

Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition

Concetti e flussi di lavoro



Agilent Technologies

Informazioni legali

© Agilent Technologies, Inc. 2010-2012, 2013

Nessuna parte di questo manuale può essere riprodotta in alcun formato o con alcun mezzo (inclusa l'archiviazione e la scansione elettroniche o la traduzione in una lingua straniera) senza previo consenso scritto di Agilent Technologies, Inc. secondo le disposizioni di legge sul diritto d'autore degli Stati Uniti, internazionali e locali applicabili.

Codice del manuale

M8301-94014

Edizione

01/2013

Stampato in Germania

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

Questo prodotto può essere utilizzato come componente di un dispositivo diagnostico in vitro qualora sia stato registrato presso le autorità competenti e sia conforme alle disposizioni di legge vigenti. In caso contrario è destinato esclusivamente ad usi generici di laboratorio.

Versione software

La presente guida è valida per la versione C.01.05 di Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition.

Microsoft® è un marchio registrato di Microsoft Corporation negli Stati Uniti.

Garanzia

Le informazioni contenute in questo documento sono fornite allo stato corrente e sono soggette a modifiche senza preavviso nelle edizioni future. Agilent non rilascia alcuna altra garanzia, esplicita o implicita, comprese le garanzie implicite di commerciabilità ed idoneità ad uno specifico, relativamente al presente manuale e alle informazioni in esso contenute. Salvo il caso di dolo o colpa grave, Agilent non sarà responsabile di errori o danni diretti o indiretti relativi alla fornitura o all'uso di questo documento o delle informazioni in esso contenute. In caso di separato accordo scritto tra Agilent e l'utente con diverse condizioni di garanzia relativamente al contenuto di questo documento in conflitto con le condizioni qui riportate prevarranno le condizioni dell'accordo separato.

Licenze tecnologia

I componenti hardware e o software descritti in questo documento vengono forniti con licenza e possono essere utilizzati o copiati solo in conformità ai termini di tale licenza.

Indicazioni di sicurezza

AVVERTENZA

L'indicazione **AVVERTENZA** segnala un rischio. Richiama l'attenzione su una procedura operativa o analoga operazione che, se non eseguita correttamente o non rispettata, può provocare danni al prodotto o la perdita di dati importanti. Non eseguite mai alcuna operazione ignorando l'**AVVERTENZA**, fatelo solo dopo aver compreso e applicato completamente le indicazioni di Agilent.

ATTENZIONE

L'indicazione **ATTENZIONE** segnala un rischio serio. Richiama l'attenzione su una procedura operativa o analoga operazione che, se non eseguita correttamente o non rispettata, può provocare lesioni personali o morte. Non eseguite mai alcuna operazione ignorando l'indicazione **ATTENZIONE**, fatelo solo dopo aver compreso e applicato completamente le indicazioni di Agilent.

In questo manuale...

Nel presente manuale sono descritti i concetti relativi ad Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition. Nel seguito il termine ChemStation si riferisce sempre ad Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition.

Nel presente manuale viene descritto come utilizzare al meglio le funzioni di acquisizione e analisi dei dati e stesura di report in OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.05 per incrementare la produttività del proprio laboratorio.

1 Concetti di base di OpenLAB CDS ChemStation Edition

Questo capitolo spiega i principi del lavoro con ChemStation, inclusi il controllo remoto, l'interfaccia utente grafica e le viste di ChemStation.

2 Utilizzo dei metodi

Il metodo è una parte vitale dell'applicazione ChemStation e questo capitolo ne spiega in dettaglio i concetti.

3 Acquisizione dei dati

Questo capitolo contiene un'introduzione al processo di acquisizione dei dati.

4 Automazione/Sequenze

Questo capitolo descrive i concetti legati all'automazione. In particolare, spiega come usare le sequenze con la ChemStation, cosa accade quando si esegue una sequenza e come personalizzare le sequenze.

5 Run Queue e Queue Planner

Nel presente capitolo sono spiegati i concetti Run Queue e Queue Planner. Viene descritto come aggiungere singoli campioni e sequenze e come mettere in pausa Run Queue.

6 Concetti relativi ad analisi e revisione dei dati

Questo capitolo descrive le opzioni di analisi e revisione dei dati. In OpenLAB CDS ChemStation Edition, queste opzioni sono disponibili in due viste separate.

7 Calibrazione

Questo capitolo descrive i concetti relativi alla calibrazione.

8 Report

Questo capitolo descrive i concetti di Intelligent Reporting e di Classic Reporting.

9 Concetti e funzioni specifici per CE

Questo capitolo è pertinente solo se si utilizza ChemStation per controllare gli strumenti CE.

Sommarior

1 Concetti di base di OpenLAB CDS ChemStation Edition 7

- Termini e abbreviazioni 8
- Introduzione 9
- Controllo remoto degli strumenti 10
- Informazioni sul software ChemStation 13
- Struttura di dati della ChemStation 34

2 Utilizzo dei metodi 39

- Che cos'è un metodo? 41
- Parti di un metodo 42
- Tipi di metodi 44
- Creazione di metodi 46
- Modifica dei metodi 47
- Amministrazione dei metodi 51
- Che cosa accade quando si esegue un metodo? 59

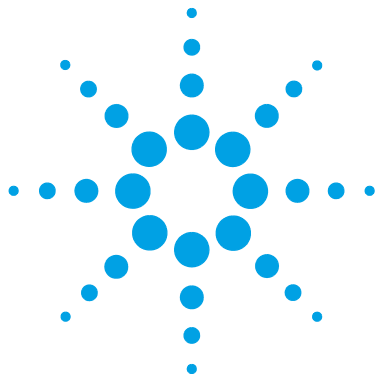
3 Acquisizione dei dati 67

- Che cosa si intende per acquisizione dei dati? 68
- Monitor in linea 71
- Registro elettronico 72
- Informazioni sullo stato 73

4 Automazione/Sequenze 75

- Che cos'è l'automazione? 77
- Che cosa sono le sequenze e i modelli di sequenze? 78
- Parametri di sequenza 79
- Tavola di sequenza 80
- Creazione di sequenze(sequenze e modelli di sequenza) 81
- Easy Sequence 83
- Utilizzo delle sequenze (sequenze e modelli di sequenza) 88
- File di registrazione della sequenza 99
- Cosa succede quando si esegue una sequenza? 100

Struttura del file di dati della sequenza	102
Funzionamento post-sequenza	111
Ricalibrazione automatica	113
Come specificare le ricalibrazioni	114
Tipi di sequenze	117
5 Run Queue e Queue Planner	131
Flussi di lavoro supportati	132
Utilizzo di Run Queue	134
Utilizzo di Queue Planner	137
6 Concetti relativi ad analisi e revisione dei dati	139
Analisi dei dati	140
Revisione	155
7 Calibrazione	159
Definizione dei termini	160
Tipi di calibrazione	161
La tavola di calibrazione	168
Somma dei picchi	169
Campioni incogniti	170
Ricalibrazione	171
8 Report	175
Che cos'è un report?	176
Classic Reporting e Intelligent Reporting	177
Intelligent Reporting	178
Classic Reporting	187
9 Concetti e funzioni specifici per CE	199
Funzioni specifiche della ChemStation Agilent per CE nella finestra di controllo del metodo e dell'analisi	200
Tipo di apice	203
Tipi di calibrazione	204
CE-MSD	207
Sottodirectory dei metodi per modalità CE diverse	208



1

Concetti di base di OpenLAB CDS ChemStation Edition

Termini e abbreviazioni	8
Introduzione	9
Controllo remoto degli strumenti	10
Informazioni sul software ChemStation	13
Sistema operativo	13
Memorizzazione centralizzata dei dati	13
Metodi e sequenze	14
Configurazione del sistema	14
Acquisition Method Viewer	14
Opzioni di scaricamento dei metodi	15
Modello di dati	16
Convenzioni per la denominazione dei file	16
Interfaccia software per l'utente	20
Acquisizione dei dati	22
Analisi dei dati	23
Report	27
Utilità e Compatibilità	27
Personalizzazione	27
Automazione	28
Run Queue e Queue Planner	29
Buone pratiche di laboratorio	31
Struttura di dati della ChemStation	34
Struttura di dati della ChemStation	34

Questo capitolo spiega i principi del lavoro con ChemStation, inclusi il controllo remoto, l'interfaccia utente grafica e le viste di ChemStation.



Termini e abbreviazioni

Tabella 1 Termini e abbreviazioni utilizzati in questo documento

Termine	Descrizione
ChemStation	OpenLAB CDS ChemStation Edition
EZChrom	OpenLAB CDS EZChrom Edition
Data Store	OpenLAB Data Store
ECM	OpenLAB Enterprise Content Manager
RC .Net	Interfaccia RapidControl .Net

Introduzione

Agilent OpenLAB è un portafoglio di software per laboratorio che fornisce un'architettura aperta e interfacce standardizzate riutilizzabili. Esistono soluzioni OpenLAB diverse per ogni fase nel ciclo di vita dei dati scientifici:

- Chromatographic Data System (CDS)
OpenLAB CDS è disponibile come EZChrom Edition o come ChemStation Edition. Questo manuale descrive la ChemStation Edition.
- Enterprise Content Manager (ECM)
- Electronic Lab Notebook (ELN)

OpenLAB CDS fornisce un controllo completo della strumentazione Agilent LC, GC, CE, CE-MS e LC-MSD. Fornisce strumenti per l'acquisizione, l'analisi e l'interpretazione dei dati, ottenuti da multi-tecnica e il controllo strumentale di sistemi di produttori diversi. Il software di cromatografia viene avviato dal Pannello di controllo OpenLAB, da cui si accede a tutte le funzioni fornite da Servizi condivisi OpenLAB.

Controllo remoto degli strumenti

Con una configurazione a sistema distribuito, è possibile configurare e avviare gli strumenti ChemStation da qualsiasi Pannello di controllo OpenLAB connesso al server Servizi Condivisi OpenLAB.

Avvio degli strumenti

Per configurare o avviare gli strumenti, è possibile usare i pulsanti *Configura strumento*, *Avvia in linea* e *Avvia non in linea* del Pannello di controllo OpenLAB. Come accade nelle configurazioni workstation o workstation in rete, la finestra di dialogo di configurazione strumento viene eseguita sul PC locale. Tuttavia, con una configurazione a sistema distribuito, l'applicazione ChemStation in sé viene eseguita su un computer AIC (Agilent Instrument Control) ed è possibile accedere all'applicazione per mezzo di un collegamento Desktop remoto al computer AIC.

Le finestre ChemStation remote vengono mostrate indipendentemente dal Pannello di controllo OpenLab; è possibile avviare uno strumento, chiudere il Pannello di controllo e continuare a lavorare con lo strumento. È inoltre possibile eseguire più istanze del Pannello di controllo OpenLAB sullo stesso client usando credenziali di accesso diverse. Le varie credenziali saranno propagate sugli strumenti avviati dal corrispondente Pannello di controllo OpenLAB.

Su un computer AIC remoto è possibile identificare gli strumenti in esecuzione dal titolo della finestra, che contiene sia il nome dello strumento, sia il nome dell'AIC.

Disconnessione della sessione

Gli strumenti in esecuzione su un AIC sono indipendenti dal client da cui è stato aperto il collegamento Desktop remoto. Se il client si disconnette, ad esempio, a causa di un malfunzionamento della rete, una sequenza in esecuzione sullo strumento continua senza esserne influenzato. Per riprendere il controllo dello strumento una volta ristabilita la rete, fare semplicemente clic di nuovo sul pulsante *Avvia in linea* o *Avvia non in linea*.

Per disconnettersi volontariamente, fare clic sul pulsante **Close** o selezionare **File > Exit**. La finestra di dialogo **Close** presenta un pulsante **Disconnect** aggiun-

tivo. Con la disconnessione, si chiude il collegamento Desktop remoto lasciando in funzione lo strumento.

NOTA

È possibile disconnettere il collegamento Desktop remoto mentre è in esecuzione una sequenza.

Per riconnettersi allo strumento, fare semplicemente clic di nuovo sul pulsante *Avvia in linea* o *Avvia non in linea* nel Pannello di controllo OpenLAB. È possibile riconnettersi da qualsiasi Pannello di controllo OpenLAB connesso al server Servizi Condivisi OpenLAB.

Se si fa clic su *Avvia non in linea* per riconnettersi a uno strumento in linea, o viceversa, si ottengono due finestre di strumento, uno per lo strumento in linea e una per lo strumento non in linea.

Acquisizione del controllo di una sessione

È possibile acquisire il controllo di una sessione esistente facendo clic sul pulsante *Launch online* (Avvia in linea) o *Launch offline* (Avvia non in linea) del pannello di controllo OpenLAB su un altro PC:

- Se si è avviato uno strumento dal pannello di controllo OpenLAB sul PC 1 e quindi si accede a un pannello di controllo OpenLAB sul PC 2 con le stesse credenziali e si avvia dal PC 2 lo stesso strumento, si acquisisce semplicemente il controllo della sessione esistente ed è possibile continuare sul PC 2 le attività iniziate sul PC 1.

NOTA

Se il nuovo utente e l'utente precedente possiedono le stesse credenziali, non viene visualizzato alcun avviso.

- Se un altro utente ha avviato lo strumento dal pannello di controllo OpenLAB su un altro PC e si dispone dei privilegi necessari, è possibile anche acquisire il controllo di quella sessione. È necessario disporre del privilegio **Take over ChemStation Remote Session** e, se l'altro utente ha bloccato privatamente la ChemStation, è necessario disporre anche del privilegio **Break Session Lock**.

Se si acquisisce il controllo della sessione, l'altro utente riceve un messaggio che segnala che avverrà l'acquisizione del controllo della sessione. Non appena l'altro utente accetta il messaggio, la finestra dello strumento si chiude sul PC di tale utente e si apre sul proprio PC. L'altro utente riceve un messaggio che specifica quale utente ha acquisito il controllo della sessione.

Gli strumenti in linea e non in linea sono inclusi nella stessa sessione e quindi vengono sempre trasferiti insieme. Se uno strumento in linea e uno strumento non in linea sono già avviati in una sessione, l'acquisizione del controllo trasferisce il controllo per entrambi gli strumenti, indipendentemente dal fatto che si sia fatto clic sul pulsante *Launch online* (Avvia in linea) o *Launch offline* (Avvia non in linea). Se si fa clic su *Launch offline* (Avvia non in linea) e la sessione comprende solo uno strumento in linea, o viceversa, si ottengono due finestre di strumento, una per lo strumento in linea e una per lo strumento non in linea.

Informazioni sul software ChemStation

Sistema operativo

ChemStation C.01.05 richiede i sistemi operativi Microsoft Windows XP Professional SP3, Windows Vista Business SP2 o Windows 7.

La funzione ChemStation Control Charts richiede Microsoft Excel.

Memorizzazione centralizzata dei dati

Un sistema di memorizzazione centralizzata dei dati può contenere tutti i tipi di dati elettronici indipendentemente dai formati proprietari dei dati. I dati grezzi della ChemStation (e di altri documenti leggibili dall'uomo, come le cartelle di lavoro) sono memorizzati insieme con i *metadati*; questo permette di ricercare i dati molto facilmente. I metodi, i modelli di sequenza, i modelli di report e i file di dati della ChemStation (sequenze e singole analisi) possono essere caricati nell'archivio centralizzato ed essere scaricati nuovamente nella ChemStation se e quando richiesto.

Agilent offre due sistemi per la memorizzazione centralizzata dei dati:

- *OpenLAB Data Store*, disponibile come installazione unica insieme a OpenLAB CDS. Progettato per laboratori di piccole dimensioni con un massimo di 15 strumenti.
- *OpenLAB ECM*, disponibile come prodotto indipendente. Progettato per laboratori con più di 15 strumenti.

Per ulteriori informazioni sui concetti relativi a ChemStation con memorizzazione centralizzata dei dati, fare riferimento alla *Guida ai concetti di Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition con memorizzazione centralizzata dei dati*.

Metodi e sequenze

Il metodo analitico spiega come eseguire una separazione specifica. Contiene tutti i parametri necessari per il controllo dello strumento, l'acquisizione e la valutazione dei dati, compresa l'integrazione, la quantificazione e la stesura di rapporti di stampa. Il sistema può essere programmato per acquisire dati provenienti dall'analisi di più campioni utilizzando metodi diversi. Il file di controllo per questo tipo di operazione si chiama sequenza e contiene tutte le informazioni sui singoli campioni, i riferimenti ai metodi adatti e le specifiche per la ricalibrazione automatica. Per ulteriori informazioni su metodi e sequenze, consultare la sezione [“Automazione/Sequenze”](#), pagina 75 e la Guida in linea.

Configurazione del sistema

La configurazione dello strumento viene effettuata con il Pannello di controllo OpenLAB, che avvia il programma per l'editing della configurazione. Tale programma consente di definire gli strumenti, gli indirizzi GPIB o LAN, le directory di dati, le sequenze e i metodi nonché le dimensioni iniziali dello schermo del software ChemStation. Inoltre, è possibile attivare o disattivare Intelligent Reporting e la valutazione degli spettri 3D e definire le opzioni di scaricamento dei metodi.

Acquisition Method Viewer

Acquisition Method Viewer consente di controllare i parametri di acquisizione memorizzati in un metodo, indipendentemente dalla configurazione corrente dello strumento. È possibile scegliere di applicare il metodo allo strumento nella sua versione originale oppure di risolvere il metodo rispetto alla configurazione corrente dello strumento.

Opzioni di scaricamento dei metodi

Le opzioni di scaricamento dei metodi definiscono il comportamento di ChemStation se l'ultimo metodo selezionato dalla sessione precedente dello strumento è diverso dalle impostazioni correnti dello strumento. È possibile scegliere tra le seguenti opzioni:

- **Download method to instrument**

Sullo strumento viene scaricato l'ultimo metodo selezionato. Le impostazioni dello strumento verranno sovrascritte. Questo comportamento corrisponde a Chemstation versione C.01.03 o precedente.

- **Upload method from instrument**

Le impostazioni dello strumento vengono caricate nell'ultimo metodo selezionato. Il metodo verrà contrassegnato come modificato.

- **New method from instrument**

Le impostazioni dello strumento vengono caricate in un metodo appena creato sulla ChemStation.

- **Always ask user to choose an option**

All'avvio della ChemStation viene visualizzata una finestra di dialogo in cui è possibile selezionare una delle opzioni sopra descritte. In questa finestra di dialogo è anche possibile confrontare le impostazioni dello strumento per ogni modulo con le impostazioni nell'ultimo metodo selezionato.

Nel confronto è possibile visualizzare l'intero elenco delle impostazioni oppure solo le differenze.

NOTA

Con questa finestra di dialogo vengono valutate solo le impostazioni degli strumenti con driver RC.Net. Non vengono valutate, invece, le impostazioni di strumenti con driver classici.

Modello di dati

Il software della ChemStation è progettato su un modello dati basato su una struttura di memoria chiamata registro. Si tratta di strutture a scopo multiplo contenenti dati analitici ed informazioni bidimensionali (es. tempo/intensità) e tridimensionali (tempo/intensità/lunghezza d'onda).

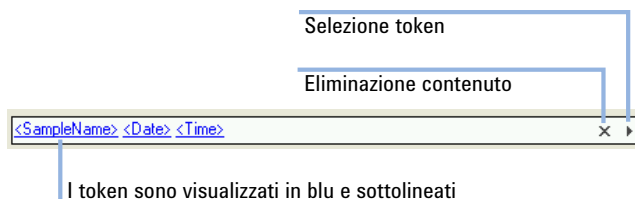
ChemStation fornisce comandi e funzioni per costruire, espandere, estrarre e, laddove non alteri dati primari, modificare registri. Per ulteriori informazioni, consultare il riferimento in di ChemStation sotto **Help > Commands**.

Convenzioni per la denominazione dei file

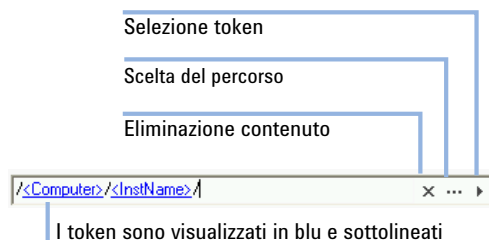
Nomi dei file e token

Nella maggior parte delle finestre di dialogo della ChemStation in cui si inserisce un percorso o un nome di file, è possibile utilizzare i token per generare dinamicamente nomi appropriati. Sono disponibili token diversi in base al nome del file o al percorso impostato in una specifica finestra di dialogo. Nelle seguenti finestre vengono utilizzati alcuni token come esempi.

Il controllo dei nomi dei file è il seguente:



Il controllo dei nomi di percorso è il seguente:



In ogni finestra di dialogo corrispondente viene visualizzato anche il nome del file o il percorso risultante.

Per questo tipo di campi sono disponibili le seguenti opzioni:

- Aggiunta di testo statico.
- Fare clic sul pulsante freccia () per selezionare un token dalla lista.
Premere il pulsante **Freccia giù** per selezionare un token dall'elenco.
- Fare clic con il pulsante destro del mouse su uno dei token già utilizzati per sostituirlo con un altro dell'elenco.
- Fare clic sul pulsante X per eliminare il contenuto corrente del campo.
- Fare clic sul pulsante con i tre puntini (...) per passare al percorso richiesto.

Convenzioni di denominazione

Le regole seguenti consentono a ChemStation di creare ed elaborare nomi validi per file e directory:

Non è possibile usare i seguenti caratteri per i nomi di file o directory:

< > : " / \ | @ % * ? '

L'uso di questi caratteri nei nomi di file o directory può causare problemi durante il caricamento dei file nella ChemStation. Inoltre, se questi caratteri sono usati nella cartella di installazione, la copia della rielaborazione non si avvia. Se viene usato il carattere % nella cartella di installazione, alcuni collegamenti della ChemStation non funzionano correttamente.

Si applicano inoltre le seguenti regole:

Tabella 2 Caratteri non consentiti

Parametro della ChemStation	Character
Nomi file di metodo:	% e . (punto decimale) non sono consentiti
Sottodirectory dei dati e delle sequenze:	[] + = ; , . (punto) e spazi non sono consentiti
Nomi dei file di dati nelle sequenze	gli spazi vuoti non sono consentiti

I seguenti nomi di dispositivi riservati non possono essere utilizzati come nomi di file:

- CON, PRN, AUX, NUL
- COMx (dove x è un numero compreso tra 1 e 9)
- LPT1x (dove x è un numero compreso tra 1 e 9)

Tali nomi non devono essere utilizzati neppure se seguiti da un'estensione (ad esempio Nul.txt).

NOTA

Per il test delle convenzioni di denominazione sono stati utilizzati sistemi operativi in lingua inglese, giapponese e cinese. Agilent non fornisce alcuna garanzia relativamente ai sistemi operativi in lingue diverse dall'inglese e ai corrispondenti caratteri speciali.

Lunghezza massima dei nomi di file e di sottodirectory della ChemStation

Di seguito sono riportate le specifiche della ChemStation Agilent per i nomi di file e di sottodirectory:

Tabella 3 Lunghezza massima dei nomi di file e di sottodirectory della ChemStation

File di dati/sottodirectory/percorso	Lunghezza massima	Aggiunta autom.	Esempio
Nome file di dati di campione singolo	60	.D	Demodad.d
Nomi file di dati in sequenza, con prefisso/carattere a scalare	15	.D	longname000001.d
Metodo Sequenza Ipersequenza Librerie Modelli di report personalizzati	40	. M . S . HYP . UVL . FRP	def_lc.m def_lc.s def_lc.hyp demodad.uvl areapct.frp
Sottodirectory del file di dati	40		demo (nelle informazioni campione)
Sottodirectory della sequenza dati	40		demo (in Parametri di sequenza)
Nome del set di risultati	40		test_date_time (creazione mediante le preferenze di sequenza)
Percorso dati Percorso metodo Percorso sequenza Percorso ipersequenza Percorso librerie Percorso modello di report personalizzato	100	100	c:\chem32\1\data c:\chem32\1\methods c:\chem32\1\sequence c:\chem32\1\hyper c:\chem32\speclib c:\chem32\repstyle

Tutti i messaggi del sistema di report dei registri elettronici della ChemStation in formato esteso e le stringhe informative vengono stampati su più righe. Alcuni report, come il report di sequenza, possono tagliare i nomi dei file per permettere l'inserimento di tutte le informazioni nel modello del report.

Interfaccia software per l'utente

L'interfaccia per l'utente della ChemStation è suddivisa in finestre che raggruppano le funzionalità software in processi analitici tipo. Le seguenti finestre standard sono disponibili in tutte le configurazioni software:

- vista Controllo del metodo e delle analisi, per controllare e acquisire dati dallo strumento
- vista Analisi dei dati, per rivalutare i dati acquisiti
- vista Revisione, per esaminare i dati usando modelli di report specifici
- vista Report Layout, per creare layout particolari per i report

Sono disponibili anche altre finestre con i moduli di valutazione dati o per configurazioni che supportano sistemi di diagnosi e procedure di verifica. Se si desidera che gli operatori analizzino campioni utilizzando una tavola facile da usare e preconfigurata, è disponibile una finestra ChemStation Companion.

Il riquadro di navigazione contiene un pulsante di navigazione che consente di passare rapidamente dalle finestre della ChemStation a ChemStation Explorer strutturato ad albero. I contenuti di ChemStation Explorer dipendono dalle finestre e consentono l'accesso a diversi elementi della ChemStation.

Ciascuna finestra contiene elementi standard per l'utente come menu e barre degli strumenti. La barra degli strumenti standard consente di accedere rapidamente a informazioni specifiche del sistema, come metodi e sequenze. La finestra Controllo del metodo e delle analisi contiene anche una barra di stato relativa al sistema, un'area di informazioni sul campione che può essere configurata per analisi singole o automatizzate, e un diagramma schematico di interfaccia per le configurazioni GC, CE e LC. Il diagramma utilizza elementi grafici interattivi per consentire un accesso rapido ai parametri dello strumento e consente la visualizzazione grafica animata dello stato di ciascuna analisi durante il suo svolgimento. Il diagramma schematico dello strumento può essere disattivato, se inutilizzato, per ridurre l'utilizzo della memoria e delle altre risorse di Windows.

La finestra Analisi dei dati estende la barra di strumenti standard a modalità specifiche dell'analisi dei dati, comprendenti ricalcolo, rielaborazione, integrazione, calibrazione, stesura di report, annotazione, comparazione di segnali e altre modalità aggiuntive specializzate, se sono installati i relativi moduli. Ciascuna di queste modalità di analisi dei dati è supportata da un set di strumenti specifico.

La vista Revisione è disponibile quando si seleziona Intelligent Reporting per uno strumento. Questa vista permette di esaminare i dati in modo molto flessibile. È possibile selezionare qualsiasi combinazione di file di dati come base per la revisione, quindi applicare qualsiasi modello di report esistente ai dati selezionati. Il modello di report selezionato definisce il modo in cui vengono visualizzati i dati e il tipo di informazioni incluse nel report generato. La barra degli strumenti fornisce funzioni di stampa ed esportazione dei report generati.

La vista Layout report permette di definire il layout di un modello di report specifico o di uno stile di report. È anche possibile utilizzare un set di barre di strumenti specifiche. Il tipo dell'editor di modelli di report visualizzato in questa vista dipende dal tipo dei report configurati per lo strumento. È possibile usare Classic Reporting o Intelligent Reporting (vedere ["Report"](#), pagina 175).

Riquadro di navigazione

Il riquadro di navigazione, disponibile nella parte sinistra di tutte le finestre della ChemStation, è progettato per consentire un rapido accesso a molti elementi chiave della ChemStation e per passare rapidamente ad altre finestre. Contiene ChemStation Explorer con struttura ad albero e un'area di pulsanti configurabili. Include anche la funzione di scomparsa automatica, in modo da non sottrarre spazio di lavoro alla ChemStation. Offre inoltre funzioni standard quali il ridimensionamento, la ridisposizione e l'area dei pulsanti di navigazione.

Pulsanti di navigazione

I pulsanti di navigazione consentono di passare da una finestra all'altra della ChemStation facendo clic sullo specifico pulsante di navigazione. La sezione Navigation Button (Pulsante di navigazione) può essere ridotta a icona, ingrandita o ridisposta.

ChemStation Explorer

Il contenuto del riquadro di navigazione varia a seconda della finestra. Per Controllo del metodo e delle analisi, Analisi dei dati, Revisione e Layout report, ChemStation Explorer consente di navigare in vari elementi della ChemStation. Per impostazione predefinita, questi elementi per dati, metodi e sequenze sono basati sulle impostazioni di Configuration Editor. È possibile specificare i nuovi nodi per metodi, sequenze e posizione dei dati utilizzando l'opzione "Preferenze" del menu Visualizza.

Tabella 4 Elementi del riquadro di navigazione

Pulsanti di navigazione	Elementi di ChemStation Explorer
Controllo del metodo e delle analisi	Modelli di sequenza / Metodi master, metodi del set di risultati
Analisi dei dati	Metodi Dati / Master, metodi del set di risultati
Revisione	Modelli per dati / report
Layout report	Report classici: Metodi master Intelligent Reporting: Modelli di report
Verifica (LC e LC/MS)	Scelte rapide di verifica specifiche per finestra
Diagnosi (LC e LC/MS)	Scelte rapide di diagnosi specifiche per finestra
Regolazione (LC/MS)	Scelte rapide di regolazione specifiche per finestra

Acquisizione dei dati

Lo stato dello strumento viene tenuto sotto controllo e aggiornato sul display, insieme al tempo di svolgimento dell'analisi sia che il software appaia come finestra visibile sia che appaia sotto forma di icona. Le variazioni dell'analisi, compresi gli eventuali errori e le condizioni dello strumento all'inizio e alla fine dell'analisi, vengono riportate sul registro elettronico del sistema e un riassunto di quest'ultimo viene archiviato con ciascun file di dati.

Le condizioni dello strumento, come il flusso, la temperatura, la pressione e la composizione del solvente per i cromatografi liquidi, possono essere registrate e conservate in ogni file di dati. Questi parametri possono essere visualizzati e riportati in forma grafica per provare la qualità di ogni analisi. L'esatta natura dei parametri registrati dipende sia dalla tecnica sia dalle possibilità dello strumento configurato.

Tutte le acquisizioni di dati regolari (singoli campioni e sequenze) vengono innanzitutto aggiunte a Run Queue e avviate da qui. Per ulteriori informazioni, consultare la sezione **“Flussi di lavoro supportati”**, pagina 132.

Possono essere utilizzate due o più finestre per monitorare i dati in fase di acquisizione in tempo reale. I dati vengono visualizzati in unità di misura reali come mAU, Volt, gradi o bar. Ognuna delle finestre può mostrare segnali cromatografici/elettroferografici sovrapposti o parametri dello strumento, come

la pressione. Le impostazioni predefinite della visualizzazione possono essere regolate e memorizzate dal sistema in modo che gli utenti possano impostare i parametri che preferiscono come impostazione predefinite dello strumento. La finestra ha capacità di ingrandimento e il cursore può essere utilizzato per visualizzare la risposta di un segnale specifico in qualsiasi punto.

Durante un'analisi, è possibile sfruttare appieno la funzionalità di ChemStation utilizzando la copia non in linea. Durante l'acquisizione, la parte di analisi dei dati della sessione in linea di uno strumento non è accessibile e la revisione dei dati deve essere eseguita nella copia non in linea.

È disponibile una funzione di "snapshot" per quegli utenti che desiderano avviare l'elaborazione dei dati prima della fine dell'analisi. Lo snapshot deve essere effettuato nella copia non in linea delle sessioni dello strumento ed è immediatamente presente per la revisione.

La disposizione delle finestre contenenti informazioni relative al segnale e allo stato, compresi i componenti dell'interfaccia schematica dello strumento, viene salvata automaticamente.

Per ulteriori informazioni sull'acquisizione dei dati, consultare il Capitolo [“Acquisizione dei dati”](#), pagina 67 oppure la Guida in linea.

Analisi dei dati

Analisi dei dati — Visualizzazione

La finestra Analisi dei dati estende la barra di strumenti standard a funzioni di analisi dei dati raggruppate per tipo di operazione da effettuare, comprendenti ricalcolo, rielaborazione, integrazione, calibrazione, stesura di report, annotazione e comparazione dei segnali. Sono possibili le seguenti operazioni grafiche:

- visualizzazione di segnale singolo o multiplo selezionabile al momento di caricare il cromatogramma/elettroferogramma;
- sovrapposizione di cromatogrammi/elettroferogrammi di campioni diversi;
- sottrazione di un cromatogramma/elettroferogramma da un altro;
- allineamento grafico verticale e orizzontale dei segnali in modo da facilitare la comparazione visiva;

- inversione del segnale o visualizzazione a specchio per facilitare la comparazione visiva;
- visualizzazione delle caratteristiche estese sulle prestazioni dei picchi per specifici picchi integrati;
- zoom grafico e funzioni di scorrimento;
- regolazione degli attributi di visualizzazione, compresa la selezione di marcatori, linee di base, assi, tempi di ritenzione/migrazione e nomi dei composti (è possibile anche scegliere il carattere per le etichette di tempi di ritenzione e composti, regolare le dimensioni e l'orientamento della visualizzazione, selezionare la visualizzazione come sovrapposta o separata e scegliere i fattori di scala);
- la visualizzazione del cromatogramma/elettroferogramma può comprendere sovrapposizioni grafiche di parametri dello strumento a seconda della capacità di quello configurato;
- possono essere aggiunte annotazioni definite dall'utente in modo interattivo, unitamente alla selezione del carattere, delle dimensioni, dell'orientamento del testo e del colore (una volta definite, le annotazioni possono essere spostate, modificate o eliminate);
- copiare la visualizzazione negli Appunti di Windows sia in formato metafile sia in formato bitmap;
- una funzione di *pick mode* per visualizzare i valori dei punti di dati individuali nelle unità del rivelatore,
- esportazione di punti digitalizzati di tempo/intensità negli Appunti di Microsoft Windows.

Analisi dei dati — Integrazione

L'algoritmo di integrazione della ChemStation è la seconda versione di una nuova generazione nata con lo scopo di aumentare la robustezza, l'affidabilità e la facilità d'uso.

Analisi dei dati — Quantificazione

La modalità di calibrazione della ChemStation nella finestra Data Analysis (Analisi dei dati) consente la visualizzazione simultanea di:

- segnale o segnali in corso di calibrazione con un'indicazione della finestra dei tempi di ritenzione/migrazione del composto attuale;

- tavola di calibrazione la cui visualizzazione può essere configurata tramite un'ampia gamma di parametri di calibrazione;
- curva di calibrazione del composto in corso di calibrazione.

Le finestre della modalità di calibrazione sono collegate tra loro cosicché eventuali modifiche effettuate in una finestra si riflettono automaticamente in tutte le altre. Questa modalità consente la selezione grafica e la modifica dei dati di calibrazione.

La quantificazione si basa su calcoli in percentuale, percentuale normalizzata, standard esterno, standard esterno percentuale, standard interno, standard interno percentuale e i calcoli possono essere effettuati sia sull'area sia sull'altezza dei picchi. Le calibrazioni possono essere multilivello e includere più definizioni di standard interni. Le cronologie di calibrazione vengono salvate automaticamente e possono essere utilizzate per variare il peso dei calcoli di ricalibrazione.

Per informazioni su quantificazione e calibrazione vedere [“Calibrazione”](#), pagina 159.

Analisi dei dati — Revisione dei lotti

Nella finestra Data Analysis (Analisi dei dati) sono disponibili altri due set di strumenti:

- Navigation Table (Tavola di navigazione)
- Batch Review (Revisione dei lotti)

Navigation Table (Tavola di navigazione) consente di eseguire numerose operazioni grafiche importanti:

- funzioni standard di configurazione della tavola, quali ordinamento, opzioni di trascinamento, selezione di colonne, raggruppamento di voci per specificare la configurazione preferita della tavola di navigazione
- funzioni disponibili facendo clic con il pulsante destro del mouse per caricare o sovrapporre un segnale, esportare dati e stampare report
- revisione dei dettagli del segnale tramite l'espansione di una riga della tavola di navigazione
- revisione dei segnali e creazione di report ChemStation utilizzando un metodo specifico

Batch Review (Revisione dei lotti) consente di eseguire le seguenti operazioni grafiche importanti:

- definizione della revisione e rielaborazione automatica o manuale dei file di dati (calibrati)
- ricalibrazione della tavola di calibrazione
- revisione delle tavole dei composti dei metodi calibrati
- creazione di report specifici su lotti

Analisi dei dati — Ricalcolo

Le funzioni della modalità di ricalcolo permettono di generare velocemente risultati o report per qualsiasi sottoinsieme di dati visualizzati nella tavola di navigazione. È possibile generare facilmente i risultati per set di dati auto-assemblati, indipendentemente dalle sequenze in cui i campioni sono stati originariamente acquisiti. È possibile utilizzare qualsiasi metodo per il ricalcolo. Il metodo utilizzato viene copiato nei singoli file di dati (DA.M). Durante il ricalcolo non viene eseguita alcuna calibrazione.

Analisi dei dati — Rielaborazione

Le funzioni nella modalità di rielaborazione permettono di rielaborare un'intera sequenza, utilizzando i metodi definiti nella tavola di sequenza e i risultati dei campioni di calibrazione per calcolare i risultati dei campioni.

Analisi dei dati — Ultimi risultati

In questa modalità viene caricato il metodo del file di dati (DA.M) per ogni analisi. Il metodo DA.M è una copia esatta del metodo utilizzato per l'ultima analisi dei dati (durante l'acquisizione, la rielaborazione o il ricalcolo). La modalità Last Result (Ultimo risultato) consente di riprodurre i risultati dell'ultima analisi dei dati, anche se nel frattempo il metodo della sequenza è stato modificato.

Report

Se Intelligent Reporting è stato abilitato per uno strumento, la vista **Review** è abilitata e l'editor dei modelli di report di Intelligent Reporting è visibile nella vista **Report Layout**.

Con Intelligent Reporting abilitato, è possibile utilizzare entrambi i modelli di report intelligenti e classici per creare report per una sola iniezione e report riassuntivi di sequenza. Se si hanno i privilegi richiesti, è possibile creare modelli di report per Intelligent Reporting.

Con Intelligent Reporting disabilitato, è possibile utilizzare solo i modelli di report classici per creare report per una sola iniezione e report riassuntivi di sequenza. Se si hanno i privilegi richiesti, è possibile creare modelli di report per Classic Reporting.

Utilità e Compatibilità

ChemStation è in grado di importare ed esportare file di dati in formato cromatografico andi (Analytical Data Interchange) creato dalla Analytical Instrument Association (AIA), revisione 1.0, copyright 1992. L'importazione dei dati è supportata al livello di conformità uno (informazioni sul campione e dati del segnale) e l'esportazione dei dati al livello di conformità due (informazioni sul campione, dati del segnale e risultati di integrazione).

ChemStation comprende comandi e funzioni per supportare lo standard di dynamic data exchange (DDE) della piattaforma Microsoft Windows come cliente o server DDE. I comandi sono in grado di stabilire e terminare collegamenti, trasferimenti di informazioni in entrambe le direzioni ed eseguire funzioni di controllo a distanza.

Personalizzazione

ChemStation può essere personalizzato utilizzando i diversi comandi disponibili. Questi comandi possono essere raggruppati per eseguire automaticamente una funzione specifica; tale gruppo è denominato macro. Gli utenti che scrivono macro possono definire variabili personalizzate, utilizzare costrutti condizionali o di ciclo, eseguire operazioni di I/O fisico (ad esempio la gestione

dei file e l'interazione tra gli utenti), nidificare le macro nonché programmare e scambiare dati con altre applicazioni MS-DOS o Windows.

Per ulteriori informazioni sulla personalizzazione, consultare il riferimento in ChemStation sotto **Help > Commands**.

Automazione

Con la ChemStation è possibile pianificare ed eseguire sia singoli campioni che sequenze multimetodo.

L'insieme dei parametri di sequenza può essere definito per utilizzare file generati automaticamente o numerati in sequenza, con un prefisso di un massimo di quindici caratteri definito dall'utente. L'utente può scegliere se effettuare analisi complete o semplicemente rielaborare i dati, oppure scegliere uno di una serie di comandi di chiusura specifici per tecnica o una macro di chiusura definibile dall'utente, che funzionerà se una sequenza viene interrotta, sia per errore sia alla fine delle analisi.

La tavola di sequenza, o la lista di analisi da effettuare, viene costruita in un'interfaccia per l'utente di formato simile a fogli elettronici che permette di definire il numero di vial e i nomi e i tipi dei campioni, i metodi di analisi, i parametri di quantificazione del campione, compresa la quantità e il fattore di moltiplicazione e di diluizione, la specifica di calibrazione, il parametro LIM-SID di scambio dei dati e il numero di iniezioni ripetute. A seconda degli strumenti e dei moduli configurati, sono accessibili ulteriori campi, ad esempio se un sistema LC Agilent 1100/1200 include un raccoglitore di frazioni, nella tavola di sequenza viene visualizzata la colonna **Fract. Start**. L'aspetto della tavola di sequenza può essere configurato dall'utente. L'utente può passare da una casella all'altra della tabella e copiare, tagliare o incollare caselle o linee intere o serie di linee per costruire sequenze in modo rapido ed efficiente.

I campioni possono essere identificati nella tavola di sequenza come incogniti, calibrati, bianchi o di controllo. Il tipo di campione determina qualsiasi tipo di trattamento speciale di valutazione dati del campione;

- I campioni incogniti vengono valutati e vengono stesi rapporti di stampa secondo quanto specificato nel metodo.
- I campioni di calibrazione vengono utilizzati per ricalibrare il componente di quantificazione del metodo come descritto di seguito.

- I bianchi vengono utilizzati per valutare il segnale di riferimento per i picchi specifici, come definito dalla Farmacopea Europea. È possibile stampare il rapporto segnale-rumore nei report personalizzati. Per informazioni più dettagliate sul calcolo e sui campi di dati richiesti, consultare il manuale di riferimento.
- I campioni di controllo vengono valutati rapportandoli ai limiti di ogni componente definito nel metodo. Se i risultati sono al di fuori degli intervalli di parametri stabiliti, l'esecuzione della sequenza viene interrotta.

