at afgøre, om den integrerede top ligger tæt på den forventede RT.

Dialogboksen Peak Review Options: Fanen Zooming

Højreklik i ruden **Peak Review** for at vælge at justere de indstillinger, der påvirker udseendet af ruden **Peak Review**. Funktionerne **Zoom intensity axis to** bruges til automatisk at justere kromatogrammernes y-akse.

Figur 8-3: Dialogboksen Peak Review Options: Fanen Zooming



Etiket	Beskrivelse
Zoom time axis to view peak	Hvis du vælger denne funktion, justeres kromatogrammernes x-akse automatisk, så kun en del af hele kørslen er synlig. Dette er nyttigt for lange LC-kørsler, så du tydeligere kan se det område, der er af interesse. Vinduesbredden udtrykkes som et multiplum af Windows RT-integrationsparameteren. Den samlede bredde af det zoomede område er dobbelt så bred som det angivne antal multipla af RT Window .
Zoom intensity axis to percent of largest peak	Du kan bruge denne funktion til automatisk at justere kromatogrammernes y-akse. Skalerer y-aksen til den angivne procentdel af den største top inden for kromatogrammets synlige x-område. Denne vil være mindre end den samlede LC-kørselslængde, hvis du anvender funktionen Zoom tidsakse for at få vist top.
Zoom intensity axis to times the baseline height	Du kan bruge denne funktion til automatisk at justere kromatogrammernes y-akse. Du kan bruge denne funktion til at fokusere på selve baselineregionen.

Topgennemgang

Etiket	Beskrivelse
Zoom intensity axis to cps	Skalerer y-aksen direkte til den angivne værdi.
Zoom intensity axis to cps, or largest peak	Skalerer y-aksen til den mindste af den angivne værdi eller den største top.
When overlaying Zoom y-axis NOT using overlays	Fastholder indstillingerne fra Zoom-intensitetsaksen til afsnittet kun ved hjælp af det primære datasæt. Denne indstilling kan medføre, at overlejringerne kun er delvist synlige, hvis de er mere intense end det primære datasæt.
When overlaying Zoom y-axis using overlays	Anvender de primære datasæt og alle overlejring og bruger den største overordnede y-værdi. Denne funktion holder altid overlejringerne synlige.
When overlaying Use a percentage y-axis	Skalerer det primære datasæt og overlejringerne hver for sig ved hjælp af en procentvis skala. Dette får hvert spor til at bruge den fulde tilgængelige højde. Du kan dog ikke foretage en direkte visuel sammenligning af de relative tophøjder.

Tip! Dobbeltklik på y-aksen for at skalere aksens til den mest intense top i hele datasættet.

Når det er valgt, tegnes kromatogrammet for den top, der er ved at blive gennemgået, ved hjælp af et solidt blå spor, og dets integrerede topområde vises. Kromatogrammerne (ikke det integrerede topområde) for de øvrige komponenter (for samme prøve) overlejres ved hjælp af en stiplede linje.

Når grafen viser overlejring på denne måde, kan du dobbeltklikke et vilkårligt sted i titelområdet for at skifte mellem at få vist titlerne for alle kromatogrammer eller kun for det aktive.

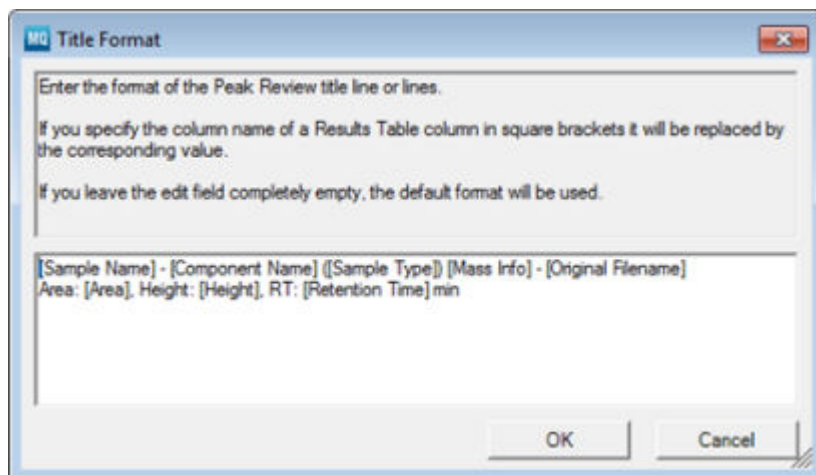
Tip! Dobbeltklik på x-aksen for at gå tilbage til startvisningen af grafen, hvor alle data er synlige. Zoom ind ved at trække inden for aksens for at vælge et tidsinterval.

Set Peak Review Title Format

Brug dialogboksen til at tilpasse de oplysninger, der vises i grafens titel for hvert af kromatogrammerne. Hvis brugeren indtaster et kolonnenavn i **Results Table** i firkantede parenteser, erstattes det af feltværdien for den aktuelle prøve og komponent. Brugeren kan også indtaste yderligere tekst, der efterlades, som den er. Det anbefales, at prøvenavnet [Sample Name] medtages i titlen på topgennemgangen.

- Højreklik i ruden **Peak Review**, og klik derefter på **Set Peak Review Title Format**

Figur 8-4: Dialogboksen Title Format



Copy Parameters

Højreklik i ruden **Peak Review** for at få adgang til denne kommando. Brug denne kommando sammen med **Paste Parameters** for at kopiere topsøgningsparametrene fra et kromatogram til et andet. Denne kommando kan bruges, hvis den samme justering af parametrene skal foretages for flere kromatogrammer.

1. Højreklik på en graf med et aktivt åbent kromatogram, og klik derefter på **Copy Parameters**.
2. Brug kommandoen **Update Quantitation Method for Component** til at anvende ændringen på alle kromatogrammer for komponenten.

Paste Parameters

1. Højreklik på en graf med et aktivt åbent kromatogram, og klik derefter på **Copy Parameters**.
2. Højreklik på et andet kromatogram, og klik derefter på **Paste Parameters**. De tidligere kopierede parametre anvendes på det nye kromatogram.

Angivelse af top til "Not found"

- I en graf med et aktivt åbent kromatogram, skal du højreklikke og derefter klikke på **Set Peak to 'Not Found'** for at fjerne integrationen fra det valgte kromatogram.

Use Peak

- I en graf, hvor et aktivt kromatogram er åbent, skal du højreklikke og derefter klikke på **Use Peak** for at inkludere eller ekskludere den aktive top fra kalibreringskurven.

Opdatering af kvantificeringsmetode for komponent

Når du har justeret topsøgningsparametrene for et bestemt kromatogram, skal du vælge denne funktion for at justere kopien af den kvantificeringsmetode, der er gemt med resultattabellen, for at bruge disse parametre for komponenten.

- Juster topsøgningsparametrene, højreklik, og klik derefter på **Update Quantitation Method for Component**.
For den pågældende komponent integreres alle prøver automatisk, så de nye parametre anvendes og ruden **Peak Review** og **Results Table** opdateres. Hvis nogle af toppene er blevet manuelt integreret, bliver brugeren spurgt, om reintegrationen skal gælde for alle toppe eller kun for dem, der ikke blev manuelt integreret.

Opdatering af kvantificeringsmetode for gruppe

Svarer til kommandoen **Update Quantitation Method for Component**, bortset fra at integrationen gælder for alle komponenter, der tilhører samme gruppe som komponenten for det aktuelt aktive kromatogram. Denne funktion er nyttig, hvis brugeren har tildelt de forskellige komponenter til grupper, og hvis de komponenter, der er tildelt til en given gruppe, forventes at have samme retentionstid. I det tilfælde kan brugeren nulstille parametrene, herunder den forventede retentionstid, for alle komponenter til gruppen på én gang. Denne funktion er ikke nyttig, hvis komponenterne for grupperne ikke har de samme retentionstider.

- Juster topsøgningsparametrene, højreklik, og klik derefter på **Update Quantitation Method for Group**.

Apply Integration Parameters to Sample Within Group

Efter justering af topsøgningsparametrene for et specifikt kromatogram, skal du bruge denne funktion til at anvende de oprindelige parametre fra kopien af kvantificeringsmetoden, der er gemt sammen med resultattabellen, på kromatogrammet.

- Når du har justeret topsøgningsparametrene for et specifikt kromatogram, skal du højreklikke og derefter klikke på **Apply Integration Parameters to Sample Within Group**.

Revert Peak to Original Method

Efter justering af topsøgningsparametrene for et specifikt kromatogram, skal du bruge denne funktion til at anvende de oprindelige parametre fra kopien af den kvantificeringsmetode, der er gemt sammen med **Results Table**, på kromatogrammet.

- Højreklik og klik derefter på **Revert Peak to Original Method**.

Revert All Peaks for Component

Efter justering af topsøgningsparametrene for nogle kromatogrammer, skal du bruge denne funktion til at anvende de oprindelige parametre fra kopien af kvantificeringsmetoden, der er gemt sammen med **Results Table**, på alle kromatogrammer for samme komponent som det aktive kromatogram. Hvis nogle af toppene er blevet manuelt integreret, bliver brugeren

spurgt, om reintegrationen skal gælde for alle toppe eller kun for dem, der ikke blev manuelt integreret.

- Højreklik og klik derefter på **Revert All Peaks for Component**.

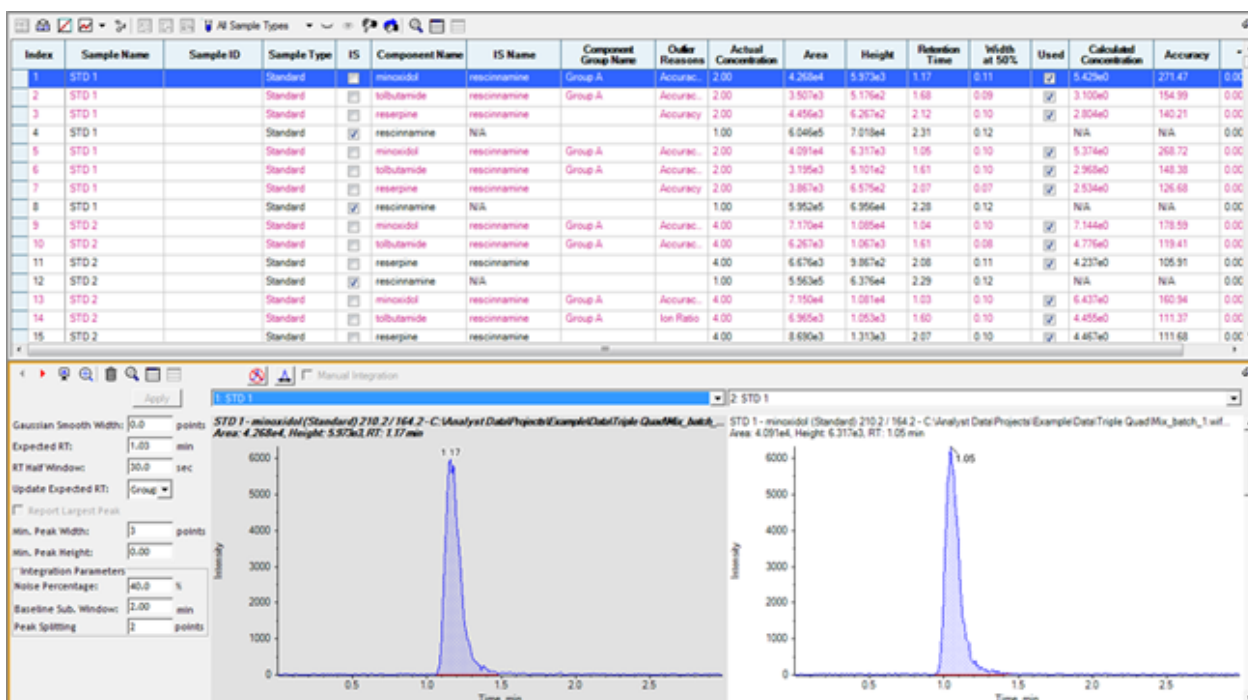
Eksempel på prøvegennemgang side om side

9

Brug funktionen **Side-by-side Sample Review** til at screene for bestemte målforbindelser. Brugere kan vælge op til seks prøver, hvor de kan foretage sammenligning af topresponserne på tværs af prøverne. Anmelderen skal gennemse de kvantitative data i overensstemmelse med kriterierne for topintegration og dataaccept i deres egne standarddriftsprocedurer.

Når en **Results Table** er aktiv, skal du klikke på ikonet **Side by Side Sample Review** på værktøjslinjen for **Results Table** for at åbne ruden **Side by Side Sample Review**.

Figur 9-1: Ruden Side by Side Sample Review



Kvantificeringsmetoder omfatter de kriterier, der anvendes til at kvantificere de toppe, der er udvalgt til integration. Anmelderen skal gennemgå de kvantitative data i overensstemmelse med kriterierne for topintegration og dataaccept i deres egne standardprocedurer.

Gennemførelse af en prøvegennemgang side om side

1. Åbn en resultattabel.
2. Klik på ikonet **Side by Side Sample Review**.
3. Vælg en prøve fra listen i ruden **Side by Side Sample Review**.

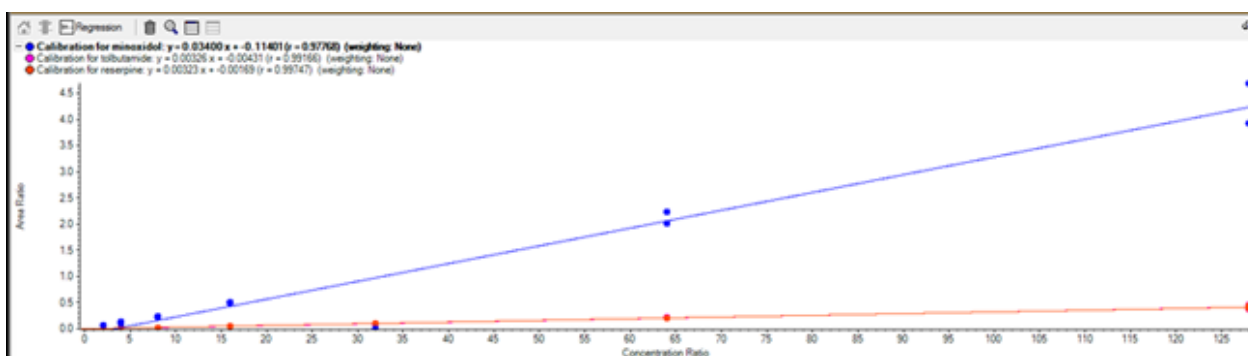
Integrationsparametrene vises.

Tip! Højreklik i panelet **Side by Side Sample Review**, og klik derefter på **Options** for at ændre antallet af rækker eller kolonner i gennemgangen side om side.

4. Vælg en anden prøve fra den anden liste.

Brug ruden **Calibration** til visuelt at inspicere regressionen for hver analyt, hvis der anvendes **Standard**-prøver af en kendt koncentration. Denne rude kan ikke anvendes, hvis brugeren udfører relativ kvantificering og ikke har **Standard**-prøver. Når en **Results Table** er aktiv, skal du klikke på **Show Calibration** på værktøjslinjen.

Figur 10-1: Ruden Calibration

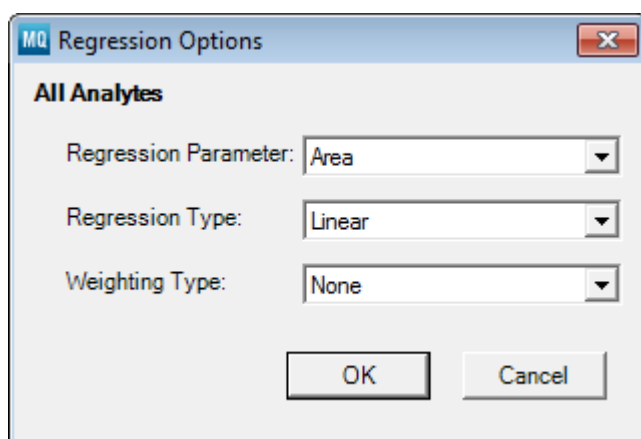


Ud over at inspicere regressionen kan brugeren udelukke **Standard**-prøver, så de ikke bruges til regressionen. Når der er foretaget justeringer, beregnes en ny regression automatisk, og parametre som **Calculated Concentration** og **Accuracy** genberegnes for alle prøver for analytten. Se [Regressionsligninger](#) på side 123.

Dialogboksen Regression Options

Hvis der er mange analytter, er det nemmere at anvende ændringer ved hjælp af dialogboksen **Regression Options** end ved at ændre regressionsparametrene én efter én.

Figur 10-2: Dialogboksen Regression Options



Kalibreringstip

- For analytter uden en tilknyttet intern standard er y-aksen top **Area** eller **Height** som valgt i kvantificeringsmetoden. For analytter med en intern standard er y-aksen toppen **Area** eller **Height** forholdet (mellem analytten og den interne standard).
- For analytter uden tilhørende intern standard er x-aksen **Actual Concentration**. Ellers er det **Actual Concentration** forholdet (mellem analytten og den interne standard).
- Hvis der vælges mere end én analyt fra **Components & Groups List**, overlejres kalibreringerne for alle analytter. Ellers vises kalibreringen for den valgte analyt.
- Titelområdet viser altid navnet på den aktive analyt og den tilhørende regressionsligning med korrelationskoefficienten. Hvis regressionen ikke kunne beregnes, for eksempel hvis der ikke er nogen **Standard**-prøver, angiver titlen dette. Hvis kalibreringer for flere analytter er overlejret, kan du skifte mellem at få vist oplysninger for alle analytter eller kun den aktive ved at dobbeltklikke et vilkårligt sted i titelområdet. Hvis der er mange overlejlrede analytter, kan alle oplysninger muligvis ikke vises. I dette tilfælde skal du rulle titlen ved at trække i den.
- Datapunkterne for de **Standard**-prøver, der er i brug, plottes altid sammen med den kalibreringsligning, der anvender disse punkter. Brugeren kan eventuelt vise datapunkter for udelukkede **Standard**-prøver og for **Quality Control**-prøver.
- Hvis brugeren klikker på et datapunkt, vælges den tilsvarende række automatisk i **Results Table** og rulles ind i visningen, forudsat at rækken i øjeblikket er synlig et sted i tabellen og ikke er skjult.

Højrekliksmenu i Calibration

Højreklik i ruden **Calibration** for at få adgang til en kontekstmenu. Følgende kommandoer er tilgængelige.

Tabel 10-1: Indstillinger for højreklik-menuen i kalibreringsruden

Menupunkt	Beskrivelse
Exclude (eller Include)	Hvis brugeren højreklikker direkte på et datapunkt for en standard, der ikke er blevet ekskluderet, anvendes denne indstilling til at ekskludere prøven fra regressionsberegningen (for prøven og analytten for det datapunkt, brugeren klikkede på). Hvis prøven allerede er blevet ekskluderet, vises menuen med teksten Include , og hvis du vælger den, medtages dette element. Når du har foretaget dit valg, beregnes regressionen, og Results Table opdateres. Denne funktionalitet svarer til at rydde eller markere afkrydsningsfeltet Used i resultattabellen for den tilsvarende række.
Exclude – All Analytes (eller Include – All Analytes)	Ekskluderer eller inkluderer alle analytter, ikke kun den analyt, der svarer til et valgt datapunkt.

Tabel 10-1: Indstillinger for højreklik-menuen i kalibreringsruden (fortsat)

Menupunkt	Beskrivelse
Show Excluded Standards	Når dette er valgt, tegnes datapunkter for ekskluderede standarder (hvis der er nogen) ved hjælp af åbne cirkler. Hvis du rydder dette, vises ekskluderede standarder ikke.
Show QCs	Når dette er valgt, tegnes datapunkter for Quality Control (QC) -prøver ved hjælp af en åben rombe. Hvis du rydder QC -prøverne, vises de ikke.
Show Legend	<p>Når dette er valgt, trækkes en forklaring til højre for plottet, der viser punktsymbolerne for de forskellige prøvetyper (lukkede cirkler for Standard-prøver, åbne cirkler for ekskluderede standarder og åbne romber for Quality Control-prøver).</p> <hr/> <p>Bemærk: Hvis brugeren ikke får vist bestemte prøvetyper, f.eks. hvis Show QCs-indstillingen ikke er valgt, er posten for disse prøvetyper ikke til stede. Hvis hverken QC-prøver eller ekskluderede standarder vises, er denne indstilling ikke tilgængelig, og der tegnes ingen forklaring.</p> <hr/>
Use Percent Y-Axis	<p>Hvis dette ikke er valgt, er y-aksen for plottet angivet i enheder af absolut top-Area eller -Height (eller top-Area-forholdet eller Height-forholdet, hvis der anvendes en intern standard). Når y-aksen er valgt, udtrykkes den som en procentdel af datapunktet med den største y-værdi for hver enkelt analyt.</p> <p>Det er nyttigt at bruge en procentakse, hvis mere end én analyt er overlejet, og deres absolutte respons er ret forskellig, da det gør det muligt at skalere hvert spor, så hele det tilgængelige lodrette område anvendes. I modsat faldt ligger analytter med lav respons tæt på x-aksen, og plottet skal zoomes for at se dem i detaljer.</p>
Log-Log Plot	Bruges til at skifte visningen mellem plot af Area i forhold til Concentration og Log(Area) i forhold til Log(Concentration) .

Statistiske tabeller

11

Brug **Statistics Table** til at få vist oplysninger vedrørende reproducerbarheden af en analyse. Hver række i tabellen opsummerer oplysninger såsom den gennemsnitlige afvigelse og standardafvigelsen for en gruppe af relaterede toppe fra den samme analyt, der ideelt set forventes at have samme respons.

Figur 11-1: Ruden Statistics

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	mnoxiidol	2.00	2 of 2	5.402e0	3.884e-2	0.72	270.09	5.429e0	5.374e0
2	mnoxiidol	4.00	2 of 2	6.791e0	4.993e-1	7.35	169.76	7.144e0	6.437e0
3	mnoxiidol	8.00	2 of 2	1.025e1	3.500e-1	3.41	128.21	1.001e1	1.050e1
4	mnoxiidol	16.00	2 of 2	1.791e1	3.199e-1	1.79	111.94	1.814e1	1.768e1
5	mnoxiidol	32.00	1 of 2	3.356e0	N/A	N/A	10.49	N/A	3.356e0
6	mnoxiidol	64.00	2 of 2	6.580e1	4.675e0	7.11	102.82	6.911e1	6.250e1
7	mnoxiidol	128.00	2 of 2	1.302e2	1.583e1	12.16	101.69	1.474e2	1.190e2
8	tolbutamide	2.00	2 of 2	3.034e0	9.352e-2	3.08	151.69	3.100e0	2.968e0
9	tolbutamide	4.00	2 of 2	4.616e0	2.274e-1	4.93	115.39	4.776e0	4.495e0
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	93.32	2.902e1	3.070e1
13	tolbutamide	64.00	2 of 2	6.485e1	3.313e0	5.11	101.33	6.251e1	6.719e1
14	tolbutamide	128.00	2 of 2	1.281e2	2.000e1	15.61	100.10	1.423e2	1.140e2
15	nesequine	2.00	2 of 2	2.683e0	1.912e-1	7.16	133.44	2.804e0	2.534e0
16	nesequine	4.00	2 of 2	4.353e0	1.633e-1	3.75	108.80	4.231e0	4.461e0
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	1.535e1	1.693e-1	1.10	96.03	1.525e1	1.548e1

Etiket	Beskrivelse
Row	Rækkenummeret. Klik på én af de andre kolonneoverskrifter for at sortere tabellen. Før tabellen tilbage til den oprindelige visning ved at klikke på denne overskrift.
Component Name	Analyttens navn.
Actual Concentration (eller Sample Name)	Hvis der grupperes efter faktisk koncentration, viser denne kolonne koncentrationen. Hvis der grupperes efter prøvenavn, ændres titlen på kolonnen, og prøvenavnet vises.
Num. Values	Viser m af n, hvor n er det samlede antal prøver ved den faktiske koncentration (eller med samme prøvenavn), og m er antallet af disse prøver, der er anvendt til beregningerne. Prøver anvendes ikke, hvis den tilsvarende top ikke kunne integreres, eller hvis feltet Used er blevet ryddet manuelt.
Mean	Gennemsnittet for de anvendte prøver.
Standard Deviation	Standardafvigelsen for de anvendte prøver.
Percent CV	Varianskoefficienten udtrykt i procent: $100 \times (\text{standardafvigelse}) / \text{middelværdi}$.
Accuracy	Gennemsnitsværdien divideret med den faktiske koncentration udtrykt i procent: $100 \times \text{middelværdi} / (\text{faktisk koncentration})$. Dette felt vises kun ved gruppering efter faktisk koncentration, ikke ved gruppering efter prøvens navn.

Etiket	Beskrivelse
Values	De enkelte værdier for prøverne vises i yderligere kolonner. Hvis den tilsvarende prøve ikke kunne integreres, er værdien N/A. Hvis feltet Used er blevet ryddet manuelt, vises værdien med en gennemstreget linje.

Tip til statistiktabel

- **Statistics Table** er linket til **Components & Groups List** for at få vist rækker, der svarer til de valgte analytter. Hvis elementerne **All Components** eller **All Analytes** er valgt, er der poster for alle analytter. Hvis du vælger en individuel analyt, er der kun poster for den pågældende analyt. Hvis en individuel intern standard vælges fra listen, er **Statistics Table** tom. Se [Liste over komponenter og grupper på side 33](#).
- Hvis brugeren klikker på én af **Value**-cellerne, vælges den tilsvarende række i **Results Table** for analytten og prøven, forudsat at rækken i øjeblikket er synlig i **Statistics Table**. Der vises kun **Unknown**-prøver i **Results Table**. Hvis **Statistics Table** indeholder oplysninger om **Standard**-prøver, er de tilsvarende rækker ikke synlige i **Results Table**. Hvis ruden **Peak Review** er synlig, linker den til **Results Table**, og den opdateres, hvis du klikker på cellen.
- Klik på én af kolonneoverskrifterne for at sortere **Statistics Table**.
- Brugeren kan enten kopiere hele **Statistics Table** eller blot de rækker, der er af interesse.
 - Hvis du vil kopiere hele tabellen, skal du klikke på **Edit > Copy**.
 - Hvis du kun vil kopiere de rækker, der er af interesse, skal du manuelt vælge rækkerne og derefter klikke på **Edit > Copy**.
- Hvis kolonnebredderne justeres, gendannes disse bredder næste gang, **Statistics Table** vises.
- Formatet og præcisionen er de samme som i **Results Table**.
- **Group by Concentration for Standards and QCs** er baseret på **Displayed Actual Concentration**, ikke de **Actual Concentration**, der er gemt i **Results Table**. Hvis Std 1-koncentrationen er 0,001, Std 2-koncentrationen er 0,005, og visningsformatet er 0, grupperes Std 1 og Std 2 sammen, fordi begge behandles som 0. Hvis du vil gruppere dem separat, skal du indstille præcisionen for **Analyte Concentration** til 0,000 i dialogboksen **Column Settings**. Hvis Std 1 er 0,500 og Std 2 er 0,499, skal præcisionen indstilles til 0,00 for at gruppere dem sammen.

Højrekliksmenu i Statistics Table

Højreklik i **Statistics Table** for at få adgang til kommandoen **Use Peak**. Brug denne kommando til at angive feltet **Used** for den prøve og analyt, der svarer til den valgte celle i én af **Value**-kolonnerne. Før du højreklikker for at åbne menuen, skal du vælge den relevante celle i én af **Value**-kolonnerne ved at klikke på den.

Brug metriske plot til at afsætte værdierne i en resultattabells kolonne i forhold til enten række nummeret eller en anden kolonne. Disse plot er et værdifuldt hjælpemiddel til visuel datagennemgang, især hvis brugerne ikke ønsker at gennemgå hvert kromatogram manuelt ved hjælp af ruden Peak Review.

Oprettelse af et metrisk plot

1. Vælg én eller to kolonner i **Results Table**.
2. Klik på **Show Metric Plot**.
Hvis én kolonne er valgt, viser det resulterende plot værdierne fra kolonnen som en funktion af række nummeret i tabellen. Hvis der vælges to kolonner, plottes værdierne fra kolonnerne i forhold til hinanden. Den første af de to kolonner, der skal vælges, indeholder x-værdierne, og den anden indeholder y-værdierne.

Lagring af indstillinger for metrisk plot

1. Åbn et metrisk plot ved at vælge en kolonne og derefter klikke på **Show Metric Plot**.
2. Højreklik på plottet, og klik derefter på **Save Setting**.
Dette gør det muligt for brugeren hurtigt at generere **Metric Plots**, der ofte bruges, uden at skulle vælge den tilsvarende kolonne hver gang.

