

Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition

Понятия и рабочие процессы



Agilent Technologies

Примечания

© Agilent Technologies, Inc. 2010-2013, 2014

Согласно законам США и международным законам об авторском праве запрещается воспроизведение любой части данного руководства в любой форме и любым способом (включая сохранение на электронных носителях, извлечение или перевод на иностранный язык) без предварительного письменного разрешения компании Agilent Technologies, Inc.

Microsoft® является товарным знаком корпорации Майкрософт, зарегистрированным в США.

Шифр документа

M8301-98015

Издание

01/2014

Printed in Germany

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

Этот продукт может использоваться как компонент лабораторной диагностической системы, если эта система зарегистрирована уполномоченными органами и отвечает требованиям соответствующих нормативных актов. В противном случае он предназначен только для общего лабораторного использования.

Версия ПО

Данное руководство предназначено для системы хроматографических данных Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition версии C.01.06.

Microsoft® является зарегистрированным товарным знаком корпорации Майкрософт в США.

Гарантия

Материал представлен в документе «как есть» и может быть изменен в последующих изданиях без уведомления. Кроме того, в пределах, допустимых действующим законодательством, компания Agilent отказывается от всех явных или подразумеваемых гарантийных обязательств в отношении данного руководства и любой содержащейся в нем информации, в том числе от подразумеваемой гарантии товарной пригодности и гарантии пригодности для конкретной цели. Компания Agilent не несет ответственности за ошибки, случайные или косвенные убытки, связанные с поставкой и эффективным применением на практике данного документа и любой содержащейся в нем информации. Если между компанией Agilent и пользователем подписано отдельное соглашение, условия гарантии которого не соответствуют условиям гарантий, содержащимся в данном документе, то силу имеют условия отдельного соглашения.

Технологические лицензии

Аппаратура и (или) программное обеспечение, описанные в данном документе, поставляются по лицензии и могут использоваться или копироваться только в соответствии с условиями лицензии.

Предупреждающие сообщения

Внимание

Сообщение **ВНИМАНИЕ** указывает на опасность. Данное сообщение предназначено для привлечения внимания к процедуре, методике и т. п., которые при неправильном выполнении или несоблюдении рекомендаций могут привести к повреждению продукта или потере важных данных. Если в документе встречается сообщение **ВНИМАНИЕ**, не следует продолжать выполнение действий до тех пор, пока указанные условия не будут полностью уяснены и выполнены.

Предупреждение

Сообщение **ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ** указывает на опасность. Данное сообщение предназначено для привлечения внимания к процедуре, методике и т. п., которые при неправильном выполнении или несоблюдении рекомендаций могут привести к травме или смерти. Если в документе встречается сообщение **ПРЕДУПРЕЖДЕНИЕ**, не следует продолжать выполнение действий до тех пор, пока указанные условия не будут полностью уяснены и выполнены..

В данном руководстве...

В настоящем руководстве описаны основные понятия системы хроматографических данных Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition. Далее везде под термином ChemStation понимается система хроматографических данных OpenLAB CDS ChemStation Edition.

В этом руководстве рассказывается об эффективном использовании функций сбора, анализа и составления отчетов системы хроматографических данных OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.06 для повышения производительности лаборатории.

1 Основные понятия OpenLAB CDS ChemStation Edition

В этом разделе рассматриваются принципы работы ChemStation, в том числе дистанционное управление, графический интерфейс и экраны приложения ChemStation.

2 Работа с методами

В этой главе подробно разъясняются понятия, связанные с методом — важнейшей частью системы ChemStation.

3 Сбор данных

Этот раздел знакомит с процессом сбора аналитических данных.

4 Автоматизация/последовательности

В этой главе описаны понятия автоматизации. Здесь объясняется, как работать с последовательностями в системе ChemStation, что происходит во время выполнения последовательности и как настраивать последовательности.

5 Очередь выполнения и планировщик очереди

В этой главе рассматриваются понятия очереди выполнения и планировщика очереди. Объясняется, как добавлять отдельные пробы, последовательности или паузы в очередь выполнения.

6 Понятия анализа и просмотра данных

В этой главе в общих чертах изложены варианты анализа и просмотра данных. В Open-LAB CDS ChemStation Edition эти варианты доступны на двух отдельных экранах.

7 Калибровка

В этой главе описываются понятия калибровки.

8 Составление отчетов

В этой главе описаны понятия составления интеллектуальных отчетов и составления классических отчетов.

9 Понятия и функции КЭ

Этот раздел относится к использованию ChemStation для управления приборами КЭ.

Содержание

1 Основные понятия OpenLAB CDS ChemStation Edition	9
Термины и сокращения	11
Введение	12
Дистанционное управление прибором	13
О программном обеспечении ChemStation	16
Структура данных ChemStation	38
2 Работа с методами	43
Что такое метод?	45
Части метода	46
Типы методов	49
Создание методов	51
Редактирование методов	52
Управление методами	56
Что происходит при выполнении метода?	65
3 Сбор данных	73
Что такое сбор данных?	74
Онлайн-мониторы	77
Журнал	78
Сведения о состоянии	79
Правила и предупреждения	81
4 Автоматизация/последовательности	83
Что такое автоматизация?	86
Что такое последовательности и шаблоны последовательности?	87
Параметры последовательности	89
Таблица последовательности	90
Создание последовательностей (последовательностей и шаблонов последовательностей)	91
Простая последовательность	94

Работа с последовательностями (последовательностями и шаблонами последовательностей)	99
Файл журнала последовательности	113
Что происходит при выполнении последовательности?	114
Структура файла данных последовательности	116
Действия после выполнения последовательности	127
Автоматическая повторная калибровка	129
Задание повторных калибровок	130
Типы последовательностей	133
5 Очередь выполнения и планировщик очереди	147
Поддерживаемые рабочие процессы	148
Использование очереди выполнения	150
Использование планировщика очереди	153
6 Понятия анализа и просмотра данных	155
Анализ данных	156
Просмотр	172
7 Калибровка	177
Определение терминов	178
Типы калибровки	179
Таблица калибровки	187
Суммирование пиков	188
Неизвестные пробы	189
Перекалибровка	190
8 Составление отчетов	193
Что такое отчет?	194
Составление классических и интеллектуальных отчетов	196
Составление интеллектуальных отчетов	197
Составление классических отчетов	206

9 Понятия и функции КЭ 219

Предназначенные для КЭ функции системы Agilent ChemStation,
представленные на экране управления методом и выполнением 220

Тип вершины пика 223

Типы калибровки 224

КЭ-МС 227

Подкаталоги методов для различных режимов КЭ 228



1

Основные понятия OpenLAB CDS ChemStation Edition

Термины и сокращения	11
Введение	12
Дистанционное управление прибором	13
О программном обеспечении ChemStation	16
Операционная система	16
Центральное хранилище данных	16
Методы и последовательности	17
Конфигурация системы	17
Средство просмотра метода сбора данных	18
Параметры загрузки метода	18
Модель данных	19
Соглашения о наименовании файлов	19
Пользовательский интерфейс программного обеспечения	23
Сбор данных	26
Анализ данных	27
Составление отчетов	30
Служебные программы и совместимость	31
Пользовательская настройка	31
Автоматизация	32
Очередь выполнения и планировщик очереди	34
Надлежащая лабораторная практика	34
Структура данных ChemStation	38
Без создания уникальной папки	38
С созданием уникальной папки	39
Включение и выключение создания уникальной папки	42



1 Основные понятия OpenLAB CDS ChemStation Edition

В данном руководстве...

В этом разделе рассматриваются принципы работы ChemStation, в том числе дистанционное управление, графический интерфейс и экраны приложения ChemStation.

Термины и сокращения

Таблица 1 Термины и сокращения, используемые в данном документе:

термин,	описание,
ChemStation,	система хроматографических данных OpenLAB CDS ChemStation Edition,
EZChrom,	система хроматографических данных OpenLAB CDS EZChrom Edition,
Data Store	OpenLAB Data Store
ECM,	корпоративный диспетчер содержимого OpenLAB Enterprise Content Manager,
RC .Net,	интерфейс .NET RapidControl.

Введение

Agilent OpenLAB — это линейка программного обеспечения для лабораторий, обеспечивающая открытую архитектуру и многократно используемые стандартизированные интерфейсы. Существуют различные решения OpenLAB для каждого этапа в жизненном цикле научных данных:

- Система хроматографических данных (Chromatographic Data System, CDS).
Система хроматографических данных OpenLAB CDS выпускается в двух редакциях: EZChrom Edition и ChemStation Edition. В этом руководстве описана редакция ChemStation Edition.
- Корпоративный диспетчер содержимого (Enterprise Content Manager, ECM).
- Data Store
- Электронный лабораторный журнал (ЭЛЖ).

Система хроматографических данных OpenLAB CDS обеспечивает полное управление приборами Agilent для ЖХ, ГХ, КЭ, КЭ-МС и ЖХ-МС. Она предоставляет средства для сбора, анализа и интерпретации данных с помощью многометодного управления приборами от различных изготовителей. Программное обеспечение хроматографии запускается с панели управления OpenLAB, предоставляющей доступ ко всем общим службам OpenLAB.

Дистанционное управление прибором

Конфигурация распределенной системы позволяет настраивать и запускать приборы ChemStation с любой панели управления OpenLAB, подключенной к серверу общих служб OpenLAB.

Запуск приборов.

Настраивать и запускать приборы можно с помощью кнопок *Настроить прибор*, *Запустить онлайн* и *Запустить автономно* на панели управления OpenLAB. Как и в случае конфигураций рабочей станции или сетевой рабочей станции, диалоговое окно конфигурации прибора отображается на локальном ПК. Однако при использовании конфигурации распределенной системы само приложение ChemStation выполняется на компьютере управления приборами Agilent (Agilent Instrument Control, AIC), и доступ к приложению предоставляется посредством подключения к удаленному рабочему столу компьютера AIC.

Окна удаленного приложения ChemStation отображаются независимо от панели управления OpenLAB — можно запустить прибор, закрыть панель управления и продолжить работу с прибором. Кроме того, на одном и том же клиентском компьютере можно запустить несколько экземпляров панели управления OpenLAB, используя различные учетные данные. Эти различные учетные сведения будут наследоваться приборами, запускаемыми с соответствующей панели управления OpenLAB.

Приборы, работающие под управлением компьютера AIC, можно определить по заголовку окна, который содержит как название прибора, так и название компьютера AIC.

Отключение сеанса

Приборы, работающие под управлением компьютера AIC, не зависят от клиентского компьютера, с которого открывается подключение к удаленному рабочему столу. Отключение клиентского компьютера, например, из-за ошибки сети, никак не повлияет на выполнение последовательности прибором. Для того чтобы после восстановления

сети вновь получить управление прибором, просто еще раз нажмите кнопку *Запустить онлайн* или *Запустить автономно*.

Для преднамеренного отключения нажмите кнопку **Close** или выберите в меню **File > Exit**. В диалоговом окне **Close** имеется дополнительная кнопка **Disconnect**. Отключение приводит к разрыву соединения с удаленным рабочим столом, в то время как прибор продолжает работать.

Примечание

Подключение к удаленному столу можно отключить, несмотря на то что выполняется последовательность.

Чтобы восстановить соединение с этим прибором, просто еще раз нажмите кнопку *Запустить онлайн* или *Запустить автономно* на панели управления OpenLAB. Соединение можно восстановить с любой панели управления OpenLAB, подключенной к серверу общих служб OpenLAB.

Если нажать кнопку *Запустить онлайн*, чтобы восстановить соединение с работающим в режиме онлайн прибором или наоборот, откроются два окна прибора — одно для прибора, работающего в режиме онлайн, другое для автономного прибора.

Взятие сеанса под свое управление

Действующий сеанс можно взять под свое управление, нажав кнопку *Запустить онлайн* или *Запустить автономно* на панели управления OpenLAB другого ПК:

- Если запустить прибор с панели управления OpenLAB на ПК 1, затем с помощью той же учетной записи пользователя войти на панель управления OpenLAB на ПК 2 и там запустить тот же самый прибор, то это попросту приведет к взятию имеющегося сеанса под свое управление и продолжению работы на ПК 2 со всем, что было запущено на ПК 1.

Примечание

В случае совпадения учетных записей нового и прежнего пользователей предупреждение на экран не выводится.

- Если еще один пользователь запустил прибор с панели управления OpenLAB на другом ПК, то при наличии необходимых прав этот

сеанс тоже можно взять под свое управление. Для этого необходимо обладать правом **Take over ChemStation Remote Session** и, если приложение ChemStation заблокировано другим пользователем в частном порядке, правом **Break Session Lock**.

Если вы берете сеанс под свое управление, другой пользователь получит сообщение о том, что вы собираетесь взять сеанс под свое управление. Как только другой пользователь подтвердит получение этого сообщения, окно прибора закроется на его ПК и откроется на вашем ПК. Другому пользователю будет сообщено, какой пользователь взял сеанс под свое управление.

Работающий в режиме онлайн и автономный приборы входят в один и тот же сеанс и поэтому всегда передаются вместе. Если работающий в режиме онлайн и автономный приборы уже запущены в каком-либо сеансе, то взятие сеанса под свое управление приведет к передаче управления обоими приборами вне зависимости от того, какая кнопка нажата — *Запустить онлайн* или *Запустить автономно*. Если нажать кнопку *Запустить автономно*, когда в сеанс входит только работающий в режиме онлайн прибор, или наоборот, то откроются два окна прибора — одно для работающего в режиме онлайн прибора, другое для автономного прибора.

О программном обеспечении ChemStation

Операционная система

Для ChemStation C.01.06 требуется операционная система Microsoft Windows 7 или Windows 8.1.

Для работы с контрольными таблицами ChemStation требуется приложение Microsoft Excel.

Центральное хранилище данных

Центральное хранилище данных может содержать всевозможные компьютерные данные, в каком бы фирменном формате они ни были представлены. Необработанные данные ChemStation (и другие удобочитаемые документы, например рабочие журналы) сохраняются вместе с *метаданными*, что значительно упрощает поиск данных. Методы, шаблоны последовательностей, шаблоны отчетов и файлы данных (последовательностей и отдельных выполнений анализа) ChemStation можно отправить в центральный репозиторий и позже загрузить обратно в ChemStation, если потребуется.

Компания Agilent предлагает две системы центрального хранилища данных:

- Хранилище данных *OpenLAB Data Store* доступно как односерверное решение, предлагающее централизованное управление данными для небольших и средних лабораторий, оснащенных не более чем 30 приборами. Оно обеспечивает необходимую безопасность, поддерживающую соответствие нормативным требованиям. Дополнительные сведения см. в документации по OpenLAB Data Store.
- Хранилище данных *OpenLAB ECM* доступно как односерверное или многосерверное распределенное решение, удовлетворяющее потребности комплексного управления данными для лабораторий, количество приборов в которых варьируется от нескольких штук до нескольких сотен. Оно также обеспечивает необходимую

безопасность, поддерживающую соответствие нормативным требованиям. Дополнительные сведения см. в документации по OpenLAB ECM.

Дополнительные сведения о понятиях приложения ChemStation с центральным хранилищем данных см. в *Руководстве по понятиям системы хроматографических данных Agilent OpenLAB CDS редакции ChemStation Edition с центральным хранилищем данных*.

Методы и последовательности

Аналитический метод полностью описывает, каким образом выполняется конкретное разделение. Он содержит все параметры для управления прибором, сбора и оценки данных, включая интегрирование, количественный анализ и составление отчетов. Систему можно настроить для получения данных из нескольких проб различными методами. Файл, управляющий операцией такого рода, называется последовательностью и содержит сведения об отдельной пробе, ссылки на соответствующие методы и спецификации автоматической перекалибровки. Дальнейшие сведения о методах и последовательностях см. в разделе [“Автоматизация/последовательности”](#) на странице 83 и в системе онлайн-справки.

Конфигурация системы

Конфигурирование системы прибора выполняется в редакторе конфигураций, запускаемом с панели управления OpenLAB. Он позволяет задавать приборы, адреса их КОП или ЛВС, каталоги для данных, последовательностей и методов, а также исходные размеры экрана программы ChemStation. Кроме того, можно активировать или деактивировать средства интеллектуального составления отчетов и трехмерной спектральной оценки, а также определить параметры загрузки метода.

Средство просмотра метода сбора данных

Вне зависимости от текущей конфигурации прибора средство просмотра метода сбора данных позволяет проверять параметры сбора данных, сохраненные в методе. В приборе этот метод можно использовать в первоначальной версии либо скорректировать с учетом текущей конфигурации прибора.

Параметры загрузки метода

Параметры загрузки метода определяют действия ChemStation при наличии расхождений между методом, выбранным последним в предыдущем сеансе прибора, и текущими настройками прибора. Можно выбрать один из следующих вариантов:

- **Download method to instrument.**

В прибор загружается последний выбранный метод. Настройки инструмента будут перезаписаны. Такие действия соответствуют ChemStation версии C.01.03 или ниже.

- **Upload method from instrument.**

Настройки прибора передаются в последний выбранный метод. Метод будет помечен как измененный.

- **New method from instrument.**

Настройки прибора передаются во вновь созданный метод ChemStation.

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

При запуске ChemStation открывается диалоговое окно, где можно выбрать один из вышеописанных вариантов. В этом диалоговом окне можно также сравнить настройки прибора для каждого модуля с настройками в последнем выбранном методе.

При сравнении отличий можно отобразить весь список настроек или только несовпадения.

Примечание

В этом диалоговом окне оцениваются настройки только приборов с драйверами RC.Net. Настройки приборов с классическими драйверами не оцениваются.

Модель данных

Программное обеспечение ChemStation создано применительно к модели данных, которая основана на структуре памяти, называемой регистром. Регистры — это универсальные структуры, которые могут содержать данные анализа и информацию, как двумерную (например, время/интенсивность), так и трехмерную (например, время/интенсивность/длина волны).

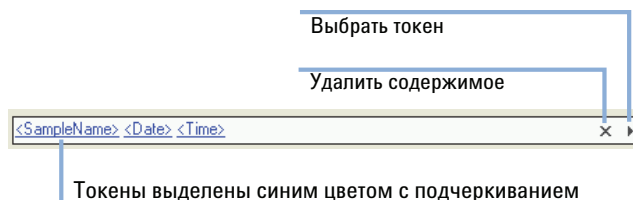
В ChemStation предусмотрены команды и функции для создания, расширения, извлечения и, если это не приводит к изменению первичных данных, редактирования регистров. Дальнейшие сведения см. в системе онлайн-справки, выбрав в приложении ChemStation пункт меню **Help > Commands**.

Соглашения о наименовании файлов

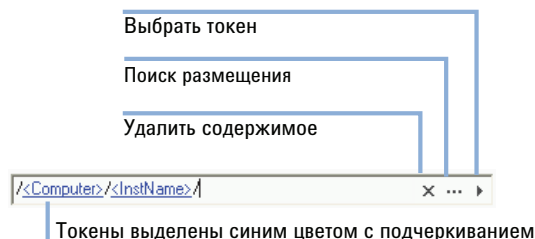
Имена файлов и токены

В большинстве диалоговых окон ChemStation, где вводятся путь и имя файла, соответствующие имена можно формировать динамически с помощью токенов. В зависимости от пути или имени файла, задаваемого в этом диалоговом окне, доступны различные токены. На следующих экранах в качестве примеров используются несколько токенов.

Элемент управления именами файлов выглядит так:



Элемент управления путями выглядит так.



В каждом соответствующем диалоговом окне итоговое имя файла или путь отображается дополнительно.

С полями этого типа можно сделать следующее:

- добавить неизменный текст;
- нажать кнопку со стрелкой (►), чтобы выбрать токен из списка;
Нажать клавишу **Стрелка вниз**, чтобы выбрать токен из списка;
- щелкнуть правой кнопкой мыши уже используемый токен, чтобы заменить его другим токеном из списка;
- нажать кнопку X, чтобы удалить текущее содержимое поля;
- нажать кнопку с тремя точками (...), чтобы найти нужный путь.

Соглашения о наименовании

Следующие правила позволяют ChemStation создавать и обрабатывать допустимые имена для файлов и каталогов.

В имени файла или каталога запрещены следующие символы:

< > : " / \ | @ % * ? ' °

Использование этих символов в именах файлов или каталогов может привести к проблемам с загрузкой файлов в ChemStation. Кроме того, использование этих символов в установочной папке препятствует запуску копии повторной обработки. В случае использования символа % в установочной папке некоторые ярлыки ChemStation действуют неправильно.

Кроме того, применяются следующие правила.

Таблица 2 Запрещенные символы

Параметр ChemStation	Character
Имена файлов методов:	% и . (десятичный знак) запрещены.
Подкаталог данных и подкаталог последовательности:	[] + = ; , . (десятичный знак); пробелы запрещены.
Имена файлов данных в последовательностях	Пробелы запрещены

В качестве имени файла нельзя использовать следующие зарезервированные имена устройств:

- CON, PRN, AUX, NUL;
- COMx (где x — число от 1 до 9);
- LPT1x (где x — число от 1 до 9).

Также следует избегать этих имен с добавленным расширением (например, Nul.txt).

Примечание

Для проверки соглашений о наименовании используются операционные системы на английском, японском и китайском языках. Компания Agilent не может заявить о поддержке неанглийских операционных систем и их специальных символов.

Максимальная длина имен файлов и подкаталогов ChemStation

Ниже перечислены спецификации Agilent ChemStation для имен файлов и подкаталогов.

Таблица 3 Максимальная длина имен файлов и подкаталогов ChemStation

Файл данных/подкаталог/путь	Макс. длина ввода	Автоматиче ское добавление	Пример
Имя файла данных отдельной пробы	60	.D	Demodad.d
Имя файла данных в последовательности, с использованием префикса/счетчика	15	.D	longname000001.d
Метод, последовательность, гиперпоследовательность, библиотеки, пользовательские шаблоны отчетов	40	. M . S . HYP . UVL . FRP	def_lc.m def_lc.s def_lc.hyp demodad.uvl areapct.frp
Подкаталог файлов данных	40		demo (в сведениях о пробе)
Подкаталог последовательностей данных	40		demo (в параметрах последовательности)
Имя набора результатов	40		тест_дата_время (создавайте, используя предпочтения для последовательности)
Путь к данным Путь к методу Путь к последовательности Путь к гиперпоследовательности Путь к библиотекам Путь к пользовательскому шаблону отчета	100	100	c:\chem32\1\data c:\chem32\1\ methods c:\chem32\1\ sequence c:\chem32\1\hyper c:\chem32\speclib c:\chem32\repstyle

Все журналы ChemStation выдают системные сообщения в расширенном формате и распечатывают информацию в несколько строк. В некоторых отчетах, например в отчете о последовательности, могут обрезаться имена файлов, чтобы вместить всю информацию в шаблон отчета.

Пользовательский интерфейс программного обеспечения

Пользовательский интерфейс ChemStation разработан в виде экранов, на которых группируются функциональные возможности программного обеспечения в соответствии с типичными задачами анализа. Следующие стандартные экраны присутствуют во всех конфигурациях программного обеспечения:

- экран Method and Run Control (Управление методом и выполнением) для управления данными и получения их из прибора;
- экран Data Analysis (Анализ данных) для повторной оценки полученных данных;
- экран Review (Просмотр) для просмотра данных с помощью определенных шаблонов отчета;
- экран Report Layout (Макет отчета) для разработки индивидуальных макетов отчетов.

Если заказаны дополнительные модули для оценки данных или используются определенные конфигурации приборов, поддерживающие диагностику прибора и процедуры верификации, то доступны дополнительные экраны. На тот случай, когда желательно, чтобы операторы выполняли анализ проб из простой в использовании предварительно настроенной таблицы, имеется экран ChemStation Companion (Компаньон ChemStation).

Панель навигации содержит кнопку навигации, позволяющую быстро переключаться между экранами приложения ChemStation и проводником ChemStation, основанным на древовидной структуре. Содержимое проводника ChemStation зависит от экрана и предоставляет доступ к различным элементам ChemStation.

Каждый экран состоит из набора стандартных пользовательских элементов, включая меню и панели инструментов. Стандартная панель инструментов предоставляет быстрый доступ к общей информации о спецификации системы, например к методам и последовательностям. Экран Method and Run Control (Управление методом и выполнением) дополнительно включает в себя строку состояния системы, область сведений о пробе, настраиваемую для отдельных и автоматических выполнений анализа, а также схематическую диаграмму интерфейса прибора в случае конфигураций ГХ, КЭ и ЖХ. Схематическая диаграмма интерфейса прибора позволяет с помощью активных точек указателя мыши быстро получить доступ к параметрам прибора и просмотру

состояния каждого текущего анализа в виде анимированных графических изображений. Если в схематической диаграмме интерфейса прибора нет надобности, ее можно отключить, чтобы сэкономить память и другие ресурсы Windows.

На экране Data Analysis (Анализ данных) стандартная панель инструментов расширена специальными режимами анализа данных, включая перерасчет, повторную обработку, интегрирование, калибровку, составление отчетов, аннотацию, сравнение сигналов и дополнительные специализированные режимы, если соответствующие модули установлены. Каждый из этих отдельных режимов анализа данных поддерживается свойственным ему набором инструментов.

Экран Review (Просмотр) доступен только в том случае, если для прибора выбрано интеллектуальное составление отчетов. Этот экран обеспечивает очень гибкий просмотр данных. В качестве основы для просмотра можно выбрать любое сочетание файлов данных, а затем применить к выбранным данным любой доступный шаблон отчета. Выбранный шаблон отчета определяет способ отображения данных и тип информации, включаемой в формируемый отчет. Панель инструментов содержит функции печати и экспортирования созданных отчетов.

Экран Report Layout (Макет отчета) позволяет задавать макет определенного шаблона отчета или стиль отчета. Кроме того, на нем используется набор панелей инструментов, характерных для этой задачи. Тип редактора шаблонов отчетов, отображаемый на этом экране, зависит от типа отчетности, настроенного для прибора. Можно воспользоваться либо составлением классических отчетов, либо составлением интеллектуальных отчетов **“Составление отчетов”** на странице 193).

Панель навигации

Панель навигации, доступная в левой части всех экранов ChemStation, предназначена для быстрого доступа ко многим ключевым элементам ChemStation, а также для быстрого переключения между экранами приложения. В панель навигации входят проводник ChemStation с древовидной структурой и настраиваемая область кнопок. Кроме того, она может автоматически сворачиваться, чтобы не нарушать рабочего пространства ChemStation, и снабжена стандартными возможностями, такими как изменение размера панели и переупорядочение области кнопок навигации.

Кнопки навигации

Кнопки навигации позволяют переключаться между экранами приложения ChemStation простым нажатием определенной кнопки навигации. Область кнопок навигации можно свернуть, развернуть и переупорядочить.

Проводник ChemStation

Содержимое панели навигации зависят от экрана. На экранах Method and Run Control (Управление методом и выполнением), Data Analysis (Анализ данных), Review (Просмотр) и Report Layout (Макет отчета) проводник ChemStation Explorer позволяет перемещаться между различными элементами ChemStation. По умолчанию эти элементы для данных, методов и последовательностей основаны на настройках редактора конфигурации. Новые узлы для методов, последовательностей и мест расположения данных можно указать с помощью пункта Preferences (Предпочтения) меню View (Вид).

Таблица 4 Элементы панели навигации

Кнопки навигации	Элементы проводника ChemStation
Управление методом и выполнением	Шаблоны последовательности/методы-образцы, методы набора результатов
Анализ данных	Данные/методы-образцы, методы набора результатов
Просмотр	Данные/шаблоны отчета
Макет отчета	Составление классических отчетов: Методы-образцы Составление интеллектуальных отчетов: Шаблоны отчета
Верификация (ЖХ и ЖХ/МС)	Ярлыки верификации в зависимости от экрана.
Диагностика (ЖХ и ЖХ/МС)	Ярлыки диагностики в зависимости от экрана.
Регулировка (ЖХ/МС)	Ярлыки регулировки в зависимости от экрана.

Сбор данных

Состояние прибора постоянно контролируется и обновляется на мониторе наряду с затраченным на выполнение анализа временем как при открытом, так и при свернутом в значок окне программы. Транзакции, происходящие в процессе анализа, в том числе ошибки и условия работы прибора в начале и конце анализа, фиксируются в журнале системы, выдержка из которого сохраняется вместе с каждым файлом данных.

Условия работы прибора, такие как поток, температура, давление и состав растворителя для жидкостных хроматографов, могут записываться и сохраняться вместе с каждым файлом данных. Эти параметры прибора можно отобразить и представить графически, чтобы подтвердить качество каждого анализа. Истинная природа записываемых параметров зависит от технических характеристик и возможностей настроенного прибора.

Все стандартные сборы данных как в случае отдельных проб, так и в случае последовательностей сначала добавляются в очередь выполнения, а затем запускаются оттуда. Дополнительные сведения см. в разделе [“Поддерживаемые рабочие процессы”](#) на странице 148.

Данные, получаемые прибором в реальном времени, можно контролировать в одном или нескольких окнах отображения. Данные отображаются в реальных единицах измерения, таких как mAU, вольты, градусы или бары. В каждом из окон могут отображаться наложенные друг на друга хроматографические/электрофоретические сигналы или параметры прибора, например давление. Используемые по умолчанию настройки отображения можно скорректировать и сохранить в системе, поэтому пользователи могут установить свои собственные предпочтительные установки в качестве используемых по умолчанию в приборе. В окне предусмотрена возможность масштабирования и использования курсора для отображения характеристики определенного сигнала в любой момент времени.

В ходе анализа можно воспользоваться всеми функциональными возможностями ChemStation с помощью автономного экземпляра сеанса. Пока идет сбор данных, относящаяся к анализу данных часть онлайн-сеанса прибора недоступна, и данные необходимо просматривать в автономном экземпляре сеанса.

Для тех пользователей, которые желают приступить к обработке данных, не дожидаясь завершения анализа, предусмотрена функция моментального снимка. Моментальный снимок сразу же становится доступным для просмотра, а делать его необходимо в автономном экземпляре сеансов инструментов.

Макет окон сигнала и сведений о состоянии, в том числе элементы схематической диаграммы интерфейса, сохраняется автоматически.

Дальнейшие сведения о сборе данных см. в разделе “Сбор данных” на странице 73 и в системе онлайн-справки.

Анализ данных

Анализ данных — отображение

На экране Data Analysis (Анализ данных) стандартная панель инструментов расширена сгруппированными по задачам функциями анализа данных, включая наборы инструментов для перерасчета, повторной обработки, интегрирования, калибровки, составления отчетов и сравнения сигналов. Возможны следующие основные графические операции:

- выбор отображения одного или нескольких сигналов при загрузке хроматограммы/электрофореграммы;
- наложение хроматограммы/электрофореграммы различных проб;
- вычитание одной хроматограммы/электрофореграммы из другой;
- графическое вертикальное и горизонтальное совмещение сигналов для облегчения визуального сравнения;
- инверсия или зеркальное отражение сигнала для облегчения визуального сравнения;
- отображение расширенных характеристик эффективности пика для отдельных интегрированных пиков;
- использование функций графического масштабирования и прокрутки;
- настройка атрибутов отображения, включая выбор делений, нулевых линий, осей, времени удерживания/миграции и названий соединений (также можно выбрать шрифт времени удерживания

(RT) и обозначений соединений, отрегулировать размер и ориентацию отображения, выбрать отображение с наложением или по отдельности и выбрать коэффициенты масштабирования);

- на изображение хроматограммы/электрофореграммы могут накладываться представленные в графическом виде параметры прибора в зависимости от возможностей сконфигурированного прибора;
- на изображение можно в интерактивном режиме добавлять пользовательские аннотации, выбирая для них шрифт, размер, поворот и цвет текста (заданные аннотации можно перемещать, править и удалять в графическом режиме);
- копирование изображения в буфер обмена Windows в формате метафайла или растрового изображения;
- отображение значений отдельных точек данных в единицах детектора с помощью *режима выборки*;
- экспорт оцифрованных точек времени/интенсивности в буфер обмена Microsoft Windows.

Анализ данных — интегрирование

Алгоритм модуля интегрирования ChemStation — это вторая версия нового поколения, переработанная с целью улучшения устойчивости, надежности и простоты в использовании.

Анализ данных — количественный анализ

Режим калибровки экрана анализа данных ChemStation позволяет одновременно отображать:

- калибруемый сигнал или сигналы с показанием текущего окна времени удерживания/миграции соединения;
- таблицу калибровки, отображение которой можно настроить с помощью полного набора параметров калибровки;
- калибровочную кривую для калибруемого соединения.

Все окна режимов калибровки связаны таким образом, что изменения в одном из них автоматически отражаются во всех остальных. Этот режим позволяет выбирать и изменять данные калибровки с помощью графических средств.

Количественный анализ основан на расчетах %, нормализованного %, внешнего стандарта, % внешнего стандарта, внутреннего стандарта и % внутреннего стандарта %, производимых на основе площади либо высоты пика. Калибровки могут быть многоуровневыми и включать в себя описания нескольких внутренних стандартов. Истории калибровки сохраняются автоматически и могут использоваться для задания веса повторных калибровок.

Сведения о калибровке и количественном анализе см. в [“Калибровка”](#) на странице 177.

Анализ данных — просмотр партии

На экране Data Analysis (Анализ данных) доступны следующие два дополнительных набора инструментов:

- таблица навигации;
- просмотр партии проб.

Таблица навигации позволяет выполнять несколько основных графических операций:

- стандартные возможности настройки таблицы, такие как сортировка, параметры перетаскивания, выделение столбца, группировка элементов, которые предназначены для задания предпочтительной конфигурации таблицы навигации;
- функции щелчка правой кнопкой мыши, используемые для загрузки сигнала, наложения сигнала, экспорта данных, печати отчетов;
- просмотр подробных сведений о сигнале путем развертывания строки в таблице навигации;
- просмотр сигналов и создание отчетов ChemStation с использованием определенного метода.

В режиме просмотра партии проб возможны следующие основные графические операции:

- задание автоматического или ручного просмотра и повторной обработки файлов (калиброванных) данных;
- перекалибровка таблицы калибровки;
- просмотр таблиц соединений калиброванных методов;
- создание специальных отчетов о партиях.

Анализ данных — перерасчет

С помощью функций в режиме перерасчета можно быстро сформировать результаты или отчеты для любого подмножества данных, показанных в таблице навигации. Можно без труда сформировать результаты для самособирающихся наборов данных вне зависимости от последовательностей, в которых первоначально были получены пробы. Для перерасчета можно использовать любой метод. Используемый метод будет скопирован в отдельные файлы данных (D.A.M.). Во время перерасчета калибровка не выполняется.

Анализ данных — повторная обработка

Функции в режиме повторной обработки позволяют повторно обрабатывать одну полную последовательность, рассчитывая результаты анализа проб с помощью методов, заданных в таблице последовательности, и результатов анализа калибровочных образцов.

Анализ данных — последние результаты

В этом режиме для каждого выполнения анализа загружается метод файла данных (D.A.M.). D.A.M. — это точная копия метода, который использовался во время последнего анализа данных (во время сбора данных, повторной обработки или перерасчета). Режим последнего результата позволяет воспроизводить результаты последнего анализа данных, даже если в промежутке был изменен метод последовательности.

Составление отчетов

Если для прибора включено составление интеллектуальных отчетов, экран **Review** доступен, и на экране **Report Layout** отображается редактор шаблонов отчетов для программируемых отчетов.