Possono essere definite ricalibrizioni semplici, cicliche e con la tecnica del bracketing. Le ricalibrizioni semplici significano che avviene una ricalibrazione ogni volta che viene definito un campione di ricalibrazione nella sequenza. Le ricalibrizioni cicliche avvengono a intervalli regolari, ogni volta che vengono analizzate serie di campioni incogniti. Per effettuare una calibrazione in bracketing di una serie di campioni incogniti devono essere analizzati due gruppi di calibrazione. I risultati quantitativi relativi ai campioni incogniti vengono quindi calcolati utilizzando una tavola di calibrazione di media fra i due gruppi.

La funzione di sequenza parziale permette di vedere l'ordine di esecuzione di una sequenza e di scegliere l'aggiunta di campioni singoli da rianalizzare o rielaborare. Se si sceglie di rivalutare dati già acquisiti si può specificare se si intende usare i dati originali di quantificazione del campione o dati nuovi, inseriti nella tavola della sequenza.

Le sequenze possono essere arrestate temporaneamente per iniettare campioni singoli prioritari utilizzando un altro metodo, e poi riavviate senza bloccare il processo automatico. Si possono anche aggiungere campioni a una sequenza mentre viene eseguita.

Entrambe le tavole possono essere stampate.

Per ulteriori informazioni sulle sequenze, consultare il [“Automazione/Sequenze”](#), pagina 75e la Guida in linea.

Run Queue e Queue Planner

Run Queue consente di eseguire automaticamente, uno dopo l'altro, diversi campioni singoli o sequenze. Il primo elemento aggiunto alla coda inizia quando il sistema di elaborazione dei dati è pronto, a meno che non sia in pausa dalla coda. Le sequenze e i campioni singoli possono essere aggiunti in

base a modelli Easy Sequence, a sequenze ChemStation classiche o essere sospesi in coda. Inoltre, ogni comando **Run Method** o **Run Sequence** aggiunge automaticamente un elemento a Run Queue e avvia automaticamente questo elemento nella coda.

Con Queue Planner, è possibile preparare una serie di campioni singoli o sequenze e salvare il piano nel file system. Per avviare tali sequenze e campioni pianificati, è sufficiente semplicemente aprire il piano e aggiungerlo a Run Queue. Questa funzionalità permette di avviare attività prolungate, da effettuarsi in ore notturne o durante il fine settimana.

Per ulteriori informazioni, consultare la sezione “[Flussi di lavoro supportati](#)”, pagina 132.

Buone pratiche di laboratorio

ChemStation è stata progettata nel rispetto di standard riconosciuti a livello internazionale con determinate funzioni che permettono all'utente di lavorare in un ambiente regolamentato. Queste funzioni si applicano alla completa costruzione dei metodi e alla verifica della loro conformità agli usi previsti, al controllo del funzionamento del sistema al fine di garantirne la rintracciabilità, all'originalità e alla qualità dei dati.

Processo di sviluppo

Il Certificato di Validazione allegato a tutti i pacchetti software documenta il processo di sviluppo e le verifiche eseguite come parte del ciclo di sviluppo. Il processo di sviluppo è registrato secondo gli standard di qualità previsti da ISO 9001.

Specifica dei metodi e uso

- Metodi globali: le specifiche complete relative allo strumento e all'analisi dei dati sono archiviate in una singola directory. I metodi comprendono le specifiche dei limiti di concentrazione dei composti, che permettono di controllare che i risultati delle quantificazioni non vengano applicati al di fuori della serie calibrata.
- Il registro elettronico delle modifiche dello strumento offre agli utenti un metodo validato che registra automaticamente i dati relativi alla data e al tipo di modifiche. Gli utenti possono aggiungere un commento relativo al motivo della modifica. Il registro elettronico delle modifiche viene memorizzato automaticamente in formato binario insieme al metodo. Per impedire l'accesso non autorizzato alle registrazioni, queste vengono protette da uno schema di accesso, come descritto di seguito. Il registro delle modifiche può essere visualizzato e stampato.
- Possono essere assegnati limiti, a seconda dei composti di ciascun metodo, per un determinato numero di parametri cromatografici/elettroferografici e di prestazioni del sistema, come descritto nella sezione relativa all'analisi dei dati e alla quantificazione. I risultati che superano gli intervalli di parametri previsti vengono utilizzati per controllare l'esecuzione delle sequenze automatizzate come descritto nell'apposita sezione. Tutti questi elementi sono riportati nel rapporto di stampa di analisi appropriato.

- I rapporti di stampa relativi alla prestazione del sistema o di system suitability (vedere la sezione precedente relativa ai rapporti di stampa) forniscono analisi dettagliate sulla qualità della separazione.

È possibile configurare ruoli e privilegi diversi nei Servizi Condivisi OpenLAB. I ruoli preconfigurati **ChemStation Administrator**, **ChemStation Lab Manager**, **ChemStation Analyst** e **ChemStation Operator** offrono una base per i ruoli dell'ambiente.

Robustezza del metodo

I rapporti riassuntivi della sequenza (vedere la sezione “[Classic Reporting e Intelligent Reporting](#)”, pagina 177) consentono di verificare la robustezza di un metodo. Con i report classici, i rapporti di stampa in formato esteso per criteri scelti dall'utente vengono riportati sotto forma di diagrammi di tendenza e possono essere usati per determinare i limiti reali di funzionamento. Con i report intelligenti, è possibile creare i propri modelli di report riepilogativi di sequenza, inclusi i grafici di tendenza con linee limite. Tali limiti possono quindi essere incorporati nel metodo per verificare, mediante l'analisi di campioni di controllo, che funzioni secondo le specifiche.

Funzionamento del sistema

Il kit di verifica della ChemStation, che fa parte del software standard, controlla automaticamente che l'installazione e il funzionamento delle parti di elaborazione dei dati siano corretti, confrontando i risultati generati dall'esecuzione del test con valori conosciuti preregistrati. Il kit di verifica permette agli utenti di definire i propri file di dati e metodi come base per il test.

Rintracciabilità, qualità e originalità dei dati

Il registro elettronico riferito al periodo di analisi tiene traccia delle transazioni dell'intero sistema. Inoltre, registra eventi non ricorrenti (come errori o modifiche di parametri effettuati durante l'analisi) così come le condizioni dello strumento prima e dopo ciascuna analisi. Insieme a ciascun file di dati viene salvata una copia del relativo estratto del registro elettronico.

Le condizioni reali dello strumento, come la pressione, il flusso e la temperatura durante l'analisi vengono registrate se lo strumento configurato supporta questa funzionalità. Questi dati possono in seguito essere visualizzati in forma grafica con il cromatogramma/elettroferogramma per mostrare le condizioni

reali dello strumento durante una particolare analisi o essere inclusi nel rapporto di stampa.

I metodi salvati con il file di dati registrano il metodo reale al momento dell'analisi e consentono la ricostruzione completa dei dati registrati anche in una data successiva. Il metodo viene salvato dopo il completamento di tutte le fasi dell'analisi.

Per impostazione predefinita, tutti i report indicano la data e l'ora e hanno pagine numerate (nel formato *pagina x di y*). L'utente può selezionare il livello di dettaglio desiderato, dal semplice rapporto di stampa in forma di riassunto a descrizioni più dettagliate di tutto il sistema.

I file creati con Registro salvataggio GLP, specificati come parte della configurazione del metodo, vengono usati per salvare tutti i dati originali, comprese le informazioni relative ai campioni, il metodo di analisi dei dati, i segnali cromatografici/elettroferografici, le condizioni dello strumento, i risultati dell'integrazione e della quantificazione, i dati dei rapporti di stampa e il registro elettronico dell'analisi, in un file binario protetto da somma di controllo (checksum). Questo è un formato binario non modificabile che assicura l'originalità del risultato. Il file include uno schema di revisione che indica se i dati sono stati rielaborati.

I tipi di campione di controllo possono essere definiti nella tavola di sequenza e utilizzati per confrontare automaticamente le prestazioni dello strumento con i risultati relativi al controllo della qualità del campione, quando lo strumento viene usato in modalità automatica. Eventuali risultati non compresi nell'intervallo specificato dall'utente determinano l'interruzione del funzionamento automatico.

Struttura di dati della ChemStation

Senza creazione cartelle esclusive

Questa struttura dati corrisponde alla struttura dati usata nelle revisioni di ChemStation B.01.03 e precedenti. Le sequenze, i metodi, i file di dati e i risultati generati vengono memorizzati in posizioni fisse, specifiche e separate. Ad esempio, ai metodi viene fatto riferimento per nome nelle sequenze ed è responsabilità dell'utente gestire l'integrità dei metodi, delle sequenze e dei file di dati. Questo rende particolarmente noiose le operazioni di archiviazione a lungo termine dei dati e di riproduzione dei risultati. Gli utenti sono tenuti a documentare il cromatogramma, i risultati e il metodo associato, non solo nel caso di laboratori regolamentati ma anche in alcune aree dei laboratori non regolamentati, come i laboratori ambientali. Senza creazione del set di risultati, tale risultato si può ottenere solo mediante la stampa di tutti i dati in un report.

Tuttavia, in alcune situazioni si potrebbe voler memorizzare i dati in modo simile alla ChemStation versione B.01.03 o precedenti e operare in base ai flussi di lavoro corrispondenti:

- Durante lo sviluppo del metodo potrebbe essere più comodo utilizzare un solo metodo sia per l'acquisizione che per l'analisi dei dati, in modo da rendere automaticamente disponibili le modifiche per future acquisizioni e rianalisi di dati già acquisiti.
- Eventuali soluzioni macro personalizzate progettate per versioni meno recenti di un sistema ChemStation potrebbero richiedere la memorizzazione di dati, metodi o sequenza in base allo schema di organizzazione di dati precedente.
- Quando ChemStation C.01.05 viene utilizzata in un laboratorio in cui sono ancora presenti sistemi con ChemStation versione B.01.03 o precedenti, potrebbe risultare più comodo utilizzare la stessa modalità di organizzazione dei dati su tutti i sistemi.

Con creazione cartelle esclusive

Per rafforzare l'associazione tra i file dei dati e i metodi, a partire da ChemStation B.02.01 è stato implementato l'utilizzo dei set di risultati (allora, i set di risultati venivano chiamati contenitori di sequenze). In caso di utilizzo del

sistema di memorizzazione centralizzata dei dati (*OpenLAB ECM* o *OpenLAB Data Store*), l'intero set di risultati (sequenza/metodi/file di dati/modelli di report) viene trasferito all'archivio centralizzato come singola entità.

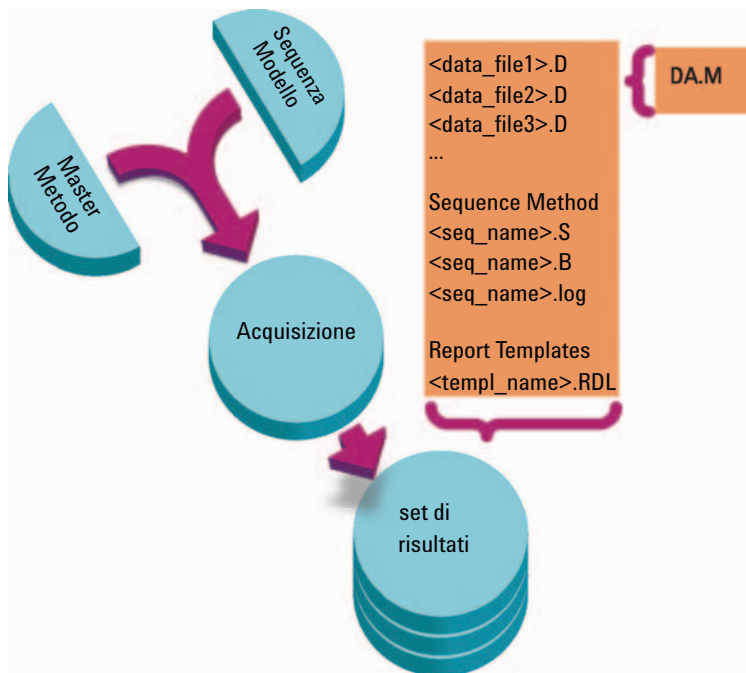


Figura 1 Acquisizione di sequenze con la creazione di cartelle esclusive attivata

I metodi nella cartella Chem32\1\methods servono come metodi master. Essi rimangono invariati durante l'acquisizione e l'analisi dei dati.

In modo simile, le sequenze nella cartella Chem32\1\sequence servono come modelli di sequenza, che possono essere utilizzati per rieseguire (ma non rielaborare) diverse volte una sequenza.

I modelli di report nella cartella Chem32\repstyle servono come punto di partenza per sviluppare i propri modelli di report.

Il pattern di memorizzazione dei dati varia a seconda che vengano acquisiti i dati di una singola analisi o i dati di una sequenza:

- 1 Se viene eseguita una sequenza, nella sottodirectory specificata viene creata automaticamente una nuova cartella (**result set**) a cui viene assegnato

un nome esclusivo. Quando viene analizzato un singolo campione, il file di dati (*.d) viene scritto nella sottodirectory specificata.

- 2 Per i dati di sequenza, nel set di risultati vengono copiati il modello di sequenza eseguito (*.s) e tutti i metodi (*.m) coinvolti. Le copie dei metodi sono denominate **sequence methods** per distinguerle dai metodi master originali. Se si usa Intelligent Reporting, tutti i modelli di report interessati (*.rdl) sono copiati anche nel set di risultati.

Tutte le attività correlate alla sequenza (come l'acquisizione e l'analisi dei dati) vengono eseguite sulle copie delle sequenze e dei metodi. Pertanto, il modello di sequenza e i metodi master rimangono inalterati per l'esecuzione di sequenze future.

Qualsiasi modifica apportata alla sequenza durante l'acquisizione di una sequenza, come l'aggiunta di righe alla tavola di sequenza, viene eseguita sulla copia del file della sequenza nel set di risultati del file della sequenza. Il modello di sequenza rimane invariato.

In modo analogo, qualsiasi modifica apportata al metodo, ad esempio, aggiornamenti alla tavola di calibrazione in caso di calibrazioni, viene riportata nei metodi di sequenza ma non nei metodi master.

Nell'esecuzione della sequenza, tutti i file di dati generati (*.d) vengono memorizzati nella cartella di dati della sequenza, insieme al file batch corrispondente (*.b) e al file di log della sequenza (*.log).

- 3 Ciascun file di dati contiene una copia del metodo usato per creare l'analisi. Sono memorizzate le seguenti informazioni sul metodo:
- I parametri di acquisizione sono salvati come ACQ.TXT per garantire il mantenimento dei parametri del metodo originale per ogni specifico file di dati. I parametri possono essere visualizzati e stampati usando il comando **Method > View Method**.
 - Il metodo completo, inclusi i parametri di analisi dei dati, viene salvato dopo il completamento della parte di analisi dei dati come DA.M.

L'utilizzo dei set di risultati fornisce molti vantaggi:

- I dati della sequenza non vengono sovrascritti. I file di dati risultanti da ogni acquisizione della sequenza vengono memorizzati con un nome esclusivo nel relativo set di risultati della sequenza.
- Con il concetto di set di risultati, i dati sono memorizzati insieme a tutte le informazioni necessarie per l'analisi dei dati: copie del file di sequenza, di tutti i metodi e, nel caso di Intelligent Reporting, anche dei modelli di report impiegati con la sequenza. È possibile modificare i metodi della

sequenza con l'input specifico della sequenza, senza influenzare il metodo master originale. Il concetto di set di risultati rafforza il significato della sequenza come set di file di dati e metodi, in quanto coinvolti nella creazione del risultato.

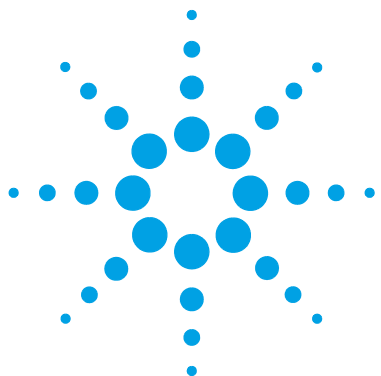
- Il ricalcolo e la rielaborazione dei dati sono entrambi disponibili nella vista **Data Analysis** attraverso la tavola di navigazione.
- Il concetto di set di risultati offre i presupposti ottimali per lo scambio di dati con un sistema di memorizzazione centralizzata dei dati.

Commutazione della creazione di cartelle esclusive

Per consentire l'adozione del concetto di memorizzazione dei dati delle versioni della ChemStation precedenti alla B.02.01, nella scheda **Sequence** della finestra di dialogo **Preferences** contiene una sezione **Data Storage**. In tale sezione è possibile scegliere **Unique Folder Creation ON** e **Unique Folder Creation OFF** (vedere “[Preferenze - Scheda Sequenza](#)”, pagina 102). Per impostazione predefinita, l'opzione **Unique Folder Creation ON** è selezionata. L'opzione **Unique Folder Creation ON** consente l'applicazione del concetto di memorizzazione dei dati descritto nel capitolo precedente.

1 **Concetti di base di OpenLAB CDS ChemStation Edition**

Struttura di dati della ChemStation



2 Utilizzo dei metodi

Che cos'è un metodo?	41
Parti di un metodo	42
Tipi di metodi	44
Metodi master	44
Metodi di sequenza	44
Metodi dei file di dati	45
Creazione di metodi	46
Modifica dei metodi	47
Parti di metodo da modificare	48
Struttura della directory dei metodi	48
Modifica dei metodi nella modalità in linea	50
Modifica dei metodi nella modalità non in linea	50
Amministrazione dei metodi	51
Struttura dei metodi in ChemStation Explorer	51
Visualizzazione del metodo di acquisizione	52
Aggiornamento dei parametri DA nel metodo master	55
Aggiornamento dei metodi	56
Salvataggio di un metodo come nuovo metodo master	58
Che cosa accade quando si esegue un metodo?	59
Riepilogo del funzionamento di un metodo	60
Comando o macro in pre-analisi (Lista di controllo del periodo di funzionamento)	62
Acquisizione dati (Lista di controllo del periodo di funzionamento)	62
Analisi dei dati (Lista di controllo del periodo di funzionamento)	62
Elaborazione dei dati personalizzata	63



2 Utilizzo dei metodi

Struttura di dati della ChemStation

Salvataggio dei dati secondo la Buona Prassi di Laboratorio (GLP) [64](#)

Comando o macro post-analisi [64](#)

Salvataggio di una copia del metodo con dati [64](#)

Salvataggio di una copia del metodo con dati come metodo DA.M (pre-definito di ChemStation) [65](#)

Il metodo è una parte vitale dell'applicazione ChemStation e questo capitolo ne spiega in dettaglio i concetti.

Che cos'è un metodo?

Un metodo comprende tutti i parametri per l'acquisizione e l'analisi di dati, insieme a eventuali funzioni pre e post analisi, per un determinato campione.

I file dei metodi disponibili (*.m) sono visualizzati in ChemStation Explorer. Per una navigazione rapida e semplice, è possibile aggiungere altri percorsi di metodi alla struttura di selezione di ChemStation Explorer utilizzando la scheda **Paths** della finestra di dialogo **Preferences**.

Parti di un metodo

Un metodo è identificato da un nome composto da un massimo di 40 caratteri alfanumerici. Il nome del file avrà sempre un'estensione .M per identificarlo come metodo. I metodi vengono memorizzati come directory che contengono singoli file relativi ai componenti del metodo.

Ogni metodo ha quattro componenti:

- informazioni sul metodo;
- controllo dello strumento;
- analisi dei dati;
- lista di controllo del periodo di funzionamento.

Informazioni sui metodi

Questa sezione viene usata per definire informazioni di tipo descrittivo sul metodo.

Controllo dello strumento

Definisce i parametri di controllo di uno strumento o i suoi componenti. In uno strumento per cromatografia liquida, i parametri, come la composizione della fase mobile, il flusso, il volume di iniezione, la lunghezza d'onda del rivelatore e così via, controllano la pompa, l'iniettore ed il rivelatore. In uno strumento per gascromatografia, i parametri, come la temperatura e la pressione di iniezione, il flusso in una colonna impaccata e così via, controllano lo strumento.

Analisi dei dati

Definisce i parametri di controllo dell'elaborazione dei dati.

- *Dettagli del segnale*

Definisce i segnali e le relative proprietà usate per la valutazione dei dati.

- *Eventi di integrazione*

Definisce gli eventi programmati nel tempo che si verificano a specifici tempi di ritenzione/migrazione su un cromatogramma/elettroferogramma.

Questi eventi programmati possono essere utilizzati per modificare le modalità di integrazione del segnale.

- *Identificazione dei picchi*
Definisce i parametri di elaborazione dei dati associati all'identificazione di picchi nel cromatogramma/elettroferogramma.
- *Quantificazione dei picchi*
Definisce i parametri di elaborazione dei dati con effetti sui calcoli quantitativi che determinano la quantità o la concentrazione del componente del campione che corrisponde a ogni picco.
- *Calibrazione e ricalibrazione*
Definisce i parametri di elaborazione dati che riguardano la calibrazione e la frequenza con la quale viene effettuata.
- *Campi personalizzati*
Definisce le proprietà dei campi personalizzati relativi al campione o composto disponibili per il metodo. I campi personalizzati consentono di aggiungere informazioni relative a un composto presente in un campione.
- *Report*
Con i report classici: definisce il formato del report stampato dopo un'analisi.
Con Intelligent Reporting: specifica il modello di report utilizzato per generare il report dopo un'analisi.

Lista di controllo del periodo di funzionamento

Definisce quali parti del metodo vengono eseguite durante il funzionamento.

La lista di controllo può essere usata per le seguenti operazioni:

- acquisire, memorizzare ed elaborare i dati per produrre un report,
- eseguire solo una parte del metodo,
- acquisire e memorizzare i dati senza analizzarli,
- rianalizzare i file di dati esistenti,
- usare macro personalizzate per l'analisi dei dati e le elaborazioni pre e post-analisi e
- salvare i risultati in un registro secondo la Buona Prassi di Laboratorio.

Tipi di metodi

Ci sono tipi diversi di metodi. A seconda della posizione di registrazione, i metodi vengono utilizzati come metodi master, come riferimenti all'interno del set di risultati di una sequenza o come registrazione effettiva delle impostazioni usate durante l'acquisizione dei dati.

Metodi master

Si tratta di metodi memorizzati sul disco del computer. I metodi archiviati hanno un nome costituito da un massimo di quaranta caratteri alfanumerici seguiti dall'estensione *.M. Le directory dei metodi master sono configurate nelle Preferenze (vedere [“Selezione del percorso”](#), pagina 68).

Il metodo master viene memorizzato in una sottodirectory di metodi, disponibile nel nodo Metodi di ChemStation Explorer, e non viene direttamente associato con alcun set di risultati.

Metodi di sequenza

Quando si esegue una sequenza (con l'opzione **Unique Folder Creation ON**, vedere [“Preferenze - Scheda Sequenza”](#), pagina 102), le copie di tutti i metodi master usati vengono memorizzate nel set di risultati insieme ai file di dati della sequenza. Questi metodi vengono direttamente collegati alla sequenza e utilizzati anche durante la rielaborazione della sequenza. Le modifiche apportate a questi metodi non vengono propagate ai metodi master per impostazione predefinita. Le modifiche hanno effetto non appena la sequenza parte viene avviata o continua dopo una pausa. Le modifiche vengono propagate anche ai singoli metodi (DA.M) durante la rielaborazione della sequenza e la generazione di qualsiasi report.

Metodi dei file di dati

Una copia dei parametri di analisi dei dati viene memorizzata come metodo del file di dati DA.M insieme ai file di dati. Il metodo del file di dati DA.M viene aggiornato automaticamente ogni volta che vengono generati risultati (acquisizione di dati, ricalcolo o generazione di report). Inoltre, viene caricato dalla ChemStation anche quando si ricalcolano i risultati in modalità Last Result (Ultimo risultato) (vedere [“Modalità ultimo risultato”](#), pagina 145).

Se si utilizza l'opzione **Save method with Data** nella lista di controllo del periodo di funzionamento, il metodo viene memorizzato anche come run.m nel file di dati.

In ChemStation Explorer è possibile caricare facilmente un metodo master o un metodo di sequenza facendo doppio clic sulla voce del metodo.

Creazione di metodi

La creazione di un nuovo metodo consiste sempre nella modifica di un metodo master o sequenza e nel salvataggio delle modifiche. È possibile sovrascrivere un metodo esistente o salvare un metodo come nuovo metodo master. È importante essere consapevoli del fatto che quando si modifica un metodo, la versione su disco rimane invariata fino a quando non si salvano le modifiche.

Si può scegliere la modalità di creazione di un metodo. È possibile crearne uno che esegua una sola o tutte le parti dell'analisi. Ad esempio si può creare un metodo che acquisisca solo dati. Quando arriva il momento di analizzare i dati e produrre un report, il metodo può essere ancora modificato per eseguire queste attività di elaborazione dati.

NOTA

Non cancellare mai il metodo predefinito (DEF_LC.M, DEF_CE.M o DEF_GC.M). Questi file vengono usati come modelli per creare metodi nuovi.

Modifica dei metodi

I metodi esistenti si possono modificare con la funzione Modifica intero metodo nel menu Metodo. L'utente viene guidato attraverso tutte le finestre di dialogo e alla fine può salvare il metodo. Il processo viene illustrato di seguito:

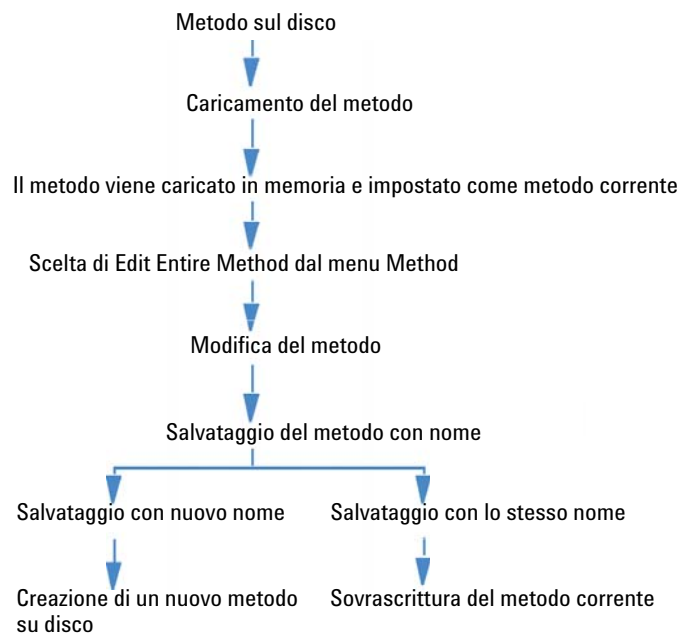


Figura 2 Modifica del metodo

Parti di metodo da modificare

Ogni metodo ha quattro componenti che possono essere modificati separatamente.

Alcune delle voci che seguono si riferiscono a finestre di dialogo specifiche, mentre altre sono solo descrittive.

- *Informazioni sul metodo* comprende:
 - una descrizione del metodo in forma di testo.
- *Controllo dello strumento* dipende dalla configurazione e può comprendere:
 - parametri del forno;
 - parametri dell'iniettore;
 - parametri del rivelatore;
- *Data Analysis* (Analisi dei dati) comprende:
 - dettagli del segnale;
 - parametri di integrazione;
 - parametri di quantificazione;
 - parametri di calibrazione,
 - parametri d'impostazione del campo personalizzato e
 - parametri per la stesura di rapporti di stampa.
- *Lista di controllo del periodo di funzionamento* comprende:
 - le parti di metodo da eseguire.

Struttura della directory dei metodi

Cartelle

Un metodo comprende un gruppo di file memorizzati nella directory del metodo (*.M).

Per impostazione predefinita, i metodi master vengono memorizzati sotto Chem32\1\METHODS. I percorsi aggiuntivi dei metodi master possono essere aggiunti usando le impostazioni delle preferenze. I metodi sequenza sono memorizzati nel set di risultati e i metodi del file di dati sono memorizzati come DA.M nella sottodirectory del file di dati.

File

I file di metodo che hanno un'estensione .MTH contengono i parametri impostati in formato UNICODE. Il file INFO.MTH comprende i parametri di controllo del metodo.

I file di metodo che contengono i parametri dello strumento hanno il nome del modulo analitico collegato. Ad esempio:

Tabella 5 Esempi di file di metodo

HPCE1.MTH	Contiene il metodo di acquisizione per l'elettroforesi capillare.
ADC1.MTH	Contiene il metodo di acquisizione per Agilent 35900. Se vengono configurati due strumenti identici, i file di metodo saranno chiamati ADC1.MTH, ADC2.MTH.
DAMETHOD.REG	Per la valutazione di dati.
LALS1.REG	Comprende i parametri per l'autocampionatore Agilent serie 1100/1200 quando è configurato un sistema LC modulare classico. I file di metodo per gli altri moduli Agilent serie 1100/1200 seguono la stessa convenzione Lxxx1.reg dove xxx è l'acronimo del modulo.
AgilentSamplerDriver1.Rapid Control.xxx.xml	Comprende i parametri per l'autocampionatore Agilent serie 1100/1200 quando è configurato un sistema LC modulare. Sono presenti diversi file .xml per le varie parti dei parametri (indicate dalle parte xxx del nome file). File .xml simili sono disponibili per gli altri moduli.

Modifica dei metodi nella modalità in linea

Quando una ChemStation in linea è inattiva, è possibile modificare tutte le parti di un metodo di sequenza. Quando una sequenza è attualmente in esecuzione, è possibile modificare tutti i parametri di acquisizione e alcuni parametri di analisi dei dati, come le impostazioni sotto Specifica report.

Le modifiche vengono immediatamente salvate e rese effettive per l'analisi attuale e per tutte le successive righe della sequenza che includono lo stesso metodo. Questo significa che è possibile anche modificare il metodo durante una pausa della sequenza o una sequenza parziale.

Modifica dei metodi nella modalità non in linea

È possibile modificare un metodo di sequenza in una ChemStation non in linea, mentre lo stesso metodo viene utilizzato per un'analisi in una ChemStation in linea. In questo scenario, è possibile modificare solo la parte Analisi dei dati nella sessione non in linea. Una volta salvate le modifiche nella sessione non in linea, le impostazioni DA modificate saranno utilizzate per la successiva analisi dei dati della sequenza corrente eseguita all'interno della sessione in linea.

Gli aggiornamenti dei metodi che riguardano la calibrazione non sono presi in considerazione. Anche le voci di cronologia non vengono integrate, cioè, se un metodo viene eseguito in una sessione in linea e lo si cambia nella sessione in linea e non in linea, l'audit trail del metodo conterrà solo le modifiche eseguite nella ChemStation non in linea.

NOTA

Se lo stesso metodo è caricato in ChemStation in linea e non in linea, durante l'esecuzione della sequenza è possibile modificare solo il metodo fuori linea. La modifica del metodo nella ChemStation non in linea non è possibile se la ChemStation in linea è inattiva.

Amministrazione dei metodi

Struttura dei metodi in ChemStation Explorer

La struttura dei metodi in ChemStation Explorer è divisa in due parti. La parte superiore mostra i metodi contenuti nel set di risultati attualmente caricato. La parte inferiore mostra i metodi nelle directory dei metodi master, che si configurano nella finestra di dialogo **Preferences**.

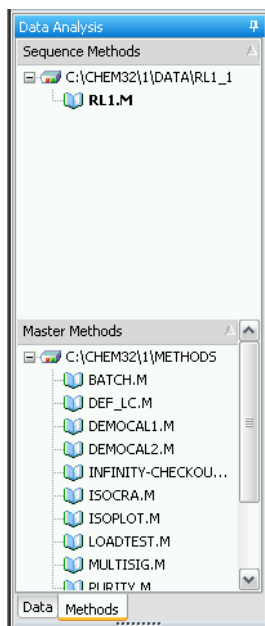


Figura 3 Struttura di navigazione nei metodi

Il metodo attualmente caricato viene sempre visualizzato in grassetto.

Mediante il trascinamento è possibile copiare facilmente i metodi master sui metodi sequenza. L'intero metodo (parametri DA e parametri ACQ) sarà copiato nel set di risultati.

Visualizzazione del metodo di acquisizione

È possibile accedere ad Acquisition Method Viewer tramite il menu **Instrument > Acquisition Method Viewer...** nella finestra **Method and Run Control**. Acquisition Method Viewer è disponibile per le sessioni ChemStation in linea e non in linea.

Acquisition Method Viewer consente di controllare i parametri di acquisizione memorizzati in un metodo, indipendentemente dalla configurazione corrente dello strumento. Nella finestra di dialogo è mostrata la configurazione dello strumento che era attiva quando il metodo è stato salvato nella ChemStation. Il visualizzatore non riporta i parametri dell'analisi dei dati. Acquisition Method Viewer non consente all'utente di apportare modifiche al metodo ChemStation caricato.

Acquisition Method Viewer mostra le impostazioni del metodo in modalità di sola lettura. Non offre funzionalità di modifica e salvataggio dei metodi.

NOTA

Nella finestra di dialogo sono mostrate le impostazioni dei metodi soltanto per gli strumenti o moduli con driver RC.Net. Non sono mostrate le impostazioni dei metodi ottenuti da driver classici.

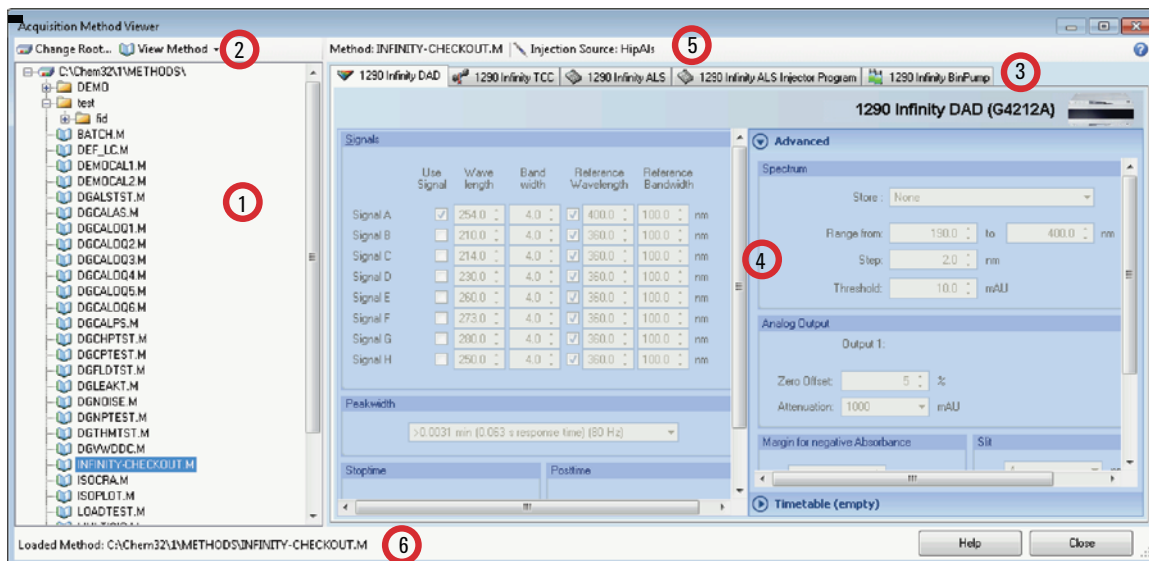


Figura 4 Finestra di dialogo Acquisition Method Viewer

- | | |
|---|---|
| 1 | Browser dei metodi |
| 2 | Barra degli strumenti |
| 3 | Schede dei moduli (sono visualizzate impostazioni dei metodi e impostazioni di pre-trattamento in uno strumento di comando a schede per tutti i moduli individuati nella configurazione in uso dello strumento) |
| 4 | Area del visualizzatore dei metodi |
| 5 | Nome del metodo, informazioni sulla sorgente dell'iniezione |
| 6 | Barra di stato |

Nel browser dei metodi (1) è visualizzato per impostazione predefinita il percorso preferito dei metodi. Fare clic su **Change Root...** nella barra degli strumenti per selezionare una diversa directory.

La barra degli strumenti (2) offre le seguenti opzioni **View Method**:

- **View with Original Configuration....**: carica nello strumento le impostazioni così come sono memorizzate nel metodo.
- **View with Instrument Configuration....**: applica il metodo memorizzato alla configurazione corrente dello strumento. Questa opzione è disponibile solo per gli strumenti in linea. Il metodo memorizzato potrebbe non essere compatibile con le impostazioni correnti dello strumento; in questo caso, se possibile, le impostazioni vengono adattate automaticamente; in caso contrario è possibile fare clic su **Resolve Settings** ed esaminare le informazioni dettagliate nella finestra di dialogo **Method Resolution Info**. Nella finestra di dialogo sono elencate incongruenze e differenze tra metodo non risolto e risolto.

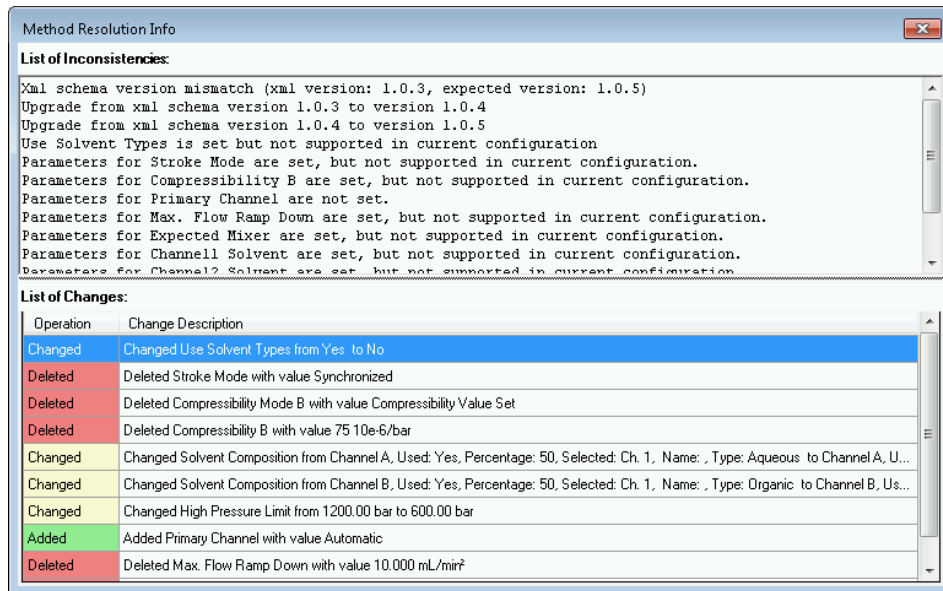


Figura 5 Finestra di dialogo **Method Resolution Info**

Aggiornamento dei parametri DA nel metodo master

L'opzione **Update Master Method** è disponibile nel menu **Method** e nel menu contestuale del metodo della sequenza in ChemStation Explorer. Il funzionamento esatto di questa funzione varia a seconda della modalità selezionata. In tutti i casi questa funzione aggiorna i parametri di analisi dei dati del metodo target.

NOTA

È importante notare che questa funzione aggiorna *solo* i parametri di analisi dei dati del metodo target e sovrascrive *tutti* i parametri di analisi dei dati.

Aggiornamento di un metodo master in modalità di rielaborazione o ricalcolo

In questa modalità, il comando **Update Master Method** è attivo solo per metodi di sequenza di un set di risultati. È possibile aggiornare il metodo master a cui si è fatto riferimento durante la creazione della sequenza. La condizione preliminare è l'esistenza del metodo master nella directory dei metodi master (il metodo master deve avere lo stesso nome del metodo della sequenza).

È possibile anche configurare i parametri della sequenza in modo da eseguire automaticamente questa funzione durante ogni acquisizione o rielaborazione di sequenza. Per ulteriori informazioni, consultare [“Amministrazione dei metodi”](#), pagina 51.

Aggiornamento di un metodo master in modalità ultimo risultato

In questa modalità, il comando **Update Master Method** è attivo sia per le sequenze sia per campioni singoli. È possibile trasferire i parametri correnti di analisi dei dati al metodo master utilizzato per l'ultima analisi dei dati. Tale metodo è mostrato nella colonna **Analysis Method** della tavola di navigazione.

Il comando è disponibile purché siano soddisfatte le seguenti condizioni:

- Il file del metodo esiste nel percorso indicato (ossia nome e percorso completo devono corrispondere).
- Per le sequenze: i dati della sequenza sono stati analizzati manualmente con un metodo master (non con il metodo della sequenza).

Aggiornamento di un metodo master qualsiasi in modalità ultimo risultato

In modalità Last Result (Ultimo risultato), è possibile trasferire i parametri di analisi dei dati a un metodo master qualsiasi, indipendentemente dal fatto che il metodo master sia correlato alla sequenza corrente o a una singola analisi. Per aggiornare un metodo master qualsiasi, selezionare **Menu > Update any Master Method ...**; quindi selezionare un metodo nella finestra di dialogo **Choose Master Method to update**. I parametri di analisi dei dati verranno quindi copiati nel metodo master selezionato.

Aggiornamento dei metodi

La finestra di dialogo **Update Methods** (vedere la figura seguente) consente di copiare i metodi dalla directory dei metodi master al set di risultati e viceversa. In entrambi i casi, viene copiato l'intero metodo (parametri DA e parametri ACQ).

È possibile aprire la finestra di dialogo dal menu **Method > Update Methods...** o dal menu contestuale del metodo della sequenza in ChemStation Explorer. La funzione è disponibile per i set di risultati in modalità di ricalcolo e rielaborazione.