Tip til metrisk plot

- Hvis brugere venstreklikker på et datapunkt, vælges den tilsvarende række i resultattabellen automatisk, og den rulles ind i visningen. Hvis ruden Peak Review er åben, opdateres den også for at vise det tilsvarende kromatogram. Dette er en praktisk måde at udføre topgennemgang for udsving på.
- Hvis der er valgt mere end én komponent på listen Components & Groups, overlejres sporene for alle komponenterne. Ellers vises sporet for den ene valgte komponent.
- Titelområdet viser altid navnet på det aktive spor. Hvis der er overlagt spor for flere komponenter, kan du skifte titlen mellem visning af oplysninger for alle sporene eller bare det aktive ved at dobbeltklikke hvor som helst i titelområdet. Aktivér et bestemt spor ved at klikke på farvepunktet til venstre for den tilsvarende titel.
- Gem indstillingerne for det metriske plot, der skal bruges igen. Højreklik på det metriske plot, og klik derefter på **Save Settings As**.

Højrekliksmenu i Metric Plot

Højreklik i det metriske plot for at få adgang til en kontekstmenu. Følgende kommandoer er tilgængelige.

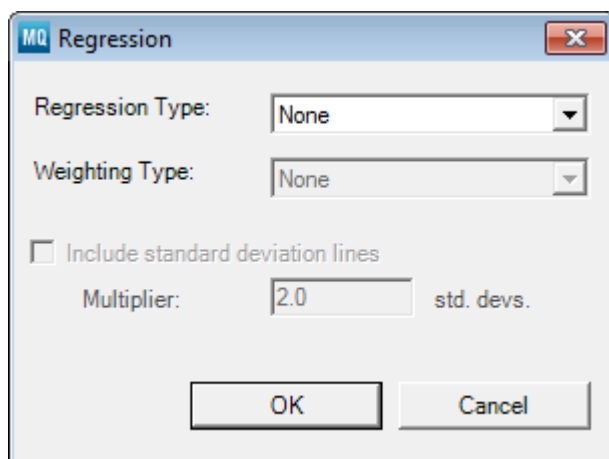
Tabel 12-1: Indstillinger for Metric Plot

Menupunkt	Beskrivelse
Regression	Viser en regressionslinje på det metriske plot. <ul style="list-style-type: none">• Regression Type• Weighting Type• Include standard deviation lines and Multiplier Se Dialogboksen Regression på side 77 .
Display "N/A" as 0.0	Når denne indstilling er valgt, plottes værdier, der ikke er numeriske, ved brug af en y-værdi på nul. Ellers er sådanne punkter udeladt fra plottet. Eksempelvis indberettes Retention Time som N/A for toppe, der ikke kunne integreres. Til denne funktion er der et punkt tilgængeligt for sådanne toppe, så brugeren kan se disse potentielt problematiske prøver og derefter kæde dem til ruden Peak Review ved at klikke på punktet.
Show Legend	Ændrer den forklaring, der kommenterer de punktsymboler, der anvendes for de forskellige prøvetyper.
Label Active Series (using sample names)	Ændrer, om datapunkterne er mærket ved hjælp af teksten fra feltet Sample Name i Results Table . Hvis der er mere end et overlejet spor, er det kun det aktuelt aktive spor, der er mærket.
Use Percent Y-Axis	Ændrer, om y-aksen bruger absolutte enheder eller en procentdel af den maksimale y-værdi. Ved brug af procentfunktionen beregnes procentdelen uafhængigt for hver overlejet kurve. Denne funktion kan bruges til at plote overlejede spor for flere komponenter, og responsen for metrikken for komponenterne er væsentligt anderledes.
Start Y-Axis at Zero	Ændrer, om y-aksen starter ved y=0 eller ved den mindste y-værdi, der skal plottes.
Connect Points With Lines	Ændrer, om datapunkterne er forbundet med linjer.
Save Setting	Hvis plottet i øjeblikket er tilknyttet en indstilling, gemmer denne funktion de aktuelle funktioner. Ellers fungerer denne funktion på samme måde som funktionen Save Setting As .
Save Setting As	Hvis de samme kolonner ofte plottes, kan brugeren gemme plottemulighederne som en indstilling. Dette gør det muligt for brugeren hurtigt at oprette et plot, selvom de ønskede kolonner ikke er synlige i Results Table . Ud over kolonnerne gemmes de forskellige plotmuligheder. Når en indstilling er gemt, vises navnet i menuen Metric Plot .
Delete Setting	Hvis det aktuelle diagram er tilknyttet en indstilling, skal du bruge denne funktion til at slette indstillingen.

Dialogboksen Regression

Klik for at vise en regressionslinje på det metriske plot.

Figur 12-1: Dialogboksen Regression



Etiket	Beskrivelse
Regression Type	Indeholder de forskellige regressionstyper (lineær, kvadratisk og så videre). Regressionstypen Mean resulterer i en vandret linje på stedet for den gennemsnitlige y-værdi for alle datapunkterne, og regressionstypen Median resulterer i en vandret linje på stedet for punkternes median-y-værdi. Derudover er der en None -funktion, som fjerner eventuelle tidligere regressioner.
Weighting Type	De forskellige vægtningstyper er beskrevet i Vægtningsfaktorer på side 123 .
Include standard deviation lines and Multiplier	Disse indstillinger er tilgængelige, når enten regressionstypen Mean eller Median er valgt. Når denne er valgt, tilføjes yderligere stiplede vandrette linjer for at afmærke det angivne antal standardafvigelser over og under hovedlinjen. Brug denne indstilling til at få vist punkter, der f.eks. ligger mere end to eller tre standardafvigelser fra gennemsnittet.

Brug **Quantitation Method Editor** til at oprette en kvantificeringsmetode eller til at redigere en eksisterende.

Den typiske arbejdsgang er at oprette kvantificeringsmetoder ved hjælp af **New Results Table wizard**. Brugeren kan dog bruge **Quantitation Method Editor** til at oprette en kvantificeringsmetode, der kan bruges efter behov.

Fanen Components

Højreklik på fanen **Components** for at få adgang til en kontekstmenu. Følgende kommandoer er tilgængelige.

Tabel 13-1: Indstillinger for højrekliksmenuen i Components

Menupunkt	Beskrivelse
Find Component by Name	Bruges til at vælge komponenten, hvis Name matcher teksten. Den nøjagtige tekst er ikke nødvendig for at finde et match. Dette er nyttigt for at vælge en bestemt komponent, hvis der er mange komponenter. Hvis der ikke oprindeligt er valgt en række i regnearket, starter søgningen fra den første række. Ellers starter søgningen fra rækken efter den valgte række og går derefter tilbage til begyndelsen. Dette er nyttigt, hvis der er mere end én komponent, hvis Name indeholder teksten. Hvis den første søgning ikke finder komponenten, skal du søge igen og lade den første komponent være valgt for at finde et andet match i tabellen.
Insert Row Above	Indsætter en enkelt tom række umiddelbart over den aktuelt markerede række.
Delete Selected Rows	Fjerner de aktuelt markerede rækker fra tabellen.
Sum Multiple Ions	Sammenlægger kromatogrammer for flere MRM-overgange eller masseintervaller med fuld scanning. Når kommandoen er valgt, føjes der flere massesøjler til tabellen Components . Masser, der vælges til en given række, anvendes ved konstruktionen af det sammenfattede XIC for den tilsvarende analyt eller interne standard. Det anbefales, at denne funktion altid vælges.
Groups	Se Undermenuen i Groups på side 79 .
Internal Standards	Se Undermenuen Internal Standards på side 80 .

Undermenuen i Groups

Tabel 13-2: Menupunkter i Groups

Menupunkt	Beskrivelse
Using Constant Group Size	Åbner dialogboksen Set Automatic Groups, som bruges til automatisk at udfylde gruppekolonnen med navnet på den første komponent for hver gruppe, forudsat at hver gruppe indeholder det samme antal komponenter. Se Dialogboksen Set Automatic Groups på side 80 .
By Filling Down Existing Groups	Indfører automatisk det samme gruppenavn for en række sekventielle komponenter. Hvis du vil bruge kommandoen, skal du manuelt angive gruppenavnet for den første komponent for hver separat gruppe og derefter vælge kommandoen. De angivne gruppenavne udfyldes ned til alle efterfølgende komponenter, hvori gruppenavnet er tomt. Kun rækker, hvor navnet er udfyldt, tages i betragtning.
Using Q1 Masses	Kun tilgængelig for MRM-eksperimenter. Bruges til at udfylde kolonnen Group med Q1-massen. Dette er nyttigt, hvis den samme Q1-masse blev angivet for flere overgange for den samme forbindelse, og forskellige fragmenter blev overvåget. Hvis der er mange komponenter, og hvis nogle tilfældigvis deler den samme Q1-masse, så de er tildelt den samme gruppe.
Using Q3 Masses	Kun tilgængelig for MRM-eksperimenter. Bruges til at udfylde kolonnen Group med Q3-massen. Dette er nyttigt, hvis forskellige isotopformer af en forbindelse blev overvåget (med forskellige Q1-masser), men en konstant Q3-masse blev overvåget. Hvis der er mange komponenter, og hvis nogle tilfældigvis deler den samme Q3-masse, de er tildelt den samme gruppe.
Using (Q1 – Q3) Mass Differences	Anvendes til at udfylde kolonnen Group ved hjælp af forskellen mellem Q1- og Q3-masserne (kun tilgængelig for MRM-eksperimenter). Dette er nyttigt, hvis forskellige isotopformer af en forbindelse blev overvåget (med forskellige Q1-masser), men et konsistent Q3-fragment, der indeholder alle modificerede isotoper, blev overvåget. Hvis der er mange komponenter, og hvis nogle tilfældigvis deler den samme masseforskel, tildeles de til den samme gruppe.
Add Group to Start of Component Name	Tilføjer gruppenavnet til begyndelsen af analytten eller navnet på den interne standard. Dette kan være nyttigt, hvis de oprindelige navne ikke er entydige.
Remove Group from Start of Component Name	Fjerner gruppenavnet, hvis det findes, fra begyndelsen af analytten eller navnet på den interne standard.

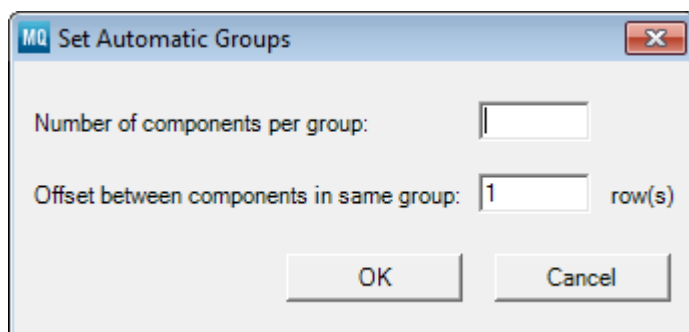
Tabel 13-2: Menupunkter i Groups (fortsat)

Menupunkt	Beskrivelse
Append Summed Ions for Groups	Når indstillingen Sum Multiple Ions er aktiveret, tilføjer denne kommando en ny komponent for hver gruppe, der bruger det summerede kromatogram for gruppen. Der tilføjes særskilte komponenter for analytter og interne standarder for grupperne, hvis begge er defineret. Navnet på de nye analytter er standard for gruppenavnet og for interne standarder for gruppenavnet med .IS tilføjet. Hvis de sammenfattede komponenter er påkrævet og ikke de originale enkeltmassekomponenter, kan sidstnævnte udgå.

Dialogboksen Set Automatic Groups

Udfylder automatisk kolonnen Group ved hjælp af navnet på den første komponent for hver gruppe, idet det antages, at hver gruppe indeholder det samme antal komponenter.

Figur 13-1: Dialogboksen Set Automatic Groups



Etiket	Beskrivelse
Number of components per group	Det samlede antal komponenter for hver gruppe.
Offset between components in same group	Forskydningen i rækker mellem sekventielle komponenter i samme gruppe. Denne værdi er sædvanligvis 1, men kan være større, hvis komponenterne for gruppen ikke er i tilstødende rækker.

Undermenuen Internal Standards

Tabel 13-3: Indstillinger for menuen Internal Standards

Menupunkt	Beskrivelse
Set IS for All Analytes	Angiver IS-navnefeltet for alle analytrækkerne. Hvis der er defineret én intern standard, anvendes navnet på denne. Hvis ikke, skal du vælge den påkrævede interne standard fra den dialogboks, der åbner.

Tabel 13-3: Indstillinger for menuen Internal Standards (fortsat)

Menupunkt	Beskrivelse
Set IS for Selected Analytes	Hvis den samme interne standard anvendes for mere end én analyt, skal der angives en genvej til at indstille den interne standard separat for hver analyt én efter én. Se Angivelse af IS for valgte analytter på side 81 .
Set Last Component of Group as IS	Brug denne kommando, hvis de forskellige komponenter er blevet tildelt til grupper, enten manuelt eller ved at bruge punkterne i undermenuen Set Groups. Afkrydsningsfeltet IS for den sidste komponent for hver gruppe er markeret, og alle de andre komponenter for gruppen, som antages at være analytter, er angivet til at anvende den sidste komponent som en intern standard.
Set for All Groups as for Selected Group	Bruges til at kopiere arrangementet af interne standarder for gruppen, der svarer til den aktuelt valgte række, til alle de andre grupper, på en symmetrisk måde. Dette er nyttigt, hvis der er mere end én intern standard i hver af grupperne. Se Angivelse for alle grupper som for den valgte gruppe på side 81 .

Angivelse af IS for valgte analytter

1. Sørg for, at den påkrævede interne standard er defineret (både afkrydsningsfeltet **Name** og **IS** er markeret).
2. Vælg rækkerne for de analytter, som den interne standard skal anvendes for.
3. Vælg menupunktet.
Hvis der er defineret mere end én intern standard, åbnes en dialogboks, der anmoder brugeren om at vælge den ønskede interne standard.

Angivelse for alle grupper som for den valgte gruppe

1. Tildel grupper.
2. Angiv manuelt, hvilke komponenter, der er interne standarder, ved at markere feltet i den første kolonne for den første gruppe.
3. Angiv manuelt den interne standard for hver analyt for den første gruppe ved at vælge fra kombinationsfeltet i kolonnen **IS Name**.
4. Vælg en enkelt række, der svarer til den første gruppe.
5. Klik på **Set for All Groups as for Selected Group**.

Fanen Integration

Højreklik på fanen **Integration** for at få adgang til en kontekstmenu. Følgende kommandoer er tilgængelige.

Tabel 13-4: Indstillinger for højrekliksmenu på fanen Integration & Regression

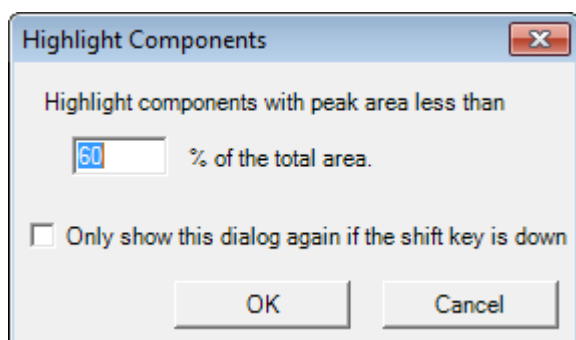
Menupunkt	Beskrivelse
Find Component by Name	Svarer til den kommando, der er tilgængelig på fanen Components , bortset fra at der i stedet for at vælge rækker i Components -regnearket vælges individuelle elementer på komponentlisten.
Highlight Components with Uncertain RT	Anvendes til at fremhæve de komponenter, for hvilke den forventede standardretentionstid (taget som RT for toppen med den største intensitet for hvert kromatogram) er ukorrekt. Hvis der kun er nogle få komponenter, skal du gennemgå hver individuelt og ikke bruge denne kommando. Men hvis der er mange komponenter, skal du bruge denne kommando til visuelt kun at kontrollere dem, hvor der findes mere end én signifikant top i kromatogrammet. Se Dialogboksen Highlight Components på side 83 .
Home Graph Axes	Returnerer den zoomede graf til sin startvisning, hvor alle data er synlige.
Overlay Other Components for Group	<p>Brug denne kommando til at overlejre kromatogrammer, hvis forskellige komponenter er blevet tildelt grupper, og hvis komponenterne, der er tildelt en given gruppe, forventes at have samme retentionstid. Hvis de f.eks. repræsenterer forskellige MRM-overgange af den samme faktiske forbindelse.</p> <p>Når den er valgt, tegnes kromatogrammet for den aktuelle komponent, hvis integrationsparametre er ved at blive defineret, ved hjælp af et fast blåt spor, og dets integrerede topområde vises. Kromatogrammerne og ikke det integrerede topområde for de øvrige komponenter i samme gruppe overlejres ved hjælp af en stiple linjestil.</p>
Update Retention Times	<p>Bruges til at nulstille de forventede retentionstider for en tidligere oprettet kvantificeringsmetode. Hvis en eksisterende kvantificeringsmetode åbnes, og Set New Typical Sample vælges, svarer de viste kromatogrammer til den nye prøve, men de forventede retentionstider forbliver uændrede.</p> <p>For hver komponent opdateres den forventede retentionstid til at svare til retentionstiden for toppen med den største intensitet i et vindue, hvor den specificerede bredde er centreret på den oprindelige forventede retentionstid. Se Dialogboksen Update Retention Time på side 83.</p>
Set New Typical Sample	Anvendes til at tilknytte en repræsentativ prøve til metoden. Dette kan potentielt påvirke de valg, der er tilgængelige i kolonnen Q1/Q3 (til MRM-eksperimenter) eller kolonnen Start - Stop (til profileksperimenter). Det påvirker også de kromatogrammer, der vises på fanen Integration .

Dialogboksen Highlight Components

Navnene på komponenter, som den automatisk valgte top ikke udgør mindst den angivne procentdel af det samlede topområde i kromatogrammet af, angives med fed skrift. Hvis for eksempel den standardtop, der er valgt i [Figur 13-2](#), udgør 70 % til 100 % af det samlede område, markeres den ikke. Gennemgå kun disse toppe ved at vælge dem på komponentlisten.

Hvis afkrydsningsfeltet **Only show this dialog again if the shift key is down** er markeret, åbnes dialogboksen ikke, næste gang kommandoen vælges, medmindre brugeren trykker på **Shift**. Den tidligere angivne procentparameter for det samlede areal anvendes automatisk.

Figur 13-2: Dialogboksen Highlight Components



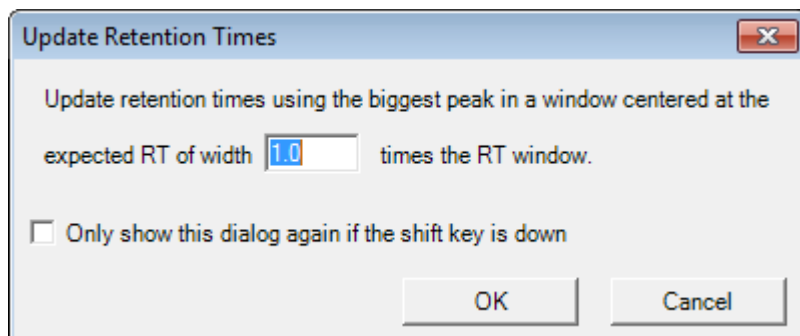
Dialogboksen Update Retention Time

Bruges til at nulstille de forventede retentionstider for en tidligere oprettet kvantificeringsmetode. Hvis du åbner en eksisterende kvantificeringsmetode, og der vælges Set New Typical Sample, svarer de viste kromatogrammer til den nye prøve, men de forventede retentionstider forbliver uændrede.

For hver komponent opdateres den forventede retentionstid til at svare til retentionstiden for toppen med den største intensitet i et vindue, hvor den specificerede bredde er centreret på den oprindelige forventede retentionstid.

Hvis afkrydsningsfeltet **Only show this dialog again if the shift key is down** er markeret, åbnes dialogboksen ikke, næste gang kommandoen vælges, medmindre brugeren trykker på **Shift**. Den tidligere angivne retentionstid bruges automatisk.

Figur 13-3: Dialogboksen Highlight Components



Fanen Outlier Settings

Højreklik på fanen **Outlier Settings** for at få adgang til en kontekstmenu. Følgende kommandoer er tilgængelige.

Etiket	Beskrivelse
Accuracy for Standards	Redigerer nøjagtighedstolerancen for Standard -prøverne.
Max. Accuracy Tolerance for Stds except LLOQ%	Redigerer nøjagtighedstolerancen for Standard -prøverne med en værdi, der er i overensstemmelse med laboratoriets standardprocedurer.
Max. Accuracy Tolerance for LLOQ (lowest Std)%	Redigerer nøjagtighedstolerancen for den laveste koncentration Standard , hvis laboratoriets standardprocedure angiver en anden tolerance for denne Standard .
Accuracy for QCs	Redigerer nøjagtighedstolerancen for Quality Control -prøverne.
Max. Accuracy Tolerance for QC%	Redigerer nøjagtighedstolerancen for Quality Control -prøverne med en værdi, der er i overensstemmelse med laboratoriets standardprocedurer.
Ion Ratio	Kun tilgængelig, hvis komponenterne er tildelt grupper. Vælg at bruge ionforholdet for topområdet eller tophøjden. Topområde eller tophøjde indstilles, når regressionsparameteren vælges under udviklingen af kvantificeringsmetoden.
Calculated Concentration	Når der anvendes Standard -prøver med kendt koncentration, er dette den bagudberegnete koncentration fra kalibreringskurven. Regressionsligninger beskriver, hvordan regressionen udføres for de forskellige regressionstyper og vægtning.
Component	Analytterne eller de interne standarder for alle prøver.
IS	Den valgte interne standard. Kun tilgængelig, hvis afkrydsningsfeltet Ion Ratio er markeret.

Etiket	Beskrivelse
Group	Komponenter, der har samme retentionstid (dvs. forskellige overgange for samme forbindelse), kan grupperes. Kun tilgængelig, hvis afkrydsningsfeltet Ion Ratio er markeret.
Ion Ratio Tolerance (%)	Brug standardindstillingen, eller rediger denne indstilling i henhold til laboratoriets standardprocedurer. Kun tilgængelig, hvis afkrydsningsfeltet Ion Ratio er markeret.
Lower Limit of Calculated Concentration	Indtast den nedre grænse for det acceptable koncentrationsområde. Alle prøver, hvor Calculated Concentration er lavere end denne værdi, markeres som et koncentrationsudsving.
Upper Limit of Calculated Concentration	Indtast den øvre grænse for det acceptable koncentrationsområde. Alle prøver, hvor Calculated Concentration er højere end denne værdi, markeres som et koncentrationsudsving.

Tabel 13-5: Indstillinger for højrekliksmenu i Outlier Settings

Etiket	Beskrivelse
Apply to all analytes the Lower Limit of Calc. Concentration	Anvender den nedre grænse for den beregnede koncentration på alle analytterne, hvis alle analytterne har samme kriterier.
Apply to all analytes the Upper Limit of Calc. Concentration	Anvender den øvre grænse for den beregnede koncentration på alle analytterne, hvis alle analytterne har samme kriterier.

Selvstudie i arbejdssekvensen i kvantificeringsanalyse

14

Målsætninger:

- Lær at behandle data ved hjælp af SignalFinder™-algoritmen.
- Lær at behandle data ved hjælp af algoritmen til MQ4-integration.
- Lær at bruge parametrene for MQ4- og SignalFinder™-integrationsalgoritme.

Kvantificeringsmetoder omfatter et sæt instruktioner om, hvordan de toppe, der er udvalgt til integration, kvantificeres. I denne vejledning oprettes en kvantificeringsmetode samtidigt med resultattabellen.

Der er også medtaget yderligere opgaver, der kan bruges til at manipulere data i **Results Table**, samt oplysninger om de tilgængelige softwareikoner.

Bemærk: Brugere af Audit Trail- og Security-udgaven er begrænset til at bruge Analyst Data-mappestrukturen. Brugere kan kun behandle datafiler, der er i Analyst® MD-softwarens filstruktur. Hvis filen og mappestrukturen ikke vedligeholdes, kan brugeren muligvis ikke se kromatogrammerne.

Om kalibreringskurver

En kalibreringskurve (også kendt som en standardkoncentrationskurve) er en metode til bestemmelse af koncentrationen af et stof i en **Unknown**-prøve ved at sammenligne **Unknown**-prøven med et sæt **Standard**-prøver med kendt koncentration. Kalibreringskurven er et plot over, hvordan instrumentet reagerer (det analytiske signal) på ændringer i analyttens koncentration (det stof, der skal måles). Brugeren forbereder en række **Standard**-prøver på tværs af en række koncentrationer i nærheden af analyttens forventede koncentration i **Unknown**-prøven.

Forudsætninger

Vælg projektet **Example** i Analyst® MD-softwaren.

Mix_batch_1. WIFF-filen kan findes i mappen Analyst Data\Projects\Example\Data\Triple Quad.

Rediger de kolonner, der vises i resultattabellen

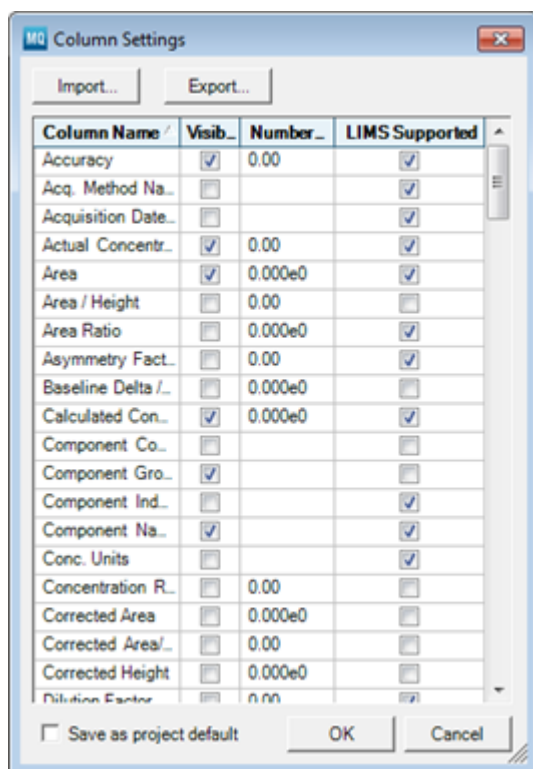
Brug denne procedure til at få vist eller skjule kolonner i **Results Table** eller ændre præcisionen af talformatet. For numeriske felter anvendes formatet 0.00 for ikke-videnskabelige notationer og formatet 0.00e0 for videnskabelige notationer. Rediger

decimaltegnene for at angive præcisionen af de tal, der vises. Der kan kun anvendes punktum (.) som decimalseparator. Ciffergruppering understøttes ikke.

Bemærk: Nogle kritiske kolonner med prøveoplysninger, som f.eks. **Sample Name**, **Sample ID** osv., bør ikke skjules, når brugerne tilpasser kolonneindstillingerne i **Results Table**.

1. Højreklik i **Results Table**, og klik derefter på **Column Settings**.

Figur 14-1: Dialogboksen Column Settings



2. Markér eller ryd afkrydsningsfeltet i kolonnen **Visible** efter behov.
3. I kolonnen **Number Format** ændres formatet til heltal eller videnskabelig notation. Antallet af decimaler, der skal vises, kan også ændres.

Tip! Hvis du vil anvende kolonneindstillingerne på alle **Results Tables** i projektet, skal du markere afkrydsningsfeltet **Save as project default**.

4. Klik på **OK**.

Behandling af data ved hjælp af integrationsalgoritmen SignalFinder™

I modsætning til algoritmen for MQ4-integration eller de algoritmer, der er tilgængelige i Analyst® MD-softwaren, opbygges en topmodel i SignalFinder™ ved hjælp af den valgte prøve, når der oprettes en kvantificeringsmetode. I denne model beskrives formen af den valgte top, der anvendes i algoritmen. På integrationstidspunktet anvendes denne

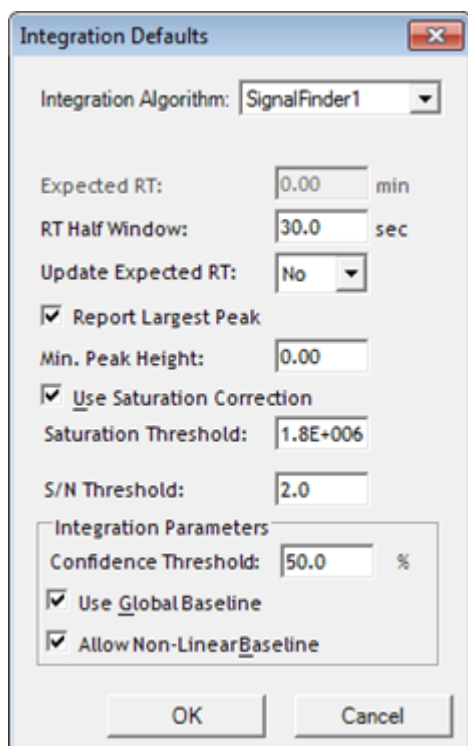
model i SignalFinder-integrationsalgoritmen på de andre prøver, idet prøven strækkes eller skævvrides. Dette giver mulighed for det faktum, at topformen er ens, men ikke identisk, for en given analyt eller intern standard for flere prøver.

Angivelse af topintegrationsparametre

Brug følgende procedure til at kontrollere eller angive integrationsalgoritmen, som behandler dataene. Se [Om SignalFinder-integrationsalgoritmen på side 105](#).