Включив составление программируемых отчетов, можно создавать отчеты по одному вводу пробы или сводные отчеты о последовательности, используя как шаблоны программируемого отчета, так и шаблоны классического отчета. При наличии необходимых прав можно создавать шаблоны отчетов для составления программируемых отчетов.

Когда составление интеллектуальных отчетов отключено, можно использовать только шаблоны классических отчетов, чтобы создавать отчеты по одному вводу пробы или сводные отчеты о последовательности. При наличии необходимых прав можно создавать шаблоны отчетов для составления классических отчетов.

Служебные программы и совместимость

ChemStation позволяет импортировать и экспортировать файлы данных в формате для данных хроматографии andi (Analytical Data Interchange), редакция 1.0. © Analytical Instrument Association (AIA), 1992. Импорт данных поддерживается на уровне соответствия 1 (сведения о пробе и данные сигнала), а экспорт данных — на уровне соответствия 2 (сведения о пробе, данные сигнала и результаты интегрирования).

ChemStation включает в себя команды и функции для поддержки стандарта динамического обмена данными (DDE) платформы Microsoft Windows как в качестве клиента DDE, так и в качестве сервера DDE. В набор входят команды для установки и разрыва соединений, передачи информации в обоих направлениях и выполнения удаленных функций.

Пользовательская настройка

ChemStation обладает мощным набором команд для установки индивидуальных настроек пользователя. Эти команды можно сгруппировать для автоматического выполнения определенных функций. Такая группа называется макросом. Создавая макросы, пользователи могут определять свои собственные переменные, встраивать конструкции условных и циклических переходов, выполнять физический ввод-вывод, в том числе обработку файлов и взаимодействие с пользователем, вкладывать свои макросы друг в друга, а также планировать и обмениваться данными с другими приложениями, работающими под управлением MS-DOS или Microsoft Windows.

Дополнительные сведения о пользовательской настройке см. в системе онлайн-справки, выбрав в приложении ChemStation пункт меню **Help > Commands**.

Автоматизация

ChemStation позволяет планировать и выполнять как анализ отдельных проб, так и последовательности с несколькими методами.

Можно задать набор параметров последовательности, чтобы использовать автоматически формируемые файлы или последовательно нумеруемые файлы с заданными пользователем префиксами длиной до 15 символов. По своему усмотрению пользователь может выполнять последовательности полного анализа или только повторной обработки данных, а также выбирать одну из серий команд завершения работы для конкретной методики или пользовательский макрос завершения работы, который запускается при прекращении выполнения последовательности в результате ошибки или после выполнения всех анализов.

Таблица последовательности, или список анализов, которые нужно выполнить, встраивается в напоминающий электронную таблицу пользовательский интерфейс, который позволяет указывать номера виал и названия проб, типы проб, методы анализа, параметры количественного анализа, в том числе количество пробы, множитель и коэффициент разбавления, спецификацию калибровки, параметр обмена данными (LMSID) и количество повторных вводов пробы. В зависимости от сконфигурированных приборов и модулей будут доступны дополнительные поля. Например, если в состав системы ЖХ Agilent 1100/1200 входит коллектор фракций, то столбец **Fract. Start** появится в таблице последовательности. Внешний вид таблицы последовательности может настраиваться пользователем. В таблице можно перемещаться между отдельными ячейками, копировать, вырезать или вставлять отдельные ячейки или полностью строки либо группы строк, что позволяет быстро и эффективно создавать последовательности.

В таблице последовательности пробам могут присваиваться следующие типы пробы: неизвестная, калибровочная, холостая или контрольная. Тип пробы определяет некоторую определенную обработку пробы с целью оценки данных:

- Для неизвестных проб оценка и составление отчета выполняются в соответствии со спецификацией метода.
- Калибровочные образцы используются для перекалибровки количественной составляющей метода, как описано ниже.

- Холостые пробы используются для оценки эталонного сигнала определенных пиков в соответствии с Европейской фармакопеей. В пользовательских отчетах можно распечатать отношение сигнал-шум. Подробнее о расчете и необходимых полях данных см. в справочном руководстве.
- Контрольные пробы оцениваются относительно пределов для каждого компонента, заданных в методе. Если результаты выйдут за пределы какого-либо заданного диапазона параметра, выполнение последовательности будет остановлено.

Калибровочные образцы могут быть определены как простые, циклические и вилочные. Простые перекалибровки означают, что повторная калибровка происходит всякий раз, как только в последовательности указан калибровочный образец. Циклические калибровки происходят с заданной периодичностью во время анализа серии неизвестных проб. При анализе серии неизвестных проб методом заключения в скобки анализируются два набора калибровочных образцов. Затем для неизвестных проб производится расчет количественных показателей на основе таблицы калибровки, усредненной по двум наборам калибровочных образцов, и составляются отчеты.

Функциональная возможность предварительного просмотра последовательности позволяет видеть порядок выполнения последовательности. После постановки последовательности в очередь в таблице последовательности также отображаются все пробы в порядке анализа. Пользователь может выбрать отдельные записи проб для повторного анализа или оценки. При повторной оценке уже полученных данных можно указать, использовать ли в повторной обработке исходные данные количественного анализа пробы или новые данные, введенные в таблице пробы последовательности.

Последовательности можно приостанавливать для выполнения анализа однократно вводимых приоритетных проб другим методом, а затем возобновлять, не нарушая автоматизации. Пробы можно добавлять в таблицу последовательности во время выполнения последовательности.

Таблицу последовательности и таблицу частичной последовательности можно распечатать.

Дальнейшие сведения о последовательностях см. в разделе [“Автоматизация/последовательности”](#) на странице 83 и в системе онлайн-справки.

Очередь выполнения и планировщик очереди

Очередь выполнения позволяет автоматически выполнять анализ нескольких отдельных проб или последовательностей одну за другой. После того как система данных приводится в готовность, запускается первый элемент, добавленный в очередь, если только он не приостановлен в очереди. В очередь можно добавить отдельные пробы, последовательности на основе шаблонов простой последовательности, классические последовательности ChemStation или паузы. Кроме того, каждая команда **Run Method** или **Run Sequence** автоматически добавляет элемент в очередь выполнения и автоматически запускает его в очереди.

Планировщик очереди позволяет подготавливать серию отдельных проб или последовательностей и сохранять план в файловую систему. Чтобы запустить эти запланированные пробы и последовательности, нужно просто открыть план и добавить его в очередь выполнения. Эта функция позволяет запускать занимающие много времени задачи, например задания на ночь или выходные дни.

Дополнительные сведения см. в разделе [“Поддерживаемые рабочие процессы”](#) на странице 148.

Надлежащая лабораторная практика

Система ChemStation создана в соответствии с международно признанными стандартами проектирования и разработки и обладает рядом свойств, специально предназначенных для оказания помощи пользователям, работающим в условиях нормативно-правового регламентирования. Эти свойства относятся к сфере полной спецификации метода и верификации соответствия методов своему предусмотренному применению, к проверке работы системы и обеспечению отслеживания, подлинности и качества данных.

Процесс разработки

Сертификат подтверждения соответствия, входящий в поставляемый пакет документации программного обеспечения, документально подтверждает этапы разработки и тестирования программного обеспече-

ния, выполняемые в рамках цикла разработки. Процесс разработки зарегистрирован как соответствующий стандарту качества ISO 9001.

Спецификация и использование метода

- Общие методы, представляющие собой полную спецификацию прибора и анализа данных, хранятся в одном месте. Методы включают в себя отдельные спецификации диапазонов соединений, которые служат для проверки того, чтобы результаты количественного анализа не применялись вне калиброванных диапазонов.
- Журнал истории изменения метода позволяет пользователям утвержденного метода автоматически регистрировать, как и где был изменен метод. По желанию пользователи могут добавлять в журнал истории изменения примечание с указанием причины изменения. Журнал истории изменения автоматически сохраняется в двоичном формате как часть метода. Во избежание несанкционированного доступа к записям он защищен схемой доступа пользователей, описанной ниже. Журнал истории изменения можно просмотреть и распечатать.
- В каждом методе, последовательно для каждого соединения, можно задать ограничения для ряда хроматографических/электрофоретических параметров, а также рабочих параметров системы, как описано в разделе о количественном анализе данных. Результаты, нарушающие эти диапазоны параметров, используются для управления выполнением автоматических последовательностей, как описано в разделе об автоматизации. Они указываются в соответствующем аналитическом отчете об анализе.
- Отчеты об эффективности или пригодности системы (см. выше раздел о составлении отчетов) предоставляют подробный анализ качества разделения.

В службах общего доступа OpenLAB можно задать различные роли и права. Основой для ролей в конкретных условиях служат предварительно настроенные роли: **ChemStation Administrator**, **ChemStation Lab Manager**, **ChemStation Analyst** и **ChemStation Operator**.

Ошибкоустойчивость метода

Средством проверки ошибкоустойчивости методов служат сводные отчеты о последовательности (см. “Составление классических и интеллектуальных отчетов” на странице 196). Классические отчеты отображаются в расширенном формате для выбранных пользователем критериев в виде диаграмм тренда и могут использоваться для определения реальных рабочих пределов. В случае составления интеллектуальных отчетов можно создавать собственные шаблоны для сводных отчетов о последовательности, включающие диаграммы тренда с предельными линиями. Впоследствии эти пределы можно внести в метод, обеспечивая посредством анализа контрольных проб функционирование метода в нормативных пределах.

Работа системы

Верификационный комплект ChemStation, являющийся частью стандартного программного обеспечения, автоматически проверяет правильность установки и работы отвечающих за оценку данных составных частей программного обеспечения, сравнивая получаемые во время проверки результаты с предварительно записанными известными значениями. Верификационный комплект позволяет пользователям определять собственные файлы данных и методы, на основе которых проводится проверка.

Отслеживание, подлинность и качество данных

В журнале хода выполнения регистрируются транзакции всей системы. Кроме того, в нем фиксируются любые необычные события (например, ошибки или изменения параметров во время выполнения), а также условия работы прибора до и после каждого анализа. Копия соответствующей выдержки из журнала сохраняется вместе с каждым файлом данных.

Регистрируются также фактические условия работы прибора, такие как давление, поток и температура во время каждого анализа, если сконфигурированный прибор поддерживает эту возможность. Впоследствии эти данные можно отобразить графически вместе с хроматограммой/электрофореграммой, чтобы показать фактические условия работы прибора во время этого конкретного анализа, а также включить в отчет.

Методы, сохраненные вместе с файлом данных, фиксируют фактический метод на момент анализа и впоследствии позволяют полностью реконструировать включенные в отчет данные. Метод сохраняется по завершении всех этапов анализа.

По умолчанию все отчеты имеют отметки времени и отслеживаемую нумерацию страниц (формат нумерации страниц: *страница x из y*). В каждом отчете можно выбрать степень детализации — от простых сводных отчетов до полных подробных сведений о системе.

Файлы регистра GLPSave, заданные как часть конфигурации метода, сохраняют все исходные данные, в том числе сведения о пробе, метод анализа данных, хроматографические/электрофоретические сигналы, условия работы прибора, результаты интегрирования и количественного анализа, данные отчета и журнал выполнения в одном двоичном файле, защищенном с помощью контрольной суммы. Это нередактируемый двоичный формат, который гарантирует подлинность результатов. Файл содержит схему пересмотра, которая показывает, обрабатывались ли данные повторно.

В таблице последовательности можно определить типы контрольных проб и использовать их для автоматической проверки рабочих показателей оставленного без присмотра прибора путем сравнения с результатами проб для контроля качества. Если результаты выйдут за рамки заданного пользователем допустимого диапазона, автоматическое выполнение анализа прибором прекратится.

Структура данных ChemStation

Без создания уникальной папки

Эта структура данных соответствует структуре данных, используемой в ChemStation версии B.01.03 и более ранних версиях.

Последовательности, методы, формируемые файлы данных и результаты сохраняются в постоянных заданных местах отдельно друг от друга. Например, в последовательности на метод ссылаются по имени, и именно пользователь несет ответственность за поддержание целостности методов, последовательностей и файлов данных. Поэтому долгосрочное архивирование данных и воспроизведение результатов является трудоемкой задачей. Пользователь должен документально фиксировать хроматограмму, результаты и соответствующий метод. Это касается не только лабораторий, деятельность которых регламентируется, но и некоторых сфер деятельности нерегулируемых лабораторий (например, лабораторий, относящихся к охране окружающей среды). Без создания набора результатов этого можно достичь лишь распечаткой всех сведений в отчете.

Однако возможны ситуации, когда у пользователей может возникнуть желание сохранить свои данные как в системе ChemStation версии B.01.03, так и в более ранней версии и работать в соответствии со следующими рабочими процессами.

- Во время разработки метода, возможно, удобнее иметь только один метод, общий для сбора и анализа данных, чтобы изменения автоматически были доступны для будущего сбора данных и повторного анализа уже собранных данных.
- Пользовательские макросы в системе ChemStation, разработанные для более старых версий, могут потребовать сохранения данных, методов или последовательностей в соответствии со старой схемой организации данных.
- Когда ChemStation C.01.06 работает в лаборатории, где до сих пор используются системы ChemStation версии B.01.03 или более ранних версий, возможно, удобнее будет использовать один и тот же режим организации данных во всех системах.

С созданием уникальной папки

Для того чтобы укрепить связь между файлами данных и методами, с выходом системы ChemStation версии V.02.01 было введено использование наборов результатов (тогда наборы результатов называли контейнерами последовательности). При работе с системой центрального хранилища данных (корпоративным диспетчером содержимого *OpenLAB ECM* или хранилищем данных *OpenLAB Data Store*) полный набор результатов (последовательность/методы/файлы данных/шаблоны отчета) передается в центральный репозиторий в виде одной записи.

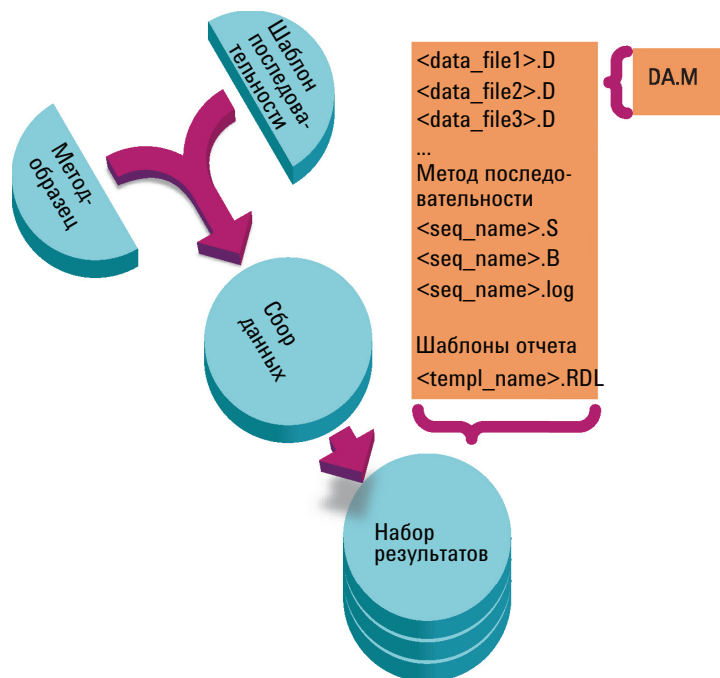


Рисунок 1 Получение последовательности, когда включено создание уникальной папки

Методы, хранящиеся в папке Chem32\1\methods, служат методами-образцами. Они остаются неизменными во время сбора и анализа данных.

Подобным образом последовательности, хранящиеся в папке Chem32\1\sequence, служат шаблонами, которые можно использовать для повторного выполнения анализа (но не повторной обработки) последовательности несколько раз.

Шаблоны отчетов, хранящиеся в папке Chem32\repstyle, служат отправным пунктом для разработки собственных шаблонов отчетов.

Модель хранилища данных меняется в зависимости от того, какие данные собираются — одного выполнения анализа или последовательности.

- 1 Когда выполняется последовательность, в заданном подкаталоге автоматически создается новая папка (**result set**) с уникальным именем. При выполнении анализа одной пробы в заданный подкаталог записывается файл данных (*.d).
- 2 В случае данных последовательности в набор результатов копируются шаблон последовательности (*.s) и все используемые методы (*.m). Копии методов называют **sequence methods**, чтобы отличить их от исходных методов-образцов. Если используется интеллектуальное составление отчета, то все задействованные шаблоны отчетов (*.rdl) тоже копируются в набор результатов.

Вся связанная с последовательностью задачи (например, сбор и анализ данных) выполняются на копиях последовательностей и методов. Поэтому шаблон последовательности и методы-образцы остаются неизменными для будущего выполнения последовательностей.

Любые изменения, производимые над последовательностью во время ее получения (например, добавление строк в таблицу последовательности), вносятся в копию файла последовательности в наборе данных результатов. Шаблон последовательности остается неизменным.

Подобным образом любые изменения в методе (например, обновления таблицы калибровки в случае выполнения калибровок) отражаются в методах последовательности, а не в методах-образцах.

В процессе выполнения последовательности все формируемые файлы данных (*.d) сохраняются в папке данных последовательности вместе с соответствующим файлом партии (*.b) и файлом журнала последовательности (*.log).

- 3 Каждый файл данных содержит копию метода, использованного для выполнения анализа. Сохраняются следующие сведения о методе.

- Параметры сбора данных сохраняются как ACQ.TXT, чтобы обеспечить сохранность исходных параметров метода для каждого отдельного файла данных. Эти параметры можно просмотреть и распечатать с помощью команды **Method > View Method**.
- По завершении части метода, касающейся анализа данных, весь метод, включая параметры анализа данных, сохраняется как DA.M.

Работа с наборами результатов дает ряд преимуществ:

- Данные последовательности не перезаписываются. Каждая полученная последовательность сохраняет получающиеся в результате файлы данных в своем собственном наборе результатов с уникальным именем.
- Благодаря концепции набора результатов данные сохраняются вместе со всей необходимой информацией, требуемой для анализа данных: копии файла последовательности, всех методов, а также (в случае составления интеллектуальных отчетов) шаблонов отчетов, использованных вместе с последовательностью. Методы последовательности можно изменить, введя в них предназначенные для этой последовательности данные, причем это не скажется на исходном методе-образце. Следовательно, концепция набора результатов усиливает представление о последовательности как о наборе файлов данных и методов, совместно причастных к созданию результата.
- Как перерасчет, так и повторная обработка данных доступны на экране **Data Analysis** через таблицу навигации.
- Концепция набора результатов обеспечивает оптимальные предпосылки для обмена данными с системой центрального хранилища данных.

Включение и выключение создания уникальной папки

Для того чтобы можно было работать с концепцией хранилища данных, как в системе ChemStation версии ниже B.02.01, на вкладке **Sequence** диалогового окна **Preferences** предусмотрен раздел **Data Storage**. Здесь можно выбрать переключатель **Unique Folder Creation ON** или **Unique Folder Creation OFF** (см. “Предпочтения — вкладка последовательности” на странице 116). По умолчанию выбран переключатель **Unique Folder Creation ON**. Выбор переключателя **Unique Folder Creation ON** позволяет использовать концепцию хранилища данных, описанную выше в этой главе.



2 Работа с методами

Что такое метод?	45
Части метода	46
Типы методов	49
Методы-образцы	49
Методы последовательности	49
Методы файлов данных	50
Создание методов	51
Редактирование методов	52
Редактируемые части метода	52
Структура каталога метода	53
Редактирование методов в режиме онлайн	54
Редактирование методов в автономном режиме	55
Управление методами	56
Дерево методов в проводнике ChemStation	56
Просмотр метода сбора данных	57
Обновление параметров АД в методах-образцах	60
Обновление методов	61
Сохранение метода как нового метода-образца	63
Что происходит при выполнении метода?	65
Сводка по работе метода	65
Предварительная команда или макрос (Контрольный список выполнения)	68
Сбор данных (Контрольный список выполнения)	68
Анализ данных (Контрольный список выполнения)	68
Пользовательский анализ данных	70
Сохранение данных GLP	70
Последующая команда или макрос	71
Сохранение копии метода вместе с данными	71



2 Работа с методами

Структура данных ChemStation

Сохранение копии метода как DA.M вместе с данными (по умолчанию ChemStation) [71](#)

В этой главе подробно разъясняются понятия, связанные с методом — важнейшей частью системы ChemStation.

Что такое метод?

Метод включает в себя все параметры сбора и анализа данных вместе с задачами, выполняемыми до и после выполнения анализа данной пробы, если в них есть необходимость.

Доступные файлы методов (*.m) отображаются в проводнике ChemStation. Чтобы облегчить и ускорить навигацию, в дерево выбора проводника ChemStation можно добавить дополнительные места размещения методов, воспользовавшись вкладкой **Paths** в диалоговом окне **Preferences**.

Части метода

Каждый метод распознается по имени, содержащему до 40 буквенно-цифровых символов. К имени файла всегда добавляется расширение .М, однозначно определяющее его как метод. Методы хранятся в виде каталогов, содержащих отдельные файлы, связанные с частями метода.

Каждый метод состоит из четырех частей:

- сведения о методе;
- управление прибором;
- анализ данных;
- контрольный список выполнения.

Сведения о методе

Этот раздел служит для задания сведений о методе.

Управление прибором

В этом разделе определяются параметры, которые управляют прибором и его составными частями. В приборе для жидкостной хроматографии такие параметры, как состав подвижной фазы, скорость потока газа-носителя, объем введенной пробы, длина волны детектора и т. п., управляют насосом, инжектором и детектором. Прибор для газовой хроматографии управляется такими параметрами, как температура на входе, давление на входе, настройка параметров потока газа-носителя через насадочную колонку и т. п.

Анализ данных

В этом разделе определяются параметры, которые управляют обработкой данных.

- *Подробные сведения о сигнале*

Здесь определяются сигналы и их свойства, используемые для оценки данных.

- *События интегрирования*

Здесь определяются спланированные по времени события, которые происходят на хроматограмме/электрофореграмме в указанное время удерживания/миграции. С помощью этих спланированных по времени событий можно изменять способ интегрирования сигнала.

- *Идентификация пика*

Здесь определяются параметры обработки данных, связанные с идентификацией пиков на хроматограмме/электрофореграмме.

- *Количественный анализ пика*

Здесь определяются параметры обработки данных, влияющие на количественные расчеты, которые определяют количество или концентрацию компонента пробы, соответствующего каждому пику.

- *Калибровка и перекалибровка*

Здесь задаются параметры обработки данных, влияющие на калибровку и периодичность ее выполнения.

- *Настраиваемые поля*

Здесь определяются свойства связанных с пробой или соединением настраиваемых полей, которые доступны для метода. Настраиваемые поля позволяют добавлять пользовательские сведения к пробе или соединению в пробе.

- *Отчет*

В случае составления классических отчетов: здесь определяется формат отчета, распечатываемого после выполнения анализа.

В случае интеллектуального составления отчета: здесь указывается шаблон отчета, используемый для формирования отчета после выполнения анализа.

Контрольный список выполнения

Определяет, какие части метода выполняются во время выполнения метода.

С помощью контрольного списка выполнения можно:

- собирать, сохранять и обрабатывать данные для создания отчета;
- выполнять только часть метода;
- собирать и сохранять данные, не анализируя их;

2 Работа с методами

Части метода

- повторно анализировать существующие файлы данных;
- использовать собственные макросы для анализа данных, предварительной и последующей обработки;
- сохранять результаты анализа в регистре в целях обеспечения надлежащей лабораторной практики (Good laboratory practice, GLP).

Типы методов

Существуют различные типы методов. В зависимости от места хранения методы используются либо как методы-образцы в качестве эталона в наборе результатов последовательности, либо как фактическая запись настроек, применяемых во время сбора данных.

Методы-образцы

Это методы, которые хранятся на жестком диске компьютера. Методы хранятся под именем, содержащем до 40 буквенно-цифровых символов, к которому добавлено расширение *.М. Каталоги методов-образцов настраиваются в диалоговом окне предпочтений (см. “Выбор пути” на странице 74).

Метод-образец хранится в подкаталоге методов, доступном в узле Methods (Методы) проводника ChemStation, и не связан напрямую ни с одним набором результатов.

Методы последовательности

При выполнении последовательности (когда выбран переключатель **Unique Folder Creation ON**, см. “Предпочтения — вкладка последовательности” на странице 116) копии всех методов-образцов, использованных в последовательности, сохраняются в наборе результатов вместе с файлами данных последовательности. Эти методы напрямую привязаны к последовательности и тоже используются при повторной обработке последовательности. По умолчанию изменения в этих методах не распространяются автоматически на методы-образцы. Изменения вступают в силу, как только выполнение последовательности начинается или возобновляется после паузы. Изменения распространяются также на методы файлов данных (D.A.M), когда выполняется повторная обработка последовательности, и при формировании любого отчета.

Методы файлов данных

Копия параметров анализа данных сохраняется как метод файла данных DA.M вместе с файлами данных. Метод файла данных DA.M автоматически обновляется после каждого получения результатов (сбор данных, перерасчет или формирование отчета). Он также загружается приложением ChemStation при перерасчете результатов в режиме последнего результата (см. [“Режим последнего результата”](#) на странице 161).

Если в контрольном списке выполнения используется пункт **Save method with Data**, то метод дополнительно сохраняется в файле данных run.m.

Для того чтобы загрузить метод-образец или метод последовательности, просто дважды щелкните его в проводнике ChemStation.

Создание методов

Создание нового метода всегда подразумевает изменение метода-образца или метода последовательности и сохранение изменений. Можно либо перезаписать существующий метод, либо сохранить метод как новый метод-образец. Обращаем ваше внимание на то, что при изменении метода имеющаяся на жестком диске версия остается неизменной до тех пор, пока не сохранят изменения.

Существует несколько способов создания методов. Можно создать метод для выполнения одной или нескольких частей анализа. Например, можно создать метод выполнения только для сбора данных. Когда будете готовы проанализировать эти данные и сформировать отчет, можно будет изменить метод, чтобы выполнить задачи обработки этих данных.

Примечание

Не удаляйте используемые по умолчанию методы (DEF_LC.M, DEF_CE.M или DEF_GC.M). Эти файлы методов используются в качестве шаблонов для создания новых методов.

Редактирование методов

Существующий метод можно отредактировать, воспользовавшись командой Edit Entire Method (Редактировать весь метод) в меню Method (Метод). Следуйте указаниям во всех диалоговых окнах метода, и в конце можно будет сохранить метод. Эта процедура показана ниже:

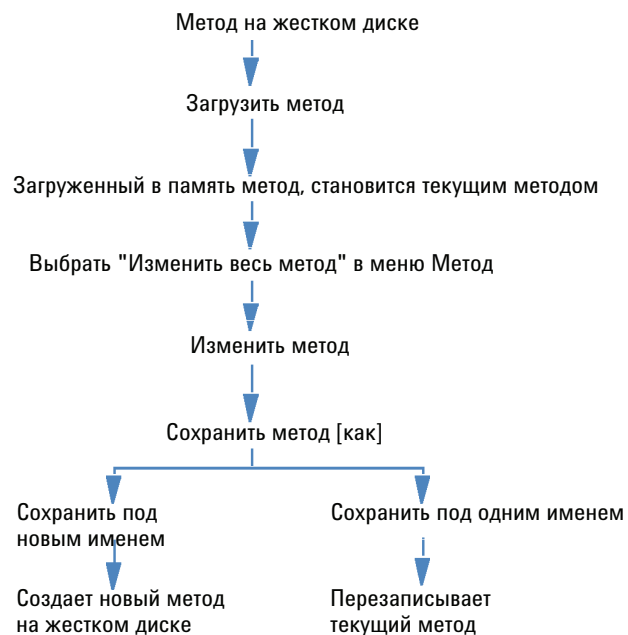


Рисунок 2 Редактирование метода

Редактируемые части метода

Каждый метод состоит из четырех частей, которые можно редактировать по отдельности.

Некоторые из следующих подразделов отсылают к определенным диалоговым окнам, а другие представляют собой обобщенные описания.

- Часть *Сведения о методе* включает в себя:
 - текстовое описание метода.
- Часть *Управление прибором* зависит от конфигурации и может включать в себя, например:
 - параметры термостата;
 - параметра инжектора;
 - параметры детектора.
- Часть *Анализ данных* включает в себя:
 - подробные сведения о сигнале;
 - параметры интегрирования;
 - параметры количественного анализа;
 - параметры калибровки;
 - параметры установки настраиваемых полей;
 - параметры составления отчетов.
- Часть *Контрольный список выполнения* включает в себя:
 - части метода, которые будут выполняться.

Структура каталога метода

Папки

Метод включает в себя группу файлов, хранящихся в каталоге метода (*.М).

По умолчанию методы-образцы хранятся в папке Chem32\1\METHODS. С помощью настроек предпочтений можно добавить дополнительные пути к методам-образцам. Методы последовательности хранятся в наборе результатов, а методы файла данных хранятся в виде файла DA.M в подкаталоге файлов данных.

Файлы

Файлы методов с расширением .MTH содержат наборы параметров и используют формат UNICODE. Файл INFO.MTH включает в себя параметры управления методом.

Имена файлов методов, содержащих параметры прибора, связаны с соответствующим модулем анализа. Например:

Таблица 5 Примеры файла метода

HPCE1.MTH	Содержит метод сбора данных для капиллярного электрофореза.
ADC1.MTH	Содержит метод сбора данных для Agilent 35900. Если сконфигурированы два одинаковых прибора, файлы методов носят имена ADC1.MTH, ADC2.MTH.
DAMETHOD.REG	Для оценки данных.
LALS1.REG	Содержит параметры для автосамплера приборов серии Agilent 1100/1200, когда сконфигурирована классическая модульная система ЖХ. В отношении файлов методов для остальных модулей приборов Agilent серии 1100/1200 действует то же самое соглашение о наименовании, а именно: Lxxx1.reg, где xxx — сокращенное название модуля.
AgilentSamplerDriver1.RapidControl.xxx.xml	Содержит параметры для автосамплера приборов серии Agilent 1100/1200, когда сконфигурирована модульная система ЖХ. Существует несколько xml-файлов для различных составляющих параметров (указываются частью xxx имени файла). Аналогичные xml-файлы имеются для других модулей.

Редактирование методов в режиме онлайн

Когда работающая в режиме онлайн система ChemStation пребывает в состоянии ожидания, редактировать можно все части метода последовательности. Когда выполняется последовательность, редактировать можно все параметры сбора данных и некоторые

параметры анализа данных, например настройки в диалоговом окне Specify Report (Определение отчета).

Изменения сохраняются и сразу же вступают в силу для текущего выполнения анализа и всех последующих строк последовательности, содержащих этот метод. Это означает, что метод можно изменять также во время приостановки последовательности или выполнения частичной последовательности.

Редактирование методов в автономном режиме

В автономной системе ChemStation метод последовательности можно редактировать, в то время как такой же метод используется для выполнения анализа в системе ChemStation, работающей в режиме онлайн. В этом случае можно отредактировать часть Data Analysis (Анализ данных) в автономном режиме. После сохранения изменений в автономном сеансе измененные настройки анализа данных будут использованы в следующем анализе данных текущей последовательности в онлайн-сеансе.

Обновления метода, затрагивающие калибровку, не учитываются. Кроме того, записи журнала не объединяются, то есть если метод выполняется в онлайн-сеансе и изменения вносятся в оба сеанса, онлайн и автономный, то журнал аудита метода будет содержать только изменения, внесенные в автономной системе ChemStation.

Примечание

Если один и тот же метод загружен в онлайн-овую и автономную системы ChemStation, то во время выполнения последовательности редактировать метод можно только в автономной системе. Редактирование метода в автономной системе ChemStation невозможно, если онлайн-овая ChemStation в состоянии ожидания.

Управление методами

Дерево методов в проводнике ChemStation

В проводнике ChemStation дерево методов разбито на две части. Вверху отображаются методы, содержащиеся в текущем загруженном наборе результатов. Внизу отображаются методы, содержащиеся в каталогах методов-образцов, сконфигурированных в диалоговом окне **Preferences**.

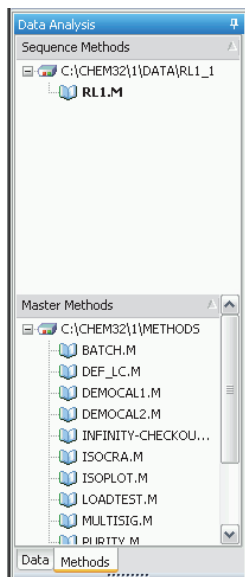


Рисунок 3 Дерево переходов по методам

Текущий загруженный метод всегда выделен жирным шрифтом.

Для того чтобы скопировать методы-образцы в методы последовательности, просто перетащите их. В набор результатов будет скопирован весь метод (параметры анализа данных и параметры сбора данных).

Просмотр метода сбора данных

Доступ к средству просмотра метода сбора данных можно получить с помощью меню **Instrument > Acquisition Method Viewer...** на экране **Method and Run Control**. Средство просмотра метода сбора данных доступно как в онлайнном, так и в автономном сеансах ChemStation.

Вне зависимости от текущей конфигурации прибора средство просмотра метода сбора данных позволяет проверять параметры сбора данных, сохраненные в методе. В диалоговом окне отображается конфигурация прибора на момент сохранения метода в ChemStation. Это средство просмотра не показывает параметры анализа данных. Средство просмотра метода сбора данных не позволяет вносить никакие изменения в загруженный метод ChemStation.

Настройки метода в средстве просмотра метода данных отображаются в режиме только для чтения. В нем не предусмотрены функциональные возможности редактирования и сохранения методов.

Примечание

В этом диалоговом окне отображаются настройки метода только для приборов или модулей с драйверами RC.Net. Настройки метода, полученные из классических драйверов, не отображаются.

2 Работа с методами

Управление методами

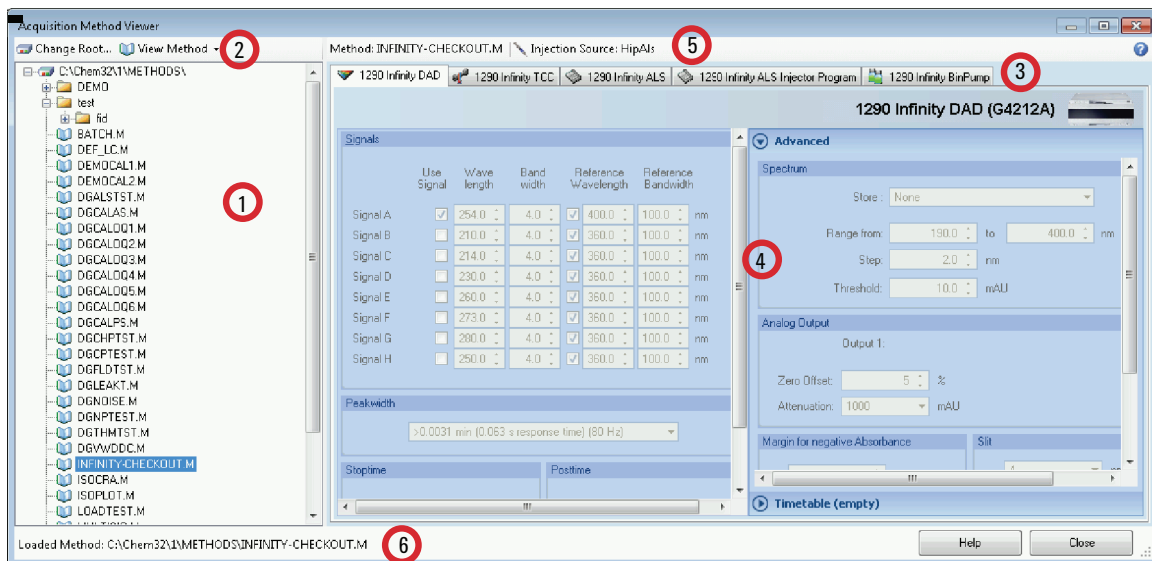


Рисунок 4 Диалоговое окно Acquisition Method Viewer

- | | |
|---|--|
| 1 | Обозреватель методов |
| 2 | Панель инструментов |
| 3 | Вкладки модулей (показывают настройки метода, настройки предварительной обработки в наборе вкладок для всех найденных модулей в используемой конфигурации прибора) |
| 4 | Область средства просмотра метода |
| 5 | Имя метода, сведения об источнике ввода |
| 6 | Строка состояния |

В обозревателе методов (1) по умолчанию указан предпочтительный путь к методу. Чтобы выбрать другой каталог, выберите команду **Change Root...** на панели инструментов.