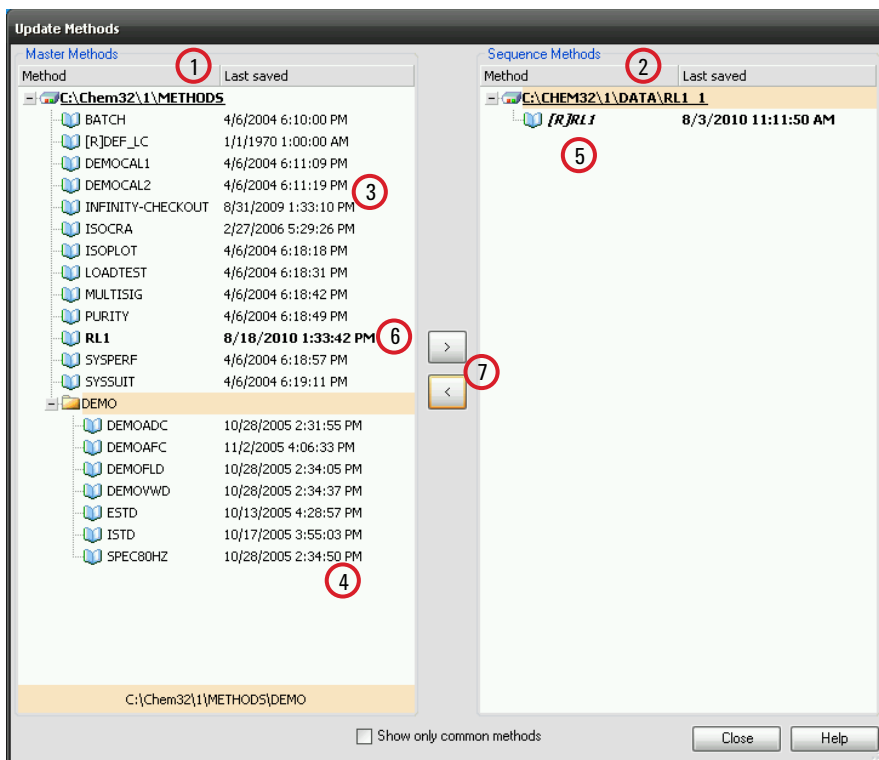


Figura 6 Update Methods, finestra di dialogo

- 1 A sinistra sono visibili i metodi in tutte le directory dei metodi master (così come sono configurati nelle preferenze).
- 2 A destra sono visibili i metodi presenti nel set di risultati attualmente caricato.
- 3 Per ogni metodo è visibile la data dell'ultimo salvataggio. Il suggerimento relativo alla data mostra l'ultima voce nella cronologia del metodo.
- 4 I metodi possono anche essere memorizzati in sottocartelle della directory dei metodi master.
- 5 I metodi a sola lettura sono indicati dal prefisso [R]. Il metodo della sequenza attualmente caricato è visualizzato in corsivo.
- 6 I metodi comuni al set di risultati della sequenza e al pool dei metodi master appaiono in grassetto. La corrispondenza dei metodi tiene conto solo del nome; se un nome di metodo esiste in più pool, ogni istanza viene considerata comune.
- 7 È possibile copiare i metodi tra un pool di metodi master e il set di risultati della sequenza usando il trascinamento o i pulsanti < e >. Non è possibile sovrascrivere i metodi contrassegnati come a sola lettura.

Salvataggio di un metodo come nuovo metodo master

È possibile salvare i parametri di analisi dei dati da DA.M come un nuovo metodo master. Tuttavia, il metodo DA.M non contiene i parametri di acquisizione. Affinché il nuovo metodo master disponga di un set valido di parametri di acquisizione, è necessario pertanto selezionare un altro metodo come modello per i parametri di acquisizione (vedere la figura seguente). Il nuovo metodo master conterrà quindi i parametri correnti di analisi dei dati ottenuti dal DA.M e i parametri di acquisizione ottenuti dal metodo modello selezionato. Il nuovo metodo viene creato nella cartella in cui è memorizzato il metodo modello di acquisizione.

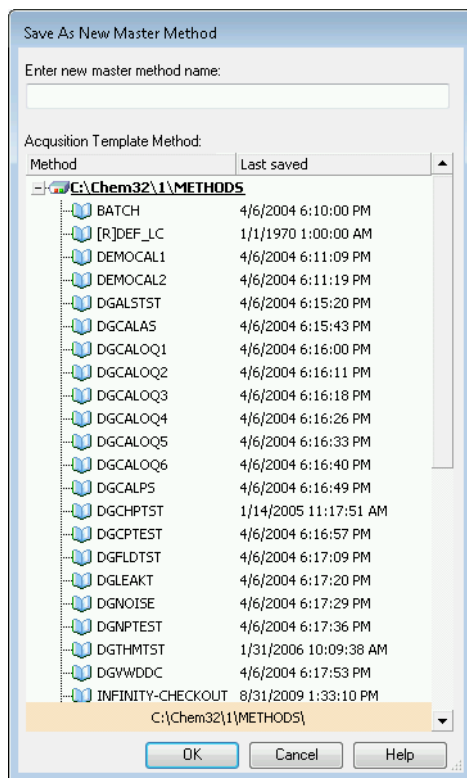


Figura 7 Finestra di dialogo Save as New Master Method

Che cosa accade quando si esegue un metodo?

La finestra di dialogo **Run Time Checklist** specifica le parti di metodo da eseguire quando viene avviata l'analisi.

La lista di controllo del periodo di funzionamento è costituita da otto parti:

- macro o comando pre-analisi;
- acquisizione dei dati;
- analisi dei dati standard;
- metodo di analisi per il secondo segnale (solo GC);
- analisi dei dati personalizzata;
- salvataggio dei dati GLP;
- comando o macro post-analisi;
- salvataggio di una copia del metodo con i relativi dati (RUN.M).

Quando si esegue un metodo, vengono eseguite le parti specificate nella finestra di dialogo Lista di controllo del periodo di funzionamento.

Riepilogo del funzionamento di un metodo

La lista che segue mostra il flusso di funzionamento di un metodo quando sono state selezionate tutte le parti di Run Time Checklist .

1 *Macro o comando in pre-analisi*

Effettua una funzione prima dell'inizio dell'analisi.

2 *Acquisizione dei dati*

Programma l'iniettore.

Inietta il campione.

Acquisisce i dati grezzi.

Archivia i dati.

3 *Salva una copia del metodo con dati (RUN.M)- opzionale in base alla Lista di controllo del periodo di funzionamento*

4 *Elaborazione dei dati (Dati di processo)*

Carica il file di dati.

Integra il file di dati.

Identifica e quantifica il picco.

Ricerca nella biblioteca di spettri, se disponibile.

Controlla la purezza del picco, se disponibile.

Salva una copia del metodo (DA.M) e stampa il report.

5 *Elaborazione dei dati personalizzata*

Esegue le macro stabilite.

6 *Salvataggio dei dati secondo la Buona Prassi di Laboratorio (GLP)*

Salva il registro binario GLPSave.Reg

7 *Macro o comando post-analisi*

Esegue un compito dopo il completamento dell'analisi. Ad esempio produce un rapporto di stampa personalizzato.

Che cosa accade quando si esegue un metodo?

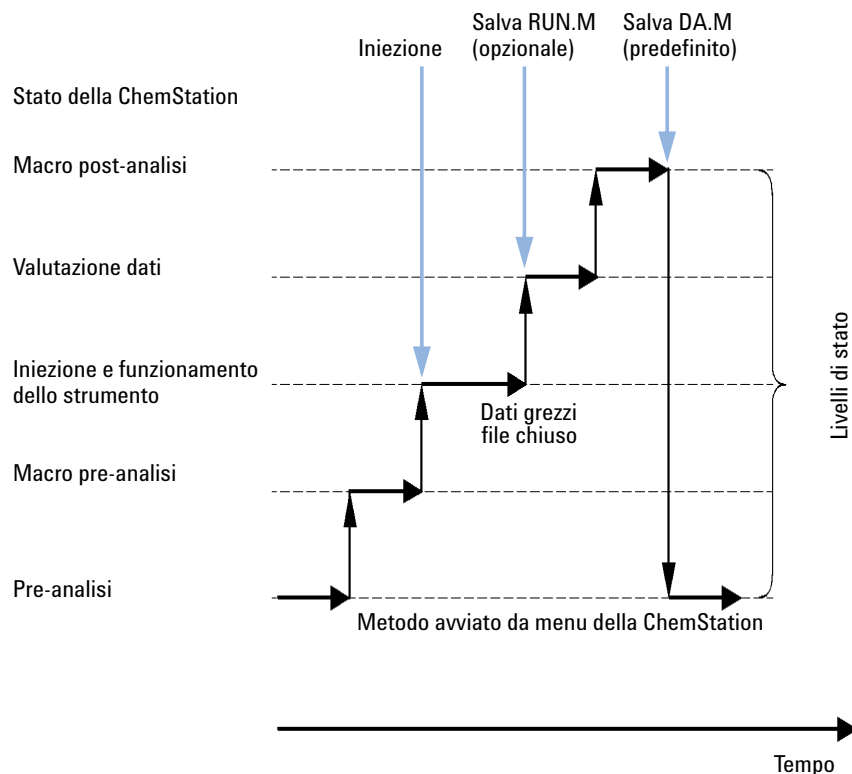


Figura 8 Funzionamento del metodo

La figura seguente fornisce una panoramica generale dello stato della ChemStation durante il funzionamento del metodo, dove tutte le parti di Lista di controllo del periodo di funzionamento sono state selezionate.

NOTA

Se è attiva la modalità "Creazione cartelle esclusive disattivata", non viene generato alcun DA.M. Per ulteriori dettagli, consultare la sezione ["Preferenze - Scheda Sequenza"](#), pagina 102.

Comando o macro in pre-analisi (Lista di controllo del periodo di funzionamento)

Se si specifica un comando o una macro di pre-analisi, viene eseguito prima dell'inizio dell'analisi. Questa parte viene di solito usata per personalizzare il sistema unitamente ad altri pacchetti software.

Acquisizione dati (Lista di controllo del periodo di funzionamento)

- Tutti i parametri sono stabiliti alle condizioni iniziali specificate nel metodo corrente.
- Il programma di iniezione viene eseguito se richiesto e l'iniezione viene effettuata da un vial definito come corrente.
- Il monitor mostra l'andamento dell'analisi comprese informazioni sul cromatogramma/elettroferogramma oltre ai dati spettrali, se disponibili.
- I dati vengono acquisiti e archiviati in un file.
- Quando termina l'acquisizione dei dati, i parametri di acquisizione del metodo attualmente eseguito vengono memorizzati per impostazione predefinita come ACQ.txt per il file di dati.

Analisi dei dati (Lista di controllo del periodo di funzionamento)

Dopo l'arresto, l'analisi viene terminata e tutti i dati grezzi vengono archiviati sul disco rigido del computer. La parte di software relativa all'analisi dei dati viene avviata quando tutti i dati grezzi sono stati archiviati.

Integrazione

- Gli oggetti di cromatogrammi/elettroferogrammi contenuti nel segnale sono integrati come specificato nella finestra di dialogo Integration Events (Eventi di integrazione).
- Vengono determinati l'inizio e la fine del picco oltre all'apice e al tempo di ritenzione/migrazione.
- Le linee di base di ogni picco vengono definite per determinare l'area e l'altezza finale del picco.
- I risultati dell'integrazione compaiono in una lista in Integration Results.

Identificazione e quantificazione dei picchi

- Utilizzando tempi di ritenzione/migrazione e qualificatori del picco opzionali, il software identifica i picchi facendo riferimenti incrociati fra questi e composti conosciuti definiti nella tavola di calibrazione.
- Utilizzando le altezze o le aree dei picchi, il software calcola la quantità di ogni componente usando i parametri di calibrazione della tavola.

Ricerca nelle librerie di spettri (solo per sistemi LC 3D, CE, CE/MS e LC/MS, disponibile con i report classici)

Per tutti i picchi per i quali sono disponibili spettri UV-visibile, è possibile effettuare una ricerca automatica nella libreria spettrale predefinita per identificare i componenti del campione in base agli spettri UV-visibile. Per informazioni più dettagliate, fare riferimento a *Conoscere il modulo di valutazione spettri*.

Controllo della purezza dei picchi (solo per sistemi LC 3D, CE, CE/MS e LC/MS)

Per un picco per il quale sono disponibili spettri UV-visibile, è possibile calcolare un fattore di purezza e memorizzarlo in un registro. La purezza può essere determinata automaticamente nell'ambito del metodo alla fine di ogni analisi, se la casella Check Purity (Controlla purezza) è selezionata quando si specifica l'esecuzione di una ricerca automatica nella libreria oppure quando si seleziona un opportuno stile di report. Per informazioni più dettagliate, fare riferimento a *Conoscere il modulo di valutazione spettri*.

Rapporto di stampa

Si tratta di un bollettino con i tipi e le quantità dei componenti identificati.

Elaborazione dei dati personalizzata

Permette di utilizzare macro personalizzate per valutare dati analitici.

Salvataggio dei dati secondo la Buona Prassi di Laboratorio (GLP)

Salva il registro binario GLPSave.Reg insieme con il metodo di analisi dei dati nella subdirectory predefinita. Questa funzione ha lo scopo di aiutare a provare l'originalità dei dati e la qualità delle singole analisi.

Il file binario GLPSave.Reg contiene le informazioni seguenti in un registro non modificabile e protetto da checksum:

- punti di impostazione chiave dello strumento (possono essere revisionati graficamente);
- segnali cromatografici o elettroferografici;
- risultati di integrazione;
- risultati quantitativi;
- metodo di analisi dei dati;
- registro elettronico.

Questi dati vengono salvati solo quando la funzione Save GLP Data viene attivata selezionando l'apposita casella della lista di controllo del periodo di funzionamento. È possibile rivedere i dati, ma non modificarli, dal menu di analisi dei dati in ChemStation.

Comando o macro post-analisi

Se viene specificato questo tipo di comando, sarà eseguito dopo l'elaborazione dei dati. Ad esempio la copiatura di dati su disco per un backup.

Salvataggio di una copia del metodo con dati

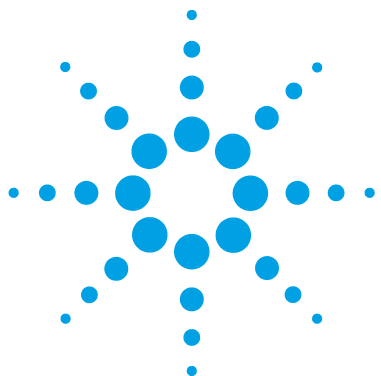
Viene effettuato dopo l'acquisizione dei dati e solo se l'opzione **Save method with Data** è attiva nella lista di controllo del periodo di funzionamento. Questa operazione copia il metodo usato per l'acquisizione nella directory dei dati, con il nome RUN.M. RUN.M contiene i parametri DA e ACQ. È a sola lettura e fornisce quindi un modo per ricostruire in futuro l'analisi, anche se il metodo è cambiato nel frattempo. È possibile vedere come le modifiche del metodo o dei parametri selezionati hanno influito sull'analisi, aiutando a ottimizzarlo.

Salvataggio di una copia del metodo con dati come metodo D.A.M (predefinito di ChemStation)

Indipendentemente dalle voci contrassegnate nella lista di controllo del periodo di funzionamento, una copia dei parametri di analisi dei dati del metodo eseguito viene salvata come metodo D.A.M insieme al report nel file di dati. Questa operazione viene eseguita alla fine della fase di *analisi dei dati standard* e anche quando si crea un report nella finestra Data Analysis (Analisi dei dati).

2 **Utilizzo dei metodi**

Che cosa accade quando si esegue un metodo?



3

Acquisizione dei dati

Che cosa si intende per acquisizione dei dati? 68

Monitor in linea 71

Monitor in linea per i segnali 71

Monitor in linea per spettri 71

Registro elettronico 72

Informazioni sullo stato 73

Stato della ChemStation 73

Barra di stato 73

Diagramma di sistema 74

Questo capitolo contiene un'introduzione al processo di acquisizione dei dati.



Che cosa si intende per acquisizione dei dati?

Durante la fase di acquisizione dei dati, tutti i segnali acquisiti dallo strumento analitico vengono convertiti da segnali analogici a segnali digitali all'interno del rivelatore. Il segnale digitale viene trasmesso a ChemStation in formato elettronico e salvato nel file dati del segnale.

Selezione del percorso

A partire dalla versione B.02.01 della ChemStation, la memorizzazione flessibile dei dati per le singole analisi e le sequenze consente di specificare diverse posizioni di salvataggio senza dover rieseguire la configurazione. La scheda **Paths** nella finestra di dialogo **Preferences** del menu **View** consente di aggiungere più percorsi oltre a quello predefinito C:\chem32\x\DATA (dove x è il numero dello strumento). Mediante i pulsanti **Add** e **Remove**, è possibile eliminare semplicemente i percorsi esistenti o passare a una posizione selezionata e aggiungere il percorso della nuova posizione in **Preferences**. Non è possibile rimuovere il percorso predefinito dall'elenco ma è possibile modificarlo in **Configuration Editor**.

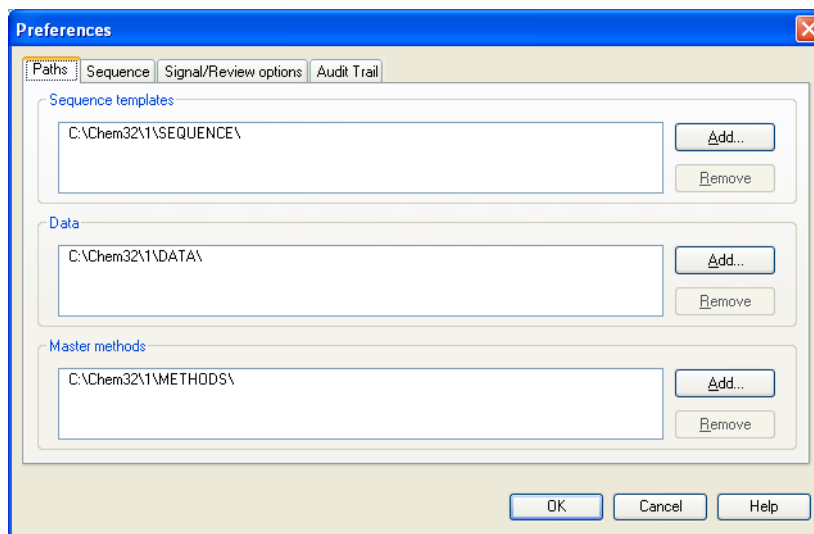


Figura 9 La scheda **Paths** nella finestra di dialogo **Preferences**

Tutti i nuovi percorsi di dati specificati sono disponibili per la selezione nelle finestre di dialogo **Sample Info** e **Sequence Parameters** quando si eseguono le analisi.

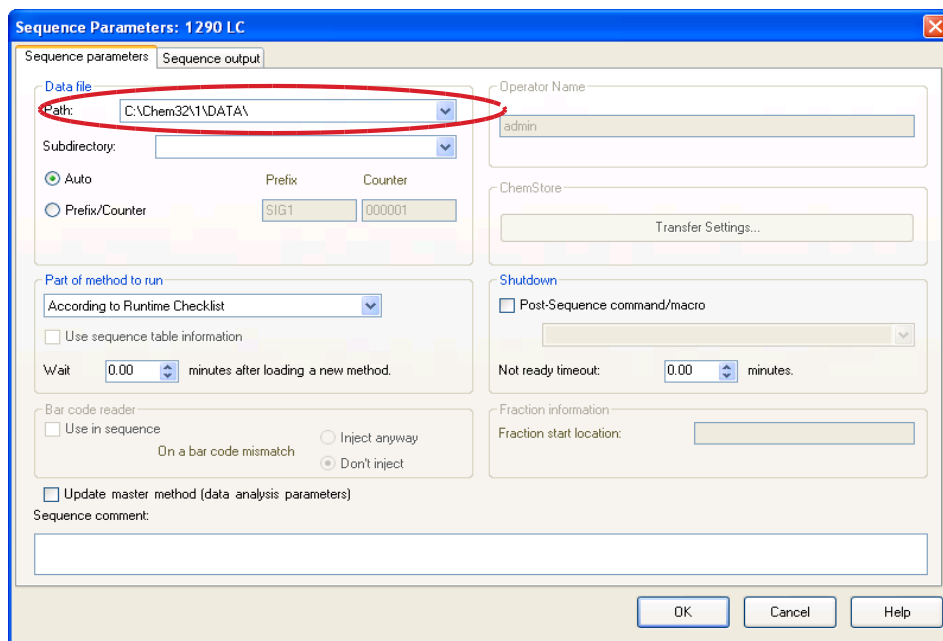


Figura 10 Selezione del percorso dei dati nella finestra di dialogo **Sequence Parameters**

Monitor in linea

Esistono due tipi di monitor in linea, uno relativo ai segnali e uno relativo agli spettri.

Monitor in linea per i segnali

Questo tipo di monitor consente di controllare parecchi segnali e, se supportato da uno strumento, diagrammi relativi alle prestazioni dello stesso, nella stessa finestra. È possibile scegliere i segnali che si desidera visualizzare e programmare il tempo e l'asse di assorbanza. Per i rivelatori che supportano questa funzione è disponibile un tasto di equilibratura.

Si può visualizzare la risposta di segnale assoluto tenendo premuto il tasto sinistro del mouse nella finestra del monitor.

Monitor in linea per spettri

Il monitor in linea per spettri illustra l'assorbanza come funzione della lunghezza d'onda. È possibile regolare sia l'intervallo di lunghezze d'onda visualizzato sia la scala di assorbanza.

Registro elettronico

Visualizza messaggi creati dal sistema analitico. Possono essere messaggi di errore, di sistema o di segnalazione di eventi in un modulo. Il registro elettronico riporta questi eventi indipendentemente dal fatto che possano essere o meno visualizzati. Per ottenere ulteriori informazioni su un evento presente nel registro elettronico, fare doppio clic sulla riga desiderata per visualizzare un testo descrittivo.

Informazioni sullo stato

Stato della ChemStation

La finestra Status (Stato) illustra un riepilogo delle condizioni del software della ChemStation.

Quando viene eseguita una sola analisi:

- sulla prima riga della finestra Status (Stato) della ChemStation viene visualizzato Run in Progress (Analisi in corso);
- sulla seconda riga viene visualizzato lo stato del metodo corrente;
- sulla terza riga viene visualizzato il nome del file di dati grezzi insieme al tempo effettivo dell'analisi in minuti. Per uno strumento GC vengono visualizzati anche i file relativi agli iniettori anteriore e posteriore.

Le finestre Instrument Status (Stato strumento) forniscono informazioni sui moduli ed i rivelatori dello strumento. Mostrano anche le condizioni dei singoli componenti e dove necessario anche dati su pressione, gradiente e flusso.

Barra di stato

L'interfaccia grafica per l'utente di ChemStation comprende barre di strumenti e una barra di stato nella visualizzazione Controllo metodo ed esecuzione di ChemStation. La barra di stato comprende un campo che visualizza lo stato del sistema ed informazioni sul metodo corrente caricato e sulla sequenza. Se questi ultimi sono stati modificati dopo il caricamento, sono contrassegnati da un ingranaggio giallo. Per un modulo Agilent Serie 1100/1200, il simbolo EMF giallo indica che i limiti di utilizzo per le parti di consumo (ad esempio la lampada), sono stati superati.

Diagramma di sistema

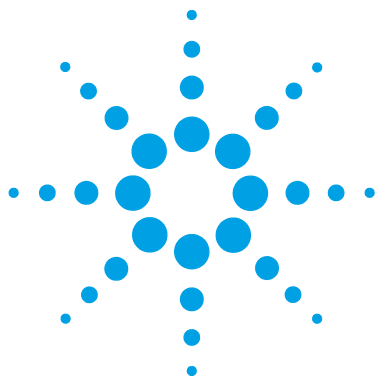
Se supportato dagli strumenti analitici configurati (ad esempio i moduli Agilent Serie 1200 Infinity per LC o il gascromatografo Agilent Serie 6890) è possibile visualizzare un diagramma del sistema gestito dalla ChemStation. Ciò consente di controllare rapidamente le condizioni del sistema. Scegliere System Diagram dal menu di View di Method o Run Control View per attivare il diagramma. Si tratta di una rappresentazione grafica dell'intero sistema della ChemStation. Ogni componente è rappresentato da un'icona. Lo stato viene visualizzato utilizzando il codice di colori descritto di seguito.

Tabella 6 Colori usati per indicare lo stato del modulo o strumento

Colore	Status
grigio scuro	non in linea
grigio chiaro	Standby (es. Lampade spente)
giallo	not ready
verde	pronto
porpora	pre-analisi, post-analisi
blu	in funzione
rosso	errore

Inoltre, è possibile visualizzare una lista delle impostazioni dei parametri in uso. Oltre a fornire una visione generale del sistema, il diagramma consente di accedere velocemente alle finestre di dialogo per impostare i parametri di ogni componente del sistema.

Per ulteriori informazioni sul diagramma del sistema, consultare la parte relativa agli strumenti della Guida in linea.



4 Automazione/Sequenze

Che cos'è l'automazione?	77
Che cosa sono le sequenze e i modelli di sequenze?	78
Parametri di sequenza	79
Tavola di sequenza	80
Creazione di sequenze(sequenze e modelli di sequenza)	81
Utilizzo di Sequence Table Editor	81
Come usare il tasto Insert Vial Range (Inserisci serie di vial)...	81
Come usare il tasto Append Line (Aggiungi linea)	82
Utilizzo dei pulsanti dei campi personalizzati	82
Easy Sequence	83
Panoramica	83
Utilizzo della scheda Easy Sequence (Sequenza)	84
Utilizzo della scheda Easy Sequence Setup (Modello)	86
Utilizzo delle sequenze (sequenze e modelli di sequenza)	88
Acquisizione dei dati in una sequenza	88
Acquisizione di dati per singole analisi	90
Aggiornamento automatico dei metodi master	90
Campioni prioritari	91
Sequenze con campioni di controllo	92
Sequenze con bianchi di riferimento	92
Come arrestare temporaneamente una sequenza	93
Come bloccare una sequenza	93
Come interrompere una sequenza	93
Esecuzione di una sequenza parziale	94
Creazione di un set di risultati autoassemblato	97
File di registrazione della sequenza	99
Cosa succede quando si esegue una sequenza?	100



Struttura del file di dati della sequenza	102
Preferenze - Scheda Sequenza	102
Struttura del file di dati con la creazione cartelle esclusive attiva	106
Attribuzione del nome ai file di dati in una sequenza	107
Attribuzione automatica del nome ai file di dati in una sequenza	107
Come inserire nomi di file manualmente	108
Migrazione del set di risultati	109
Funzionamento post-sequenza	111
Not Ready Timeout (Timeout non pronto) (solo cromatografia liquida ed elettroforesi capillare)	111
Wait Time (Tempo di attesa) (solo cromatografia liquida ed elettroforesi capillare)	112
Ricalibrazione automatica	113
Come specificare le ricalibrazioni	114
Parametri di ricalibrazione nella tavola di sequenza	114
Tipi di sequenze	117
Sequenze di calibrazione esplicite	117
Sequenze di calibrazione cicliche a livello singolo	117
Sequenze di calibrazione cicliche multilivello	118
Calibrazioni cicliche ed esplicite insieme	121
Sequenze di calibrazione ciclica in bracketing	123
Sequenze di ricalibrazione ciclica con più vial contenenti la stessa diluizione di uno standard	127

Questo capitolo descrive i concetti legati all'automazione. In particolare, spiega come usare le sequenze con la ChemStation, cosa accade quando si esegue una sequenza e come personalizzare le sequenze.

Che cos'è l'automazione?

L'automazione è l'analisi non sorvegliata di più iniezioni.

La parte di software della ChemStation che riguarda le sequenze permette di automatizzare l'acquisizione e la valutazione dei dati oltre che la stesura di rapporti di stampa.

Che cosa sono le sequenze e i modelli di sequenze?

Una sequenza è una serie di istruzioni che rende automatica l'analisi di campioni. Può essere utilizzata per iniettare automaticamente i campioni, per acquisire e analizzare dati secondo il metodo definito per il campione specificato. Ciascun vial di campione in una sequenza può essere analizzato con un diverso metodo analitico che utilizza diverse impostazioni cromatografiche o elettroferografiche e diversi parametri di valutazione.

ChemStation introduce due modalità di archiviazione dei dati per consentire la scelta del modello di archiviazione corrispondente al proprio flusso di lavoro. Tali modalità influiscono sull'uso della sequenza:

- **Unique Folder Creation** attivata
- **Unique Folder Creation** disattivata

L'attivazione della funzione **Unique Folder Creation** per la congruenza dei dati campione utilizza le sequenze come "modelli di sequenza" da utilizzare per eseguire più volte l'acquisizione; tuttavia, tali modelli non vengono utilizzati per la rielaborazione in **Data Analysis**. Quando viene eseguito il modello di sequenza, viene creato un set di risultati che contiene tutti i file relativi. Se il modello di sequenza viene riutilizzato, viene creato ogni volta un nuovo set di risultati

La disattivazione della funzione **Unique Folder Creation** comporta l'archiviazione di tutti i dati in una directory. I file *.s di sequenza non vengono utilizzati come modelli di sequenza, pertanto la riesecuzione di una sequenza potrebbe provocare la sovrascrittura dei dati presenti, se l'utente non cambia directory di archiviazione.

Le sequenze e i modelli di sequenza disponibili (*.s) sono visualizzabili in ChemStation Explorer. Per una navigazione rapida e semplice, è possibile aggiungere altri percorsi di sequenza/modello di sequenza alla struttura di selezione di ChemStation Explorer utilizzando la scheda **Paths** della finestra di dialogo **Preferences**.

Parametri di sequenza

La finestra di dialogo **Sequence Parameters** contiene informazioni comuni a tutti i vial di campioni di una sequenza. Utilizzare questa finestra di dialogo per effettuare le seguenti operazioni.

- selezionare la directory dei dati utilizzando la casella combinata **Path** e
- specificare come deve essere elaborata la sequenza scegliendo una parte specifica dei parametri Metodi ed Esecuzione.

Ad esempio si può scegliere di:

- eseguire la lista di controllo del periodo di funzionamento,
- eseguire solo l'acquisizione, oppure
- eseguire solo la rielaborazione (per i dati acquisiti fino alla ChemStation Rev. B.01.03. oppure per i dati acquisiti con l'opzione **Unique Folder Creation OFF**.

NOTA

I dati della sequenza acquisiti con le versioni ChemStation fino a B.01.03 o acquisiti con l'opzione **Unique folder Creation OFF** devono essere rielaborati tramite l'opzione **reprocess** nella finestra **Method and Run Control**.

I dati della sequenza acquisiti con le versioni ChemStation B.02.01 e superiori devono essere rielaborati tramite l'opzione **reprocess** nella tavola **Data Analysis Navigation table**.

Se si sceglie l'opzione **reprocess** si può stabilire se usare i dati relativi al campione definiti al momento della sua analisi originaria oppure attivare la casella di controllo **Use Sequence Table information** per utilizzare dati aggiornati inserendo i dati nuovi nella tavola di sequenza:

- Specificare cosa accade quando finisce la sequenza utilizzando i parametri di **shutdown**.
- Specificare se deve essere usato il codice a barre nella sequenza e come devono essere trattate le mancate corrispondenze se sul sistema è installato un lettore di codici a barre.

Tavola di sequenza

La tavola della sequenza determina quali metodi vengono usati per analizzare i vial di campione e l'ordine secondo il quale vengono analizzati. Questa tavola contiene anche informazioni sul campione compreso il nome e i parametri quantitativi.

Per strumenti che supportano campionature doppie (GC) viene visualizzato il gruppo di iniezione. Scegliendo **Front** o **Back** si visualizzano le linee della tavola di sequenza e la condizione dell'iniettore in quel momento.

Per una descrizione delle colonne contenute in questa tavola e delle loro modalità di interazione con le informazioni archiviate con il metodo, vedere i riferimenti nella Guida in linea.

Creazione di sequenze(sequenze e modelli di sequenza)

Usare la tavola di sequenza per precisare i campioni, i metodi ed i vial da analizzare nella sequenza. La tavola elenca ogni campione nell'ordine in cui verrà analizzato e contiene le informazioni necessarie su vial, metodo e calibrazione per ciascun campione.

Utilizzo di Sequence Table Editor

Se si desidera cambiare la visualizzazione e il contenuto della tavola di sequenza, è possibile aprire Sequence Table Editor facendo clic su **Configure Table** nell'angolo in basso a destra della Tavola di sequenza. Sequence Table Editor si apre e consente di specificare se in Sequence table (Tavola di sequenza) è visualizzata una determinata colonna. Inoltre è possibile definire la larghezza di ogni colonna della tavola di sequenza. In base ai pacchetti software installati, verranno aggiunti altri campi colonna, ad esempio il campo **Target Mass** se è installato un LC/MS.

Come usare il tasto Insert Vial Range (Inserisci serie di vial)...

Se si hanno molti campioni che si servono dello stesso metodo, è possibile inserire i campioni nella Sequence Table (Tavola di sequenza) utilizzando la funzione Insert Vial Range (Inserisci serie di vial). Questa funzione copia il nome del metodo, la serie di vial, il numero di iniezioni per vial e, se richiesto, la quantità di campione, la quantità di standard interno, il moltiplicatore e la diluizione. Il sistema inserisce l'informazione per ogni vial della serie.

Come usare il tasto Append Line (Aggiungi linea)

Per aggiungere una nuova linea alla fine della tavola di sequenza scegliere il tasto Append Line (Aggiungi linea).

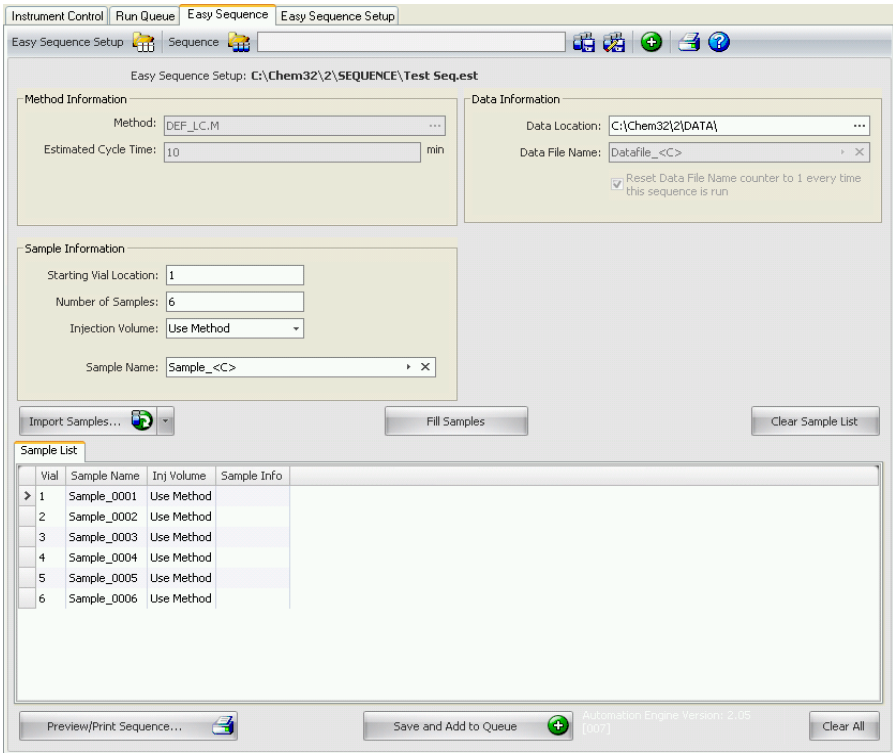
Utilizzo dei pulsanti dei campi personalizzati

Se nel metodo usato nella tabella di sequenza sono stati impostati campi personalizzati, selezionare il pulsante Campi personalizzati per potere modificare i valori dei campi personalizzati per ciascun campione (campi personalizzati relativi al campione) o per ciascun composto presente nel metodo di un campione (campi personalizzati relativi al composto).

Easy Sequence

Panoramica

Easy Sequence è un'interfaccia utente che serve a impostare in modo rapido e facile le sequenze dai modelli. Il modello specifica i parametri che dovrebbero essere visualizzati o modificati dall'utente. L'impostazione della calibrazione fornisce un'interfaccia a trascinamento di facile utilizzo per specificare i tipi di calibrazione e le posizioni del campione, oltre a mostrare una panoramica della sequenza. Con **Easy Sequence**, più sequenze possono essere inviate a Run Queue per essere eseguite sul sistema di elaborazione dei dati.



Easy Sequence Setup: C:\Chem32\2\SEQUENCE\Test Seqest

Method Information

Method: DEF_UC.M ...

Estimated Cycle Time: 10 min

Data Information

Data Location: C:\Chem32\2\DATA\ ...

Data File Name: Datafile_<C> ...

☒ Reset Data File Name counter to 1 every time this sequence is run

Sample Information

Starting Vial Location: 1

Number of Samples: 6

Injection Volume: Use Method

Sample Name: Sample_<C> ...

Import Samples... Fill Samples Clear Sample List

Vial	Sample Name	Inj Volume	Sample Info
1	Sample_0001	Use Method	
2	Sample_0002	Use Method	
3	Sample_0003	Use Method	
4	Sample_0004	Use Method	
5	Sample_0005	Use Method	
6	Sample_0006	Use Method	

Preview/Print Sequence... Save and Add to Queue Automation Engine Version: 2.05 (2007) Clear All

Figura 11 La scheda Easy Sequence

Utilizzo della scheda Easy Sequence (Sequenza)

La scheda **Easy Sequence** viene usata per creare una sequenza dal modello creato nella Configurazione **Easy Sequence**. Possono anche essere importati i campioni salvati in formato CSV.

Per definire una sequenza

- 1 Dalla scheda **Easy Sequence**, aprire un modello facendo clic sull'icona **Open Easy Sequence Setup**.
- 2 Eseguire gli aggiornamenti, se necessario. Questi possono includere posizioni del vial campione, posizioni del vial del calibrante, dati o posizione della sequenza. I parametri disponibili per la modifica dipendono dalla configurazione del modello.
- 3 Se i campioni precompilati non corrispondono alle posizioni del nuovo campione, fare clic su **Fill Samples** per riempire di nuovo la tabella.
- 4 Fare clic su **Preview/Print Sequence...** per vedere in anteprima la sequenza
- 5 Salvare la sequenza.

SUGGERIMENTO

La sequenza può essere modificata purché il suo stato sia **Pending** nella coda.

- 6 Fare clic su **Save and Add to Queue** per inviare la sequenza alla coda delle sequenze.

Per importare i dati del campione

Il set di dati del campione può essere importato in **Easy Sequence**. Prima di importare i campioni, il file CSV deve essere configurato e formattato correttamente. Fare riferimento alla guida in linea per ulteriori informazioni sul modo per creare un file di dati CSV per il campione.

- 1 Dalla scheda **Easy Sequence**, aprire un modello facendo clic sul pulsante **Open Easy Sequence Setup**
- 2 Fare clic su **Import Samples...**
- 3 Selezionare il file CSV che si desidera importare.
Vengono importati tutti i campi validi.

NOTA

Per importare i dati del campione nell'**Back Sample List**, assicurarsi che l'**Back Sample List** sia selezionato e visualizzato prima di premere il pulsante **Import Samples**.

- 4 Verificare i campi esaminando l'elenco dei campioni.

Utilizzo della scheda Easy Sequence Setup (Modello)

Easy Sequence Setup viene utilizzata per creare i modelli che rappresentano il punto di partenza per creare le sequenze. Ci sono due pannelli: Campioni e calibrazione. Il pannello **Samples** specifica il metodo, il campione, i dati e le informazioni sulla sequenza. Il modello viene utilizzato anche per specificare quali parametri sono nascosti o a sola lettura. Il pannello **Calibration** fornisce un'interfaccia grafica per configurare e visualizzare le analisi di calibrazione. Fornisce un'interfaccia a trascinamento di facile utilizzo per specificare i tipi di calibrazione, cicliche e in bracketing, e le posizioni del campione.

Creazione di un modello Easy Sequence:

- 1 Dalla scheda **Easy Sequence Setup**, selezionare il pannello **Samples**. Aprire un modello esistente o creare un nuovo modello.
- 2 Selezionare il **Method**. Se la sorgente di iniezione del metodo è doppia, saranno mostrate le opzioni a doppia iniezione. Può essere specificato un metodo di analisi posteriore per il segnale posteriore. Il metodo è l'unico parametro richiesto per un modello.
- 3 Se lo si desidera, immettere la durata stimata (in minuti) di un'analisi campione. Questo è il tempo misurato dall'inizio di un campione parte all'inizio del campione successivo. Questo parametro si utilizza per prevedere la durata totale prevista per la sequenza. Lasciare in bianco questo campo se non si desidera usare la funzionalità Tempo di ciclo stimato.
- 4 Specificare la **Starting Vial Location**, il **Number of Samples** e il **Sample Name**.
- 5 Selezionare la **Data Location**.
- 6 Selezionare la **Sequence Location** e specificare il **Sequence Name**.
- 7 Immettere qualsiasi commento per il modello.
- 8 Specificare quali parametri sono nascosti o a sola lettura. Immettere un valore predefinito per **injections/vial**, **sample amount**, **ISTD amount**, **injection volume**, ecc. Questo aiuta a ridurre al minimo la possibilità di errori quando si crea una sequenza nella scheda **Easy Sequence**.
- 9 Salvare il modello.

Per definire le calibrazioni:

Prerequisiti

Il metodo usato nel modello dovrebbe essere stato calibrato con i livelli necessari.

- 1 Dalla scheda **Easy Sequence Setup**, selezionare il pannello **Calibration**
- 2 Selezionare **Cyclic**, **Bracketing** o **Simple Calibration** dall'elenco a discesa **Calibration Mode**.
- 3 Il **Sequence Diagram** contiene le seguenti sezioni:
 - **Sequence Start**
 - **Bracketing/Cyclic**
 - **Samples/Injections**
 - **Sequence End**
- 4 Nell'area **Samples** della sequenza, impostare l'**Calibration Interval** basato sul numero di campioni o sul numero di iniezioni.
- 5 Configurare il **Sample type**, **Blank**, **Calibrant** o **QC Sample** trascinando l'icona dall'area **Sample Type** alla sezione **Sequence Diagram**.
- 6 Impostare i parametri per ogni tipo di campione e impostare a **Hide** o **Read-Only**.
- 7 Verificare la modalità di calibrazione nella Panoramica **Easy Sequence**.
- 8 Salvare il modello.