1. I Analyst® MD-softwaren på linjen **Navigation** under **Companion Software** skal du dobbeltklikke på **MultiQuant 3.0.3**.
2. Klik på **Edit > Project Integration Defaults**.
3. I dialogboksen **Integration Defaults** skal du vælge **SignalFinder1** fra listen **Integration Algorithm**.
4. Markér afkrydsningsfeltet **Use Saturation Correction**, og angiv derefter **Saturation Threshold** til $1,8\text{E}+006$.

Figur 14-2: Dialogboksen Integration Defaults



Bemærk: Toppe over **Saturation Threshold** betragtes som mættede. Denne værdi er detektorafhængig.

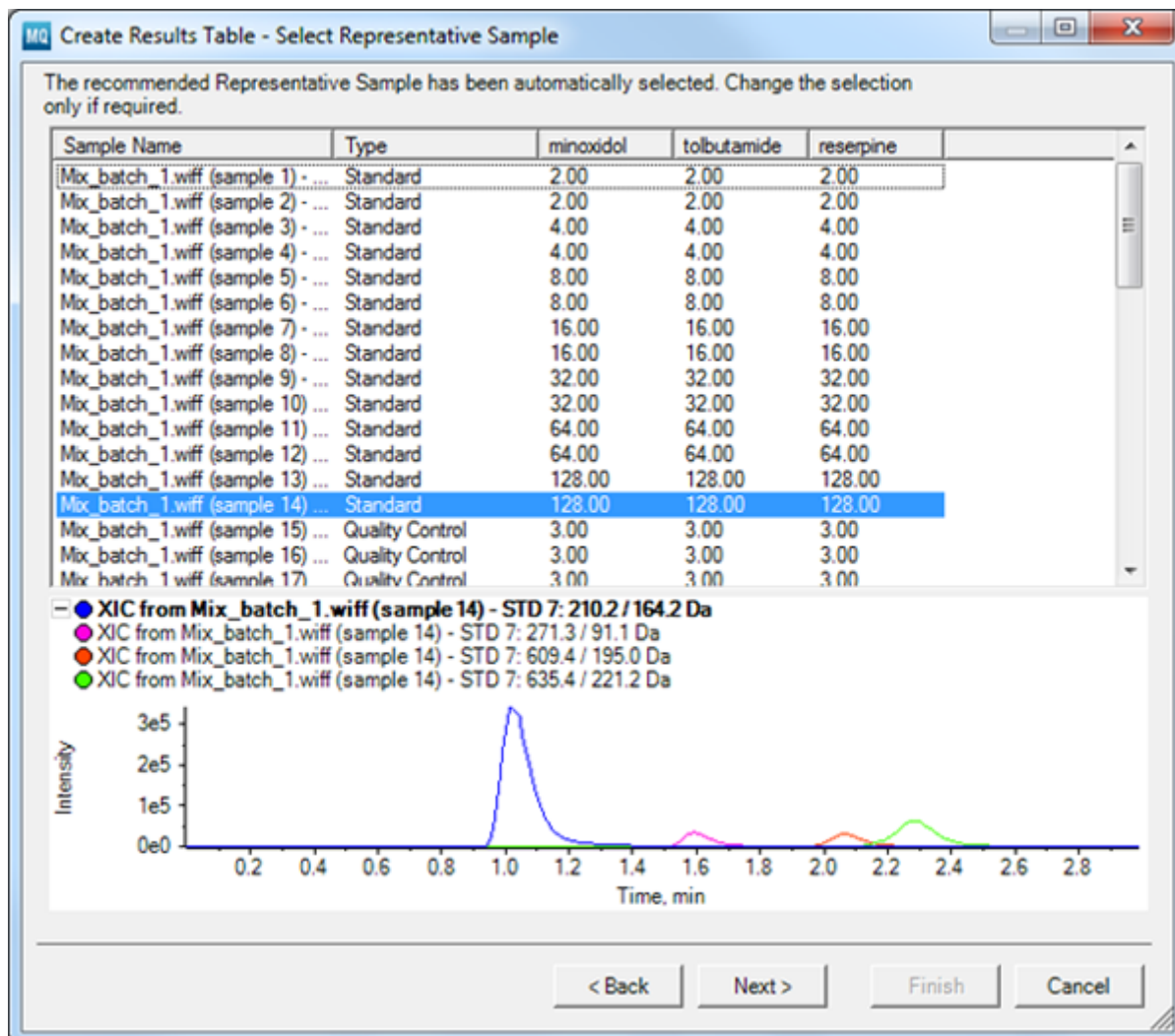
5. Klik på **OK**.

Oprettelse af en resultattabel

1. Klik på **File > New Results Table**.
2. Udvid mappen **Example Data** på siden **Create Results Table - Select Samples**, og træk derefter filen **Mix_batch_1.wiff** ind i ruden **Selected**.
3. Klik på **Next**.
4. Klik på indstillingen **Create New Method (SignalFinder1)**.
5. Klik på **New**.
6. Indtast et navn på metoden i dialogboksen **Save Quantitation Method As**, og klik derefter på **Save**.
7. Klik på **Next**.
På siden **Create Results Table - Select Representative Sample** er der valgt en repræsentativ prøve. Softwaren anbefaler en repræsentativ prøve baseret på et valg af et kromatogram, der giver den bedste mulighed for at vælge integrationsparametre, der passer til hele batchen. Det anbefales at vælge en umættet, høj koncentrationsstandard eller en **QC**-prøve (TIC under 1E+006 cps).

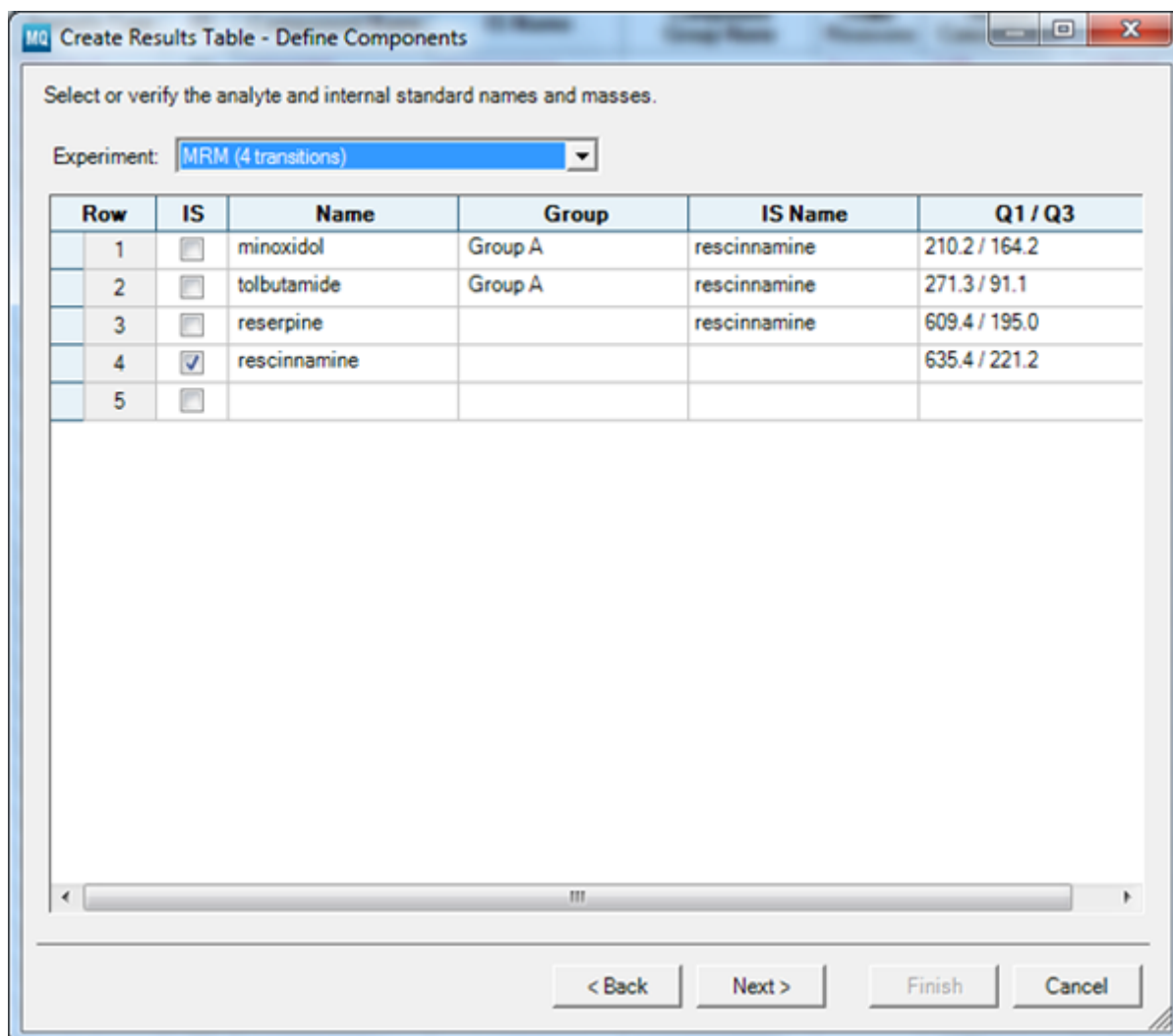
Tip! Under topgennemgang kan der vælges en anden prøve til opbygning af en topmodel under topgennemgang.

Figur 14-3: Create Results Table - siden Select Representative Sample



8. Bekræft analytterne og de interne standarder på **Create Results Table - Define Components** page.
9. Klik på **Next**.

Figur 14-4: Create Results Table - siden 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"/>				

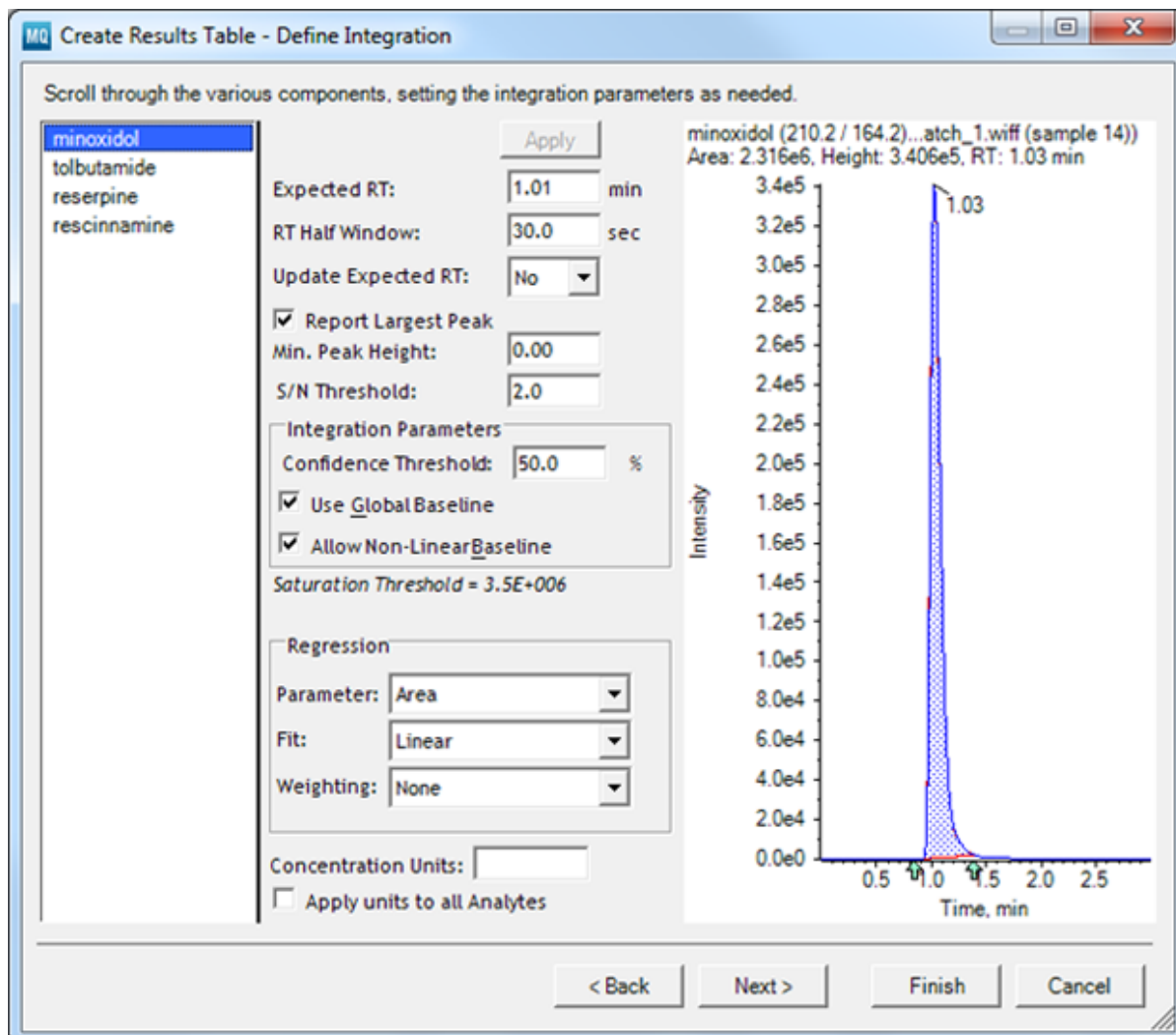
< Back Next > Finish Cancel

Bemærk: Når du opretter en dataopsamlingsmetode, udfyldes komponentnavnet automatisk på siden **Define Components**, hvis dette navn er inkluderet i kolonnen **ID** i masseområdestabellen. Hvis komponentnavnet ikke var inkluderet, skal du manuelt opdatere tabellen med komponentnavnet.

På siden **Create Results Table - Define Integration** vises analytterne og de interne standarder til venstre. De nuværende integrationsparametre er blevet anvendt på den repræsentative prøve, og kromatogrammet vises.

Komponenterne i den repræsentative prøve, der tidligere blev valgt, vises i ruden **Integration**. Toppe i denne repræsentative prøve findes og integreres ved hjælp af de parametre, der blev indstillet i dialogboksen **Integration Defaults**.

Figur 14-5: Create Results Table - siden Define Integration



Om nødvendigt justeres topsøgningsparametrene og de grønne piles placering i kromatogrammernes x-akse. Dette gør det muligt for brugeren at indstille den ønskede start- og slutposition for topintegration mere præcist. Dette er faktisk en visuel måde til at justere to topsøgningsparametre, der er gemt med kvantificeringsmetoden og anvendt på alle toppe, der skal integreres. Softwaren sætter begrænsninger for disse parametres grænser inden for, hvad den anser for at være rimelige grænser for toppens omfang.

Hvis der er mere end én top i kromatogrammet, og den korrekte top ikke automatisk vælges, skal du trække over en top for at indstille den forventede retentionstid. Træk fra den faktiske start til den faktiske slutning af toppen, og undlad at vælge et meget bredt eller meget smalt område. Årsagen er, at algoritmen antager, at der kun er én top inden for det valgte område. Hvis datasættet for eksempel er støjende, og algoritmen finder to flettede toppe, når der kun er én top til stede, skal du vælge et område, der indeholder begge toppe, for at få algoritmen til at justere sine interne parametre, så den kun finder én top. Alternativt, hvis algoritmen har fundet en top, når det menes, at der er to eller flere tilstedende toppe til stede, skal du vælge et område, der kun spænder over toppen af interesse.

10. I gruppen **Integration Parameters** skal du markere afkrydsningsfeltet **Global Baseline** for at bruge hele kromatogrammet som baseline.
Hvis du ikke vælger denne indstilling, tager softwaren kun højde for et smalt område omkring toppen af interesse.
11. Markér afkrydsningsfeltet **Allow Non-Linear Baseline** for at vælge mellem en lineær eller ikke-lineær baseline. En ikke-lineær baseline estimerer baseline under hver top. En lineær baseline passer til en linje mellem punkterne i begyndelsen og slutningen af den specifikke gruppe af toppe.
12. Gennemgå topintegrationen for hver komponent ved at klikke på komponentnavnet i venstre rude. Juster integrationsparametrene for at få den repræsentative top korrekt integreret.
13. For komponenterne **Minoxidol**, **Tolbutamide** og **Reserpine** skal du bruge gruppeparametrene **Regression** til at angive følgende, og derefter klikke på **Apply**:
 - **Parameter**: Area
 - **Fit**: Linear
 - **Weighting**: Ingen
14. Angiv **Concentration Units** til ng/mL , og markér derefter afkrydsningsfeltet **Apply units to all Analytes**.
15. Klik på **Apply**.
16. Klik på **Finish**.

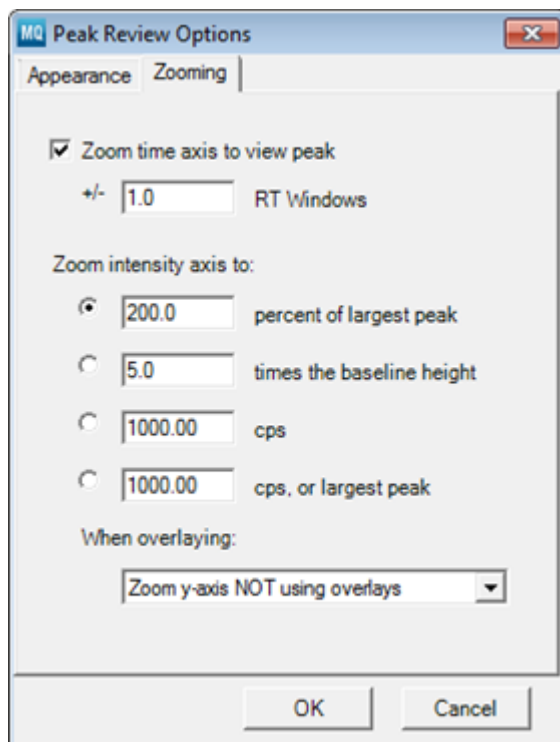
Prøvefilerne integreres automatisk, og der genereres en **Results Table**.

Se [Gennemgå top på side 93](#) for administration af dataene i **Results Table**. Se [Rapporter på side 128](#) for oplysninger om oprettelse af rapporter.

Gennemgå top

1. Klik på ikonet **Peak Review**.
2. Højreklik i tabellen, og klik derefter på **Column Settings**.
3. Gør kolonne **SF Saturated** synlig.
4. Højreklik i ruden **Peak Review**, og klik derefter på **Options**.
5. På fanen **Zooming** skal du skifte **Zoom time axis to view peak** til 1.
6. Indstil **Zoom intensity axis** til **200 percent of largest peak**.

Figur 14-6: Indstillinger for topgennemgang



7. Brug de røde pile til at rulle gennem toppene.

Hvis detektoren er mættet, fremstår toppen fladere end normalt. For eksempel vil denne top have en rød profil omkring toppen og **Yes** vises i kolonnen **SF Saturated**, fordi topintensiteten er over mætningstærsklen på $1,8^6$ cps.

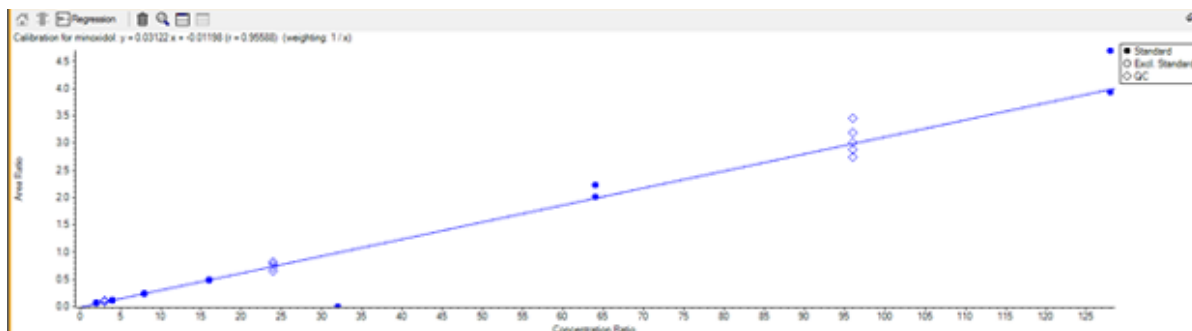
Bemærk: Den repræsentative prøve er muligvis ikke egnet til alle komponenter. Der kan vælges en ny repræsentativ prøve under topgennemgang og en ny model kan genereres.

8. Hvis du vil oprette en ny model, skal du vælge en ny top og derefter klikke på ikonet **Update Peak Model**. Vælg en top, hvis form ligner de andre toppe, og som ikke er mættet.
9. Højreklik og klik derefter på **Update Quantitation Method for Component** for at anvende ændringer på alle prøverne i komponenten.

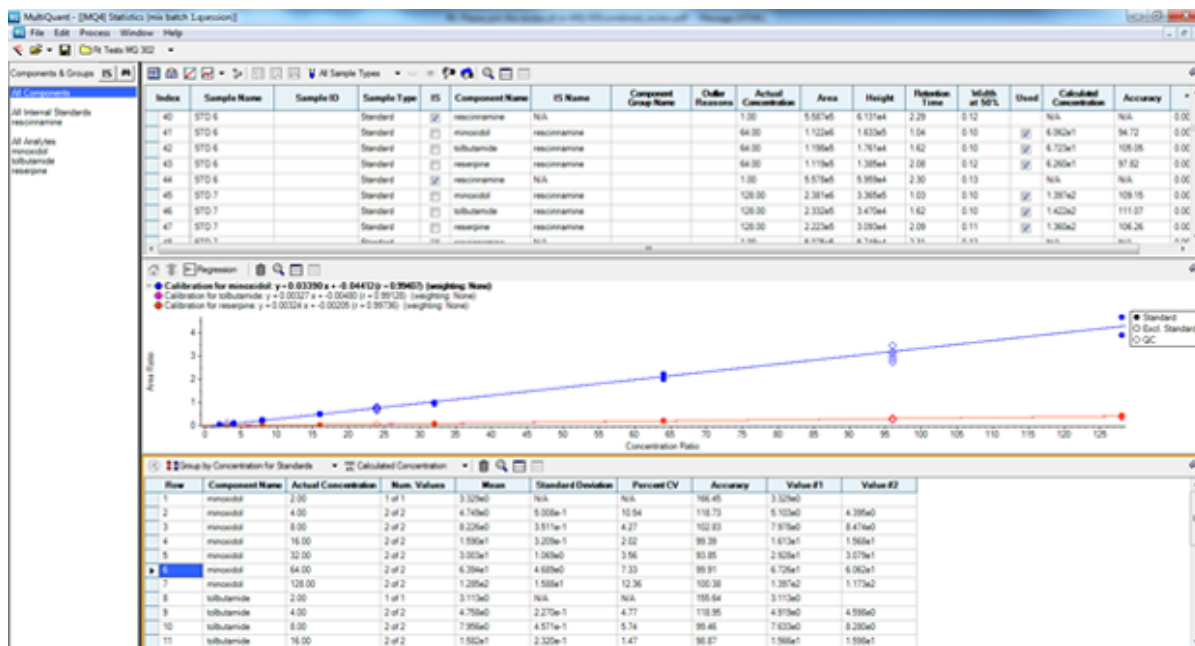
Ændring af kalibreringskurven

1. Klik på ikonet **Show Calibration Curve** for at få vist kalibreringskurven.
2. Hvis du vil tilføje en forklaring, skal du højreklikke i ruden **Calibration** og derefter klikke på **Show Legend**.

Figur 14-7: Kalibreringskurve



Figur 14-8: Ruden Statistics



- Klik på et element på listen **Metric** for at angive den faktiske måling, der anvendes til beregning af statistikkerne.
- Gennemgå kolonnerne **Value**. De overstregede punkter angiver ekskluderede datapunkter.

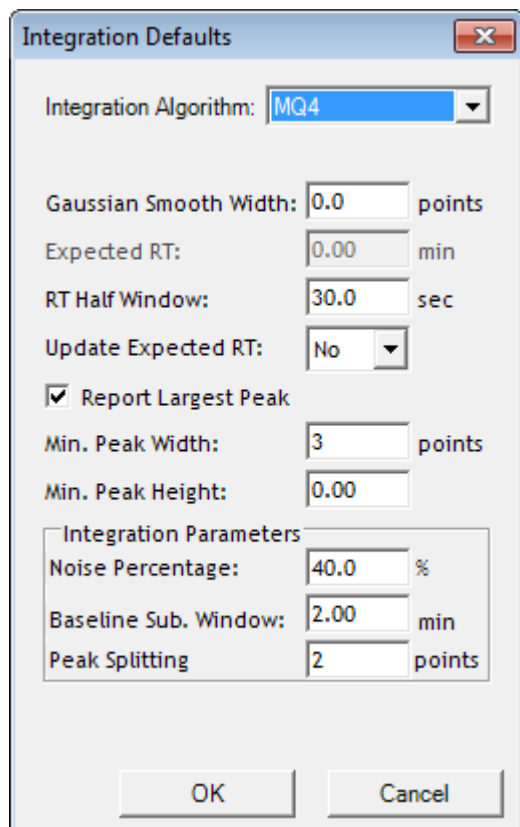
Behandling af data ved hjælp af MQ4-integrationsalgoritmen

Angivelse af topintegrationsparametre

Brug følgende procedure til at kontrollere eller indstille integrationsalgoritmen, før dataene behandles. Se [Parametre for MQ4-integrationsalgoritme på side 112](#).

- I Analyst® MD-softwaren på linjen **Navigation** under **Companion Software** skal du dobbeltklikke på **MultiQuant 3.0.3**.
- Klik på **Edit > Project Integration Defaults**.
- På listen **Integration Algorithm** i dialogboksen **Integration Defaults** skal du vælge **MQ4**.

Figur 14-9: Dialogboksen Integration Defaults



4. Hvis det er nødvendigt, skal du ændre parametrene for projektet og derefter klikke på **OK**.
MQ4-integrationsalgoritmen og parameterindstillingerne bruges til alle nye metoder, der oprettes i denne **Example**-projektmappe. Disse standardindstillinger er projektbaserede. Hvis du vil ændre standardindstillingerne for andre projekter, skal du gentage denne procedure for det valgte projekt.

Oprettelse af en resultattabel

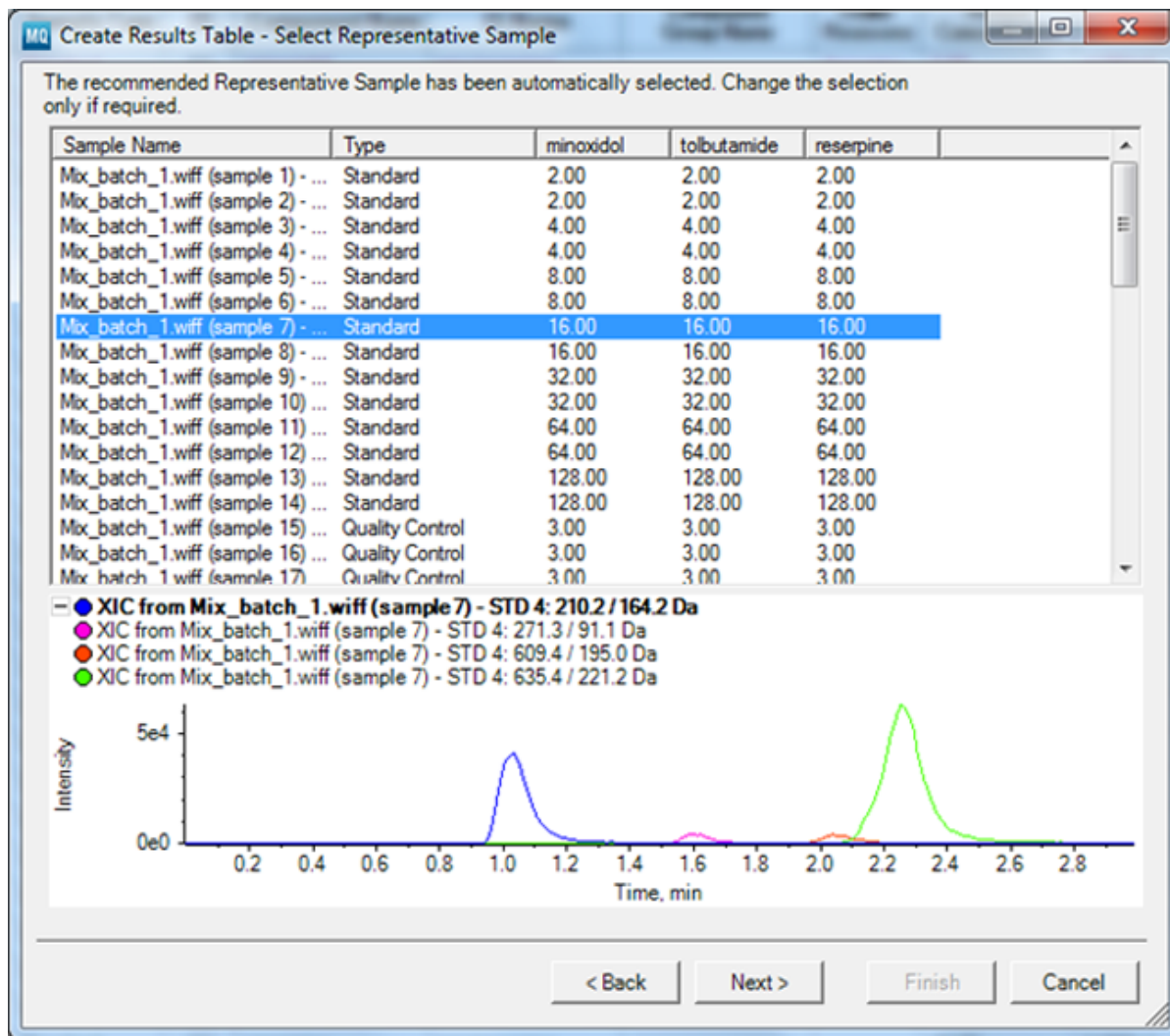
1. Klik på **File > New Results Table**.
2. Udvid mappen **Example Data** på siden **Create Results Table - Select Samples**, og træk derefter filen **Mix_batch_1.wiff** ind i ruden **Selected**.
3. Klik på **Next**.
4. Klik på indstillingen **Create New Method (MQ4)**.
5. Klik på **New**.
6. Indtast et navn på metoden i dialogboksen **Save Quantitation Method As**, og klik derefter på **Save**.