На панели инструментов (2) в раскрывающемся списке **View Method** предлагаются следующие варианты.

- **View with Original Configuration...** Загрузить в прибор настройки, хранящиеся в методе.

- **View with Instrument Configuration...** Применить сохраненный метод к текущей конфигурации прибора. Этот вариант доступен только для приборов, работающих в режиме онлайн. Сохраненный метод может не соответствовать текущим настройкам прибора. По возможности, настройки автоматически адаптируются после загрузки. В противном случае можно нажать **Resolve Settings** и проверить подробные сведения в диалоговом окне **Method Resolution Info**. В этом диалоговом окне перечисляются несоответствия и различия между неурегулированным и урегулированным методами.

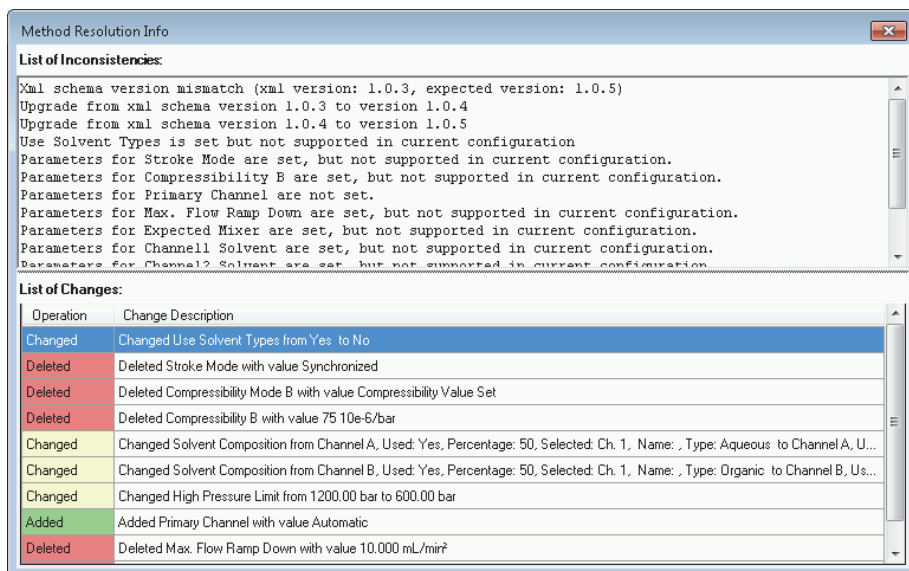


Рисунок 5 Диалоговое окно **Method Resolution Info**

Обновление параметров АД в методах-образцах

Команда **Update Master Method** доступна в меню **Method** и в контекстном меню метода последовательности в проводнике ChemStation. Как именно действует эта функция, зависит от текущего выбранного режима. Во всех случаях эта функция обновляет параметры анализа данных целевого метода.

Примечание

Важно отметить, что эта функция обновляет параметры анализа данных *только* целевого метода и что она перезаписывает *все* параметры анализа данных.

Обновление метода-образца в режиме повторной обработки или перерасчета

В этом режиме команда **Update Master Method** активна только для методов последовательности набора результатов. Можно обновить метод-образец, на который делались ссылки при создании последовательности. В качестве предварительного условия необходимо, чтобы этот метод-образец по-прежнему присутствовал в каталоге методов-образцов (у метода-образца должно быть то же имя, что и у метода последовательности).

Можно также настроить параметры последовательности, чтобы автоматически выполнять эту функцию во время каждого сбора данных или повторной обработки в рамках этой последовательности. Дополнительные сведения см. в разделе “[Управление методами](#)” на странице 56.

Обновление метода-образца в режиме последнего результата

В этом режиме команда **Update Master Method** активна как для последовательностей, так и для отдельных проб. Текущие параметры анализа данных можно перенести в метод-образец, использовавшийся для анализа данных в последний раз. Этот метод отображается в столбце **Analysis Method** таблицы навигации.

Команда доступна при следующих условиях.

- Файл метода существует в указанном месте (т. е. имя файла и полный путь должны совпадать).

- Для последовательностей: анализ последовательности выполнен вручную с использованием метода-образца (а не метода последовательности).

Обновление любого метода-образца в режиме последнего результата

В режиме последнего результата параметры анализа данных можно перенести в любой метод-образец вне зависимости от метода-образца, связанного с текущей последовательностью или выполнением анализа одной пробы. Чтобы обновить любой метод-образец, выберите **Menu > Update any Master Method ...**, затем выберите метод в диалоговом окне **Choose Master Method to update**. После этого параметры анализа данных будут скопированы в выбранный метод-образец.

Обновление методов

С помощью диалогового окна **Update Methods** (см. Рис. 6 на странице 62) можно скопировать методы из каталога методов-образцов в набор результатов, и наоборот. Во обоих случаях метод копируется целиком (параметры анализа данных и параметры сбора данных).

Диалоговое окно открывается с помощью меню **Method > Update Methods...** или контекстного меню метода последовательности в проводнике ChemStation. Эта функция доступна для наборов результатов в режиме перерасчета и повторной обработки.

2 Работа с методами

Управление методами

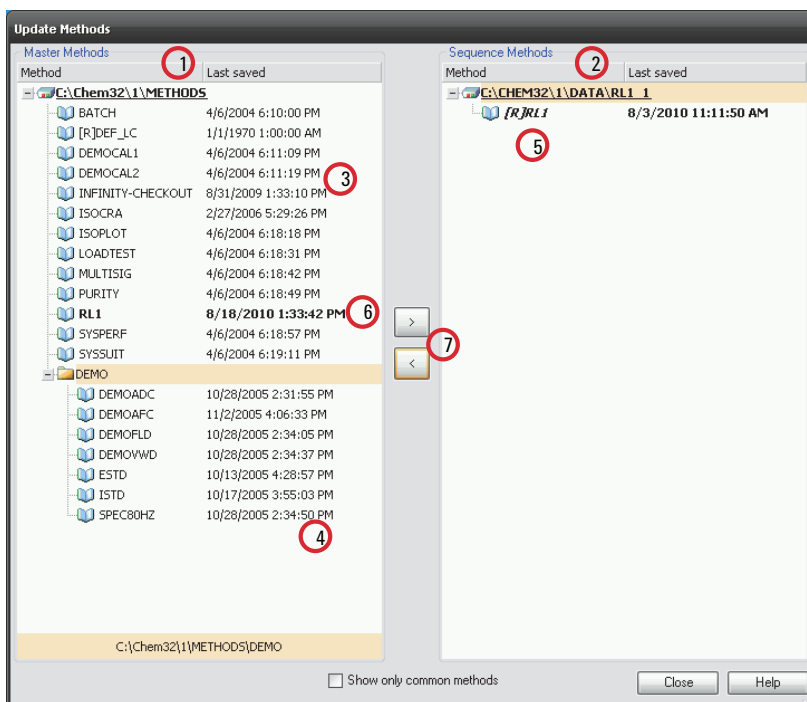


Рисунок 6 Диалоговое окно Update Methods

- 1 Слева показаны методы, содержащиеся во всех каталогах методов-образцов (в соответствии с настройками предпочтений).
- 2 Справа показаны методы в текущем загруженном наборе результатов.
- 3 Для каждого метода указана дата его последнего сохранения. Во всплывающей подсказке даты отображается последняя запись в журнал для этого метода.
- 4 Методы могут также храниться в подпапках каталога методов-образцов.
- 5 Методы, доступные только для чтения, снабжены префиксом [R]. Текущий загруженный метод последовательности выделен курсивом.

- 6 Методы, общие для набора результатов последовательности и пула методов-образцов, выделены жирным шрифтом. Методы сопоставляются только по именам. Если имя метода встречается в нескольких пулах, каждый из этих экземпляров считается общим.
- 7 Копировать методы между пулом методов-образцов и набором результатов последовательности можно либо перетаскиванием, либо или с помощью кнопок < и >. Perezаписать методы, которые помечены как доступные только для чтения, невозможно.

Сохранение метода как нового метода-образца

Параметры анализа данных из файла DA.M можно сохранить как новый метод-образец. Однако файл DA.M не содержит параметров сбора данных. Следовательно, чтобы обеспечить допустимый набор параметров сбора данных для нового метода-образца, необходимо выбрать другой метод в качестве шаблона для параметров сбора данных (см. Рис. 7 на странице 64). После этого новый метод-образец будет содержать текущие параметры анализа данных из файла DA.M и параметры сбора данных из выбранного шаблона метода. Новый метод будет создан в папке, где хранится использованный в качестве шаблона метод сбора данных.

2 Работа с методами

Управление методами

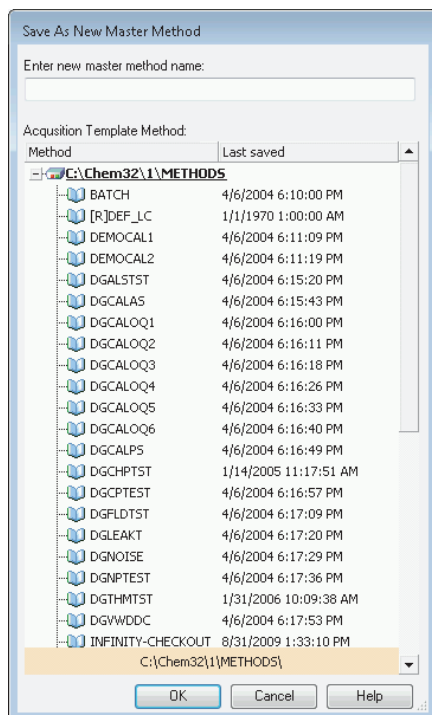


Рисунок 7 Диалоговое окно Save as New Master Method

Что происходит при выполнении метода?

В диалоговом окне **Run Time Checklist** определяются части метода, которые нужно выполнить, когда начнется анализ.

Контрольный список выполнения разбит на восемь частей:

- предварительная команда или макрос;
- сбор данных;
- стандартный анализ данных;
- метод анализа для второго сигнала (только для GX);
- пользовательский анализ данных;
- сохранение данных GLP;
- последующая команда или макрос;
- сохранение копии метода вместе с данными (RUN.M).

Во время выполнения метода выполняются указанные части метода из числа заданных в диалоговом окне контрольного списка выполнения.

Сводка по работе метода

В следующем списке показан порядок работы метода в случае, когда выбраны все части контрольного списка выполнения.

1 *Предварительная команда или макрос.*

Выполнение задачи перед началом анализа.

2 *Сбор данных.*

Выполнение программы инжектора.

Введение пробы.

Сбор необработанных данных.

Сохранение данных.

3 *Сохранение копии метода вместе с данными (RUN.M), необязательный пункт контрольного списка выполнения*

2 Работа с методами

Что происходит при выполнении метода?

4 Анализ данных (обработка данных).

Загрузка файла данных.

Интегрирование файла данных.

Идентификация и количественный анализ пика.

Поиск в библиотеке спектров, если она в наличии.

Проверка чистоты пика, если доступно.

Сохранение копии метода (DA.M) и печать отчета.

5 Пользовательский анализ данных.

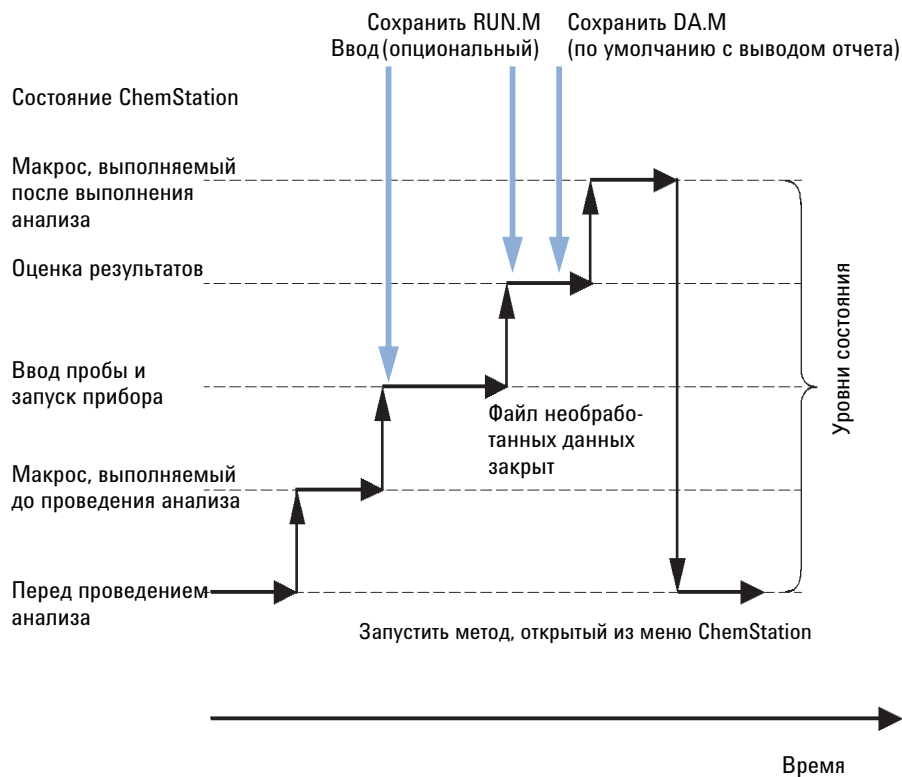
Выполнение макроса пользователя.

6 Сохранение данных GLP.

Сохранение двоичного регистра GLPSave.Reg.

7 Последующая команда или макрос.

Выполнение задачи после завершения анализа, например формирование пользовательского отчета.

**Рисунок 8** Работа метода

На приведенном ниже рисунке дан обзор состояния ChemStation во время работы метода, когда выбраны все части контрольного списка выполнения.

Примечание

В режиме Unique Folder Creation OFF (Создание уникальной папки ВЫКЛ) файл DA.M не создается. Дополнительные сведения см. в разделе [“Предпочтения — вкладка последовательности”](#) на странице 116.

Предварительная команда или макрос (Контрольный список выполнения)

Если предварительная команда или макрос указаны, они выполняются перед началом анализа. Эта часть обычно используется для настройки совместной работы системы с другими пакетами программного обеспечения.

Сбор данных (Контрольный список выполнения)

- Все параметры приводятся к исходным условиям, указанным в текущем методе.
- Если указано, выполняется программа инжектора, и осуществляется ввод из текущей заданной виалы.
- На экране монитора отображается процесс анализа, в том числе хроматографические/электрофоретические сведения, и спектральные данные, если они в наличии.
- Данные собираются и сохраняются в файле данных.
- По завершении сбора данных параметры сбора данных выполняемого метода сохраняются в виде используемого по умолчанию файла данных ACQ.txt.

Анализ данных (Контрольный список выполнения)

По достижении времени остановки анализ завершается, и все необработанные данные сохраняются на жестком диске компьютера. После того как сохранены все необработанные данные, запускается часть программного обеспечения, выполняющая анализ данных.

Интегрирование

- Хроматографические/электрофоретические объекты в сигнале интегрируются согласно настройкам в диалоговом окне Integration Events (События интегрирования).

- Определяются начало пика, вершина пика, время удерживания/миграции и конец пика.
- Нулевые линии определяются под каждым пиком, чтобы определить конечную высоту и площадь пика.
- Результаты интегрирования создаются в виде списка Integration Results (Результаты интегрирования).

Идентификация и количественный анализ пика

- Используя время удерживания/миграции и дополнительные характеристики пика, программное обеспечение идентифицирует пики путем перекрестного сравнения с известными компонентами, определенными в таблице калибровки.
- На основе высот или площадей пика программное обеспечение рассчитывает количество каждого обнаруженного компонента с помощью параметров калибровки, указанных в таблице калибровки.

Поиск в библиотеке спектров (только для систем 3D ЖХ, КЭ, КЭ/МС и ЖХ/МС, доступен в случае составления классических отчетов)

Для всех пиков, у которых имеются спектры в УФ- и видимой областях, можно выполнить автоматический поиск в предварительно заданной библиотеке спектров, чтобы опознать компоненты пробы на основе УФ- и видимых спектров. Подробные сведения см. в разделе *Основные сведения о спектральном модуле*.

Проверка чистоты пика (только для систем 3D ЖХ, КЭ, КЭ/МС и ЖХ/МС)

Для пика со спектрами в УФ- и видимой областях можно рассчитать коэффициент чистоты этого пика и сохранить его в регистре. Чистота пика может определяться автоматически в конце каждого анализа как часть метода, если при задании автоматического поиска в библиотеке установлен флажок Check Purity (Проверять чистоту), или когда выбран соответствующий стиль отчета. Подробные сведения см. в разделе *Основные сведения о спектральном модуле*.

Печать отчета

Создаваемый отчет содержит состав и количества компонентов, обнаруженных при выполнении анализа.

Пользовательский анализ данных

Позволяет выполнять собственные пользовательские макросы с целью оценки данных анализа.

Сохранение данных GLP

Сохраняет двоичный регистр GLPSave.Reg вместе с методом анализа данных в используемом по умолчанию подкаталоге файлов данных. Эта функция предназначена для того, чтобы помочь убедиться в подлинности данных и качестве отдельного анализа.

Двоичный файл GLPSave.Reg содержит следующие сведения в нередатируемом и защищенном контрольной суммой файле реестра:

- ключевые установки прибора (возможен просмотр в графическом режиме);
- хроматографические или электрофоретические сигналы;
- результаты интегрирования;
- результаты количественного анализа;
- метод анализа данных;
- журнал регистрации.

Эти данные сохраняются лишь в том случае, если функция сохранения данных GLP активирована путем установи флажка в контрольном списке выполнения. Данные GLP можно просматривать, но не редактировать в меню анализа данных системы ChemStation.

Последующая команда или макрос

Если указана последующая команда или макрос, они выполняются после оценки данных, например копирование данных на жесткий диск для создания резервной копии данных.

Сохранение копии метода вместе с данными

Эта операция выполняется после сбора данных только в том случае, если элемент **Save method with Data** активирован контрольном списке выполнения. Метод, использованный для сбора данных, копируется в каталог данных RUN.M. Каталог RUN.M содержит параметры анализа данных и сбора данных. Он доступен только для чтения и тем самым обеспечивает средства для реконструкции анализа в будущем, даже если метод будет изменен за это время. Можно посмотреть, как изменения в методе или в выбранных параметрах повлияли на анализ, что может помочь оптимизировать его.

Сохранение копии метода как DA.M вместе с данными (по умолчанию ChemStation)

Независимо от элементов, отмеченных в контрольном списке выполнения, копия параметров анализа данных выполненного метода сохраняется в файле данных как DA.M вместе с отчетом. Это делается по завершении части метода *Стандартный анализ данных*, а также при создании отчета на экране Data Analysis (Анализ данных).

2 Работа с методами

Что происходит при выполнении метода?



3 Сбор данных

Что такое сбор данных?	74
Онлайн-мониторы	77
Онлайн-монитор сигнала	77
Онлайн-монитор спектров	77
Журнал	78
Сведения о состоянии	79
Состояние ChemStation	79
Строка состояния	79
Схема системы	80
Правила и предупреждения	81

Этот раздел знакомит с процессом сбора аналитических данных.



Что такое сбор данных?

Во время сбора данных все сигналы, получаемые анализатором, преобразуются в детекторе из аналоговых сигналов в цифровые сигналы. Цифровой сигнал передается в электронном виде в систему ChemStation и сохраняется в файле данных сигнала.

Выбор пути

Начиная с версии B.02.01, в системах ChemStation используется универсальное хранилище данных для отдельных выполнений анализа и последовательностей, которое позволяет задавать различные места для сохранения, не изменяя конфигурации. Вкладка **Paths** в диалоговом окне **Preferences**, открываемом с помощью меню **View**, позволяет добавлять множество путей в дополнение к используемому по умолчанию пути C:\chem32\x\DATA (где x — номер прибора). С помощью кнопок **Add** и **Remove** можно просто удалить существующие пути или перейти в выбранное место и добавить путь к этому новому месту в диалоговое окно **Preferences**. Используемый по умолчанию путь невозможно удалить из списка, но его можно изменить в приложении **Configuration Editor**.

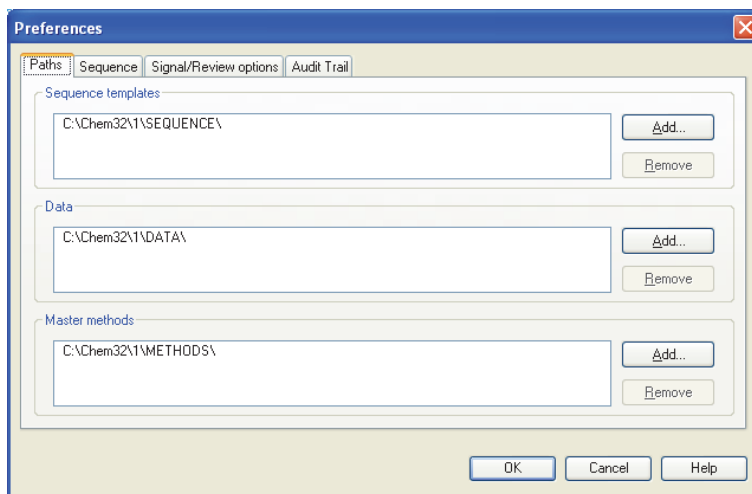


Рисунок 9 Вкладка **Paths** в диалоговом окне **Preferences**

После этого все вновь указанные пути к данным становятся доступными для выбора в диалоговых окнах **Sample Info** и **Sequence Parameters** во время выполнения анализов.

3 Сбор данных

Что такое сбор данных?

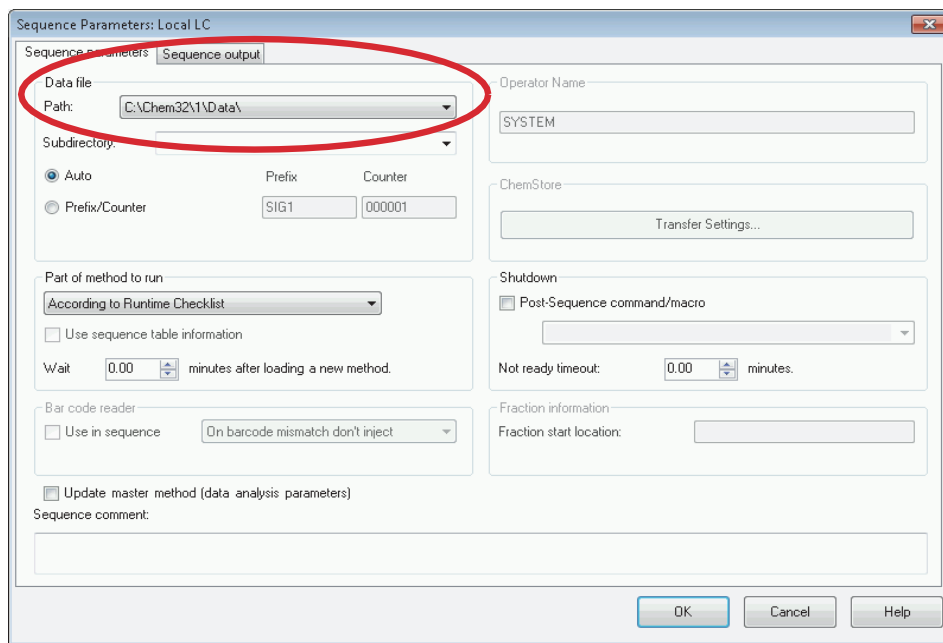


Рисунок 10 Выбор пути к данным в диалоговом окне **Sequence Parameters**

Онлайн-мониторы

Существуют два типа онлайн-мониторов: онлайн-монитор сигнала и онлайн-монитор спектров.

Онлайн-монитор сигнала

Онлайн-монитор сигнала позволяет в одном и том же окне контролировать несколько сигналов и, если это поддерживается соответствующим прибором, графики рабочих характеристик прибора. В мониторе удобно выбирать сигналы для просмотра и настраивать оси времени и оптической плотности. Для детекторов, поддерживающих эту функцию, доступна кнопка баланса.

В строке сообщений можно отобразить абсолютную характеристику сигнала, перемещая курсор-перекрестие по экрану.

Онлайн-монитор спектров

Онлайн-монитор спектров отображает зависимость оптической плотности от длины волны. Отображаемый диапазон длин волн и шкалу оптической плотности можно настроить.

Журнал

В журнале отображаются сообщения, формируемые системой анализа. Это могут быть сообщения об ошибках, системные сообщения или сообщения о событиях из модуля. Эти события фиксируются в журнале независимо от того, отображаются они или нет. Чтобы получить дополнительные сведения о событии в журнале, дважды щелкните соответствующую строку в журнале, и отобразится справочное текстовое описание.

Сведения о состоянии

Состояние ChemStation

В окне состояния ChemStation отображается сводка о состоянии программного обеспечения ChemStation.

При выполнении отдельного анализа:

- в первой строке окна состояния ChemStation отображается выполняемый анализ;
- во второй строке окна состояния отображается текущее состояние метода;
- в третьей строке отображается имя файла необработанных данных вместе с фактическим временем выполнения анализа в минутах (для прибора ГХ всегда отображаются также файлы переднего и заднего инжекторов).

Окна состояния прибора предоставляют сведения о состоянии модулей и детекторов прибора. Кроме того, они показывают состояние отдельных компонентов и, где это уместно, текущие условия, например давление, градиент и поток.

Строка состояния

На экране Method and Run Control (Управление методом и выполнением) графический пользовательский интерфейс системы ChemStation состоит из панелей инструментов и строки состояния. Строка состояния содержит поле состояния системы и сведения о методе и последовательности, загруженных в настоящее время. Если после загрузки в них были внесены изменения, они помечаются значком в виде желтой шестеренки. В случае ЖХ модуля Agilent серии 1100/1200 символ EMF желтого цвета напоминает пользователю, что были превышены сроки использования, установленные для расходных материалов (например, лампы).

Схема системы

На экран можно вывести графическую схему системы ChemStation, если ее поддерживает сконфигурированный анализатор (например, ЖХ-модули Agilent серии 1200 Infinity или ГХ-модули Agilent серии 6890). Это позволяет быстро проверять состояние системы с первого взгляда. Чтобы активировать схему, выберите пункт System Diagram (Схема системы) в меню View (Вид) на экране Method and Run Control (Управление методом и выполнением). Схема в графическом виде изображает систему ChemStation. Каждая составная часть представлена значком. Текущее состояние указывается цветовой маркировкой, описанной ниже.

Таблица 6 Цвета, используемые для указания состояния модуля или прибора

Цвет	Status
темно-серый	автономный
светло-серый	Ожидание (например, лампы отключены)
желтый	не готов
зеленый	готов
фиолетовый	перед выполнением, после выполнения
синий	выполнение
красный	ошибка

Кроме того, можно отображать списки фактических настроек параметров. Схема не только дает общее представление о состоянии, но и предоставляет быстрый доступ к диалоговым окнам для настройки параметров каждой составной части системы.

Дополнительные сведения о схеме системы см. в системе онлайн-справки в части, касающейся прибора.

Правила и предупреждения

Для драйверов приборов, которые поддерживают эту функцию (например, GC 7890A), можно выбрать **Instrument > Manage Rules and Alerts...**, чтобы настроить отклик ChemStation на определенные события во время сбора данных.

Например, распространенной ошибкой в хроматографии является отсутствие виалы или колбы. Например, программа ChemStation может продолжить, приостановить, остановить или прервать последовательность.

Примечание

Учитываемые события и возможная реакция зависят от драйвера прибора.

3 **Сбор данных** Правила и предупреждения



4

Автоматизация/последовательности

Что такое автоматизация?	86
Что такое последовательности и шаблоны последовательности?	87
Параметры последовательности	89
Таблица последовательности	90
Создание последовательностей (последовательностей и шаблонов последовательностей)	91
Корректировка столбцов в таблице последовательности	91
Вставка, добавление или удаление строк	91
Использование функции заполнения вниз	92
Фильтрация таблицы последовательности	92
Считывание штрихкодов	92
Использование кнопки настраиваемых полей	92
Предварительный просмотр последовательности	93
Простая последовательность	94
Обзор	94
Использование вкладки Easy Sequence (последовательности)	95
Использование вкладки Easy Sequence Setup(шаблона)	97
Работа с последовательностями (последовательностями и шаблонами последовательностей)	99
Сбор данных в последовательности	99
Сбор данных отдельных выполнений анализа	101
Автоматическое обновление методов-образцов	102
Приоритетные пробы	103
Задание последовательностей с контрольными пробами	104
Задание последовательностей с холостыми контрольными пробами	104
Выполнение последовательности	105
Приостановка последовательности	107



Остановка последовательности	108
Прерывание последовательности	108
Выполнение частичной последовательности	108
Создание самособирающегося набора результатов	112
Файл журнала последовательности	113
Что происходит при выполнении последовательности?	114
Структура файла данных последовательности	116
Предпочтения — вкладка последовательности	116
Структура файлов данных при включенном создании уникальной папки	121
Присвоение имен файлам данных в последовательности	122
Автоматическое присвоение имен файлам данных в последовательности	122
Ввод имен файлов данных вручную	123
Перенос набора результатов	124
Действия после выполнения последовательности	127
Время ожидания в состоянии неготовности (только для ЖХ и КЭ)	127
Время ожидания (только для ЖХ и КЭ)	128
Автоматическая повторная калибровка	129
Задание повторных калибровок	130
Параметры повторной калибровки в таблице последовательности	130
Типы последовательностей	133
Заданные в явном виде последовательности калибровки	133
Циклические одноуровневые последовательности калибровки	134
Циклические многоуровневые последовательности калибровки	134
Явно заданные и циклические калибровки вместе	137
Циклические последовательности калибровки с заключением в скобки	139
Циклические последовательности перекалибровки с несколькими виалами, содержащими одинаковый раствор стандартного образца	143

В этой главе описаны понятия автоматизации. Здесь объясняется, как работать с последовательностями в системе ChemStation, что происходит во время выполнения последовательности и как настраивать последовательности.

Что такое автоматизация?

Автоматизация — это выполнение анализов с многократным вводом проб без присутствия оператора.

Часть программного обеспечения ChemStation, предназначенная для работы с последовательностями, позволяет автоматизировать сбор и оценку данных и составление отчета.

Что такое последовательности и шаблоны последовательности?

Последовательность — это набор инструкций, автоматизирующих анализ проб. Ее можно использовать для автоматического ввода каждой пробы и для сбора и анализа данных в соответствии с методом, указанным для пробы. Каждая виала с пробой, заданная в последовательности, может быть проанализирована с помощью различных аналитических методов и, следовательно, с использованием различных наборов хроматографических/электрофоретических условий и параметров оценки.

ChemStation вводит два режима хранилища данных, что позволяет выбрать модель хранилища данных в соответствии с рабочим процессом. Эти режимы влияют на способ использования последовательности:

- **Unique Folder Creation** включено;
- **Unique Folder Creation** выключено.

Когда параметр **Unique Folder Creation** включен, в целях согласованности данных последовательности используются как «шаблоны последовательностей», позволяющие многократно выполнять сбор данных. Однако эти шаблоны не применяются для повторной обработки на экране **Data Analysis**. В ходе выполнения шаблона последовательности создается набор результатов, содержащий все соответствующие файлы. При каждом повторном использовании шаблона последовательности создается новый набор результатов.

Когда параметр **Unique Folder Creation** выключен, все данные сохраняются в одном каталоге. Файлы последовательности *.s не используются в качестве шаблонов последовательностей, поэтому в результате повторного выполнения последовательности возможна перезапись имеющихся данных, если пользователь не укажет другой каталог данных.

Доступные последовательности/шаблоны последовательностей (*.s) отображаются в проводнике ChemStation. Чтобы облегчить и ускорить навигацию, в дерево выбора проводника ChemStation можно добавить

4 Автоматизация/последовательности

Что такое последовательности и шаблоны последовательности?

дополнительные места размещения последовательности/шаблона последовательности, воспользовавшись вкладкой **Paths** в диалоговом окне **Preferences**.

Параметры последовательности

Диалоговое окно **Sequence Parameters** содержит сведения, общие для всех виал с пробой в последовательности. Используйте это диалоговое окно:

- чтобы выбрать каталог данных с помощью поля со списком **Path**;
- указать порядок обработки последовательности, выбирая определенную часть параметров методов и выполнения.

Например, можно выбрать один из следующих вариантов:

- осуществить контрольный список выполнения;
- выполнить только сбор данных;
- выполнить только повторную обработку (данных, собранных системой ChemStation версии ниже B.01.03, или данных, собранных в режиме хранилища **Unique Folder Creation OFF**).

Примечание

Данные последовательности, собранные системой ChemStation версии ниже B.01.03 или собранные в режиме хранилища **Unique folder Creation OFF**, нужно повторно обрабатывать с использованием параметра **reprocess** на экране **Method and Run Control**.

Данные последовательности, собранные системой ChemStation версии B.02.01 и выше, нужно повторно обрабатывать с использованием параметра **reprocess** в **Data Analysis Navigation table**.

Если выбран параметр **reprocess**, возможны два варианта дальнейших действий: использовать данные пробы, определенные при первоначальном анализе пробы, или установить флажок **Use Sequence Table information**, чтобы использовать обновленные данные пробы, вводя новые данные в таблицу последовательности.

- Укажите действия по завершении последовательности, используя параметры **shutdown**, и,
- если в системе установлен сканер штрихкода, укажите, использовать ли штрихкоды в последовательности и как поступать в случае несовпадения штрихкода.

Таблица последовательности

Таблица последовательности определяет, какие методы используются для обработки виал с пробой и в каком порядке осуществляется сбор данных и анализ виал. Кроме того, в этой таблице содержатся сведения о каждой пробе, в том числе имя, параметры количественного анализа и параметры перекалибровки.

Для приборов, поддерживающих двойной отбор проб (ГХ), в таблице отображается дополнительный столбец **Injector Location** (с возможными значениями **Front** или **Back**) и в нижней части доступен флажок **Dual Simultaneous Injections**:

- Если флажок **Dual Simultaneous Injections** установлен, анализы автоматически объединяются и в каждом из них одновременно анализируются две пробы. Номера строк корректируются соответствующим образом. В этом режиме можно сортировать таблицу последовательности по местоположению инжектора, **Front** или **Back**.
- Если флажок не установлен, в каждом анализе обрабатывается одна проба. Порядок анализов соответствует таблице. Можно изменить его, используя передний и задний инжекторы.