Utilizzo delle sequenze (sequenze e modelli di sequenza)

È possibile creare ed accedere alle sequenze e ai modelli di sequenza dal menu Sequenza. Le sequenze possono essere create e salvate come i metodi. Quando si salva una sequenza, viene creato un file con estensione .S. Se si desidera modificare la sequenza o usarla ancora, si può accedere alla sequenza usando ad esempio l'opzione Carica sequenza dal menu Sequenza.

Acquisizione dei dati in una sequenza

Per analizzare una sequenza, è necessario che siano disponibili metodi predefiniti. Si tratta dei metodi master descritti in precedenza. Solitamente, i metodi master e i modelli di sequenza vengono utilizzati nella finestra **Method and Run Control** di ChemStation. Per tale motivo, nella finestra **Method and Run Control** è disponibile ChemStation Explorer, che consente di accedere ai metodi master e ai modelli di sequenza.

Il modello di sequenza fa riferimento a tali metodi nella tavola di sequenza.

Come descritto in precedenza, quando viene eseguita una sequenza con il modello di sequenza <nome_sequenza>.S e viene utilizzato il metodo master <nome_metodo>.M, viene creata una nuova cartella contenente tutti i file risultanti dall'analisi della sequenza ("set di risultati").

La posizione di tale cartella è determinata dalle impostazioni della finestra di dialogo **Sequence Parameters** mentre il nome della cartella è determinato dalla scheda **Sequence** della finestra di dialogo **Preferences**. Per impostazione predefinita il nome è <SeqName> <Date> <Time>, ma può essere configurato utilizzando i token oppure inserendo manualmente qualsiasi nome. Per ulteriori informazioni sull'uso dei token, consultare la sezione "Nomi dei file e token", pagina 16. È possibile utilizzare i seguenti token:

- **Current date**
- **Current time**
- **User name**
- **Instrument name**
- **Sequence name**

- **Counter**
- **Computer name**

Se **Name Pattern** non produce nomi esclusivi per i set di risultati, ChemStation aggiunge un contatore per garantirne l'univocità.

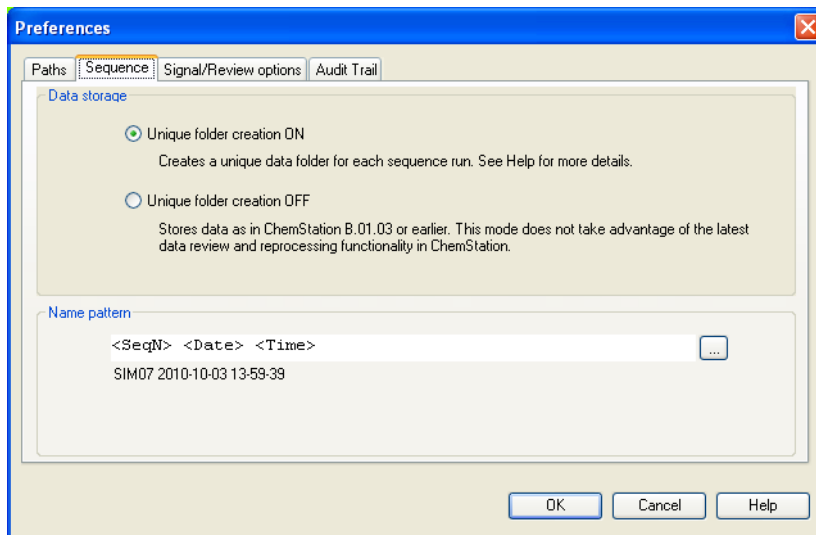


Figura 12 La finestra di dialogo **Preferences** / scheda **Sequence**

All'inizio di una sequenza di acquisizione, il metodo specificato nella tavola di sequenza viene copiato dalla cartella dei metodi master nel set di risultati. Inoltre, viene creata una copia della sequenza, che viene inserita insieme al file di log della sequenza e al file batch (*.b) nel set di risultati. Tutti gli aggiornamenti del metodo (ad esempio gli aggiornamenti della tavola di calibrazione) vengono scritti in questo metodo del set di risultati. Se si utilizza Intelligent Reporting, i modelli di report selezionati nei Parametri della sequenza o nelle Proprietà del metodo sono copiati anche nel set di risultati. Tutti i file necessari sono così disponibili per future revisioni e rielaborazioni dei dati, senza le modifiche applicate al metodo master o al modello di sequenza per altre analisi di sequenze.

Durante l'acquisizione, i file di dati vengono memorizzati nel set di risultati. All'interno di ciascun file di dati (*.D), viene salvata una copia del metodo della sequenza per l'analisi specifica. Il file ACQ.txt contiene i parametri di acquisizione del metodo della sequenza, conservando lo stato del metodo al momento dell'acquisizione del file di dati specifico. La cartella DA.M contiene una copia dei parametri di analisi dei dati utilizzati nel metodo della sequenza.

Con questi file salvati nella cartella della sequenza, tutte le attività di revisione e rielaborazione dei dati possono essere eseguite senza alterare il metodo master o il modello di sequenza. Se necessario, è possibile salvare nel metodo master anche le modifiche apportate al metodo.

NOTA

Il set di risultati deve sempre contenere la serie completa di tutti i file di dati (*.D). In caso vengano eliminate parti dei file di dati, il caricamento del set di risultati nella memorizzazione centralizzata dei dati causerà dei problemi. Se si desidera ridurre una sequenza, è sufficiente creare un set di risultati autoassemblati dalla serie ridotta di linee di sequenza (vedere [“Creazione di un set di risultati autoassemblato”](#), pagina 97).

Acquisizione di dati per singole analisi

Per singole analisi, il file di dati viene salvato direttamente nella relativa sottodirectory. Poiché viene impiegato un solo metodo per una singola analisi, non è necessario copiare tale metodo nella sottodirectory in quanto tutte le azioni vengono eseguite direttamente con il metodo master. Dopo il completamento della parte di acquisizione del metodo, una copia dei parametri di acquisizione viene salvata nel file ACQ.txt. Una copia dei parametri di analisi dei dati viene salvata nella directory di archivio dei dati (DA.M) dopo l'esecuzione della parte di analisi dei dati del metodo master.

Aggiornamento automatico dei metodi master

Con questa funzione ChemStation aggiorna automaticamente i parametri di analisi dei dati dei metodi master copiati nel set di risultati. È possibile utilizzare questa funzione, ad esempio, per aggiornare le tavole di calibrazione dei metodi master dopo aver rielaborato una sequenza con ricalibrazioni.

È possibile attivare questa funzione nella finestra di dialogo **Sequence Parameters** (vedere la figura seguente). Durante l'acquisizione, ChemStation aggiorna i parametri di analisi dei dati dei metodi master per tutti i metodi della sequenza nel set di risultati.

I parametri di analisi dei dati dei metodi master sono aggiornati anche dopo aver rielaborato la sequenza. La condizione preliminare è che il metodo master corrispondente (un metodo avente lo stesso nome del metodo di sequenza) esista ancora nella stessa directory dei metodi master in cui si trovava quando era stato copiato nel set di risultati.

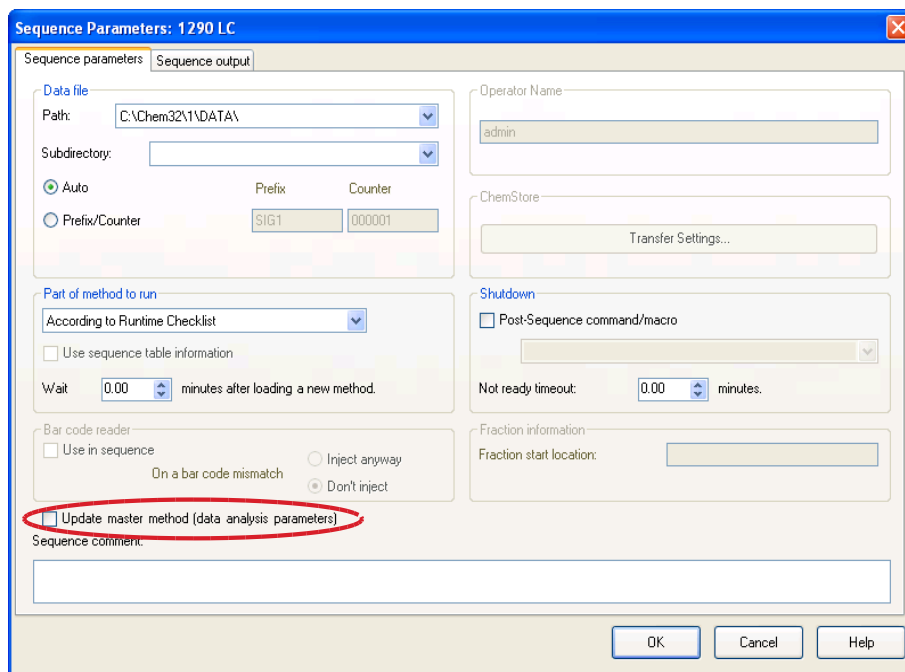


Figura 13 L'opzione **Update master methods** nella finestra di dialogo **Sequence Parameters**

NOTA

Poiché questa funzione incide sulle prestazioni, si consiglia di non utilizzarla se le sequenze includono centinaia di metodi.

Campioni prioritari

Una sequenza in esecuzione può essere temporaneamente arrestata dopo il completamento del metodo corrente. La sequenza può essere arrestata per consentire l'analisi di un campione prioritario dello stesso metodo o di un altro. La sequenza può quindi essere ripresa e continua con il campione in corso di analisi al momento dell'interruzione.

Sequenze con campioni di controllo

Nel campo Sample Type della tavola di sequenza è possibile specificare campioni di controllo. Il metodo utilizzato per analizzare il campione di controllo deve contenere una tavola di calibrazione con i limiti per uno dei composti. Se i limiti vengono superati, la sequenza viene arrestata e riportato un messaggio sul registro elettronico. Se si sta utilizzando uno dei rapporti di stampa della ChemStation, anche i limiti del campione di controllo vengono stampati sui rapporti delle analisi. Per informazioni su come definire una sequenza con campioni di controllo, consultare la Guida in linea.

Sequenze con bianchi di riferimento

Per valutare il rapporto segnale-rumore sono necessari dei segnali di riferimento come definito dalla Farmacopea Europea. È possibile specificare il file di dati di riferimento nella tavola di sequenza scegliendo il tipo di campione **Blank** per i campioni corrispondenti.

In caso vengano utilizzati più file di riferimento, l'ordine dei file è essenziale. Con la ChemStation viene utilizzato un file di riferimento per tutte le analisi successive, fino a quando non è indicato un nuovo file di riferimento nella tavola di sequenza. Il file di riferimento di un bianco viene utilizzato come proprio riferimento. La seguente panoramica mostra un esempio di sequenza contenente due bianchi:

Tabella 7 Esempio di sequenza con bianchi

	Campione	File di dati	File di riferimento
1	Campione1	DF01.D	
2	<i>Bianco1</i>	<i>DF02.D</i>	<i>DF02.D</i>
3	Campione2	DF03.D	<i>DF02.D</i>
4	Campione3	DF04.D	<i>DF02.D</i>
5	<i>Bianco2</i>	<i>DF05.D</i>	<i>DF05.D</i>
6	Campione4	DF06.D	<i>DF05.D</i>
7	Campione5	DF07.D	<i>DF05.D</i>

Per informazioni più dettagliate sul calcolo del rapporto segnale-rumore, consultare il manuale di riferimento.

Come arrestare temporaneamente una sequenza

L'analisi in corso sarà completata prima della pausa della sequenza.

Durante la pausa di arresto il nome del file Sequence Table e i file di dati non possono essere modificati. Nella tavola si possono modificare le linee di sequenza che non sono ancora state eseguite o cambiare il numero dei vial nella linea in corso di analisi. Si possono aggiungere, togliere e modificare le linee di sequenza per analisi future.

Può essere necessario modificare una sequenza attiva per aggiungere un nuovo gruppo di campioni. Si può modificare la sequenza in modo che i vial siano i prossimi a essere elaborati da ChemStation, dopo i campioni della linea in analisi.

Come bloccare una sequenza

L'analisi attualmente attiva sarà terminata immediatamente. Tuttavia, l'esame dei dati sarà comunque eseguito per l'analisi. Una sequenza bloccata non può in nessun caso essere ripresa.

Se si desidera terminare l'analisi in corso attuale prima di interrompere la sequenza, mettere in pausa la sequenza, attendere che l'analisi sia terminata e la quindi terminare la sequenza.

Come interrompere una sequenza

La funzione di abbandono termina immediatamente una sequenza attiva. Non viene eseguita alcuna analisi dei dati.

Esecuzione di una sequenza parziale

Selezione del set di risultati per un'acquisizione parziale

Se si attiva la creazione di cartelle esclusive (vedere [“Preferenze - Scheda Sequenza”](#), pagina 102, è possibile scegliere fra le seguenti opzioni per un'acquisizione parziale di sequenza:

- acquisire la sequenza parziale in un nuovo set di risultati

oppure

- acquisire la sequenza parziale in un set di risultati esistente.

L'acquisizione dei file di dati dall'esecuzione di una sequenza parziale in un set di risultati esistente può risultare utile nei seguenti casi:

- È necessario sovrascrivere uno o più file di dati, ad esempio in seguito al precedente utilizzo di un vial errato.
- Solo la prima parte della sequenza è stata eseguita in precedenza e i campioni mancanti devono essere aggiunti eseguendo la sequenza parziale. Ciò si può verificare nel caso di un guasto dello strumento durante l'acquisizione della sequenza.
- Al modello di sequenza sono state aggiunte altre righe dopo l'acquisizione delle righe già esistenti. Le ulteriori analisi devono essere aggiunte ai dati già esistenti.

Pertanto, quando l'utente seleziona l'opzione **Partial Sequence** dal menu **Sequence**, viene visualizzata una finestra di dialogo che consente di selezionare un set di risultati esistente da un elenco o di crearne uno nuovo.

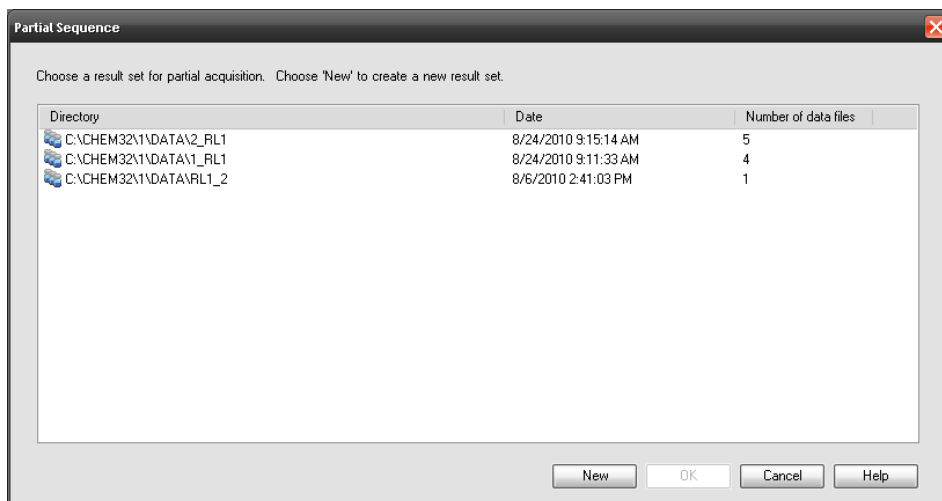


Figura 14 Finestra di dialogo **Partial Sequence**

Tuttavia, per assicurare la congruenza del set di risultati, in modo che possa essere rielaborato completamente in **Data Analysis**, vengono proposti per l'acquisizione solo i set di risultati che soddisfano determinate condizioni:

- Il nome del modello di sequenza (sequenza di origine) e il nome della sequenza nel file .S del set di risultati (sequenza di destinazione) sono identici.
- Entrambi il percorso dei dati e la sottodirectory devono essere identici per i file di sequenza.
- Il numero di righe della sequenza di origine deve essere uguale o maggiore del numero di righe della sequenza di destinazione.
- Per ogni riga nella sequenza di destinazione, il tipo di campione e il numero di iniezioni devono essere identici ai valori nelle righe corrispondenti della sequenza di origine.
- Lo schema di denominazione del file di dati deve essere identico per i due file delle sequenze.

Una volta chiusa questa finestra di dialogo facendo clic su **Ok** (per la selezione di uno dei set di risultati esistenti) o **New** (per la creazione di un nuovo set di risultati), l'utente può selezionare le righe della sequenza da eseguire durante la sequenza parziale.

Selezione delle righe della sequenza per un'acquisizione di sequenza parziale

Il sistema visualizza la finestra di dialogo **Partial Sequence** e permette di selezionare dalla tavola campioni singoli e di analizzarli. Questa finestra di dialogo si apre indipendentemente dall'impostazione della funzione di creazione di cartelle esclusive.

In ogni riga della finestra di dialogo **Partial Sequence** viene riportata una sola analisi. Per ogni analisi vengono riportati il vial, il metodo, il file di dati e il nome del campione. Inoltre nelle colonne Seq Tbl e Calib:RF:RT compaiono informazioni codificate sulla tavola di sequenza e sui campioni di calibrazione. Per informazioni sui codici consultare la guida in linea.

Tramite il pulsante **Print** è possibile ottenere una copia cartacea della sequenza parziale.

L'opzione **Manual update ...** consente di aprire la finestra di dialogo **Update Methods**, che permette di sincronizzare manualmente i metodi master e i metodi utilizzati nel modello della sequenza. L'opzione **Automatic update for selected runs** consente di aggiornare tutti i metodi della sequenza utilizzati nelle analisi selezionate con i corrispondenti metodi master.

NOTA

Vengono aggiornati sia i parametri di acquisizione sia i parametri di analisi dei dati.

Ad esempio, l'aspetto della finestra di dialogo **Partial Sequence** può essere simile a quello riportato di seguito. È possibile contrassegnare campioni specifici per l'elaborazione.

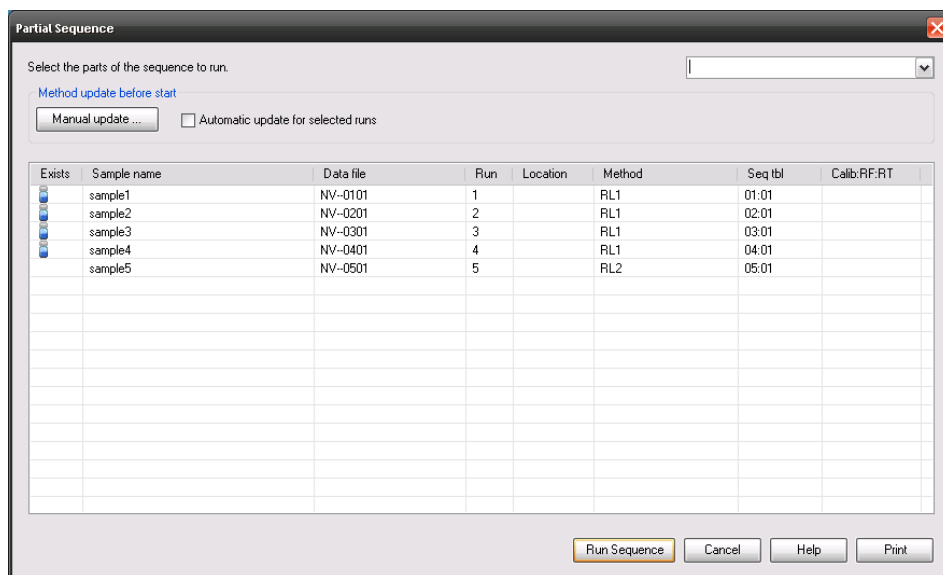


Figura 15 La finestra di dialogo **Partial Sequence**

Creazione di un set di risultati autoassemblato

Utilizzando il comando **Sequenza > Crea nuovo set di risultati** nella finestra **Data Analysis**, è possibile creare un nuovo set di risultati autoassemblato dai dati correnti indicati nella Tavola di navigazione. I set di risultati autoassemblati possono essere utili ad esempio nei seguenti casi:

- per combinare singoli campioni, sequenze o una combinazione di entrambi al fine di rielaborarli con uno specifico metodo
- per ridurre una sequenza

Assemblamento di un nuovo set di risultati

- 1 Aggiungere i file di dati necessari alla tavola di navigazione.
- 2 Nella tavola di navigazione, si selezionano tutti i file di dati che si desidera includere nel nuovo set di risultati.
- 3 Selezionare poi **Sequence > Create New Result Set** per aprire la finestra di dialogo **Create New Result Set**.
- 4 Selezionare un metodo da associare al nuovo set di risultati.
- 5 Specificare una cartella per il nuovo set di risultati.
- 6 Ordinare i campioni.

I nomi dei file di dati di output vengono aggiornati automaticamente. In caso di necessità è possibile ripristinare l'ordine iniziale dei campioni utilizzando il pulsante  (**Restore initial order**).

Si osservi che la posizione di un file di bianco è rilevante per la valutazione del rapporto segnale-rumore, come definito dalla Farmacopea Europea. Consultare anche la sezione “[Sequenze con bianchi di riferimento](#)”, pagina 92.

- 7 Confermare le impostazioni per assemblare la lista dei file di dati in un set di risultati nella cartella specificata.

File di registrazione della sequenza

Viene creato un registro della sequenza che indica cosa è accaduto durante l'esecuzione della stessa. Esso è utile per stabilire quando si è verificato un errore, in caso la sequenza sia stata eseguita senza sorveglianza o durante la notte. Il nome del file contenente il registro elettronico ha sempre l'estensione .log. Il file del registro elettronico si trova nella directory nella quale sono stati archiviati i dati della sequenza.

Cosa succede quando si esegue una sequenza?

Avvio di una sequenza attivando la Unique Folder Creation

Il sistema crea un set di risultati sulla base della definizione del percorso nei parametri di sequenza e delle impostazioni delle preferenze per la sequenza. Il modello della sequenza *.s; tutti i metodi definiti nella tavola di sequenza appartenenti a questa particolare sequenza vengono copiati nel set di risultati. Se si utilizza Intelligent Reporting, tutti i modelli di report *.rdl che sono definiti nel metodo o nel modello della sequenza sono copiati anche nel set di risultati. Il sistema continua a lavorare con tali file durante l'acquisizione. Avvio della sequenza; il metodo della linea della sequenza corrispondente viene caricato all'interno della ChemStation da questi set di risultati.

Avvio di una sequenza disattivando la Unique Folder Creation

Avvio di una sequenza; il sistema carica il file *.s della sequenza e in base alla voce nella tavola di sequenza, il metodo corrispondente della linea della sequenza viene caricato nella ChemStation. In contrasto con la seconda modalità di registrazione dei dati, attivando la **Unique Folder Creation**, non viene creato alcun set di risultati. La sequenza e i metodi rimangono nella directory master corrispondente.

Altre operazioni eseguite durante l'esecuzione della sequenza:

Le seguenti operazioni vengono ripetute per ciascuna linea della sequenza eseguita:

- Se dotato di campionatore automatico, il software dapprima trova il campione nel campionatore automatico secondo il numero inserito nella colonna Vial
- Sullo strumento vengono impostati i parametri del metodo.
- Si esegue la macro pre-analisi.
- Il campione viene quindi iniettato nello strumento (manualmente o automaticamente).
- I dati vengono acquisiti.

- Viene effettuata la valutazione dei dati del metodo. Integrazione, quantificazione e stesura di un rapporto, comprese eventuali macro specificate dall'utente. Se viene usata la modalità di attivazione della **Unique Folder Creation**, il sistema memorizza un metodo DA.M aggiuntivo durante l'analisi.
- Si esegue la macro post-analisi.
- Durante l'intero processo, ChemStation segue l'andamento della sequenza in tempo reale e produce un file di registrazione della sequenza.

Stato della ChemStation

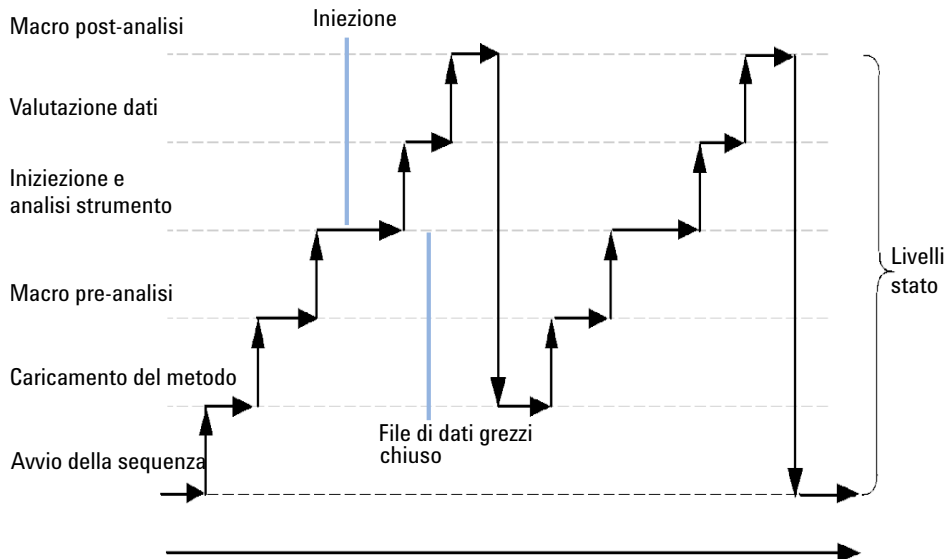


Figura 16 Stato della sequenza

Struttura del file di dati della sequenza

Preferenze - Scheda Sequenza

Nella scheda **Sequence** durante le sessioni in linea, l'utente può scegliere due diversi modelli per la memorizzazione dei dati. Tali modalità definiscono il metodo di archiviazione dei dati della sequenza in ChemStation.

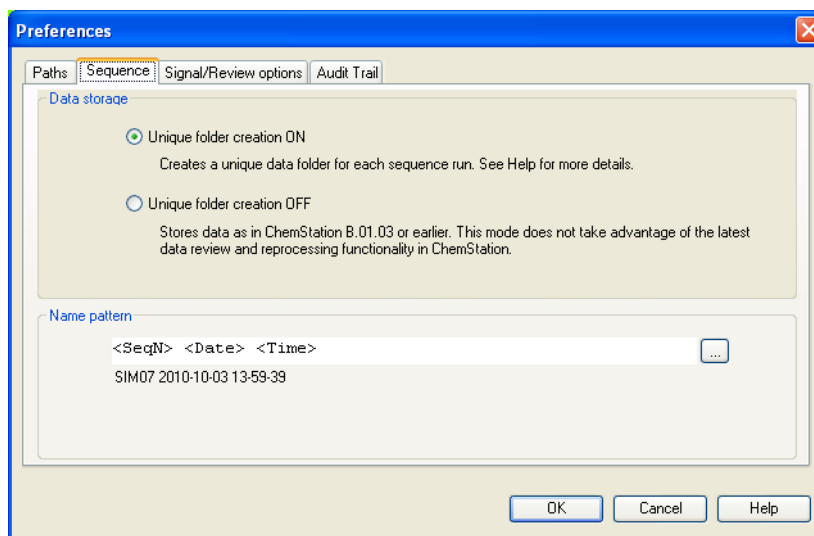


Figura 17 Finestra di dialogo **Preferences** / Scheda **Sequence**

NOTA

L'attivazione o la disattivazione della creazione di cartelle esclusive incide solo sulle future acquisizioni e non modifica l'organizzazione dei dati già acquisiti.

NOTA

Si consiglia vivamente di scegliere tra le due modalità all'inizio del lavoro e di non cambiare tale impostazione successivamente.

La disattivazione della creazione di cartelle esclusive non è supportata se la ChemStation è collegata a un sistema di memorizzazione centralizzata dei dati.

Creazione cartelle esclusive attivata

Con questa modalità di archiviazione dei dati, si crea un collegamento solido e permanente tra i dati grezzi e il metodo. Ciascun file di dati, sia che venga acquisito all'interno di una sequenza o come singola analisi, contiene un collegamento al metodo utilizzato per l'analisi dei dati:

I dati di sequenza sono memorizzati in un set di risultati utilizzando un nome univoco per il set di risultati. È possibile specificare le convenzioni di denominazione (Modello del nome) per questi contenitori di sequenza nella scheda **Sequence** della finestra di dialogo **Preferences**. Se non viene specificato un modello di nome, viene utilizzato un modello di nome di sequenza predefinito. La scheda **Sequence** è utilizzata solo per l'acquisizione dei dati ed è pertanto presente solo per i sistemi in linea.

Il modello di nome della sequenza può contenere varie sezioni. Il nome creato dal sistema per il set di risultati della sequenza dipende dalle sezioni selezionate del modello di nome della sequenza. Tutti i file di dati, i metodi, il registro elettronico delle sequenze, il file <sequence_name>.s e il file <sequence_name>.b che appartengono a questa particolare sequenza, vengono archiviati nel contenitore dati della sequenza. Il set di risultati viene creato all'avvio della sequenza.

I file della sequenza (*.s) sono utilizzati come modelli di sequenza e questo concetto consente di eseguire più volte qualsiasi file di sequenza senza sovrascrivere i dati esistenti e senza modificare i parametri della sequenza. Se nel modello di nome della sequenza non sono utilizzati né caratteri a scalare né l'ora, il sistema introduce automaticamente caratteri a scalare per evitare di sovrascrivere i dati. Per la seconda, la terza e tutte le sequenze successive che utilizzano lo stesso modello di sequenza, al nome del set di risultati vengono aggiunti caratteri a scalare.

Creazione cartelle esclusive disattivata

In questa modalità di archiviazione dei dati, il nome del metodo è l'unico collegamento esistente tra il file di dati e il metodo utilizzato per l'acquisizione e l'elaborazione. Non viene salvata alcuna copia del metodo insieme alla sequenza o al file di dati; se il metodo viene modificato o viene creato un nuovo metodo con quel nome, la sequenza non può essere riprodotta esattamente. I file di dati della sequenza sono memorizzati in conformità con i parametri specificati nel gruppo File di dati della finestra di dialogo **Sequence Parameters**; la funzione di denominazione di sequenza nella scheda **Sequence** della finestra di dialogo **Preferences** è disabilitata in questa modalità. Questa

modalità di registrazione dei dati è identica alle versioni di ChemStation precedenti la B.02.01 e quindi non può sfruttare completamente le ultime funzionalità di revisione/rielaborazione dati della vista **Data Analysis** di ChemStation.

NOTA

I dati della sequenza acquisiti con l'opzione **Unique folder Creation** disattivata devono essere rielaborati utilizzando l'opzione di rielaborazione nella vista **Method and Run Control**.

NOTA

In caso di utilizzo ChemStation con memorizzazione centralizzata dei dati, la modalità di preferenza **Unique Folder Creation** deve essere ATTIVA. Con la memorizzazione centralizzata dei dati, l'opzione **Unique Folder Creation** è disabilitata.

La selezione dell'opzione **Unique Folder Creation Off** ha il seguente impatto sulla memorizzazione dei dati:

- I dati della sequenza non vengono acquisiti in un set di risultati ma direttamente nella sottodirectory specificata nei parametri della sequenza ([“Parametri di sequenza”](#), pagina 79). Pertanto, il modello del nome della sequenza è inattivo nella scheda **Sequence** della finestra di dialogo **Preferenze**.
- Ciò significa che è possibile acquisire nella stessa sottodirectory due o più acquisizioni di sequenze di dati.
- Con i dati non vengono memorizzati metodi di sequenza (.M) o copie del file di sequenza (.S) ma solo il file di log della sequenza e il file batch (.B). Questo significa che risultano disponibili solo i metodi e le sequenze nei percorsi specificati nella finestra di dialogo **Preferences** ([“Selezione del percorso”](#), pagina 68). Tali metodi e sequenze devono essere utilizzati per l'acquisizione nonché per la revisione e la rielaborazione dei dati. Le modifiche apportate ai metodi specifici della sequenza o del file di dati possono essere memorizzate solo salvando il metodo con un nome diverso. Altrimenti, tali modifiche vengono applicate anche al metodo di acquisizione.
- Quando una sequenza acquisita con Creazione cartelle esclusive inattiva è caricato nella tavola di navigazione, la modalità di rielaborazione della vista **Data Analysis** non è disponibile ([Figura 18](#), pagina 105). Le sequenze acquisite con Creazione cartelle esclusive inattiva possono essere rielaborate solo nella finestra **Method and Run Control** mediante l'opzione **Reprocessing only** nei **Sequence Parameters** ([Figura 19](#), pagina 105).

Over...	ECM	Type	Line	Inj	Vial	Sample Name	Sample Type	Man...	Cal Level	Sample Info
1	1	5	Isocratic Std. 1	Calibration	1					
2	1	5	Isocratic Std. 1	Calibration	1					
3	1	5	Isocratic Std. 1	Control Sample	1					
4	1	6	Isocratic Std. 2	Sample	1					
5	1	7	Isocratic Std. 3	Sample	1					

Figura 18 Tavola di navigazione per le sequenze acquisite con la funzione **Unique Folder Creation** disattivata

Sequence Parameters: Local LC

Sequence parameters | Sequence output

Data file
Path: C:\Chem32\2\DATA\
Subdirectory:
☒ Auto Prefix Counter
☐ Prefix/Counter SIG1 000001

Part of method to run
 According to Runtime Checklist
 According to Runtime Checklist Acquisition Only
 Reprocessing Only
 Wait 0.00 minutes after loading a new method

Bar code reader
☐ Use in sequence On a bar code mismatch ☐ Inject anyway ☒ Don't inject
☐ Update master method (data analysis parameters)

Sequence comment:
 OK Cancel Help

Operator Name: admin
 ChemStore: Transfer Settings...
 Shutdown: ☒ Post-Sequence command/macro
 Not ready timeout: 0.00 minutes.
 Fraction information: Fraction start location:
 OK Cancel Help

Figura 19 Rielaborazione dei dati della sequenza acquisiti con la funzione **Unique Folder Creation** disattivata

Struttura del file di dati con la creazione cartelle esclusive attiva

Esiste uno stretto collegamento tra i dati non formattati e il metodo, come mostrato nella figura che segue.

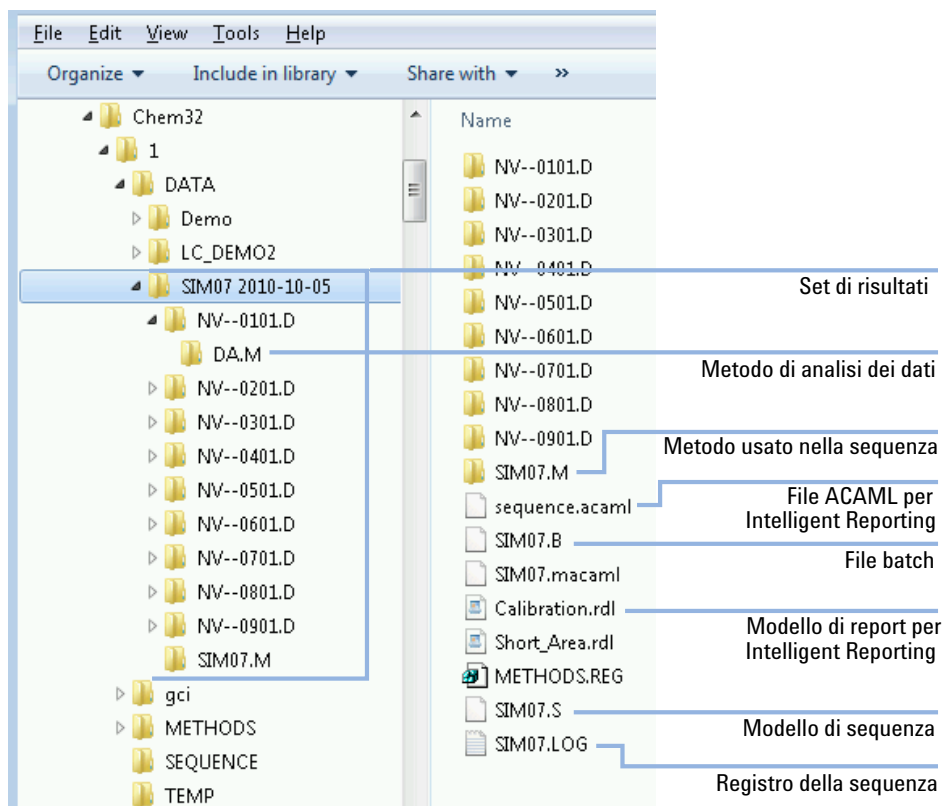


Figura 20 Struttura del file di dati della sequenza “Creazione di cartelle esclusive attiva”

NOTA

Il set di risultati deve sempre contenere la serie completa di tutti i file di dati (*.D). In caso vengano eliminate parti dei file di dati, il caricamento del set di risultati nella memorizzazione centralizzata dei dati causerà dei problemi. Se si desidera ridurre una sequenza, è sufficiente creare un set di risultati autoassemblati dalla serie ridotta di linee di sequenza (vedere “[Creazione di un set di risultati autoassemblato](#)”, pagina 97).

Attribuzione del nome ai file di dati in una sequenza

L'attribuzione del nome ai file di una sequenza viene effettuata:

- in modo automatico;
- manualmente;
- con il sistema di prefisso/caratteri a scalare.

Attribuzione automatica del nome ai file di dati in una sequenza

Vial di campioni

Ad esempio 017-0103.D

Dove:

- le prime tre cifre si riferiscono al numero di vial 017;
- il quarto carattere è una lineetta di separazione in cromatografia liquida ed elettroforesi capillare (-); in gascromatografia sarà (F) per front o (B) per back;
- il quinto ed il sesto carattere indicano la linea di sequenza che definisce il metodo usato, ad esempio 01 sta per la prima linea di sequenza;
- il settimo ed ottavo carattere indicano il numero di iniezione per un determinato vial del metodo: ad esempio 03 sta per la terza iniezione.

Analisi in bianco

Ad esempio NV--0499.D

Dove:

- NV significa nessun vial.
- - è una lineetta di separazione.
- 0499 è la 99^{esima} analisi del bianco della linea di sequenza numero 4.

Come inserire nomi di file manualmente

Una delle colonne della tavola di sequenza si chiama **Datafile**. Quando non contiene dati, viene utilizzato lo schema specificato nei Parametri della sequenza (automatico o prefisso/caratteri a scalare) per attribuire un nome ai file di dati. Se viene inserito del testo nella colonna **Datafile**, ChemStation lo utilizza per attribuire il nome al file di dati per l'analisi.

Se viene specificata più di una iniezione per vial su di una linea con un file di dati il cui nome sia stato inserito manualmente, ChemStation tronca automaticamente caratteri dalla fine del nome inserito dall'utente e aggiunge il numero di iniezione. Ciò impedisce che lo stesso nome venga usato per più iniezioni.

Uso del sistema a prefisso/caratteri a scalare per denominare i file di dati

Utilizzando il sistema prefisso/caratteri a scalare per denominare i file di dati, ChemStation genera un nome per ogni analisi. Per uno strumento che supporta analisi a due segnali come il gascromatografo, ChemStation genererà un nome per ogni segnale.

L'impostazione della sequenza consente l'uso di nomi di file lunghi per il prefisso/caratteri a scalare. Il nome del file di dati definito da un prefisso/caratteri a scalare può essere lungo fino a quindici caratteri più l'estensione .d, per un totale di diciassette caratteri.

Al campo del prefisso/caratteri a scalare si applicano le seguenti regole:

- i caratteri a scalare possono essere al massimo 6
- se un prefisso utilizza meno di nove caratteri, i caratteri a scalare vengono automaticamente estesi a 6 cifre
- il numero utilizzato nei caratteri a scalare è il numero iniziale che viene incrementato

Tabella 8 Nomi di file

Prefisso	Contatore	Risultati nel nome di file
long	000001	long000001
longname	000001	longname000001
testwithalongna	1	testwithalongna1

Migrazione del set di risultati

In ChemStation è disponibile uno strumento per eseguire la migrazione dei dati non appartenenti al set di risultati al formato del set di risultati. Per eseguire correttamente questa attività, è necessario che il file di sequenza originale sia ancora disponibile. Tale file deve contenere tutte le righe della sequenza necessarie e seguire lo schema di denominazione del file di dati originale per rielaborare tutti i file di dati della sequenza. Inoltre, è necessario che siano disponibili tutti i metodi elencati nella colonna Metodo della tabella di sequenza.

Per eseguire la migrazione,

avviare la **Result Set Migration** dal menu **Sequence** nella vista **Data Analysis**.

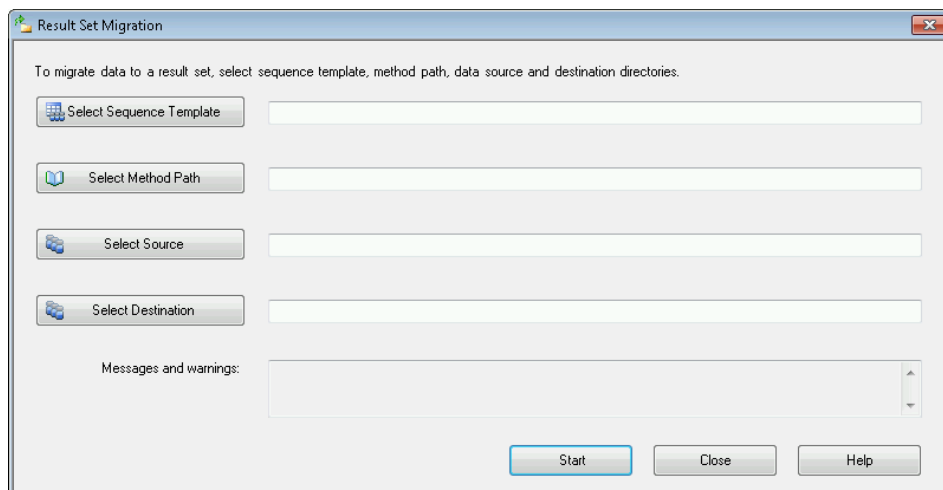


Figura 21 Migrazione del set di risultati

Compilare i seguenti campi obbligatori:

Select Sequence Template: selezionare il file di sequenza (*.S) contenente la tabella di sequenza corrispondente alla serie di dati da migrare.

Select Method Path: selezionare la directory in cui si trovano i metodi a cui fa riferimento la tabella di sequenza.