I denne vejledning oprettes en metode. Oprettelse af metoder giver mulighed for at gennemgå og anvende forskellige parametre for integrationen af dataene.

Hvis der er en eksisterende metode, skal du vælge indstillingen **Choose Existing Method** og derefter markere afkrydsningsfeltet **Edit Method** for at gennemgå og anvende forskellige parametre på metoden. Hvis afkrydsningsfeltet **Edit Method** ikke er markeret, vil guiden oprette **Results Table** ved hjælp af den eksisterende metode.

7. På siden **Create Results Table - Select Representative Sample** er en repræsentativ prøve blevet anbefalet og valgt.

Figur 14-10: Create Results Table - siden Select Representative Sample



8. Klik på **Next**.

Softwaren anbefaler en repræsentativ prøve baseret på et valg af et kromatogram, der giver den bedste mulighed for at vælge integrationsparametre, der passer til hele batchen. Det anbefales, at den næstlaveste koncentrationsstandard eller QC-prøve for MQ4-integrationsalgoritmen vælges, hvis analytkoncentrationsoplysningerne er indlejret i .wiff-filen. Hvis koncentrationsområdet eksempelvis ligger mellem en og otte, er den næstlaveste to. Hvis den repræsentative standardprøve ikke er tilstrækkelig intens, skal du vælge en anden repræsentativ prøve ved at klikke på knappen **Back** i guiden og

derefter vælge en anden prøve. Der kan vælges en anden prøve under topgennemgang. Se [Gennemgang af toppe på side 101](#).

9. Bekræft analytterne og de interne standarder på **Create Results Table - Define Components** page.

Figur 14-11: Create Results Table - siden 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. Klik på **Next**.

Bemærk: Når du opretter en dataopsamlingsmetode, udfyldes komponentnavnet automatisk på siden **Define Components**, hvis dette navn er inkluderet i kolonnen **ID** i masseområdestabellen. Hvis komponentnavnet ikke var inkluderet, skal du manuelt opdatere tabellen med komponentnavnet. Hvis du føjer en .IS-udvidelse til et komponentnavn, identificerer softwaren komponenten som en intern standard og tildeler .IS-komponenten som den interne standard til dens matchende analyt.

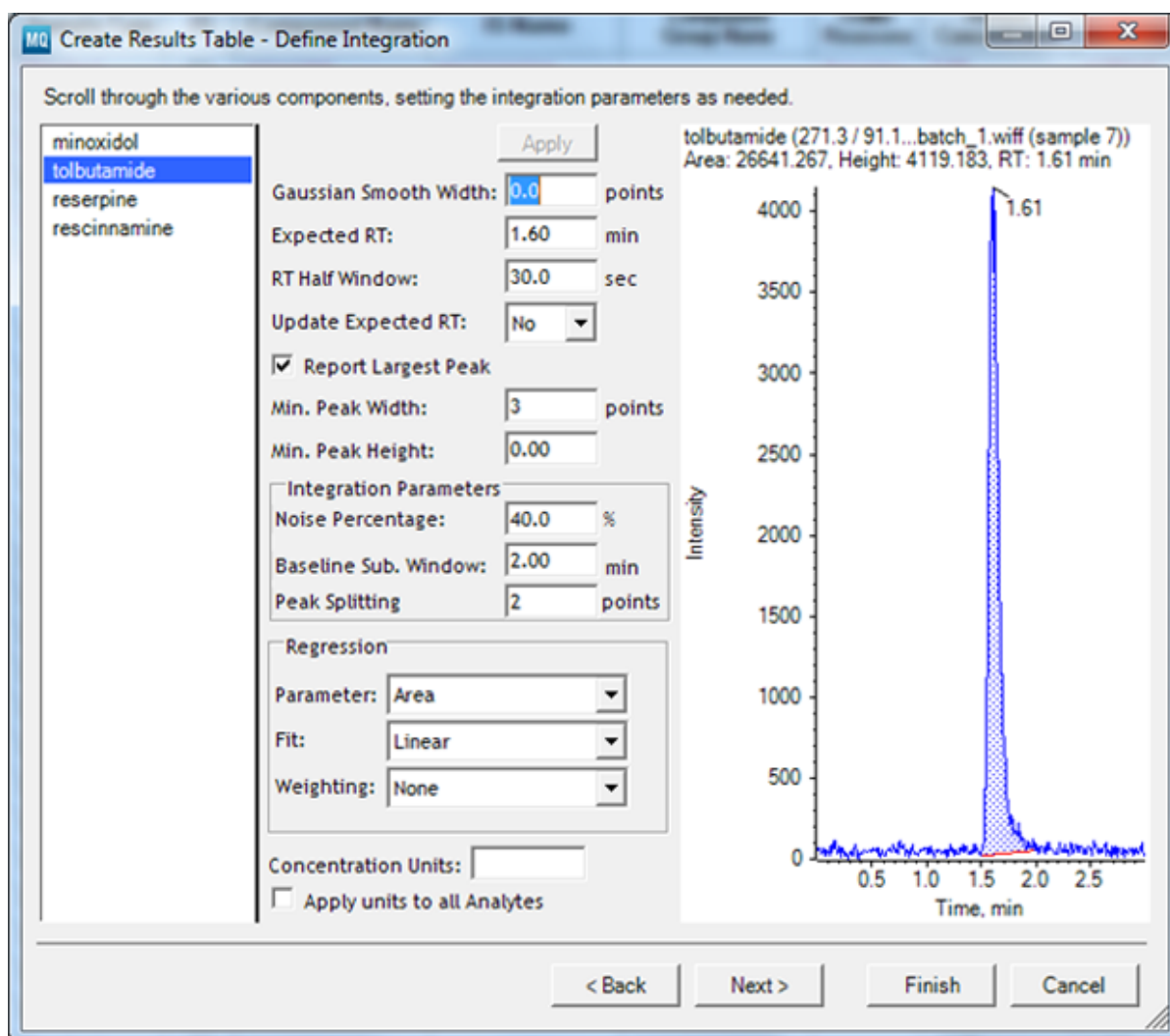
Selvstudie i arbejdssekvensen i kvantificeringsanalyse

På siden **Create Results Table - Define Integration** vises analytterne og de interne standarder til venstre. De nuværende integrationsparametre er blevet anvendt på den repræsentative prøve, og kromatogrammet vises.

Komponenterne i den repræsentative prøve, der tidligere blev valgt, vises i ruden **Integration**. Toppe i denne repræsentative prøve findes og integreres ved hjælp af de parametre, der blev indstillet i dialogboksen **Integration Defaults**.

11. Gennemgå topintegrationen for hver komponent ved at klikke på komponentnavnet i venstre rude. Juster integrationsparametrene for at få den repræsentative top korrekt integreret. Se [Angivelse af topintegrationsparametre på side 96](#).

Figur 14-12: Create Results Table - siden Define Integration



12. For komponenterne **Minoxidol**, **Tolbutamide** og **Reserpine** skal du bruge gruppeparametrene **Regression** til at angive følgende, og derefter klikke på **Apply**:
 - **Parameter:** Area
 - **Fit:** Linear

- **Weighting:** Ingen

- Angiv **Concentration Units** til ng/mL, og markér derefter afkrydsningsfeltet **Apply units to all Analytes**.
- Klik på **Apply**.
- Klik på **Finish**.

Prøvefilerne integreres automatisk, og der genereres en resultattabel.

Figur 14-13: Resultattabel

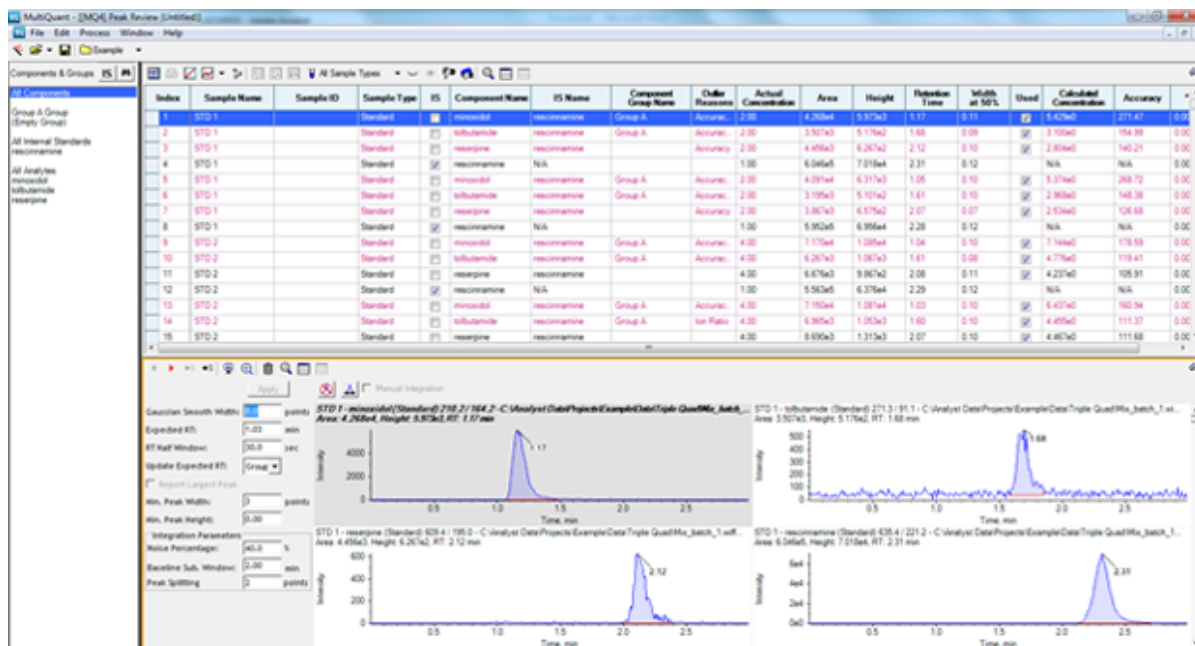
Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Outer Response	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
1	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	2.00	4.268e4	5.973e3	5.17	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	3.223e3	161.15
2	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recomamine	group1	Accuracy	2.00	3.507e3	5.176e2	1.68	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	3.103e3	154.39
3	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	nesequine	recomamine	group1	Accuracy	2.00	4.496e3	6.267e2	2.12	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.804e3	140.21
4	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	6.566e3	7.018e4	2.31	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
5	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	2.00	4.091e4	6.317e3	1.05	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	3.160e3	158.39
6	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recomamine	group1	Accuracy	2.00	3.195e3	5.107e2	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	2.960e3	148.38
7	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	nesequine	recomamine	group1	Accuracy	2.00	3.867e3	6.575e2	2.07	0.07	<input checked="" type="checkbox"/>	2.534e3	126.68
8	STD 1		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	5.952e3	6.985e4	2.28	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
9	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	4.00	7.170e4	1.085e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.946e3	123.64
10	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recomamine	group1	Accuracy	4.00	6.267e3	1.067e3	1.61	0.08	<input checked="" type="checkbox"/>	4.776e3	119.41
11	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	nesequine	recomamine	group1	Accuracy	4.00	6.676e3	9.867e2	2.08	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	4.223e3	108.91
12	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	5.953e3	6.376e4	2.29	0.12	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
13	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	recomamine	group1	Ion Ratio	4.00	7.150e4	1.081e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.236e3	108.90
14	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recomamine	group1	Ion Ratio	4.00	6.985e3	1.063e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.455e3	111.37
15	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	nesequine	recomamine	group1	Ion Ratio	4.00	6.696e3	1.073e3	2.07	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	4.467e3	111.68
16	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	6.817e3	7.533e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
17	STD 2		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.526e5	2.257e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	7.825e3	97.82
18	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.357e4	2.547e3	1.60	0.09	<input checked="" type="checkbox"/>	7.496e3	93.70
19	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	nesequine	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.474e4	1.875e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.013e3	87.67
20	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	6.747e3	7.327e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
21	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.405e5	2.095e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.323e3	104.04
22	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.288e4	1.836e3	1.60	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	8.543e3	101.79
23	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	nesequine	recomamine	group1	Accuracy	8.00	1.397e4	1.860e3	2.07	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	7.970e3	98.62
24	STD 3		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	5.790e3	6.952e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
25	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.897e5	4.095e4	1.03	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.899e4	99.95
26	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.866e4	4.116e3	1.61	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.853e4	97.07
27	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	nesequine	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.736e4	3.547e3	2.05	0.11	<input checked="" type="checkbox"/>	1.525e4	95.28
28	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	5.790e3	6.296e4	2.28	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A
29	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.827e5	4.186e4	1.04	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.896e4	99.11
30	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	tolbutamide	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.347e4	4.296e3	1.63	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.589e4	98.13
31	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	nesequine	recomamine	group1	Accuracy	16.00	2.895e4	4.132e3	2.09	0.10	<input checked="" type="checkbox"/>	1.545e4	96.78
32	STD 4		Standard	<input checked="" type="checkbox"/>	recomamine	N/A		Accuracy	1.00	5.956e3	6.673e4	2.30	0.13	<input checked="" type="checkbox"/>	N/A	N/A

Se [Gennemgå top på side 93](#) for administration af dataene i resultattabellen. Se [Rapporter på side 128](#) for oplysninger om oprettelse af rapporter.

Gennemgang af toppe

- Klik på ikonet **Peak Review**.

Figur 14-14: Ruden Peak Review



- Højreklik i tabellen, og klik derefter på **Column Settings**.
- Højreklik i ruden **Peak Review**, og klik derefter på **Options**.
- Skift **Zoom time axis to view peak** til **3 RT Windows** på fanen **Zooming**.
- Hvis et kromatogram indeholder flere toppe, og en forkert top er integreret, skal du trække hen over den korrekte top for at angive en ny **Expected RT**. Juster om nødvendigt topsøgnings- og integrationsparametrene. Se [Integrationsalgoritmer på side 104](#).
- Hvis du vil anvende de nye parametre på alle andre prøver, skal du højreklikke i kromatogrammet for den samme komponent og derefter klikke på **Update Quantitation Method for Component**.
- Den indlejrede kvantificeringsmetode kan ændres, mens du får vist **Results Table** ved at klikke på **Edit > Modify Results Table Method**. Brugeren kan ændre integrationsparameteren regressionsindstillinger og komponentoplysninger for hver komponent.
Hvis integrationsparameterens regressionsindstillinger og komponentoplysninger for hver komponent ændres, ændres kun den kvantificeringsmetode, der er indlejret i **Results Table**. Den faktiske kvantificeringsmetodefil, der anvendes til at oprette **Results Table**, ændres ikke. Hvis du vil bruge denne indlejrede kvantificeringsmetode til at behandle andre datafiler, skal du eksportere denne indlejrede metode til en metodefil ved hjælp af funktionen **Export**.

Bemærk: Ryd integrationen ved at klikke på **Set Peak to Not Found** for at få vist rådataene, før du integrerer toppen manuelt.

- Klik på ikonet **Enable Manual Integration Mode** i ruden **Peak Review** for at bruge den manuelle integrationstilstand. Træk markøren fra basen af den ene side af toppen

af interesse til den anden. Toppen er nu manuelt integreret, og de tidligere anvendte integrationsparametre er ikke tilgængelige.

Tip! Hvis toppen lige er blevet ændret, skal du føre toppen tilbage til den oprindelige metode ved at højreklikke og derefter klikke på **Revert Peak to Original Method**.

Bemærk: Feltet **Calculated Concentration** i **Results Table** afspejler eventuelle ændringer som følge af kurvens tilpasning til standardens punkter.

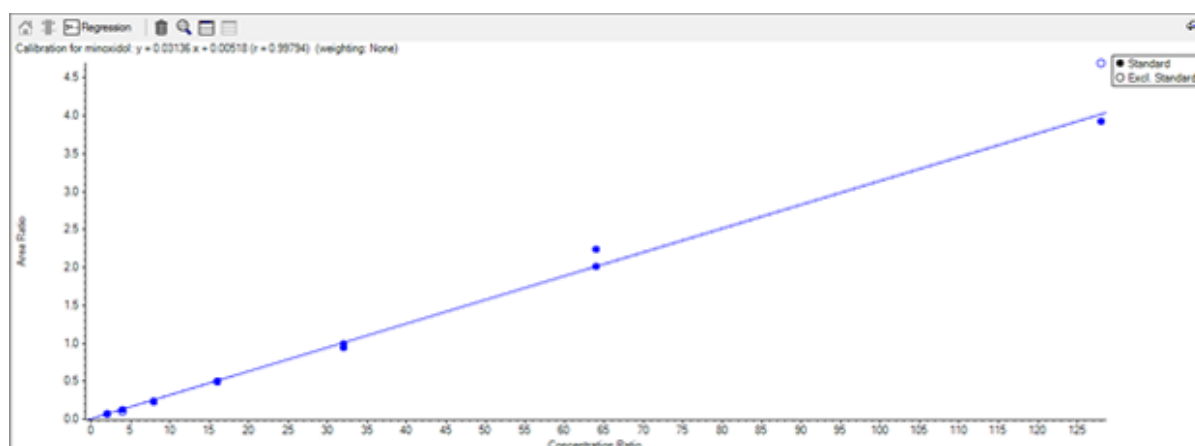
Ændring af kalibreringskurven

1. Klik på ikonet **Show Calibration Curve** for at få vist kalibreringskurven.
2. Hvis du vil tilføje en forklaring, skal du højreklikke i ruden **Calibration** og derefter klikke på **Show Legend**.
3. For at tilføje kvalitetskontrollerne til kurven skal du højreklikke i ruden **Calibration** igen og derefter klikke på **Show QCs**.

Tip! Hvis du vil ekskludere et punkt fra kurven, skal du højreklikke på et punkt på kurven og derefter klikke på **Exclude**.

4. For at bekræfte eller redigere regressionsparametrene for en individuel analyt skal du vælge analytten i ruden **Components and Group** og derefter klikke på knappen **Regression** på værktøjslinjen.
5. For at få kalibreringskurven til at passe bedre ekskluderes den anden STD 2-prøve (koncentration 4,00 ng/ml) og den første STD 7-prøve (koncentration 128,00 ng/ml). For at gøre dette skal du bruge kolonnen **Actual Concentration** og kolonnen **Used** for at fjerne prøverne. Ryd afkrydsningsfeltet i kolonnen Used for at fjerne punktet fra kurven. Kalibreringskurven bør nu ligne den, der er vist i [Figur 14-15](#).

Figur 14-15: Kalibreringskurve med ekskluderede prøver



Gennemgang af prøvestatistik

Brugere kan gennemgå statistikker for en enkelt resultattabel. Gennemgang af topintegrationen, kalibreringskurven og prøvestatistikken er en iterativ proces.

1. Mens en resultattabel er åben, skal du klikke på ikonet **Show Statistics Table**.

Figur 14-16: Statistiktabel

Index	Sample Name	Sample ID	Sample Type	IS	Component Name	IS Name	Component Group Name	Outer Retention	Actual Concentration	Area	Height	Retention Time	Width at 50%	Used	Calculated Concentration	Accuracy
2	STD 1		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Accurate	2.00	3.521e3	5.170e4	1.60	0.09		4.421e0	121.33
6	STD 1		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	2.00	3.195e3	5.101e4	1.61	0.10		2.293e0	114.59
10	STD 2		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	4.00	6.267e3	1.061e5	1.61	0.08		4.131e0	103.43
14	STD 2		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	4.00	6.985e3	1.083e5	1.60	0.10		3.809e0	95.29
18	STD 3		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	8.00	1.357e4	2.247e5	1.60	0.09		6.913e0	86.40
22	STD 3		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	8.00	1.286e4	1.935e5	1.60	0.10		7.573e0	84.65
26	STD 4		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	16.00	2.684e4	4.119e5	1.61	0.10		1.511e1	84.44
30	STD 4		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	16.00	2.847e4	4.296e5	1.63	0.10		1.545e1	86.54
34	STD 5		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	32.00	5.628e4	8.427e5	1.61	0.09		2.887e1	80.23
38	STD 5		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	32.00	5.517e4	8.437e5	1.62	0.09		3.059e1	85.59
42	STD 6		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	64.00	1.115e5	1.793e6	1.61	0.09		6.356e1	88.50
46	STD 6		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	64.00	1.108e5	1.781e6	1.62	0.10		6.762e1	105.97
50	STD 7		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	128.00	2.332e5	3.470e6	1.62	0.10		1.444e2	112.83
54	STD 7		Standard		tolbutamide	resonance	Group A	Ion-Ratio	128.00	2.205e5	3.493e6	1.60	0.09		1.196e2	90.28
58	QC 1		Quality Control		tolbutamide	resonance	Group A	Accurate	3.00	5.765e3	8.395e4	1.60	0.09		3.795e0	125.16

Row	Component Name	Actual Concentration	Num. Values	Mean	Standard Deviation	Percent CV	Accuracy	Value #1	Value #2
1	tolbutamide	2.00	2 of 2	2.359e0	9.547e-2	4.04	117.96	2.427e0	2.293e0
2	tolbutamide	4.00	2 of 2	3.973e0	2.320e-1	5.84	99.33	4.137e0	3.809e0
3	tolbutamide	8.00	2 of 2	7.240e0	4.670e-1	6.45	90.52	6.912e0	7.572e0
4	tolbutamide	16.00	2 of 2	1.528e1	2.371e-1	1.55	95.49	1.511e1	1.545e1
5	tolbutamide	32.00	2 of 2	2.973e1	1.213e0	4.08	92.91	2.887e1	3.059e1
6	tolbutamide	64.00	2 of 2	6.543e1	3.389e0	5.17	102.23	6.356e1	6.762e1
7	tolbutamide	128.00	2 of 2	1.309e2	2.547e1	19.70	101.95	1.444e2	1.196e2

2. Klik på et punkt på listen **Sample Grouping** for at angive, hvordan prøven (for en given analyt) skal grupperes til beregning af statistikken.
3. Klik på kolonnen **Value #1**.

Bemærk: Group by Concentration for Standards and QCs er faktisk baseret på **Displayed Actual Concentration**, ikke på de **Actual Concentration**, der er gemt i resultattabellen. Hvis Std 1-koncentrationen er 0,001, Std 2-koncentrationen er 0,005, og visningsformatet er 0, grupperes Std 1 og Std 2 sammen, fordi begge behandles som 0. Hvis du vil gruppere dem separat, skal du indstille præcisionen for **Analyte Concentration** til 0,000 i dialogboksen **Column Settings**. Hvis Std 1 er 0,500, og Std 2 er 0,499, skal du indstille præcisionen til 0,00 for at gruppere dem sammen. Se [Rediger de kolonner, der vises i resultattabellen på side 86](#).

4. Klik på et punkt på listen **Metric** for at angive den faktiske måling, der anvendes til beregning af statistikkerne.
5. Gennemgå kolonnerne **Value**. De overstregede punkter angiver ekskluderede datapunkter.

Integrationsalgoritmer

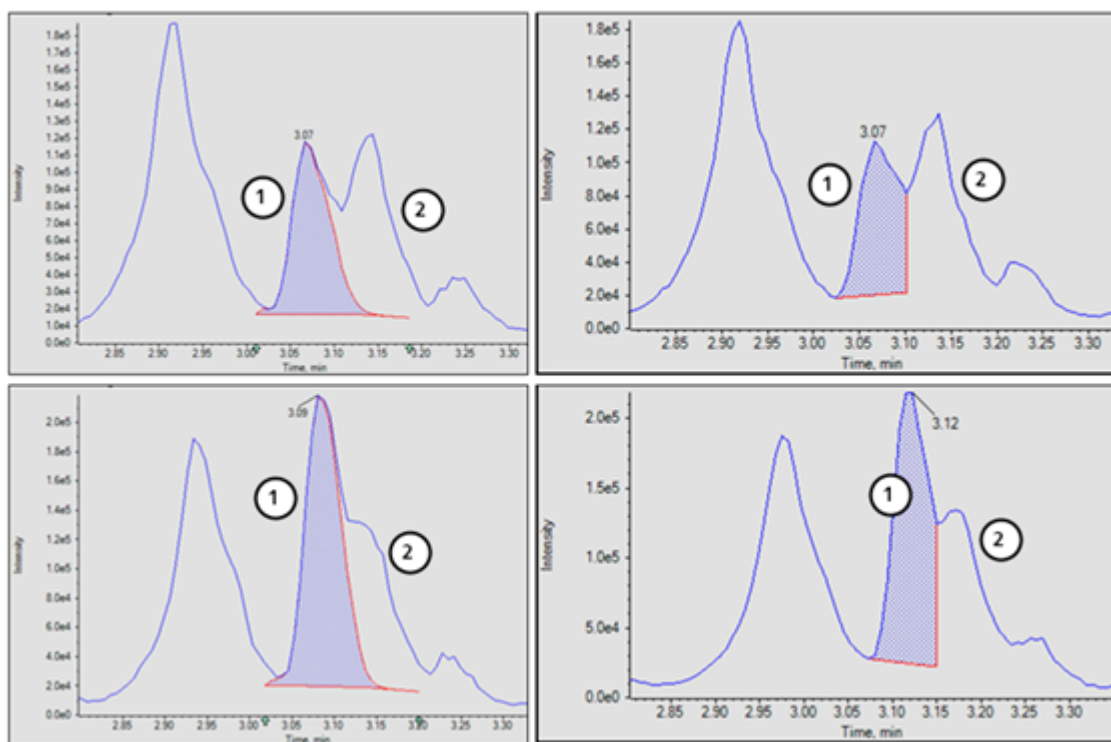
Dette afsnit beskriver de forskellige parametre, der er tilgængelige for hver algoritme.

Om SignalFinder-integrationsalgoritmen

Tæt eluerende toppe

SignalFinder™ giver en mere præcis repræsentation af topområdet for tæt eluerende toppe. Figur 14-17 viser et eksempel på, hvordan integrationsalgoritmer i MQ4 (graf til højre) og SignalFinder (graf til venstre) håndterer tæt eluerende toppe. I dette eksempel forstyrres toppen i baggrunden (element 2) toppen af interesse (element 1). Da interferenstoppen kommer fra enten LC eller matrixen, er den temmelig konstant gennem hele batchen. Analyttens topintensitet øges dog, efterhånden som analytkoncentrationen øges, hvilket resulterer i, at de kombinerede topformer ændrer sig dramatisk. SignalFinder-integrationsalgoritmen, som er baseret på en topmodel, der er brugerdefineret, kan konsekvent identificere toppe af interesse på alle koncentrationsniveauer, mens MQ4-integrationsalgoritmen kun kan trække en lodret linje fra dalen til baseline. Dette integrerer kun en delvis top, hvilket fører til fejl i topområdet.

Figur 14-17: Tæt eluerende toppe



Element	Beskrivelse
1	Top af interesse
2	Co-eluerende baggrundstoppe

Toppe, der følger efter hinanden

For toppe, der følger efter hinanden, er tidligere algoritmer ofte inkonsekvente i valget af den retentionstid, som toppen slutter ved. Afhængigt af den nøjagtige karakter af støjen i denne region, kan to toppe, der ligner hinanden, have forskellige rapporterede topafslutninger. Integrationen kan normalt gøres mere konsekvent ved at justere topsøgningsparametrene. Dette sker imidlertid på bekostning af tid og kræfter. Med en modelleringstilgang afbrydes integrationen, hvis modellen falder under en tærskelværdi, så den er langt mindre påvirket af støj.