Описание столбцов этой таблицы и их взаимосвязи с информацией, хранящейся в методе, см. в онлайн-справке.

Создание последовательностей (последовательностей и шаблонов последовательностей)

Используйте таблицу последовательности для задания проб, методов и виал, необходимых при выполнении последовательности. В таблице последовательности перечисляются все пробы в порядке выполнения их анализа и содержатся необходимые сведения о виале, методе и калибровке для каждой пробы.

Корректировка столбцов в таблице последовательности

Чтобы изменить вид и содержимое таблицы последовательности,

щелкните значок  (**Column Chooser**) в панели инструментов таблицы последовательности. Выберите столбцы, которые требуется отображать в таблице последовательности. В зависимости от установленных пакетов программного обеспечения будут добавлены дополнительные столбцы, например столбец **Target Mass**, если установлен пакет для ЖХ/МС.

Вставка, добавление или удаление строк

Чтобы вставить или добавить новую пустую строку или удалить существующую строку, используйте соответствующие кнопки в панели инструментов:



(Insert Line)





(Append Lines)




(Delete Lines)


Использование функции заполнения вниз

С помощью значка  **Filldown** можно быстро ввести в таблицу последовательности несколько проб, использующих один и тот же метод. Эта функция копирует имя метода, диапазон виал, число вводов пробы для каждой виалы, а также количество пробы, количество внутреннего, множитель и разбавление, если они указаны. Затем система вводит эти сведения по каждой виале в таблицу последовательности.


Filldown Options  позволяют определить точные параметры функции заполнения вниз.

Кроме того, можно использовать **Insert/Filldown Wizard**  для многократного добавления диапазона выбранных строк в таблицу последовательности.

Фильтрация таблицы последовательности

Filter Options  позволяют применить набор условий для отображения подмножества строк в таблице последовательности.

Считывание штрихкодов

Если прибор поддерживает считывание штрихкодов, щелкните значок **Read Bar Codes**,  чтобы получить названия проб.


Использование кнопки настраиваемых полей

Если в методах, используемых в таблице последовательности, были заданы настраиваемые поля, нажмите кнопку Custom Fields (Настраиваемые поля), чтобы отредактировать значения настраиваемых полей для каждой пробы (настраиваемых полей,

Создание последовательностей (последовательностей и шаблонов последовательностей)

связанных с пробой) или для каждого соединения в методе пробы (настраиваемых полей, связанных с соединением).

Предварительный просмотр последовательности

Значок **Sequence Preview**  позволяет открыть диалоговое окно, в котором отображается последовательность точно в том порядке, в котором она будет выполняться, со всеми повторными калибровками, пробами контроля качества и холостыми пробами, включенными в правильном порядке.

Простая последовательность

Обзор

Easy Sequence — это пользовательский интерфейс для быстрой и удобной настройки последовательностей с помощью шаблонов. Шаблон определяет параметры, которые следует просмотреть или отредактировать. Настройка калибровки обеспечивает простой в использовании интерфейс с поддержкой операции перетаскивания для задания типа калибровки и позиций проб, а также отображает общий вид последовательности. **Easy Sequence** позволяет пользователям быстро создавать последовательности по определенному шаблону, которые отличаются только по числу проб.

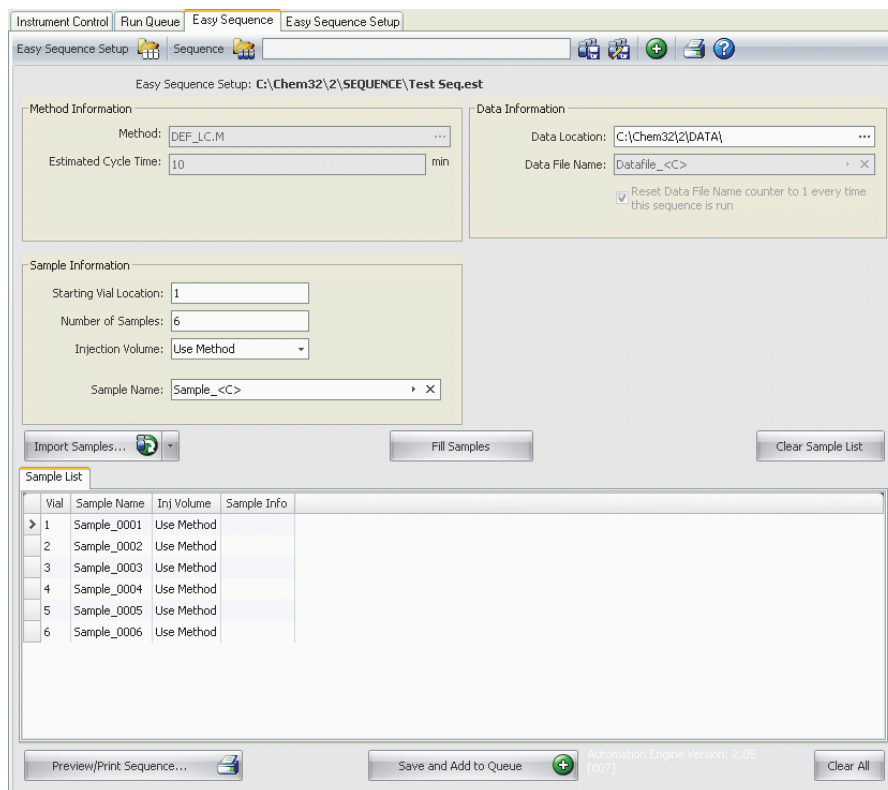


Рисунок 11 Вкладка Easy Sequence

Использование вкладки Easy Sequence (последовательности)

Вкладка **Easy Sequence** используется для построения последовательности из шаблона, созданного на вкладке **Easy Sequence Setup**. Можно также импортировать пробы, сохраненные в формате CSV.

Определение последовательности

- 1 На вкладке **Easy Sequence** откройте шаблон, щелкнув значок **Open Easy Sequence Setup**.
- 2 При необходимости обновите содержимое. Это могут быть местоположения виал с пробой, виал с калибровочным раствором,

данных или последовательности. Какие именно параметры доступны для редактирования, зависит от конфигурации шаблона.

- 3 Если предварительно заполненные пробы не соответствуют новым местоположениям проб, нажмите кнопку **Fill Samples**, чтобы заново заполнить таблицу.
- 4 Нажмите кнопку **Preview/Print Sequence...**, чтобы предварительно просмотреть последовательность.
- 5 Сохраните последовательность.

Рекомендация

Последовательность можно редактировать до тех пор, пока она находится в состоянии **Pending** в очереди.

-
- 6 Нажмите кнопку **Save and Add to Queue**, чтобы отправить последовательность в очередь последовательностей.

Импорт данных пробы

Набор данных пробы можно импортировать на вкладку **Easy Sequence**. Прежде чем импортировать пробы, необходимо настроить и правильно отформатировать файл CSV. Дополнительные сведения о том, как создать CSV-файл данных пробы, см. в онлайн-справке.

- 1 На вкладке **Easy Sequence** откройте шаблон, щелкнув значок **Load Easy Sequence Setup**.
- 2 Нажмите кнопку **Import Samples...**
- 3 Выберите CSV-файл, который нужно импортировать.
Импортируются все допустимые поля.

Примечание

Чтобы импортировать данные пробы в **Back Sample List**, убедитесь в том, что **Back Sample List** выбран и отображается, а затем нажмите кнопку **Import Samples**.

-
- 4 Проверьте поля, просмотрев список проб.

Использование вкладки Easy Sequence Setup(шаблона)

Вкладка **Easy Sequence Setup** используется для создания шаблонов, служащих отправной точкой для построения последовательностей. Имеются две панели: **Samples** (Пробы) и **Calibration** (Калибровка). Панель **Samples** содержит подробные сведения о методе, пробе, данных и последовательности. С помощью шаблона определяют также, какие параметры будут скрытыми или доступными только для чтения. Панель **Calibration** обеспечивает графический интерфейс для настройки и просмотра выполнения калибровок. Она предоставляет простой в использовании интерфейс с поддержкой операции перетаскивания для задания типов калибровки (циклическая или методом заключения в скобки) и позиций проб.

Создание шаблона Easy Sequence:

- 1 На вкладке **Easy Sequence Setup** выберите панель **Samples**. Откройте существующий шаблон или создайте новый шаблон.
- 2 Выберите **Method**. Отобразятся параметры двойного ввода пробы, если источник ввода в методе указан как двойной. Для фонового сигнала может быть указан метод анализа фоновых сигнала. Единственный обязательный параметр шаблона — это метод.
- 3 По желанию введите ожидаемую продолжительность (в минутах) выполнения анализа пробы. Она представляет собой время, измеряемое с момента начала обработки пробы до момента начала обработки другой пробы. Этот параметр используется для оценки общей ожидаемой продолжительности выполнения последовательности. Оставьте это поле пустым, если не требуется использовать функцию расчетного времени цикла.
- 4 Укажите **Starting Vial Location**, **Number of Samples** и **Sample Name**.
- 5 Выберите **Data Location**.
- 6 Выберите **Sequence Location** и укажите **Sequence Name**.
- 7 Введите любые комментарии к шаблону.
- 8 Укажите, какие параметры будут скрытыми или доступными только для чтения. Введите значение по умолчанию для **injections/vial**, **sample amount**, **ISTD amount**, **injection volume** и т. д. Это поможет свести к минимуму вероятность ошибок при создании последовательности на вкладке **Easy Sequence**.
- 9 Сохранить шаблон.

Определение калибровок:

**Необходимые
условия**

Метод, используемый в шаблоне, следует калибровать до необходимых уровней.

- 1** На вкладке **Easy Sequence Setup** выберите панель **Calibration**.
- 2** В раскрывающемся списке **Calibration Mode** выберите **Cyclic, Bracketing** или **Simple Calibration**.
- 3** Область **Sequence Diagram** состоит из следующих разделов:
 - **Sequence Start.**
 - **Bracketing/Cyclic.**
 - **Samples/Injections.**
 - **Sequence End.**
- 4** В области **Samples** последовательности задайте **Calibration Interval**, исходя из числа проб и числа вводов проб.
- 5** Установите **Sample type: Blank, Calibrant** или **QC Sample**, перетаскив соответствующий значок из области **Sample Type** в раздел **Sequence Diagram**.
- 6** Установите параметры для каждого типа пробы и задайте для них **Hide** или **Read-Only**.
- 7** Проверьте режим калибровки на вкладке **Easy Sequence**.
- 8** Сохраните шаблон.

Работа с последовательностями (последовательностями и шаблонами последовательностей)

Последовательности (последовательности и шаблоны последовательностей) создают с помощью меню Sequence (Последовательность). Последовательности создаются и сохраняются аналогично методам. При сохранении последовательности создается файл с расширением .S. Когда требуется отредактировать или еще раз использовать последовательность, получить к ней доступ можно, например, с помощью команды Load Sequence (Загрузить последовательность) меню Sequence (Последовательность).

Сбор данных в последовательности

Для выполнения последовательности необходимы соответствующие предварительно заданные методы. Это методы-образцы, кратко описанные выше. Обычно работа с методами-образцами и шаблонами последовательностей происходит на экране **Method and Run Control** приложения ChemStation. Поэтому на экране **Method and Run Control** проводник ChemStation предоставляет доступ к методам-образцам и шаблонам последовательностей.

Шаблон последовательности ссылается на эти методы в таблице последовательности.

Как объяснялось ранее, при выполнении последовательности с использованием шаблона последовательности <имя_последовательности>.S и метода-образца <имя_метода>.M создается новая папка, которая содержит все файлы с результатами выполнения последовательности («набор результатов»).

Местоположение этой папки определяется настройками в диалоговом окне **Sequence Parameters**; имя, присваиваемое этой папке, определяется на вкладке **Sequence** в диалоговом окне **Preferences**. По умолчанию имя имеет формат <Имя последовательности> <Дата> <Время>, но его можно настроить с помощью токенов либо ввести ручную произвольное имя. Дополнительные сведения об использовании

токенов см. в разделе “Имена файлов и токены” на странице 19.
Можно использовать следующие токены:

- **Current date;**
- **Current time;**
- **User name**
- **Instrument name**
- **Sequence name;**
- **Counter;**
- **Computer name.**

Если **Name Pattern** не даст уникальных имен для наборов результатов, ChemStation добавит счетчик, чтобы обеспечить уникальность.

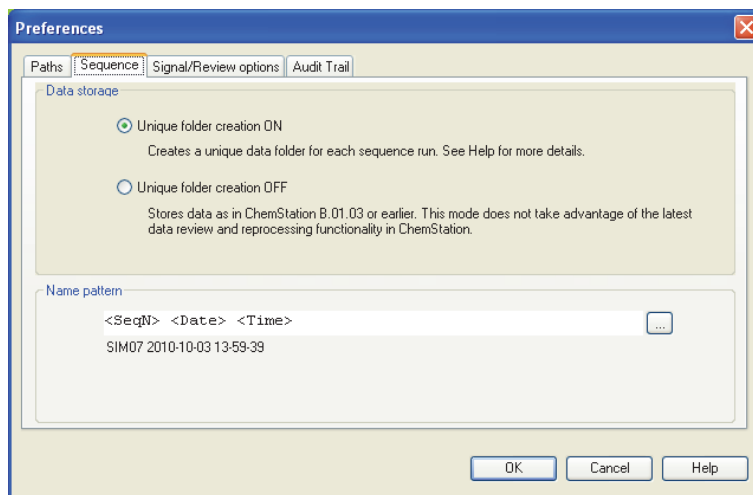


Рисунок 12 Диалоговое окно **Preferences** / вкладка **Sequence**.

При запуске последовательности сбора данных метод, указанный в таблице последовательности, копируется из папки методов-образцов в набор результатов. Кроме того, создается копия последовательности и помещается в журнал последовательности и файл партии (*.b) в наборе результатов. Все обновления метода (например, обновления таблицы калибровки) записываются в этот метод последовательности в наборе результатов. Если используется составление интеллектуальных отчетов, шаблоны отчетов, выбранные в параметрах последовательности или свойствах метода, тоже

копируются в набор результатов. После этого все необходимые файлы доступны для просмотра и повторной обработки данных в будущем. В них не учитываются изменения, внесенные в метод-образец или шаблон последовательности для выполнения других последовательностей.

Во время сбора данных файлы данных сохраняются в набор результатов. В каждом файле данных (*.D) сохраняется копия метода последовательности для этого конкретного выполнения анализа. Файл ACQ.txt содержит параметры сбора данных метода последовательности, сохраняя состояние метода на момент получения определенного файла данных. Папка DA.M содержит копию параметров анализа данных, использованных в методе последовательности.

С помощью этих файлов, сохраненных в папке последовательности, можно выполнить любые действия по просмотру и повторной обработке данных, не меняя метода-образца или шаблона последовательности. Кроме того, изменения метода можно также сохранить в метод-образец, если в этом есть необходимость.

Примечание

Набор результатов всегда должен содержать полный комплект всех файлов данных (*.D). Удаление части файлов данных спровоцирует проблемы при передаче набора результатов в центральное хранилище данных. Если требуется сократить последовательность, создайте самособирающийся набор результатов из сокращенного набора строк последовательности (см. [“Создание самособирающегося набора результатов”](#) на странице 112).

Сбор данных отдельных выполнений анализа

В случае отдельных выполнений анализа файл данных сохраняется непосредственно в соответствующий подкаталог. Поскольку в отдельном анализе используется только один метод, необходимости копировать его в подкаталог нет — все действия выполняются непосредственно с методом-образцом. По завершении части метода, касающейся сбора данных, копия параметров сбора сохраняется в файл ACQ.txt. Копия параметров анализа данных сохраняется в каталог файлов данных (DA.M) после того, как выполнена часть метода-образца, касающаяся анализа данных.

Автоматическое обновление методов-образцов

С помощью этой функции ChemStation автоматически обновляет параметры анализа данных методов-образцов, скопированных пользователем в набор результатов. Эту функцию можно использовать, например, для обновления таблиц калибровки методов-образцов после повторной обработки последовательности с перекалибровками.

Активировать эту функцию можно в диалоговом окне **Sequence Parameters** (см. Рис. 13 на странице 103). Во время сбора данных ChemStation обновляет параметры анализа данных методов-образцов для всех методов последовательности в наборе результатов.

Параметры анализа данных методов-образцов тоже обновляются после повторной обработки последовательности. В качестве предварительного условия необходимо, чтобы соответствующий метод-образец (метод с таким же именем, что и у метода последовательности) по-прежнему присутствовал в том же самом каталоге методов-образцов, что и на момент его копирования в набор результатов.

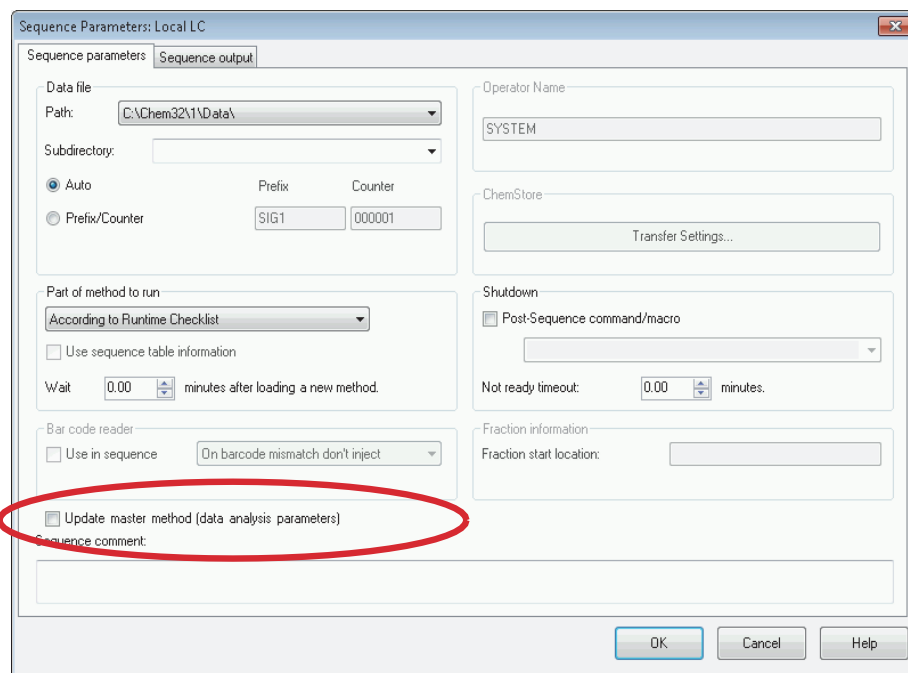


Рисунок 13 Кнопка-флажок **Update master methods** в диалоговом окне **Sequence Parameters**

Примечание

Поскольку эта функция ресурсозатратная, ее не рекомендуется использовать для последовательностей с сотнями методов.

Приоритетные пробы

Выполняемую последовательность можно приостановить после завершения текущего метода. Последовательность можно приостановить для того, чтобы получить возможность проанализировать приоритетную пробу тем же самым или иным методом. Затем последовательность можно возобновить, причем последовательность продолжится с той пробы, на которой она была приостановлена.

Задание последовательностей с контрольными пробами

В таблице последовательности в поле типа пробы можно указать контрольные пробы. Метод, используемый для анализа контрольной пробы, должен содержать таблицу калибровки, в которой указаны границы диапазона концентраций (количеств) контрольной пробы для одного из соединений. В случае превышения заданных границ диапазона концентраций (количеств) контрольной пробы последовательность останавливается, и в журнал записывается сообщение. Если используется один из стилей отчетов ChemStation, то границы диапазона концентраций (количеств) контрольной пробы также распечатываются в отчетах, формируемых для этих анализов. Дополнительные сведения о том, как определять последовательность с контрольными пробами, см. в онлайн-справке в разделе инструкций.

Задание последовательностей с холостыми контрольными пробами

Эталонные сигналы необходимы для оценки отношения сигнал-шум в соответствии с требованиями Европейской фармакопеи. В таблице последовательности можно задать файл эталонных данных, выбрав тип пробы **Blank** для соответствующих проб.

При использовании нескольких эталонных файлов важен порядок этих файлов. ChemStation использует один эталонный файл для всех последовательных выполнений анализа до тех пор, пока в таблице последовательности не встретится новый эталонный файл. Эталонный файл холостой пробы служит ее собственным эталоном. Ниже приведен пример последовательности с двумя холостыми пробами.

Таблица 7 Пример последовательности с холостыми пробами

	Проба	Файл данных	Эталонный файл
1	Проба 1	DF01.D	
2	Холостая проба 1	DF02.D	DF02.D
3	Проба 2	DF03.D	DF02.D
4	Проба 3	DF04.D	DF02.D

Таблица 7 Пример последовательности с холостыми пробами

	Проба	Файл данных	Эталонный файл
5	Холостая проба 2	DF05.D	DF05.D
6	Проба 4	DF06.D	DF05.D
7	Проба 5	DF07.D	DF05.D

Подробнее о расчете отношения сигнал-шум см. в справочном руководстве.

Выполнение последовательности

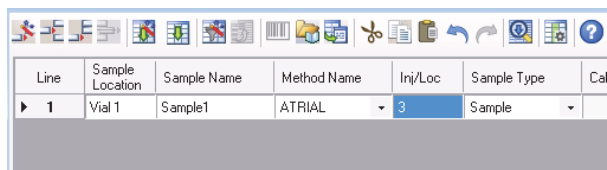
После отправки последовательности в очередь шаблон последовательности меняется на пошаговый список анализов. В нем отображается последовательность точно в том порядке, в котором она будет выполняться, со всеми повторными калибровками, пробами контроля качества и холостыми пробами, включенными в правильном порядке. Созданный файл последовательности будет сохранен в наборе результатов.

Примечание

Добавление строк в выполняющуюся последовательность ведет к несогласованности в именах файлов данных.

Удаление строк из выполняющейся последовательности может привести к серьезным противоречиям, особенно если последовательность была приостановлена и затем повторно запущена.

Пример. Последовательность с несколькими инъекциями

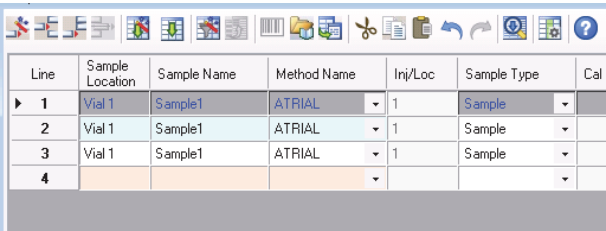


Line	Sample Location	Sample Name	Method Name	Inj/Loc	Sample Type	Cal
1	Vial 1	Sample1	ATRIAL	3	Sample	

Рисунок 14 Шаблон последовательности перед отправкой в очередь, проба с 3 инъекциями

4 Автоматизация/последовательности

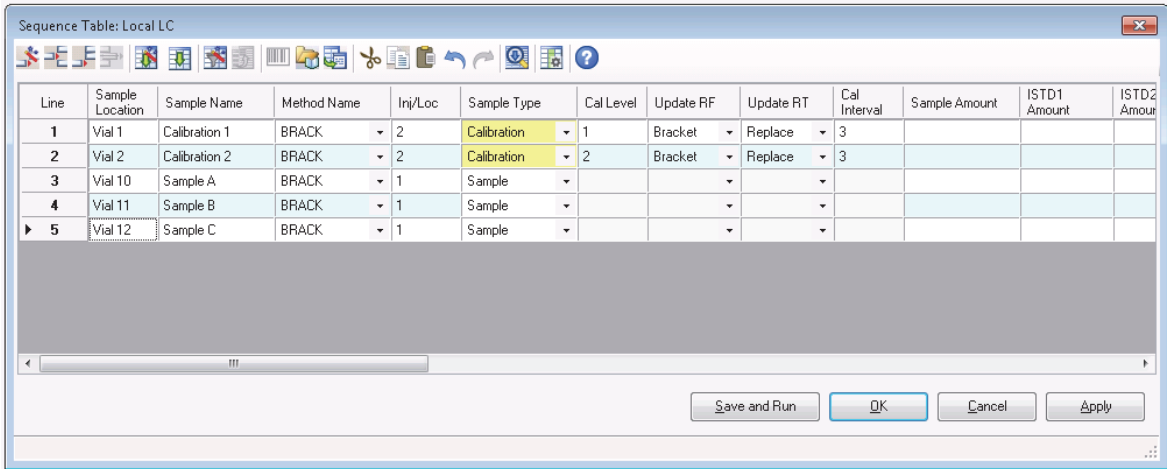
Работа с последовательностями (последовательностями и шаблонами последовательностей)



Line	Sample Location	Sample Name	Method Name	Inj/Loc	Sample Type	Cal
1	Vial 1	Sample1	ATRIAL	1	Sample	
2	Vial 1	Sample1	ATRIAL	1	Sample	
3	Vial 1	Sample1	ATRIAL	1	Sample	
4						

Рисунок 15 Файл последовательности после отправки в очередь, 3 отдельных строки

Пример. Последовательность с циклической калибровкой



Line	Sample Location	Sample Name	Method Name	Inj/Loc	Sample Type	Cal Level	Update RF	Update RT	Cal Interval	Sample Amount	ISTD1 Amount	ISTD2 Amount
1	Vial 1	Calibration 1	BRACK	2	Calibration	1	Bracket	Replace	3			
2	Vial 2	Calibration 2	BRACK	2	Calibration	2	Bracket	Replace	3			
3	Vial 10	Sample A	BRACK	1	Sample							
4	Vial 11	Sample B	BRACK	1	Sample							
5	Vial 12	Sample C	BRACK	1	Sample							

Рисунок 16 Шаблон последовательности перед отправкой в очередь, циклическая калибровка методом вилки

Sequence Table: Local LC

Line	Sample Location	Sample Name	Method Name	Inj/Loc	Sample Type	Cal Level	Update RF	Update RT	Cal Interval	Sample Amount	ISTD1 Amount	ISTD2 Amount
1	Vial 1	Calibration 1	BRACK	1	Calibration	1	Bracket	Replace	1			
2	Vial 1	Calibration 1	BRACK	1	Calibration	1	Bracket	Replace	1			
3	Vial 2	Calibration 2	BRACK	1	Calibration	2	Bracket	Replace	1			
4	Vial 2	Calibration 2	BRACK	1	Calibration	2	Bracket	Replace	1			
5	Vial 10	Sample A	BRACK	1	Sample							
6	Vial 11	Sample B	BRACK	1	Sample							
7	Vial 12	Sample C	BRACK	1	Sample							
8	Vial 1	Calibration 1	BRACK	1	Calibration	1	Bracket	Replace	1			
9	Vial 1	Calibration 1	BRACK	1	Calibration	1	Bracket	Replace	1			
10	Vial 2	Calibration 2	BRACK	1	Calibration	2	Bracket	Replace	1			
11	Vial 2	Calibration 2	BRACK	1	Calibration	2	Bracket	Replace	1			

Save and Run OK Cancel Apply

Рисунок 17 Файл последовательности после отправки в очередь, циклическая калибровка методом заключения в скобки

Приостановка последовательности

Перед приостановкой последовательности завершится выполнение текущего активного анализа.

Когда последовательность приостановлена, имя файла таблицы последовательности и имя файла данных невозможно изменить. В таблице последовательности можно изменить только строки последовательности, которые еще не выполнены, или номер виалы в текущей строке последовательности. Можно добавить, удалить или изменить строки последовательности для будущих анализов.

Например, может возникнуть необходимость отредактировать активную последовательность, чтобы добавить новую партию проб. Последовательность можно отредактировать таким образом, чтобы ChemStation обработала пробы из этих виал после проб, указанных в строке последовательности, выполняемой в данный момент.

Остановка последовательности

Выполнение текущего активного анализа сразу же прекратится. Однако анализ его данных продолжится. Остановленную последовательность невозможно возобновить никоим образом.

Если перед остановкой последовательности нужно завершить текущий выполняющийся анализ, приостановите последовательность, дождитесь завершения выполнения анализа, а затем остановите последовательность.

Прерывание последовательности

Функция прерывания немедленно завершает текущую активную последовательность. Анализ данных не выполняется.

Выполнение частичной последовательности

Выбор набора результатов для частичного сбора данных

Если создание уникальной папки включено (см. [“Предпочтения — вкладка последовательности”](#) на странице 116), можно выбирать из следующих вариантов сбора данных с помощью частичной последовательности:

- собрать данные частичной последовательности в новый набор результатов;

или

- собрать данные частичной последовательности в уже существующий набор результатов.

Размещение файлов данных, собираемых путем выполнения частичной последовательности, в уже существующий набор результатов может оказаться полезным в следующих ситуациях.

- Необходимо перезаписать один файл данных (или несколько файлов данных), например из-за использования неверной вилы поначалу.

- Изначально была выполнена лишь первая часть последовательности, и необходимо добавить недостающие пробы путем выполнения частичной последовательности. Такое возможно в случае отказа прибора в процессе сбора данных последовательности.
- После сбора данных с помощью уже имеющихся строк в шаблон последовательности добавлены дополнительные строки. Данные из дополнительно выполненных анализов нужно добавить к уже имеющимся данным.

Примечание

Удаление или вставка строк в части последовательности, для которой уже собраны данные, приведет к серьезным противоречиям в именах файлов данных.

Поэтому при выборе пункта **Partial Sequence** из меню **Sequence** появится диалоговое окно с двумя возможными вариантами продолжения: выбрать существующий набор результатов из списка или создать новый набор результатов.

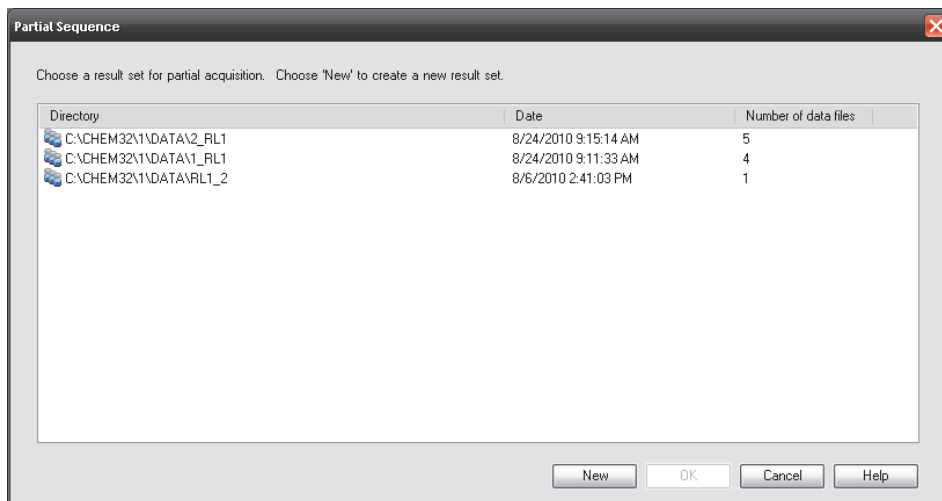


Рисунок 18 Диалоговое окно **Partial Sequence**

Однако в целях поддержания согласованности набора результатов (чтобы его можно было полностью повторно обработать на этапе **Data Analysis**) для частичного сбора данных предоставляются лишь те наборы результатов, которые удовлетворяют следующим условиям:

- имя шаблона последовательности (исходная последовательность) и имя файла последовательности *.S в наборе результатов (целевая последовательность) идентичны.
- У файлов последовательности должны совпадать как путь к данным, так и подкаталог.
- Число строк последовательности в исходной последовательности должно быть не меньше, чем в целевой последовательности.
- Тип пробы и количество вводов пробы в каждой строке целевой последовательности должны быть такими же, как и в соответствующих строках исходной последовательности.
- Схема именования файлов данных должна быть одинакова для обоих файлов последовательности.

После закрытия этого диалогового окна нажатием кнопки **Ok** (в случае выбора одного существующего набора результатов) или кнопки **New** (в случае создания нового набора результатов) можно выбрать строки последовательности, которые нужно выполнить в рамках частичной последовательности.

Выбор строк последовательности для сбора данных из частичной последовательности

Система открывает диалоговое окно **Partial Sequence** и позволяет выбрать из таблицы отдельные пробы для анализа. Это диалоговое окно открывается независимо от настройки создания уникальной папки.

В каждой строке диалогового окна **Partial Sequence** отображается одно выполнение анализа. Для каждого выполнения анализа указаны виала, метод, файл данных и имя пробы. Кроме того, в столбцах Seq Tbl и Calib:RF:RT приведены закодированные сведения о таблице последовательности и калибровочных образцах соответственно. Что означают эти коды, см. в онлайн-справке.

Для получения бумажной копии частичной последовательности нажмите кнопку **Print**.

Кнопка **Manual update ...** открывает диалоговое окно **Update Methods**, позволяющее вручную синхронизировать методы-образцы и методы, используемые в шаблоне последовательности. Кнопка-флажок **Automatic update for selected runs** позволяет на основе соответствующих

методов-образцов обновлять все методы последовательности, используемые в выбираемых выполнениях анализа.

Примечание

Обновляются как параметры сбора, так и параметры анализа данных.

Диалоговое окно **Partial Sequence** может, например, выглядеть следующим образом. Для обработки можно отметить конкретные пробы.

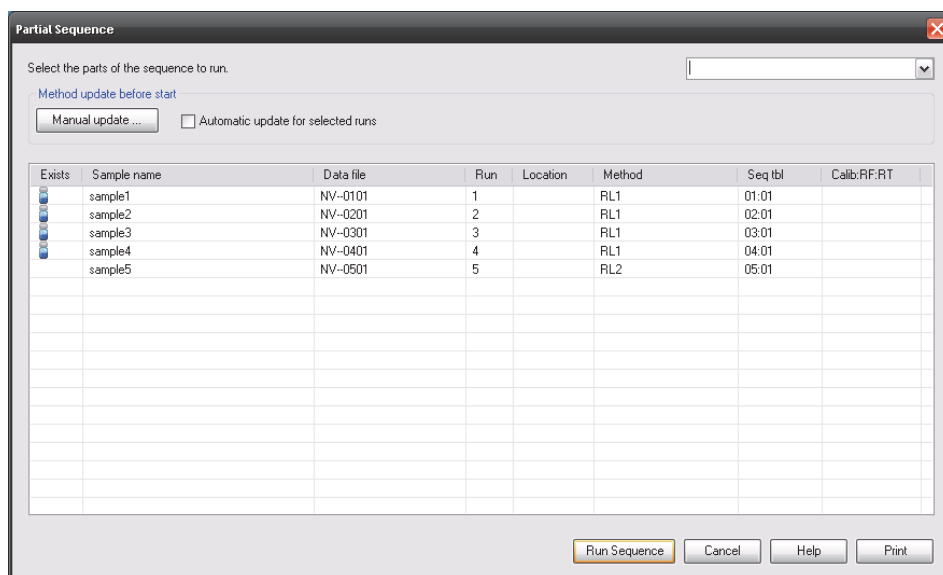


Рисунок 19 Диалоговое окно **Partial Sequence**


Создание самособирающегося набора результатов

Выбрав команду **Sequence > Create New Result Set** на экране **Data Analysis**, можно создать новый самособирающийся набор результатов из данных, отображаемых в таблице навигации. Самособирающиеся наборы результатов полезны, например, в следующих ситуациях.

- Требуется объединить отдельные пробы, последовательности или сочетание тех и других, чтобы обработать их определенным методом.
- Требуется сократить последовательность.