Select Source: selezionare la directory contenente i file di dati da migrare.

Select Destination: specificare il percorso e il nome del set di risultati da creare. È possibile selezionare una cartella esistente o crearne una nuova.

Una volta compilati tutti i campi, è possibile avviare la migrazione.

Vengono effettuate le seguenti operazioni:

- Viene creata la directory del set di risultati.
- Il modello di sequenza viene copiato nel set di risultati, e viene convertito in uno stato in cui possa rielaborare i file di dati nella vista **Data Analysis**.
- I metodi a cui fa riferimento la tavola di sequenza vengono copiati dal percorso del metodo specificato nella cartella del set di risultati.
- I file di dati, il file di registro della sequenza e il file di raggruppamento vengono copiati dalla directory di origine dei dati nella directory di destinazione.
- In base alle informazioni nella tavola di sequenza, una copia del metodo corrispondente viene copiata in ciascun file di dati come DA.M.

Una volta completata la migrazione del set di risultati, nel campo **Messages and warnings** viene visualizzato un messaggio di successo. In caso contrario, viene visualizzato un messaggio di avviso in cui sono indicati gli eventuali problemi che si sono verificati durante la migrazione. Per visualizzare informazioni dettagliate sull'avviso, è sufficiente fare doppio clic sul messaggio di avviso.

Funzionamento post-sequenza

È possibile specificare cosa accade dopo che una sequenza ha terminato la sua normale esecuzione o quando ChemStation incontra un errore durante il funzionamento della sequenza stessa. Per quanto riguarda la cromatografia liquida attivando la funzione Post-Sequence Cmd/Macro di Sequence Parameters si può scegliere di:

- impostare il sistema in STANDBY con la pompa e la lampada spente,
- impostare il sistema in LAMPOFF con tutte le lampade spente (solo cromatografia liquida ed elettroforesi capillare),
- impostare il sistema in PUMPOFF con tutte le pompe spente (solo CL e EC),
- usare la macro predefinita SHUTDOWN o modificare SHUTDOWN.MAC per determinare funzioni specifiche.

Ad esempio se si desidera spegnere il sistema dopo che la sequenza è stata completata. Si può usare questa macro anche per impostare il flusso a zero e ridurlo gradualmente.

Nella finestra Sequence Parameters, è possibile specificare le macro personali da usare inserendo il loro nome nel campo Post-Sequence Cmd/Macro e barrando l'apposita casella.

Not Ready Timeout (Timeout non pronto) (solo cromatografia liquida ed elettroforesi capillare)

La funzione Not Ready Timeout (Timeout non pronto) in Sequence Parameters (Parametri sequenza) indica l'intervallo di tempo per il quale il sistema attende che lo strumento sia pronto: trascorso questo tempo il sistema si arresta.

Wait Time (Tempo di attesa) (solo cromatografia liquida ed elettroforesi capillare)

Sequence Parameters (Parametri sequenza) permette di specificare il tempo di attesa dopo che un metodo è stato caricato e prima della prima iniezione di quel metodo. Ciò può essere utile per permettere il riequilibrio della colonna/del capillare quando si usano condizioni di analisi nuove.

Ricalibrazione automatica

La calibrazione viene spesso effettuata dopo una modifica delle condizioni operative, ad esempio dopo la sostituzione di una colonna o di un capillare. La ricalibrazione automatica viene effettuata di solito all'inizio di una sequenza di analisi o a intervalli regolari durante una sequenza come parte di un programma per compensare fattori che interessano la prestazione analitica.

Esistono due modi per specificare la ricalibrazione automatica della sequenza.

- Sequenze di calibrazione esplicite.
- Sequenze di calibrazione cicliche.

Ricalibrazione usando la modalità di preferenza “Creazione cartelle esclusive attiva”

Quando si esegue una ricalibrazione, la tavola di calibrazione del metodo usato viene aggiornata in base alle impostazioni del metodo definite. Se viene utilizzata la modalità di archiviazione dei dati “Creazione di cartelle esclusive attiva”, i metodi ricalibrati saranno disponibili nel set di risultati. La tavola di calibrazione del metodo della sequenza viene aggiornato durante tale processo. Oltre al metodo DA.M dei singoli file di dati, contiene la calibrazione aggiornata utilizzata per la creazione dei risultati.

Ricalibrazione nella modalità “Creazione cartelle esclusive inattiva”

Quando si esegue una ricalibrazione, la tavola di calibrazione del metodo usato viene aggiornata in base alle impostazioni del metodo definite. Se viene utilizzata la modalità di archiviazione dei dati “Creazione di cartelle esclusive inattiva”, la tavola di calibrazione del metodo master viene aggiornata durante la ricalibrazione.

Come specificare le ricalibrazioni

I parametri di ricalibrazione per la sequenza vengono inseriti direttamente nella tavola apposita. I parametri definiscono come si ricalibra il metodo durante una sequenza.

Parametri di ricalibrazione nella tavola di sequenza

Il fattore di risposta ed i tempi di ritenzione/migrazione possono essere aggiornati in diversi modi. Il livello di calibrazione, l'aggiornamento del fattore di risposta e dei tempi di ritenzione/migrazione vengono utilizzati per l'elaborazione dei dati quando si ricalibra la tavola.

Se si inserisce Calibration nella colonna SampleType della tavola di campioni, le seguenti colonne diventano attive e possono essere modificate.

- Cal Level
- Update RT
- Update RF
- Interval

I valori possono essere inseriti in ciascuna di queste colonne come illustrato nella tavola.

Tabella 9 Parametri di ricalibrazione della tavola di sequenza

CAL Level	Update RT	Update RF	Interval
Numero livello nella tavola di calibrazione # (1-999)	No update	No update	Numero intervallo di ricalibrazione ciclico # (1-999)
	Average	Average	Bianco
	Replace	Replace	
		Bracket	
		Delta%	

La tavola mostra le colonne della tavola di sequenza che contengono i parametri di ricalibrazione e i valori che possono essere inseriti.

No Update

Il fattore di risposta o il tempo di ritenzione/migrazione non cambia.

Replace

Sostituisce la risposta precedente (altezze o aree) con quella dell'analisi in corso. La risposta non viene cambiata per i picchi che non si trovano in questa operazione di ricalibrazione.

Average

Calcola una media delle risposte (aree o altezze) per ogni picco, basata sull'operazione di calibrazione originaria e su tutte le ricalibrazioni calcolate in media fino a quel momento. Se manca un picco in una delle ricalibrazioni, la risposta media del picco non ne risentirà.

Bracket

I campioni sono raggruppati in calibrazioni pre e post campione. La valutazione viene effettuata quando l'ultimo campione di calibrazione dell'ultimo gruppo è stato analizzato. I dati di calibrazione esistenti vengono sostituiti dai dati che risultano dalla calibrazione del gruppo di apertura. Le calibrazioni del gruppo di chiusura vengono mediate con quelle di questa tavola di calibrazione.

Interval

L'intervallo di ricalibrazione determina quanto spesso si effettui una calibrazione durante una sequenza. La frequenza di calibrazione corrisponde al numero di iniezioni di campione effettuate prima del successivo gruppo di iniezioni di calibrazione. All'inizio dell'analisi ha luogo una calibrazione ed i risultati (fattori di risposta) vengono inseriti nella tavola di calibrazione. Questi risultati vengono usati per i successivi calcoli quantitativi. Dopo che è stato effettuato il numero di iniezioni specificato, si effettua un'altra calibrazione ed i risultati vengono inseriti nella tavola di calibrazione e sovrascritti ai risultati dei calcoli precedenti.

Delta%

Il calcolo del delta% consente di paragonare i fattori di risposta di un'analisi con i fattori di risposta inseriti manualmente in una tavola di calibrazione. Il delta% è quindi applicato a tutti i picchi calibrati contenuti nella tavola. Si possono identificare diversi standard interni ed i loro fattori di risposta misurati vengono usati per calcolare nuovi fattori di risposta per altri picchi. L'operatore identifica quale standard interno deve essere usato per il calcolo del delta% per ogni picco elencato nella tavola di calibrazione.

Tipi di sequenze

Le sequenze possono essere dei seguenti tipi:

- sequenze di calibrazione esplicita;
- sequenze di calibrazione esplicita a livello singolo;
- sequenze di calibrazione ciclica multilivello;
- calibrazioni cicliche ed esplicite contenute nella stessa sequenza;
- sequenze di calibrazione cicliche con calibrazioni in bracketing.

Sequenze di calibrazione esplicite

Questo tipo di sequenza ricalibra ad intervalli definiti scelti dall'utente nella tavola di sequenza.

Per sequenze di calibrazione esplicite, i campioni di calibrazione sono inseriti nella sequenza senza un intervallo di calibrazione nella tavola di ricalibrazione della sequenza del metodo. La ricalibrazione si effettua una volta per ogni campione di calibrazione inserito nella tavola di sequenza.

Sequenze di calibrazione cicliche a livello singolo

Questo tipo di sequenza utilizza lo stesso vial, cioè il campione di calibrazione, ad intervalli regolari nella sequenza.

Recalibration Interval (Intervallo di ricalibrazione) nella tavola di ricalibrazione della sequenza determina le modalità di effettuazione della ricalibrazione. Ad esempio, un valore di intervallo di ricalibrazione uguale a due, ricalibrerà ogni due vial di campione nella sequenza.

Sequenze di calibrazione cicliche multilivello

Questo tipo di sequenza usa campioni di calibrazione diversi per ricalibrare un metodo calibrato multilivello.

L'esempio che segue descrive una sequenza a due metodi comprendente un Metodo A e un Metodo B per analizzare due gruppi di campioni. Entrambi i metodi sono metodi di calibrazione multilivello che si ricalibreranno automaticamente a intervalli definiti.

Per ogni metodo la tavola di sequenza ha tre componenti:

- Due livelli di calibrazione
 - Righe della sequenza 1 e 2 nel metodo A;
 - Righe della sequenza 8 e 9 nel metodo B.
- Cinque voci per i campioni:
 - Righe della sequenza da 3 a 7 nel metodo A;
 - Righe della sequenza da 10 a 14 nel metodo B.

Le calibrazioni sono specificate a intervalli regolari inserendo l'intervallo di ricalibrazione nella tavola di ricalibrazione della sequenza.

- Il metodo A ricalibrerà ogni due campioni.
- Il metodo B ricalibrerà ogni tre campioni.

La tavola di sequenza riportata di seguito è incompleta per semplificare l'esempio.

Tabella 10 Tavola di sequenza per i metodi A e B

Riga	Vial	Nome del metodo	In./Vial	Tipo di campione	Livello calib.	Aggiorna RF	Aggiorna RT	Intervallo
1	1	Metodo A	1	Calibrazione	1	Media	Nessun agg.	2
2	2	Metodo A	1	Calibrazione	2	Media	Nessun agg.	2
3	10	Metodo A	1					
4	11	Metodo A	1					
5	12	Metodo A	1					
6	13	Metodo A	1					
7	14	Metodo A	1					

Tabella 10 Tavola di sequenza per i metodi A e B

Riga	Vial	Nome del metodo	In./Vial	Tipo di campione	Livello calib.	Aggiorna RF	Aggiorna RT	Intervallo
8	3	Metodo B	1	Calibrazione	1	Media	Nessun agg.	3
9	5	Metodo B	2	Calibrazione	2	Media	Nessun agg.	3
10	20	Metodo B	1					
11	21	Metodo B	1					
12	22	Metodo B	1					
13	23	Metodo B	1					
14	24	Metodo B	1					

Ordine di analisi - Metodo A

Il metodo A è la prima parte di una sequenza a doppio metodo.

Tabella 11 Ordine di analisi - Metodo A

N. iniez.	Metodo	Vial	Operazione
1	Metodo A	1	Livello di calibrazione 1 e rapporto di stampa
2	Metodo A	2	Livello di calibrazione 2 e rapporto di stampa
3	Metodo A	10	Analisi del campione e rapporto di stampa
4	Metodo A	11	Analisi del campione e rapporto di stampa
5	Metodo A	1	Livello di calibrazione 1 e rapporto di stampa
6	Metodo A	2	Livello di calibrazione 2 e rapporto di stampa
7	Metodo A	12	Analisi del campione e rapporto di stampa
8	Metodo A	13	Analisi del campione e rapporto di stampa
9	Metodo A	1	Livello di calibrazione 1 e rapporto di stampa
10	Metodo A	2	Livello di calibrazione 2 e rapporto di stampa
11	Metodo A	14	Analisi del campione e rapporto di stampa

Ordine di analisi - Metodo B

Il metodo B è la seconda parte di una sequenza a doppio metodo. Il metodo B è diverso dal metodo A in quanto vi sono due iniezioni per vial per il livello di calibrazione 2. L'intervallo di calibrazione è stabilito a 3.

Tabella 12 Ordine di analisi - Metodo B

N. iniez.	Metodo	Vial	Operazione
12	Metodo B	3	Livello di calibrazione 1 e rapporto di stampa
13	Metodo B	5	Livello di calibrazione 2 e rapporto di stampa
14	Metodo B	5	Livello di calibrazione 2 e rapporto di stampa
15	Metodo B	20	Analisi del campione e rapporto di stampa
16	Metodo B	21	Analisi del campione e rapporto di stampa
17	Metodo B	22	Analisi del campione e rapporto di stampa
18	Metodo B	3	Livello di calibrazione 1 e rapporto di stampa
19	Metodo B	5	Livello di calibrazione 2 e rapporto di stampa
20	Metodo B	5	Livello di calibrazione 2 e rapporto di stampa
21	Metodo B	23	Analisi del campione e rapporto di stampa
22	Metodo B	24	Analisi del campione e rapporto di stampa

Notare che i risultati illustrati nella [Tabella 11](#), pagina 119e nella [Tabella 12](#), pagina 120 possono essere ottenuti utilizzando Partial Sequence per aver una visione in anteprima, dopo aver impostato la tavola di sequenza.

Calibrazioni cicliche ed esplicite insieme

Questo tipo di sequenza consente di eseguire calibrazioni esplicite e cicliche nella stessa sequenza.

Questa funzione permette di ricalibrare completamente il metodo all'inizio della sequenza (*ricalibrazione esplicita*) e quindi di aggiornare la calibrazione (*ricalibrazione ciclica*) durante la sequenza.

- *Devono essere specificate due righe di calibrazione per ciascun livello della tavola Sequenza.* Una riga di calibrazione è riservata all'inserimento della ricalibrazione esplicita e l'altra alla ricalibrazione ciclica.
- La tavola di sequenza *deve* contenere inserimenti per ogni riga di calibrazione e tutti i vial della ricalibrazione ciclica *devono* comparire prima sia della ricalibrazione esplicita sia dei campioni.

Esempio

La seguente tavola di sequenza illustra un metodo calibrato a livello singolo chiamato SimpReg. Per semplificare l'esempio, è stata troncata.

Tabella 13 Tavola di sequenza per SIMPREG

Riga	Vial	Nome del metodo	In./Vial	Tipo di campione	Livello calib.	Aggiorna RF	Aggiorna RT	Intervallo
1	1	SimpReg	1	Calibrazione	1	Media	Media	3
2	1	SimpReg	1	Calibrazione	1	Sostituzione	Sostituzione	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

La tavola presenta due inserimenti per il livello di calibrazione singolo.

- La prima riga di calibrazione è per lo stesso livello, ma calcola una media dei parametri di calibrazione. L'intervallo di ricalibrazione specifica che la ricalibrazione viene effettuata ogni tre campioni.
- Il secondo inserimento sostituisce tutti i parametri di ricalibrazione, ciò significa che viene effettuata una ricalibrazione completa. Non ha *nessun* intervallo di ricalibrazione.

Tavola di sequenza

Comprende sette righe. La prima riga specifica il campione di ricalibrazione ciclica. La seconda descrive la ricalibrazione esplicita effettuata una sola volta all'inizio della sequenza. Dalla terza alla settima riga sono elencati i campioni da analizzare.

L'ordine degli inserimenti nella tabella di calibrazione è molto importante. Tutti i vial relativi alla ricalibrazione ciclica *devono* essere visualizzati *prima* dei campioni o di ogni inserimento di ricalibrazione esplicita per quel metodo.

Ordine di analisi del metodo SimpReg

La seguente tabella descrive l'ordine di analisi per il metodo SimpReg.

Tabella 14 Ordine di analisi del metodo SimpReg

Riga seq.	N. iniez.	Metodo	Vial	Operazione
2	1	SimpReg	1	Calibrazione semplice
1	2	SimpReg	1	Calibrazione regolare
3	3	SimpReg	2	Analisi del campione
3	4	SimpReg	3	Analisi del campione
4	5	SimpReg	4	Analisi del campione
5	6	SimpReg	1	Calibrazione regolare
6	7	SimpReg	5	Analisi del campione
7	8	SimpReg	6	Analisi del campione

Sequenze di calibrazione ciclica in bracketing

In una sequenza ciclica calibrata con bracketing, la tavola di calibrazione usata per calcolare i risultati quantitativi relativi ai campioni incogniti viene creata calcolando la media dei risultati della calibrazione attuale e di quelli della calibrazione precedente. Questa nuova tavola offre una rappresentazione più accurata della risposta dello strumento al momento dell'analisi del campione.

Esempio

Consideriamo la situazione seguente.

- Deviazione della risposta dello strumento.
- Sono state specificate tre iniezioni della stessa miscela a due componenti.
- Due iniezioni sono descritte come campioni di calibrazione ed uno come campione.
- Il primo ed il terzo sono campioni di calibrazione.
- La seconda iniezione è un campione.

Per ottenere un risultato quantitativo preciso per l'iniezione numero due (il campione), deve essere effettuata un'interpolazione fra due campioni di calibrazione, come mostra la figura. Questa procedura è nota come bracketing.

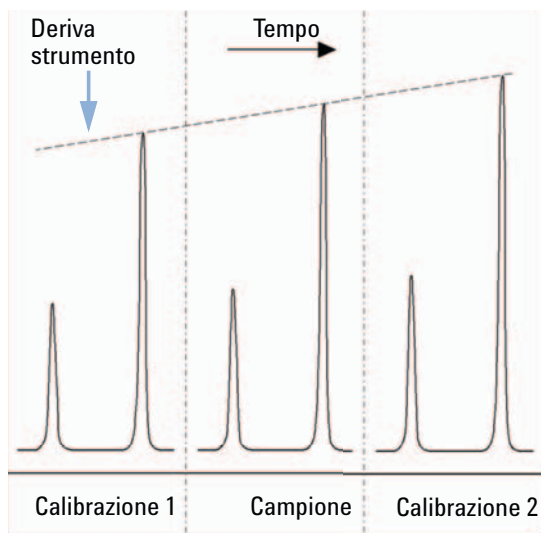


Figura 22 Tecnica del bracketing

Funzionamento della sequenza con bracketing

- I primi vial di calibrazione vengono analizzati.
- I vial di campioni vengono analizzati.
- I vial di calibrazione successivi vengono analizzati.
- Viene prodotta la tavola di calibrazione sostituendo i fattori di risposta pre-esistenti con fattori nuovi e calcolando la media delle calibrazioni successive per creare una nuova tavola.
- Vengono valutati i file di dati relativi ai campioni e creati i rapporti di stampa.
- La sequenza ritorna alla fase due se ci sono ancora vial di campioni da analizzare.

Esempio

Questa sezione riporta un esempio di sequenza in bracketing comprendente un metodo chiamato Brack.M. Questo metodo è uno standard interno a due livelli che utilizza la calibrazione ciclica.

Tavola di sequenza

La tabella di sequenza di Brack.M (illustrata nella pagina seguente) è incompleta per semplificare l'esempio. È composta da sette linee. Le prime due definiscono le condizioni di ricalibrazione per ogni livello. Le rimanenti sono campioni da analizzare.

La tavola di ricalibrazione della sequenza del metodo Brack.M ha:

- l'inserimento di Bracket nella zona Update Response Factor che specifica la bracketing fra campioni e campioni di calibrazione;
- l'inserimento di Replace in Update Retention/Migration Times che specifica la sostituzione dei tempi di ritenzione/migrazione;
- l'inserimento di 3 in Recalib Interval che precisa la ricalibrazione ogni tre campioni.

Tabella 15 Tavola di sequenza per BRACK-M

Riga	Vial	Nome del metodo	In./ Vial	Tipo di campione	Livello calib.	Aggiorna RF	Aggiorna RT	Intervallo
1	1	BRACK-M	2	Calibrazione	1	Staffa	Sostituzione	3
2	2	BRACK-M	2	Calibrazione	2	Staffa	Sostituzione	3
3	10	BRACK-M	1					
4	11	BRACK-M	1					
5	12	BRACK-M	1					
6	13	BRACK-M	1					
7	14	BRACK-M	1					

4 Automazione/Sequenze

Tipi di sequenze

Run No.	Method Name	Vial No.	Inj No.	DataFile Name	Lvl No.	Upd RF	Upd Ret	Operation
1	Brack.M	1	1	c1-03001.d	1	R	R	Report for Calibration Run No.1
2	Brack.M	1	2	c1-03002.d	1	A	R	Report for Calibration Run No.2
3	Brack.M	2	1	c2-03001.d	2	R	R	Report for Calibration Run No.3
4	Brack.M	2	2	c2-03002.d	2	A	R	Report for Calibration Run No.4 Print Calibration Table
5	Brack.M	10	1	010-0301.d				Sample Analysis, no report
6	Brack.M	11	1	011-0301.d				Sample Analysis, no report
7	Brack.M	12	1	012-0301.d				Sample Analysis, no report
8	Brack.M	1	1	c1-03003.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
9	Brack.M	1	2	c1-03004.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
10	Brack.M	2	1	c2-03003.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
11	Brack.M	2	2	c2-03004.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report Print Calibration Table
				010-0301.d				Report for Sample Run No.5
				011-0301.d				Report for Sample Run No.6
				012-0301.d				Report for Sample Run No.7
				c1-03003.d	1	R		Report for Calibration Run No.8
				c1-03004.d	1	A		Report for Calibration Run No.9
				c2-03003.d	2	R		Report for Calibration Run No.10
				c2-03004.d	2	A		Report for Calibration Run No.11
12	Brack.M	13	1	013-0301.d				Sample Analysis, no report
13	Brack.M	14	1	014-0301.d				Sample Analysis, no report
14	Brack.M	1	1	c1-03005.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
15	Brack.M	1	2	c1-03006.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
16	Brack.M	2	1	c2-03005.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
17	Brack.M	2	2	c2-03006.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report Print Calibration Table
				013-0301.d				Report for Sample Run No.12
				014-0301.d				Report for Sample Run No.13
				c1-03005.d	1	R		Report for Calibration Run No.14
				c1-03006.d	1	A		Report for Calibration Run No.15
				c2-03005.d	2	R		Report for Calibration Run No.16
				c2-03006.d	2	A		Report for Calibration Run No.17

Where A = average

R = replace

Figura 23 Ordine di analisi per una sequenza di ricalibrazione in bracketing

Sequenze di ricalibrazione ciclica con più vial contenenti la stessa diluizione di uno standard

Sequenza di ricalibrazione ciclica con vial di calibrazione usati "in successione"

Quando si esegue una sequenza molto lunga che effettua ricalibrazioni cicliche, cioè che ricalibra automaticamente dopo un numero prefissato di iniezioni di campione, esiste in potenza il rischio di esaurire il volume di campione contenuto nel vial di calibrazione nel corso della sequenza. La tavola di sequenza della ChemStation consente di usare una serie di vial contenenti la stessa diluizione di uno standard da utilizzare *in successione*.

In questo modo sequenze anche molto lunghe possono essere programmate con ricalibrazioni automatiche ad intervalli prefissati, utilizzando diversi vial di calibrazione per ogni livello, dato che il contenuto di ogni vial può essere consumato nelle stesse proporzioni.

Definendo un numero adatto di vial di calibrazione è anche possibile garantire che ogni vial di calibrazione venga utilizzato una sola volta. Si tratta di un requisito importante nei casi in cui si richieda un nuovo vial di ricalibrazione per ogni calibrazione, ad esempio se un analita evapora una volta che il setto viene punto o inizia a degradarsi entrando in contatto con l'acciaio dell'ago. La sezione che segue descrive come deve essere impostata la tavola di sequenza della ChemStation per far fronte a questo tipo di esigenza.

Determinare il numero totale di vial di calibrazione per ogni livello basandosi sull'uso previsto del calibrante per la durata della sequenza.

Impostare una linea di ricalibrazione ciclica per ogni vial di calibrazione. Le linee definite per lo stesso livello di calibrazione devono essere su linee di sequenza adiacenti e le posizioni di vial definite devono essere anch'esse adiacenti. Scegliere un intervallo di ricalibrazione identico per tutte le linee di calibrazione. Ad esempio se la sequenza deve ricalibrarsi ogni 6 iniezioni di campione, impostare l'intervallo di ricalibrazione a 6.

Tabella 16 Sequenza di ricalibrazione ciclica con 3 vial definiti per ogni livello

N. vial	Nome del campione	Tipo di campione	Nome del metodo	N.iniez.	Lvl	Upd RT	Upd RF	Interval
1	Cal1a	Calib	Metodo A	1	1	Avg	Avg	6
2	Cal1b	Calib	Metodo A	1	1	Avg	Avg	6
3	Cal1c	Calib	Metodo A	1	1	Avg	Avg	6
5	Cal2a	Calib	Metodo A	1	2	Avg	Avg	6
6	Cal2b	Calib	Metodo A	1	2	Avg	Avg	6
7	Cal2c	Calib	Metodo A	1	2	Avg	Avg	6
10	Campione 10	Campione	Metodo A	6				
11	Campione 11	Campione	Metodo A	6				
12	Campione 12	Campione	Metodo A	6				
13	Campione 13	Campione	Metodo A	6				
14	Campione 14	Campione	Metodo A	6				

L'ordine di esecuzione è:

- Vial 1 (Cal1a)
- Vial 5 (Cal2a)
- 6 dal vial 10 (Campione 10)
- Vial 2 (Cal1b)
- Vial 6 (Cal2b)
- 6 dal vial 11 (Campione 11)
- Vial 3 (Cal1c)
- Vial 7 (Cal2c)
- 6 dal vial 12 (Campione 12)
- Vial 1 (Cal1a)
- Vial 5 (Cal2a)
- 6 iniezioni dal vial13 (Campione 13)
- Vial 2 (Cal1b)
- Vial 6 (Cal2b)
- ecc.

Ricalibrazioni cicliche con uso di un vial diverso per ogni calibrazione

Per assicurare che ogni vial di calibrazione venga iniettato una sola volta, la sequenza deve definire un numero sufficiente di vial di calibrazione diversi, in modo che *l'ordine in successione* descritto nell'esempio precedente non venga applicato. Ad esempio, se la sequenza processa 80 vial di campioni con ricalibrazioni richieste ogni 10 campioni, la tavola di sequenza deve contenere $80/10+1=9$ linee di calibrazione per ogni livello.

Come nell'esempio precedente, le linee di calibrazione devono essere adiacenti e riferirsi a posizioni di vial adiacenti.

Sequenza in bracketing che utilizza vial diversi per l'apertura e la chiusura dei bracket

La stessa funzione è disponibile per le sequenze in bracketing. Definendo la serie di vial di calibrazione adatti può essere definita una sequenza in bracketing in modo che vial di calibrazione diversi vengano usati per l'apertura e la chiusura dei bracket. Anche in questo caso le linee di calibrazione della sequenza devono essere adiacenti così come le posizioni dei vial di calibrazione.

Che i vial di calibrazione in bracketing vengano usati nella modalità "in successione" oppure per una sola iniezione dipende unicamente e semplicemente dal numero totale di vial di calibrazione per ogni livello e dal numero di ricalibrazioni richieste dalla sequenza.

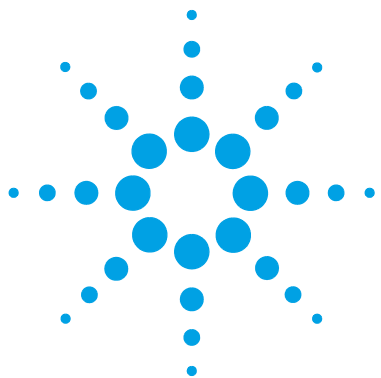
L'esempio che segue definisce 3 iniezioni di campione in bracketing, fra diverse calibrazioni. Il bracket di apertura utilizza un vial di calibrazione diverso da quello di chiusura. Le ricalibrazioni sono richieste dopo ogni iniezione di campione, quindi l'intervallo di ricalibrazione deve essere 1. Il numero di linee di ricalibrazione per livello è uguale al numero di campioni più uno.

Tabella 17 Vial diversi utilizzati per l'apertura e la chiusura dei bracket

N. vial	Nome del campione	Tipo di campione	Nome del metodo	N.iniez.	Lvl	Upd RT	Upd RF	Interval
1	Cal1a	Calib	Metodo A	1	1	Brkt	Brkt	1
2	Cal1b	Calib	Metodo A	1	1	Brkt	Brkt	1
3	Cal1c	Calib	Metodo A	1	1	Brkt	Brkt	1
4	Cal1d	Calib	Metodo A	1	1	Brkt	Brkt	1
10	Campione 10	Campione	Metodo A	1				
11	Campione 11	Campione	Metodo A	1				
12	Campione 12	Campione	Metodo A	1				

L'ordine di esecuzione di questa sequenza è:

- Vial 1 (Cal1a), Apertura Bracket 1
- Vial 10 (Campione 10)
- Vial 2 (Cal1b), Chiusura Bracket 1 ed apertura Bracket 2
- Vial 11 (Campione 11)
- Vial 3 (Cal1c), Chiusura Bracket 2 ed apertura Bracket 3
- Vial 12 (Campione 12)
- Vial 4 (Cal1d), Chiusura Bracket 3



5 Run Queue e Queue Planner

Flussi di lavoro supportati	132
Utilizzo di Run Queue	134
Singoli campioni in Run Queue	135
Sequenze in Run Queue	135
Pause in Run Queue	136
Utilizzo di Queue Planner	137

Nel presente capitolo sono spiegati i concetti Run Queue e Queue Planner. Viene descritto come aggiungere singoli campioni e sequenze e come mettere in pausa Run Queue.



Flussi di lavoro supportati

Run Queue controlla tutte le analisi nella ChemStation:

- Ogni volta che per avviare un metodo o una sequenza viene utilizzato il comando **RunControl > Run Method** o **RunControl > Run Sequence**, l'elemento viene innanzitutto aggiunto a Run Queue e avviato automaticamente da qui. Se Run Queue è in pausa, l'elemento verrà aggiunto alla parte anteriore della coda, seguito da una pausa accodabile. In questo modo quando l'analisi è terminata lo strumento tornerà allo stato di pausa.
- Run Queue permette anche di programmare una serie di campioni e sequenze nonché ulteriori parametri. Campioni o sequenze possono essere aggiunti alla coda con il comando **RunControl > Queue Method...** o **RunControl > Queue Sequence....** Grazie a Run Queue, è possibile automatizzare attività prolungate, come quelle delle ore notturne o del fine settimana. Oltre ai campioni e alle sequenze, possono essere programmate anche le pause. Quando una sequenza viene sospesa, ChemStation mostra un messaggio personalizzabile e attende conferma dell'utente.

Con Queue Planner, è possibile preparare preventivamente piani di coda e aggiungerli a Run Queue in un secondo momento.

Sono supportati i seguenti flussi di lavoro:

- analisi di un singolo campione
- analisi di una singola sequenza
- accodamento di un singolo campione
- accodamento di singola sequenza
 - a** selezionare un modello di sequenza ChemStation classica o un modello Easy Sequence
 - b** modificare o rivedere la tabella sequenze
 - c** modificare o rivedere i parametri delle sequenza
 - d** salvare le impostazioni
 - e** aggiungere la sequenza alla coda
- modifica di Run Queue
- preparare un piano di coda

- aggiunta di una serie di sequenze predefinita a Run Queue
 - a** selezionare un piano di coda
 - b** aggiungere il piano a Run Queue

In Cronologia è sempre possibile vedere quali analisi sono state eseguite sullo strumento corrente.

Run Queue e Queue Planner sono disponibili soltanto nelle sessioni in linea della ChemStation nella finestra **Method and Run Control**.

Utilizzo di Run Queue

Run Queue è presente nella scheda **Instrument Control** e nella scheda **Run Queue**. Nella scheda Controllo dello strumento è possibile visualizzare o nascondere Run Queue attraverso il comando **View > Run Queue**.

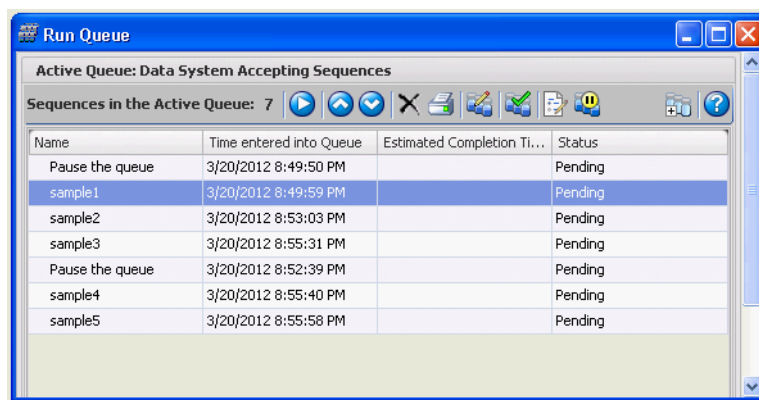


Figura 24 Finestra di dialogo **Run Queue**

È possibile aggiungere un elemento all'inizio o alla fine della coda. Se lo stato degli elementi nella coda sia in sospeso, è inoltre possibile modificare sia l'ordine di esecuzione che le proprietà dell'elemento. In base alle opzioni di coda attive, il primo elemento nella coda viene avviato quando il sistema di elaborazione dei dati è pronto oppure quando la coda viene ripresa.

Run Queue supporta singoli campioni, modelli Easy Sequence e sequenze ChemStation classiche. Gli unici elementi che non possono essere aggiunti a Run Queue sono sequenze parziali, campioni prioritari e analisi avviate direttamente dallo strumento.

Per maggiori informazioni su Easy Sequence, consultare la Guida in linea. I corsi autodidattici sulla **Easy Sequence Setup** sono disponibili nella guida in linea.

Singoli campioni in Run Queue

Per aggiungere un singolo campione alla coda, utilizzare il menu **RunControl > Queue Method....** È possibile modificare tutti i parametri nella finestra di dialogo **Queue Method**.

Sequenze in Run Queue

Per aggiungere una sequenza alla coda, usare il menu **RunControl > Queue Sequence....** È possibile modificare la tabella sequenze e i parametri della sequenza senza cambiare la sequenza al momento caricata. Prima di eseguire l'accodamento della sequenza, appare una finestra di dialogo che consente l'opzione di aggiungere la sequenza in coda o di salvarla come nuovo modello di sequenza.

Tale finestra di dialogo per il **Finish Queue Sequence** contiene anche la casella di controllo **Delete temporary Sequence Template after completion** per l'eliminazione del modello temporaneo di sequenza dopo il completamento. ChemStation conserva sempre, in una cartella temporanea, una copia del modello di sequenza in coda. Tale modello di sequenza temporaneo viene usato per eseguire la sequenza dalla coda. Poiché una stessa sequenza può essere accodata diverse volte usando diversi parametri, ChemStation necessita di una copia separata per ogni elemento accodato.

In base allo stato della casella di controllo, questo modello di sequenza temporaneo viene conservato o eliminato quando la coda passa all'elemento successivo. La casella di controllo può essere selezionata o deselezionata per impostazione predefinita, in base alle impostazioni della **Unique Folder Creation** (consultare la sezione **“Preferenze - Scheda Sequenza”**, pagina 102):

- Se la **Unique Folder Creation OFF**:
la casella **Delete temporary Sequence Template after completion** è annullata per impostazione predefinita.
Se si desidera rielaborare i dati, sarà necessario il modello della sequenza, pertanto si raccomanda di conservare una copia di tale file. Per impostazione predefinita, viene salvato in Chem32\<instrument>\SEQUENCE.
- Se la **Unique Folder Creation ON**:
la casella **Delete temporary Sequence Template after completion** è selezionata per impostazione predefinita.

Tutte le informazioni necessarie per la rielaborazione sono disponibili nel set di risultati, quindi non serve la copia del modello di sequenza temporaneo. Tuttavia, selezionando la casella, una copia viene salvata in automatico in **Chem32\<instrument>\TEMP\AESEQ**.

Pause in Run Queue

Per pianificare una pausa della coda, fare clic su **Add Pause to Queue** nella barra degli strumenti di Run Queue. Nelle pause la ChemStation mostra un messaggio personalizzabile e attende la conferma da parte dell'utente.

Utilizzo di Queue Planner

Con Queue Planner, è possibile preparare una serie ordinata di sequenze (modello Easy Sequence *.es o modelli di sequenze ChemStation classiche *.s) o di pause. L'intero piano di coda può essere aggiunto all'inizio o alla fine di Run Queue.

Il piano di coda viene salvato come file *.qpl. Basta aprire Queue Planner nella finestra **Method and Run Control** tramite menu **RunControl > Queue Planner...**

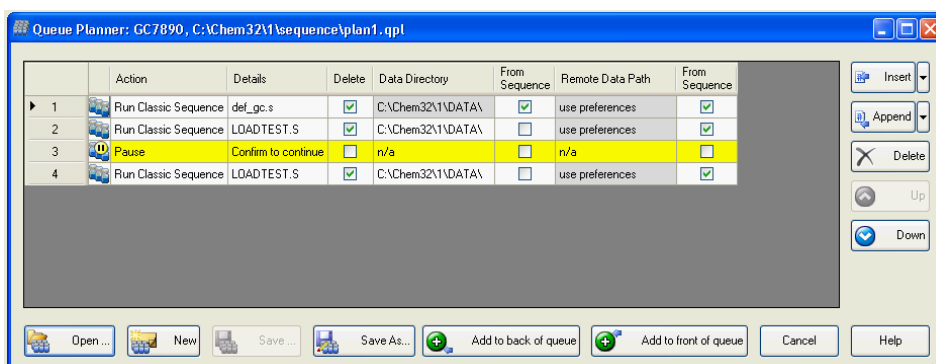


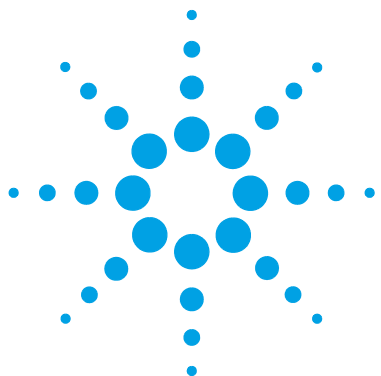
Figura 25 Queue Planner

Come per Run Queue, quando viene aggiunta una pausa è possibile inserire un messaggio personalizzato nella colonna **Details**. Quando la coda delle sequenze viene sospesa, ChemStation si arresta e visualizza il messaggio programmato. L'utente deve confermare il messaggio per riavviare la coda.

Per maggiori informazioni sull'interfaccia utente, consultare la Guida in linea.

5 **Run Queue e Queue Planner**

Utilizzo di Queue Planner



6

Concetti relativi ad analisi e revisione dei dati

Analisi dei dati	140
Modalità di analisi dei dati	142
Modalità di ricalcolo	143
Modalità ultimo risultato	145
Modalità di rielaborazione	146
Aggiornamento dei metodi	150
Visualizzatore di report per l'analisi dei dati	151
Revisione	155
Requisiti per Intelligent Reporting	155
Selezione di file di dati	155
Selezione del modello di report	156
Anteprima del report	157
Flussi di revisione possibili	157

Questo capitolo descrive le opzioni di analisi e revisione dei dati. In OpenLAB CDS ChemStation Edition, queste opzioni sono disponibili in due viste separate.



Analisi dei dati

Una volta acquisiti i dati, è possibile analizzarli nella finestra **ChemStation Data Analysis**. Selezionando la scheda **Data** di ChemStation Explorer, è possibile caricare tutte le analisi di una sequenza o tutte le singole analisi in una determinata cartella facendo doppio clic sul simbolo corrispondente. Il set di dati corrispondente diventa quindi disponibile nella tavola di navigazione.

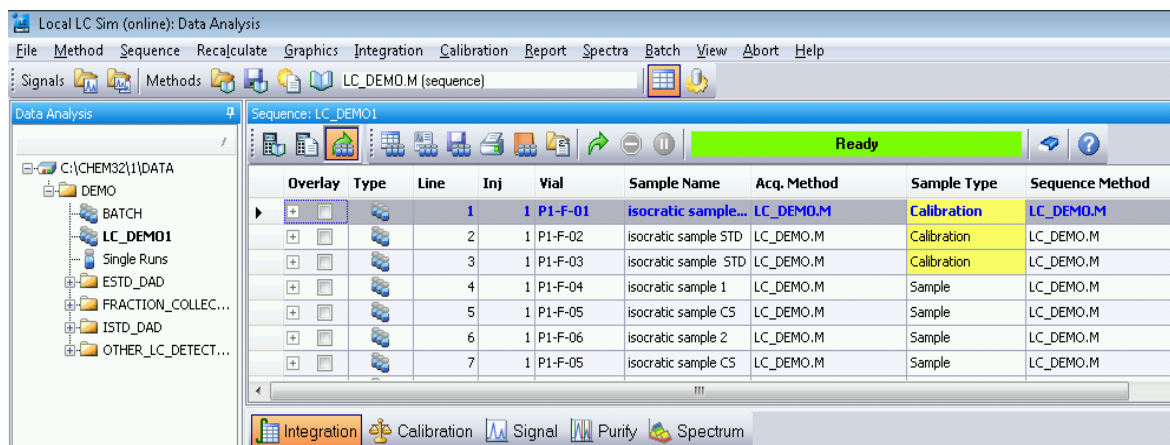


Figura 26 Caricamento di una sequenza da ChemStation Explorer nella tavola di navigazione

Il corpo principale della tavola di navigazione è costituito da un elenco di tutte le analisi del set. È possibile caricare un'analisi nella memoria della ChemStation facendo doppio clic sulla relativa riga nella tavola di navigazione. Inoltre, facendo clic con il pulsante destro del mouse su di un'analisi vengono visualizzate varie opzioni, ad esempio per caricare o sovrapporre segnali specifici dal file, esportare i dati o visualizzare i parametri del metodo di acquisizione.