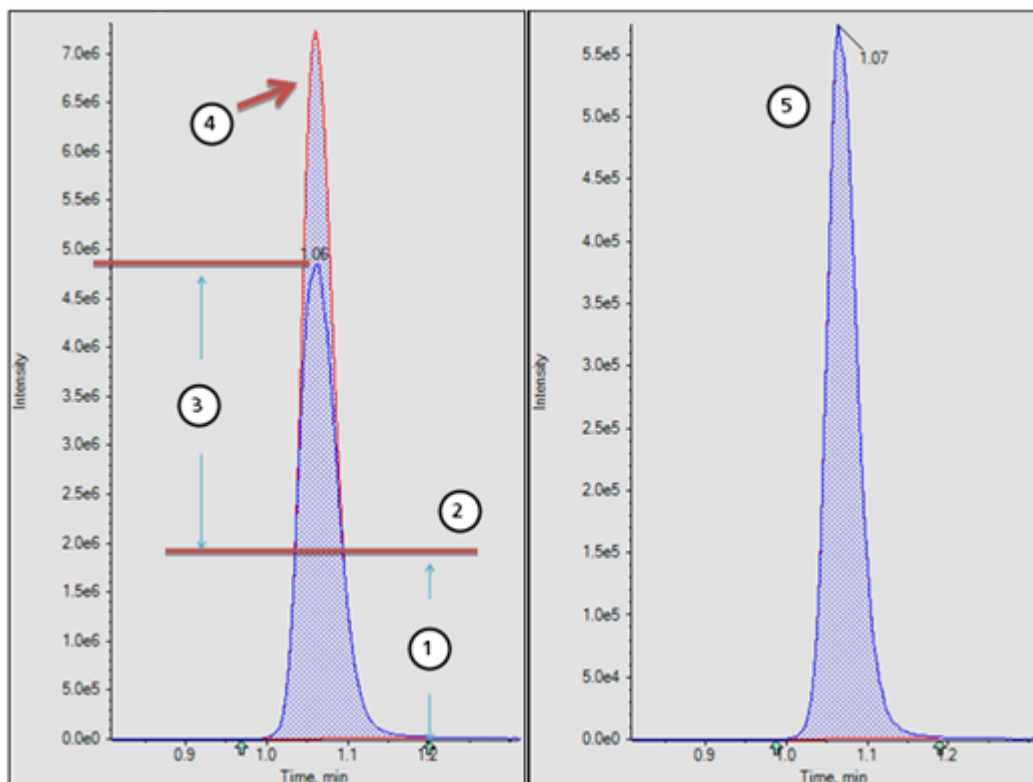
Mættede toppe

Når algoritmen registrerer, at en top er mættet, bruger den en model til at forudsige, hvordan toppen kunne se ud, hvis detektoren ikke var mættet. Dette vises som en rød profil, der strækker sig over toppen for at tilnærme den respons, der ville være opnået, hvis detektoren ikke var blevet mættet. Denne funktion korrigerer kun detektormætning og ikke ionkildemætning eller kolonnemætning. [Figur 14-18](#) viser et eksempel på en korrektion af mætning.

Inden du bruger SignalFinder™-algoritmen, skal du vælge en umættet prøve, der skal bruges til at opbygge topmodellen, og derefter indstille mætningstærsklen til en værdi, der er passende for detektoren. I dette eksempel anvendes en mætningstærskel på $1,8\text{E}+006$ cps. Algoritmen matcher den umættede del af den top, der er tilbage, dvs. toppen under $1,8\text{E}+006$ cps, til topmodellen. Algoritmen forudsiger derefter resten af toppen angivet af den røde kurve baseret på den valgte topmodel.

Bemærk: Mætningstærsklen afhænger af en række faktorer, herunder typen af detektor, detektorens alder og forbindelsen af interesse. For at opnå optimale resultater skal mætningstærsklen justeres på passende vis.

Figur 14-18: Korrektur af detektormætning



Element	Beskrivelse
1	Umættet del (match topmodel)
2	Tærskel 1,8e6 cps
3	Mættet del
4	Korrigeret topprofil
5	Topmodel

Bemærkninger om anvendelse

Nogle arbejdssekvenser har ikke en typisk prøve, der indeholder alle de relevante komponenter. For eksempel kan brugere i forbindelse med opdagelse af lægemidler søge efter oxidationsmetabolitter ved at tilføje +16 til modersubstansens Q1-masse og enten +0 eller +16 til Q3-massen. Disse metabolitter er normalt til stede for nogle prøver, men ikke nødvendigvis i den prøve, der er valgt som den model, der anvendes til at oprette kvantificeringsmetoden. I denne situation vil SignalFinder™-algoritmen anvende en standardmodel, hvis der for en given MRM-overgang ikke findes en rimelig top i den typiske prøve. I mange tilfælde vil denne standardmodel være tilstrækkelig nøjagtig. Det er imidlertid også muligt at oprette en ny model i forbindelse med den efterfølgende topgennemgang ved hjælp af en stikprøve, der indeholder toppen af interesse.

Parametre for SignalFinder™-integrationsalgoritme

Følgende parametre anvendes til at identificere og rapportere toppen af interesse. Se [Parametre for integrationsalgoritme på side 117](#) for at få vist en komplet liste over tilgængelige parametre.

Use Saturation Correction

Denne indstilling er kun tilgængelig, når du angiver de overordnede algoritmestandardværdier og ikke under oprettelse af kvantificeringsmetode eller individuel topgennemgang, fordi det ikke er nyttigt at bruge denne indstilling for nogle toppe alene.

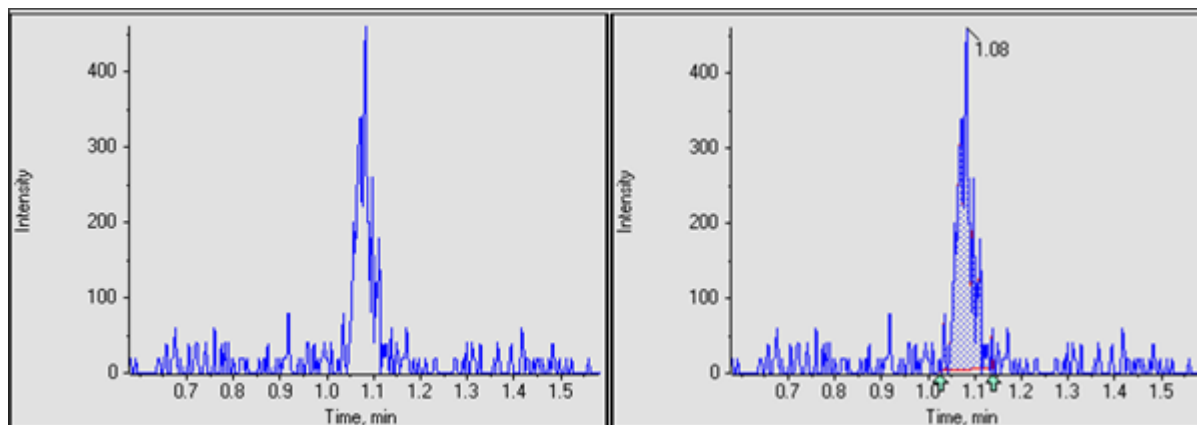
Mætningstærskel

Toppe over denne tærskel betragtes som mættede. Denne værdi er detektorafhængig.

S/N Threshold

Hvis S/N-tærsklen i [Figur 14-19](#) sættes til syv (graf til venstre), rapporteres toppen ikke. Hvis S/N-tærsklen er sat til to (graf til højre), rapporteres toppen. Denne parameter påvirker ikke integrationen.

Figur 14-19: S/N Threshold



Confidence Threshold

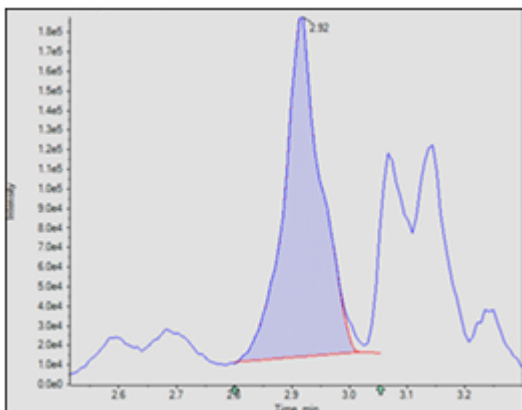
Denne parameter bruges til at filtrere potentielle toppe, der er falske positive. Standardværdien er 50 %, hvilket normalt er passende. Brugeren kan dog eventuelt ønske at bruge en højere værdi for meget støjende data eller for data, for hvilke topbredden varierer betydeligt fra prøve til prøve.

[Figur 14-20](#) og [Figur 14-21](#) viser, hvordan **Confidence Threshold** påvirker antallet af identificerede toppe. Når **Confidence Threshold** er sat til 50 %, identificeres toppen med en lille skulder som en top. Når **Confidence Threshold** er sænket til 16 %, finder SignalFinder™-algoritmen to toppe. Træk hen over de to topområder for at få vist de to toppe.

For at afgøre, hvilke andre toppe der potentielt er til stede i denne ene top, og hvis den korrekte **Confidence Threshold** ikke er kendt, skal du trykke på **Ctrl** og derefter trække hen over det relevante toppeområde. Dette sænker automatisk **Confidence Threshold** og

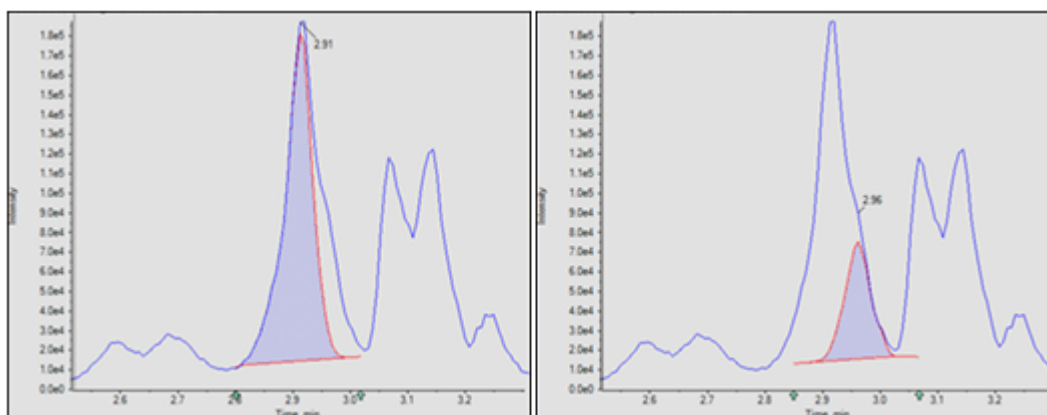
afslører den anden top af interesse, der ikke er til stede, hvis **Confidence Threshold** er indstillet til 50 %.

Figur 14-20: 50 % tillid

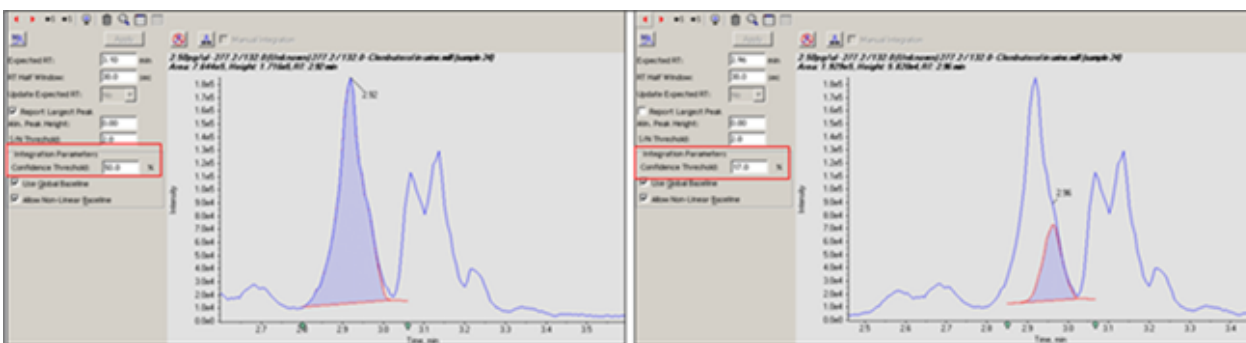


Ved 16 % tillid, findes der to toppe. Træk over topområdet for at identificere de to toppe

Figur 14-21: 16 % tillid



Figur 14-22: Parameter for tillidstærskel

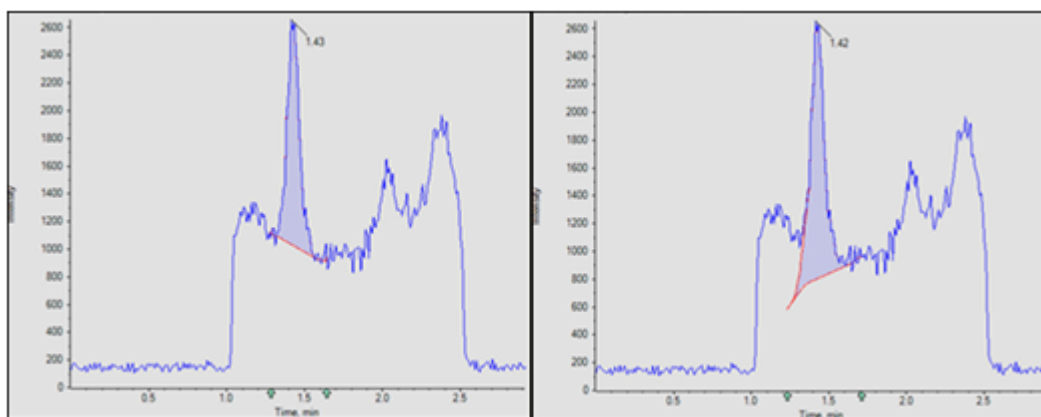


Brug af global baseline

Vælg denne indstilling for at bruge hele kromatogrammet som baseline. Hvis indstillingen ikke er valgt, vurderer kvantificeringssoftwaren ændringer i baseline lokalt. [Figur 14-23](#) viser et eksempel på, hvornår den lokale baseline bør anvendes.

Den venstre graf viser et kromatogram, der blev korrekt integreret ved hjælp af den lokale baseline. Den højre graf viser det samme kromatogram, der blev forkert integreret ved hjælp af den globale baseline.

Figur 14-23: Brug af global baseline

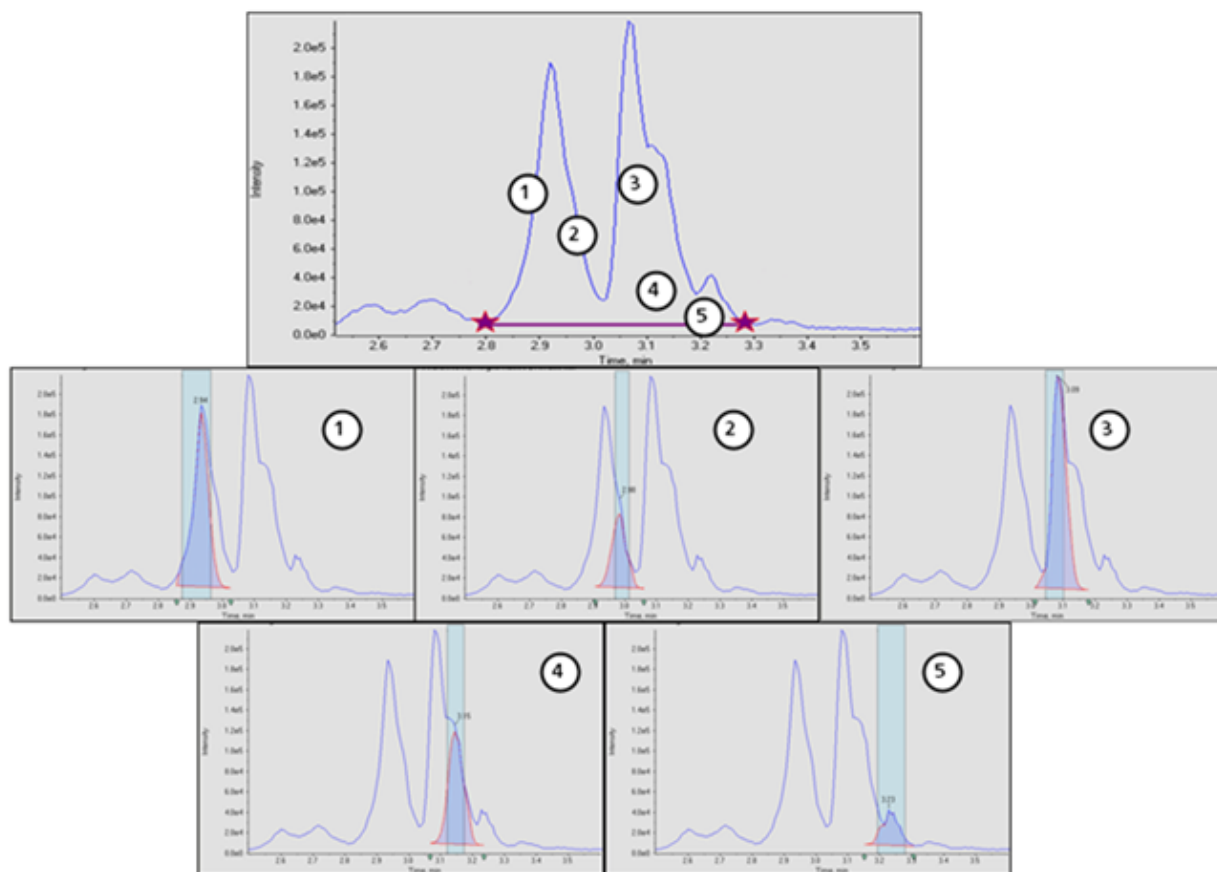


Allow Non-Linear Baseline

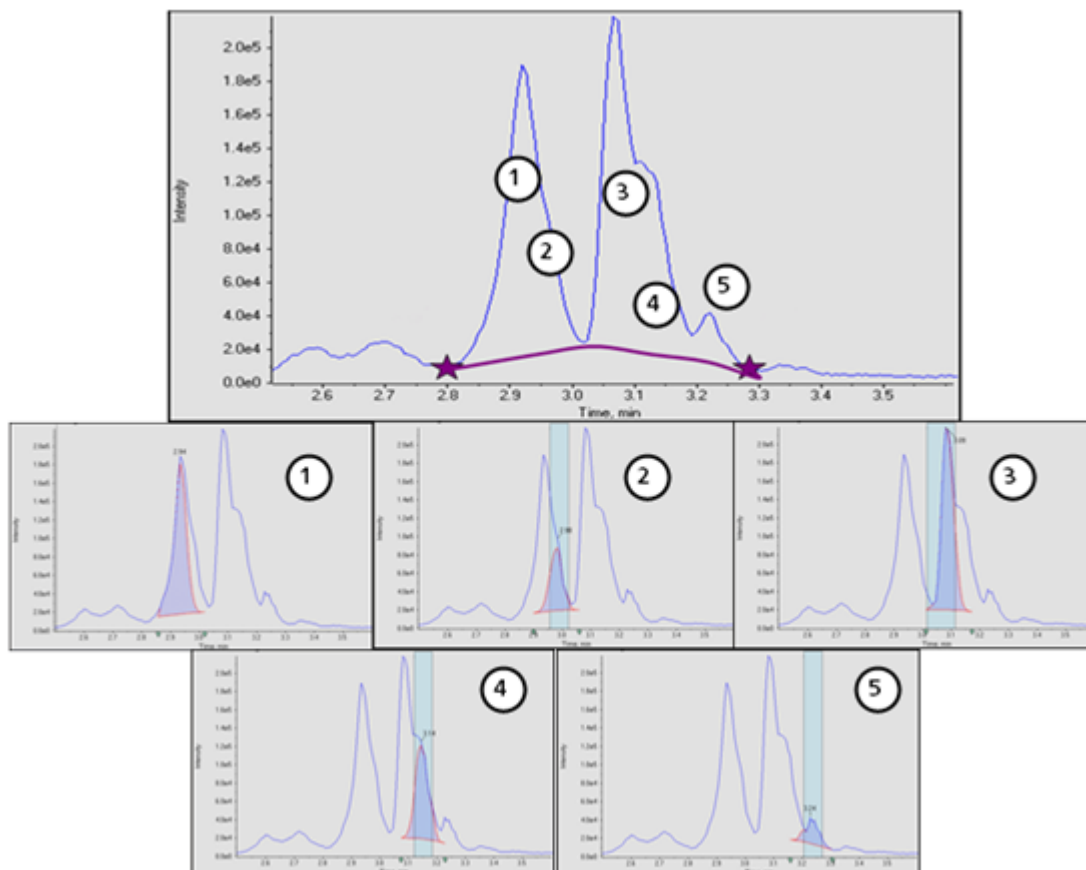
Brug denne indstilling til at vælge mellem en lineær eller ikke-lineær baseline. En ikke-lineær baseline estimerer baseline under hver top. Den lineære indstilling passer til en linje mellem punkterne i begyndelsen og slutningen af den specifikke gruppe af toppe. [Figur 14-24](#) og [Figur 14-25](#) viser eksempler på lineære og ikke-lineære baselines for co-eluerende toppe. Element 1 til 4 er sammenviklede toppe.

En ikke-lineær baseline anbefales for flere toppe. For en enkelt top er forskellen mellem lineær og ikke-lineær ubetydelig.

Figur 14-24: Eksempel på en lineær baseline



Figur 14-25: Eksempel på en ikke-lineær baseline



Tip til brug af SignalFinder™-integrationsalgoritmen

- Flet to toppe: Lejlighedsvis registrerer SignalFinder-integrationsalgoritmen to toppe. For at flette de to toppe skal du trykke på **Ctrl** og derefter trække hen over de to toppe. Softwaren forsøger at flette toppene ved at reducere følsomheden over for sammenfletning, medmindre de to toppe er for langt fra hinanden.
- Redigering af toppens start- og sluttidspunkter: Hvis du vil ændre start- og sluttidspunkterne for toppen, mens du opretter en **Results Table** eller under top gennemgang, skal du trække i toppens start- og slutpile.

Bemærk: Brugeren kan kun ændre start- og slutpile inden for rimelige grænser.

Parametre for MQ4-integrationsalgoritme

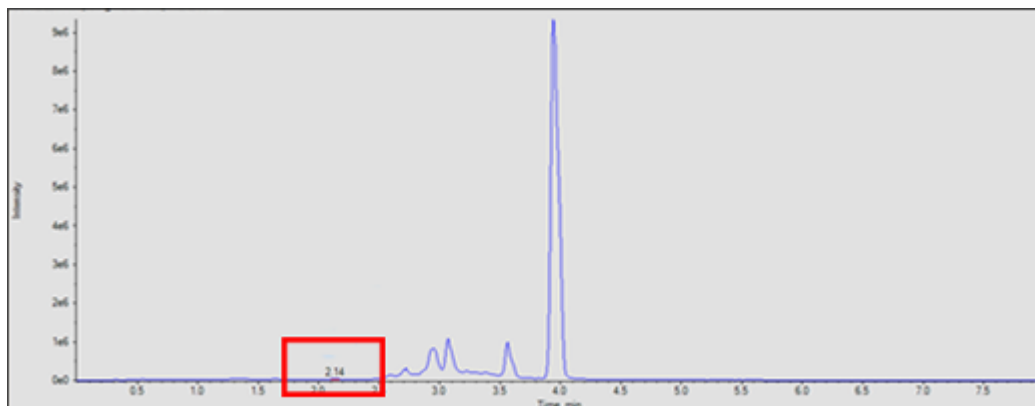
Følgende parametre anvendes til at identificere og rapportere toppen af interesse. Se [Parametre for integrationsalgoritme på side 117](#) for at få vist en komplet liste over tilgængelige parametre.

Noise Percentage

Denne parameter anvendes til at estimere støjniveauet i kromatogrammerne. Den angivne procentdel af datapunkterne med den mindste intensitet antages at være støj.

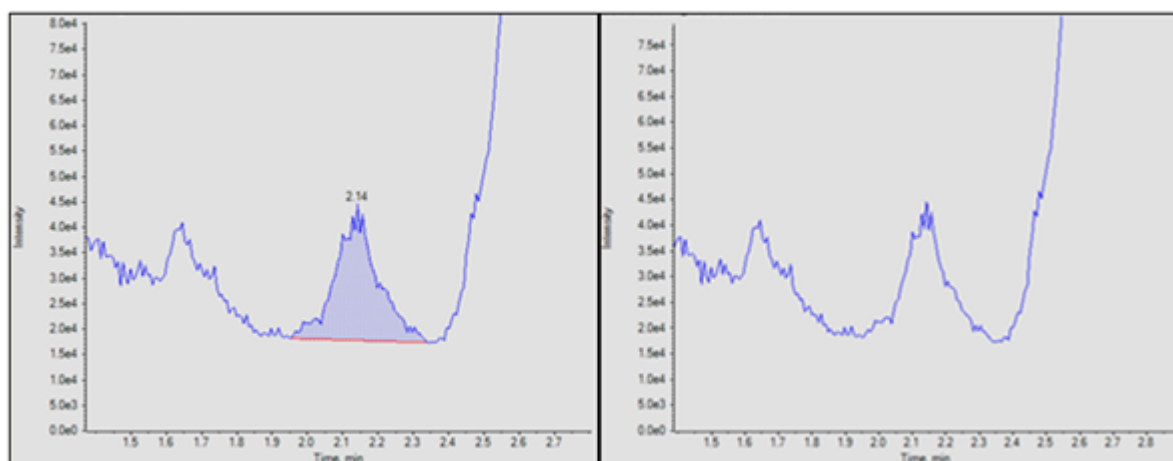
Typiske værdier spænder fra 20 % til 60 %. Hvis der ikke findes små toppe i nærvær af større toppe, bør støjprocenten sænkes. [Figur 14-26](#) er et eksempel på en lille top i nærvær af en ekstremt stor top. Denne top findes ikke, hvis støjprocenten er indstillet til 90 %, men findes, hvis støjprocenten er angivet til 40 %.

Figur 14-26: Top af interesse



I [Figur 14-27](#) viser den venstre graf støjprocenten angivet til 40 %. Den højre graf er angivet til 90 %.

Figur 14-27: Støjniveauer

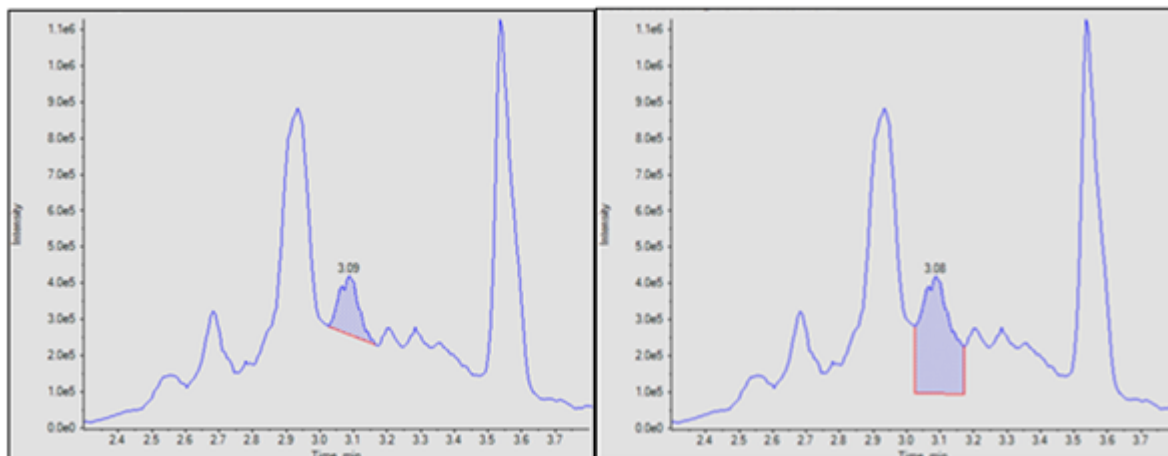


Vinduet Baseline Sub.

Efter udglatning, men før anden behandling, skal du trække kromatogrammer fra baseline for at fjerne pukler i dataene. For hvert datapunkt beregnes baseline ved hjælp af datapunkterne på både venstre og højre side af det aktuelle punkt med minimal intensitet (inden for subtraktionsvinduet).

Den nøjagtige værdi af denne parameter er ikke kritisk, forudsat at den er angivet mindst et par gange større end den forventede topbredde.

Figur 14-28: Vinduet Baseline Subtraction



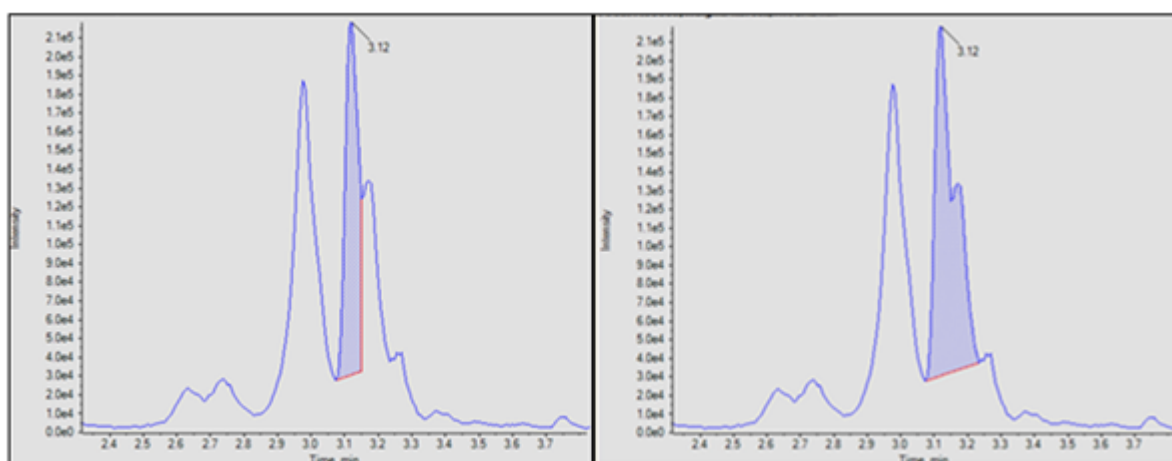
Peak Splitting

Denne parameter styrer, om en potentielt støjende top findes som en enkelt top eller som to (eller flere) separate toppe. Hvis faldet mellem to potentielle toppe er mindre end den angivne værdi, findes en enkelt top. Ellers findes der to toppe.