Комплектование нового набора результатов

- 1 Добавьте необходимые файлы данных в таблицу навигации.
- 2 В таблице навигации выберите все файлы данных, которые нужно включить в новый набор результатов.
- 3 Выберите **Sequence > Create New Result Set**, чтобы открыть диалоговое окно **Create New Result Set**.
- 4 Выберите метод, который нужно связать с новым набором результатов.
- 5 Укажите папку для нового набора результатов.
- 6 Отсортируйте пробы.

Имена выходных файлов данных обновляются автоматически. При необходимости можно восстановить первоначальный порядок проб, воспользовавшись кнопкой  (**Restore initial order**).

Обратите внимание на то, что положение файла холостой пробы имеет важное значение для оценки отношения сигнал-шум в соответствии с требованиями Европейской фармакопеи. См. также раздел [“Задание последовательностей с холостыми контрольными пробами”](#) на странице 104.

- 7 Подтвердите настройки, чтобы скомпоновать из списка файлов данных набор результатов в указанной папке.

Файл журнала последовательности

В ходе выполнения последовательности создается файл журнала последовательности, который показывает, что при этом происходило. Он помогает выявлять ошибки, которые произошли, когда последовательность выполнялась без оператора или ночью. Имя файла журнала всегда имеет расширение .log. Файл журнала находится в каталоге, где хранятся данные последовательности.

Что происходит при выполнении последовательности?

Запуск последовательности при включенном режиме Unique Folder Creation

Система создает набор результатов на основе пути, определенного в параметрах последовательности, и настроек предпочтений последовательности. В набор результатов копируются шаблон последовательности *.s и все методы, определенные в таблице последовательности, принадлежащей этой конкретной последовательности. В случае использования составления интеллектуальных отчетов все шаблоны отчетов *.rdl, определенные в методе или в шаблоне последовательности, тоже копируются в набор результатов. Система продолжает работать с этими файлами во время сбора данных. Когда запускается последовательность, из этого набора в ChemStation загружается метод, указанный в соответствующей строке последовательности.

Запуск последовательности при выключенном режиме Unique Folder Creation

При запуске последовательности система загружает файл последовательности *.s, а затем, исходя из записи в таблице последовательности, в ChemStation загружается соответствующий метод, указанный в строке последовательности. В отличие от другого режима хранилища данных (т. е. когда настройка **Unique Folder Creation** включена) папка результатов не создается. Последовательность и методы будут оставаться в главном каталоге.

Дальнейшие этапы, осуществляемые во время выполнения последовательности

Для каждой выполняемой строки последовательности будут повторяться следующие этапы.

- Если система оснащена автосамплером, то программное обеспечение ChemStation сначала определяет местоположение пробы в автосамплере в соответствии с номером, введенным в столбце виалы.

- В прибор загружаются параметры метода.
- Выполняется предварительный макрос.
- Затем в прибор вводится проба (вручную или автоматически).
- Собираются данные.
- Производится оценка данных, указанная в методе. Выполняются интегрирование, количественный анализ и составление отчета, в том числе макрос, указанный пользователем. Если настройка **Unique Folder Creation** включена, система сохраняет дополнительные методы DA.M в ходе выполнения анализа.
- Выполняется последующий макрос.
- На протяжении всего процесса ChemStation отслеживает ход выполнения последовательности в режиме реального времени и создает файл журнала последовательности.

Состояние ChemStation

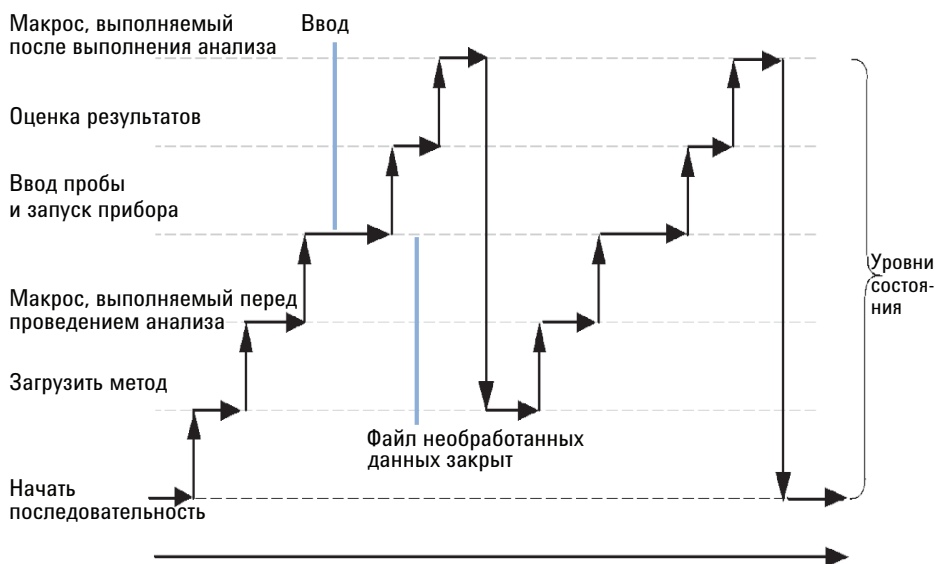


Рисунок 20 Состояние последовательности

Структура файла данных последовательности

Предпочтения — вкладка последовательности

В онлайн-сеансах на вкладке **Sequence** предоставлены на выбор две различные модели хранилища данных. Эти режимы определяют, каким образом данные последовательности хранятся в системе ChemStation.

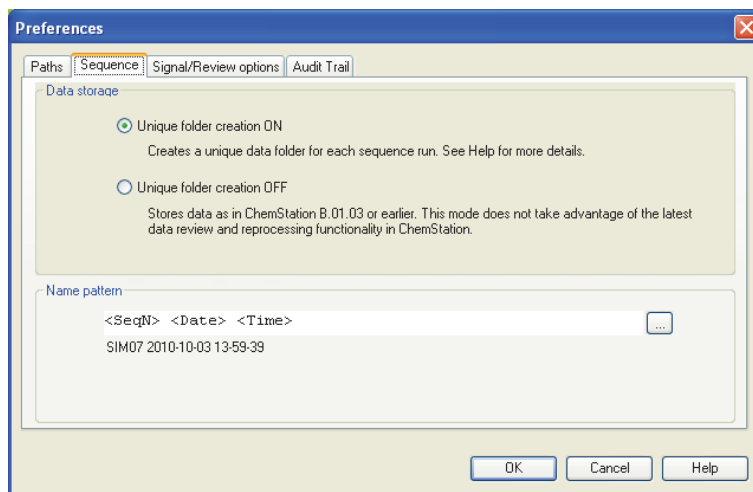


Рисунок 21 Диалоговое окно **Preferences** / вкладка **Sequence**

Примечание

Включение или выключение создания уникальной папки влияет только на будущие сборы данных, но не изменяет структуру уже собранных данных.

Примечание

Мы настоятельно рекомендуем определиться с выбором одного из двух этих режимов перед началом работы и не переходить с одного режима на другой.

Если система ChemStation подключена к центральному хранилищу данных, создание уникальной папки невозможно выключить.

Создание уникальной папки включено

В этом режиме хранилища данных существует надежная и постоянная связь между необработанными данными и методом. В каждом файле данных, получен ли он при выполнении последовательности или одного анализа, имеется ссылка на метод, который использовался для анализа данных.

Данные последовательности сохраняются в наборе результатов с уникальным именем. Соглашения о наименовании (шаблон имени) для этих наборов результатов можно задать на вкладке **Sequence** в диалоговом окне **Preferences**. Если шаблон имени не указан, используется заданный по умолчанию шаблон имени последовательности. Вкладка **Sequence** используется только для сбора данных и, следовательно, присутствует только в системах, работающих в режиме онлайн.

Шаблон имени последовательности может содержать различные разделы. Система создает для набора результатов имя, которое определяется разделами, выбранными в шаблоне имени последовательности. Все файлы данных, методы, журнал последовательности, файл <имя_последовательности>.s и файл <имя_последовательности>.b, принадлежащие этой конкретной последовательности, сохраняются в наборе результатов. Результат наборов данных создается при запуске последовательности.

Файлы последовательности (*.s) используются в качестве шаблонов последовательности. Такой принцип позволяет многократно выполнять любой файл последовательности без перезаписи существующих данных и изменения параметров последовательности. Если в шаблоне имени последовательности не используются ни время, ни счетчик, система автоматически вводит счетчик во избежание перезаписи данных. К имени набора результатов второй, третьей и всех дальнейших последовательностей, использующих один и тот же шаблон последовательности, добавляется счетчик.

Создание уникальной папки выключено

В этом режиме хранилища данных имя метода является единственной связью, которая существует между файлом данных и методом, используемым для получения и обработки этого файла данных. Вместе с последовательностью или файлом данных не сохраняется копий метода. В случае изменения метода или создания нового метода

с этим именем невозможно точно воспроизвести последовательность. Файлы данных последовательности сохраняются в соответствии с параметрами, указанными в группе файла данных диалогового окна **Sequence Parameters**; в этом режиме возможность присвоения имен на вкладке **Sequence** диалогового окна **Preferences** недоступна. Этот режим хранилища данных тот же самый, что и в системах ChemStation версии младше B.02.01, и поэтому он не позволяет использовать все преимущества последних функциональных возможностей повторного просмотра и повторной обработки данных на экране **Data Analysis** приложения ChemStation.

Примечание

Данные последовательности, полученные при включенном режиме **Unique folder Creation**, нуждаются в повторной обработке с помощью параметра повторной обработки на экране **Method and Run Control**.

Примечание

Если используется система ChemStation с центральным хранилищем данных, режим **Unique Folder Creation** должен быть включен. При работе с центральным хранилищем данных режим с выключенным параметром **Unique Folder Creation** недоступен.

Выбор переключателя **Unique Folder Creation Off** влияет на хранилище данных следующим образом:

- Данные последовательности собираются не в набор результатов, а непосредственно в подкаталог, указанный в параметрах последовательности (см. раздел “[Параметры последовательности](#)” на странице 89). Поэтому шаблон имени последовательности недоступен для выбора на вкладке **Sequence** диалогового окна предпочтений.
- Это означает, что в один и тот же подкаталог могут быть собраны данные двух и более последовательностей.
- Вместе с данными сохраняются лишь журнал последовательности и файл партии (.B), а методы последовательности (.M) и копии файлов последовательности (.S) не сохраняются. То есть доступны только методы и последовательности, пути к которым указаны в диалоговом окне **Preferences** (см. раздел “[Выбор пути](#)” на странице 74). Они должны использоваться для сбора данных, а также для просмотра и повторной обработки данных. Изменения метода, касающиеся последовательности или файла данных, можно

сохранить только в виде метода под другим именем. В противном случае эти изменения применяются также к методу сбора данных.

- Когда последовательность, полученная при выключенной опции создания уникальной папки, загружается в таблицу навигации, на экране **Data Analysis** недоступен режим повторной обработки (Рис. 22 на странице 119). Повторная обработка последовательностей, полученных при выключенном создании уникальной папки, возможна только на экране **Method and Run Control** путем выбора варианта **Reprocessing only** в диалоговом окне **Sequence Parameters** (Рис. 23 на странице 120).

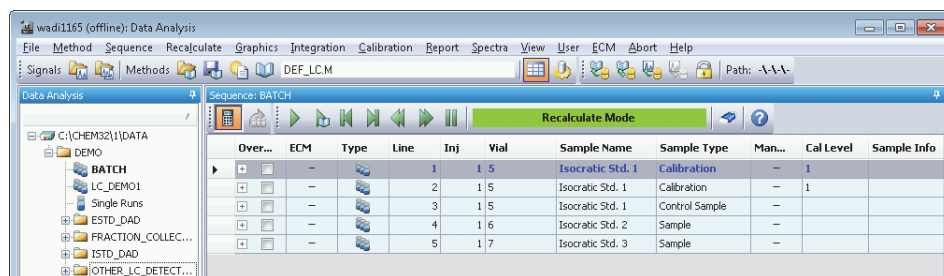


Рисунок 22 Таблица навигации для последовательностей, полученных при выключенном режиме **Unique Folder Creation**

4 Автоматизация/последовательности

Структура файла данных последовательности

Sequence Parameters: Local LC

Sequence parameters | Sequence output

Data file

Path: C:\Chem32\1\Data\

Subdirectory: Demo

☒ Auto Prefix: SIG1 Counter: 000001

☐ Prefix/Counter

Part of method to run

Reprocessing Only

According to Runtime Checklist

Acquisition Only

Reprocessing Only

Wait: 0.00 minutes after loading a new method.

Bar code reader

☒ Use in sequence On barcode mismatch don't inject

☐ Update master method (data analysis parameters)

Sequence comment:

Dilution sequence of isocratic standard

Operator Name: SYSTEM

ChemStore

Transfer Settings...

Shutdown

☒ Post-Sequence command/macro

Not ready timeout: 0.00 minutes.

Fraction information

Fraction start location:

OK Cancel Help

Рисунок 23 Повторная обработка последовательностей, полученных при выключенном режиме **Unique Folder Creation**

Между необработанными данными, методом и набором результатов существует строгая связь, как показано на рисунках ниже.

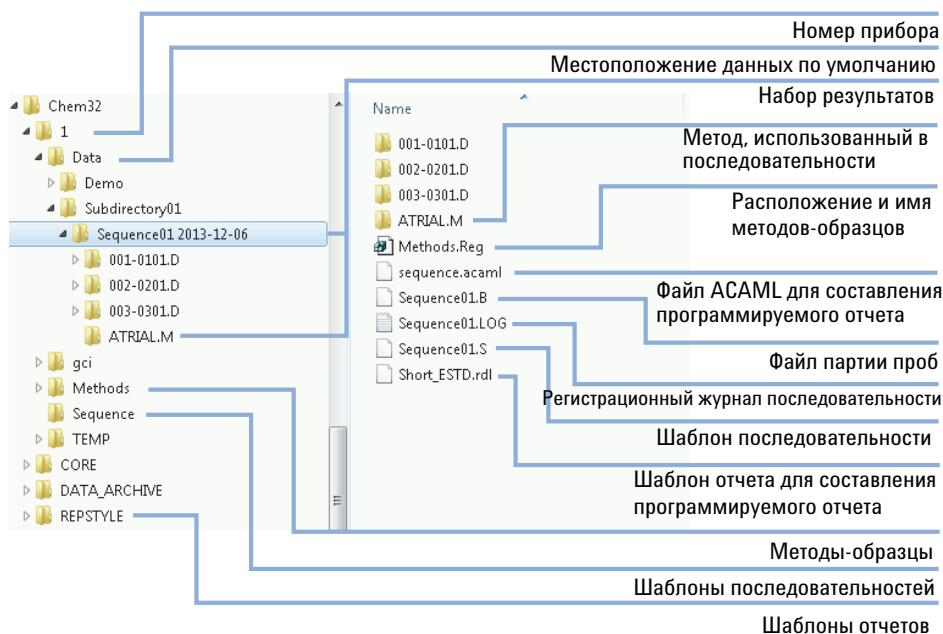


Рисунок 24 Структура файла данных последовательности в режиме «Создание уникальной папки ВКЛ»

Набор результатов всегда должен содержать полный комплект всех файлов данных (*.D). Удаление части файлов данных спровоцирует проблемы при передаче набора результатов в центральное хранилище данных. Если требуется сократить последовательность, создайте самособирающийся набор результатов из сокращенного набора строк последовательности (см. [“Создание самособирающегося набора результатов”](#) на странице 112).

4 Автоматизация/последовательности

Структура файла данных последовательности

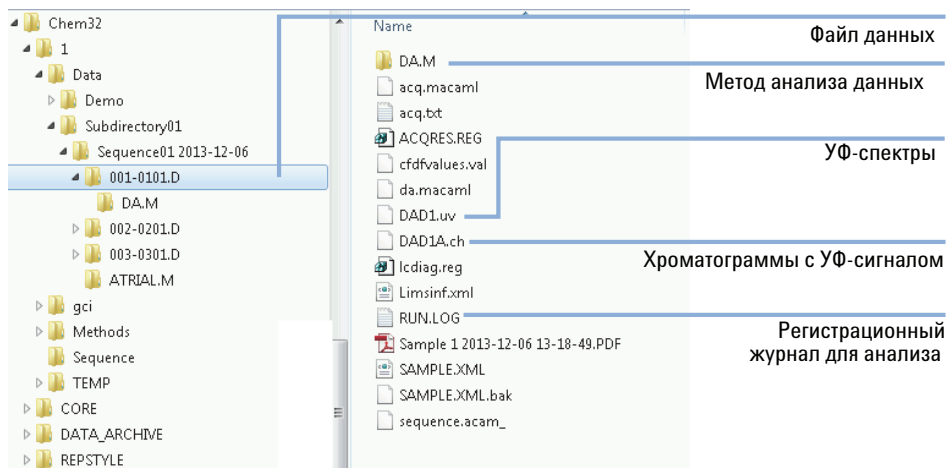


Рисунок 25 Содержимое файла данных

Присвоение имен файлам данных в последовательности

Имена файлам данных в последовательности могут присваиваться следующим образом:

- автоматически;
- вручную;
- с помощью префикса/счетчика.

Автоматическое присвоение имен файлам данных в последовательности

Вials с пробями

Например, 017-0103.D,

где:

- первые три знака являются номером вials, например 017.

- Для жидкостной хроматографии и капиллярного электрофореза четвертым знаком будет дефис (-), используемый в качестве разделителя; в газовой хроматографии это будет обозначение переднего (F) или заднего (B) инжектора.
- Пятый и шестой знаки указывают строку последовательности, которая определяет используемый метод, например 01 в случае первой строки.
- Седьмой и восьмой знаки указывают номер введения пробы из этой виалы для данного метода, например 03 для третьего введения пробы.

Выполнения анализа с холостой пробой

Например, NV--0499.D,

где:

- NV обозначает отсутствие виалы;
- - является разделительным дефисом;
- 0499 означает 99-е выполнение 4-й строки последовательности с холостой пробой.

Ввод имен файлов данных вручную

Один из столбцов таблицы последовательности называется **Datafile**. Когда в нем пусто, имя файла данных создается с использованием схемы наименования файлов данных, указанной в параметрах последовательности (автоматически или с помощью префикса и счетчика). Любой текст, введенный в столбец **Datafile**, используется системой ChemStation в качестве имени файла данных для выполнения анализа.

Если в строке с введенным вручную именем файла данных указаны несколько введений пробы из виалы, то система ChemStation автоматически отсекает последние символы имени, введенного пользователем, и добавляет номер введения пробы. Таким способом предотвращается повторное использование одного и того же имени файла данных для нескольких введений пробы.

Использование префикса/счетчика для присвоения имени файлам данных

Если для присвоения имен файлам данных используются префикс/счетчик, система ChemStation формирует имена для каждого анализа. В случае приборов, поддерживающих двойной анализ сигнала (например, ГХ) система ChemStation формирует имя для каждого сигнала.

Настройка последовательности позволяет использовать длинные имена файлов в случае префикса/счетчика. Имя файла данных, заданное с помощью префикса/счетчика, может содержать до 15 символов плюс расширение .d, т. е. в сумме 17 символов.

В отношении поля префикса/счетчика действуют следующие правила:

- сам счетчик может содержать до шести символов;
- если префикс состоит менее чем из девяти символов, счетчик автоматически расширяется до шести знаков;
- число, указанное в счетчике, представляет собой начальный номер, который увеличивается с каждым выполнением анализа.

Таблица 8 Имена файлов

Префикс	Счетчик	Итоговое имя файла
long	000001	long000001
longname	000001	longname000001
testwithalongna	1	testwithalongna1

Перенос набора результатов

ChemStation предоставляет инструмент для переноса данных, не являющихся набором результатов, в формат набора результатов. Для успешного выполнения этой задачи необходимо, чтобы исходный файл последовательности по-прежнему оставался в наличии. Он должен содержать все необходимые строки последовательности и соответствовать первоначальной схеме наименования файлов данных, чтобы можно было повторно обработать все файлы данных

последовательности. Кроме того, должны быть доступны все методы, указанные в столбце метода таблицы последовательности.

Выберите пункт **Result Set Migration** в меню **Sequence** на экране **Data Analysis**.

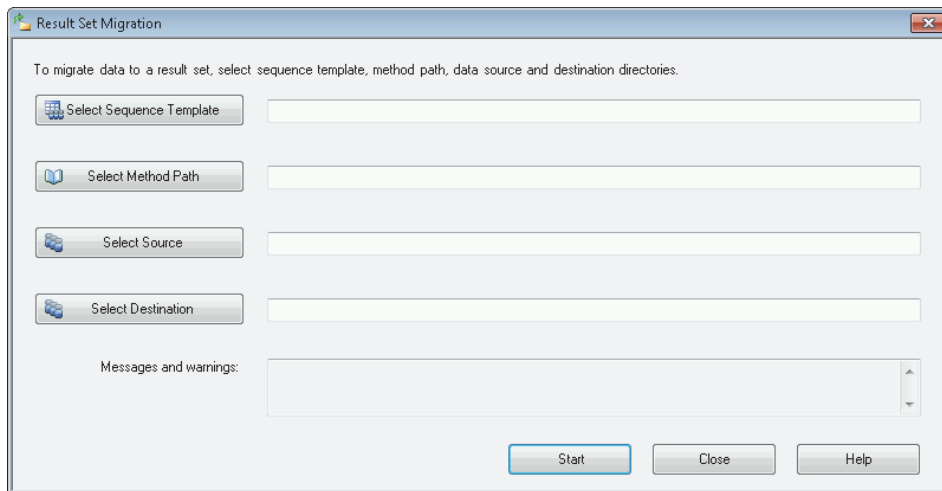


Рисунок 26 Перенос набора результатов

Заполните следующие обязательные поля.

Select Sequence Template: выберите файл последовательности (*.S), который содержит таблицу последовательности, соответствующую переносимому набору данных.

Select Method Path: выберите каталог, где находятся методы, упоминаемые в таблице последовательности.

Select Source: выберите каталог с файлами данных, которые нужно перенести.

Select Destination: укажите путь и имя создаваемого набора результатов. Можно выбрать существующую папку или создать новую папку.

Заполнив все поля, можно приступить к переносу.

Будут выполнены следующие этапы.

- Будет создан каталог набора результатов.

- Шаблон последовательности копируется в набор результатов. Кроме того, он преобразуется в состояние, пригодное для повторной обработки файлов данных на экране **Data Analysis**.
- Методы, упоминаемые в таблице последовательности, копируются из места, указанного в пути к методу, в папку набора результатов.
- Файлы данных, журнал последовательности и файл партии копируются из исходного каталога в каталог назначения.
- В соответствии с информацией в таблице последовательности копия соответствующего метода копируется в файл данных как DA.M.

Когда перенос набора результатов завершится, в поле **Messages and warnings** появится сообщение об успешном выполнении. В противном случае появится предупреждающее сообщение с указанием какой-либо ошибки, произошедшей при переносе. Чтобы посмотреть подробности предупреждения, дважды щелкните предупреждающее сообщение.

Действия после выполнения последовательности

Можно указать, что произойдет после завершения последовательности, выполненной в штатном режиме, или в том случае, если система ChemStation столкнулась с ошибкой при работе с последовательностью. В случае ЖХ это делается путем установки флажка выполняемой по завершении последовательности команды/макроса в окне параметров последовательности, где доступны следующие варианты.

- Установка системы в режим STANDBY (Ожидание), в котором насос и лампа выключены.
- Установка системы в режим LAMPOFF (Лампа Выкл), в котором все лампы выключены (только для ЖХ и КЭ).
- Установка системы в режим PUMPOFF (Насос Выкл), в котором все насосы выключены (только для ЖХ и КЭ).
- Использование макроса по умолчанию SHUTDOWN (Завершение работы) или изменение SHUTDOWN.MAC с целью задания определенной операции.

Например, можно выключить систему после завершения последовательности. Макрос завершения работы можно использовать также для установки нулевого расхода или постепенного снижения расхода.

В параметрах последовательности можно задать выполнение любого специального макроса, внося его имя в поле команды/макроса, выполняемого по завершении последовательности, и установив флажок.

Время ожидания в состоянии неготовности (только для ЖХ и КЭ)

В параметрах последовательности время ожидания в состоянии неготовности представляет собой время, в течение которого система будет ожидать, пока прибор придет в состояние готовности. По истечении этого времени система завершит работы.

Время ожидания (только для ЖХ и КЭ)

Параметры последовательности позволяют задать время ожидания между загрузкой метода и вводом пробы с помощью этого метода. Это может оказаться полезным для восстановления равновесия в колонке/капилляре при изменении условий анализа.

Автоматическая повторная калибровка

Калибровка зачастую выполняется после смены условий работы, например после смены колонки или капилляра. Автоматическая повторная калибровка обычно производится в начале последовательности анализов или через равные промежутки времени в ходе последовательности как часть программы компенсации факторов, влияющих на выполнение анализа.

Существуют два способа задания автоматической повторной калибровки последовательности:

- заданные в явном виде последовательности калибровки;
- циклические последовательности калибровки.

Повторная калибровка в режиме предпочтений «Создание уникальной папки ВКЛ»

При выполнении повторной калибровки таблица калибровки используемого метода обновляется в соответствии с заданными настройками метода. Когда используется режим хранилища данных «Создание уникальной папки ВКЛ», повторно калиброванные методы доступны в наборе результатов. В ходе этого процесса обновляется таблица калибровки метода последовательности. Кроме того, метод DA.M индивидуальных файлов данных содержит обновленную калибровку, использованную для создания результата.

Повторная калибровка в режиме предпочтений «Создание уникальной папки ВЫКЛ»

При выполнении повторной калибровки таблица калибровки используемого метода обновляется в соответствии с заданными настройками метода. Когда используется режим хранилища данных «Создание уникальной папки ВЫКЛ», в ходе калибровки обновляется калибровочная таблица метода-образца.

Задание повторных калибровок

Параметры повторной калибровки последовательности вводятся непосредственно в таблицу последовательности. Эти параметры определяют, каким образом происходит повторная калибровка метода в ходе выполнения последовательности.

Параметры повторной калибровки в таблице последовательности

Фактор отклика (поправочный коэффициент) и время удерживания/миграции можно обновить несколькими способами. В анализе данных при повторной калибровке таблицы калибровки используются команды: уровень калибровки, обновить фактор отклика и обновить время удерживания/миграции.

Если в столбце типа пробы в таблице проб указана калибровка, то следующие столбцы активны и доступны для редактирования:

- Cal Level (Уровень кал.);
- Update RT (Обновить время удерживания);
- Update RF (Обновить КО);
- Interval (Интервал).

Значения, которые можно ввести в каждый из этих столбцов, показаны в таблице.

Таблица 9 Параметры перекалибровки в таблице последовательности

Уровень кал.	Обновить ВУ	Обновить КО	Интервал
№ уровня таблицы калибровки (1–999)	Не обновлять	Не обновлять	№ интервала циклической перекалибровки (1–999)
	Усреднить	Усреднить	Холостая

Таблица 9 Параметры перекалибровки в таблице последовательности

Уровень кал.	Обновить ВУ	Обновить КО	Интервал
	Заменить	Заменить	
		Заключение в скобки	
		% разницы	

В этой таблице показаны столбцы таблицы последовательности, которые содержат параметры повторной калибровки и значения, которые можно ввести.

No Update (Не обновлять)

Не изменять фактор отклика и время удерживания/миграции.

Replace (Заменить)

Замена предыдущих времен удерживания/миграции и отклика (площади или высоты) только соответствующими значениями из текущего выполняемого анализа. Отклик не изменяется ни для одного пика, который не обнаруживается при этом выполнении повторной калибровки.

Усреднение

Усреднение времени удерживания/миграции и отклика (площадей и высот) для каждого пика на основе первоначальной калибровки и всех последующих усредненных повторных калибровок. Если какой-либо пик отсутствует в одной из повторных калибровок, то на среднем отклике пика это не скажется.

Bracket (Заклучение в скобки)

Пробы «заклучаются в скобки» между предварительной и последующей калибровками. Оценка производится после выполнения анализа последнего калибровочного образца последующей калибровки. Имеющиеся данные калибровки заменяются результатами предварительной калибровки. Результаты последующих калибровок усредняются и вносятся в эту таблицу калибровки.

Interval (Интервал)

Интервал определяет, как часто выполняется калибровка во время выполнения последовательности. Частота калибровки соответствует количеству введений пробы, выполняемых прежде, чем начнется следующая серия введений калибровочных образцов. В начале анализа производится калибровка, и результаты (факторы отклика) вводятся в таблицу калибровки. Потом эти результаты используются в последующих количественных расчетах. По завершении заданного количества введений пробы выполняется еще одна калибровка, и результаты записываются в таблицу калибровки поверх результатов предыдущего выполнения калибровки.

Delta% (% разницы)

Расчет % разницы позволяет сравнивать факторы отклика, получаемые в результате анализа, с факторами отклика, введенными вручную в таблицу калибровки. Впоследствии % разницы применяется ко всем калибруемым пикам в таблице. Можно определить несколько внутренних стандартов, а затем использовать их измеренные факторы отклика для расчета новых факторов отклика других пиков. Для каждого пика в таблице калибровки определяют, какой внутренний стандарт нужно использовать для расчета % разницы.

Типы последовательностей

При подготовке последовательности можно использовать следующие типы последовательностей:

- заданные в явном виде последовательности калибровки;
- заданные в явном виде одноуровневые последовательности калибровки;
- циклические многоуровневые последовательности калибровки;
- заданные в явном виде и циклические калибровки, объединенные в одной последовательности;
- циклические последовательности калибровки с вилочными калибровками.

Примечание

После отправки последовательности в очередь выполнения все последовательности (включая последовательности с калибровками методом вилки) преобразуются в явные последовательности калибровок. См. [“Выполнение последовательности”](#) на странице 105.

Во время выполнения в таблице последовательности просто отображаются инъекции по мере их обработки прибором. При добавлении пробы во время выполнения все последующие пробы (включая калибровочные) перемещаются вниз в таблице последовательности.

Заданные в явном виде последовательности калибровки

В последовательностях этого типа перекалибровки выполняются с заданным интервалом, указанным в таблице последовательности.

В случае явно заданных последовательностей калибровки калибровочные образцы вводятся в последовательность без внесения интервала в таблицу последовательности. Перекалибровка осуществляется один раз для каждого вхождения калибровочного образца в таблице последовательности.

Циклические одноуровневые последовательности калибровки

В последовательностях этого типа используется одна и та же виала (то есть калибровочный образец) через равные промежутки времени.

Запись интервала в таблице последовательности определяет, каким образом выполняется перекалибровка. Например, если интервал равен 2, перекалибровка будет производиться через каждые две вials с пробой в последовательности.

Циклические многоуровневые последовательности калибровки

В последовательностях этого типа перекалибровка выполняется методом многоуровневой калибровки с использованием различных калибровочных образцов.

В следующем примере описана последовательность с двумя методами, метод А и метод Б, для анализа двух групп проб. Оба метода являются методами многоуровневой калибровки, которые выполняют перекалибровку автоматически с заданными интервалами.

Таблица последовательности содержит по три записи для каждого метода.

- Два уровня калибровки:
 - строки последовательности 1 и 2 в методе А;
 - строки последовательности 8 и 9 в методе Б.
- Пять записей для проб:
 - строки последовательности с 3-й по 7-ю в методе А;
 - строки последовательности с 10-й по 14-ю в методе Б.

Калибровки заданы через равные промежутки времени с помощью записи интервала перекалибровки в таблице перекалибровки последовательности.

- В методе А перекалибровка будет производиться через каждые две пробы.
- В методе Б перекалибровка будет производиться через каждые три пробы.

Ради простоты примера приведенная ниже таблица последовательности усечена.

Таблица 10 Таблица последовательности для метода А и метода Б

Стро- ка	Место- положе- ние пробы	Имя метода	Инж./ место- поло- жение	Тип пробы	Уро- вень кал.	Обновить ФО	Обновить ВУ	Интер- вал кали- бровки
1	1	Метод А	1	Калибровка	1	Усред- нить	Не обнов- лять	2
2	2	Метод А	1	Калибровка	2	Усре- днить	Не обно- влять	2
3	10	Метод А	1					
4	11	Метод А	1					
5	12	Метод А	1					
6	13	Метод А	1					
7	14	Метод А	1					
8	3	Метод Б	1	Калибровка	1	Усре- днить	Не обно- влять	3
9	5	Метод Б	2	Калибровка	2	Усре- днить	Не обно- влять	3
10	20	Метод Б	1					
11	21	Метод Б	1					
12	22	Метод Б	1					
13	23	Метод Б	1					
14	24	Метод Б	1					

Порядок анализа методом А

Метод А является первой частью последовательности, включающей в себя два метода.

Таблица 11 Порядок анализа методом А

№ ввода	Метод	Вialа	Операция
1	Метод А	1	Уровень калибровки 1 и отчет
2	Метод А	2	Уровень калибровки 2 и отчет
3	Метод А	10	Анализ пробы и отчет
4	Метод А	11	Анализ пробы и отчет
5	Метод А	1	Уровень калибровки 1 и отчет
6	Метод А	2	Уровень калибровки 2 и отчет
7	Метод А	12	Анализ пробы и отчет
8	Метод А	13	Анализ пробы и отчет
9	Метод А	1	Уровень калибровки 1 и отчет
10	Метод А	2	Уровень калибровки 2 и отчет
11	Метод А	14	Анализ пробы и отчет

Порядок анализа методом Б

Метод А является второй частью последовательности, включающей в себя два метода. Метод Б отличается от метода А тем, что на уровне калибровки 2 выполняется по два введения из вialы. В графе интервала задано 3.

Таблица 12 Порядок анализа методом Б

№ ввода	Метод	Вialа	Операция
12	Метод Б	3	Уровень калибровки 1 и отчет
13	Метод Б	5	Уровень калибровки 2 и отчет
14	Метод Б	5	Уровень калибровки 2 и отчет
15	Метод Б	20	Анализ пробы и отчет
16	Метод Б	21	Анализ пробы и отчет
17	Метод Б	22	Анализ пробы и отчет
18	Метод Б	3	Уровень калибровки 1 и отчет

Таблица 12 Порядок анализа методом Б

№ ввода	Метод	Виала	Операция
19	Метод Б	5	Уровень калибровки 2 и отчет
20	Метод Б	5	Уровень калибровки 2 и отчет
21	Метод Б	23	Анализ пробы и отчет
22	Метод Б	24	Анализ пробы и отчет

Обратите внимание на то, что результаты, показанные в Табл. 11 на странице 136 и Табл. 12 на странице 136, можно получить с помощью частичной последовательности, чтобы просмотреть порядок выполнения анализа после настройки таблицы последовательности.

Явно заданные и циклические калибровки вместе

Последовательность этого типа содержит как явно заданные, так и циклические калибровки.

Эта функциональная возможность позволяет полностью перекалибровать метод в начале последовательности (*явно заданная перекалибровка*) и затем обновлять калибровку (*циклическая калибровка*) во время выполнения последовательности.

- В таблице последовательности необходимо указать по две строки калибровки для каждого уровня калибровки. Одна строка калибровки — для записи явно заданной перекалибровки, другая — для записи циклической калибровки.
- Таблица калибровки *должна* содержать записи для каждой строки калибровки, и все виалы, используемые в циклической калибровке, *должны* появляться раньше записей явной заданной перекалибровки и проб.

Пример

Приведенная ниже таблица последовательности демонстрирует метод с одноуровневой калибровкой, который называется SimpReg. Она усечена ради простоты примера.