Le *analisi della sequenza* sono caricate (nella modalità di rielaborazione) con il metodo della sequenza che è stato utilizzato durante l'acquisizione o la rielaborazione. Il nome del metodo è mostrato nella barra degli strumenti, oltre che nella colonna **Sequence Method** nella tavola di navigazione. Il nome del metodo di acquisizione è mostrato nella colonna **Acq Method**.

È possibile caricare *singole analisi* tramite uno dei seguenti metodi, a seconda delle impostazioni specificate in **Preferences > Signal/Review options** (vedere la figura seguente):

- Se la casella di controllo (1) è selezionata e l'ultima volta la singola analisi è stata analizzata o oggetto di report in base a un metodo memorizzato in uno dei percorsi attualmente definiti dei metodi master, la singola analisi viene caricata con tale metodo master. Il metodo è mostrato nella colonna **Analysis Method** della tavola di navigazione.
- Se la casella di controllo (1) è deselezionata, le singole analisi sono caricate con l'ultimo metodo master caricato nella ChemStation.

Il nome del metodo di acquisizione è mostrato nella colonna **Acq Method**.

La ChemStation consente di specificare le operazioni predefinite che vengono eseguite automaticamente quando un file di dati viene caricato dalla tavola di navigazione. Tali operazioni includono attività di analisi dei dati come l'integrazione del cromatogramma direttamente dopo il caricamento, oppure la stampa di un report per ogni singola iniezione (vedere la figura seguente).

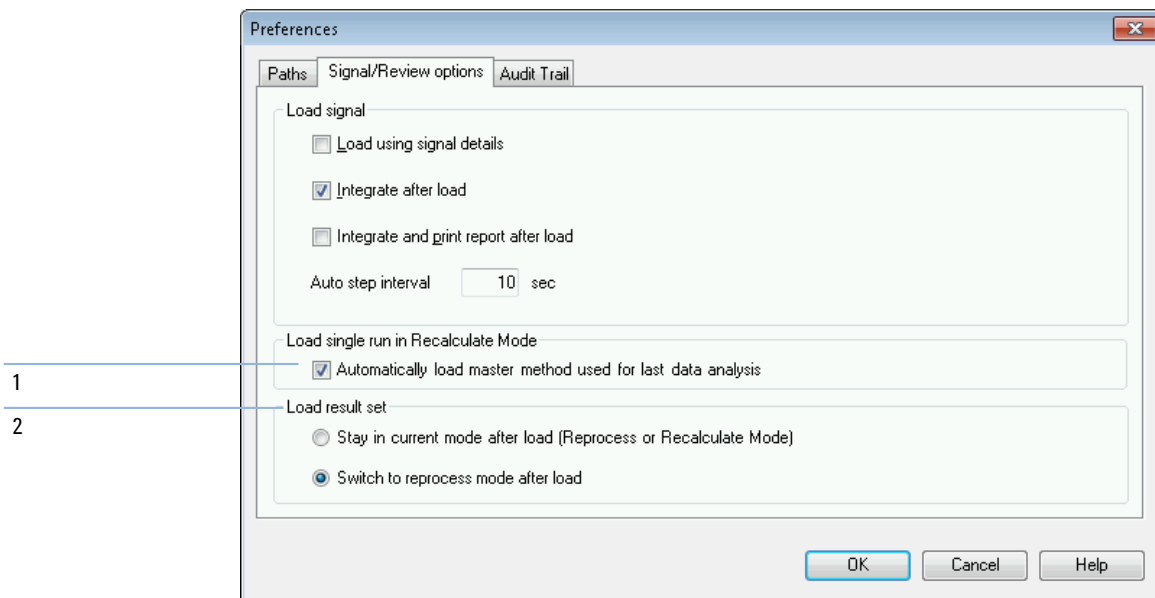


Figura 27 La scheda **Signal/Review options** della finestra di dialogo **Preferences**

Modalità di analisi dei dati

È possibile scegliere fra le seguenti modalità di analisi dei dati:

- Modalità Recalculation (Ricalcolo)
- Modalità Last Result (Ultimo risultato)
- Modalità Reprocessing (Rielaborazione)

È possibile accedere a queste modalità tramite il menu **View** o per mezzo del set di strumenti (vedere la figura seguente).



Figura 28 Selezione della modalità

Per ogni modalità, il set di strumenti contiene funzioni specifiche. Le modalità e le relative funzioni sono descritte nelle sezioni che seguono. Nella scheda **Signal/Review Options** della finestra di dialogo **Preferences** è possibile scegliere quale modalità deve essere attiva per impostazione predefinita quando si carica un set di risultati (vedere [Figura 27](#), pagina 141, indicatore 2).

Modalità di ricalcolo

Una volta caricata l'analisi, è possibile revisionarla, ossia regolare i parametri di analisi dei dati, integrare i segnali e infine stampare un report. In questo caso l'analisi viene esaminata singolarmente senza prendere in considerazione il contesto della sequenza e senza utilizzare le funzioni della tavola di sequenza. La tavola di navigazione per questo tipo di analisi dei dati fornisce il set di strumenti visualizzati nella figura che segue.



Figura 29 Set di strumenti per il ricalcolo della tavola di navigazione

Questo set di strumenti consente di passare all'inizio o alla fine della tavola di navigazione, passare all'analisi successiva o precedente, passare automaticamente da un'analisi all'altra, interrompere il passaggio automatico, ricalcolare un'analisi utilizzando un metodo specifico o cancellare la tavola di navigazione.

Per ricalcolo si intende l'analisi dei dati eseguita analisi per analisi. Vengono analizzate soltanto le analisi visualizzate nella tavola di navigazione. Se si è applicato un filtro alla tavola di navigazione, vengono ricalcolate solo le analisi effettivamente visualizzate nella tavola. Viene preso in considerazione anche l'ordinamento della tavola di navigazione.

È possibile utilizzare il ricalcolo nei seguenti flussi di lavoro, ad esempio:

- Si desidera riesaminare i file di dati di un set di risultati con un metodo diverso attualmente non presente nel set di risultati; ad esempio un metodo master non utilizzato per l'acquisizione poiché il proprio flusso di lavoro prevede metodi di acquisizione e analisi dei dati separati.
- È stato modificato un metodo di sequenza e si desidera riesaminare solo le analisi specifiche che utilizzano questo metodo per controllare l'applicabilità dei parametri per le varie analisi.

Metodo di analisi dei dati per singole analisi

Nelle versioni precedenti, non veniva caricato automaticamente alcun metodo con i file di dati in modalità di ricalcolo. A partire della versione C.01.05, è possibile selezionare la casella di controllo per caricare automaticamente il metodo master utilizzato per l'ultima analisi dei dati (vedere [Figura 27](#), pagina 141, indicatore 1). Se la casella di controllo è selezionata, le singole analisi vengono caricate insieme al metodo master corrispondente, se il metodo è ancora memorizzato nel percorso specificato.

Ricalcolo con un metodo specifico

Questa funzione consente di ricalcolare le analisi visualizzate nella tavola di navigazione utilizzando un metodo master specifico. Il metodo master richiesto viene specificato nella finestra di dialogo **Recalculate With Method** (vedere la figura seguente). Se il metodo master selezionato utilizza Intelligent Reporting (vedere “**Report**”, pagina 175), è possibile anche specificare il modello di report che sarà utilizzato per i report delle singole iniezioni.

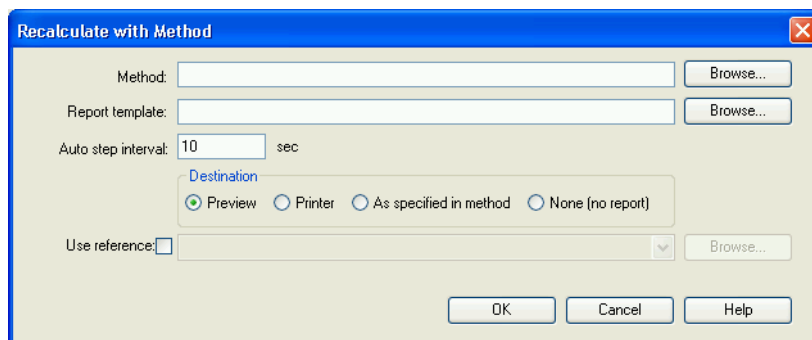


Figura 30 Finestra di dialogo **Recalculate With Method**

La finestra di dialogo **Browse for methods in master paths** e la finestra di dialogo **Browse for templates in master paths** offrono tutte le posizioni di file specificate nelle preferenze.

NOTA

Nelle precedenti versioni di ChemStation era possibile ricalcolare con un metodo specifico scegliendo **Use current method**, **Use method from data file** oppure **Use sequence method** nella barra degli strumenti.

Se si seleziona la casella **Use reference** è possibile scegliere un file di dati contenente un segnale di riferimento. La ChemStation utilizza questo segnale per il calcolo del rapporto segnale-rumore in base alla definizione della Farmacopea Europea. Nell'elenco a discesa sono riportati i file di dati utilizzati durante la sessione corrente. Il pulsante **Browse** consente di selezionare qualsiasi file di dati presente anche nella tavola di navigazione. Se si desidera utilizzare un file di riferimento diverso è necessario innanzitutto aggiungerlo alla tavola di navigazione.

Il nuovo riferimento sovrascrive quello precedente e in seguito verrà utilizzato per i calcoli del rapporto segnale-rumore in ogni report. Se si seleziona la casella di controllo **Use reference** ma non si specifica alcun file, vengono cancel-

lati i riferimenti per tutti i file di dati ricalcolati e in seguito non verrà calcolato alcun valore del rapporto segnale-rumore.

Ogni volta che si ricalcola un campione o si genera un report, il metodo del file di dati (DA.M) viene aggiornato automaticamente con i parametri di analisi dei dati del metodo utilizzato. Il percorso del metodo specifico viene salvato come riferimento nel file di dati.

Modalità ultimo risultato



Figura 31 Set di strumenti della modalità ultimo risultato della tavola di navigazione

In questa modalità viene caricato il metodo del file di dati (DA.M) per ogni analisi. Il metodo DA.M è una copia esatta del metodo utilizzato per l'ultima analisi dei dati (durante l'acquisizione, la rielaborazione o il ricalcolo). Pertanto, anche se nel frattempo il metodo della sequenza è stato modificato, è possibile riprodurre l'ultimo risultato con il metodo utilizzato in origine. In tal modo è possibile, per esempio, tenere traccia delle modifiche apportate al metodo in fasi successive di ricalibrazione in un set di risultati.

Il nome del metodo nella barra degli strumenti visualizza la dicitura DA.M, a indicare che è caricato il metodo del file di dati. Quando si sposta il puntatore del mouse su questo campo, il suggerimento visualizza anche il percorso completo e il nome del metodo. Inoltre, il nome dell'ultimo metodo utilizzato per l'analisi dei dati (che era stato copiato nel DA.M) è mostrato nella colonna **Analysis Method** della tavola di navigazione. Il suggerimento relativo a questa colonna mostra il percorso completo di tale metodo.

NOTA

Il DA.M in genere è a sola lettura. Non può essere caricato manualmente ma viene caricato soltanto dalla ChemStation in modalità Last Result (Ultimo risultato) per il ricalcolo. Può essere modificato, ma non salvato manualmente. Se il metodo è stato modificato e cambiato, non è più possibile generare un report in quanto questa operazione prevederebbe il salvataggio del metodo DA.M e potrebbe pertanto creare incongruenze nel sistema.

In modalità Last Result (Ultimo risultato) è possibile aggiornare il metodo master caricato o un qualsiasi metodo master con i parametri correnti di analisi dei dati ottenuti dal DA.M, oppure salvare un metodo DA.M modificato come un nuovo metodo master. Per esempio, è stato caricato un set di dati

analizzato alcune settimane o mesi fa e si determina che i parametri di analisi dei dati memorizzati nel DA.M sono utili per le attività in corso. In questo caso è possibile trasferire le impostazioni in un metodo master di propria scelta. Per ulteriori informazioni, consultare [“Amministrazione dei metodi”](#), pagina 51.

Modalità di rielaborazione

Un modo diverso di analizzare i dati consiste nell'utilizzo della funzione **Reprocess** di una sequenza completa. A differenza del ricalcolo, tutte le analisi vengono rianalizzate nel contesto della sequenza, ossia le tavole di calibrazione dei metodi di sequenza vengono aggiornate in caso di calibrazioni; inoltre moltiplicatori, quantità e altri elementi possono essere modificati nella tavola di sequenza.

Il set di risultati include tutti i file necessari per la rielaborazione: i file di dati, una copia del file della sequenza, tutti i metodi della sequenza e tutti i modelli di report originariamente impiegati nell'acquisizione. Pertanto, per rielaborare una sequenza è sufficiente caricarla nella tavola di navigazione e selezionare il set di strumenti di rielaborazione.

Se è necessario propagare le modifiche apportate nel metodo di sequenza al metodo master corrispondente come input per tutte le successive acquisizioni, è possibile farlo con estrema semplicità tramite la funzionalità **Update Master Method** (vedere [“Aggiornamento dei parametri DA nel metodo master”](#), pagina 55).

Il DA.M viene aggiornato automaticamente ogni volta che si rielabora un file di dati.

Per la rielaborazione, la tavola di navigazione fornisce il seguente set di strumenti:



Figura 32 Set di strumenti per la rielaborazione della sequenza della tavola di navigazione

Questo set di strumenti consente di modificare la tavola della sequenza, modificare i parametri della sequenza, salvare la sequenza corrente, stampare la sequenza corrente, visualizzare o nascondere il registro elettronico della

sequenza, visualizzare i file di report di riepilogo della sequenza salvati, avviare la rielaborazione della sequenza, interrompere la sequenza o mettere in pausa la sequenza.

Tenere presente che le icone per la rielaborazione nella tavola di navigazione sono disponibili solo per i set di risultati generati con la ChemStation B.02.01 e versioni successive. La rielaborazione in **Data Analysis** non è accessibile per i dati di un'unica analisi, per i dati generati con versioni precedenti alla B.02.01 e per i dati acquisiti quando è disattivata la funzione **Unique Folder Creation** (vedere [“Preferenze - Scheda Sequenza”](#), pagina 102). Tali sequenze devono essere rielaborate in **Method and Run Control**, definendo il parametro della sequenza **Part of method to run** come **Reprocess Only**. Per le sequenze generate con la ChemStation B.02.01 e versioni successive, l'opzione di rielaborazione in **Method and Run Control** è stata rimossa e la rielaborazione è disponibile nella tavola di navigazione come **Data Analysis Task**.

Un'ulteriore alternativa consiste nell'aggiungere tali campioni o sequenze a un nuovo set di risultati auto-assemblato. In quel caso si assegnano anche i metodi di sequenza e in seguito è possibile rielaborare l'intera sequenza (vedere [“Set di risultati autoassemblato”](#), pagina 150).

Tenere presenti le seguenti regole relative alla rielaborazione:

- Quando carica un set di risultati nella tavola di navigazione, ChemStation carica automaticamente anche il file della sequenza (*.S) situato nel set di risultati. Il file della sequenza contiene tutte le righe della sequenza che si riferiscono a qualsiasi file di dati appartenente a questo set di risultati.
- Tutte le operazioni vengono eseguite sui metodi della sequenza. Se devono essere applicati parametri di analisi modificati, è necessario modificare i metodi della sequenza.
- Durante la rielaborazione, vengono aggiornati il file Batch (*.b), il registro esecuzione della singola analisi/sequenza (*.log) e la tavola di navigazione. Il singolo metodo di analisi dei dati (DA.M) di ciascun file di dati elaborato viene sovrascritto con il metodo della sequenza.
- Per aggiungere nuovi metodi da una delle directory dei metodi master alla tavola di sequenza, utilizzare ChemStation Explorer per copiare il metodo master nel set di risultati oppure fare clic su **Method > Update Methods....** È quindi possibile selezionare il nuovo metodo di sequenza nella tavola di sequenza. Non è possibile aggiungere o rimuovere righe nella tavola di sequenza.
- Nella finestra di dialogo Sequence Parameters (Parametri della sequenza) è possibile modificare solo il commento della sequenza e l'utilizzo delle infor-

mazioni della tavola di sequenza. Tutti gli altri campi devono essere impostati durante l'acquisizione dei dati o non vengono applicati alla rielaborazione.

The screenshot shows the 'Sequence Parameters: Local LC' dialog box with the 'Sequence parameters' tab selected. The 'Data file' section has 'Path' set to 'C:\Chem32\2\DATA\' and 'Subdirectory' empty. Under 'Prefix/Counter', 'Prefix' is 'demo' and 'Counter' is '000001'. 'Part of method to run' is set to 'Reprocessing Only'. 'Use sequence table information' is checked. 'Wait' is set to '0.00 minutes after loading a new method.'. In the 'Bar code reader' section, 'Use in sequence' is checked, and 'On a bar code mismatch' is set to 'Inject anyway'. 'Update master method (data analysis parameters)' is unchecked. The 'Sequence comment' field contains 'Aqc. of isocratic standard samples'. The 'Operator Name' is 'admin'. The 'ChemStore' section has a 'Transfer Settings...' button. The 'Shutdown' section has 'Post-Sequence command/macro' set to 'PUMPALL OFF' and 'Not ready timeout' set to '0.00 minutes'. The 'Fraction information' section has an empty 'Fraction start location' field. At the bottom are 'OK', 'Cancel', and 'Help' buttons.

Figura 33 Parametri della sequenza nell'analisi dei dati

Gestione degli eventi manuali di integrazione

Gli eventi manuali di integrazione, come una linea di base disegnata a mano, sono file di dati ancora più specifici rispetto agli eventi di integrazione temporizzati. In caso di cromatogrammi complessi, è preferibile utilizzare questo tipo di eventi per la rielaborazione.

Pertanto nella ChemStation B.04.01 e versioni superiori, gli eventi manuali di integrazione possono essere memorizzati direttamente nel file dei dati anziché con il metodo. Ogniqualvolta il file dei dati viene esaminato o rielaborato, gli eventi manuali di integrazione nel file dei dati vengono applicati automaticamente. Un'analisi contenente eventi manuali di integrazione viene segnalata nella relativa colonna della tavola di navigazione.

Oltre agli strumenti per tracciare una linea di base ed eliminare manualmente un picco, nell'interfaccia sono disponibili tre altri strumenti che consentono di:

- salvare gli eventi manuali dei cromatogrammi attualmente visualizzati nel file di dati
- rimuovere tutti gli eventi dai cromatogrammi attualmente visualizzati
- annullare gli ultimi eventi manuali di integrazione (questo è disponibile fino al salvataggio dell'evento)

Quando si passa al file di dati successivo durante la revisione nella tavola di navigazione, la ChemStation controlla se ci sono eventi manuali di integrazione non salvati e chiede all'utente se desidera salvarli.

Gli eventi manuali memorizzati nel file dei dati durante la revisione nella tavola di navigazione non interferiscono con gli eventi manuali di integrazione memorizzati durante la revisione in modalità **Batch**. Queste due modalità di revisione sono completamente diverse rispetto agli eventi manuali di un file dei dati.

Nelle versioni della ChemStation precedenti alla B.04.01, gli eventi manuali di integrazione potevano essere memorizzati solo nel metodo. Nella versione B.04.01, è ancora possibile utilizzare questo flusso di lavoro. Il menu **Integration** nella finestra **Data Analysis** fornisce le seguenti opzioni per la gestione degli eventi manuali di integrazione con il metodo:

Update Manual Events of Method: salva i nuovi eventi manuali tracciati nel metodo.

Apply Manual Events from Method: applica gli eventi manuali correntemente salvati nel metodo al file dei dati attualmente caricato.

Remove Manual Events from Method: elimina gli eventi manuali dal metodo.

Per convertire gli eventi manuali memorizzati in un metodo e memorizzarli nel file dei dati, applicare gli eventi dal metodo e memorizzare i risultati nel file dei dati. Se necessario, rimuovere gli eventi dal metodo.

Se è selezionata la casella di controllo **Manual Events** della **Integration Events Table** di un metodo, gli eventi manuali del metodo vengono sempre applicati quando si carica un file dei dati con quel metodo. Se il file dei dati contiene eventi manuali aggiuntivi, vengono utilizzati gli eventi nel file dei dati. Se la casella di controllo **Manual Events** è abilitata, all'utente non viene mai richiesto di salvare gli eventi nel file dei dati.

Set di risultati autoassemblato

Nella vista **Data Analysis**, la tavola di navigazione visualizza il contenuto della singola analisi o sequenza che è stata caricata. È possibile caricare, scaricare o aggiungere file di dati alla tavola di navigazione. Utilizzando il comando **Sequence > Create New Result Set**, è possibile creare un nuovo set di risultati autoassemblato dai dati attualmente visualizzati nella tavola di navigazione (consultare la sezione [“Assemblamento di un nuovo set di risultati”](#), pagina 98). I set di risultati autoassemblati possono essere rielaborati nello stesso modo dei set di risultati creati automaticamente.

Scaricamento del set di dati corrente

Utilizzando il comando **Unload Current Dataset** dal menu di scelta rapida della tavola di navigazione, è possibile riportare la tavola di navigazione allo stato vuoto originale, come avviene direttamente dopo l'avvio di ChemStation. Se ci sono dati non salvati, viene chiesto di salvarli.

Eliminazione del file di dati selezionato

Utilizzando il comando **Remove selected Data Files** dal menu di scelta rapida della tavola di navigazione, è possibile rimuovere le linee selezionate dalla tavola di navigazione. Questo rimuove solo il riferimento nella tavola di navigazione, non cancella il file di dati fisico dal set di risultati o dalla singola analisi nel file system. È possibile solo eliminare i riferimenti dei file aggiunti/sovrapposti.

Aggiornamento dei metodi

Nella vista **Data Analysis**, sono disponibili numerose opzioni per copiare i metodi tra le directory dei metodi master e i set di risultati. Per ulteriori informazioni, consultare [“Amministrazione dei metodi”](#), pagina 51.

Visualizzatore di report per l'analisi dei dati

A seconda delle configurazioni, ChemStation salva ad un certo punto automaticamente i report per le singole iniezioni e i report riassuntivi di sequenza nel file system. Con il Visualizzatore di report, è possibile visualizzare in modo semplice i file dei report salvati, così da poter controllare i risultati ottenuti dall'acquisizione dei dati, dall'elaborazione o dal ricalcolo.

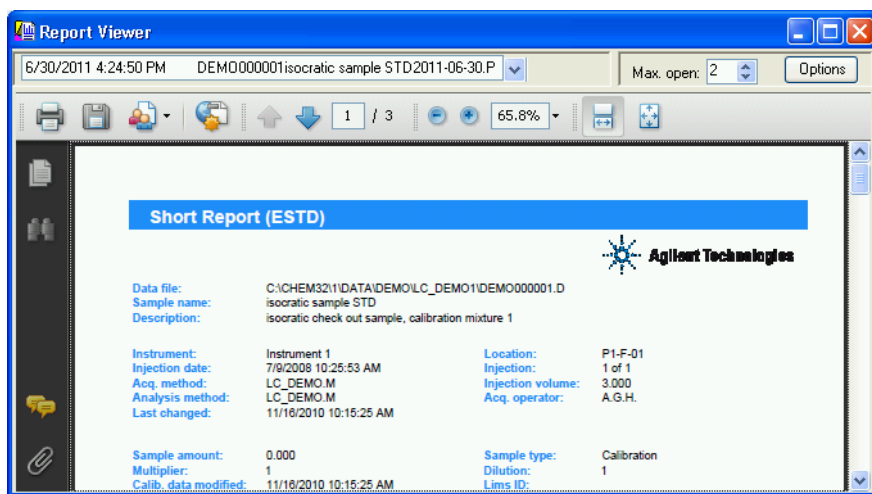


Figura 34 Visualizzatore di report

L'uso del Visualizzatore di report offre i seguenti vantaggi:

- consente di aprire i file dei report direttamente dalla piattaforma ChemStation e non è necessario cercare i file nel file system
- ogni report viene aperto in una finestra mobile separata, quindi il confronto dei report diventa più facile affiancando finestre una all'altra
- i report sono visualizzabili a schermo intero
- si possono usare le funzionalità di Adobe Reader per visualizzare i report in .pdf
- è possibile ricercare testo specifico sia nei report .txt sia nei .pdf
- quando si rielabora una sequenza, non è necessario attendere il completamento dell'operazione, possono essere aperti i file dei report salvati per i campioni della sequenza che sono già stati completati

Avvio del visualizzatore di report

È possibile aprire il visualizzatore di report da menu, tramite icone nella barra strumenti o da menu contestuale della tavola di navigazione. Vi sono diversi elementi per report riassuntivi di sequenza e report per singola iniezione.

Per visualizzare i report per singola iniezione:

- Selezionare il menu **Report > View Report File** per visualizzare i file dei report del segnale caricato.
- Selezionare il comando **View Saved Report File(s)** dal menu contestuale per un campione specifico nella tavola di navigazione. Con tale comando è possibile caricare uno o più file di report di qualsiasi segnale, anche se al momento non caricato.
- Fare clic sull'icona **View saved Report File(s)** dalla barra degli strumenti dello spazio di lavoro per visualizzare uno o più file di report del segnale caricato.



Per visualizzare i report riassuntivi di sequenza:

- selezionare il menu **Sequence > View Summary Report File**.
- Fare clic sull'icona **View Saved Sequence Summary Report File(s)** dalla barra degli strumenti di navigazione (in modalità rielaborazione).



Configurazione delle finestre del visualizzatore di report

È possibile configurare diversi aspetti del comportamento del visualizzatore di report. Tutte queste impostazioni sono accessibili tramite pulsante **Options** nella finestra del visualizzatore di report.

Può essere definito il numero massimo di finestre apribili in parallelo nel visualizzatore di report. Le finestre vengono ciclicamente riutilizzate. Quando vengono visualizzati più file di report rispetto al numero massimo di finestre consentito, le prime finestre aperte sono le prime a cambiare contenuto.

NOTA

Se non si ha necessità di raffrontare più report, si consiglia di limitare il numero di finestre del visualizzatore di report a 1.

Per il confronto dei report, potrebbe inoltre essere utile adattare la barra del titolo delle finestre del visualizzatore di report. Sono disponibili vari token per le finestre del visualizzatore di report, che visualizzano i report riassuntivi di sequenza, i report per singola iniezione per i campioni della sequenza o report per singola iniezione per analisi singole. Tali token consentono di distinguere le singole finestre del visualizzatore di report.

Le finestre del visualizzatore di report appaiono sempre nella parte superiore dell'applicazione ChemStation. Per poter lavorare contemporaneamente con ChemStation e il visualizzatore di report, è possibile ridimensionare e posizionare le due finestre in modo che siano entrambi visibili. Quando viene chiusa la ChemStation, vengono salvate posizioni e dimensioni delle finestre. All'avvio successivo della ChemStation, verranno riutilizzate le medesime impostazioni.

Attività con il visualizzatore di report

È possibile utilizzare il visualizzatore di report, ad esempio, nei seguenti flussi di lavoro:

- Impostazione del metodo e della sequenza per il salvataggio nel file system dei report in formato PDF. A completamento dell'analisi della sequenza, apertura dei file di report (report riassuntivo di sequenza o report per singola iniezione) direttamente da piattaforma ChemStation nel visualizzatore di report. Uso delle funzionalità di Adobe Reader, quali zoom o comando trova per controllare il report in dettaglio.
- Scaricamento dalla memorizzazione centralizzata dei dati di una sequenza contenente già file di report.
 - Per vedere il risultato finale, selezionare il relativo campione nella tavola di navigazione e aprire il file di report direttamente dalla ChemStation nel visualizzatore di report.
 - Se necessario, è possibile cambiare il metodo e rielaborare la sequenza. Durante la fase di rielaborazione, è già possibile visualizzare i report dei campioni completati.

Nel visualizzatore di report è possibile selezionare, dall'elenco nell'angolo in alto a sinistra, sia il report nuovo sia il report vecchio. I report sono distinguibili per data di creazione, indicata nella voce dell'elenco. In base alle impostazioni di trasferimento, i dati (inclusi i nuovi file di report) possono essere automaticamente caricati nella memorizzazione centralizzata dei dati una volta completata la rielaborazione.

- Analisi di una sequenza che salva solo file di report TXT. Tali file di report possono essere controllati anche nel visualizzatore di report.
- Rassegna di diversi report negli stessi campioni della sequenza, in base a diversi stili o modelli di report.

Come primo passo si crea una sequenza con un report prestazioni esteso. Si analizza o rielabora la sequenza per ottenere il file di report. Se il risultato visualizzato nel report è soddisfacente, si cambia il metodo della sequenza per creare un report ridotto (ad esempio, si seleziona un modello di report diverso o lo stile ridotto classico **Short**). Quindi si rielabora la sequenza per ottenere report più brevi. Quando si visualizza un report nel visualizzatore di report, è possibile passare da un report all'altro selezionando il report dall'elenco nell'angolo in alto a sinistra. La data di creazione di ciascun file è indicata nella voce dell'elenco.

Revisione

In Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition è disponibile una nuova vista che copre i flussi di pura revisione per l'analisi dei dati. In questa vista **Review**, è possibile generare report per un'intera sequenza, un sottoinsieme di una sequenza o qualsiasi scelta di file di dati da sequenze diverse o singoli campioni.

Nella vista **Review**, non si carica nessun metodo e non si crea nessun nuovo risultato come nel ricalcolo o nella rielaborazione. I report che si generano nella vista **Review** visualizzano solo i risultati che sono stati già calcolati.

È possibile selezionare un modello di report e applicarlo a una specifica selezione di file di dati. La combinazione del modello e della selezione di file di dati determina l'output del report generato.

NOTA

La vista **Review** è disponibile solo se è stato attivato Intelligent Reporting nella Configurazione di strumento del Pannello di controllo OpenLAB.

Requisiti per Intelligent Reporting

ChemStation C.01.05 genera i dati risultanti in un formato specifico (*.ACAML) che viene usato da Intelligent Reporting. Se si vogliono creare dei report per i dati acquisiti con una ChemStation Versione A o B, è prima necessario rigenerare i risultati usando ChemStation C.01.05 (ad esempio ricalcolando i dati o generando report per iniezioni singole nella vista Analisi dati). Se i risultati non sono disponibili nel formato richiesto, i report generati nella vista Revisione non conterranno alcun dato.

Selezione di file di dati

È possibile selezionare i file di dati richiesti caricando le sequenze o le singole analisi dalla Struttura di navigazione in ChemStation Explorer. Tutti i file di dati disponibili vengono quindi visualizzati nella tavola di navigazione. Nella tavola di navigazione si selezionano i file di dati specifici per cui si desiderano vedere i risultati nel report.

Caricamento dei file di dati

È possibile caricare tutti i file di dati da un'intera sequenza o da una cartella Analisi singole. Nella scheda **Data** di ChemStation Explorer, è possibile fare doppio clic sulla sequenza o utilizzare il comando **Load** dal menu di scelta rapida per caricare tutti i file di dati inclusi.

Quando si caricano i file di dati, la tavola di navigazione viene cancellata automaticamente prima che siano visualizzati i nuovi file di dati. È possibile quindi preparare i dati per un *Report per singolo campione* o per un *Report riassuntivo di sequenza*.

Aggiunta di file di dati

Se si desidera confrontare i risultati di sequenze diverse, è possibile prima caricare una sequenza e quindi aggiungere da un'altra sequenza i file di dati richiesti. Nella scheda **Data** di ChemStation Explorer, utilizzare il comando **Add Data Files...** dal menu di scelta rapida da aggiungere solo file di dati specifici alla selezione già caricata. Si apre una finestra di dialogo in cui è possibile selezionare i file di dati richiesti.

Quando si aggiungono file di dati, la tavola di navigazione aggiunge i file di dati all'elenco dei file di dati già caricati. È possibile preparare quindi i dati, ad esempio, per i *Report su più sequenze*.

Selezione dei file di dati per i report

La tavola di navigazione visualizza che tutti i file di dati della sequenza o della raccolta di singoli campioni su cui si è fatto doppio clic in ChemStation Explorer. Nella tavola di navigazione, si selezionano i file di dati per cui si desidera creare il report. Quando si genera un report saranno incluse solo le linee selezionate.

Selezione del modello di report

È possibile selezionare i modelli di report richiesti dalla scheda **Report Templates** in ChemStation Explorer. La Struttura di navigazione visualizza tutti i modelli di report nella directory chem32/repstyle.

Anteprima del report

Il report risultante è determinato sempre dalla selezione dei dati e dal modello del report. Quindi ChemStation genera il report corrispondente e visualizza l'anteprima del report quando sono stati selezionati uno o più file di dati ed è stato caricato un modello di report.

È possibile inviare il report a una stampante o salvarlo come file (PDF, XLS, DOC o TXT). In caso di utilizzo di un sistema di memorizzazione centralizzata dei dati, è possibile anche caricare direttamente il report nell'archivio centralizzato.

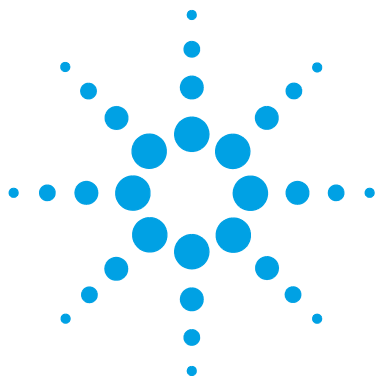
Flussi di revisione possibili

È possibile utilizzare la vista **Review**, ad esempio, nei seguenti flussi di lavoro:

- Viene caricata una sequenza e si selezionano tutti i file di dati della sequenza. Si carica un modello di report e si genera un *report riassuntivo di sequenza*.
- Dopo avere generato un report riassuntivo di sequenza, si carica un altro modello di report. Si esaminano gli stessi dati utilizzando un *layout di report diverso*.
- Si carica una sequenza e si seleziona solo un sottoinsieme dei file di dati. Si carica un modello di report e si genera un report riassuntivo di sequenza per una *sola parte della sequenza*.
- Dopo aver caricato un sottoinsieme dei file di dati, si aggiungono altri file di dati (da una sequenza o da una raccolta di singoli campioni). Si carica un modello di report e si genera un *report su più campioni o su più sequenze*.

6 **Concetti relativi ad analisi e revisione dei dati**

Revisione



7 Calibrazione

Definizione dei termini	160
Tipi di calibrazione	161
Calibrazione a livello singolo	161
Calibrazione multilivello	162
Intervalli di calibrazione	164
Corrispondenze delle curve di calibrazione	164
Trattamento dell'origine	165
La tavola di calibrazione	168
Somma dei picchi	169
Campioni incogniti	170
Ricalibrazione	171
Che cos'è la ricalibrazione?	171
Perché ricalibrare?	171
Ricalibrazione manuale	172
Ricalibrazioni con somma dei picchi	172
Modalità di ricalibrazione	173
Ricalibrazione di picchi non identificati	173

Questo capitolo descrive i concetti relativi alla calibrazione.



Definizione dei termini

Calibrazione	La calibrazione è il procedimento di determinazione di fattori di risposta utilizzati per calcolare le concentrazioni assolute di componente iniettando campioni di calibrazione appositamente preparati. La tavola di calibrazione viene anche utilizzata per l'identificazione.
Composto	Un composto chimico può comprendere diversi picchi, in una calibrazione multisegnale, di solito uno per segnale. In una calibrazione a un solo segnale il composto si riferisce a un picco.
Livello di calibrazione	Un livello di calibrazione comprende i punti di calibrazione per una concentrazione di campione di calibrazione. In una calibrazione multisegnale, i punti di calibrazione possono essere distribuiti su diversi segnali.
Punto di calibrazione	Un punto di calibrazione si riferisce a un rapporto quantità/risposta per un picco sulla curva di calibrazione.
Campione di calibrazione	Un campione di calibrazione, chiamato anche standard di calibrazione o miscela standard, è un campione contenente una quantità nota del composto da quantificare. Nel software il campione viene chiamato anche iniezione dal vial relativo al campione di calibrazione. I campioni di calibrazione possono essere acquistati da fornitori di prodotti chimici o preparati direttamente utilizzando una quantità accuratamente misurata di composto puro. La quantità di composto nel campione di calibrazione viene espressa in genere come concentrazione, di solito in unità ng/μl.

Tipi di calibrazione

ChemStation offre due tipi di calibrazione, a livello singolo e multiplo.

Calibrazione a livello singolo

La curva di calibrazione illustrata nella [Figura 35](#), pagina 161 contiene un punto, cioè un livello. Per la curva di calibrazione a livello singolo, la risposta del rivelatore si suppone lineare, nell'intervallo di lavoro delle concentrazioni per il campione di interesse. Il fattore di risposta per il picco di un determinato componente è dato dall'inverso dell'inclinazione della curva di calibrazione passante attraverso il punto e per l'origine. Uno svantaggio della calibrazione a livello singolo è dato dal fatto che la risposta del rivelatore alla concentrazione del campione si suppone lineare e passa per l'origine in un diagramma di concentrazione contro risposta. Ciò non è sempre vero e può portare a risultati non accurati.

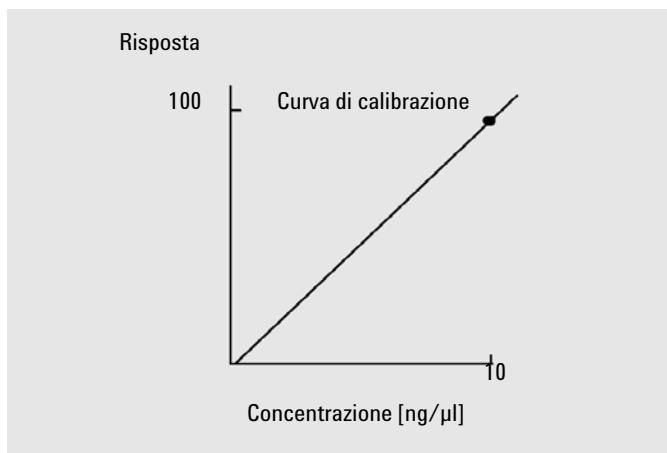


Figura 35 Curva di calibrazione a livello singolo

Per ottenere risultati quantitativi accurati, la curva di calibrazione deve avere almeno due livelli. Questi livelli devono comprendere le quantità che ci si aspetta di trovare nei campioni incogniti.

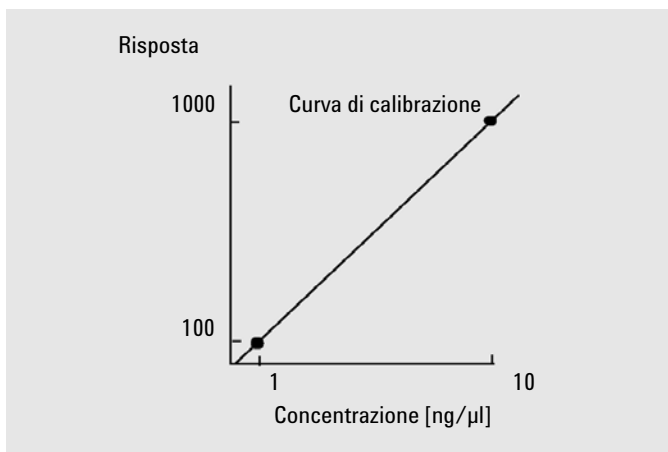


Figura 36 Curva di calibrazione a due livelli

Ad esempio se si desidera quantificare un composto e si suppone che i campioni incogniti possano contenere da 1 a 10 ng/μl, allora la curva di calibrazione deve comprendere almeno due livelli, come mostrato in [Figura 36](#), pagina 162.

Limiti di quantità

ChemStation permette di definire scale quantitative valide per le quantità assolute di ciascun componente.

Calibrazione multilivello

La calibrazione multilivello si usa quando non è abbastanza accurato supporre che un componente mostri una risposta lineare o confermare la linearità della scala di calibrazione. Ciascun livello di calibrazione corrisponde ad un campione con una particolare concentrazione di componenti. I campioni devono essere preparati in modo che la concentrazione di ciascun componente vari lungo la scala di concentrazioni attese nei campioni sconosciuti. In questo modo si permette una modifica della risposta del rivelatore in funzione della concentrazione e si calcolano i nuovi fattori di risposta.

Questa curva di calibrazione ha tre livelli e mostra una corrispondenza lineare passante per l'origine. Questo metodo di corrispondenza è simile alla calibra-

zione a punto singolo. La risposta del rivelatore alla concentrazione si suppone lineare. La differenza fra i due tipi di calibrazione è tale che con corrispondenza lineare, l'inclinazione della retta della risposta del rivelatore può essere determinata con la migliore corrispondenza passante per un certo numero di punti, uno per ciascun livello.

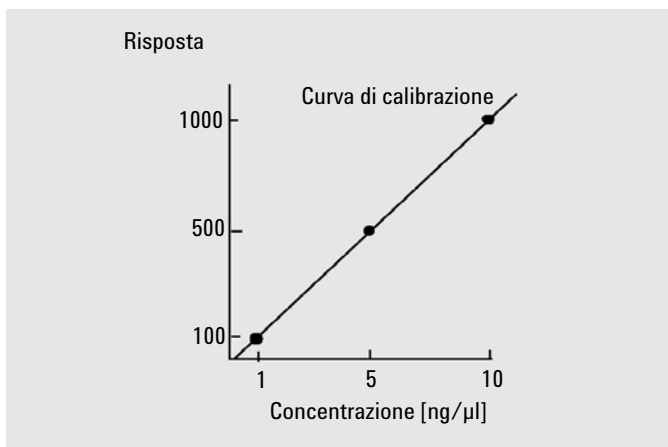


Figura 37 Curva di calibrazione multilivello con tre livelli

La tavola di calibrazione corrispondente, cioè la tabulazione delle informazioni utilizzate per produrre la curva, può risultare simile a quella riportata nella [Tabella 18](#), pagina 163.

Tabella 18 Tavola di calibrazione

Livello	Quantità (ng/μl)	Risposta (conteggi area)
1	1	100
2	5	500
3	10	1000

In questo esempio i campioni di calibrazione usati per produrre i tre livelli sono stati identificati come 1, 2 e 3.