Angivelse af denne parameter til en høj værdi vil forhindre støjende toppe i at blive opdelt og fundet som to separate toppe. Der skal dog anvendes en mindre værdi, hvis der er to tæt eluerende (overlappende) særskilte toppe.

Grafen til venstre viser Peak Splitting angivet til to punkter. Grafen til højre viser Peak Splitting angivet til tre punkter.

Figur 14-29: Peak Splitting



Valgfri opgaver

Dette afsnit indeholder valgfri opgaver, der kan bruges til forbedring af dataanalyse.

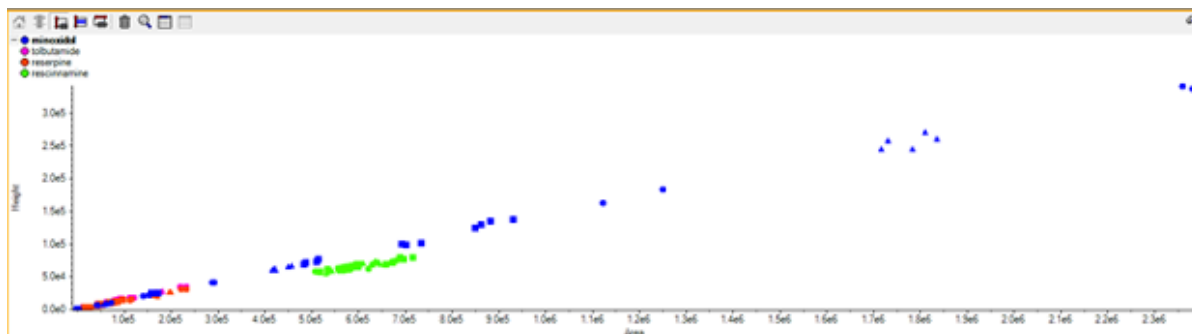
Oprettelse af metriske plot

Brug et **Metric Plot** til at plote værdierne i en kolonne i **Results Table** mod enten række nummeret eller en anden kolonne. Disse plot er en værdifuld hjælp til en visuel datagennemgang, især hvis der ikke er brug for at gennemgå alle kromatogrammer manuelt ved hjælp af ruden **Peak Review**.

Bemærk: Metriske plot anvender de samme regressionsformler som kalibreringskurverne. For metriske plot er der to yderligere formler, middelværdi og median.

1. Åbn en **Results Table**.
2. Vælg én eller to kolonner, og klik derefter på ikonet **Metric Plot**. I dette eksempel skal du vælge kolonnen **IS Area**.
Hvis der er valgt én kolonne, viser det resulterende plot værdierne fra kolonnen som en funktion af række nummeret i tabellen. Hvis der vælges to kolonner, plottes værdierne fra kolonnerne i forhold til hinanden. Den første af de to kolonner, der skal vælges, indeholder x-værdierne, og den anden indeholder y-værdierne.
3. Højreklik i plotruden, og klik derefter på **Show Legend** for at få vist en forklaring af de symboler, der bruges af plottet.

Figur 14-30: Metrisk plot



Oprettelse af brugerdefinerede kolonner

1. Mens du har en åben og aktiv **Results Table**, skal du højreklikke og derefter klikke på **Add Custom Column**.
Der tilføjes en kolonne til slutningen af tabellen.
2. Indtast kolonnenavnet i dialogboksen **Custom Column Name**.
3. Klik på **OK**.

Om kvantificeringsmetodefiler og indlejrede metoder

Kvantificeringsmetoder kan oprettes ved hjælp af én af følgende muligheder:

- Brug **Quantitation wizard**.
- Rediger en eksisterende metode i **Quantitation wizard** med afkrydsningsfeltet **Edit** markeret.

Selvstudie i arbejdssekvensen i kvantificeringsanalyse

- Åbn og rediger en eksisterende kvantificeringsmetode.

Kvantificeringsmetoder gemmes i mappen **Quantitation Method**.

Når der oprettes en **Results Table**, er den kvantificeringsmetode, der anvendes til oprettelse af **Results Table**, indlejret i **Results Table**. Rediger den indlejrede kvantificeringsmetode, men eventuelle ændringer af kvantificeringsmetoden gælder kun for den indlejrede metode i **Results Table** og ikke for metoderne i mappen **Quantitation Method**.

Tip! Denne ændrede indlejrede metode kan eksporteres til senere brug.

Parametre for integrationsalgoritme **A**

Parametre for SignalFinder-integrationsalgoritme

Integrationsalgoritmen SignalFinder™ bygger en topmodel ved hjælp af den valgte prøve, når der oprettes en ny kvantificeringsmetode. Denne model beskriver formen på den valgte top, der bruges til at træne algoritmen.

Figur A-1: Dialogboksen Integration Defaults

Integration Defaults

Integration Algorithm: SignalFinder1

Expected RT: 0.00 min

RT Half Window: 30.0 sec

Update Expected RT: No

☒ Report Largest Peak

Min. Peak Height: 0.00

☒ Use Saturation Correction

Saturation Threshold: 3.5E+006

S/N Threshold: 2.0

Integration Parameters

Confidence Threshold: 50.0 %

☒ Use Global Baseline

☒ Allow Non-Linear Baseline

OK Cancel

Etiket	Beskrivelse
Integration Algorithm	Den valgte integrationsalgoritme.
Expected RT	Den forventede retentionstid i minutter. Dette indstilles i første omgang til retentionstiden for den største top i kromatogrammet for den repræsentative prøve, der anvendes til at opbygge kvantificeringsmetoden. Dette felt kan ikke redigeres. Det opdateres afhængigt af forbindelsen i kvantificeringsmetoden.

Parametre for integrationsalgoritme

Etiket	Beskrivelse
RT Half Window	Halvdelen af det samlede retentionstidsvindue i sekunder. For at en topværdi kan detekteres og indberettes, skal forskellen mellem toppen og den forventede retentionstid være mindre end eller lig med denne værdi.
Update Expected RT	<p>Angiver, om den forventede retentionstid skal justeres undervejs ved hjælp af andre komponenter. Gør brug af yderligere oplysninger for at kompensere for forskydninger i retentionstiden fra prøve til prøve. Valgmulighederne er:</p> <ul style="list-style-type: none">• No: Den forventede retentionstid anvendes, som den er.• Group: Gælder for komponenter, der er blevet tildelt grupper, for hvilke alle komponenter for en given gruppe har samme retentionstid (dvs. forskellige overgange for samme forbindelse). Den forventede retentionstid opdateres ved hjælp af positionen for maksimal overlapning af de enkelte kromatogrammer for gruppen (for en given prøve) inden for RT-vinduet. Tanken er at indstille den forventede RT til den sandsynlige RT for den faktiske komponent af interesse (hvor der forventes en top i hvert kromatogram.) <p>Hvis der er defineret mindst to interne standarder for en gruppe, anvendes kun deres kromatogrammer til at bestemme den nye retentionstid. Ellers anvendes alle kromatogrammer for gruppen. Hensigten er kun at anvende de kromatogrammer, for hvilke det er mest sandsynligt, at komponenten er til stede på et rimeligt niveau.</p> <ul style="list-style-type: none">• IS: For analytter, der anvender en intern standard, bestemmes først den faktiske retentionstid for den interne standardtoppe (for den tilsvarende prøve). Den forventede RT for analytten bestemmes ved at gange den specificerede forventede RT med forholdet mellem den faktiske og den forventede RT for den interne standard. Denne indstilling kaldes undertiden relativ retentionstid. <p>Bemærk: Denne indstilling gælder ikke for interne standarder eller for analytter, der ikke anvender en intern standard.</p>
Report Largest Peak	<p>Hvis der findes mere end én top i et kromatogram, styrer denne parameter, inden for retentionstidsvinduet og med mindstebredde og -højde opfyldt, hvilken top der rapporteres. Når afkrydsningsfeltet er markeret, rapporteres toppen med det største område. Når afkrydsningsfeltet ikke er markeret, rapporteres toppen med en retentionstid tættest på den forventede tid.</p> <p>Aktivering af denne indstilling anbefales, medmindre retentionstiderne i høj grad er reproducerbare.</p>

Etiket	Beskrivelse
Min. Peak Height	Denne parameter påvirker ikke integrationen. Den anvendes kun til rapportering. Potentielle toppe, der er mindre intense end denne værdi, antages at være uden interesse og anvendes ikke.
Use Saturation Correction	Når algoritmen registrerer, at en top er mættet, bruger den modellen til at forudsige, hvordan toppen kunne se ud, hvis detektoren ikke var mættet. Dette medfører, at profilen strækker sig over toppen af toppen for at tilnærme sig den respons, der ville være opnået, hvis detektoren ikke havde mættet. Dette kan udvide kalibreringskurvernes lineære dynamikområde. Denne indstilling er kun tilgængelig, når du angiver de overordnede algoritmestandardværdier og ikke under oprettelse af kvantificeringsmetode eller individuel topgennemgang, fordi det ikke er nyttigt at bruge denne indstilling for nogle toppe alene.
Saturation Threshold	Toppe over denne tærskel betragtes som mættede. Denne værdi er detektorafhængig.
S/N Threshold	Denne parameter påvirker ikke integrationen. Den anvendes kun til rapportering. Toppe, der ligger under tærsklen, indberettes ikke.
Confidence Threshold	Bruges til at filtrere potentielle toppe, der er falske positive. Standardværdien er 50 %, hvilket normalt er passende. En større værdi kan dog anvendes til meget støjende data eller til data, for hvilke topbredden har betydelige variationer fra prøve til prøve.
Use Global Baseline	Vælg for at bruge hele kromatogrammet som baseline. Hvis afkrydsningsfeltet ikke er markeret, vurderer softwaren ændringer i baseline lokalt.
Allow Non-Linear Baseline	Vælg mellem en lineær eller ikke-lineær baseline. En ikke-lineær baseline estimerer baseline under hver top. En lineær baseline passer til en linje mellem punkterne i begyndelsen og slutningen af den specifikke gruppe af toppe.

Parametre for MQ4-integrationsalgoritme

Figur A-2: Dialogboksen Integration Defaults

The screenshot shows the 'Integration Defaults' dialog box with the following settings:

- 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

Buttons: OK, Cancel

Etiket	Beskrivelse
Integration Algorithm	Den valgte integrationsalgoritme.
Gaussian Smoothing Width	Der anvendes en standardalgoritme for gaussisk udjævning med en halv bredde svarende til den angivne værdi (i punkter). For støjende kromatogrammer er en værdi tæt på den faktiske topbredde (i halv højde) et godt valg. For mindre støjende data kan en mindre værdi anvendes.
Expected RT	Den forventede retentionstid, i minutter. Dette indstilles i første omgang til retentionstiden for den største top i kromatogrammet for den repræsentative prøve, der anvendes til at opbygge kvantificeringsmetoden.
RT Half Window	Halvdelen af det samlede retentionstidsvindue i sekunder. For at en topværdi kan detekteres og indberettes, skal forskellen mellem toppen og den forventede retentionstid være mindre end eller lig med denne værdi.

Etiket	Beskrivelse
Update Expected RT	<p>Angiver, om den forventede retentionstid skal justeres undervejs ved hjælp af andre komponenter. Gør brug af yderligere oplysninger for at kompensere for forskydninger i retentionstiden fra prøve til prøve. Valgmulighederne er:</p> <ul style="list-style-type: none"> • No: Den forventede retentionstid anvendes, som den er. • Group: Gælder for komponenter, der er blevet tildelt grupper, for hvilke alle komponenter for en given gruppe har samme retentionstid (dvs. forskellige overgange for samme forbindelse). Den forventede retentionstid opdateres ved hjælp af positionen for maksimal overlapning af de enkelte kromatogrammer for gruppen (for en given prøve) inden for RT-vinduet. Tanken er at indstille den forventede RT til den sandsynlige RT for den faktiske komponent af interesse (hvor der forventes en top i hvert kromatogram.) <p>Hvis der er defineret mindst to interne standarder for en gruppe, anvendes kun deres kromatogrammer til at bestemme den nye retentionstid. Ellers anvendes alle kromatogrammer for gruppen. Hensigten er kun at anvende de kromatogrammer, for hvilke det er mest sandsynligt, at komponenten er til stede på et rimeligt niveau.</p> <ul style="list-style-type: none"> • IS: For analytter, der anvender en intern standard, bestemmes først den faktiske retentionstid for den interne standardtoppe (for den tilsvarende prøve). Den forventede RT for analytten bestemmes ved at gange den specificerede forventede RT med forholdet mellem den faktiske og den forventede RT for den interne standard. Denne indstilling kaldes undertiden relativ retentionstid.
Report Largest Peak	<p>Hvis der findes mere end én top i et kromatogram inden for retentionstidsvinduet, som opfylder mindstebredde og -højden, styrer denne parameter, hvilken top der indberettes. Når afkrydsningsfeltet er markeret, rapporteres toppen med det største område. Når afkrydsningsfeltet er afkrydset, rapporteres toppen med den retentionstid, der er tættest på den forventede tid.</p> <p>Aktivering af denne indstilling anbefales, medmindre retentionstiderne i høj grad er reproducerbare.</p>
Min. Peak Height	Denne parameter påvirker ikke integrationen. Den anvendes kun til rapportering. Potentielle toppe, der er mindre intense end denne værdi, antages at være uden interesse og anvendes ikke.
Min. Peak Width	Eventuelle toppe, der er smallere end denne værdi, antages at være støj og anvendes ikke.

Parametre for integrationsalgoritme

Etiket	Beskrivelse
Noise Percentage	<p>Denne parameter anvendes til at estimere støjniveauet i kromatogrammerne. Den angivne procentdel af datapunkterne med den mindste intensitet antages at være støj.</p> <p>Typiske værdier spænder fra 20 % til 60 %. Hvis der ikke findes små toppe ved forekomsten af større toppe, bør denne værdi sænkes.</p>
Vinduet Baseline Sub.	<p>Efter udglatning, men før anden behandling, skal du trække kromatogrammer fra baseline for at fjerne pukler i dataene. For hvert datapunkt beregnes baseline ved hjælp af datapunkterne på både venstre og højre side af det aktuelle punkt med minimal intensitet (inden for subtraktionsvinduet).</p> <p>Den nøjagtige værdi af denne parameter er ikke kritisk, forudsat at den er angivet mindst et par gange større end den forventede topbredde.</p>
Peak Splitting	<p>Denne parameter styrer, om en potentielt støjende top findes som en enkelt top eller som to (eller flere) separate toppe. Hvis faldet mellem to potentielle toppe er mindre end den angivne værdi, findes en enkelt top. Ellers findes der to toppe.</p> <p>Angivelse af denne parameter til en høj værdi forhindrer støjende toppe i at blive delt og fundet som to separate toppe. Der skal dog anvendes en mindre værdi, hvis der er to tæt eluerende (overlappende) særskilte toppe.</p>

Regressionsligninger

B

Dette afsnit beskriver de ligninger, der anvendes til at beregne regressionskurverne. I de følgende ligninger repræsenterer x analytkoncentrationen for **Standard**-prøver, og y repræsenterer det tilsvarende topområde eller den tilsvarende tophøjde. De præcise variable, der anvendes til regressionen, afhænger af, om der anvendes en intern standard, og om topområdet eller tophøjden anvendes, som vist i [Tabel B-1](#).

Tabel B-1: Regressionsvariable

Intern standard anvendt?	Område anvendt?	x	y
Ja	Ja	$C_a / C_{is} / DF$	A_a / A_{is}
Ja	Nej	$C_a / C_{is} / DF$	H_a / H_{is}
Nej	Ja	C_a / DF	A_a
Nej	Nej	C_a / DF	H_a

hvor:

- C_a = faktisk analytkoncentration
- C_{is} = intern standardkoncentration
- DF = fortyndingsfaktor
- A_a = topområde for analyt
- A_{is} = topområde for intern standard
- H_a = analyttophøjde
- H_{is} = tophøjde for intern standard

Vægtningstyper

[Tabel B-2](#) viser, hvordan vægtningstypen (w i ligningerne) beregnes for hver af de syv vægtningstyper.

Tabel B-2: Vægtningstyper

Vægtningstype	Vægt (w)
Ingen	Altid 1,0.
$1/x$	Hvis $ x < 10^{-5}$, er $w = 10^5$. I modsat fald er $w = 1/ x $.
$1/x^2$	Hvis $ x < 10^{-5}$, er $w = 10^{10}$. I modsat fald er $w = 1/x^2$.
$1/y$	Hvis $ y < 10^{-8}$, er $w = 10^8$. I modsat fald er $w = 1/ y $.

Tabel B-2: Vægtningstyper (fortsat)

Vægtningstype	Vægt (w)
$1/y^2$	Hvis $ y < 10^{-8}$, er $w = 10^{16}$. I modsat fald er $w = 1/y^2$.
$ x $	Hvis $x < 0$, genereres en fejl. Hvis $x < 10^{-5}$, så er $w = \ln 10^5$. I modsat fald er $w = \ln x $.
$\ln y$	Hvis $y < 0$, genereres en fejl. Hvis $y < 10^{-8}$, så er $w = \ln 10^8$. I modsat fald er $w = \ln y $.

Regressionsligninger

Dette afsnit indeholder ligningerne for hver regressionstype. I de følgende ligninger er x, y og w som tidligere defineret. Alle summer beregnes for alle **Standard**-prøver, bortset fra de **Standard**-prøver, der er markeret som ubrugte.

Korrelationskoefficienten beregnes som:

hvor:

y_c = Beregnet y-værdi ved hjælp af den relevante ligning nedenfor

Lineær

Den lineære kalibreringsligning er:

$$y = mx + b$$

Hældningen og skæringspunktet beregnes som:

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

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

hvor:

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

Lineær gennem nul

Ligningen for kalibreringen lineær gennem nul er:

$$y = mx$$

Hældningen beregnes som:

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

Middelresponsfaktor

Middelresponsfaktoren for kalibrering er:

$$y = mx$$

Dette er den samme ligning som for "lineær gennem nul"-tilfældet. Hældningen beregnes dog forskelligt som:

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

og responsfaktorens standardafvigelse som:

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

hvor:

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

Bemærk: Point, hvis x-værdi er nul, er udelukket fra summerne.

Hvis der er linearitet og krumning i linjen af punkter, bruges potensregression i stedet for lineær eller kvadratisk regression til at producere en linje et sted mellem disse matches.

Kvadratisk

Den kvadratiske kalibreringsligning er:

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

De polynomiale koefficienter beregnes som:

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

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

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

hvor:

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

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

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

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

Regressionsligninger

$$b_1 = \sum wx^3 / \sum wx - \sum wx^4 / \sum wx^2$$

$$b_2 = \sum wxy / \sum wx - \sum wx^2 y / \sum wx^2$$

Effekt

Effektfunktionens kalibreringsligning er:

$$y = aks^p$$

Ligningerne for den lineære kalibrering anvendes, som beskrevet ovenfor, til beregning af hældningen (m) og skæringspunktet (b), bortset fra at x i disse ligninger erstattes af ln x, og y erstattes af ln y. Når dette er gjort, beregnes a og p som:

$$a = e^b$$

$$p = m$$

Hvis nogen af x- eller y-værdierne er negative eller nul, rapporteres der en fejl.

Wagner

Wagner-kalibreringsligningen er:

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

Ligningerne for den kvadratiske kalibrering anvendes som beskrevet ovenfor til at beregne e_{t0} , a_1 og e_{t2} , bortset fra at x i disse ligninger erstattes af ln x, og y erstattes af ln y.

Hvis nogen af x- eller y-værdierne er negative eller nul, rapporteres der en fejl.

Hill

Hill-kalibreringsligningen er:

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

Det er ikke muligt at give en analytisk funktion til løsning for a, b, c og n. I stedet bestemmes koefficienterne ved hjælp af den iterative Levenberg-Marquardt-metode.

Beregning af endelige koncentrationer

Dette afsnit forklarer, hvordan du beregner den endelige koncentration ud fra de resulterende regressionsligninger ved hjælp af den IS-koncentration og fortyndingsfaktor, der blev anvendt i den oprindelige koncentration.

Lineær

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

Lineær gennem nul- og middelresponsfaktor

$$x = y/m$$

Kvadratisk

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

- Hvis både plus- og minus-rødderne er inden for standardens område, genereres der en fejl, da der ikke er nogen unik løsning.
- Hvis en af de to rødder ligger inden for standardernes koncentrationsområde, indberettes denne værdi.
- Hvis begge rødder er under den laveste koncentrationsstandard, indberettes plus-roden.
- Hvis begge rødder er over den højeste koncentrationsstandard, indberettes minus-roden.
- Hvis minus-roden er under den laveste standard, og plus-roden er over den højeste standard, indberettes minus-roden, hvis forskellen fra den laveste koncentrationsstandard er mindre end forskellen mellem plus-roden og den højeste koncentration. Ellers indberettes plus-roden.

Effekt

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

Wagner

Den samme ligning som for det kvadratiske tilfælde anvendes til hovedberegningen, bortset fra at x erstattes med ln x og y erstattes med ln y.

Hill

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

Dette afsnit beskriver, hvordan du bruger softwarens rapportfunktion til at oprette formaterede rapporter fra **Results Tables**.

Oprettelse af rapporter

Denne software bruger Microsoft Word-dokumenter som foruddefinerede skabeloner. Når en rapport oprettes, udtrækkes værdier fra den seneste resultattabel og de tilknyttede filer.

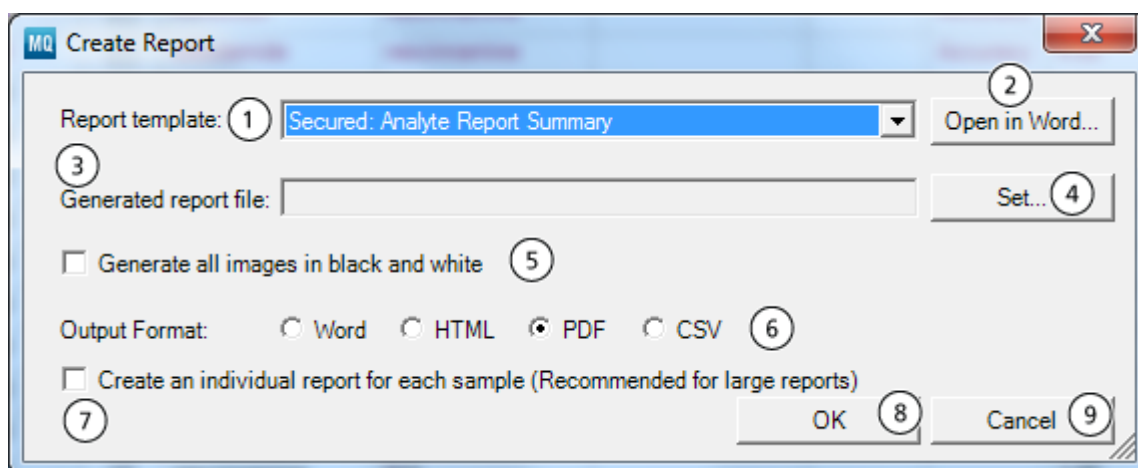
Brugere er ansvarlige for at kontrollere brugerdefinerede skabeloner. Brugeren kan redigere talformatet i rapportskabeloneditoren. Hvis talformatet ikke er angivet i skabelonen, anvendes formatet fra **Results Table Column Setting** i rapporten. Sørg for at anvende det korrekte antal decimaler.

De kontrollerede måder at udskrive data fra softwaren er eksport af **Results Tables**, overførsel til LIMS og rapportering. De andre kilder til udskrivning af data, f.eks. kopiering og indsætning fra **Results Tables**, er ikke kontrollerede. Brugere bør ikke bruge disse ukontrollerede outputmetoder til lovgivningsmæssige formål.

Naviger til en hvilken som helst mappe for at få adgang til og gemme data. De tidligere placeringer, som skabeloner blev åbnet fra og rapporter gemt til, åbnes som standard.

1. Åbn en **Results Table**.
2. Klik på **File > Create Report and Save Results Table**.

Figur C-1: Dialogboksen Create Report



Element	Beskrivelse
1	Report template: Vælg en skabelon på listen.

Element	Beskrivelse
2	Open in Word: Klik for at åbne den angivne rapportskabelon direkte i Microsoft Word for at kontrollere eller redigere den.
3	Generated report file: Viser navnet på rapportfilen.
4	Set: Klik for at angive filnavnet på rapporten, der skal genereres.
5	Generate all images in black and white: Markér afkrydsningsfeltet for at udskrive i sort/hvid.
6	Output Format: Word, HTML, PDF eller CSV. PDF er den mest sikre metode til udskrivning, da rapporten ikke kan redigeres.
7	Create an individual report for each sample (Recommended for large reports)
8	Klik på OK for at udskrive rapporten.
9	Klik på Cancel for at lukke dialogboksen uden at oprette en rapport.

- Vælg en skabelon på listen over rapportskabeloner. Rapportskabelonerne gemmes på følgende steder:

- I Windows 7 og 10: C:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

Se [Rapportskabeloner på side 130](#) for at få en beskrivelse af skabelonerne.

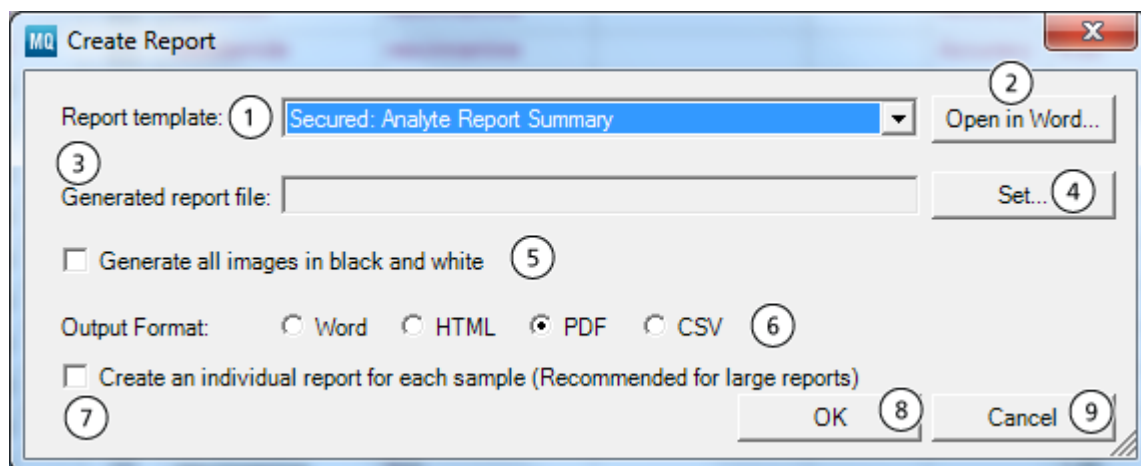
- Klik på **Set** for at oprette navn og placering for rapporten.
- Klik på **OK** for at generere rapporten.

Oprettelse af brugerdefinerede rapportskabeloner

De kontrollerede måder at udskrive data fra softwaren er eksport af **Results Tables**, overførsel til LIMS og rapportering. De andre kilder til udskrivning af data, f.eks. kopiering og indsætning fra **Results Tables**, er ikke kontrollerede. Brugere bør ikke bruge disse ukontrollerede outputmetoder til lovgivningsmæssige formål.

- Åbn eller opret en **Results Table**.
- Klik på **File > Create Report and Save Results Table**.

Figur C-2: Dialogboksen Create Report



Element	Beskrivelse
1	Report template: Vælg en skabelon på listen.
2	Open in Word: Klik for at åbne den angivne rapportskabelon direkte i Microsoft Word for at kontrollere eller redigere den.
3	Generated report file: Viser navnet på rapportfilen.
4	Set: Klik for at angive filnavnet på rapporten, der skal genereres.
5	Generate all images in black and white: Markér afkrydsningsfeltet for at udskrive i sort/hvid.
6	Output Format: Word, HTML, PDF eller CSV. PDF er den mest sikre metode til udskrivning, da rapporten ikke kan redigeres.
7	Create an individual report for each sample (Recommended for large reports)
8	Klik på OK for at udskrive rapporten.
9	Klik på Cancel for at lukke dialogboksen uden at oprette en rapport.

- Vælg en skabelon på listen **Report template**.
- Klik på **Open in Word**.
Docx-skabelonen åbnes, og Reporter-skabeloneditoren vises til højre. Skabeloneditoren udfyldes automatisk med taginformation.
- Rediger skabelonen efter behov.
- Gem skabelonen.