Таблица 13 Таблица последовательности для метода SIMPREG

Строка	Местоположение пробы	Имя метода	Инж./местоположение	Тип пробы	Уровень кал.	Обновить КО	Обновить ВУ	Интервал калибровки
1	1	SimpReg	1	Калибровка	1	Усреднить	Усреднить	3
2	1	SimpReg	1	Калибровка	1	Заменить	Заменить	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

Имеются две записи для одного уровня калибровки.

- Первая строка калибровки относится к тому же уровню, но она усредняет параметры калибровки. В графе интервала указано, что перекалибровка выполняется через каждые три пробы.
- Вторая запись заменяет все параметры перекалибровки, то есть выполняется полная перекалибровка. Она *не* содержит интервала перекалибровки.

Таблица последовательности

Таблица последовательности состоит из семи строк. Первая строка задает образец для циклической перекалибровки. Вторая строка определяет явно заданную перекалибровку, которая выполняется один раз в начале последовательности. Строки с 3-й по 7-ю определяют пробы для анализа.

Порядок записей в таблице последовательности исключительно важен. Все записи виаля для циклической перекалибровки *должны* появляться *раньше* записей проб или любых записей явно заданной перекалибровки для этого метода.

Порядок анализа методом SimpReg

В приведенной ниже таблице описан порядок анализа для метода SimpReg.

Таблица 14 Порядок анализа методом SimpReg

Стр. посл.	№ ввода	Метод	Виала	Операция
2	1	SimpReg	1	Простая калибровка
1	2	SimpReg	1	Регулярная калибровка
3	3	SimpReg	2	Анализ пробы
3	4	SimpReg	3	Анализ пробы
4	5	SimpReg	4	Анализ пробы
5	6	SimpReg	1	Регулярная калибровка
6	7	SimpReg	5	Анализ пробы
7	8	SimpReg	6	Анализ пробы

Циклические последовательности калибровки с заключением в скобки

В случае циклической калибровочной последовательности с заключением в скобки таблица калибровки, используемая для расчета неизвестных количественных результатов, формируется путем усреднения результатов текущей калибровки и результатов предыдущей калибровки. Эта новая таблица калибровки более точно представляет отклик прибора на момент анализа пробы.

Пример

Рассмотрим следующую ситуацию.

- Наблюдается дрейф отклика прибора.
- Заданы три введения одной и той же двухкомпонентной смеси.
- Указаны два ввода калибровочного образца и один ввод пробы.
- В первый и третий раз вводятся калибровочные образцы.
- Во второй раз вводится проба.

Чтобы получить точный количественный результат для второго ввода (проба), необходимо выполнить интерполяцию между двумя

калибровочными образцами (см. рисунок). Эту процедуру называют «заклучение в скобки».

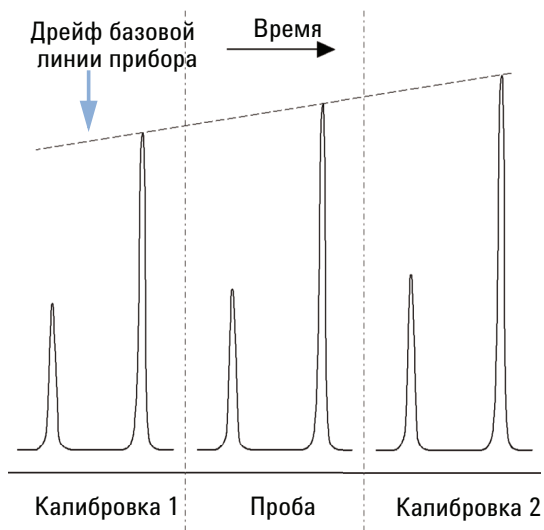


Рисунок 27 Заклучение в скобки

Порядок выполнения последовательности с заклучением в скобки

- Анализируются первые виалы с калибровочным образцами.
- Анализируются виалы с пробой.
- Анализируются следующие виалы с калибровочными образцами.
- Создается таблица калибровки путем замены существующих факторов отклика новыми и внесения усредненных результатов последующих выполнений калибровки в новую таблицу калибровки.
- Оцениваются файлы данных для виал с пробой, и формируется отчет.
- Если еще остались виалы с пробой, которые нужно проанализировать, последовательность возвращается к шагу 2.

Пример

В этом разделе описан пример последовательности с заклучением в скобки, состоящей из одного метода под названием Brack.M. Метод

Brack.M — это метод с двухуровневым внутренним стандартом, используемым для циклической калибровки.

**Таблица
последова-
тельности**

Таблица последовательности метода Brack.M (см. следующую страницу) усечена ради упрощения примера. Она состоит из семи строк. Первые две строки определяют условия перекалибровки для каждого уровня. Остальные строки определяют пробы, которые нужно проанализировать.

Точнее говоря, таблица последовательности метода Brack.M содержит:

- запись Bracket (Скобки) в столбце обновления фактора отклика, которая означает заключени проб в скобки из калибровочных образцов;
- запись Replace (Обновить) в столбце обновления времен удерживания/миграции, которая означает замену времен удерживания/миграции;
- запись 3 в столбце интервала перекалибровки, которая означает перекалибровку через каждые три пробы.

Таблица 15 Таблица последовательности для метода BRACK-M

Строка	Местоположение пробы	Имя метода	Инж./местоположение	Тип пробы	Уровень кал.	Обновить КО	Обновить ВУ	Интервал калибровки
1	1	BRACK-M	2	Калибровка	1	Заключение в скобки	Заменить	3
2	2	BRACK-M	2	Калибровка	2	Заключение в скобки	Заменить	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 Автоматизация/последовательности

Типы последовательностей

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

Рисунок 28 Порядок анализа для последовательности с заключением в скобки

Циклические последовательности перекалибровки с несколькими виалами, содержащими одинаковый раствор стандартного образца

Циклические последовательности с использованием виалы с калибровочным образцом в «циклическом» режиме

В случае большой последовательности, в которой периодически выполняются перекалибровки (то есть после фиксированного количества вводов пробы выполняется автоматическая перекалибровка) существует потенциальный риск опорожнения виалы с калибровочным образцом во время выполнения последовательности. В таблице последовательности ChemStation предусмотрены средства для использования серии виал, содержащих одинаково разбавленный стандартный образец, в *циклическом* режиме.

Благодаря этой возможности в больших последовательностях можно задавать автоматические перекалибровки с постоянными интервалами, используя несколько виал с калибровочными образцами на каждом уровне, причем все растворы в виалах с калибровочными образцами будут расходоваться в одинаковой степени.

Более того, задав подходящее число виал с калибровочными образцами, можно обеспечить однократное использование каждого из них. Это требование важно в тех случаях, когда для каждой перекалибровки требуется виала со свежим калибровочным образцом, например вследствие испарения определяемого вещества после прокола мембраны или потери им своих качеств после контакта со стальной иглой. В следующем разделе описано, как нужно настраивать таблицу последовательности ChemStation, чтобы удовлетворить эти требования.

Определите общее число виал с калибровочными образцами для каждого уровня, исходя из расчетного потребления калибровочного раствора при выполнении всей последовательности.

Задайте отдельную строку циклической перекалибровки для каждой виалы с калибровочным образцом. В таблице последовательности строки, заданные для одного и того же уровня калибровки, должны быть смежными, как и позиции, указанные для виал. Выберите одинаковый интервал перекалибровки для всех строк калибровки.

Например, если последовательность должна повторять калибровку через каждые шесть вводов пробы, установите интервал перекалибровки, равный 6.

Таблица 16 Циклическая последовательность перекалибровки с тремя виалами, заданными для каждого уровня

№ виалы	Наименование пробы	Тип пробы	Имя метода	№ ввода	Уров.	Обн. ВУ	Обн. КО	Интервал
1	Кал. 1a	Калибр.	Метод А	1	1	Уср.	Уср.	6
2	Кал. 1b	Калибр.	Метод А	1	1	Уср.	Уср.	6
3	Кал. 1c	Калибр.	Метод А	1	1	Уср.	Уср.	6
5	Кал. 2a	Калибр.	Метод А	1	2	Уср.	Уср.	6
6	Кал. 2b	Калибр.	Метод А	1	2	Уср.	Уср.	6
7	Кал. 2c	Калибр.	Метод А	1	2	Уср.	Уср.	6
10	Проба 10	Проба	Метод А	6				
11	Проба 11	Проба	Метод А	6				
12	Проба 12	Проба	Метод А	6				
13	Проба 13	Проба	Метод А	6				
14	Проба 14	Проба	Метод А	6				

Порядок выполнения следующий:

- Виала 1 (Кал. 1a)
- Виала 5 (Кал. 2a)
- 6 вводов из виалы 10 (Проба 10)
- Виала 2 (Кал. 1b)
- Виала 6 (Кал. 2b)
- 6 вводов из виалы 11 (Проба 11)
- Виала 3 (Кал. 1c)
- Виала 7 (Кал. 2c)
- 6 вводов из виалы 12 (Проба 12)
- Виала 1 (Кал. 1a)

- Вiala 5 (Кал. 2a)
- 6 вводов из вialы 13 (Проба 13)
- Вiala 2 (Кал. 1b)
- Вiala 6 (Кал. 2b)
- и т. д.

Циклические перекалибровки с использованием в каждой калибровке другой вialы

Для обеспечения однократного введения из каждой вialы с калибровочным образцом необходимо задать последовательность с достаточным количеством разных вial с калибровочным образцом, чтобы не применялся *циклический* режим, описанный в предыдущем примере. Например, если последовательность обрабатывает 80 вial с пробой, причем через каждые 10 проб требуется перекалибровка, то таблица последовательности должна содержать $80/10 + 1 = 9$ строк калибровки для каждого уровня.

Как и в предыдущем примере, строки калибровки должны быть смежными строками последовательности, ссылающимися на вialы в смежных позициях.

Последовательность калибровки методом заключения в скобки с использованием разных вial для предварительной калибровки и последующей калибровки

Такая же возможность предусмотрена для последовательностей калибровки методом заключения в скобки. Определяя соответствующий диапазон вial с калибровочными образцами, можно задать последовательность вилочной калибровки таким образом, чтобы для предварительной и последующей калибровок использовались разные вialы с калибровочными образцами. В этом случае строки калибровки в последовательности тоже должны располагаться друг за другом точно так же, как и позиции вial с калибровочными образцами.

Используются ли вialы для калибровки методом заключения в скобки в циклическом режиме или только для однократного введения, зависит от их общего количества для каждого уровня и числа необходимых перекалибровок в последовательности.

В следующем примере заданы три введения проб, заключенные в скобки калибровками. Для предварительной и последующей калибровок используются разные виалы с калибровочными образцами. Перекалибровки требуются после каждого ввода пробы. Поэтому интервал перекалибровки должен быть равен 1. Число строк калибровки на уровень равно количеству проб плюс 1.

Таблица 17 Для предварительной и последующей калибровок используются разные виалы

№ виалы	Наименование пробы	Тип пробы	Имя метода	№ ввода	Уров.	Обн. ВУ	Обн. КО	Интервал
1	Кал. 1a	Калибр.	Метод А	1	1	Заклю- чение в скобки	Заклю- чение в скобки	1
2	Кал. 1b	Калибр.	Метод А	1	1	Заклю- чение в скобки	Заклю- чение в скобки	1
3	Кал. 1c	Калибр.	Метод А	1	1	Заклю- чение в скобки	Заклю- чение в скобки	1
4	Кал. 1d	Калибр.	Метод А	1	1	Заклю- чение в скобки	Заклю- чение в скобки	1
10	Проба 10	Проба	Метод А	1				
11	Проба 11	Проба	Метод А	1				
12	Проба 12	Проба	Метод А	1				

Порядок выполнения этой последовательности следующий:

- Виала 1 (Кал. 1a), предварительная калибровка 1
- Виала 10 (Проба 10)
- Виала 2 (Кал. 1b), последующая калибровка 1 и предварительная калибровка 2
- Виала 11 (Проба 11)
- Виала 3 (Кал. 1c), последующая калибровка 2 и предварительная калибровка 3
- Виала 12 (Проба 12)
- Виала 4 (Кал. 1d), последующая калибровка 3



5

Очередь выполнения и планировщик очереди

Поддерживаемые рабочие процессы 148

Использование очереди выполнения 150

Отдельные пробы в очереди выполнения 151

Последовательности в очереди выполнения 151

Паузы в очереди выполнения 152

Использование планировщика очереди 153

В этой главе рассматриваются понятия очереди выполнения и планировщика очереди. Объясняется, как добавлять отдельные пробы, последовательности или паузы в очередь выполнения.



Поддерживаемые рабочие процессы

Очередь выполнения управляет выполнением всех анализов в ChemStation.

- При каждом использовании команды **RunControl > Run Method** или **RunControl > Run Sequence** с целью выполнения метода или последовательности соответствующий элемент сначала добавляется в очередь выполнения, а затем автоматически запускается оттуда. Если в данный момент очередь выполнения приостановлена, то элемент будет вставлен в начало очереди, а после него добавится пауза. Благодаря этому прибор возвратится в состояние паузы, как только завершит выполнение анализа.
- Очередь выполнения позволяет также планировать серию проб и последовательностей вместе с дополнительными параметрами. Пробы и последовательности добавляются в очередь с помощью команды **RunControl > Queue Method...** или **RunControl > Queue Sequence...**. С помощью очереди выполнения можно автоматизировать занимающую много времени работу, например задания на ночь или выходные дни. Помимо проб и последовательностей можно также планировать паузы. Во время этих пауз ChemStation отображает настраиваемое сообщение и ожидает подтверждения пользователем.

С помощью планировщика очереди можно заранее подготовить планы очереди и впоследствии добавлять их в очередь выполнения.

Поддерживаются следующие рабочие процессы:

- выполнение анализа отдельной пробы;
- выполнение отдельной последовательности;
- постановка в очередь отдельной пробы;
- постановка в очередь отдельной последовательности:
 - a выбор классического шаблона последовательности ChemStation или шаблона простой последовательности;
 - b редактирование или просмотр таблицы последовательности;
 - c редактирование или просмотр параметров последовательности;
 - d сохранение настроек;

- **e** добавление последовательности в очередь;
- изменение очереди выполнения;
- подготовка плана очереди;
- добавление предварительно заданного набора последовательностей в очередь выполнения;
- **a** выбор плана очереди;
- **b** добавление плана в очередь выполнения.

В очереди журнала всегда можно посмотреть, какие анализы выполнены в текущем приборе.

Очередь выполнения и планировщик очереди доступны только в онлайн-сессиях ChemStation на экране **Method and Run Control**.

Использование очереди выполнения

Очередь выполнения присутствует на вкладках **Instrument Control** и **Run Queue**. На вкладке управление прибором очередь выполнения можно отобразить или скрыть с помощью команды **View > Run Queue**.

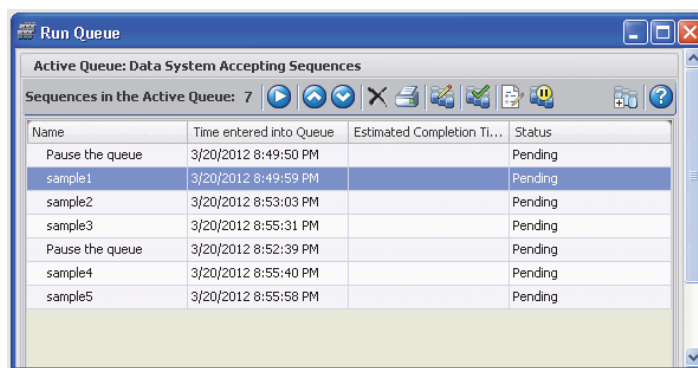


Рисунок 29 Диалоговое окно **Run Queue**

Новый элемент можно добавить в начало или в конец очереди. До тех пор пока элемент пребывает в очереди в состоянии ожидания, его порядок выполнения и свойства можно изменить. В зависимости от параметров активной очереди, первый элемент в очереди запускается, когда готова система данных либо при возобновлении очереди.

Очередь выполнения поддерживает отдельные пробы, шаблоны простой пробы и классические последовательности ChemStation. Единственные элементы, которые невозможно добавить в очередь выполнения, — это частичные последовательности и выполнения анализа, запускаемые непосредственно из аппарата.

Дальнейшие сведения о простой последовательности см. в системе онлайн-справки. Обучающие программы по работе со вкладкой **Easy Sequence Setup** доступны в онлайн-справке.

Отдельные пробы в очереди выполнения

Для добавления отдельной пробы в очередь выполнения используйте меню **RunControl > Queue Method....** В диалоговом окне **Queue Method** можно изменить все параметры.

Последовательности в очереди выполнения

Для добавления последовательности в очередь выполнения используйте меню **RunControl > Queue Sequence....** Таблицу последовательности и параметры последовательности можно изменить, не меняя текущей загруженной последовательности. Перед окончательной постановкой последовательности в очередь в диалоговом окне предлагается либо добавить последовательность в очередь, либо сохранить ее как новый шаблон последовательности.

В диалоговом окне **Finish Queue Sequence** имеется также кнопка-флажок **Delete temporary Sequence Template after completion**. ChemStation всегда хранит копию поставленного в очередь шаблона последовательности во временном каталоге. Этот временный шаблон последовательности будет использоваться для выполнения последовательности из очереди. Поскольку одна и та же последовательность может быть поставлена в очередь несколько раз, ChemStation нуждается в отдельной копии для каждого элемента, поставленного в очередь.

В зависимости от того, установлен или снят вышеупомянутый флажок, этот временный шаблон сохранится или будет удален, когда очередь перейдет к следующему элементу. Этот флажок может быть установлен или снят по умолчанию в зависимости от настройки параметра **Unique Folder Creation** (см. раздел [“Предпочтения — вкладка последовательности”](#) на странице 116):

- Если выбрано **Unique Folder Creation OFF**:
по умолчанию флажок **Delete temporary Sequence Template after completion** снят.
Если требуется повторно обрабатывать данные, понадобится шаблон последовательности, поэтому мы рекомендуем хранить копию этого файла. По умолчанию он хранится в папке Chem32\
<прибор>\SEQUENCE.
- Если выбрано **Unique Folder Creation ON**:

по умолчанию флажок **Delete temporary Sequence Template after completion** установлен.

Все сведения, необходимые для повторной обработки, уже имеются в наборе результатов, поэтому нет необходимости хранить копию временного шаблона последовательности. Однако, если этот флажок установлен, по умолчанию копия сохраняется в папке **Chem32\<instrument>\TEMP\AESEQ**.

Паузы в очереди выполнения

Чтобы запланировать паузу в очереди, щелкните кнопку **Add Pause to Queue** на панели инструментов очереди выполнения. Во время этих пауз ChemStation отображает настраиваемое сообщение и ожидает подтверждения пользователем.

Использование планировщика очереди

С помощью планировщика очереди можно подготовить упорядоченный набор последовательностей (шаблон простой последовательности *.es либо классические шаблоны последовательности ChemStation *.s) или пауз. План последовательности можно целиком добавить в конец или начало очереди выполнения.

План очереди сохраняется в виде файла *.qpl. Планировщик последовательностей можно открыть на экране **Method and Run Control** с помощью меню **RunControl > Queue Planner...**

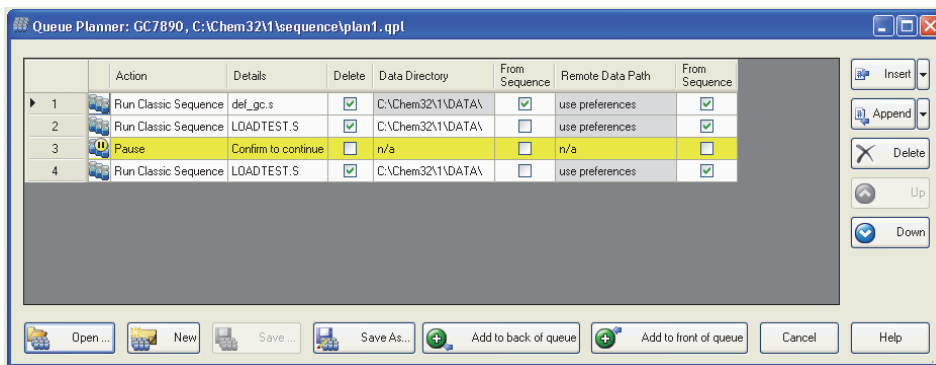


Рисунок 30 Планировщик очереди

Как и в случае очереди выполнения, при добавлении паузы можно ввести собственное сообщение в столбце **Details**. Когда очередь выполнения достигает паузы, ChemStation прекращает работу и выводит на экран заданное сообщение. Очередь сможет продолжиться только после подтверждения этого сообщения пользователем.

Дальнейшие сведения о пользовательском интерфейсе см. в системе онлайн-справки.

5 Очередь выполнения и планировщик очереди

Использование планировщика очереди



6

Понятия анализа и просмотра данных

Анализ данных 156

Режимы анализа данных 158

Режим перерасчета 158

Режим последнего результата 161

Режим повторной обработки 162

Обновление методов 167

Средство просмотра отчетов для экрана анализа данных 167

Просмотр 172

Требования к составлению интеллектуальных отчетов 172

Выбор файлов данных 173

Выбор шаблона отчета 174

Предварительный просмотр отчета 174

Возможные рабочие процессы просмотра 174

В этой главе в общих чертах изложены варианты анализа и просмотра данных. В OpenLAB CDS ChemStation Edition эти варианты доступны на двух отдельных экранах.



Анализ данных

После того как данные получены, их можно проанализировать на экране **ChemStation Data Analysis**. Открыв вкладку **Data** в проводнике ChemStation, можно загрузить все выполнения последовательностей или все отдельные выполнения анализа в определенную папку, дважды щелкнув соответствующий значок. После этого соответствующий набор данных доступен в таблице навигации.

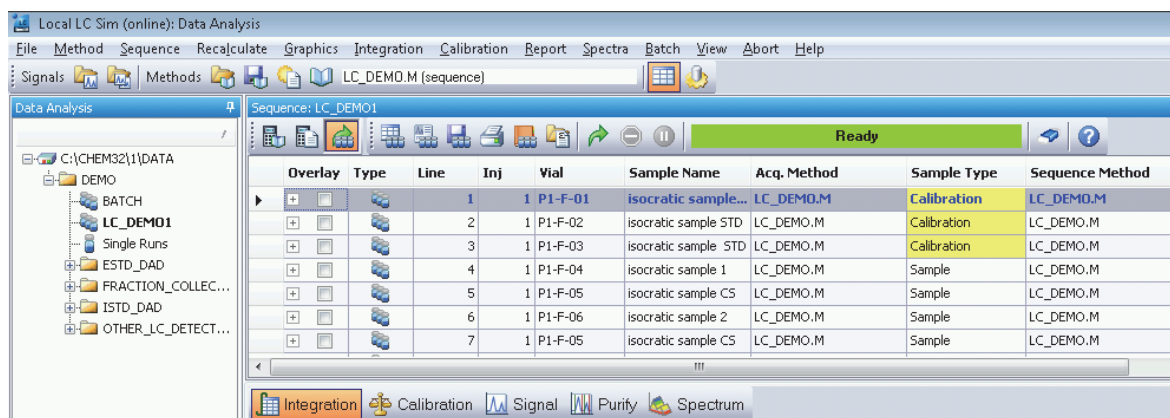


Рисунок 31 Загрузка последовательности из проводника ChemStation в таблицу навигации

Основная часть таблицы навигации состоит из списка всех выполнений анализа. Чтобы загрузить выполнение анализа в память ChemStation, дважды щелкните соответствующую строку в таблице навигации. Кроме того, если правой кнопкой мыши щелкнуть строку выполнения анализа, откроется меню из нескольких команд, например загрузка или наложение определенных сигналов из файла, экспорт данных или просмотр параметров метода сбора данных.

Выполнения последовательностей (в режиме повторной обработки) загружаются вместе с методом последовательности, использованным во время сбора данных или повторной обработки. Имя этого метода отображается на панели инструментов, а также в столбце **Sequence Method** таблицы навигации. Имя метода сбора данных отображается в столбце **Acq Method**.

Отдельные выполнения анализа можно загрузить одним из следующих способов в зависимости от настроек в окне **Preferences** > на вкладке > **Signal/Review options** (см. рисунок ниже):

- Если флажок (1) установлен и в последний раз выполнялся единичный анализ или составлялся отчет по отдельному выполнению анализа с использованием метода, расположенного по одному из заданных в настоящее время путей к методу-образцу, то единичное выполнение анализа загружается вместе с этим методом-образцом. Этот метод отображается в столбце **Analysis Method** таблицы навигации.
- Если флажок (1) снят, отдельные выполнения анализа загружаются вместе с методом-образцом, который загружался последним в систему ChemStation.

Имя метода сбора данных отображается в столбце **Acq Method**.

ChemStation позволяет задать действия по умолчанию, выполняемые автоматически при загрузке файла данных из таблицы навигации. В их число входят задачи анализа данных вроде интегрирования хроматограммы непосредственно после загрузки или печати отчета для каждого отдельного ввода пробы (см. рисунок ниже).

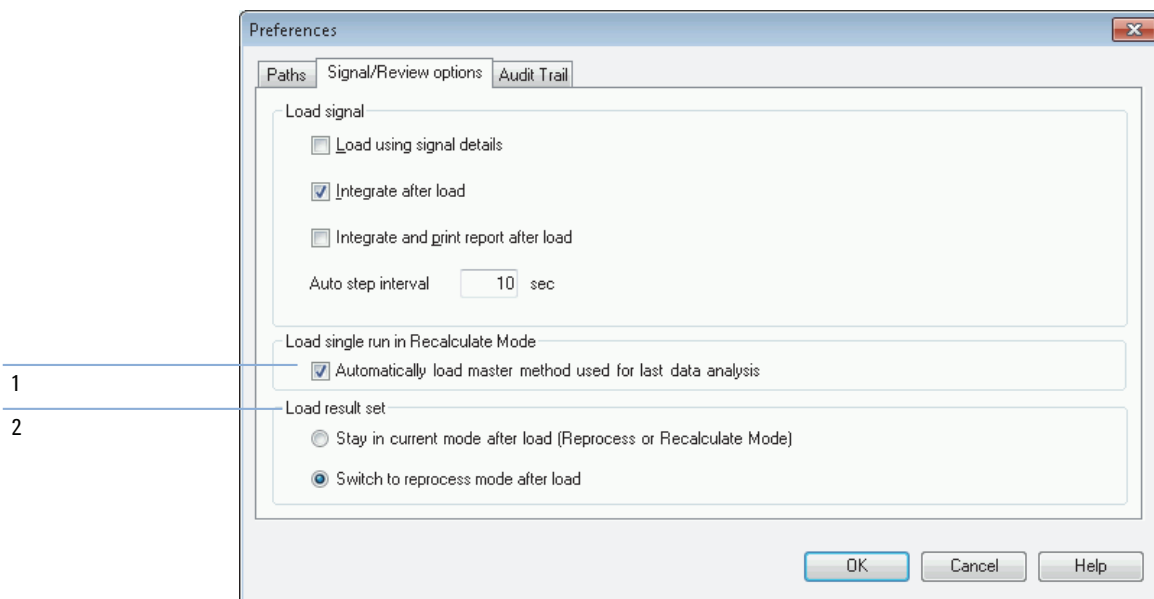


Рисунок 32 Вкладка **Signal/Review options** диалогового окна **Preferences**

Режимы анализа данных

Выбирать можно из следующих режимов анализа данных:

- режим перерасчета;
- режим последнего результата;
- режим повторной обработки.

Эти режимы доступны с помощью меню **View** или набора инструментов (см. рисунок ниже).



Рисунок 33 Выбор режима

Набор инструментов каждого режима содержит функции, относящиеся к этому режиму. Режимы и соответствующие функции описаны в следующих разделах. На вкладке **Signal/Review Options** диалогового окна **Preferences** можно выбрать режим, который будет включаться по умолчанию при загрузке набора результатов (см. Рис. 32 на странице 157, пометка 2).

Режим перерасчета

Загрузив выполнение анализа, можно просмотреть его, скорректировать параметры анализа данных, проинтегрировать сигналы и, наконец, распечатать отчет. В этом случае анализ выполняется как единичный без учета контекста последовательности или использования функциональных возможностей таблицы последовательности. Для анализа данных этого типа таблица навигации предоставляет набор инструментов, показанный на рисунке ниже.



Рисунок 34 Набор инструментов таблицы навигации в режиме перерасчета

С помощью этого набора инструментов можно перемещаться в начало или конец таблицы навигации, переходить к предыдущему и следующему выполнению анализа, автоматически пошагово перемещаться между выполнениями анализа, останавливать автоматический пошаговый переход, пересчитывать выполнение анализа с использованием определенного метода или очищать таблицу навигации.

Перерасчет проводится по каждому выполнению анализа отдельно. Рассматриваются только выполнения анализа, показанные в таблице навигации. Если к таблице навигации применен фильтр, то пересчитываются только те выполнения анализа, которые фактически показаны в таблице. Учитывается также сортировка таблицы навигации.

Перерасчет можно использовать, например, в следующих рабочих процессах:

- требуется просмотреть файлы данных набора результатов с использованием другого метода, отсутствующего в текущем наборе результатов (например, метода-образца, не использовавшегося для сбора данных), так как в рабочем процессе использовались обособленные методы сбора и анализа данных.
- Метод последовательности отредактирован, и с его помощью нужно просмотреть только определенные выполнения анализа, чтобы проверить, насколько хорошо эти параметры применяются к другим выполнениям анализа.

Метод анализа данных для единичных выполнений анализа

В предыдущих версиях в режиме перерасчета не было автоматической загрузки метода вместе с файлом данных. Начиная с версии C.01.05, можно установить флажок автоматической загрузки метода-образца, использованного в последнем анализе данных (см. [Рис. 32](#) на странице 157, пометка 1). Если этот флажок установлен, единичные выполнения анализа загружаются с соответствующим методом-образцом, если тот по-прежнему находится в заданном месте.

Перерасчет с использованием определенного метода

Эта функция позволяет пересчитать показанные в таблице навигации выполнения анализа с использованием определенного метода. Требуемый метод-образец указывается в диалоговом окне **Recalculate With Method** (см. [Рис. 35](#) на странице 160). Если в выбранном методе-образце применяется составление интеллектуальных отчетов (см. раздел “Составление отчетов” на странице 193), то можно также указать шаблон отчета, который будет использоваться для составления отчетов по одному вводу пробы.

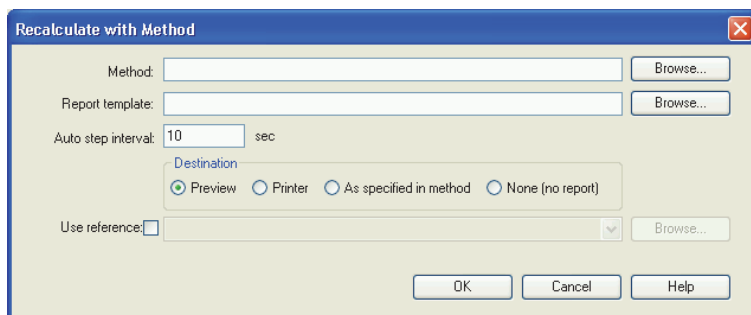


Рисунок 35 Диалоговое окно **Recalculate With Method**

В диалоговых окнах **Browse for methods in master paths** и **Browse for templates in master paths** указаны все местоположения файлов, заданные в предпочтениях.

Примечание

В предыдущих версиях ChemStation перерасчет с использованием определенного метода осуществлялся путем выбора кнопки **Use current method**, **Use method from data file** или **Use sequence method**.

Если установить флажок **Use reference**, то можно выбрать файл данных эталонным сигналом. С помощью этого эталонного сигнала ChemStation рассчитывает отношение сигнал-шум в соответствии с требованиями Европейской фармакопеи. В раскрывающемся списке отображаются файлы данных, использованные в текущем сеансе. С помощью кнопки **Browse** можно выбрать любой файл данных, который присутствует также в таблице навигации. Если требуется использовать другой эталонный файл, то сначала его нужно добавить в таблицу навигации.

Новый эталон записывается вместо предыдущего и в дальнейшем будет использоваться в расчетах отношения сигнал-шум в каждом отчете. Если установить флажок **Use reference**, но не выбрать никакого файла, то эталоны очищаются для всех пересчитанных файлов данных, и в дальнейшем значения отношения сигнал/шум не будут рассчитываться.

Всякий раз, когда пересчитывается проба или формируется отчет, метод файла данных (DA.M) автоматически обновляется параметрами анализа данных из использованного метода. Путь к этому конкретному методу сохраняется в виде ссылки в файле данных.

Режим последнего результата



Рисунок 36 Набор инструментов таблицы навигации в режиме последнего результата

В этом режиме для каждого выполнения анализа загружается метод файла данных (DA.M). DA.M — это точная копия метода, который использовался во время последнего анализа данных (во время сбора данных, повторной обработки или перерасчета). Поэтому, даже если впоследствии метод последовательности был изменен, можно воспроизвести последний результат вместе с первоначально использованным методом. Таким способом можно, например, отслеживать в наборе результатов изменения, внесенные в метод при последующих перекалибровках.

На панели инструментов имя метода отображается как DA.M, указывая на то, что загружен метод файла данных. Если навести указатель мыши на это поле, появится всплывающая подсказка, дополнительно указывающая имя метода и полный путь к нему. Кроме того, имя метода, в последний раз использовавшегося для анализа данных (скопированного в DA.M), отображается в столбце **Analysis Method** в таблице навигации. Всплывающая подсказка в этом столбце показывает полный путь к данному методу.

Примечание

Обычно DA.M доступен только для чтения. Его невозможно загрузить вручную, он загружается только приложением ChemStation в режиме последнего результата для перерасчета. Его можно отредактировать, но невозможно сохранить вручную. Если отредактировать или изменить этот метод, формирование отчета станет невозможным, так как это означало бы сохранение метода DA.M и, следовательно, могло бы привести к противоречиям в системе.

В режиме последнего результата можно обновить загруженный метод-образец или любой другой метод-образец текущими параметрами анализа данных из DA.M или сохранить измененный метод DA.M как совершенно новый метод-образец. Например, при загрузке набора данных, проанализированного несколькими неделями или месяцами раньше, обнаруживается, что сохраненные в DA.M параметры анализа данных пригодны для текущей работы. В таком случае эти настройки можно перенести в выбранный метод-образец. Дополнительные сведения см. в разделе [“Управление методами”](#) на странице 56.

Режим повторной обработки

Другим способом обработки данных является **Reprocess** всей последовательности. В отличие от перерасчета все анализы выполняются повторно в контексте последовательности, то есть таблицы калибровки методов последовательности обновляются в случае выполнения калибровок и в таблице последовательности могут измениться множители, количества и т. д.

Набор результатов включает в себя все файлы, необходимые для повторной обработки: файлы данных, копию файла последовательности, все методы последовательности и все шаблоны отчетов, первоначально использованные при сборе данных. Таким образом, для повторной обработки последовательности нужно просто загрузить ее в таблицу навигации и выбрать набор инструментов повторной обработки.

Если возникает необходимость распространить изменения метода последовательности на соответствующий метод-образец в качестве входных данных для всех будущих сборов данных, это можно легко сделать с помощью функции **Update Master Method** (см. раздел [“Обновление параметров АД в методах-образцах”](#) на странице 60).

ДА.М автоматически обновляется при каждой повторной обработке файла данных.