Intervalli di calibrazione

Ogni calibrazione multilivello è valida per l'intervallo di concentrazioni usate per i campioni di calibrazione. L'estrapolazione di una curva di calibrazione, specialmente se non lineare, è nel migliore dei casi solo un'approssimazione. La scala di calibrazione valida per ogni composto può essere definita nella finestra di dialogo **Compound Details**. Ogni valore inserito per quel composto può essere espresso come limite superiore o inferiore. Se questi limiti vengono superati il rapporto di stampa viene annotato.

Corrispondenze delle curve di calibrazione

Sono disponibili vari tipi di calcolo corrispondenti alle curve che possono essere usate per calibrazioni multilivello.

- Spezzata
- Lineare
- Logaritmica
- Potenza
- Esponenziale
- Quadratico
- Cubico
- Di media (Risposta/Quantità)

Corrispondenza non lineare

In alcuni casi, la risposta del rivelatore ai cambiamenti di concentrazione del campione non è lineare. Per questi tipi di analisi un metodo di calibrazione a regressione lineare non è adatto e si devono usare calcoli di calibrazione a livello multiplo.

Trattamento dell'origine

Esistono quattro modi di trattare l'origine tracciando una curva di risposta:

- Ignorarla
- Comprenderla
- Forzarne l'inserimento
- Collegarla

Per forzare l'origine in modo che venga inserita nella curva di calibrazione, è necessario riprodurre i punti di calibrazione ottenuti intorno all'origine, facendoli passare dal primo al terzo quadrante. L'uso di tali punti per il calcolo della regressione assicura che la curva di calibrazione che ne risulta passi attraverso l'origine. Ciò è illustrato anche nella [Figura 38](#), pagina 165.

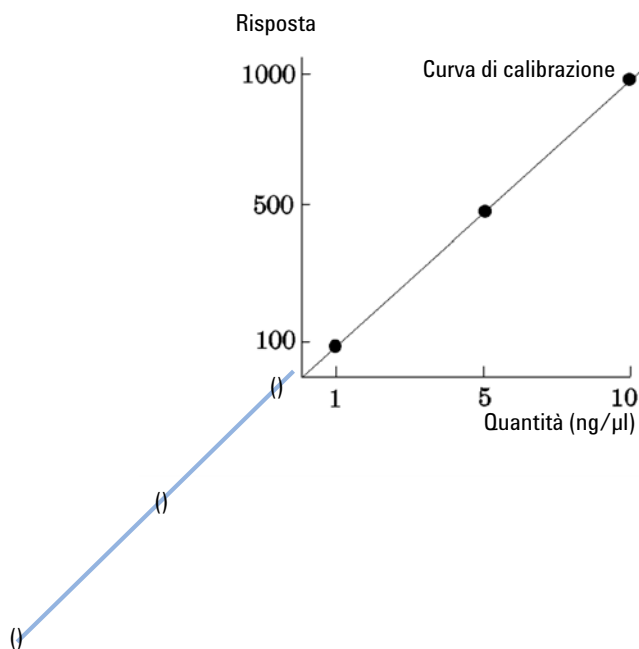


Figura 38 Forzatura dell'origine perché venga inclusa

Per ulteriori informazioni sulle corrispondenze delle curve di calibrazione e sul trattamento dell'origine, consultare la *Guida in linea*.

Peso dei punti di calibrazione

Quando si imposta la curva di calibrazione predefinita, è possibile specificare il peso relativo (o importanza) dei vari punti di calibrazione usati per generare la curva.

Possono essere scelte le seguenti opzioni:

Peso	Descrizione
Uguale	Tutti i punti di calibrazione hanno peso uguale nella curva.
Lineare (Amnt)	Un punto di calibrazione con quantità x ha il peso $1/x$ normalizzato alla quantità inferiore in modo che il fattore di peso più elevato sia 1. La normalizzazione viene effettuata moltiplicando il peso per la quantità inferiore. Ad esempio il peso di un punto di calibrazione con quantità x è $(1/x) \times a$ dove a è la quantità minore del composto calibrato, preparata negli standard di calibrazione. Se l'origine viene compresa, le viene assegnata la media dei pesi degli altri punti di calibrazione.
Lineare (Resp)	Per un punto di calibrazione con risposta y si normalizza il peso $1/y$ alla risposta inferiore in modo che il fattore di peso maggiore sia 1. La normalizzazione si effettua moltiplicando il peso per la risposta inferiore. Ad esempio il peso di un punto di calibrazione con quantità y è $(1/y) \times b$ dove b è la risposta corrispondente alla quantità inferiore del composto calibrato preparato negli standard di calibrazione. Se l'origine viene compresa, le viene assegnata la media dei pesi degli altri punti di calibrazione.
Quadratico (Amnt)	Un punto di calibrazione con quantità x ha il peso $1/x^2$ normalizzato alla quantità inferiore in modo che il fattore di peso più elevato sia 1. La normalizzazione viene effettuata moltiplicando il peso per la quantità inferiore. Ad esempio il peso di un punto di calibrazione con quantità x è $(1/x^2) \times a^2$ dove a è la quantità minore del composto calibrato, preparata negli standard di calibrazione.
Quadratico (Resp)	Per un punto di calibrazione con risposta y si normalizza il peso $1/y^2$ alla risposta inferiore in modo che il fattore di peso maggiore sia 1. La normalizzazione si effettua moltiplicando il peso per la risposta inferiore. Ad esempio il peso di un punto di calibrazione con quantità y è $(1/y^2) \times b^2$ dove b è la risposta corrispondente alla quantità inferiore del composto calibrato preparato negli standard di calibrazione.
Numero di calibrazioni	Un punto di calibrazione viene pesato secondo il numero di ricalibrazioni del punto. Non viene effettuato alcun tipo di normalizzazione.

Pesi di punti di calibrazione quadratici, ad esempio, possono essere utilizzati per regolare punti di calibrazione sparsi. Ciò assicura che i punti di calibrazione più vicini all'origine, che possono essere misurati in maniera più accurata, ottengano un peso maggiore dei punti di calibrazione più lontani dall'origine, che possono essere sparsi.

La decisione di quale tipo di peso utilizzare per i punti di calibrazione dovrebbe essere basata sulle esigenze del metodo.

La tavola di calibrazione

La tavola di calibrazione specifica la conversione in unità scelte di aree o altezze di picchi secondo il procedimento di calcolo selezionato. La tavola di calibrazione contiene una lista di tempi di ritenzione/migrazione ottenuta da un'analisi di calibrazione. I tempi di ritenzione/migrazione vengono paragonati ai tempi di ritenzione/migrazione di picchi relativi all'analisi di un campione. Dove si verifica una corrispondenza si suppone che il picco del campione rappresenti lo stesso composto presente nella tavola di calibrazione. Durante un'analisi o mentre viene prodotto un report di stampa, le quantità inserite per ogni picco vengono usate per calcolare le quantità per il procedimento di calcolo selezionato per il report. Il tipo e la quantità di informazioni richieste per creare una tavola di calibrazione variano con il tipo di procedimento di calcolo desiderato.

Per creare una tavola di calibrazione sono necessarie le informazioni seguenti:

- Il tempo di ritenzione/migrazione per ogni picco componente la miscela di calibrazione e
- la quantità di ogni composto usato nel preparare la miscela di calibrazione espressa in unità significative.

Somma dei picchi

Per alcune applicazioni nelle industrie farmaceutiche e petrolchimiche viene fornita una tavola di somma dei picchi, la somma può così essere effettuata in maniera più efficiente eseguendo le seguenti operazioni.

- Somma dell'area di picchi che rientrano entro un intervallo specificato dall'utente.
- Somma delle aree di un intervallo di picchi e calcoli effettuati con singolo moltiplicatore.
- Somma delle aree di tutti i picchi con lo stesso nome.

La tavola di somma dei picchi è simile ma distinta dalla tavola di calibrazione standard. Come la tavola di calibrazione è associata al metodo corrente.

NOTA

È necessario creare una tavola di calibrazione per un'analisi prima di poter creare una tavola di somma dei picchi.

Campioni incogniti

È un campione che contiene una quantità sconosciuta di composto da quantificare.

Per stabilire quanto di quel composto è contenuto nel campione incognito è necessario:

- Creare una curva di calibrazione per il composto
- Iniettare un'aliquota di campione incognito ed effettuare l'analisi esattamente allo stesso modo usato per il campione di calibrazione
- Determinare, a partire dal segnale, la risposta, e quale sia l'area o l'altezza del picco dovuta alla quantità sconosciuta di composto
- Usare la curva di calibrazione per calcolare la quantità di composto nel campione incognito

Ad esempio se l'area del picco nel campione incognito è 500, è possibile determinare che la quantità nell'incognito è di 5 ng/μl, utilizzando la curva di calibrazione illustrata nella [Figura 39](#), pagina 170.

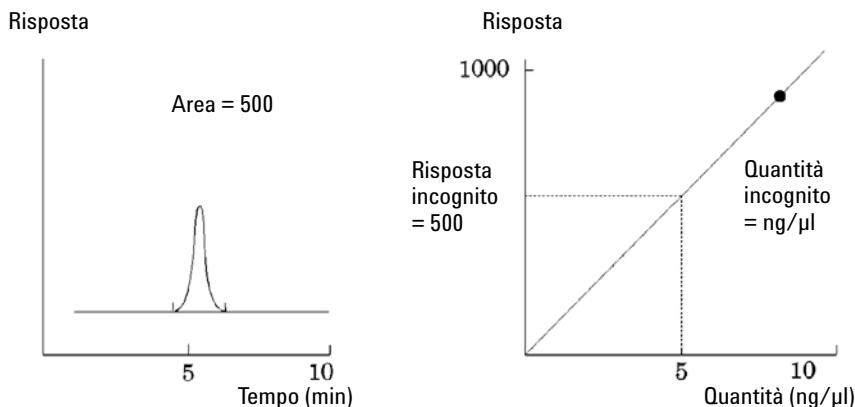


Figura 39 Segnale di un campione incognito e curva di calibrazione

Ricalibrazione

Che cos'è la ricalibrazione?

La ricalibrazione è il processo utilizzato quando si desidera aggiornare un livello sulla curva di calibrazione. Quando si ricalibra, si analizza un altro campione che contiene gli stessi composti di calibrazione dell'originale e, ciò che è più importante, nella stessa quantità. Quando si analizza un campione di calibrazione si ottengono fattori di risposta aggiornati e tempi di ritenzione/migrazione. È anche possibile scegliere i fattori di risposta medi su di un certo numero di calibrazioni, in modo che i fattori di risposta possano essere valutati uniformemente.

Perché ricalibrare?

La maggior parte delle calibrazioni hanno vita breve a causa delle continue modifiche in cromatografia. La ricalibrazione è necessaria per mantenere l'accuratezza dell'analisi. Supponiamo di aver creato una tavola di calibrazione per il composto caffeina, che sarà usata ogni volta che viene richiesta una quantificazione relativa ad un campione contenente caffeina. Ad un certo punto bisognerà sostituire la colonna/il capillare. Sebbene questi siano sostituiti con altri esattamente dello stesso tipo, non si comporteranno esattamente allo stesso modo dei precedenti usati al momento della creazione della tavola di calibrazione per la caffeina. Quindi, per assicurare che le analisi siano significative, bisogna ricalibrare i livelli della tavola di calibrazione con la nuova colonna o capillare, per analizzare poi i campioni che contengono quantità sconosciute di caffeina. Così facendo si è certi di quantificare campioni analizzati nelle stesse condizioni.

Ricalibrazione manuale

È possibile inserire informazioni sulla calibrazione dei picchi manualmente e normalizzare la tavola di calibrazione utilizzando il tasto di opzione Manual Setup nella finestra di dialogo New Calibration Table. Di solito viene prodotto un nuovo metodo di calibrazione analizzando una miscela standard di calibrazione, creando una tavola di calibrazione ed inserendo le quantità di tutti i picchi calibrati per ottenere fattori di risposta. Per alcune applicazioni questo tipo di approccio non è indicato, ad esempio, per l'industria petrolchimica dove si analizzano per anni gli stessi composti ed i fattori di risposta di ciascuno di essi e dei vari rivelatori sono disponibili con facilità.

La tavola di calibrazione viene creata manualmente inserendo i picchi ed i fattori di risposta nella tavola di calibrazione, ricalibrando il metodo utilizzando uno standard che contenga almeno un picco di risposta di riferimento e selezionando un aggiornamento Delta%.

Per indicare un picco specifico come riferimento per il calcolo dei rapporti del tempo di ritenzione, è possibile impostare questo picco come picco di riferimento per il rapporto del tempo di ritenzione. Tutti i picchi con lo stesso numero di riferimento vengono quindi riferiti a questo picco.

Ricalibrazioni con somma dei picchi

Quando si effettua una ricalibrazione, gli intervalli dei tempi di ritenzione/migrazione nella tavola Peaksum relativa al metodo verranno aggiornati prima di effettuare la ricalibrazione vera e propria. Le ricalibrazioni con somma dei picchi vengono effettuate in questo modo per assicurare che il delta venga incorporato ai calcoli di tempo.

Modalità di ricalibrazione

Dal software della ChemStation la ricalibrazione può essere effettuata in due modi. È possibile effettuare la calibrazione in modo interattivo oppure automatico durante una sequenza di analisi automatizzata. La ricalibrazione interattiva avviene quando l'utente interviene direttamente nel processo con l'aiuto del software dopo aver iniettato uno o più campioni di calibrazione. La ricalibrazione con utilizzo di una sequenza avviene al momento specificato, ma l'operazione viene effettuata direttamente dal software. Per ulteriori informazioni, consultare la sezione [“Ricalibrazione automatica”](#), pagina 113.

Per informazioni sulle modalità di ricalibrazione da software, consultare la parte Come... della Guida in linea.

Ricalibrazione di picchi non identificati

Esistono tre modi di ricalibrare i picchi non identificati.

No Recalibration

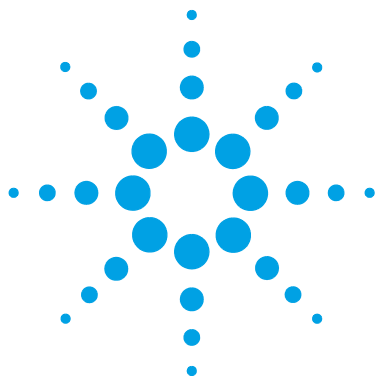
Se un picco della tavola di calibrazione non può essere identificato nei risultati di integrazione, la calibrazione non è considerata valida. Se questo avviene in una sequenza, anche la sequenza viene interrotta.

Partial Recalibration

Questa funzione permette la ricalibrazione dei soli picchi identificati. Se alcuni picchi non si trovano, la calibrazione non viene interrotta ma il rapporto di stampa riporta la mancanza dei picchi.

Recalibration of all Retention/Migration Times

Questa funzione permette la ricalibrazione di tutti i tempi di ritenzione/migrazione di tutti i picchi identificati e non. Questa operazione viene effettuata utilizzando i tempi di ritenzione/migrazione dei picchi identificati. Non vi è aggiornamento di fattori di risposta per i picchi non identificati.



8 Report

Che cos'è un report?	176
Classic Reporting e Intelligent Reporting	177
Intelligent Reporting	178
Vantaggi di Intelligent Reporting	178
Editor dei modelli di report (RTE) per Intelligent Reporting	179
Registrazione dei modelli di report	183
Registrazione dei report generati	185
Modelli di report nella memorizzazione centralizzata dei dati	186
Classic Reporting	187
Rapporti sui risultati	187
Risultati quantitativi	188
Rapporto relativo ai valori dei campi personalizzati	189
Stili di report	190
Altri parametri per lo stile dei rapporti di stampa	192
Report riassuntivi di sequenza	193
Formati dei file dei report	197

Questo capitolo descrive i concetti di Intelligent Reporting e di Classic Reporting.



Che cos'è un report?

Un rapporto di stampa può comprendere informazioni quantitative e qualitative sul campione in corso di analisi. Può essere in forma di stampa o visualizzato su schermo o file elettronico. Il rapporto di stampa può comprendere particolari relativi ai picchi rivelati durante l'analisi e la rappresentazione grafica dei segnali acquisiti.

Report per scopi diversi

È possibile specificare report che servono a scopi diversi durante l'acquisizione e la revisione dei dati:

- Il *report riassuntivo di sequenza* è definito nella scheda **Sequence Output** della finestra di dialogo **Sequence Parameters**. Questo report viene creato automaticamente da ChemStation dopo avere completato un'acquisizione di sequenza o avere rielaborato una sequenza.
- Il *report per una sola iniezione* è definito nella finestra di dialogo **Specify Report**. Questo report viene creato per ogni singolo campione durante un'acquisizione o una rielaborazione di sequenza.

Con Intelligent Reporting, si possono creare modelli per diversi tipi di report, a seconda dello scopo del report. Per ulteriori informazioni, consultare la sezione [“Tipi di report”](#), pagina 179.

Destinazione del report

Un report può essere inviato alle seguenti destinazioni:

- **Screen**
Il rapporto di stampa (comprendente testo e grafica) viene visualizzato sullo schermo nella finestra Report Preview, dalla quale può essere stampato.
- **Printer**
Il rapporto di stampa comprendente sia testo che grafici viene stampato tramite una stampante selezionata.
- **File**
Il rapporto di stampa viene salvato in un file, ad esempio, un file PDF Adobe.

Classic Reporting e Intelligent Reporting

Classic Reporting e Intelligent Reporting

Con Agilent OpenLAB CDS, è possibile scegliere il tipo di Reporting che si desidera utilizzare: *Classic Reporting* come veniva utilizzato nelle versioni precedenti di ChemStation, o *Intelligent Reporting* quello fornisce un potente linguaggio standardizzato di definizione del report e migliori funzioni di revisione. Le seguenti sezioni descrivono i due tipi di reporting.

Conseguenze dell'attivazione di Intelligent Reporting

Se si desidera utilizzare Intelligent Reporting, è necessario abilitare Intelligent Reporting nella Configurazione strumento del Pannello di controllo OpenLAB.

L'attivazione di Intelligent Reporting ha le seguenti conseguenze per ChemStation:

- La vista **Report Layout** mostra l'Editor del modello di report per Intelligent Reporting.
- La vista **Review** è visibile.
- Nella finestra di dialogo **Sequence Parameters**, è possibile scegliere fra Classic Reporting e Intelligent Reporting.
- Nella finestra di dialogo **Specify Report**, è possibile scegliere fra Classic Reporting e Intelligent Reporting.

Intelligent Reporting

Vantaggi di Intelligent Reporting

Intelligent Reporting offre i seguenti vantaggi:

- È possibile utilizzare la vista **Review**.
- La maggior parte delle funzionalità che sono disponibili in diverse impostazioni e in numerose finestre di dialogo per Classic Reporting fanno ora parte dei modelli di report. È possibile creare o modificare i modelli di report utilizzando la vista **Report Layout**, quale contiene il nuovo Editor dei modelli di report per Intelligent Reporting. L'Editor dei modelli di report offre numerose potenti funzioni:
 - È possibile accedere a tutti i dati risultanti generati da ChemStation selezionando il campo di dati corrispondente.
 - È possibile creare le proprie espressioni per eseguire calcoli sui campi di dati. È possibile utilizzare qualsiasi espressione Microsoft Visual Basic valida.
 - È possibile creare espressioni in cui eseguire calcoli con i campi personalizzati di ChemStation.
 - Evidenziazione dei risultati: È possibile fornire espressioni che evidenziano specifici risultati a seconda del loro valore.
 - Snippet: L'Editor dei modelli di report fornisce elementi preconfigurati del report, i cosiddetti *snippet*, che è possibile inserire nel modello del report trascinando la selezione.
- Per la creazione delle descrizioni di modelli di report personalizzati è possibile utilizzare lo strumento Documentazione modello di report.
- È possibile eseguire report sui seguenti valori, come definito dalla Farmacopea Europea (il rapporto picco-valle è disponibile anche con Classic Reporting; per informazioni più dettagliate sui campi obbligatori, consultare il *manuale di riferimento*):
 - Rapporto segnale-rumore
 - Ritenzione relativa
 - Tempo di ritenzione relativo

Editor dei modelli di report (RTE) per Intelligent Reporting

Tipi di report

È possibile creare tipi diversi di report. A seconda del tipo di report, in un modello di report sono disponibili diversi campi di dati e gli elementi del report sono raggruppati in modo diverso.

Sono disponibili i seguenti tipi di report:

- **Single Injection**

Il report generato visualizza gli elementi del report del modello in modo separato per ogni iniezione nell'ambito di dati attuale. È possibile visualizzare i dati per ogni iniezione, ma non è possibile confrontare i risultati di iniezioni diverse in una tabella o in una matrice.

- **Single Sequence Summary**

Il report generato visualizza gli elementi del report del modello in modo separato per ogni sequenza nell'ambito di dati attuale. È possibile confrontare i risultati di iniezioni diverse in una tabella o in una matrice, ma non i risultati di diverse sequenze.

- **Cross-Sequence Summary**

Con questo tipo di report, i dati *non* sono raggruppati automaticamente. È quindi necessario prestare più attenzione al raggruppamento degli elementi del report, ma in compenso è possibile creare elementi del report che confrontano i dati di più sequenze.

Formato del modello

Tutti i modelli di report sono basati su RDL (Report Definition Language), un formato XML standardizzato fornito da Microsoft.

Per creare modelli di report, è possibile utilizzare il l'Editor dei modelli di report (RTE) o Microsoft SQL Server Business Intelligence Development Studio (BI Studio):

- *RTE* fornisce un'interfaccia di facile utilizzo che aiuta a creare i modelli di report in pochi passaggi. Supporta tutti i tipi di elementi dei report e la maggior parte delle relative opzioni di configurazione.

Con RTE, non è possibile modificare i modelli che sono stati creati con BI Studio. Se è necessario modificare tali modelli in RTE, rivolgersi al centro di assistenza Agilent.

- *BI Studio* fornisce la gamma completa delle funzioni. Tuttavia, l'utilizzo di BI Studio richiede un'avanzata conoscenza dello sviluppo di modelli. Per maggiori informazioni, consultare il *Manuale per i progettisti di modelli di report - G4635-90007*. Il manuale viene fornito con OpenLAB ECM Intelligent Reporter. Contattare Agilent per ricevere una copia del manuale. Il manuale contiene anche descrizioni dettagliate dei modelli di report Agilent che vengono forniti con OpenLAB ECM Intelligent Reporter. Questi modelli sono progettati specificatamente per l'utilizzo in BI Studio e contengono la maggior parte delle funzionalità avanzate che non sono disponibili in RTE.

In BI Studio, è possibile modificare qualsiasi modello di report, indipendentemente dal fatto che sia stato creato con RTE o con BI Studio.

Campi dati

È possibile accedere a tutti dati risultanti generati da ChemStation durante un'acquisizione. Per ogni valore è possibile selezionare il relativo campo dati in cui è memorizzato il valore. I campi dati del modello di report possono essere organizzati secondo i propri requisiti. I campi di dati disponibili sono organizzati nelle seguenti categorie:

- Sequenza
- Campione
- Iniezione
- Segnale
- Composto
- Picco
- Curva di calibrazione
- Strumento
- File
- Progetto

Elementi del report

A un modello di report è possibile aggiungere diversi elementi del report, a seconda dei requisiti. Per ogni elemento del report è possibile configurare numerose proprietà come il formato del carattere, il colore di sfondo, espressioni, ecc. Sono disponibili i seguenti elementi del report:

- Campi di testo
- Campi dati
- Tabelle
- Matrici
- Gruppi compositi
- Immagini
- Cromatogrammi
- Curve di calibrazione
- Spettri
- Grafici
- Informazioni sui metodi

Snippet

L'Editor dei modelli di report fornisce gli snippet, multipli elementi preconfigurati del report o del gruppo di report, che è possibile inserire nel modello del report trascinando la selezione.

Gli snippet sono, ad esempio, tabelle preconfigurate per risultati composti o per l'idoneità del sistema, cromatogrammi per il plottaggio di un singolo segnale o di più segnali o diagrammi di controllo della precisione di calibrazione o della stabilità di conservazione nel tempo. È possibile utilizzare gli snippet come punto di partenza e adattarli secondo i requisiti.

Calcolo personalizzato

Nell'Editor dei modelli di report è possibile visualizzare i valori dei campi dati man mano che vengono generati da ChemStation, oppure è possibile calcolare nuovi valori per scopi diversi. È possibile creare espressioni utilizzando i campi dati esistenti o anche utilizzando campi personalizzati.

I valori possono essere memorizzati come variabili ed è possibile accedere a queste variabili da un elemento del report situato più avanti nel modello.

L'Editor dei modelli di report fornisce un Editor di espressioni che aiuta a creare espressioni valide. Tutte le espressioni sono basate su Microsoft Visual Basic.

Formattazione condizionale

A seconda dei valori che derivano dall'espressione, è possibile configurare alcune proprietà di un campo o di una cella. Ad esempio, se viene visualizzata la quantità del composto, è possibile creare una condizione per uno sfondo rosso se la quantità supera un determinato valore.

Dati dimostrativi

Quando si sviluppa un nuovo modello di report nella vista Layout report, ChemStation fornisce dati dimostrativi che vengono visualizzati nell'Editor dei modelli di report quando si modifica o si visualizza in anteprima un modello. I dati di demo corrispondono al set di dati (sequenza o singole analisi) che è attualmente selezionato nella tavola di navigazione della vista **Data Analysis**. Se si sviluppa un modello per un report riassuntivo di sequenza, è necessario caricare una sequenza nella vista Analisi dati e selezionare un sottoinsieme di campioni. Se si sviluppa un modello per un report su una singola iniezione, è sufficiente selezionare un solo campione nella vista Analisi dati.

Registrazione dei modelli di report

ChemStation fornisce numerosi modelli di report predefiniti. Questi modelli predefiniti sono situati nella directory chem32\repstyle.

Per la sequenze, i modelli di report utilizzati per i report riassuntivi di sequenza e report per singole iniezioni sono situati nel set di risultati allo stesso livello dei metodi di sequenza. Nessun modello di report è memorizzato a livello dei file di dati di una sequenza.

Per singoli campioni, il modello di report è situato nel file di dati.

Finestra di dialogo Sfoglia modelli

Se si sfogliano i modelli di report nella finestra di dialogo **Sequence Parameters** o nella finestra di dialogo **Specify Report**, è possibile sincronizzare i modelli nella directory dei modelli predefiniti e nel set di risultati.

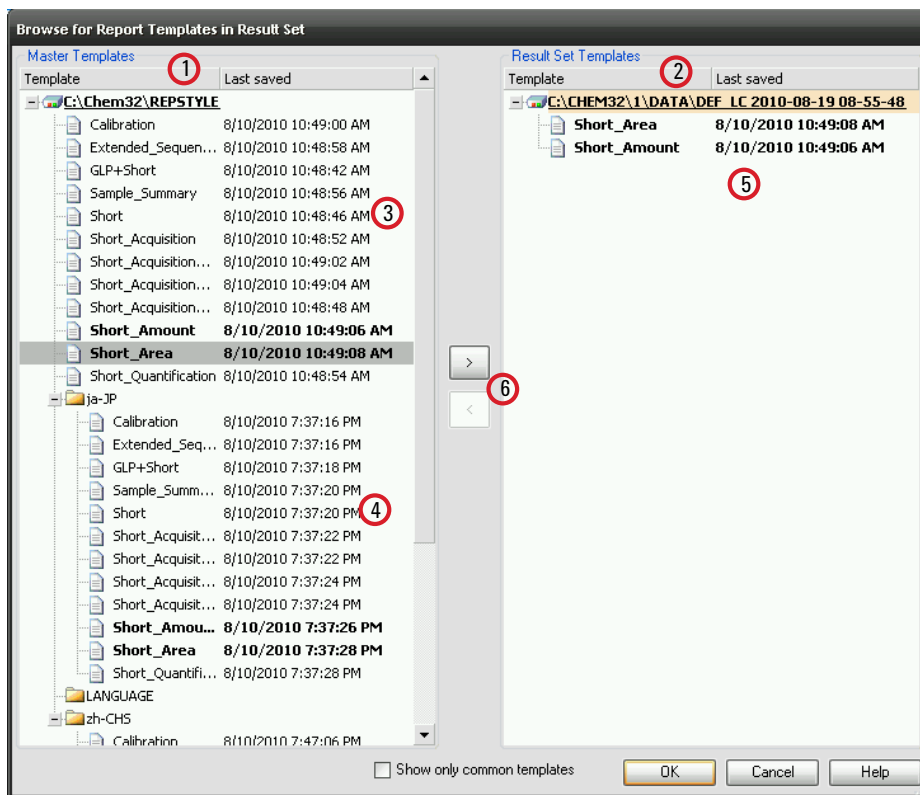


Figura 40 La finestra di dialogo **Browse for Report Templates in Result Set**

- 1 A sinistra sono visibili i modelli nella directory dei modelli predefiniti (chem32/repstyle).
- 2 A destra sono visibili i modelli presenti nel set di risultati attualmente caricato.
- 3 Per ogni modello è visibile la data dell'ultimo salvataggio. Il suggerimento relativo alla data mostra l'ultima voce nella cronologia del modello.
- 4 I modelli possono anche essere memorizzati in sottocartelle di chem32/repstyle.
- 5 I modelli comuni al set di risultati e alla directory dei modelli predefiniti sono visualizzati in grassetto. Per la corrispondenza dei modelli viene utilizzato solo il nome.
- 6 È possibile copiare i modelli dalla directory dei modelli predefiniti al set di risultati utilizzando il trascinamento o il pulsante >.

Gestione del file di dati con la creazione di cartelle esclusive disattivata

Con l'opzione di disattivazione della creazione di cartelle esclusive, ai modelli dei report riassuntivi di sequenza e dei report per singola iniezione viene sempre fatto riferimento dalla directory Modelli predefiniti (chem32\repstyle).

Registrazione dei report generati

Denominazione dei file dei report per singola iniezione

Quando si fornisce un nome di file per un report per singola iniezione nella finestra di dialogo **Specify Report**, è possibile utilizzare i seguenti token:

- <Data> data corrente
- <Ora> ora corrente
- <SeqN> nome del file di sequenza (sarà “_” per un singolo campione)
- <Cont> nome del set di risultati (sarà “_” per un singolo campione)
- <SamN> nome del campione
- <Lims> LimsID
- <InjD> data e ora dell'iniezione
- <File> nome del file di dati
- <SLoc> ubicazione del campione

Denominazione dei file dei report riassuntivi di sequenza

Quando provide un nome di file per il report riassuntivo di sequenza nella scheda **Sequence Output** della finestra di dialogo **Sequence Parameters**, è possibile utilizzare i seguenti token:

- <Data> data corrente
- <Ora> ora corrente
- <File> nome del file di sequenza
- <Cont> nome del set di risultati

Modelli di report nella memorizzazione centralizzata dei dati

Se si utilizza un sistema di memorizzazione centralizzata dei dati, i modelli di report vengono considerati come un tipo di documento separato. È possibile caricare i modelli nella memorizzazione centralizzata dei dati, scaricare i modelli dalla memorizzazione centralizzata dei dati oppure aggiornare tutti i modelli di report locali con l'ultima versione disponibile nella memorizzazione centralizzata dei dati.

Classic Reporting

Rapporti sui risultati

Sono disponibili due tipi di rapporto di stampa.

- Il rapporto di stampa non calibrato, che non corregge la risposta del rivelatore.
- Il rapporto di stampa calibrato, che mostra risultati corretti in modo da compensare le differenze di risposta del rivelatore ai vari componenti del campione.

Report non calibrati

I report non calibrati comprendono **Area%** e **Height%**. Si usano soprattutto per la preparazione di report calibrati. Possono essere validi come report finale se le quantità di composto richieste per produrre una risposta unitaria di area o altezza per i composti di interesse sono simili.

Rapporti di stampa calibrati

I rapporti di stampa calibrati correggono la differenza di risposta del rivelatore ai composti riportati. Uno o più campioni di calibrazione contenenti quantità note di composti devono essere analizzati nelle stesse condizioni usate per il campione incognito. I dati di integrazione di questi campioni di calibrazione si usano per preparare la tavola di calibrazione. È una lista di tempi di ritenzione/migrazione, quantità e risposte, usata per i rapporti di stampa. I rapporti di stampa calibrati si basano su due procedimenti di calibrazione chiamati standard interno ed esterno.

Rapporto di stampa di standard esterno

Il rapporto di stampa ESTD elenca i risultati con le unità o i composti scelti come percentuale di tutti i presenti. La procedura di standard esterno richiede che il volume relativo iniettato di entrambi i campioni, quello di calibrazione ed il campione incognito, debbano essere conosciuti in dettaglio. L'affidabilità del rapporto di stampa di standard esterno è limitata dalla riproducibilità dell'iniezione e da tutti i fattori che cambiano da campione a campione.

Rapporto di stampa di standard interno

I limiti della procedura di standard esterno possono essere compensati usando la procedura di standard interno. Si aggiunge una quantità perfettamente conosciuta di standard interno (non necessariamente la stessa) sia al campione di calibrazione sia al campione incognito. La risposta di ogni composto che interessa viene divisa per la risposta dello standard interno per ottenere un rapporto di risposta. Le curve di calibrazione sono una rappresentazione di questo rapporto di risposta contro il rapporto di quantità; questa informazione viene usata per calcolare i risultati del rapporto di stampa. In questo modo si eliminano errori di volume di iniezione o piccole modifiche del sistema cromatografico/elettroferografico che possono interessare tutti i composti. Il rapporto di stampa ISTD elenca i risultati con le unità scelte.

Report dei diagrammi di controllo

La funzione Report dei diagrammi di controllo tiene sotto controllo un singolo risultato durante più analisi di un composto specifico calibrato. La funzionalità **Control Chart** viene installata dopo che ChemStation è già operativo. I metodi che utilizzano questa funzione passano i risultati ottenuti al foglio elettronico di Microsoft Excel dopo ogni analisi. Excel viene quindi usato per stampare il report.

Risultati quantitativi

Il tipo di rapporto di stampa si identifica dal nome del metodo di calcolo usato per prepararlo, ad esempio rapporto ISTD. I tipi sono brevemente descritti di seguito. I calcoli relativi ad ogni rapporto vengono visualizzati in [“Risultati quantitativi”](#), pagina 188.

Area% è il tipo di rapporto di stampa più semplice e non richiede dati di calibrazione poiché non viene effettuata alcuna correzione della differenza di risposta del rivelatore per i componenti del campione. Questo tipo di rapporto è particolarmente utile per lo sviluppo di tavole di calibrazione da usare con gli altri tipi di rapporto di stampa. È anche adatto alle analisi nelle quali la differenza della risposta del rivelatore non è significativa.

Height% è un tipo di rapporto di stampa simile al precedente. Per i calcoli viene usata come base l'altezza invece dell'area.

Norm% produce un rapporto nel quale ogni componente viene riportato come percentuale di tutti i componenti presenti. I picchi vengono corretti in base alla risposta del rivelatore prima di calcolare la percentuale di ognuno.

ESTD fornisce la quantità reale di ogni sostanza in qualsiasi unità scelta. Le quantità vengono calcolate utilizzando una tavola di calibrazione precedentemente stabilita. L'uso di standard esterni richiede che il volume della miscela di calibrazione usata sia conosciuto.

ESTD% indica la quantità relativa di ogni sostanza come percentuale di campione iniettato. Le quantità vengono calcolate utilizzando una tavola di calibrazione precedentemente stabilita. L'uso di standard esterni richiede che il volume della miscela di calibrazione usata sia conosciuto.

ISTD indica la quantità reale di ogni sostanza. Le quantità vengono calcolate utilizzando una curva di calibrazione stabilita in precedenza. L'uso di uno standard interno sia nel campione, sia nella miscela di calibrazione elimina la necessità di conoscere e controllare il volume del campione iniettato. Corregge anche qualsiasi variazione delle prestazioni dello strumento da analisi ad analisi.

ISTD% indica la quantità relativa di ogni sostanza come percentuale del campione iniettato. L'uso di standard interni sia nel campione sia nella miscela di calibrazione, elimina la necessità di conoscere e controllare il volume di campione iniettato. Corregge anche qualsiasi variazione delle prestazioni dello strumento da analisi ad analisi.

Rapporto relativo ai valori dei campi personalizzati

I valori dei campi personalizzati collegati ad un dato campione in base al suo metodo di acquisizione possono essere aggiunti al rapporto. I campi personalizzati del campione sono elencati al termine dell'intestazione del campione che contiene le informazioni generali sul campione. I campi personalizzati relativi ai composti vengono visualizzati alla fine del rapporto.

Stili di report

Si può scegliere di aggiungere un segnale a ciascuno dei tipi di report barando l'apposita casella nella finestra di dialogo Specifica report.

Sono disponibili i seguenti stili:

- **None:** non viene incluso alcun tipo di testo. Il cromatogramma verrà riportato solo se è stata scelta l'opzione Aggiungi output cromatogramma.
- **Short:** contiene i risultati quantitativi di tutti i segnali integrati impostati nella finestra di dialogo Dettagli segnale (solo LC) o nella finestra di dialogo Segnale (solo GC). L'ampiezza del picco nel report breve viene calcolata con la formula più complessa utilizzata dall'integratore: $PW = 0,3(IPRight - ILeft) + 0,7(Area/Altezza)$ dove IPRight e ILeft sono i punti di flesso.
- **Detail:** contiene i risultati del segnale e i risultati quantitativi oltre alle curve di calibrazione. L'intestazione viene archiviata in un file chiamato RPTHEAD.TXT nella directory del metodo. È possibile modificarla usando un elaboratore di testi e inserire un testo specifico per un metodo.
- **Header + Short:** contiene un'intestazione del file e i risultati quantitativi. L'intestazione viene archiviata in un file chiamato RPTHEAD.TXT nella directory del metodo. È possibile modificarla usando un elaboratore di testi e inserire un testo specifico per un metodo.
- **GLP + Short:** contiene l'intestazione, le informazioni sul campione, le condizioni dello strumento, il registro elettronico, il segnale e i risultati quantitativi. L'intestazione viene archiviata in un file chiamato RPTHEAD.TXT nella directory del metodo. È possibile modificarla usando un elaboratore di testi e inserire un testo specifico per un metodo.
- **GLP + Detail:** contiene l'intestazione, le informazioni sul campione, le condizioni dello strumento, il registro elettronico, il segnale, i risultati quantitativi e le curve di calibrazione. L'intestazione viene archiviata in un file chiamato RPTHEAD.TXT nella directory del metodo. È possibile modificarla usando un elaboratore di testi e inserire un testo specifico per un metodo.
- **Full:** contiene le intestazioni, le informazioni sul campione, le condizioni dello strumento, il registro elettronico, i segnali e i risultati quantitativi. L'intestazione viene archiviata in un file chiamato RPTHEAD.TXT nella directory del metodo. È possibile modificarla usando un elaboratore di testi e inserire un testo specifico per un metodo.

- **Performance:** genera un report secondo i limiti precisati nella finestra di dialogo Modifica limiti prestazioni del menu Idoneità del sistema.

Per metodi non calibrati, i parametri del rapporto comprendono, per ciascun picco, il numero di picchi, il tempo di ritenzione/migrazione, l'area e l'altezza del picco, la descrizione del segnale, l'ampiezza reale del picco a metà altezza, (consultare anche la sezione *Ampiezza reale del picco W_x* nel manuale di riferimento), la simmetria, il fattore k' , l'efficienza (piatti) e la risoluzione di ogni picco.

Per i metodi calibrati i parametri del report comprendono il numero di picchi, il tempo di ritenzione/migrazione, il nome del composto, la quantità, la descrizione del segnale, l'ampiezza reale del picco a metà altezza, la simmetria, il fattore k' , l'efficienza (piatti) e la risoluzione.

Il calcolo del picco a metà altezza non è uguale alla formula più complessa dell'ampiezza del picco utilizzata dall'integratore. I valori di efficienza e risoluzione si basano sull'ampiezza del picco calcolata. L'intestazione del report contiene tutte le informazioni importanti per il metodo, compreso lo strumento, la colonna/capillare, il campione e i parametri di acquisizione. Anche il segnale viene rappresentato graficamente.

- **Performance + Noise:** combina lo stile del report Prestazioni con i calcoli del rumore di fondo per la scala definita nella finestra di dialogo Modifica intervallo rumore nel menu Idoneità del sistema. Inoltre il rumore viene dato come sei volte la deviazione standard, come picco a picco e come rumore di fondo ASTM; sono determinati anche deriva e variazione casuale.
- **Performance + Extended:** genera un report esteso con tutti i parametri, dai calcoli sulla prestazione dei picchi ai singoli diagrammi per ciascun picco. I diagrammi comprendono la linea di base, le tangenti e le ampiezze dei picchi ad altezze determinate. Questo tipo di report include solo i picchi calibrati.

Oltre ai parametri stampati per lo stile Prestazioni, vengono determinati e stampati altri parametri: l'inizio e la fine del picco i tempi, il disallineamento, l'eccesso, l'ampiezza del picco, il fattore di scodamento USP, l'intervallo di tempo fra punti di dati, il numero di punti di dati, i momenti statistici, i piatti teorici, i piatti al metro, la selettività e la risoluzione per ogni picco. L'ampiezza del picco, i piatti, i piatti per metro, la selettività e la risoluzione vengono calcolati attraverso i metodi: metà altezza reale, sigma 5, tangente e scodamento (per informazioni più dettagliate, consultare la sezione *Definizioni di test sulle prestazioni* nel manuale di riferimento).

L'intestazione del report contiene informazioni relative al metodo, come lo strumento, la colonna/capillare, il campione e i parametri di acquisizione, e

una rappresentazione grafica del segnale. Per una lista completa degli algoritmi contenenti i parametri di prestazione dei picchi, consultare la sezione *Definizione di test sulle prestazioni* nel manuale di riferimento.

Gli stili di report spettrali (**Short + Spectrum**, **Detail + Spectrum**, **Performance + Library Search**) sono descritti nel volume *Conoscere il modulo di valutazione spettri*.

Come aggiungere uno stile di report personalizzato alla lista degli stili esistenti

È possibile aggiungere alla lista degli stili disponibili un modello di report personale creato nella finestra Layout report di ChemStation.