Rapportskabeloner

Følgende tabel beskriver de tilgængelige skabeloner i <drive>:\ProgramData\AB SCIEX\MultiQuant\Reporter.

Hvis der oprettes en brugerdefineret skabelon, er brugeren ansvarlig for at validere skabelonen. Brugeren kan redigere talformatet i rapportskabeloneditoren. Hvis talformatet ikke er angivet i skabelonen, anvendes formatet i dialogboksen **Results Table Column Settings** i rapporten. Det er brugerens ansvar at validere den brugerdefinerede rapportskabelon.

Nogle rapportskabeloner anvender forespørgsler. Brugerne kan oprette forespørgsler ved hjælp af Microsoft Excel-baserede formler til at evaluere, manipulere og præsentere data fra resultattabellen i en rapport. MetaField-tagget i rapportskabelonen fortæller rapporten navnet på den forespørgselsfil, som skal anvendes. For at anvende forespørgsler skal navnet på forespørgselsfilen angives i MetaField-tagget i rapportskabelonen. Forespørgsler skal også have filtypenavnet ".query" for at blive genkendt som en forespørgsel. Forespørgslerne skal gemmes i Reporter-mappen, hvor rapportskabelonerne er gemt.

Det anbefales, at brugeren validerer de genererede resultater, når der anvendes en Reporter-skabelon, især når der bruges forespørgsler i en skabelon. Hvis der foretages ændringer i rapportskabelonen efter validering, skal rapportskabelonen valideres igen. Ændringer i rapportskabelonen omfatter enhver ændring af Reporter-tags eller forespørgsler.

Tabel C-1: Beskrivelser af rapportskabelon

Skabelon	Beskrivelse
Analyte Report Summary	Sikker rapport, som viser en oversigtstabel for prøver for hver analyt. Denne rapportskabelon egner sig til en resultattabel med definerede grupper.
Calibration Curves Template	Rapport, der viser filoplysninger, statistiktabel (standarder) og kalibreringskurve for analytter, én side pr. analyt.
Metric Plot_IS Area	Sikker rapport, som viser et afsnit med filoplysninger og metrisk plot af IS-topområde for hver intern standard.
Per Analyte Ion Ratio Report	Sikker rapport, som for hver analyt viser et afsnit med filoplysninger, resultattabel, kalibreringskurve for hver analyt og kromatogrammer med IS og hver analyt. Denne tabel egner sig til en resultattabel med definerede grupper.
Per Analyte Report	Sikker rapport, som for hver analyt viser et afsnit med filoplysninger, resultattabel, kalibreringskurve for hver analyt og kromatogrammer med IS og hver analyt. Denne tabel egner sig til en resultattabel uden definerede grupper.
Per Sample Ion Ratio Report	Sikker rapport, som for hver prøve viser et afsnit med filoplysninger, prøveoplysninger, tabel med analytresultater, kalibreringskurver for hver analyt og kromatogrammer med IS og hver analyt. Denne tabel egner sig til en resultattabel med definerede grupper.
Per Sample Report	Sikker rapport, som for hver prøve viser et afsnit med filoplysninger, prøveoplysninger, tabel med analytresultater, kalibreringskurver for hver analyt og kromatogrammer med IS og hver analyt. Denne tabel egner sig til en resultattabel uden definerede grupper.

Tabel C-1: Beskrivelser af rapportskabelon (fortsat)

Skabelon	Beskrivelse
Sample Report Summary	Sikker rapport, som viser en oversigtstabel for analytter for hver prøve. Denne rapportskabelon egner sig til en resultattabel med definerede grupper.
Sample Report with Concentration Threshold.docx	Rapport, som viser filoplysninger, prøveoplysninger og oversigtstabel med resultater for hver ukendt prøve. Oversigtstabellen for resultater indeholder analytspecifikke koncentrationstærskler. Analyser markeres som positive, hvis koncentrationen er over tærsklen. Denne skabelon refererer til filen Sample Report With Concentration Threshold.query. Brugeren kan redigere forespørgselsfilen for at angive analytnavne, analytgrupper (f.eks. forbindelsesklasse) og analytkoncentrationstærskler.

Rapportskabelontags

Tabel C-2: Rapportskabelontags

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
Tags fra Analyst [®] MD-softwarens dataleverandørskema		
Analyte	ForEach	Danner løkke over alle analytterne i den rækkefølge, de er defineret i resultattabellen.
AnalyteGroup	ForEach	Danner kun løkke over de forskellige analytgrupper. TextField- eller PictureField-tags henter værdier for kvantificeringen. Hvis tags af denne type indeholder en yderligere For_Each-tag, som angiver attributten Ratiolons, er den indvendige løkke kun for kvalifikationer, som er en del af den aktuelle gruppe.
InternStandard	ForEach	Danner løkke over alle interne standarder.
QCStatistics	ForEach	Danner løkke over al kvalitetskontrolstatistik
Ratiolons	ForEach	Se AnalyteGroup.
Sample	ForEach	Danner løkke over hver af de enkelte prøver. Denne bruges f.eks. i forbindelse med en konfiguration af TextField-tag til indsættelse af prøvenavnet.

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
Statistics	ForEach	Danner løkke over al statistik for standarder.
MQ_Group	ForEach	Danner løkke over de forskellige grupper, herunder IS-grupper eller undergrupper. TextField- eller PictureField-tags henter værdier for kvantificeringen. Hvis tags af denne type indeholder en yderligere For_Each-tag, som angiver attributten Ratiolons, er den indvendige løkke kun for kvalifikationer, som er en del af den aktuelle gruppe.
MQ_AnalyteRatiolons	ForEach	Se MQ_Group for analytkvalifikator alene.
MQ_ISRatiolons	ForEach	Se MQ_Group for IS-kvalifikator alene.
AnalyteRatio	PictureField	Viser overlejringerne af kromatogrammer for kvantifikator og kvalifikator for analytundergruppen. Viser den ubrudte linje i midten for at angive det forventede ionforhold. Den midterste linje = tophøjden af kvantifikatoren x forventet ionforhold. Viser de nedre og øvre grænser for det acceptable ionforholdsområde med stiplede linjer. Nedre grænse = Tophøjde af kvantifikator x forventet ionforhold x ((100-tolerance)/100). Øvre grænse = Tophøjde af kvantifikator x forventet ionforhold x ((100+tolerance)/100).
AnalyteRatioNoLines	PictureField	Viser overlejringerne af kromatogrammer for kvantifikator og kvalifikator for analytundergruppen uden linjerne.
Calibration	PictureField	Viser kalibreringskurven for analytten.

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
IS_AnalyteRatio	PictureField	Viser overlejringerne af kromatogrammer for kvantifikator og kvalifikator for undergruppen med interne standarder. Viser den ubrudte linje i midten for at angive det forventede ionforhold. Den midterste linje = tophøjden af kvantifikatoren x forventet ionforhold. Viser de øvre og nedre grænser for det acceptable ionforholdsområde med stiplede linjer. Nedre grænse = Tophøjde af kvantifikator x forventet ionforhold x ((100-tolerance)/100) Øvre grænse = Tophøjde af kvantifikator x forventet ionforhold x ((100+tolerance)/100).
IS_AnalyteRatioNoLines	PictureField	Viser overlejringerne af kromatogrammer for kvantifikator og kvalifikator for undergruppen med interne standarder uden linjerne.
IS_PeakReview	PictureField	Viser kromatogrammet for den interne standard.
Overlay_All_XIC	PictureField	Viser overlejringen af kromatogrammerne for alle analytterne i prøven.
Overlay_All_XIC_with_IntStds	PictureField	Viser overlejringen af kromatogrammerne for alle analytterne og de interne standarder i prøven.
Overlay_All_XIC_with_IntStds_NoLegend	PictureField	Viser overlejringen af kromatogrammerne for alle analytterne og de interne standarder i prøven uden forklaringen.
Overlay_All_XIC_NoLegend	PictureField	Viser overlejringen af kromatogrammerne for alle analytterne i prøven uden forklaringen.
PeakReview	PictureField	Viser kromatogrammet for analytten.
TIC	PictureField	Viser TIC for prøven.
Acquisition_Date	TextField	Datoen, hvor prøven blev hentet. Viser "Acquisition Date & Time".

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
Acquisition_Duration_Minutes	TextField	Viser tidsperioden for de data, der er opsamlet for prøven, angivet i minutter.
Acquisition_Method	TextField	Den dataopsamlingsmetode, som blev anvendt til at indhente prøvedata. Viser "Acq. Method Name".
Analyte_AnalyteAnnotation	TextField	Viser "Component Comment".
Analyte_AnalyteCorrelation	TextField	Viser R-regressionsværdien.
Analyte_AnalyteRegression	TextField	Viser regressionsligningen, herunder R-værdi og vægtning.
Analyte_Concentration	TextField	Den faktiske koncentration af analytten, som defineret af brugeren i resultattabellen. Viser "Actual Concentration".
Analyte_Expected_RT	TextField	Den forventede retentionstid for en specifik analyt i minutter. Viser "Expected RT".
Analyte_Integration_Type	TextField	Integrationstypen, som anvendes for specifikke analyttoppe. Toppe kan integreres manuelt eller ved hjælp af de tilgængelige parametre. Viser "Integration Type".
Analyte_IS_Area_Ratio	TextField	Forholdet mellem arealet af analyttoppen og arealet af toppen fra en intern standard-opløsning. Beregnet som analyttopområde//IS-topområde. Viser "Area Ratio".
Analyte_IS_Height_Ratio	TextField	Forholdet mellem højden i antal pr. sekund (cps) af analyttoppen og højden af toppen fra en intern standard-opløsning. Beregnet som analyttophøjden/IS-tophøjden. Viser "Height Ratio".

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
Analyte_Mass_Ranges	TextField	Den brugerdefinerede MRM-overgang for en analyt, defineret i den anvendte dataopsamlingsmetode. Viser "Mass Info".
Analyte_Peak_Area	TextField	Topområdet for en analyt i et kromatogram. Viser "Area".
Analyte_Peak_Height	TextField	Højden af analyttoppen, i tællinger pr. sekund (cps). Viser "Height".
Analyte_Peak_Name	TextField	Det brugerdefinerede navn, der er tildelt til specifikke prøver, når resultattabellen oprettes. Viser "Component Name".
Analyte_Peak_Width	TextField	Bredden af en analyttop i minutter. Viser "Total Width".
Analyte_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	Bredden ved 50 % af tophøjden af en analyttop i minutter. Viser "Width at 50%".
AnalyteQuantPeak_info	TextField	Viser integrationsoplysningerne, herunder algoritme og parametre.
Analyte_QTY	TextField	Analytmængden, beregnet ud fra den analytberegnete koncentration og vægt/volumen-forholdet (f.eks. ng af analyt pr. gram prøve). Viser "Quality".
isCurrentAnalyteQuantifier	TextField	Er den første analyt i gruppen.
Analyte_Processing_Algorithm	TextField	Viser integrationsalgoritmen.

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
Analyte_Retention_Time	TextField	Den faktiske retentionstid for en analyt i et kromatogram, som bruges til at generere en resultattabel. Viser "Retention Time".
Analyte_R_Squared	TextField	Viser R^2 -regressionsværdien.
Analyte_RT_Window	TextField	Tidsintervallet i sekunder, hvori en analyttop forventes at forekomme. Midten af dette område er den forventede retentionstid for analytten. Viser værdien af "RT Half Window" for integrationsparametrene.
Analyte_Signal_To_Noise	TextField	Signal/støj-forholdet for en specifik analyttop. Viser "Signal/Noise".
Analyte_Slope_of_Baseline	TextField	Hældningen af baseline for en analyt, målt i % intensitet/minut. Viser "Slope of Baseline" for analytten.
Analyte_Start_Scan	TextField	Start på scanning af analyt.
Analyte_Start_Time	TextField	Tidspunktet, hvor analyttoppen begynder, i minutter. Viser "Start Time".
Analyte_Stop_Scan	TextField	Slut på scanning af analyt.
Analyte_Stop_Time	TextField	Tidspunktet, hvor analyttoppen slutter, i minutter. Viser "End Time".
Analyte_Unit	TextField	De enheder, der anvendes til at repræsentere koncentrationen for analytter. Standardenheden for resultattabeller er ng/ml. Viser "Conc. Units".

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
Analyte_Use_Record	TextField	Et valgfelt, som bestemmer, om en angivet post skal bruges til efterfølgende analyse, f.eks. kalibreringskurver. Viser "Used".
Analyte_Count	TextField	Viser det samlede antal analytter.
Analyte_Index	TextField	Viser løbenummeret for analytten i prøven, som starter med 0.
Calculated_Accuracy	TextField	Nøjagtigheden for analyttoppen, afledt ved at sammenligne den faktiske analytkoncentration med den beregnede analytkoncentration. Viser "Accuracy".
Calculated_Concentration	TextField	Den beregnede koncentration for analyttoppen, udført af Analyst® MD-softwaren ved hjælp af topområdet. Viser "Calculated Concentration".
Calculated_Relative_Retention_Time	TextField	Retentionstiden for en analyt- eller intern standard-specifik post i en resultattabel. Viser "Relative RT".
IS_Concentration	TextField	Den faktiske koncentration af en intern standard, som defineret af brugeren i resultattabellen. Viser "IS Actual Concentration".
IS_expected_RT	TextField	Den forventede retentionstid for en intern standard-top i minutter. Viser "IS Expected RT".
IS_Integration_Type	TextField	Integrationstypen, som anvendes for specifikke intern standard-toppe. Toppe kan integreres manuelt eller ved hjælp af de tilgængelige parametre. Viser "IS Integration Type".

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
IS_Mass_Ranges	TextField	Den brugerdefinerede MRM-overgang for en intern standard, defineret i den anvendte dataopsamlingsmetode. Viser "IS Mass Info".
IS_Peak_Area	TextField	Topområdet for en intern standard. Viser "IS Area".
IS_Peak_Height	TextField	Højden af den interne standard-top, i tællinger pr. sekund (cps). Viser "IS Height".
IS_Peak_Name	TextField	Det brugerdefinerede navn, der er givet til en specifik intern standard, når resultattabellen oprettes. Viser "IS Name".
IS_Peak_Width	TextField	Bredden af en analyttop i minutter. Viser "IS Total Width".
IS_Peak_Width_at_50%_Height	TextField	Topbredden i minutter for en intern standard-top ved halvdelen af sin højde, i tællinger pr. sekund (cps). Viser "IS Width at 50%".
IS_Retention_Time	TextField	Den faktiske retentionstid for en intern standard. Viser "IS Retention Time".
IS_RT_Window	TextField	Tidsintervallet i sekunder, hvori en intern standard-top forventes at forekomme. Midten af dette interval er den forventede retentionstid for den interne standard. Viser værdien af "RT Half Window" for integrationsparametrene for IS.
ISQuantPeak_Info	TextField	Viser integrationsoplysningerne, herunder algoritme og parametre.

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
IS_Signal_To_Noise	TextField	Signal/støj-forholdet for en intern standard-top. Viser "IS Signal/Noise".
IS_Slope_of_Baseline	TextField	Hældningen af baseline for en intern standard, målt i % intensitet/minut. Viser "Slope of Baseline" for den interne standard.
IS_Start_Scan	TextField	Start på scanning af intern standard.
IS_Start_Time	TextField	Tidspunktet, hvor den interne standard-top begynder, i minutter. Viser "IS Start Time".
IS_Stop_Scan	TextField	Stoptid for den interne standard.
IS_Stop_Time	TextField	Tidspunktet, hvor den interne standard-top slutter, i minutter. Viser "IS End Time".
IS_Units	TextField	De enheder, der anvendes til at repræsentere koncentrationen for interne standarder. Standardenheden for resultattabeller er ng/ml. Viser "Conc. Units" for IS.
MQ_Accuracy_Tolerance_LLOQ	TextField	Viser værdien for Max. Accuracy Tolerance for LLOQ i dialogboksen Outlier Setting for kvantificeringsmetoden.
MQ_Accuracy_Tolerance_STD	TextField	Viser værdien for Max. Accuracy Tolerance for Standards i dialogboksen Outlier Setting for kvantificeringsmetoden.
MQ_Accuracy_Tolerance_QC	TextField	Viser værdien for Max. Accuracy Tolerance for QCs i dialogboksen Outlier Setting for kvantificeringsmetoden.
MQ_Analyte_Group_Name	TextField	Viser navnet på analytgruppen.

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
MQ_Created_With	TextField	Viser navnet på det produkt, som anvendes til at generere rapporten.
MQ_Expected_Ion_Ratio	TextField	Viser "Expected Ion Ratio".
MQ_GROUP_INDEX	TextField	Viser løbenummeret for gruppen i prøven, som starter med 1. Anvendes med ForEach MQ_Group-sløjfen.
MQ_Group_Name	TextField	Viser navnet på gruppen. Anvendes med ForEach MQ_Group-sløjfen.
MQ_Ion_Ratio	TextField	Viser "Ion Ratio".
MQ_IonRatio_Tolerance	TextField	Viser værdien for Max. Ion Ratio Tolerance for analytten i dialogboksen Outlier Setting for kvantificeringsmetoden.
MQ_IS_Group_Name	TextField	Viser navnet på intern standard-gruppen.
MQ_IsRowHidden	TextField	Viser rækken, som er skjult i resultattabellen.
MQ_Lower_Limit_Concentration	TextField	Viser værdien af Lower Limit of Calculated Concentration i dialogboksen Outlier Setting for kvantificeringsmetoden.
MQ_Outlier_Reasons	TextField	Viser "Outlier Reasons".
MQ_Peak_Asymmetry_Factor	TextField	Viser "Asymmetry Factor".
MQ_Peak_BaselineDelta_to_Height	TextField	Viser "Baseline Delta/Height".
MQ_Peak_End_at_10pct	TextField	Viser "End Time at 10%".
MQ_Peak_End_at_5pct	TextField	Viser "End Time at 5%".
MQ_Peak_Points_Across_Baseline	TextField	Viser "Points Across Baseline".
MQ_Peak_Points_Across_Half_Height	TextField	Viser "Points Across Half Height".
MQ_Peak_Start_at_10pct	TextField	Viser "Start Time at 10%".
MQ_Peak_Start_at_5pct	TextField	Viser "Start Time at 5%".
MQ_Peak_Tailing_Factor	TextField	Viser "Tailing Factor".
MQ_Peak_Width_at_10pct	TextField	Viser "Width at 10%".
MQ_Peak_Width_at_5pct	TextField	Viser "Width at 5%".

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
MQ_Quantifier_Mass_Ranges	TextField	Viser "Mass Range" for kvantifikatoren i analytgruppen.
MQ_Quantifier_Peak_Area	TextField	Viser "Area" for kvantifikatoren i analytgruppen.
MQ_Quantifier_Calculated_Concentration	TextField	Viser "Calculated Concentration" for kvantifikatoren i analytgruppen.
MQ_Report_Generation_Date	TextField	Viser datoen for rapportgenereringen, som afspejler kulturindstillingerne fra softwaren.
MQ_Upper_Limit_Concentration	TextField	Viser værdien af Upper Limit of Calculated Concentration i dialogboksen Outlier Setting for kvantificeringsmetoden.
Query_Name	TextField	Navnet på den forespørgsel, der refereres til i rapportskabelonen (hvis relevant).
Record_Modified	TextField	Viser "Modified".
Reporter_Template_Name	TextField	Navnet på den rapportskabelon, som anvendes til at oprette rapporten.
ResultTbl_CreateDate	TextField	Viser den dato, hvor resultattabellen blev oprettet.
ResultTbl_IntegrAlgorithm	TextField	Viser den behandlingsalgoritme, som blev anvendt ved behandling af resultattabellen (f.eks. MQ4, SignalFinder1).
ResultTbl_Name	TextField	Viser filnavnet på resultattabellen.
ResultTbl_ProjName	TextField	Viser det projektnavn, hvori resultattabellen blev gemt.
Sample_Comment	TextField	En kommentar relateret til prøven. Viser "Sample Comment".
Sample_Dilution_Factor	TextField	Det samlede antal enhedsvolumener, hvori prøven opløses. Viser "Dilution Factor".

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
Sample_File_Name	TextField	Navnet på den datafil, hvori de rå data for den specifikke prøve gemmes. Viser "Original Filename".
Sample_ID	TextField	En brugerdefineret værdi for angivelse af specifikke id'er for hver prøve eller analyt i resultattabellen. Viser "Sample ID".
Sample_Index	TextField	Viser "Index".
Sample_Count	TextField	Viser det samlede antal analytter.
Sample_InjectionVolume	TextField	Injektionsvolumen, som anvendes i autosampleren, når den oprindelige prøve blev injiceret, som defineret i dataopsamlingsmetoden. Viser "Injection Volume".
Sample_Instrument	TextField	Viser den instrumenttype, som blev brugt til at indhente prøven, som blev udtrukket fra wiff-filen.
Sample_InstrumentSerialNumber	TextField	Viser serienummeret på det instrument, som blev brugt til at indhente prøven, som blev udtrukket fra wiff-filen.
Sample_Name	TextField	Det brugerdefinerede navn, som blev tildelt til den specifikke prøve, da resultattabellen blev oprettet. Viser "Sample Name".
Sample_Operator	TextField	Den bruger, som var logget på på dataopsamlingstidspunktet. Viser "Operator Name".
Sample_Plate_Number	TextField	Placeringen af prøvepladen i autosampleren, som blev anvendt ved opsamlingen af prøverne. Viser "Plate Number".

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
Sample_Rack_Number	TextField	Placeringen af prøveracket i autosampleren, som blev anvendt ved opsamlingen af prøverne. Viser "Rack Number".
Sample_Type	TextField	Den brugerdefinerede værdi angiver, fra hvilken prøvetype hver specifikke injektion stammer. F.eks. Blank, Standard osv. Viser "Sample Type".
Sample_Vial_Position	TextField	Hætteglaspositionen, som er defineret i den dataopsamlingsbatch, der anvendes i autosampleren til at bestemme, hvilket hætteglas der indeholder prøven. Viser "Vial Number".
Sample_File_Full_Name	TextField	Viser filnavnet med hele stien.
Sample_Index_In_Wiff	TextField	Viser løbenummeret på prøven i wiff-filen, som starter med 0.
Sta_Accuracy	TextField	Nøjagtigheden for analyttoppen, som bestemmes ved at sammenligne den faktiske analytkoncentration med den beregnede analytkoncentration. Viser "Accuracy".
Sta_CV	TextField	Viser den betingede variansprocent, som dikterer, hvor meget en beregnet koncentration sværdi afviger i procent fra middeldkoncentrationsværdien. Beregnes ved at tage standardafvigelsen/ middelværdien.
Sta_ExpectedConcent	TextField	Den forventede koncentration for en analyt, som er beregnet af Analyst [®] MD-softwaren ved hjælp af topområdet. Viser "Actual Concentration".

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
Sta_Mean	TextField	Viser middelværdien (gennemsnittet) for de beregnede koncentrationer, som er beregnet af Analyst [®] MD-softwaren.
Sta_NumVal	TextField	Viser antallet af værdier, som danner statistikken. Antallet af prøver, som tages i betragtning, når der beregnes et gennemsnit.
Sta_QCAccuracy	TextField	Nøjagtigheden bestemmes ved at sammenligne den forventede koncentration med den faktiske koncentration for en kvalitetskontrolprøve som defineret af brugeren i prøvetypekolonnen. Viser "Accuracy".
Sta_QCCV	TextField	Viser den betingede variansprocent, som dikterer, hvor meget en beregnet koncentrationsværdi afviger i procent fra middelkoncentrationsværdien. Beregnes ved at tage standardafvigelsen/ middelværdien. Anvendes på en kvalitetskontrolprøve.
Sta_QCExpectedConcent	TextField	Den forventede koncentration for en kvalitetskontrolprøve som defineret af brugeren. Viser "Actual Concentration" for kvalitetskontrolprøven.
Sta_QCMean	TextField	Viser middelværdien (gennemsnittet) for de beregnede koncentrationer, som er beregnet af Analyst [®] MD-softwaren for en kvalitetskontrolprøve.
Sta_QCNumVal	TextField	Viser antallet af værdier, som tages i betragtning for en kvalitetskontrolprøves koncentrationsmiddelværdi, når der beregnes et gennemsnit.
Sta_QCStdDev	TextField	Viser standardafvigelsen for koncentrationsværdierne for hver prøve. Standardafvigelsen repræsenterer et mål for, hvor meget et sæt værdier spreder sig fra middelværdien.

Tabel C-2: Rapportskabelontags (fortsat)

Type	Felttype	Beskrivelse af tag
Sta_StdDev	TextField	Viser standardafvigelsen for en standardprøve. Standardafvigelsen repræsenterer et mål for, hvor meget et sæt værdier spredt sig fra middelværdien.
CUSTOM	TextField	Viser værdien af resultattabellens brugerdefinerede kolonner.

Beregning af relativ støj og signal/støj-forhold

D

Ved kvantitativ databehandling af massespektrometri er det vigtigt at afgøre, om en given top er signifikant eller ej, hvor "signifikant" typisk betyder "overstiger dette signal baggrundsstøjen?".

Normalt sammenlignes tophøjden med baggrundsstøj, der er målt i et topbelastningsfrit område, hvor støjen typisk estimeres som enten én eller tre gange standardafvigelsen for datapunkterne i dette område. Denne fremgangsmåde er ikke ideel af følgende grunde:

- Det er subjektivt, da støjområdet vælges manuelt.
- Et baggrundsområde uden en top findes måske ikke, eller området kan være for smalt til et nøjagtigt skøn af støjen.
- Støjen ved toppositionen kan være helt forskellig fra støjen i det valgte støjområde.
- Faktoren "én eller tre" er også subjektiv, og forskellige myndigheder har forskellige anbefalinger.
- Den tilsyneladende støj kan ændres, hvis dataene er blevet forbehandlet. For eksempel udglattet eller tærskelangivet.

Ved at anvende begrebet relativ støj (R_n) er det nemt at udvikle en enkel metode til beregning af den forventede støj på et hvilket som helst punkt i dataene til sammenligning med det målte signal. Dette er en robust, objektiv metrik, der kan bruges til at beregne signal/støj-forhold (S/N) og til at evaluere og sammenligne ydelsen af instrument og analyse. Der er mange anvendelser af det relative støjbegreb, hvoraf den ene er beregningen af signal/støj-forhold.

Den grundlæggende algoritme fungerer som følger:

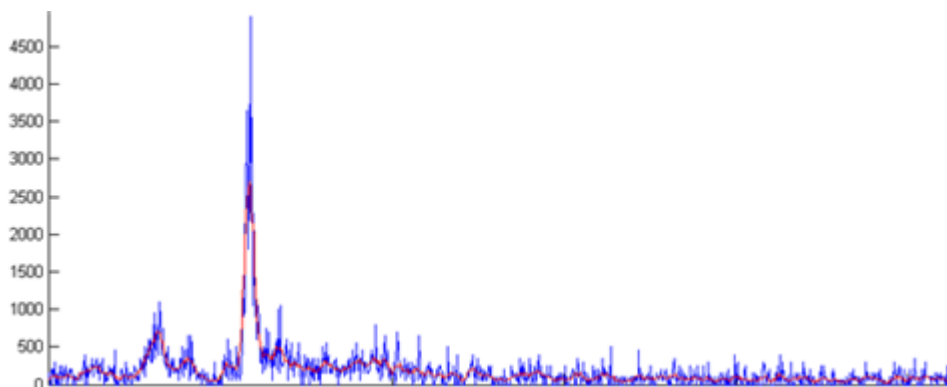
1. Udtænk en støjmodel, der vil give brugeren mulighed for at beregne den forventede støj på et hvilket som helst punkt i dataposten, under hensyntagen til niveauet af det underliggende signal på det pågældende punkt.

Støjmodellen kan bestemmes ud fra teoretiske overvejelser eller kan modelleres ud fra reelle målinger for et bestemt system. I forbindelse med pulstællende detektorer er standardafvigelsen for et signal, og dermed den forventede støj, proportional med kvadratroden af signalet og varierer derfor med signalet. I andre systemer vil der være en konstant "hvid støj"-komponent, der eventuelt er kombineret med en intensitetsafhængig komponent.

2. Anslå det underliggende signal ud fra det målte signal.

Dette kan gøres på mange måder, men det letteste er at generere en udjævnet version af dataene, som vist i [Figur D-1](#).

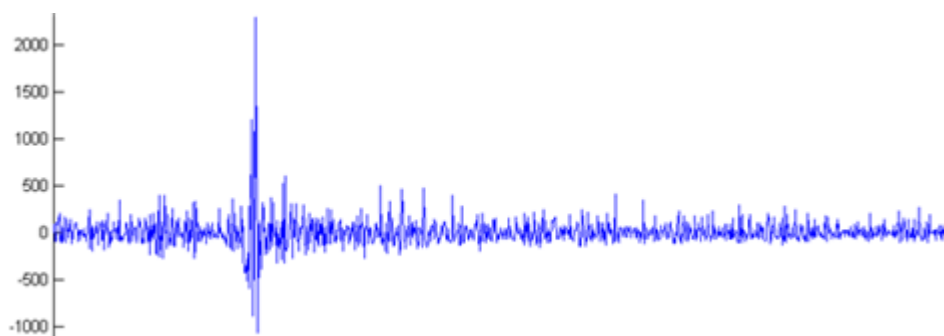
Figur D-1: Overlejring af rå og udjævnede data



3. Mål den faktiske støj på tværs af dataene ved hjælp af alle punkter (toppe og baggrund).

Dette gøres ved at fratrække den underliggende signalvurdering ud fra det målte signal på hvert punkt i dataene, hvor det udjævnede signal er blevet fratrasket det oprindelige. Dette kaldes deltastøjen. Området for deltastøjen er rimeligt konstant, undtagen hvor der er store toppe, fordi støjen er afhængig af signalet og derfor større, hvor signalet er større. Se [Figur D-2](#).