В таблице навигации предоставляется следующий набор инструментов для повторной обработки:



Рисунок 37 Набор инструментов таблицы навигации в режиме повторной обработки последовательности

Этот набор инструментов позволяет отредактировать таблицу последовательности, отредактировать параметры последовательности, сохранить текущую последовательность, распечатать текущую последовательность, показать или скрыть журнал последовательности, просмотреть сохраненные файлы сводных отчетов о последовательности, запустить повторную обработку последовательности, остановить или приостановить последовательность.

Обратите внимание на то, что в таблице навигации значки повторной обработки доступны только для наборов результатов, сформированных в приложении ChemStation версии B.02.01 и старше. На экране **Data Analysis** повторная обработка недоступна для данных единичных выполнений анализа, для данных, полученных в приложении версии младше B.02.01, и для данных, полученных с выключенным параметром **Unique Folder Creation** (см. раздел “Предпочтения — вкладка последовательности” на странице 116). Повторную обработку таких последовательностей нужно производить на экране **Method and Run Control**, установив для параметра **Part of method to run** значение **Reprocess Only**. Для последовательностей, созданных с помощью приложения ChemStation версии B.02.01 и старше, параметр повторной обработки убран с экрана **Method and Run Control**, и в таблице навигации повторная обработка предлагается как **Data Analysis Task**.

Другим вариантом является добавление проб или последовательностей в новый самособирающийся набор результатов. В этом случае нужно также назначить методы последовательности, и впоследствии можно будет повторно обработать всю последовательность (см. раздел “Самособирающийся набор результатов” на странице 166).

Обратите внимание на то, что в отношении повторной обработки действуют следующие правила:

- при загрузке набора результатов в таблицу навигации ChemStation автоматически загружает также файл последовательности (*.S), находящийся в этом наборе результатов. Файл последовательности содержит все строки последовательностей, связанные с любым файлом данных, принадлежащих этому набору результатов.
- Все действия выполняются над методами последовательности. Если требуется применить измененные параметры анализа, то нужно изменить методы последовательности.
- Во время повторной обработки файл партии (*.b), журнал выполнения последовательности/единичного выполнения анализа (*.log) и таблица навигации обновляются. Индивидуальный метод анализа данных (DA.M) каждого обработанного файла данных перезаписывается методом последовательности.
- Чтобы добавить в таблицу последовательности новые методы из других каталогов методов-образцов, с помощью проводника ChemStation скопируйте метод-образец в набор результатов или выберите **Method > Update Methods....** После этого можно выбрать новый метод

последовательности в таблице последовательности. Добавить или удалить строки таблицы последовательности невозможно.

- В диалоговом окне параметров последовательности можно изменить только комментарий и использование сведений о таблице последовательности. Все остальные поля должны быть настроены во время сбора данных либо не применяться для повторной обработки.

Рисунок 38 Параметры последовательности на экране анализа данных

Обращение с событиями интегрирования, связанными с вмешательством вручную

События интегрирования, связанные с вмешательством, совершенным вручную, например, проведенная вручную нулевая линия, даже еще более характерны для файла данных, чем спланированные по времени события интегрирования. В случае сложных хроматограмм крайне желательно иметь возможность использовать эти события для повторной обработки.

Поэтому в ChemStation версии B.04.01 и старше события интегрирования, связанные с вмешательством вручную, можно сохранять непосредственно в файле данных, а не в методе. Хранящиеся в файле данных события вмешательства вручную применяются автоматически при каждом просмотре или повторной обработке файла данных. Выполнение анализа, содержащее события интегрирования, связанные с вмешательством вручную, помечается в соответствующем столбце таблицы навигации.

Помимо инструментов для нанесения нулевой линии и удаления пика вручную в пользовательском интерфейсе доступны другие инструменты, с помощью которых можно:

- сохранить параметры интегрирования вручную отображаемых на данный момент хроматограмм в файле данных;
- удалить все события с отображаемых хроматограмм;
- отменить последние события интегрирования, связанные с вмешательством вручную (это можно сделать до тех пор, пока событие не сохранено).

При переходе к следующему файлу данных во время просмотра в таблице навигации ChemStation проверит, нет ли несохраненных событий интегрирования, связанных с вмешательством вручную, и спросит пользователя, нужно ли сохранить эти события.

События вмешательства вручную, сохраняемые в файле данных во время просмотра в таблице навигации, не мешают связанным с вмешательством вручную событиям интегрирования, сохраняемым во время просмотра в режиме **Batch**. Эти два способа просмотра совершенно независимы друг от друга с точки зрения параметров интегрирования вручную, хранящихся в файле данных.

В приложениях ChemStation версии младше B.04.01 события интегрирования, связанные с интегрированием вручную, можно сохранять только в методе. В версии B.04.01 этот рабочий процесс по-прежнему доступен. В меню **Integration** на экране **Data Analysis** представлены следующие пункты для обработки событий интегрирования, связанных с событиями интегрирования вручную, с помощью метода:

Update Manual Events of Method: сохранить заново отобранные события интегрирования вручную в метод.

Apply Manual Events from Method: применить события интегрирования вручную, хранящиеся в методе, к текущему загруженному файлу данных.

Remove Manual Events from Method: удалит события интегрирования вручную из метода.

Чтобы преобразовать события интегрирования вручную, хранящиеся в методе, для хранения в файле данных, примените эти события из метода и сохраните результаты в файле данных. При необходимости удалите события из метода.

Если флажок **Manual Events** в разделе **Integration Events Table** метода установлен, то события интегрирования вручную, хранящиеся в методе, всегда применяются при загрузке файла данных, использующего этот метод. Если файл данных содержит дополнительные события интегрирования вручную, то используются события из файла данных. Когда флажок **Manual Events** установлен, пользователь никогда не получает приглашения сохранить события в файл данных.

Самособирающийся набор результатов

На экране **Data Analysis** таблица навигации показывает содержимое загруженного единичного выполнения анализа или последовательности. В таблицу навигации можно загружать и добавлять файлы данных или выгружать их оттуда. С помощью команды **Sequence > Create New Result Set** можно создать новый самособирающийся набор результатов из данных, отображаемых в таблице навигации (см. раздел [“Комплектование нового набора результатов”](#) на странице 112). Самособирающиеся наборы результатов можно повторно обработать точно так же, как и автоматически создаваемые наборы результатов.

Выгрузка текущего набора данных

С помощью команды **Unload Current Dataset** из контекстного меню таблицы навигации можно вернуть таблицу навигации в первоначальное незаполненное состояние, в котором она пребывает сразу после запуска ChemStation. Если есть несохраненные данные, предлагается сохранить их.

Удаление выбранного файла данных

С помощью команды **Remove selected Data Files** из контекстного меню таблицы навигации можно удалить выбранные строки из таблицы навигации. Это приводит к удалению только ссылки в таблице навигации, но не физического файла данных из загруженного набора результатов или единичного выполнения анализа в файловой системе. Ссылки добавленных/наложенных файлов удалить невозможно.

Обновление методов

На экране **Data Analysis** доступны несколько вариантов копирования методов между каталогами методов-образцов и наборами результатов. Дополнительные сведения см. в разделе [“Управление методами”](#) на странице 56.

Средство просмотра отчетов для экрана анализа данных

В зависимости от конфигурации, ChemStation в определенный момент времени автоматически сохраняет отчеты по одному вводу пробы и сводные отчеты о последовательностях в файловую систему. Средство просмотра отчетов позволяет без труда просмотреть сохраненные файлы отчетов, чтобы проверить результаты сбора данных, повторной обработки и перерасчета.

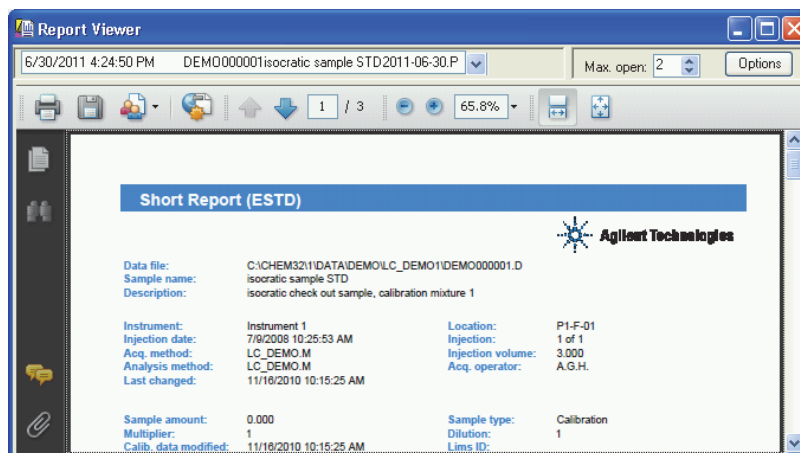


Рисунок 39 Средство просмотра отчетов

Преимущества использования средства просмотра отчетов:

- файлы отчетов можно открыть непосредственно из ChemStation; нет необходимости искать файлы в файловой системе;
- каждый отчет открывается в отдельном перемещаемом окне, поэтому можно без труда сравнить различные отчеты, размещая окна рядом друг с другом;
- файл отчета можно просматривать в полноэкранном режиме;
- для просмотра отчетов в формате .pdf можно использовать функциональные возможности Adobe Reader;
- можно искать определенный текст как в отчетах формата .txt, так и в отчетах формата .pdf;
- при повторной обработке последовательности не нужно дожидаться, пока она завершится для всей последовательности; можно открыть сохраненные файлы отчета для уже обработанных проб последовательности.

Запуск средства просмотра отчетов

Средство просмотра отчетов можно открыть с помощью меню, значков панели инструментов или контекстного меню таблицы навигации. Существуют различные пункты меню для сводных отчетов о последовательности и для отчетов по одному вводу пробы.

Просмотр отчетов по одному вводу пробы

- Выберите меню **Report > View Report File**, чтобы просмотреть файл отчета или файлы загруженного сигнала.
- Выберите команду **View Saved Report File(s)** в контекстном меню конкретной пробы в таблице навигации. С помощью этой команды можно загрузить файл отчета или файлы любого сигнала, даже если он сейчас не загружен.
- Щелкните значок **View saved Report File(s)** на панели инструментов рабочей области, чтобы просмотреть файл отчета или файлы загруженного сигнала.



Просмотр сводных отчетов о последовательности:

- Выберите меню **Sequence > View Summary Report File**.
- Щелкните значок **View Saved Sequence Summary Report File(s)** на панели инструментов навигации (в режиме повторной обработки).



Настройка окон средства просмотра отчетов

Можно настроить несколько аспектов поведения средства просмотра отчетов. Для получения доступа ко всем этим настройкам используйте кнопку **Options** в окне средство просмотра отчетов.

Можно задать максимальное число одновременно открытых окон средства просмотра отчетов. Повторное использование окон происходит по кругу. Если количество просматриваемых файлов отчета превышает максимальное число окон средства просмотра, то в первую очередь будет изменяться содержимое окон, открытых первыми.

Примечание

Если не требуется сравнивать несколько отчетов, то рекомендуется ограничить число окон средства просмотра отчетов единицей.

В случае сравнения нескольких отчетов, возможно, будет полезно настроить строку заголовка окон средства просмотра отчетов. Имеются

различные токены для окон средства просмотра, отображающих сводные отчеты о последовательности, отчеты по одному вводу пробы для проб последовательности или отчеты по одному вводу пробы для единичных выполнений анализа. Эти токены помогают различать отдельные окна средства просмотра отчетов.

Окна средства просмотра всегда отображаются в верхней части приложения ChemStation. Чтобы одновременно работать с приложением ChemStation и средством просмотра отчетов, можно изменить размер и положение обоих окон таким образом, чтобы видеть сразу два окна. При закрытии приложения ChemStation размеры и положения окон сохраняются. При следующем запуске приложения ChemStation опять будут использоваться те же самые настройки.

Компоновка окон средства просмотра отчетов

Окна средства просмотра всегда отображаются в верхней части приложения ChemStation. Чтобы одновременно работать с приложением ChemStation и средством просмотра отчетов, можно изменить размер и положение обоих окон таким образом, чтобы видеть сразу два окна и комфортно работать.

При закрытии приложения ChemStation размеры и положения окон сохраняются. При следующем запуске приложения ChemStation опять будут использоваться те же самые настройки.

Работа со средством просмотра отчетов

Средство просмотра отчетов можно использовать, например, в следующих рабочих процессах:

- Настройте метод и последовательность для сохранения отчетов формата PDF в файловой системе. По завершении выполнения последовательности откройте непосредственно из ChemStation файлы отчета (сводный отчет о последовательности или отчет по одному вводу пробы) в средстве просмотра отчетов. Используйте функциональные возможности приложения Adobe Reader, такие как изменение масштаба или поиск, для детальной проверки отчета.
- Загрузите последовательность, уже содержащую файлы отчета, из центрального хранилища данных.

- Чтобы просмотреть итоговый результат, выберите соответствующую пробу в таблице навигации и прямо из ChemStation откройте файл отчета в средстве просмотра отчетов.

- При необходимости можно изменить метод и повторно обработать последовательность. Во время повторной обработки можно начать просмотр отчетов уже проанализированных проб.

В списке, расположенном в верхнем левом углу средства просмотра отчетов, можно выбрать оба отчета — старый и новый. Отчеты можно различить по дате создания, указанной в строке списка. В зависимости от настроек передачи возможна автоматическая выгрузка данных, включая новые файлы отчетов, в центральное хранилище данных по завершении повторной обработки.

- Выполните последовательность, которая сохраняет файлы отчета только в формате txt. Эти файлы отчета тоже можно проверить в средстве просмотра отчетов.

- Просмотрите различные отчеты по одним и тем же пробам последовательности, используя разные стили или шаблоны отчета.

Сначала создайте последовательность с отчетом, обладающим расширенными рабочими характеристиками. Выполните или повторно обработайте последовательность, чтобы получить файл отчета. Если отображаемые в этом отчете результаты удовлетворяют, измените метод последовательности, чтобы создать более короткий отчет (например, выберите другой шаблон отчета или классический стиль отчета **Short**). Затем повторно обработайте последовательность, чтобы получить более короткие отчеты. При просмотре отчета в средства просмотра отчетов можно переключаться между двумя различными отчетами, выбирая их в списке вверху слева. Дата создания каждого файла отображается в строке списка.

Просмотр

В Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition доступен новый экран, предназначенный исключительно для просмотра данных рабочих процессов экрана Анализ данных. На этом экране **Review** можно создавать отчеты для всей последовательности, подмножества последовательности или любой подборки файлов данных из различных последовательностей или отдельных проб.

На экране **Review** не загружаются никаких методов и не создается никаких новых результатов, как в случае перерасчета или повторной обработки. Отчеты, создаваемые на экране **Review**, отображают только результаты, которые уже были рассчитаны.

Можно выбрать шаблон отчета и применить его к определенной подборке файлов данных. Содержимое формируемого отчета определяется сочетанием шаблона и выбранных файлов данных.

Примечание

Экран **Review** доступен только в том случае, если в конфигурации прибора на панели управления OpenLAB включено составление интеллектуальных отчетов.

Требования к составлению интеллектуальных отчетов

ChemStation C.01.06 формирует данные результатов в особом формате (*.ACAML), используемом при составлении интеллектуальных отчетов. Если требуется создавать отчеты по данным, собранным в системе ChemStation версии A или B, то сначала необходимо восстановить результаты с помощью ChemStation C.01.06 (например, пересчитать данные или создать отчеты по одному вводу пробы на экране анализа данных). Если нет результатов в требуемом формате, сформированные на экране просмотра отчеты не будут содержать никаких данных.

Выбор файлов данных

Нужные файлы данных можно выбрать, загрузив последовательности или единичные выполнения анализа из дерева навигации в проводнике ChemStation. После этого все доступные файлы данных отображаются в таблице навигации. В таблице навигации выбирают определенные файлы данных, результаты которых требуется посмотреть в отчете.

Загрузка файлов данных

Файлы данных можно загрузить из полной последовательности или из папки единичных выполнений анализа. Чтобы загрузить все файлы данных из последовательности, дважды щелкните ее на вкладке **Data** проводника ChemStation или воспользуйтесь командой **Load** из контекстного меню.

При загрузке файлов данных таблица навигации автоматически очищается, прежде чем отобразить новые файлы данных. Таким образом, можно подготовить данные либо для *Отчета по отдельной пробе*, либо для *Сводного отчета о последовательности*.

Добавление файлов данных

Если нужно сравнить результаты разных последовательностей, то можно сначала загрузить одну последовательность, а затем добавить необходимые файлы данных из другой последовательности. На вкладке **Data** проводника ChemStation воспользуйтесь командой **Add Data Files...** из контекстного меню, чтобы добавить только определенные данные файлов в уже загруженную подборку. Откроется диалоговое окно для выбора требуемых файлов данных.

При добавлении файлов данных таблица навигации присоединяет их к списку уже загруженных файлов данных. Поэтому можно подготовить данные, например, для *Перекрестных отчетов по последовательностям*.

Выбор файлов данных для составления отчетов

Если в проводнике ChemStation дважды щелкнуть последовательность или подборку отдельных проб, то все ее файлы данных отобразятся в таблице навигации. Файлы данных, по которым нужно создать отчет,

выбирают в таблице навигации. В формирование отчета будут включены только выбранные строки.

Выбор шаблона отчета

Нужные шаблоны отчетов можно выбрать на вкладке **Report Templates** в проводнике ChemStation. В дереве навигации отображаются все шаблоны отчетов из каталога chem32/repstyle.

Предварительный просмотр отчета

Итоговый отчет всегда определяется выбором данных и шаблоном отчета. Поэтому, как только выбран один или несколько файлов данных и загружен шаблон отчета, ChemStation формирует соответствующий отчет и выводит его на экран для предварительного просмотра.

Отчет можно отправить на принтер или сохранить в виде файла (в формате PDF, XLS, DOC или TXT). Кроме того, если используется центральное хранилище данных, отчет можно передать прямо в центральный репозиторий.

Возможные рабочие процессы просмотра

Экран **Review** можно использовать, например, в следующих рабочих процессах/

- Загрузите последовательность и выберите все ее файлы данных. Загрузите шаблон отчета и сформируйте *сводный отчет о последовательности*.
- Сформировав сводный отчет о последовательности, загрузите другой шаблон отчета. Просмотрите те же данные, используя *другой макет отчета*.
- Загрузите последовательность и выберите только подмножество ее файлов данных. Загрузите шаблон отчета и сформируйте сводный отчет о последовательности *только для части последовательности*.

- Загрузив подмножество файлов данных, добавьте другие файлы данных (из последовательности или подборки отдельных проб). Загрузите шаблон отчета и сформируйте *перекрестный отчет для проб* или *перекрестный отчет для последовательностей*.

6 **Понятия анализа и просмотра данных**

Просмотр



7 Калибровка

Определение терминов	178
Типы калибровки	179
Одноуровневая калибровка	179
Многоуровневая калибровка	181
Диапазоны калибровки	182
Аппроксимация калибровочных кривых	182
Обработка начала координат	183
Таблица калибровки	187
Суммирование пиков	188
Неизвестные пробы	189
Перекалибровка	190
Что такое перекалибровка?	190
Для чего нужна перекалибровка?	190
Перекалибровка вручную	191
Перекалибровки с суммированием пиков	191
Способы перекалибровки	191
Перекалибровка неидентифицированных пиков	192

В этой главе описываются понятия калибровки.



Определение терминов

Калибровка	Калибровка — это процесс определения факторов отклика, используемых для расчета абсолютных концентраций компонентов путем ввода специально подготовленных калибровочных образцов. Таблица калибровки используется также для идентификации.
Соединение	Химическому соединению могут соответствовать несколько пиков, при калибровке по нескольким сигналам, как правило - по одному пику на сигнал. При калибровке одного сигнала соединению соответствует один пик.
Уровень калибровки	Уровень калибровки включает в себя точки калибровки для одной концентрации калибровочного образца. В случае калибровки нескольких сигналов точки калибровки могут быть распределены по нескольким сигналам.
Точка калибровки	Под точкой калибровки понимают отношение количество/сигнал для пика на калибровочной кривой.
Калибровочный образец	<p>Калибровочный образец, называемый также калибровочным стандартом или стандартной смесью, представляет собой пробу с известным количеством соединения, количественный анализ которого нужно провести. В программном обеспечении под калибровочным образцом понимается ввод пробы из вials с калибровочным образцом.</p> <p>Калибровочные образцы можно приобрести у поставщиков химических реактивов или приготовить, используя точно измеренное количество чистого соединения. Обычно количество соединения в калибровочном образце выражают как концентрацию нг/мкл.</p>

Типы калибровки

В системе ChemStation предусмотрена калибровка двух типов — одноуровневая и многоуровневая.

Одноуровневая калибровка

Калибровочная кривая, показанная на Рис. 40 на странице 179, содержит одну точку, т. е. один уровень. В случае одноуровневой калибровочной кривой предполагается, что отклик детектора будет линейным по всему рабочему диапазону концентраций анализируемых проб. Фактор отклика для данного пика компонента выражается в виде обратного значения угла наклона линии калибровочной кривой, соединяющей точку калибровки и начало координат. Недостатком одноуровневой калибровки является то, что отклик детектора на концентрацию пробы предполагается линейным и кривая проходит через начало координат графика зависимости отклика от концентрации. Это не всегда справедливо и может привести к неточным результатам.

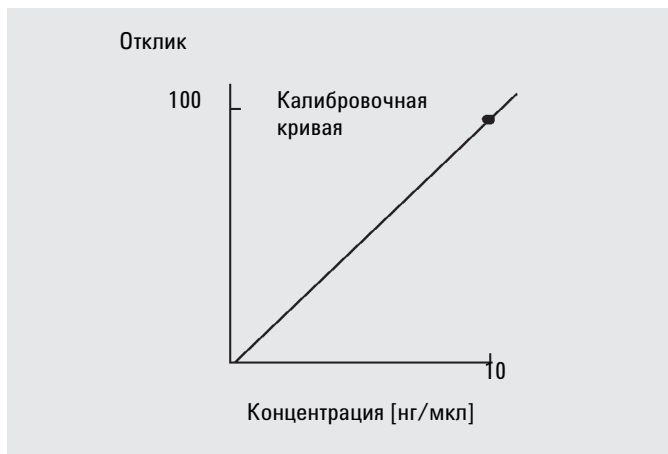


Рисунок 40 Кривая одноуровневой калибровки

Для получения точных количественных результатов у калибровочной кривой должно быть не менее двух уровней. Эти уровни должны заключать в скобки количества, которые предполагается обнаружить в неизвестных пробах.

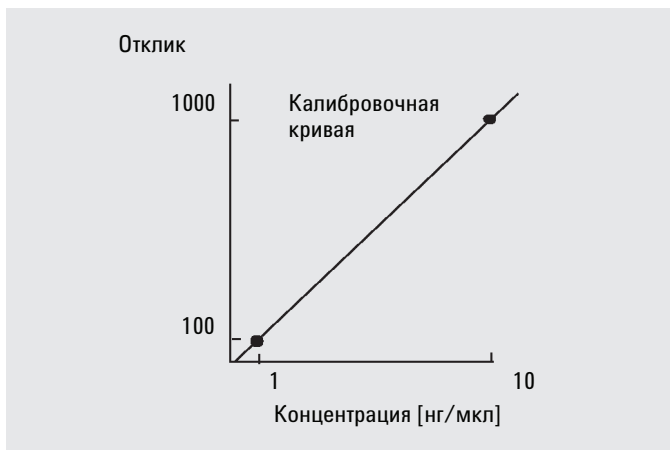


Рисунок 41 Кривая двухуровневой калибровки

Например, если требуется количественно оценить соединение, концентрация которого в неизвестных пробах ожидается в диапазоне 1–10 нг/мкл, то калибровочная кривая должна иметь не менее двух уровней, как показано на [Рис. 41](#) на странице 180.

Количественные ограничения

ChemStation позволяет задать допустимые диапазоны количественного анализа в абсолютных количествах каждого компонента.

Многоуровневая калибровка

Многоуровневую калибровку можно использовать, когда предположение о линейном отклике компонента будет не вполне точным или для подтверждения линейности диапазона калибровки. Каждый уровень калибровки соответствует калибровочному образцу с определенной концентрацией компонентов. Калибровочные образцы следует готовить таким образом, чтобы концентрация каждого компонента менялась по всему диапазону ожидаемых концентраций в неизвестных пробах. Такой подход позволяет добиться изменения отклика детектора в зависимости от концентрации и, соответственно, рассчитать факторы отклика.

Эта многоуровневая калибровочная кривая имеет три уровня и линейно аппроксимируется через начало координат. Метод линейной аппроксимации через начало координат схож с калибровкой одноточечным методом. Предполагается линейная зависимость отклика детектора на концентрацию. Отличие между этими двумя типами калибровки состоит в том, что при линейной аппроксимации наклон отклика детектора можно определить с помощью наилучшей аппроксимации по нескольким точкам, по одной на каждый уровень.

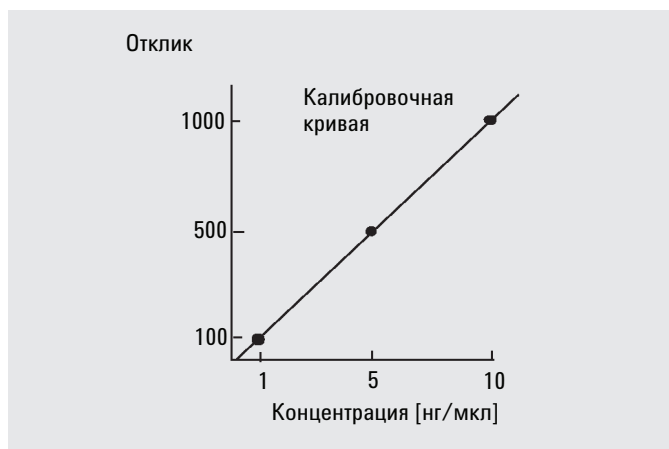


Рисунок 42 Многоуровневая калибровочная кривая с тремя уровнями

Табл. 18 на странице 182 демонстрирует примерный вид соответствующей таблицы калибровки, в которую сведены данные, использованные для создания этой кривой.

Таблица 18 Таблица калибровки

Уровень	Содержание (нг/мкл)	Отклик (рассчитанная площадь)
1	1	100
2	5	500
3	10	1000

В данном примере калибровочные образцы, использованные для формирования трех уровней, обозначены как 1, 2 и 3.

Диапазоны калибровки

Каждая многоуровневая калибровка действительна в пределах диапазона концентраций, используемых в калибровочных образцах. Экстраполяция калибровочной кривой, особенно нелинейной, в лучшем случае будет аппроксимацией. Допустимый диапазон калибровки для каждого соединения можно задать в диалоговом окне **Compound Details**. Каждый диапазон для этого соединения можно выразить в нижнем и верхнем пределах. В случае превышения этих пределов в отчет добавляется комментарий.

Аппроксимация калибровочных кривых

Для работы с многоуровневой калибровкой имеются разнообразные расчеты аппроксимации кривой.

- Кусочно-линейная
- Линейная
- Логарифмическая
- Степенная
- Экспоненциальная
- Квадратичная
- Кубическая
- Среднее значение (отклик/количество)

Нелинейная аппроксимация

В некоторых случаях отклик детектора на изменения концентрации в пробе не является линейным. Для анализов этого типа калибровка методом линейной регрессии не подходит, и следует использовать расчет многоуровневой калибровки.

Обработка начала координат

Существуют четыре способа обработки начала координат при построении кривой отклика:

- игнорировать начало координат;
- включить начало координат;
- принудительно включить начало координат;
- соединить с началом координат.

Чтобы принудительно включить начало координат в калибровочную кривую, точки калибровки зеркально отражаются относительно начала координат из первого квадранта в третий квадрант. Использование всех точек для расчета регрессии обеспечивает прохождение получающейся в результате калибровочной кривой через начало координат. Эта процедура поясняется на [Рис. 43](#) на странице 184.

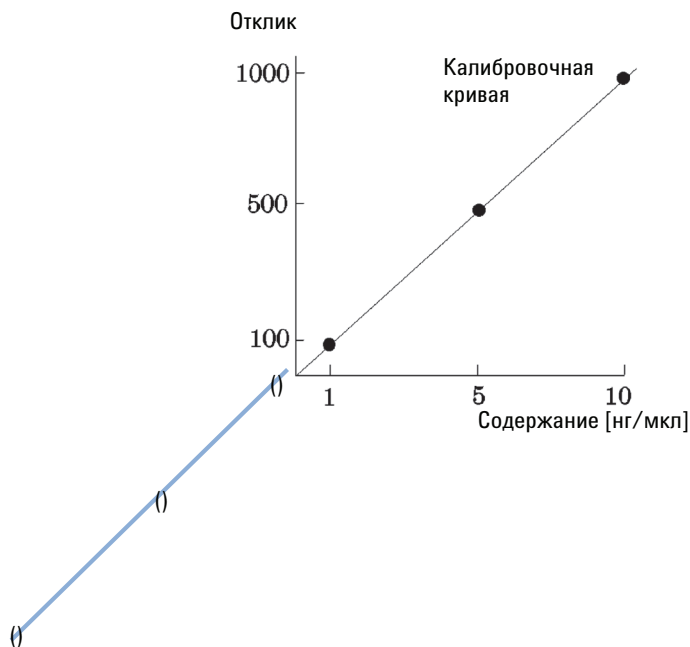


Рисунок 43 Принудительное включение начала координат

Дальнейшие сведения об аппроксимации калибровочной кривой и применении начала координат см. в файле *онлайн-справки*.

Присвоение веса точкам калибровки

При настройке калибровочной кривой, используемой по умолчанию, можно указать относительный вес (или важность) различных точек калибровки, используемых для построения кривой.

Можно выбрать один из следующих вариантов присвоения весов:

Вес.	Описание.
Равный.	У всех точек калибровки на кривой одинаковый вес.
Линейный (колич.).	Точка калибровки с количеством x обладает весом $1/x$, нормализованным относительно наименьшего количества, чтобы максимальный весовой коэффициент был равен 1. Нормализация выполняется путем умножения веса на наименьшее количество. Например, вес точки калибровки с количеством x равен $(1/x) \times a$, где a — наименьшее количество калибруемого соединения, подготовленного в калибровочных стандартах. Если начало координат включено в кривую, ему присваивается среднее значение весов остальных точек калибровки.
Линейный (отклик).	Точка калибровки с откликом x обладает весом $1/x$, нормализованным относительно наименьшего отклика, чтобы максимальный весовой коэффициент был равен 1. Нормализация выполняется путем умножения веса на наименьший отклик. Например, вес точки калибровки с откликом y равен $(1/y) \times i$, где i — отклик, соответствующий наименьшему количеству калибруемого соединения, подготовленного в калибровочных стандартах. Если начало координат включено в кривую, ему присваивается среднее значение весов остальных точек калибровки.
Квадратичный (колич.).	Точка калибровки с количеством x обладает весом $1/x^2$, нормализованным относительно наименьшего количества, чтобы максимальный весовой коэффициент был равен 1. Нормализация выполняется путем умножения веса на наименьшее количество. Например, вес точки калибровки с количеством x равен $(1/x^2) \times a$, где a — наименьшее количество калибруемого соединения, подготовленного в калибровочных стандартах.

Вес.	Описание.
Квадратичный (отклик).	Точка калибровки с откликом y обладает весом $1/y^2$, нормализованным относительно наименьшего отклика, чтобы максимальный весовой коэффициент был равен 1. Нормализация выполняется путем умножения веса на наименьший отклик. Например, вес точки калибровки с откликом y равен $(1/y^2) \times b^2$, где b — отклик, соответствующий наименьшему количеству калибруемого соединения, подготовленного в калибровочных стандартах.
Количество калибровок.	Точке калибровки присваивается вес в соответствии с количеством ее перекалибровок. Нормализация не выполняется.

Квадратичные веса точек калибровки, например, можно использовать для корректировки разброса в точках калибровки. Они гарантируют, что вес точек калибровки, расположенных ближе к началу координат (обычно для них - более точные измерения), будет выше, чем у точек калибровки, удаленных от начала координат (в них возможен разброс).

При выборе способа присвоения весов точкам калибровки исходите из требований, предъявляемых методом.

Таблица калибровки

Таблица калибровки задает преобразования площадей или высот пиков в единицы измерения, определяемые в соответствии с выбранной процедурой расчета. Она содержит список времен удерживания/миграции, полученных в результате выполнения калибровки. Эти времена удерживания/миграции сравниваются с временами удерживания/миграции пиков, полученными в ходе выполнения анализа пробы. В случае совпадения считается, что пик пробы представляет тот же самый компонент, что и пик в таблице калибровки. Во время анализа или формирования отчета количества, введенные для каждого пика, используются для расчета количеств с использованием процедуры, выбранной для отчета. Тип и количество информации, необходимые для создания таблицы калибровки, меняются в зависимости от типа требуемой процедуры расчета.

Для создания таблицы калибровки требуется следующая информация:

- время удерживания/миграции для каждого пика компонента калибровочной смеси;
- количество каждого компонента, использованного для приготовления калибровочной смеси, выраженное в одинаковых единицах измерения.

Суммирование пиков

Для некоторых областей применения в нефтехимической и фармацевтической промышленности предусмотрена таблица суммарных пиков, позволяющая повысить эффективность работы системы с помощью следующих функций:

- суммирование площадей пиков, лежащих в пределах диапазона, указанного пользователем;
- суммирование площадей диапазона пиков и выполнение расчетов с использованием единого множителя;
- суммирование площадей всех пиков с одинаковым именем.

Таблица суммарных пиков аналогична стандартной таблице калибровки, но с некоторыми отличиями. Как и таблица калибровки, она связана с текущим методом.

Примечание

Прежде чем создавать таблицу суммарных пиков, необходимо создать таблицу калибровки для анализа.

Неизвестные пробы

Неизвестная проба — это проба с неизвестным содержанием соединения, которое нужно определить количественно.

Для того чтобы выяснить, сколько вещества содержится в неизвестной пробе, необходимо:

- создать калибровочную кривую для соединения;
- ввести аликвоту неизвестной пробы и выполнить анализ точно таким же способом, что и для калибровочного образца;
- по сигналу определить отклик, представляющий собой площадь или высоту пика, обусловленного неизвестным количеством соединения;
- применить калибровочную кривую для расчета количества соединения в неизвестной пробе.

Например, если площадь пика неизвестной пробы равна 500, то с помощью калибровочной кривой, показанной на [Рис. 44](#) на странице 189, можно установить, что количество соединения в неизвестной пробе составляет 5 нг/мкл.

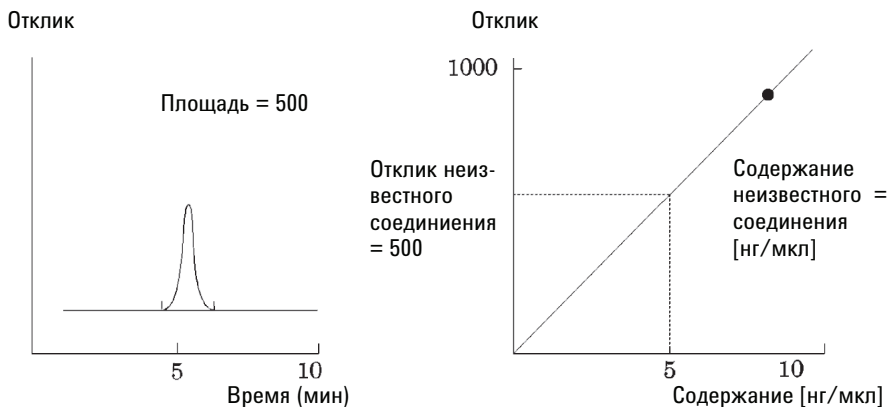


Рисунок 44 Сигнал неизвестной пробы и калибровочная кривая

Перекалибровка

Что такое перекалибровка?