NOTA

Tutti i report, eccetto quelli sulle prestazioni, elencano le ampiezze di picchi calcolate con una formula più complessa dall'integratore (per una descrizione dettagliata del calcolo dell'ampiezza del picco, consultare *Ampiezza del picco* nel manuale di riferimento).

Altri parametri per lo stile dei rapporti di stampa

Tavola di somma dei picchi

Per alcune applicazioni nelle industrie farmaceutiche e petrolchimiche viene fornita una tavola di somma dei picchi, la somma può così essere effettuata in maniera più efficiente con le seguenti funzionalità:

- Somma dell'area di picchi che giacciono entro un intervallo specificato dall'utente
- Somma delle aree di un intervallo di picchi e calcoli effettuati con singolo moltiplicatore
- Somma delle aree di tutti i picchi con lo stesso nome

Una volta creato il rapporto di stampa ChemStation utilizza la tavola di somma dei picchi per produrre un rapporto di somma da stampare dopo i calcoli del rapporto standard ad eccezione del valore di Norm% sostituito dal rapporto di somma dei picchi.

Disposizione del rapporto di stampa per picchi non calibrati

Per modificare la disposizione del rapporto di stampa relativo a picchi non calibrati, selezionare una delle seguenti funzioni dalla finestra di dialogo Specify Report (Specifica rapporto).

- Separately (Separatamente) per inserire i picchi non calibrati in una tavola separata se si sceglie la suddivisione per tempi di ritenzione/migrazione o in tavole separate se si sceglie la suddivisione per segnali.
- With Calibrated Peaks (Con picchi calibrati) per inserire i picchi non calibrati insieme ai picchi calibrati.
- Do Not Report (Nessun rapporto) per evitare l'inserimento di picchi non calibrati.

Report riassuntivi di sequenza

Panoramica

ChemStation è in grado di produrre una serie di rapporti di stampa standard per ogni singola analisi. Il rapporto di stampa di riassunto della sequenza è un ulteriore tipo di rapporto di stampa che permette di calcolare e riportare parametri in analisi diverse. È molto utile, ad esempio, per verificare la stabilità di uno strumento o la robustezza di un metodo nuovo.

Questo tipo di rapporto di stampa può comprendere vari elementi.

- Una pagina di intestazione.
- La configurazione dello strumento, compresi i numeri di revisione ed i particolari della colonna/del capillare in uso.
- La tavola di sequenza che elenca che cosa avrebbe dovuto fare la sequenza automatica.
- Un registro elettronico che descrive cosa è stato effettivamente realizzato e qualsiasi evento inaspettato prodottosi durante la sequenza.
- Liste di metodi.
- Rapporti di stampa singoli per ogni campione.
- Statistiche sulle analisi basate sui criteri selezionati. *Le statistiche vengono calcolate solo per i composti calibrati.*

- Un indice con il numero di pagina ed i riferimenti a sezioni particolari del rapporto di stampa.

Impostazione di un report riassuntivo di sequenza

Quando si imposta un report riassuntivo di sequenza, si può scegliere qualsiasi combinazione delle seguenti nove categorie attivando le apposite caselle e, dove necessario, scegliere uno stile di report dalla selezione Modello. Ogni modello specifica i contenuti ed il layout di quella particolare selezione di report riassuntivo della sequenza.

Si possono scegliere gli stili che seguono.

One Page Header

Il modello GLP stampa la parola GLP a lettere grandi come pagina titolo per il report che segue. Comprende la data e lo spazio per la firma.

Configuration

Scegliere **Configuration** se si desidera inserire la configurazione dello strumento e le specifiche della colonna analitica/capillare.

Sequence Table

Scegliere **Sequence Table** per inserire nel report una lista di campioni, parametri di quantificazione e nomi di metodi. Questa lista dovrebbe corrispondere a quanto il sistema ha analizzato.

Logbook

Scegliere **Logbook** per avere un elenco delle analisi effettuate dal sistema, comprese le condizioni dello strumento e qualsiasi evento inatteso verificatosi durante l'analisi dei campioni.

Methods

Scegliere **Methods** per elencare tutti i metodi analitici usati in una serie di analisi automatizzata.

Analysis Reports

Scegliere **Analysis Reports** per ottenere report singoli secondo lo stile impostato per il metodo.

I singoli report di analisi possono essere stampati dopo ogni analisi a seconda dello stile di report specificato per il metodo in questione, oltre alle sezioni specificate in **Sequence Summary Reporting**. Consultare la sezione "Output di sequenza".

SUILabel Type = Application > Statistics for Calibrated and Sample Runs

Scegliendo Calcolo statistico esecuzioni si possono ottenere analisi statistiche di tendenza per campioni di calibrazione. Scegliendo invece **Statistics** si possono ottenere analisi statistiche di tendenza per analisi di campioni (sconosciuti). Per entrambi le selezioni si possono avere i modelli Statistiche standard e Statistiche estese. **Extended Statistics** stampa le analisi in forma di grafico mentre **Standard Statistics** stampa unicamente il testo. La selezione effettuata nella finestra di dialogo **Items and Limits for Extended Statistics** viene usata solo se si sceglie l'opzione **Extended Statistic** nella finestra di dialogo **Sequence Summary Parameters**.

Se si sceglie l'opzione **Standard Statistic** nella finestra di dialogo **Sequence Summary Parameters**, le statistiche riportate saranno:

- Tempo di ritenzione/migrazione
- Area
- Altezza
- Quantità
- Ampiezza del picco (basata sullo stile del report, consultare la sezione "[Stili di report](#)" , pagina 190)
- Simmetria.

Il calcolo statistico non distingue fra i diversi livelli di calibrazione in una sequenza che utilizza metodi di calibrazione multilivello. Ciò significa che i valori che dipendono dalla concentrazione, ad esempio Area, Altezza, Quantità (vedere la finestra di dialogo Voci e limiti per statistiche estese) sono presi tutti insieme, indipendentemente dal livello di calibrazione. I valori di **Statistics for Calibration Runs** non sono quindi utili per metodi di calibrazione multilivello nelle sequenze.

Riassunto

La selezione di **Summary** stampa una visione d'insieme delle serie di campioni analizzate e dei metodi usati. Se si seleziona Riassunto unitamente ad altre voci di Riassunto sequenza vengono inseriti i numeri di pagina che si riferiscono ad altre parti del report riassuntivo di sequenza. Sono disponibili due stili.

Sample Summary mette in forma di tabulato i particolari delle analisi dei campioni della sequenza con qualche informazione relativa ai campioni come nome, nome del file di dati, metodo e numero di vial.

Compound Summary crea un tabulato delle analisi del campione con risultati quantitativi di base per ogni composto calibrato o ogni picco, a seconda del metodo.

Output di sequenza

Nella finestra di dialogo **Sequence Output** è possibile definire dove stampare il report riassuntivo della sequenza.

Scegliendo **Report to file** ed inserendo un nome di file viene inviato il report nel file specificato. L'impostazione predefinita prevede che i dati vengano salvati in GLPrprt.txt. Nei sistemi gascromatografici a doppia iniezione i dati vengono salvati in GLPrptF.txt e GLPrptB.txt rispettivamente per l'iniettore anteriore e quello posteriore.

Selezionare **Report to PDF** per salvare il report come documento PDF. Il report viene salvato nella cartella della sequenza con il nome CLPrprt.PDF

Selezionare **Report to HTML** per stampare il report in formato HTML. Il report viene salvato in una directory HTM nella directory dei dati specificata in **Sequence Parameters**. Il report HTML è costituito da un file indice (index.htm) e da almeno altri due file, un file di contenuto (contents.htm) e un file GIF (Graphics Interchange Format) per ogni pagina del report (ad esempio page1.gif). Per visualizzare il report HTML, aprire il file indice nel browser.

Scegliendo **Report to printer** il report viene stampato sulla stampante di sistema. Stampa report singolo per ogni analisi attiva la stampa di report singoli per campione, secondo il metodo analitico, dopo ogni analisi. Questi report saranno aggiunti a quelli specificati in Report riassuntivo sequenza e prodotti alla fine dell'intera sequenza. È possibile specificare una nuova destinazione per questi report nella finestra di dialogo **Sequence Output** o utilizzare la destinazione specificata per ogni metodo.

Formati dei file dei report

Il report può essere salvato in formati diversi. Ciascun formato ha un'estensione specifica. È possibile selezionare più formati per un report.

- .TXT** Il testo viene stampato come file di solo testo UNICODE.
- .EMF** La parte grafica (segnale o curva di calibrazione) viene salvata come metafile Windows (WMF). Ciascun report può contenere più file .WMF. Il formato di file prodotto è conforme agli standard Microsoft come definito nella documentazione dello sviluppo del software di Windows. Questi file sono compatibili con il formato Aldus Placeable Metafile (APM) usato da numerosi pacchetti software brevettati.
- .DIF** I dati contenuti nel report in forma tabulare vengono salvati in formato DIF (Data Interchange Format). Questo formato è supportato da programmi con fogli elettronici come Microsoft Windows EXCEL. Indipendentemente dallo stile scelto, vengono salvate solo le informazioni contenute nel tipo "Breve".
- .CSV** Il report è in formato CSV (Comma Separated Values). Si tratta di un formato molto semplice per i dati in forma tabulare, supportato da molti programmi con fogli elettronici e database. Indipendentemente dallo stile scelto, vengono salvate solo le informazioni contenute nel tipo "Breve".

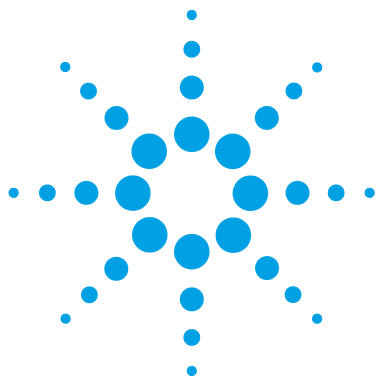
Un report può contenere più file .DIF e .CSV. Il primo file di ciascun blocco, ad esempio REPORT00.CSV, contiene l'intestazione. I file che seguono contengono i dati dei tabulati.

Se i risultati sono ordinati in base al tempo di ritenzione/migrazione, è necessario un solo file per avere la tavola completa, ad esempio REPORT01.CSV.

Se i risultati sono ordinati in base al segnale, sarà necessario usare una tavola diversa per ciascun segnale. In questo caso i file sono denominati da Report01.CSV a ReportNN.CSV, dove NN è il numero del segnale.

- .XLS** Il report viene esportato in Microsoft Excel in formato (XLS). I dati devono essere generalmente rielaborati.
- .PDF** Il report viene stampato in un file .pdf. La configurazione della ChemStation consente di installare una stampante PDF chiamata "PDF-XChange 4.0". Questa stampante sarà visibile nel menu **Start/Impostazioni/Stampanti e fax** solo dopo il riavvio del computer. All'avvio della ChemStation, viene creata un'altra stampante temporanea chiamata "ChemStation PDF" basata sulla stampante PDF-XChange. Durante l'esecuzione di qualsiasi sessione della ChemStation, ChemStation PDF sarà visibile nel menu **Start/Impostazioni/Stampanti e fax**.

L'opzione **Unique pdf file name** consente di memorizzare i report .pdf in modo indipendente dai report stessi, con i nomi file
<nome_contenitore_sequenza>_<nome_file_dati>.pdf



9

Concetti e funzioni specifici per CE

Funzioni specifiche della ChemStation Agilent per CE nella finestra di controllo del metodo e dell'analisi 200

Tavola di vial 200

Tavola dei conflitti di metodo 201

Tavola dei conflitti di sequenza 202

Simulazione del metodo 202

Tipo di apice 203

Tipi di calibrazione 204

Calibrazioni basate sul tempo di migrazione 205

Calibrazione mediante correzione della mobilità 205

CE-MSD 207

Sottrazione del fondo 207

Sottodirectory dei metodi per modalità CE diverse 208

Questo capitolo è pertinente solo se si utilizza ChemStation per controllare gli strumenti CE.



Funzioni specifiche della ChemStation Agilent per CE nella finestra di controllo del metodo e dell'analisi

Tavola di vial

NOTA

La funzione **Vial Table** è disponibile solo nella sessione in linea della ChemStation.

La **Vial Table** consente di associare i vial del vassoio ai campioni e, aspetto ancora più importante, a vial specifici, quali tamponi, vial per lavaggio, vial per pulizia dei tubi e vial per residui. La **Vial Table** è collegata alla tavola di sequenza. Quando una sequenza viene caricata, le informazioni contenute nella tavola di sequenza vengono copiate nella tavola di vial. Tuttavia, le voci della tavola di vial non vengono trasferite nella tavola di sequenza. Quando si seleziona il pulsante **Advanced** nella **Vial Table**, viene visualizzata la finestra di dialogo **Vial Table Advanced Settings**. In questa finestra è possibile abilitare gli avvisi di conflitti tra la **Vial Table** e il metodo o la sequenza e l'uso di nomi simbolici. Per controllare l'eventuale presenza di conflitti tra la **Vial Table** e il metodo o la sequenza, selezionare l'opzione **Enable vial table checks and warnings**.

Al caricamento di un metodo o di una sequenza, viene eseguito un controllo di coerenza tra le assegnazioni dei vial nella **Vial Table** e quelle del metodo o della sequenza. Eventuali conflitti di vial possono essere risolti facilmente mediante le tavole dei **Conflict**.

NOTA

La posizione 49 nel vassoio dei vial è usata per il vial di lavaggio dell'ago, mentre la posizione 50 rimane vuota per consentire il ritorno del dispositivo di sollevamento dei vial. Queste posizioni non sono disponibili nella **Vial Table**.

La colonna **Used in** della tavola di vial consente di specificare l'uso del vial. Vi sono cinque opzioni valide per i campi **Used in**:

- | | |
|-------------------|---|
| Don't Care | Non viene eseguito alcun controllo di coerenza. |
| Method | Viene fatto riferimento al vial nel metodo. |
| Sequence | Viene fatto riferimento al vial nella tavola di sequenza. |

- System** Si tratta di un vial speciale correlato alla configurazione del sistema. Il **Name** deve essere uno dei seguenti nomi simbolici:
- **@INLET** il vial per iniezione
 - **@OUTLET** il vial per scarico
 - **@FLUSH** il vial per lavaggio
 - **@WASTE** il vial per residui
 - **@clean tubes** il vial utilizzato per pulire i tubi di riempimento
 - **@USER X** il segnaposto della sequenza (dove X può essere un numero compreso tra 1 e 10)
- Questa opzione consente di specificare numeri di vial individuali per i nomi simbolici usati nel metodo. Ciò permette all'utente di specificare vial diversi per Iniezione, Scarico, Riempimento, Precondizionamento, Postcondizionamento e così via per ogni linea della sequenza.
- Not Used** Non è presente alcun vial in questa posizione.

Tavola dei conflitti di metodo

La **Method Conflict Table** viene visualizzata quando si carica un metodo per il quale sono definiti vial che sono in conflitto con i vial definiti nella tavola di vial. La **Method Conflict Table** è divisa in due: la parte sinistra contiene un'immagine della **Vial Table**, la parte destra indica i vial in conflitto.

Per risolvere i conflitti, è possibile sostituire (freccia singola) o spostare il vial dal metodo nella posizione libera successiva nella **Vial Table** (freccia doppia). Questa operazione può essere eseguita per ogni vial in conflitto.

Se vengono utilizzati vial definiti dall'utente (con i nomi simbolici @User1, @User2 e così via), non è possibile eseguire la verifica dei conflitti per questi vial, perché mancano le informazioni sulla sequenza, necessarie a stabilire se esiste o meno un conflitto.

Tavola dei conflitti di sequenza

La **Sequence Conflict Table** viene visualizzata quando si imposta o si carica una sequenza per la quale sono definiti vial che sono in conflitto con i vial definiti nella tavola di vial. La **Sequence Conflict Table** è divisa in due: la parte sinistra contiene un'immagine della **Vial Table**, la parte destra indica i vial in conflitto.

Per risolvere i conflitti, è possibile sovrascrivere le informazioni della **Vial Table** con le informazioni della **Sequence Table**. Tuttavia, se il conflitto è causato da una voce di sistema, le informazioni non possono essere sovrascritte. È inoltre possibile chiudere la **Sequence Conflict Table** senza risolvere i conflitti.

Se vengono utilizzati vial definiti dall'utente (nella colonne User1, User2 e così via), non è possibile eseguire la verifica dei conflitti per questi vial, perché mancano le informazioni sul metodo, necessarie a stabilire se esiste o meno un conflitto.

Simulazione del metodo

È possibile usare la funzione di simulazione per controllare il metodo. Durante la simulazione, il diagramma riflette le azioni che verrebbero eseguite durante il metodo, ovvero i vial specificati nel metodo sono visualizzati nei dispositivi di sollevamento, l'alimentazione e la tensione applicate vengono indicate così come avverrebbe durante un'analisi reale. La simulazione richiede meno tempo rispetto all'analisi perché ogni fase dura circa 3 secondi. Una fase è definita da un cambiamento nel diagramma CE.

Per avviare la simulazione, caricare il metodo che si desidera simulare e selezionare **Simulation** dal menu **Instrument**.

Tipo di apice

Diversamente dai picchi LC, GC e MS, è abbastanza normale che i picchi CE siano asimmetrici. Perciò, è molto importante selezionare parametri di integrazione che consentano di ottenere il massimo livello di accuratezza e riproducibilità nei risultati di quantificazione.

Se si seleziona **Peak Top Type** nel menu a discesa **Integration**, sono disponibili i tipi di apice seguenti:

Punto più alto

- Quando il picco è triangolare
- Quando si usano concentrazioni diverse

Interpolazione parabolica

- Usata per scodamento, picchi non separati

Centro di gravità

- Fornisce calcoli più accurati con i picchi triangolari
- Campioni con concentrazioni simili

Fit gaussiano

- Usato per picchi simmetrici

Tipi di calibrazione

La calibrazione standard è basata sull'area del picco o sull'altezza del picco. Se si seleziona **Standard Calibration**, sono disponibili le opzioni **Calculate Signals Separately** e **Calculate with Corrected Areas**.

Selezionare l'opzione di calcolo con aree corrette per far sì che, nel calcolo dei rapporti di normalizzazione percentuale (Norm%), il valore percentuale dei segnali indicati separatamente corrisponda a 100% per ogni segnale. Se l'opzione **Calculate signals separately** è deselezionata, il valore percentuale di tutti i segnali corrisponde a 100%. È necessario selezionare **Calculate signals separately** per eseguire l'ordinamento in base al segnale nella tavola di calibrazione.

Selezionare **Calculate with Corrected Areas** per apportare una correzione all'area del picco in base al tempo di migrazione. In questa modalità, l'area viene divisa in base al tempo di migrazione per migliorare la riproducibilità nell'analisi quantitativa in caso di instabilità dei tempi di migrazione.

Oltre alla calibrazione standard, sono disponibili tre calibrazioni specifiche per l'elettroforesi capillare caratterizzata da un segnale basato sul tempo di migrazione.

Nell'elenco a discesa relativo alla tavola di calibrazione sono disponibili i seguenti tipi di calibrazione:

- **Standard Calibration**
- **Protein Molecular Weight Calibration**
- **DNA Base-Pair Calibration**
- **Capillary Isoelectric Focusing Calibration**

Per ulteriori informazioni sulle calibrazioni specifiche per l'elettroforesi capillare, fare riferimento alla *Guida di riferimento ai principi operativi di OpenLAB CDS ChemStation Edition*.

Calibrazioni basate sul tempo di migrazione

Uso delle calibrazioni basate sul tempo di migrazione in una sequenza

Le calibrazioni e le ricalibrazioni basate sul tempo di migrazione possono essere incluse in una sequenza, ma sono supportate solo le calibrazioni esplicite e le ricalibrazioni cicliche. La calibrazione in bracketing non è supportata. Le calibrazioni basate sul tempo di migrazione non prevedono alcun rapporto riassuntivo di sequenza.

Stili di rapporto per le calibrazioni basate sul tempo di migrazione

Gli stili di rapporto disponibili per le calibrazioni basate sul tempo di migrazione sono soltanto **Short** (risultati quantitativi) e **Full** (integrazione, informazioni sul campione, condizioni dello strumento, registro elettronico, risultati quantitativi e diagramma della purezza dei picchi).

Calibrazione mediante correzione della mobilità

Piccole modifiche nella composizione del tampone, nella temperatura o nella viscosità, nonché l'adsorbimento nella parete capillare, possono condizionare il flusso elettrosmotico (EOF) e renderlo instabile. La conseguente modifica dell'EOF può creare una considerevole deviazione standard dei tempi di migrazione. Le correzioni della mobilità consentono di ridurre notevolmente l'effetto dei cambiamenti del tempo di migrazione da un'analisi all'altra, mediante il monitoraggio del tempo di migrazione di un picco di riferimento della mobilità e l'aumento significativo della riproducibilità del tempo di migrazione.

È consigliabile scegliere il picco di riferimento della mobilità in base alle priorità seguenti:

- Selezionare il picco con il segnale più alto.
- Selezionare il picco più isolato.
- Il marker EOF o lo standard interno possono essere usati come picco di riferimento della mobilità.
- Ingrandire la finestra di ricerca in modo da individuare sempre il picco di riferimento della mobilità.

- Se diversi picchi sono indicati nella finestra di ricerca, il picco con il segnale più alto viene selezionato automaticamente come picco di riferimento della mobilità.

Sono disponibili due tipi di correzione della mobilità:

Correzione della mobilità effettiva

Questo tipo di **Effective Mobility Correction** usa le mobilità effettive di tutti i picchi e richiede la disponibilità dei dati della rampa di tensione unitamente all'elettroferogramma. Inoltre, la correzione della mobilità effettiva consente di determinare le mobilità effettive vere di tutti i componenti del campione.

Correzione della mobilità relativa

Questo **Relative Mobility Correction** non richiede i dati di tensione e utilizza una tensione costante per tutte le misurazioni.

CE-MSD

Sottrazione del fondo

Quando si seleziona l'opzione di menu **Subtract Background**, l'ultimo spettro di massa selezionato viene sottratto da ogni punto nell'elettroferogramma corrente. I dati che ne derivano vengono salvati nella stessa directory e con lo stesso nome del file di dati originale. L'estensione di file, tuttavia, viene sostituita con .BSB.

Il nuovo file di dati diventa il file di dati corrente e l'elettroferogramma con il fondo sottratto viene visualizzato. Il numero di sottrazioni di fondo eseguite viene registrato nella voce Operator dell'intestazione del file di dati.

Se si visualizzano i dati BSB in forma di tabulato, si potrebbero notare delle differenze dovute alla precisione della rappresentazione dei dati.

NOTA

I file della Guida (HELP) relativi a LC/MSD si riferiscono solo ai parametri LC e non ai parametri CE. Alcune funzioni disponibili nel software LC/MSD non sono disponibili o non sono attivate per le applicazioni CE/MSD, ma sono usate in LC. Ad esempio, la funzione di **peak matching** non è applicabile a CE-MS e pertanto non è attiva. In CE-MS, la rivelazione UV e MS avviene a lunghezze effettive differenti del capillare di separazione. Data la risoluzione diversa a lunghezze effettive differenti, la corrispondenza dei picchi non è possibile.

Sottodirectory dei metodi per modalità CE diverse

Nei sistemi CE, i metodi dipendono dalla modalità CE selezionata. Pertanto vengono memorizzati in sottodirectory diverse all'interno della directory dei metodi:

- CE** Memorizza i metodi per la modalità CE.
- CEC** Memorizza i metodi per la modalità CEC.
- CEp** Memorizza i metodi per la modalità di pressione CE Plus.
- CEMS** Memorizza i metodi per la modalità CE MS.
- CEMSp** Memorizza i metodi per la modalità di pressione CE MS Plus.

Glossario-IU

A

Acq Method
Metodo di acq.

Acquisition Method Viewer
Visualizzatore del metodo di acquisizione

Add
Aggiungi

Add Data Files...
Aggiungi file di dati...

Add Pause to Queue
Aggiungi pausa alla coda

Advanced
Avanzate

Always ask user to choose an option
Chiedi sempre all'utente di selezionare un'opzione

Analysis Method
Metodo di analisi

Analysis Reports
Report di analisi

Apply Manual Events from Method
Applica eventi manuali dal metodo

Automatic update for selected runs
Aggiornamento automatico per le analisi selezionate

B

Back
Indietro

Back Sample List
Elenco dei campioni

Blank
Vuoto

Bracketing/Cyclic
Bracketing/Ciclica

Break Session Lock
Disattiva blocco sessione

Browse
Sfoglia

Browse for methods in master paths
Sfoglia metodi nei percorsi principali

Browse for Report Templates in Result Set
Sfoglia modelli di report nel set di risultati

Browse for templates in master paths
Sfoglia modelli nei percorsi principali

C

Calculate signals separately
Calcola segnali separatamente

Calculate Signals Separately
Calcola segnali separatamente

Calculate with Corrected Areas
Calcola con aree corrette

Calibrant
Calibrante

Calibration
Calibrazione

Calibration Interval
Intervallo di calibrazione

Calibration Mode
Modalità di calibrazione

Capillary Isoelectric Focusing Calibration
Calibrazione mediante focalizzazione isoelettrica capillare

Change Root...
Cambia directory principale...

Character
Carattere

ChemStation Administrator
Amministratore ChemStation

ChemStation Analyst
Analista ChemStation

ChemStation Data Analysis
Analisi dei dati della ChemStation

ChemStation Lab Manager
Gestore laboratorio ChemStation

ChemStation Operator
Operatore ChemStation

Choose Master Method to update
Scegli metodo master da aggiornare

Close
Chiudi

Commands
Comandi

Compound Details
Dettagli composto

Compound Summary
Riassunto composto

Computer name
Nome del computer

Configuration
Configurazione

Configure Table
Configura tavola

Conflict
conflitti

Control Chart
Diagramma di controllo

Counter
Contatore

Create New Result Set
Crea nuovo set di risultati

Cross-Sequence Summary
Riepilogo di più sequenze

Current date
Data corrente

Current time
Ora corrente

Cyclic
Ciclica

D

Data
Dati

Data Analysis
Analisi dei dati

Data Analysis Navigation table
Navigazione analisi dei dati

Data Analysis Task
Attività di analisi dei dati

Data Location
Posizione dei dati

Data Storage
Memorizzazione dei dati

Detail
Dettagli

Details
Dettagli

Disconnect
Disconnetti

DNA Base-Pair Calibration
Calibrazione mediante coppia di basi del DNA

Download method to instrument
Scarica metodo sullo strumento

E

Easy Sequence Setup
Configurazione Easy Sequence

Effective Mobility Correction
correzione

Enable vial table checks and warnings
Abilita controlli e avvisi per la tavola di vial

Exit
Esci

Extended
Esteso

Extended Statistic
Statistiche estese

Extended Statistics
Statistiche estese

F

Fill Samples
Riempi campioni

Finish Queue Sequence
Completamento sequenza in coda

Front
Avanti

Full
Completo

H

Header
Intestazione

Height%
Altezza%

Help
Guida

Hide
Nascosto

I

Import Samples
Importa campioni

Import Samples...
Importa campioni...

injection volume
volume di iniezione

injections/vial
iniezioni/vial

Instrument
Strumento

Instrument Control
Controllo dello strumento

Instrument name
Nome dello strumento

Integration
Integrazione

Integration Events Table
Tavola degli eventi di integrazione

ISTD amount
quantità ISTD

Items and Limits for Extended Statistics
Voci e limiti per statistiche estese

L

Library Search
Ricerca libreria

Load
Carica

Logbook
Registro elettronico

M

Manual Events
Eventi manuali

Manual update ...
Aggiornamento manuale...

Messages and warnings
Messaggi e avvisi

Method
Metodo

Method and Run Control
Controllo del metodo e delle analisi

Method Conflict Table
tavola dei conflitti di metodo

Method Resolution Info
Informazioni sulla risoluzione del metodo

Methods
Metodi

N

Name
nome

Name Pattern
Modello nome

New
Nuovo

New method from instrument
Nuovo metodo dallo strumento

No Recalibration
Nessuna ricalibrazione

Noise
Rumore

None
Nessuno

Number of Samples
Numero di campioni

O

One Page Header
Titolo su una pagina

Open Easy Sequence Setup
Apri configurazione Easy Sequence

Options
Opzioni

P

Part of method to run
Parte del metodo da eseguire

Partial Recalibration
Ricalibrazione parziale

Partial Sequence
Sequenza parziale

Path
Percorso

Paths
Percorsi

Peak Top Type
Tipo di apice

peak matching
corrispondenza dei picchi

Pending
In sospeso

Performance
Prestazioni

Preferences
Preferenze

Preview/Print Sequence...
Anteprima/Stampa sequenza...

Print
Stampa

Printer
Stampante

Protein Molecular Weight Calibration
Calibrazione mediante peso molecolare delle proteine

Q

QC Sample
Campione QC

Queue Method
Coda metodo

Queue Sequence...
Coda sequenza...

R

Read-Only
Sola lettura

Recalculate With Method
Ricalcola con metodo

Recalibration of all Retention/Migration Times

Ricalibrazione di tutti i tempi di ritenzione/migrazione

Relative Mobility Correction
tipo di correzione

Remove
Rimuovi

Remove Manual Events from Method
Rimuovi eventi manuali dal metodo

Remove selected Data Files
Rimuovi file di dati selezionato

Report Layout
Layout report

Report Templates
Modelli di report

Report to file
Report su file

Report to HTM
Report su HTML

Report to PDF
Report su PDF

Report to printer
Report su stampante

reprocess
rielabora

Reprocess
Rielaborazione

Reprocess Only
Solo rielaborazione

Reprocessing only
Solo rielaborazione

Resolve Settings
Risolvi impostazioni

Restore initial order
Ripristina ordine iniziale

result set
set di risultati

Result Set Migration
Migrazione del set di risultati

Review
Revisione

Run Method
Esegui metodo

Run Sequence
Esegui sequenza

Run Time Checklist
Lista di controllo del periodo di funzionamento

S

sample amount
quantità di campione

Sample Info
Info campione

Sample Name
Nome del campione

Sample Summary
Riassunto campione

Sample type
Tipo di campione

Sample Type
Tipo di campione

Samples
Campioni

Samples/Injections
Campioni/Iniezioni

Save and Add to Queue
Salva e aggiungi alla coda

Save as New Master Method
Salva come nuovo metodo master

Save method with Data
Salva il metodo con i dati

Screen
Schermo

Select Destination
Seleziona destinazione

Select Method Path
Seleziona percorso metodo

Select Sequence Template
Seleziona modello di sequenza

Select Source
Seleziona origine

Sequence
Sequenza

Sequence > Create New Result Set
Sequenza > Crea nuovo set di risultati

Sequence Conflict Table
tavola dei conflitti di sequenza

Sequence Diagram
Diagramma della sequenza

Sequence End
Fine sequenza

Sequence Location
Posizione della sequenza

Sequence Method
Metodo della sequenza

sequence methods
metodi della sequenza

Sequence name
Nome della sequenza

Sequence Name
Nome della sequenza

Sequence Output
Output sequenza

Sequence Parameters
Parametri sequenza

Sequence Start
Inizio sequenza

Sequence Summary Parameters
Parametri riassuntivi sequenza

Sequence Summary Reporting
Report riassuntivo sequenza

Sequence Table
Tavola di sequenza

Short
Breve

shutdown
arresto

Signal/Review options
Opzioni segnale/revisione

Signal/Review Options
Opzioni segnale/revisione

Simple Calibration
Calibrazione semplice

Simulation
Simulazione

Single Injection
Singola iniezione

Single Sequence Summary
Riepilogo singola sequenza

Specify Report
Specifica report

Spectrum
Spettro

Standard Calibration
Calibrazione standard

Standard Statistic
Statistiche standard

Standard Statistics
Statistiche standard

Starting Vial Location
Posizione del vial iniziale

Statistics
Statistiche esecuzione campioni

Statistics for Calibration Runs
Statistiche per esecuzione calibrazione

Status
Livelli

Subtract Background
Sottrai fondo, BSB

SUILabel Type = Application > Statistics for Calibrated and Sample Runs
Tipo SUILabel = Applicazione > Statistiche per analisi calibrate e di campioni

Summary
Riassunto

T

Take over ChemStation Remote Session
 Acquisisci controllo sessione remota
 ChemStation

Target Mass
 Massa target

U

Unique folder Creation
 Creazione cartelle esclusive

Unique Folder Creation
 Creazione cartelle esclusive

Unique folder Creation OFF
 Creazione cartelle esclusive attiva

Unique Folder Creation Off
 Creazione cartelle esclusive inattiva

Unique Folder Creation OFF
 Creazione cartelle esclusive inattiva

Unique Folder Creation ON
 Creazione cartelle esclusive attiva

Unique pdf file name
 Nome file PDF univoco

Unload Current Dataset
 Scarica set di dati corrente

Update any Master Method ...
 Aggiorna metodo master qualsiasi...

Update Manual Events of Method
 Aggiorna eventi manuali del metodo

Update Master Method
 Aggiorna metodo master

Update master methods
 Aggiorna metodi master

Update Methods
 Aggiorna metodi

Update Methods...
 Aggiorna metodi...

Upload method from instrument
 Carica metodo dallo strumento

Use current method
 Usa metodo corrente

Use method from data file
 Usa metodo dal file di dati

Use reference
 Utilizza riferimento

Use sequence method
 Usa metodo della sequenza

Use Sequence Table information
 Usa informazioni tavola di sequenza

Used in
 Usato in

User name
 Nome utente

V

Vial Table
 Tavola di vial

Vial Table Advanced Settings
 Impostazioni avanzate tavola di vial

View
 Visualizza

View Method
 Visualizza metodo

View with Instrument Configuration...
 Visualizza con la configurazione dello strumento...

View with Original Configuration...
 Visualizza con la configurazione originale...

Indice

A

abbandono
 sequenza 93
 ACAML 155
 accuratezza
 analisi 173
 ACQ.TXT 36
 acquisizione dei dati 22, 68
 acquisizione del controllo di una
 sessione 11
 acquisizione del controllo su una sessione
 remota 11
 aggiornamento
 metodo master 55
 metodo 90, 56
 analisi dei dati 42, 140
 metodo 45
 personalizzata 63
 quantificazione 24
 revisione dei lotti 25
 ricalcolo 26
 rielaborazione 26
 analisi
 accuratezza 173
 anteprima del report 157
 arresto
 automatico 111
 macro 111
 sequenza 93
 sistema 111
 automatica
 ricalibrazione 113
 ricerca nelle librerie 63
 automatico
 arresto 111

automazione
 definizione 77

B

BI Studio 180
 bianco 92
 bracketing
 calibrazione ciclica 123
 buone pratiche di laboratorio 31
 Business Intelligence Development
 Studio 180

C

calcolo personalizzato 182
 calibrazione ciclica
 bracketing 123
 calibrazione multilivello 162
 calibrazione
 campione 160
 cicliche multilivello 118
 composto 160
 corrispondenze delle curve 165
 intervalli 164
 livello 160
 multilivello 162
 punto 160
 campi dati 181
 campi personalizzati 43, 178
 campione incognito 170
 campione
 calibrazione 160
 incognito 170
 CDS 9
 cenni generali sul software
 configurazione del sistema 14
 metodi e sequenze 14
 modello dati 16
 sistema operativo 13
 ChemStation
 Explorer 51
 personalizzazione 27
 codifica a colori 74
 composto 160
 configurazione 14
 connessione desktop remoto 12
 controllo dello strumento 42
 controllo remoto 10
 corrispondenze delle curve
 curva 165
 creazione cartelle esclusive 34, 100,
 103
 creazione di cartelle esclusive
 attivazione e disattivazione 102
 curva calibrazione
 corrispondenze delle curve 165
 multilivello 162
 curva di calibrazione
 forza attraverso lo zero (origine) 165
 livello singolo 161
 peso dei punti di calibrazione 166
 tipi 161
 curva
 corrispondenze delle curve 165

D

DA.M 36, 65, 145
 Data Store 8, 13
 dati dimostrativi 182

destinazione
 report 176
 directory
 metodo 49
 set di risultati 106
 disconnessione della sessione 10
 disconnessione 10
 DOC 157

E

easy sequence 83
 ECM 8, 13
 Editor dei modelli di report 180
 elementi del report 181
 ELN 9
 espressione 178, 182
 estrapolazione 164
 evidenziazione dei risultati 178
 EZChrom 8

F

Farmacopea Europea 29, 92, 98, 144, 178
 file di dati di riferimento 92, 144
 file di metodo
 parametri strumento 49
 file
 metodo 49
 flussi di lavoro
 revisione 157
 formati file
 report dei risultati 197
 formattazione condizionale 182
 formattazione
 modello di report 182
 funzionamento post-sequenza 111

G

GLPSave.Reg 64
 salvataggio con metodo 64

I

informazioni sul metodo 42
 integrazione
 eventi 42
 tabella dei risultati 62
 intelligent reporting
 anteprima 157
 attivazione 177
 file di dati 155
 requisiti 155
 vantaggi 178
 intervalli
 calibrazione 164

L

limiti di quantità 162
 lista di controllo del periodo di
 funzionamento
 acquisizione dati 62
 analisi dei dati 62
 comando post-analisi 64
 macro post-analisi 64
 salvataggio copia del metodo 64
 salvataggio dati GLP 64

M

macro
 arresto 111
 memorizzazione centralizzata dati 13
 metodo
 aggiornamento automatico 96, 90
 aggiornamento manuale 96, 56, 55
 creazione 46
 directory 49

GLPSave.Reg 64
 integrazione 62
 modalità in linea 50
 modalità non in linea 50
 modifica 46, 47
 parti 42
 ricerca nelle librerie 63
 riepilogo del funzionamento 60
 stato 74
 utilizzo di un metodo specifico 144
 visualizzazione dei parametri di
 acquisizione 52
 migrazione
 set di risultati 109
 modalità ultimo risultato 145
 modello di report
 calcolo personalizzato 182
 elementi del report 181
 formato di esportazione 157
 formato 180
 formattazione condizionale 182
 predefinito 156
 registrazione 183
 sfoglia 183
 snippet 178, 182
 modello di sequenza 78
 modello nome 89
 monitor
 stato strumento 74
 multilivello
 calibrazione 162
 sequenze cicliche 118

N

nome di file
 report per singola iniezione 185
 report riassuntivo di sequenza 185
 nome file
 prefisso 108

O

origine
 collega 165
 forza 165
 ignora 165
 includi 165
 trattamento 165

P

parametri della sequenza 69, 79, 147
 parametri di acquisizione 36
 pausa
 sequenza 93
 PDF 157, 157
 percorsi 68
 percorso dei dati 69
 personalizzazione
 analisi dei dati 63
 peso
 lineare 166
 punti di calibrazione 166
 quadratico 166
 uguale 166
 picchi non identificati
 ricalibrazione 173
 picchi
 identificazione 43, 63
 quantificazione 43, 63
 post-analisi
 comando 64
 macro 64
 preferenze 68, 89, 102
 prefisso 108

R

rapporto segnale-rumore 92, 98, 144
 RDL 180
 registrazione dati 104
 report classici 27

report di più sequenze 179
 report riassuntivo di sequenza
 configurazione 194
 intestazione 194
 metodi 194
 pagina riassuntiva 196
 registro elettronico 194
 report di analisi 195
 specifiche di output 196
 statistiche 195
 tavola dei campioni 194
 tavola di sequenza 194
 report singola iniezione 179
 report singola sequenza 179
 report
 campi personalizzati 178
 che cos'è? 176
 classic o intelligent? 177
 destinazione 176
 evidenziazione dei risultati 178
 formati file 197
 nome di file 185
 non calibrato 187
 riassuntivo di sequenza 176
 singola iniezione 176
 stile 190
 revisione 155
 ricalcolo 26, 37, 143
 ultimo risultato 145
 ricalibrazione parziale 173
 ricalibrazione
 automatica 113
 completa 173
 cos'è? 173
 parziale 173
 perché 173
 picchi non identificati 173
 tempo di ritenzione 173
 ricerca nelle librerie 63
 riconnessione 11

rielaborazione 26, 37, 104, 146
 risposta del rivelatore 161
 risposta
 rivelatore 161
 RTE 180

S

salvataggio con dati
 copia del metodo 65
 salvataggio dati GLP 64
 segnale analogico 68
 segnale di riferimento 29
 segnale digitale 68
 segnale
 dettagli 42
 sequenza parziale
 righe della sequenza 96
 selezione del set di risultati 94
 sequenza
 abbandono 93
 acquisizione 88
 arresto 93
 calibrazione ciclica 118
 caricamento 140
 crea 88
 modifica 88
 pausa 93
 rielaborazione 146
 salva 88
 tavola 80
 sequenze
 impostazione 83
 set di risultati autoassemblato 150
 set di risultati
 autoassemblato 150
 migrazione 109
 sistema
 arresto 111
 snipet 178, 182

stato di standby 111
stato
 strumento 74
strumento
 stato 74
struttura dei metodi 51

T

tavola di calibrazione
 definizione 168
tavola di navigazione 140
 rimozione di un file di dati 150
 scaricamento del set di dati 150
tavola di somma dei picchi 192
tempo di ritenzione
 ricalibrazione 173
tipo di metodo
 analisi dei dati 45
 file di dati 45
 master 44
 sequenza 44
tipo di report
 più sequenze 179
 singola iniezione 179
 singola sequenza 179
TXT 157

V

Visual Basic 178, 182
visualizzatore del metodo di
acquisizione 52
Visualizzatore di report 151

X

XLS 157, 157

In questo volume

Nel presente manuale sono descritti vari concetti relativi ad Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition. Lo scopo è permettere all'utente di acquisire una conoscenza più approfondita del funzionamento di ChemStation. Contiene informazioni sui seguenti argomenti:

- Concetti di base
- Acquisizione dei dati
- Automazione/sequenze
- Run Queue e Queue Planner
- Concetti relativi ad analisi e revisione dei dati
- Calibrazione
- Stesura di report
- Concetti e funzioni specifici per CE

© Agilent Technologies 2010-2012, 2013

Printed in Germany
01/2013



M8301-94014



Agilent Technologies