Figur D-2: Plot af deltastøjværdierne for hvert datapunkt

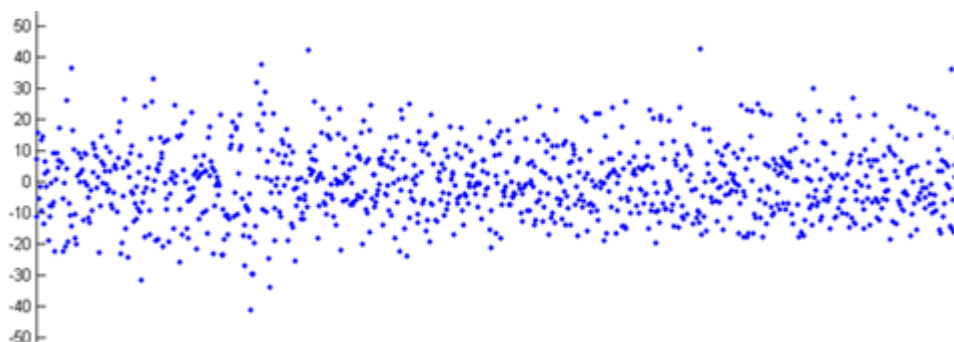


4. Ved hvert datapunkt beregnes forholdet mellem den målte støj og den forventede støj.

Det vil sige, at vi ved hvert datapunkt dividerer den støj, vi målte i trin 3, med den værdi, som vores støjmodel forudsiger (i dette tilfælde kvadratroden af intensiteten). Hvis støjmodellen er god, genereres en række værdier, der for det meste forbliver afgrænset af nogle grænser, som vist [Figur D-3](#). I [Figur D-3](#) vises også plottet af

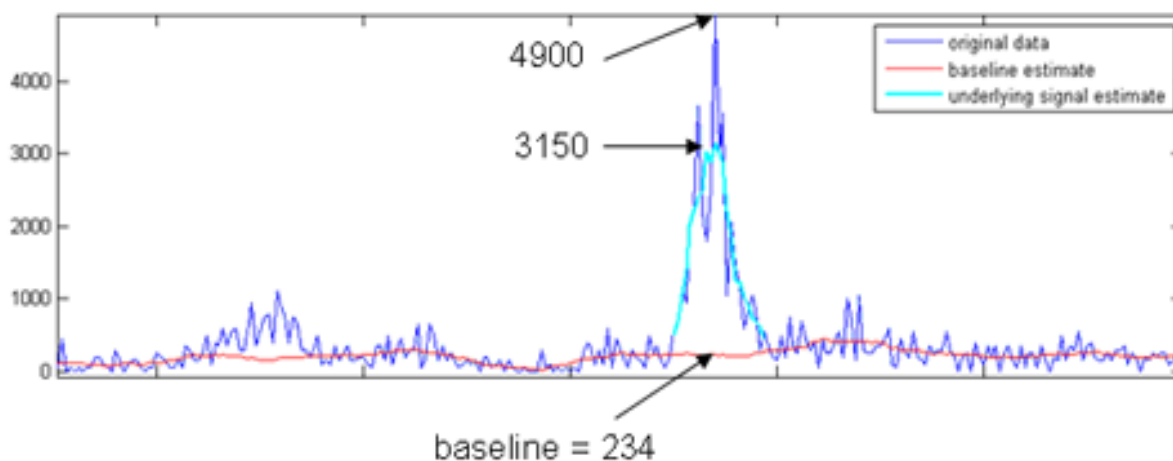
$$\Delta noise / \sqrt{intensity}$$

Bemærk: Dette reducerer den store variation i deltastøjen og resulterer i et velafgrænset sæt af værdier.

Figur D-3: Støjmodel

5. Beregn standardafvigelsen for forholdsværdierne. Dette er R_n , et skøn over den mest sandsynlige sammenhæng mellem den faktiske deltastøj og den, der forudsiges af modellen. I [Figur D-3](#) resulterer dette i en værdi på 9,5.

I [Figur D-4](#) vises et eksempel på, hvordan relativ støj kan bruges til at beregne signal/støj-forhold.

Figur D-4: Overlejring af rådata, underliggende signalestimer og baselineestimer

Som tidligere beskrevet:

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

i dette specifikke eksempel:

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

Hvis spidsen af toppen bruges som signal, giver det et signal/støj-forhold på 34 (4900/145), og hvis højden af det udjævnede signal anvendes, giver det et signal/støj-forhold på 22 (3150/145).

Beregning af relativ støj og signal/støj-forhold

Når signal/støj-forhold rapporteres, anvendes den procedure, der er beskrevet her, i MQ4-integrationsalgoritmen og topspids som signal. Fordi SignalFinder™-integrationsalgoritmen tilpasser en model til toppen, bruger den højden af den tilpassede profil. Dette resulterer i et mindre rapporteret signal/støj-forhold. Det er dog en mere nøjagtig værdi, fordi den er mindre påvirket af mulige støjspidser. SignalFinder-integrationsalgoritmen har også en mere avanceret metode til vurdering af baseline. Af disse to årsager vil de signal/støj-forholdsværdier, der rapporteres af de to algoritmer, ikke være identiske, selvom de normalt vil være ens.

Sammenfattende har metoden til beregning af signal/støj-forhold for relativ støj følgende fordele til sammenligning med den sædvanlige metode til vurdering af støjen som standardafvigelsen for et baggrundsområde:

- Det er langt mindre subjektivt, fordi det ikke er nødvendigt at vælge et baggrundsområde manuelt.
- Et nøjagtig signal/støj-forhold kan forudsiges, selvom der ikke findes nogen områder uden top i kromatogrammet.
- Baselinen og derfor støjen vurderes i nærheden af toppen af interesse. Dette kan gøre en stor forskel for den rapporterede værdi for signal/støj-forhold, fordi det baggrundsområde, der er valgt til den normale metode, muligvis kunne være mere støjsvag end baggrunden i nærheden af toppen. Som tidligere beskrevet kan det signal/støj-forhold, der beregnes ved hjælp af metoden **Relative Noise**, give mindre værdier end den sædvanlige metode. De er dog mere nøjagtige og nyttige værdier. Se [Figur D-4](#).

Se [Rediger de kolonner, der vises i resultattabellen på side 86](#) for at få oplysninger om at gøre kolonnen **Signal / Noise** synlig i **Results Table**.










Bemærkning om signal/støj ved brug af SignalFinder-integrationsalgoritmen

Eftersom SignalFinder™-integrationsalgoritmen beregner signal/støj-forholdet mere præcist (og derfor mere præcist forudsiger CV'er), hvis 1-sigma signal/støj-tilgangen anvendes, skal du overveje at sænke den mindste acceptable signal/støj-værdi på alle standardoperationsprocedurer (SOP'er) med udgangspunkt i empiriske data fra laboratoriet.




Kun én rude er aktiv ad gangen. Aktive ruder har en orange kant, og brugeren kan aktivere en rude ved at klikke et vilkårligt sted i den. Mange menukommandoer fungerer i den aktive rude.

Værktøjslinjeikonerne, der er beskrevet i dette afsnit, vises på den rudespecifikke værktøjslinje for alle rudetyper. Der findes også yderligere ikoner, som er specifikke for hver rudetype.








Tabel E-1: Ikoner på værktøjslinjen

Ikon	Navn	Beskrivelse
	New Results Table	Åbner New Results Table wizard .
	Open	Åbner en Results Table .
	Save	Gemmer alle åbne filer.
	Select Analyst Project	Vælger en projektmappe.
	Screen Lock	Låser skærmen. Denne funktion er kun tilgængelig, når Analyst® MD-softwaren er i blandet tilstand, og skærmlåsfunktionen er aktiveret.
	Show Internal Standard with Analyte	Viser rækkerne i Results Table for både den aktuelt valgte analyt og den tilsvarende interne standard. Når denne indstilling er valgt, kan brugeren klikke på et analytnavn og få det vist med den interne standard. Dette svarer til at klikke på analytten og derefter klikke på den interne standard, mens der trykkes på Ctrl (så begge vælges).
	Find Component or Group	Markerer de punkter på listen, der matcher den angivne tekst.
	Arranging Panes	Ændrer rudernes relative positioner. Klik på ikonet i en rude, og træk det derefter til den øverste, nederste, venstre eller højre del af en anden rude. Afhængigt af hvor markøren slippes, ændrer den første rude position i forhold til den anden. Når markøren trækkes, fremhæves den ene side af den anden rude med rødt for at angive, hvortil den første rude trækkes.
	Delete Pane	Sletter ruden. Hvis en Results Table slettes, slettes også andre relaterede ruder (Peak Review og Calibration), og hele vinduet lukkes.




Tabel E-1: Ikoner på værktøjslinjen (fortsat)

Ikon	Navn	Beskrivelse
	Toggles tab mode	<p>Maksimerer ruden, så den fylder hele vinduet (eller omvendt). Dette er nyttigt, hvis der er flere ruder i vinduet, så brugeren midlertidigt kan fokusere på én.</p> <p>I zoomet tilstand vises en separat fane øverst i vinduet for hver rude. Skift mellem ruder ved at klikke på den relevante fane. Fra zoomet tilstand kan du vende tilbage til den oprindelige visning af alle ruder ved at klikke på Zoom Pane igen. Klik på ikonet for at skifte mellem de to tilstande.</p>
	Hide Pane	Skjuler ruden, så de andre ruder i vinduet udfylder den tilgængelige plads.
	Show Hidden Panes	Viser alle ruder der tidligere har været skjult.

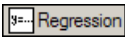
Tabel E-2: Ikoner på værktøjslinjen Peak Review

Ikon	Navn	Beskrivelse
	Display Previous Page	Viser forrige sæt af kromatogrammer. Dette svarer til at trykke på pil op eller pil venstre eller klikke på den øverste pil i rullepanelet.
	Display Next Page	Viser næste sæt af kromatogrammer. Dette svarer til at trykke på pil ned eller pil højre eller klikke på den nederste pil i rullepanelet.
	Display Previous Sample	Ruller baglæns i ruden Peak Review . Dette svarer til at klikke på pil op i rullepanelet, indtil den første prøve, der er forskellig fra det første aktuelt synlige kromatogram, vises.
	Display Next Sample	Ruller til næste prøve.
	Starts Slide Show Peak Review mode	Starter diasshowet. Ved første visning åbnes dialogboksen Slide Show Options . Indstil forsinkelsestiden i sekunder mellem toppe. Markér afkrydsningsfeltet Only show this dialog again if the shift key is down for at undgå, at dialogboksen åbnes igen. Klik et vilkårligt sted i ruden Peak Review for at stoppe diasshowet.
	Peak Magnifier	Forstørrer den valgte top.
	Peak Demagnifier	Returnerer den forstørrede top til sin oprindelige størrelse.



Tabel E-2: Ikoner på værktøjslinjen Peak Review (fortsat)

Ikon	Navn	Beskrivelse
	Set Peak to 'Not Found'	<p>Klik for at angive, at der ikke er nogen top i det aktive kromatogram. I nogle tilfælde, hvor der faktisk ikke er nogen signifikant top, kan små støjtoppe integreres og rapporteres. Klik på dette ikon for at tilsidesætte denne adfærd. Topområdet vises i Results Table som N/A.</p> <p>Når brugeren har markeret toppen som Not Found, er parametrene for topsøgning til venstre for ruden ikke tilgængelige for kromatogrammet, da de ikke anvendes. Klik på ikonet igen for at vende tilbage til automatisk tilstand.</p>
	Enable Manual Integration Mode	<p>Klik for at aktivere manuel integrationstilstand. Når softwaren er i manuel integrationstilstand, skal du trække i et kromatogramplot for at angive det præcise område, der skal integreres. Integrationen starter fra det punkt (tidspunkt, intensitet), hvor der klikkes med markøren første gang, og fortsætter til det punkt, hvor markøren slippes. Klik på ikonet igen for at afslutte manuel integrationstilstand.</p> <p>Når brugeren har integreret toppen manuelt, er parametrene for topsøgning til venstre for ruden ikke tilgængelige for kromatogrammet, da de ikke anvendes. Klik på ikonet igen for at vende tilbage til automatisk tilstand.</p>
	Recalculate Peak Model	Genberegner topmodellen ved hjælp af det aktive kromatogram og anvender den på det pågældende kromatogram (kun SignalFinder™-integrationsalgoritmen).


Tabel E-3: Ikoner på værktøjslinjen Calibration

Ikon	Navn	Beskrivelse
	Edit Regression and Weighting	<p>Bruges til at ændre kalibreringsparametrene. Dette omfatter både den faktiske parameter, der anvendes til regressionen (område eller højde), samt regressionstypen og vægtningen. Se Regressionsligninger på side 123.</p>






Tabel E-4: Ikoner på værktøjslinjen Statistics

Ikon	Navn	Beskrivelse
	Remove Trailing Index from Sample Name	<p>Statistics Table kan arrangeres, så prøverne (for en given analyt) grupperes efter faktisk koncentration eller prøvens navn. Når der grupperes efter prøvenavn, bestemmer indstillingen Remove Trailing Index from Sample Name, om prøvenavne skal matche nøjagtigt for at blive grupperet, eller om et efterfølgende numerisk indeks efter en tankestreg (-) skal fjernes. For eksempel ville to prøver med navnene Prøve 1 - 001 og Prøve 1 - 002 blive grupperet sammen, hvis denne indstilling blev valgt, men ellers ikke.</p>
	Sample Grouping	<p>Elementerne på denne liste angiver, hvordan prøven for en given analyt skal grupperes med henblik på beregning af statistikken. Følgende valgmuligheder er tilgængelige:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Group by Concentration for Standards: Standard-prøver grupperes efter faktisk koncentration. • Group by Concentration for QCs: Quality Control-prøver grupperes efter faktisk koncentration. • Group by Sample Name for Standards: Replikerede Standard-prøver grupperes efter feltet Sample Name. Som beskrevet tidligere skal prøvenavnene matche præcist, hvis indstillingen Remove Trailing Index from Sample Name ikke anvendes. Ellers kan navnene afvige med et efterfølgende nummer (efter en tankestreg). • Group by Sample Name for QCs: Samme som foregående indstilling, bortset fra at der kun anvendes Quality Control-prøver. • Group by Sample Name for All Samples: Samme som foregående indstilling, bortset fra at alle prøver anvendes.




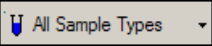



Tabel E-4: Ikoner på værktøjslinjen Statistics (fortsat)

Ikon	Navn	Beskrivelse
	Metric	<p>Elementerne på denne liste angiver den faktiske metrik, som anvendes ved beregningen af statistikken. Følgende valgmuligheder er tilgængelige:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Calculated Concentration: Feltet Calculated Concentration i Results Table anvendes. • Area: Feltet Area i Results Table anvendes. • Height: Feltet Height i Results Table anvendes. • Calibration Y-Value: Regressionsparameteren, der er angivet for analytten, anvendes. Dette er enten Area eller Height for en analyt, som ikke har en tilsvarende intern standard, eller Area Ratio eller Height Ratio for en analyt, der anvender en intern standard.




Tabel E-5: Ikoner på værktøjslinjen Results Table

Ikon	Værtøjstip	Beskrivelse
	Displays the peak review	Viser ruden Peak Review , så kvaliteten af topintegrationerne kan kontrolleres og om nødvendigt ændres.
	Displays the side by side sample review	Viser to prøvelister, så brugerene kan vælge op til seks prøver for at sammenligne topresponserne mellem prøverne.
	Displays the calibration curve	Viser kalibreringskurven (dette er kun relevant, hvis der anvendes Standard -prøver med kendt koncentration). Fra denne rude kan brugeren gennemgå kalibreringen og justere regressionstypen og vægtingen.
	Creates a metric plot	Viser et metrisk plot for den eller de aktuelt valgte kolonner. Disse plot kan være meget nyttige til at finde udsving. Menuen umiddelbart til højre for knappen viser eventuelle gemte plotindstillinger.
	Displays the statistics pane	Viser ruden Statistics . Denne tabel viser den gennemsnitlige beregnede koncentration, standardafvigelsen og CV for hvert koncentrationsniveau.

Tabel E-5: Ikoner på værktøjslinjen Results Table (fortsat)

Ikon	Værtøjstip	Beskrivelse
	Sort selected column from smallest to largest	Sorterer Results Table , så værdierne i den valgte kolonne vises i stigende rækkefølge. Dette ikon er kun tilgængeligt, når der er klikket på kolonneoverskriften.
	Sort selected column from largest to smallest	Sorterer Results Table , så værdierne i den valgte kolonne vises i faldende rækkefølge. Dette ikon er kun tilgængeligt, når der er klikket på kolonneoverskriften.
	Removes any previous sorting	Hvis tabellen er blevet sorteret, vender Results Table tilbage til standardrækkefølgen.
	Shows only the selected sample type(s)	Filtrerer Results Table , så der kun vises prøver af en bestemt type. Dette er kun nyttigt, hvis der er Standard -prøver med kendt koncentration, og ikke alle prøver er Unknowns .
	Hide selected row(s)	<p>Skjuler de valgte rækker i Results Table. Vælg de rækker, der skal skjules, og klik derefter på ikonet.</p> <p>Da ruden Peak Review synkroniseres med Results Table, bliver gennemgangen hurtigere, når rækker for toppe, som ikke skal gennemgås, skjules. Brugeren kan f.eks. sortere tabellen i kolonnen Quality og skjule alle rækker med en kvalitet, der er større end en bestemt værdi (f.eks. 0,8). Tabellen kan derefter sorteres efter kolonnen Region Height og alle rækker med en lav værdi skjult (for at skjule rækker, hvor toppen helt sikkert ikke er til stede). Resultatet er, at der kun vises toppe med lav kvalitet, men hvor en top faktisk er til stede. Brugeren kan derefter gennemgå disse synlige rækker i ruden Peak Review på mindre tid, end det ville tage at gennemgå alle mulige toppe.</p>
	Show previously hidden row(s)	Viser alle rækker. De viste rækker kan fortsat være begrænset af Sample Type Filter og valget Components & Groups List .
	Show only outliers	Viser de rækker, der indeholder udsving.

Tabel E-5: Ikoner på værktøjslinjen Results Table (fortsat)

Ikon	Værtøjstip	Beskrivelse
	Go to next outlier	Går frem til det næste udsving i Results Table .
	Lock and Save	Låser Results Table , når den er blevet gemt. Ændringer i Results Table gemmes ikke, medmindre filen er låst op.
	Review and Save	Klik for at gemme Results Table , når den er blevet gennemgået. Ikonet er ikke tilgængeligt, hvis Results Table er skrivebeskyttet.

Adgang til MultiQuant™ MD-softwaren

F

Bemærk: Når MultiQuant™ MD-softwaren fjernes, forbliver MultiQuant™ MD-softwarens sikkerhedselementer i Analyst® MD-softwaren. Sikkerhedstilladelser findes på fanen **Roles** i dialogboksen **Security Configuration**.

Forudindstillet adgang	Beskrivelse
Create session file	Giver brugerne mulighed for at oprette en Results Table .
Create quantitation method	Giver brugerne mulighed for at oprette kvantificeringsmetoder.
Modify quantitation method files	Giver brugerne mulighed for at ændre kvantificeringsmetoderne, der findes i mappen Quantitation Methods i mappen Analyst Data .
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Giver brugerne mulighed for at eksportere eller oprette rapporter for ulåste Results Tables .
Replace existing Results Table when saved	Giver brugerne mulighed for at opdatere eksisterende Results Tables , men giver dem ikke mulighed for at oprette en ny Results Table ved hjælp af et eksisterende Results Table -navn. Hvis der for eksempel oprettes en Results Table med navnet RT1, kan brugerne opdatere den, men de kan ikke oprette en ny Results Table med navnet RT1. Brugere kan ikke navngive en Results Table uden navn ved hjælp af et eksisterende Results Table -navn.
Change default quantitation method integration algorithm	Giver brugerne mulighed for at ændre algoritmen i dialogboksen Integration Default . Klik på Edit > Project Integration Defaults .
Change default quantitation method integration parameters	Giver brugerne mulighed for at ændre standardparametre for algoritmen i dialogboksen Integration Default . Edit > Project Integration Defaults .
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Giver brugerne mulighed for at aktivere eller deaktivere det flag, som aktiverer indstillingen Project Modified Peak Warning i menuen Edit .
Allow Project Secure Export Settings	Hvis indstillingen aktiveres, krypteres data i tekstfilen under eksport. Angiv en adgangskode for at aktivere kryptering.
Add samples to Results Table	Giver brugerne mulighed for at tilføje prøver. Klik på Process > Add Samples .
Remove samples from Results Table	Giver brugerne mulighed for at fjerne valgte prøver. Klik på Process > Remove Selected Samples .

Forudindstillet adgang	Beskrivelse
Export, import, or remove External Calibration	Giver brugerne mulighed for at eksportere, importere eller fjerne en ekstern kalibrering ved hjælp af én af følgende indstillinger: <ul style="list-style-type: none"> • Klik på Process > Export Calibration. • Klik på Process > Import External Calibration. • Klik på Process > Remove External Calibration.
Change Audit Map settings	Giver brugerne mulighed for at ændre projektets revisionskort og ændre definitionen for revisionskortet. Klik på Audit Trail > Audit Map Manager .
Modify Sample Name	Giver brugerne mulighed for at ændre prøvenavnet i Results Table .
Modify Sample Type	Giver brugerne mulighed for at ændre prøvetypen (Standard, QC, Unknown) i Results Table .
Modify Sample ID	Giver brugerne mulighed for at ændre prøven ID i Results Table .
Modify Actual Concentration	Giver brugerne mulighed for at ændre den faktiske koncentration af Standard og QC i Results Table .
Modify Dilution Factor	Giver brugerne mulighed for at ændre fortyndingsfaktoren i resultattabellen.
Modify Comment Fields	Giver brugerne mulighed for at ændre kommentarfelder: <ul style="list-style-type: none"> • Component Comment • IS Comment • IS Peak Comment • Peak Comment • Sample Comments
Allow manual integration	Giver brugerne mulighed for at aktivere manuel integrationstilstand i ruden Peak Review . Hvis denne tilladelse aktiveres, skal tilladelsen Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram også aktiveres. Kommandoen Allow manual integration kan deaktiveres, hvis Modify Results Table integration parameters er aktiveret.
Allow set to Peak Not Found	Giver brugerne mulighed for at bruge Set peak to not found . For at udføre denne handling skal du højreklikke i ruden Peak Review .

Forudindstillet adgang	Beskrivelse
Include or exclude a peak from the Results Table	Giver brugerne mulighed for at inkludere eller ekskludere toppe fra Results Tables , Statistics Tables og kalibreringskurver.
Modify regression settings for fit and weight	Giver brugeren mulighed for at ændre regressionsindstillingerne i ruden Calibration Curve, når funktionen Modify Results Table Method anvendes, og når New Quantitation Method wizard anvendes.
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Giver brugeren mulighed for at ændre et enkelt kromatogram.
Modify quantitation method for the Results Table component	Giver brugeren mulighed for at anvende ændringerne fra de enkelte kromatogrammer på komponenten. Brugere skal have denne tilladelse og tilladelsen Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram aktiveret, hvis de ønsker at opdatere og anvende enkelte ændringer på komponenter.
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Giver brugerne mulighed for at oprette og bruge metriske plot i Results Table (knappen Metric Plot er aktiveres) eller eksportere metriske plot. Klik på File > Export .
Set Peak Review Title Format	Giver brugerne mulighed for at ændre Peak Review Title Format in Peak Review . For at udføre denne handling skal du højreklikke i ruden Peak Review .
Add, Rename, or Modify custom column	Giver brugerne mulighed for at tilføje, omdøbe eller ændre en brugerdefineret kolonne. Selv uden denne tilladelse kan brugerne køre forespørgsler, som automatisk opretter brugerdefinerede kolonner. Hvis denne tilladelse aktiveres, skal tilladelsen Remove custom column også aktiveres. Remove custom column kan deaktiveres, hvis tilladelsen Add, Rename, or Modify custom column er aktiveret.
Remove custom column	Giver brugerne mulighed for at slette en brugerdefineret kolonne i Results Table .
Modify Results Table column settings	Giver brugerne mulighed for at ændre kolonneindstillingerne for Results Table i en Results Table .
Save Column Settings as Project Default	Giver brugerne mulighed for at anvende kolonneindstillingerne i projektet.
Lock and save Results Table	Giver brugerne mulighed for at låse og gemme en Results Table .

Forudindstillet adgang	Beskrivelse
Unlock and save Results Table	Giver brugerne mulighed for at låse op for og gemme en Results Table .
Review and save Results Table	Giver brugerne mulighed for at gennemse og gemme Results Table .
Edit Report Template	Giver brugerne mulighed for at redigere rapportskabelonerne.
Transfer to LIMS	Giver brugerne mulighed for at overføre en gemt og låst Results Table til en LIMS. Hændelsen registreres i revisionssporet.

Sikkerhedsindstillinger

Tabel F-1 indeholder de anbefalede sikkerhedsindstillinger for brugerrollerne.

Tabel F-1: Sikkerhedsindstillinger baseret på brugerroller

Sikkerhedsindstilling	Administratør	Tilsynsførende	Analytiker	Anmelder
Create session file	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang
Create quantitation methods	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Modify quantitation method files	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Allow Export and Create Report of unlocked Results Table	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Replace existing Results Table when saved	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Adgang
Change default quantitation method integration algorithm	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Change default quantitation method integration parameters	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Allow Enable Project Modified Peak Warning	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang	Ingen adgang

Tabel F-1: Sikkerhedsindstillinger baseret på brugerroller (fortsat)

Sikkerhedsindstilling	Administratør	Tilsynsførende	Analytiker	Anmelder
Allow Project Secure Export Settings	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Add samples to Results Table	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang
Remove samples from Results Table	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang
Modify Sample Name	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Modify Sample Type	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang
Modify Sample ID	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Modify Actual Concentration	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang
Modify Dilution Factor	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang
Modify Comment Fields	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Allow manual integration	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang
Allow set to Peak Not Found	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang
Include or exclude a peak from the Results Table	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang
Modify regression settings for fit and weight	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Modify Results Table integration parameters for a single chromatogram	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang
Modify quantitation method for the Results Table component	Adgang	Adgang	Adgang	Ingen adgang

Tabel F-1: Sikkerhedsindstillinger baseret på brugerroller (fortsat)

Sikkerhedsindstilling	Administratør	Tilsynsførende	Analytiker	Anmelder
Create, use, or export Metric Plots in Results Tables	Adgang	Adgang	Adgang	Adgang
Set Peak Review Title Format	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Add, Rename, or Modify custom column	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Remove custom column	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Modify Results Table column settings	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Save Column Settings as Project Default	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Lock and save Results Table	Adgang	Adgang	Adgang	Adgang
Unlock and save Results Table	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Review and save Results Table	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Adgang
Modify Report Template	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Transfer to LIMS (Controls Initiate Transfer to Watson LIMS as well)	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Adgang
Export, import, or remove External Calibration	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang
Change Audit Map Setting	Adgang	Adgang	Ingen adgang	Ingen adgang

Revision	Årsag til ændring	Dato
A	Første udgivelse af dokumentet.	September 2013
B	Opdaterede menuafsnittet File. Opdaterede menuafsnittet Audit Trail. Opdaterede kolonnetabellen Results Table. Opdaterede afsnittet Reports.	Januar 2015
C	AB SCIEX-logoet ændret til SCIEX Diagnostics på forsiden. Opdaterede ophavsretsiden og ændrede AB Sciex til SCIEX, hvor det var påkrævet. Tilføjede Windows 10 til kapitlet Introduktion til softwaren. Opdaterede afsnittet Kontakt os. Ændrede emnetitlen Revisionskorthåndtering til Om revisionskort. Opdaterede beskrivelsen af Set Last Component of Group som IS-menupunkt i afsnittet Undermenuen Internal Standards. Erstattede "procentparameter for det samlede areal" med "retentionstid" i afsnittet Dialogboksen Update Retention. Opdaterede beskrivelsen af forventet RT i afsnittet Parametre for SignalFinder-integrationsalgoritme. Tilføjede Windows 10 til afsnittet Opret rapporter. Opdaterede indholdet i afsnittet Rapportskabelontags. Ændrede skærmbilledet i figur 7-3. Nye skabeloner blev anvendt på indholdet, hvilket har ført til redigeringsændringer i indholdet. Fjernede alle referencer til Windows XP.	Juni 2017