Перекалибровка — это процедура, к которой прибегают, когда требуется обновить уровень калибровочной кривой. Во время перекалибровки выполняется анализ другой пробы, содержащей те же самые калибровочные соединения, что и исходная проба, и, самое главное, в тех же количествах. В результате выполнения анализа калибровочного образца получают обновленные факторы отклика и времена удерживания/миграции. По желанию можно также усреднить факторы отклика по нескольким выполнениям анализа калибровочного образца, чтобы эти факторы отклика имели одинаковый вес.

Для чего нужна перекалибровка?

Из-за изменчивости условий хроматографии большинство калибровок действительны в течение ограниченного времени. Перекалибровка необходима для поддержания точности анализа. Предположим, например, что создана таблица калибровки для соединения кофеина, которая используется всякий раз, когда нужно количественно оценить пробы, содержащие кофеин. Рано или поздно колонку/капилляр придется заменить. Несмотря на то что для замены используется колонка/капилляр точно такого же типа, она не будет вести себя точно так же, как предыдущая колонка/капилляр, с помощью которой первоначально создавалась таблица калибровки для кофеина. Поэтому, чтобы обеспечить согласованность, следует перекалибровать уровни в таблице калибровки, прежде чем использовать новую колонку/капилляр для анализа проб, содержащих кофеин в неизвестных количествах. При таком подходе количественный анализ проб выполняется в одинаковых условиях системы.

Перекалибровка вручную

Можно вручную ввести сведения о калибровке пика и нормализовать таблицу калибровки с помощью переключателя ручной настройки в диалоговом окне таблицы калибровки. Как правило, новый метод калибровки получают путем выполнения анализа стандартной калибровочной смеси, в результате которого создается таблица калибровки, и вводом количеств для всех калиброванных пиков с целью получения факторов отклика. Этот подход неэффективен в некоторых областях применения. Например, к такому выводу пришли в нефтехимической промышленности, где некоторые соединения анализировали на протяжении многих лет, и факторы отклика для многих соединений и детекторов легкодоступны.

Таблицу калибровки создают вручную. Для этого в нее вводят пики и их факторы отклика, повторно калибруют метод с использованием стандарта, содержащего хотя бы один контрольный пик отклика, и обновляют % разницы.

Чтобы использовать определенный пик в качестве исходных условий для расчета отношений времен удерживания, можно задать этот пик эталоном отношения времен удерживания. После чего этот пик служит эталоном для всех пиков с таким же номером эталона отношения времен удерживания (RT Ratio Ref).

Перекалибровки с суммированием пиков

Прежде чем начнется сама перекалибровка, в таблице суммарных пиков метода обновляются диапазоны времени удерживания/миграции. Такой способ перекалибровки сумм пиков применяется для того, чтобы учесть разницу в расчетах времени.

Способы перекалибровки

В программном обеспечении ChemStation предусмотрены два способа перекалибровки. Перекалибровка может производиться в интерактивном режиме или автоматически во время выполнения последовательности автоматического анализа. Интерактивная

перекалибровка означает, что вы непосредственно выполняете перекалибровки с помощью программного обеспечения ChemStation после ввода одного или нескольких калибровочных образцов. Перекалибровка с использованием последовательности означает, что вы указываете, когда должны происходить перекалибровки, а программное обеспечение автоматизации осуществляет их. Дополнительные сведения см. в разделе [“Автоматическая повторная калибровка”](#) на странице 129.

О том, как выполнять перекалибровку с помощью программного обеспечения, см. в разделе инструкций справочной системы.

Перекалибровка неидентифицированных пиков

Существуют три способа перекалибровки неидентифицированных пиков.

No Recalibration

Если результаты интегрирования не позволяют идентифицировать пик в таблице калибровки, калибровка прерывается. Когда это происходит в последовательности, последовательность также прерывается.

Partial Recalibration

Эта функциональная возможность позволяет калибровать повторно только идентифицированные пики. Если пики отсутствуют, то вместо прерывания калибровки в отчет добавляется комментарий об отсутствии пиков.

Recalibration of all Retention/Migration Times

Эта функциональная возможность позволяет повторно калибровать время удерживания/миграции всех идентифицированных и неидентифицированных пиков. Для этого используются времена удерживания/миграции идентифицированных пиков. Факторы отклика неидентифицированных пиков не обновляются.



8

Составление отчетов

Что такое отчет?	194
Составление классических и интеллектуальных отчетов	196
Последствия активации составления интеллектуальных отчетов	196
Составление интеллектуальных отчетов	197
Преимущества составления интеллектуальных отчетов	197
Редактор шаблонов отчетов для составления интеллектуальных отчетов	198
Хранение шаблонов отчетов	202
Хранение созданных отчетов	204
Шаблоны отчетов в центральном хранилище данных	205
Составление классических отчетов	206
Составление отчетов о результатах	206
Количественные результаты	208
Включение в отчет значений настраиваемых полей	209
Стили отчетов	209
Другие параметры стиля отчета	212
Составление сводного отчета о последовательности	213
Форматы файлов отчетов	217

В этой главе описаны понятия составления интеллектуальных отчетов и составления классических отчетов.



Что такое отчет?

Отчет может содержать количественные и качественные сведения об анализируемой пробе. Отчет можно распечатать, отобразить на экране или сохранить в электронном файле. Он может содержать сведения о пиках, обнаруженных в ходе выполнения анализа, и графики полученных сигналов.

Отчеты для разных целей

Можно задать отчеты, которые служат для разных целей во время сбора и просмотра данных:

- *Сводный отчет о последовательности* определяется на вкладке **Sequence Output** в диалоговом окне **Sequence Parameters**. Этот отчет создается системой ChemStation автоматически по завершении последовательности сбора данных или повторной обработки последовательности.
- *Отчет по одному вводу пробы* задается в диалоговом окне **Specify Report**. Этот отчет создается для каждой отдельной пробы во время сбора данных последовательности или повторной обработки последовательности.

При составлении интеллектуальных отчетов создаются шаблоны для различных типов отчетов, зависящие от назначения отчета. Дополнительные сведения см. в разделе “**Типы отчетов**” на странице 198.

Место назначения для отчета

Отчет можно отправить в следующие места назначения:

- **Screen**

Отчет (включая текст и графику) отображается на экране компьютера в окне предварительного просмотра отчетов, откуда его можно распечатать.

- **Printer**

Отчет, содержащий текст и графику, распечатывается на выбранном в данный момент принтере.

- **File**

Отчет сохраняется в файл, например файл в формате Adobe PDF.

Составление классических и интеллектуальных отчетов

В системе хроматографических данных Agilent OpenLAB CDS можно выбрать тип составления отчетов, который будет использоваться: *составление классических отчетов*, которое уже использовалось в ранних версиях ChemStation, или *составление интеллектуальных отчетов*, обеспечивающее мощный стандартизованный язык определения отчетов и улучшенные функции просмотра. Эти два типа составления отчетов описаны в следующих разделах.

Последствия активации составления интеллектуальных отчетов

Если требуется использовать составление интеллектуальных отчетов, то его нужно включить в конфигурации прибора на панели управления OpenLAB.

Активация составления интеллектуальных отчетов имеет следующие последствия для системы ChemStation.

- На экране **Report Layout** отображается редактор шаблонов отчетов для составления интеллектуальных отчетов.
- Экран **Review** тоже виден.
- В диалоговом окне **Sequence Parameters** можно выбрать составление либо классических, либо интеллектуальных отчетов.
- В диалоговом окне **Specify Report** можно выбрать составление либо классических, либо интеллектуальных отчетов.

Составление интеллектуальных отчетов

Преимущества составления интеллектуальных отчетов

Составление интеллектуальных отчетов обладает следующими преимуществами:

- Можно использовать экран **Review**.
- Значительная часть функциональных возможностей, доступных в различных настройках и ряде диалоговых окон для составления классических отчетов, теперь реализована в шаблонах отчетов. Шаблоны отчетов можно создавать и редактировать на экране **Report Layout**, содержащем новый редактор шаблонов отчетов для составления интеллектуальных отчетов. Редактор шаблонов отчетов предоставляет несколько мощных функций.
 - Доступ ко всем данным результатов, сформированных системой ChemStation, посредством выбора соответствующего поля данных.
 - Создание собственных выражений для выполнения расчетов с использованием полей данных. Использование любого допустимого выражения языка Microsoft Visual Basic.
 - Создание выражений для расчетов с использованием настраиваемых полей системы ChemStation.
 - Маркировка результатов: создание выражений для выделения определенных результатов в зависимости от их значения.
 - Фрагменты: предоставление редактором шаблонов отчетов так называемых *фрагментов*, которые можно вставлять в шаблон отчета с помощью операции перетаскивания.
- Можно создать описания шаблонов отчетов с помощью инструмента документации шаблонов отчетов.
- Можно включать в отчет следующие значения, предписанные Европейской фармакопеей (в случае составления классических отчетов доступно также отношение максимума к минимуму; подробнее об обязательных полях см. в *справочном руководстве*).
 - отношение сигнал-шум;
 - относительное удерживание;
 - относительное время удерживания.

Редактор шаблонов отчетов для составления интеллектуальных отчетов

Типы отчетов

Можно создать отчеты различных типов. В зависимости от типа отчета в шаблоне доступны различные поля данных и элементы отчета группируются по-разному.

Существуют отчеты следующих типов:

- **Single Injection**

В формируемом отчете отображаются элементы шаблона отдельно для каждого ввода пробы в текущей области действия данных. Данные можно отображать по каждому вводу пробы, но нельзя сравнивать результаты анализа для разных вводов пробы в одной таблице или матрице.

- **Single Sequence Summary**

В формируемом отчете отображаются элементы шаблона отдельно для каждой последовательности в текущей области действия данных. Результаты анализа для разных вводов пробы можно сравнивать в одной таблице или матрице, но не с результатами из других последовательностей.

- **Cross-Sequence Summary**

В отчете этого типа данные *не* группируются автоматически. Поэтому необходимо уделять больше внимания группировке элементов отчета, но зато можно создать элементы отчета для сравнения данных из разных последовательностей.

Формат шаблона

Все шаблоны отчетов основаны на языке определения отчетов (Report Definition Language, RDL), который является стандартизованным XML-форматом, предоставляемым корпорацией Майкрософт.

Шаблоны отчетов можно создавать в редакторе шаблонов отчетов (RTE) или в среде SQL Server Business Intelligence Development Studio (BI Studio) от корпорации Майкрософт:

- *RTE* предоставляет простой в использовании интерфейс, помогающий создавать шаблоны отчета всего за несколько шагов. Он подде-

рживает все типы элементов отчета и большинство соответствующих параметров конфигурации.

В RTE невозможно редактировать шаблоны, созданные в среде BI Studio. Если нужно отредактировать такие шаблоны в RTE, обращайтесь, пожалуйста, в отдел обслуживания клиентов компании Agilent.

- *BI Studio* обеспечивает полный набор функций. Однако для работы в среде BI Studio необходимы углубленные знания в области разработки шаблонов. Дополнительные сведения см. в *Руководстве для разработчиков шаблонов отчетов (G4635-90007)*. Это руководство входит в комплект приложения OpenLAB ECM Intelligent Reporter. Чтобы получить экземпляр этого руководства, обратитесь в компанию Agilent. В руководстве содержатся также подробные описания шаблонов отчетов Agilent, поставляемых вместе с приложением OpenLAB ECM Intelligent Reporter. Эти шаблоны разработаны специально для использования в среде BI Studio и включают в себя большинство расширенных функциональных возможностей, недоступных в RTE.

В среде BI Studio можно редактировать любой шаблон отчета, где бы он ни был создан — в RTE или в BI Studio.

Поля данных

Все данные результатов, формируемые системой ChemStation во время сбора данных, доступны. Для каждого значения можно выбрать соответствующее поле данных, где это значение хранится. В шаблоне отчета поля данных можно расположить в соответствии с потребностями. Доступные поля данных упорядочены по следующим категориям:

- последовательность;
- проба;
- ввод;
- сигнал;
- соединение;
- пик;
- калибровочная кривая;
- прибор;

- файл;
- проект.

Элементы отчета

В зависимости от потребностей в шаблон отчета можно добавить различные элементы отчета. Для каждого элемента отчета можно настроить некоторые свойства, например формат шрифта, цвет фона, выражения и т. д. Доступны следующие элементы отчета:

- текстовые поля;
- поля данных;
- таблицы;
- матрицы;
- составные группы;
- изображения;
- хроматограммы;
- калибровочные кривые;
- спектры;
- графики;
- сведения о методе.

Фрагменты

Редактор шаблонов отчетов предоставляет фрагменты, многочисленные предварительно настроенные элементы отчета или группы элементов отчета, которые можно вставлять в шаблон отчета с помощью операции перетаскивания.

В число этих фрагментов входят, например, предварительно настроенные таблицы результатов анализа соединений или пригодности системы, хроматограммы для построения графика с одним или несколькими сигналами или контрольные таблицы для определения точности калибровки или стабильности времени удерживания. Фрагменты можно использовать в качестве отправной точки и настраивать их в соответствии с потребностями.

Настраиваемый расчет

В редакторе шаблонов отчетов можно отображать значения полей данных в том виде, в каком они были сформированы системой ChemStation, или рассчитывать новые значения для различных целей. Можно создать выражения, используя имеющиеся поля данных или настраиваемые поля.

Значения можно сохранить как переменные и получать к ним доступ из последующего элемента отчета в шаблоне.

В редакторе шаблонов отчетов предусмотрен редактор выражений, помогающий создавать допустимые выражения. Все выражения основаны на языке Microsoft Visual Basic.

Условное форматирование

Можно настроить некоторые свойства поля или ячейки в зависимости от значений, получаемых с помощью выражения. Например, если количество соединения отображается, то можно создать условие, согласно которому это количество будет показано на красном фоне, если оно превысит определенную величину.

Демонстрационные данные

При разработке нового шаблона отчета на экране Report Layout (Макет отчета) система ChemStation предоставляет демонстрационные данные, которые отображаются в редакторе шаблонов отчетов во время редактирования или предварительного просмотра шаблона. Демонстрационные данные соответствуют набору данных (последовательность или единичные выполнения анализа), выбранному в данный момент в таблице навигатора на экране **Data Analysis**. Если разрабатывается шаблон сводного отчета о последовательности, то необходимо загрузить последовательность на экране анализа данных и выбрать подмножество проб. Если разрабатывается шаблон отчета по одному вводу пробы, достаточно выбрать только одну пробу на экране анализа данных.

Хранение шаблонов отчетов

Система ChemStation предоставляет несколько заранее заданных шаблонов отчетов. Эти шаблоны, используемые по умолчанию, находятся в каталоге chem32\repstyle.

В случае последовательностей шаблоны отчетов, используемые для сводных отчетов о последовательности и отчетов по одному вводу пробы, находятся в наборе результатов на том же уровне, что и методы последовательностей. На уровне файла данных последовательности шаблоны отчетов не хранятся.

В случае отдельных проб шаблон отчета находится в файле данных.

Диалоговое окно поиска шаблонов

В случае поиска шаблонов отчетов в диалоговом окне **Sequence Parameters** или диалоговом окне **Specify Report** можно синхронизировать шаблоны в каталоге шаблонов по умолчанию и в наборе результатов.

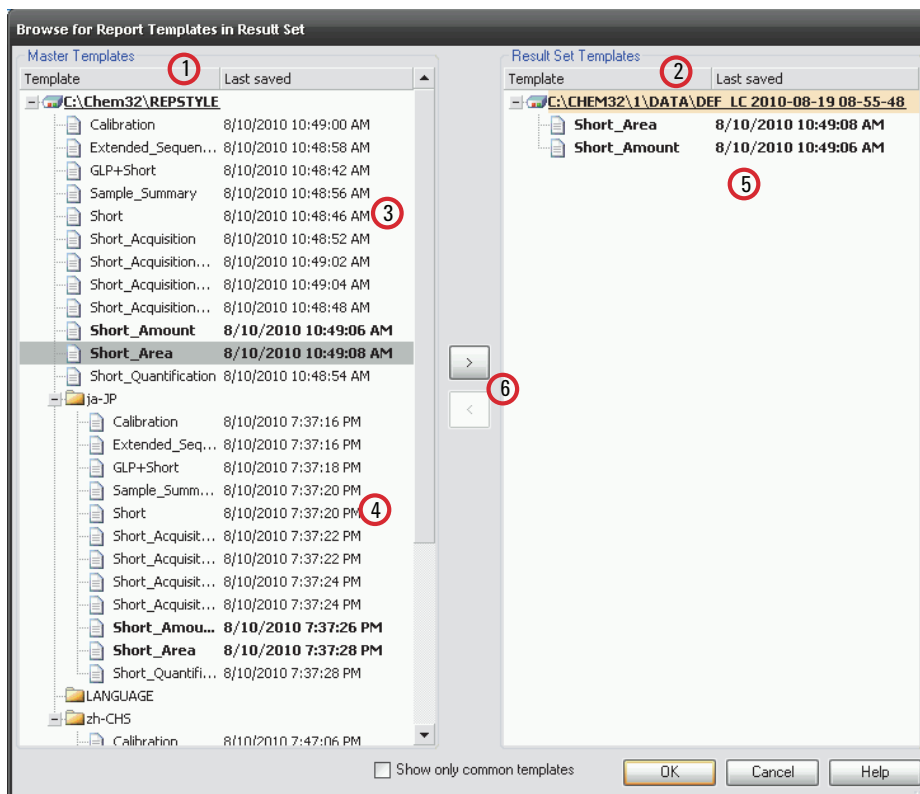


Рисунок 45 Диалоговое окно **Browse for Report Templates in Result Set**

- 1 Слева отображаются шаблоны из каталога шаблонов по умолчанию (chem32/repstyle).
- 2 Справа отображаются шаблоны из набора результатов, загруженного в данный момент.
- 3 Для каждого шаблона указана дата его последнего сохранения. Во всплывающей подсказке даты отображается последняя запись о шаблоне в журнале.
- 4 Шаблоны могут также храниться в подпапка каталога chem32/repstyle.

- 5 Шаблоны, общие для набора результатов и каталога методов по умолчанию, выделены жирным шрифтом. Шаблоны сравниваются только по имени.
- 6 Шаблоны можно копировать из каталога шаблонов по умолчанию в набор результатов путем перетаскивания или с помощью кнопки >.

Управление файлами данных, когда создание уникальной папки выключено

Когда используется режим с выключенным созданием уникальной папки, шаблоны для сводных отчетов о последовательности или отчетов по одному вводу пробы всегда берутся из каталога шаблонов по умолчанию (chem32\repstyle) по ссылке.

Хранение созданных отчетов

Формирование имен файлов для отчетов по одному вводу пробы

При назначении имени файла отчету по одному вводу пробы в диалоговом окне **Specify Report** можно использовать следующие токены:

- <Date> — текущая дата;
- <Time> — текущее время;
- <SeqN> — имя файла последовательности (для одной пробы будет «_»);
- <Cont> — имя набора результатов (для одной пробы будет «_»);
- <SamN> — имя пробы;
- <Lims> — идентификатор границ диапазона;
- <InjD> — дата и время ввода пробы;
- <File> — имя файла данных;
- <SLoc> — местоположение пробы.

Формирование имен файлов для сводных отчетов о последовательности

При назначении имени файла сводному отчету о последовательности на вкладке **Sequence Output** в диалоговом окне **Sequence Parameters** можно использовать следующие токены:

- <Date> — текущая дата;
- <Time> — текущее время;
- <SeqN> — имя файла последовательности;
- <Cont> — имя набора результатов.

Шаблоны отчетов в центральном хранилище данных

Если используется центральная система хранилища данных, шаблоны отчетов рассматриваются как отдельный тип документа. Шаблоны можно передать в центральное хранилище данных, загрузить из центрального хранилища данных или обновить все локальные шаблоны последней версией из центрального хранилища данных.

Составление классических отчетов

Составление отчетов о результатах

Доступны два типа отчетов:

- отчет без калибровки, в котором отклик детектора не скорректирован;
- отчет с калибровкой, в котором приводятся результаты с поправкой на разницу в отклике детектора на различные компоненты пробы.

Отчеты без калибровки

Отчеты без калибровки содержат данные по параметрам **Area%** и **Height%**. Эти отчеты используются главным образом для подготовки отчетов с калибровкой. Они могут оказаться полезными в качестве итогового отчета, если количества соединений, необходимые для получения отклика (площади или высоты пика) устройства на искомые соединения, аналогичны.

Отчеты с калибровкой

В отчетах с калибровкой скорректирована разница в отклике детектора на соединения, по которым составляется отчет. Необходимо выполнить анализ одного или нескольких калибровочных образцов, содержащих известные количества включаемых в отчет соединений, в тех же самых условиях, что и при выполнении анализа неизвестной пробы. С помощью данных интегрирования этих калибровочных образцов составляется таблица калибровки. Она представляет собой список времен удерживания/миграции, количеств и откликов, которые используются при формировании отчета. Отчеты с калибровкой основываются на двух процедурах калибровки, называемых внешним и внутренним стандартом.

Отчет с использованием внешнего стандарта

Отчет с использованием внешнего стандарта (ESTD) содержит список результатов в выбранных единицах измерения либо виде процентного содержания каждого соединения в общем количестве всех

присутствующих соединений. Процедура с внешним стандартом требует точного знания относительного введенного объема калибровочного образца и неизвестной пробы. Достоверность отчета с использованием внешнего стандарта ограничена воспроизводимостью ввода пробы и любыми другими факторами, которые могут изменяться от пробы к пробе.

Отчет с использованием внутреннего стандарта

Недостатки процедуры с внешним стандартом можно преодолеть с помощью методики внутреннего стандарта. Точно известное количество (необязательно одинаковое) внутреннего стандарта добавляется как в калибровочный образец (образцы), так и в неизвестную пробу. Отклик каждого искомого соединения делится на отклик внутреннего стандарта с целью получения отношения откликов. Калибровочные кривые представляют собой график зависимости этого отношения откликов от отношения количеств, и с помощью этой информации рассчитываются соответствующие результаты, включаемые в отчет. Таким образом, исключаются случайные ошибки, связанные с объемом введенной пробы или незначительными изменениями в хроматографической/электрофоретической системе, в одинаковой степени влияющими на все вещества. В отчете с использованием внутреннего стандарта (ISTD) приводится список результатов в выбранных единицах измерения.

Отчет с использованием контрольных таблиц

В отчете с использованием контрольных таблиц отслеживается один результат, получаемый при многократном выполнении анализа определенного откалиброванного соединения. Функцию **Control Chart** устанавливают после того, как система ChemStation готова к работе. Методы, использующие эту функцию, передают отслеживаемый результат на лист приложения Microsoft Excel после каждого выполнения анализа. После этого отчет распечатывают с помощью приложения Excel.

Количественные результаты

Тип отчета определяется именем метода расчета, использованного для его составления, например отчет ISTD. Каждый тип кратко описан ниже. Расчеты для каждого отчета приведены в разделе “Количественные результаты” на странице 208.

Area% — создание простейшего отчета, для которого не требуется данных калибровки, т. к. разница в отклике детектора на компоненты пробы не корректируется. Отчет по % площади особенно полезен при разработке таблицы калибровки для работы с другими вариантами отчетов. Этот отчет подходит для анализов, когда разница в отклике детектора на компоненты незначительная.

Height% — создание отчета, аналогичного отчету по % площади, только вместо площади пика в расчетах используется высота пика.

Norm% — создание отчета, в котором каждый компонент представлен в виде процентного содержания в общем количестве всех присутствующих компонентов. Перед расчетом процентного содержания каждого компонента пики корректируются относительно отклика детектора.

ESTD — создание отчета о фактическом количестве каждого соединения в любых единицах измерения на выбор. Количества рассчитываются с помощью предварительно созданной таблицы калибровки. Для использования внешнего стандарта необходимо знать объем введенной пробы калибровочной смеси.

ESTD% — создание отчета об относительном количестве каждого вещества в виде процента от введенной пробы. Количества рассчитываются с помощью предварительно созданной таблицы калибровки. Для использования внешнего стандарта необходимо знать объем введенной пробы калибровочной смеси.

ISTD — создание отчета о фактическом количестве каждого вещества. Количества рассчитываются с помощью предварительно созданной калибровочной кривой. Так как внутренний стандарт используется и в пробе, и в калибровочной смеси, знать и контролировать объем введенной пробы не требуется. Кроме того, благодаря этому корректируются любые изменения рабочих характеристик прибора между выполнениями анализа.

ISTD% — создание отчета об относительном количестве каждого вещества в виде процента от введенной пробы. Так как внутренний стандарт используется и в пробе, и в калибровочной смеси, знать и контролировать объем введенной пробы не требуется. Кроме того, благодаря этому корректируются любые изменения рабочих характеристик прибора между выполнениями анализа.

Включение в отчет значений настраиваемых полей

В отчет можно добавлять значения настраиваемых полей, привязанных к определенной пробе в соответствии с ее методом сбора данных. Настраиваемые поля пробы перечисляются в конце заголовка отчета, содержащего общие сведения о пробе. Настраиваемые поля соединений находятся в конце отчета.

Стили отчетов

По желанию можно добавить сигнал в любой стиль отчета, установив соответствующий флажок в диалоговом окне определения отчета.

Существуют следующие стили отчетов:

- **None** — отчет не будет содержать текста. Хроматограмма будет отображаться только в том случае, если установлен флажок Add Chromatogram Output (Добавлять полученную хроматограмму).
- **Short** — содержит в текстовом виде количественные результаты для всех интегрированных сигналов, настроенных в диалоговом окне сведений о сигналах (только для ЖХ) или в диалоговом окне сигнала (только для ГХ). Ширина пика в кратком отчете рассчитывается по более сложной формуле, используемой модулем интегрирования: $\text{ШП} = 0,3 (\text{праваяТП} - \text{леваяТП}) + 0,7 (\text{площадь/высота})$, где праваяТП и леваяТП — правая и левая точки перегиба соответственно.
- **Detail** — содержит заголовок, количественные результаты и калибровочные кривые. Заголовок сохраняется в файле под именем RPTHEAD.TXT в каталоге метода. Заголовок можно изменить, добавив относящийся к методу текст с помощью текстового редактора.

- **Header + Short** — содержит заголовок файла и количественные результаты в текстовом виде. Заголовок сохраняется в файле под именем RPTHEAD.TXT в каталоге метода. Заголовок можно изменить, добавив относящийся к методу текст с помощью текстового редактора.
- **GLP + Short** — содержит заголовок, сведения о пробе, условия работы прибора, журнал, сигнал и количественные результаты. Заголовок сохраняется в файле под именем RPTHEAD.TXT в каталоге метода. Заголовок можно изменить, добавив относящийся к методу текст с помощью текстового редактора.
- **GLP + Detail** — содержит заголовок, сведения о пробе, условия работы прибора, журнал, сигнал, количественные результаты и калибровочные кривые. Заголовок сохраняется в файле под именем RPTHEAD.TXT в каталоге метода. Заголовок можно изменить, добавив относящийся к методу текст с помощью текстового редактора.
- **Full** — содержит заголовок, сведения о пробе, условия работы прибора, журнал, сигналы и количественные результаты. Заголовок сохраняется в файле под именем RPTHEAD.TXT в каталоге метода. Заголовок можно изменить, добавив относящийся к методу текст с помощью текстового редактора.
- **Performance** — создание отчета в соответствии с ограничениями, указанными в диалоговом окне редактирования ограничений рабочих характеристик, которое открывается из меню пригодности системы.

В случае некалиброванных методов в число параметров отчета входят номер пика, время удерживания/миграции, площадь пика, высота пика, описание сигнала, истинная ширина пика на половине его высоты (см. *Истинная ширина пика на уровне x его высоты (W_x) [мин]* в справочном руководстве), симметрия, фактор удерживания (коэффициент емкости) k' , эффективность (теоретические тарелки) и разрешение для каждого пика.

В случае калиброванных методов в число параметров входят номер пика, время удерживания/миграции, название соединения, количество, описание сигнала, истинная ширина пика на половине его высоты, симметрия, k' , эффективность (теоретические тарелки) и разрешение для каждого пика.

Расчет ширины пика на половине его высоты не столь сложный по сравнению с формулой ширины пика, которая используется

модулем интегрирования. Значения эффективности и разрешения основываются на этой рассчитанной ширине пика. Заголовок отчета содержит все важные сведения о методе, включая прибор, колонку/капилляр, пробу и параметры сбора данных. Сигнал представляется в виде графика.

- **Performance + Noise** — объединяет в себе стиль «рабочие характеристики» с расчетами шума для диапазонов шумов, заданных в диалоговом окне редактирования диапазонов шумом, которое открывается из меню пригодности системы. Кроме того, шум представляется как шесть стандартных отклонений, как размах и в соответствии со стандартом ASTM. Также определяются дрейф и блуждание.
- **Performance + Extended** — создание расширенного отчета со всеми параметрами, полученными при расчете рабочих характеристик пика, и отдельными графиками для каждого пика. Графики включают в себя нулевую линию, касательные и значения ширины пика на заданных высотах. Отчет этого типа содержит только калиброванные пики.

Помимо параметров, распечатываемых для стиля отчета «Рабочие характеристики», определяются дополнительные параметры рабочих характеристик пика: распечатываются время начала и время конца пика, перекося (асимметрия), эксцесс (степень заостренности), ширина пика, коэффициент размывания по методу USP (US Pharmacopeia), временной интервал между точками данных, количество точек данных, статистические моменты, число теоретических тарелок, число теоретических тарелок на метр, избирательность и разрешение каждого пика. Ширина пика, число теоретических тарелок, число теоретических тарелок на метр, избирательность и разрешение рассчитываются методами истинной ширины пика на половине его высоты, 5 сигма (5 стандартных отклонений), касательной и размывания заднего края пика (подробнее см. в разделе *Определения проверки рабочих характеристик* справочного руководства).

Заголовок отчета содержит все важные сведения о методе, такие как прибор, колонку/капилляр, пробу и параметры сбора данных. Полный список алгоритмов определения параметров рабочих характеристик см. в разделе *Определения проверки рабочих характеристик* справочного руководства.

Стили отчета о спектрах (**Short + Spectrum**, **Detail + Spectrum**, **Performance + Library Search**) описаны в разделе *Основные сведения о спектральном модуле*.

Добавление настраиваемого отчета в стили отчета

В список доступных стилей отчетов можно добавить шаблон настраиваемого отчета, созданного на экране макета отчета системы ChemStation.

Примечание

Все отчеты, кроме отчетов о рабочих характеристиках, содержат список значений ширины пиков, рассчитанных модулем интегрирования по более сложной формуле (подробнее о расчете ширины пика см. в разделе *Ширина пика* справочного руководства).

Другие параметры стиля отчета

Таблица суммированных пиков

Для некоторых областей применения в нефтехимической и фармацевтической промышленности предусмотрена таблица суммарных пиков, позволяющая повысить эффективность работы системы с помощью следующих функций:

- суммирование площадей пиков, лежащих в пределах диапазона, указанного пользователем;
- суммирование площадей диапазона пиков и выполнение расчетов с использованием единого множителя;
- суммирование площадей всех пиков с одинаковым именем.

При формировании отчета система ChemStation использует таблицу суммарных пиков для создания отчета о суммарных пиках, который распечатывается по завершении стандартных расчетов отчета, за исключением отчета Norm%, который заменяется отчетом о суммарных пиках.

Макет отчета для некалиброванных пиков

Чтобы изменить макет отчета для некалиброванных пиков, выберите одну из следующих команд в диалоговом окне определения отчета.

- Separately (По отдельности) — в отчете отображать некалиброванные пики в отдельной таблице, если выбрана сортировка по времени удерживания/миграции, или в отдельных таблицах, если выбрана сортировка по сигналу.
- With Calibrated Peaks (Вместе с калиброванными пиками) — в отчете отображать некалиброванные пики вместе с калиброванными пиками.
- Do Not Report (Не включать в отчет) — запретить включение некалиброванных пиков в отчет.

Составление сводного отчета о последовательности

Обзор

Система позволяет распечатывать ChemStation самые разные стандартные отчеты для отдельных анализов проб. Составление сводных отчетов — это дополнительный способ составления отчетов, позволяющий рассчитывать и включать в отчет параметры из ряда различных анализов. Это полезно, например, для проверки стабильности прибора или ошибкоустойчивости нового метода.

Сводный отчет о последовательности может включать в себя:

- титульный лист;
- конфигурацию прибора, включая номера версий прибора и подробные сведения об используемой аналитической колонке/капилляре;
- перечни таблиц последовательностей, которые описывают, какую автоматическую последовательность анализов следует выполнять;
- журнал с описаниями действий, фактически выполненных последовательностью, и всех непредвиденных событий, произошедших во время выполнения последовательности;
- перечни методов;
- отдельные отчеты по каждой пробе;

- статистику анализов на основе выбранных критериев — *статистические данные рассчитываются только для калиброванных соединений*;
- содержание с подробным разбиением отчета на разделы и указанием соответствующих номеров страниц.

Настройка сводного отчета о последовательности

При настройке сводного отчета о последовательности можно выбрать любое сочетание следующих девяти категорий, установив соответствующие флажки и выбрав стиль отчета из подборок шаблонов, когда это уместно. Каждый шаблон определяет содержимое и макет конкретного раздела всего сводного отчета о последовательности.

Можно выбрать один из следующих стилей сводного отчета о последовательности.

One Page Header

В качестве титульного листа для следующего отчета шаблон GLP выводит на печать страницу с крупными буквами GLP. Она также содержит дату и место для подписи.

Configuration

Выберите **Configuration**, если в отчет нужно включить конфигурацию прибора и спецификации аналитической колонки/капилляра.

Sequence Table

Выберите **Sequence Table**, чтобы включить в отчет список проб, параметры количественного анализа пробы и имена методов. В этом списке указаны действия, которые должна выполнить система.

Logbook

Выберите **Logbook**, для перечисления анализов, выполненных системой, включая рабочие условия прибора и любые необычные события, которые произошли во время анализа проб.

Methods

Выберите **Methods**, чтобы перечислить все методы анализа, использованные в серии автоматических анализов.

Analysis Reports

Выберите **Analysis Reports**, чтобы получить отдельные отчеты об анализе в соответствии со стилем отчета, настроенным для метода.

Отдельные аналитические отчеты можно распечатать после каждого анализа в соответствии со стилем отчета, указанным для соответствующего метода, в дополнение к разделам отчета, указанным в окне **Sequence Summary Reporting**. См. раздел «Вывод последовательности» ниже.

SUI Label Type = Application > Statistics for Calibrated and Sample Runs

При выборе варианта **Statistics cal. runs** (Статистика выполнений анализа калибровочных образцов) будет проведен статистический анализ трендов для калибровочных образцов. При выборе варианта **Statistics** выполнений анализа проб будет проведен статистический анализ трендов для анализов (неизвестных) проб. В обоих случаях имеются шаблоны стилей **Standard Statistics** (Стандартная статистика) и **Extended Statistics** (Расширенная статистика). Шаблон **Extended Statistics** выводит на печать статистические тренды анализов в виде графиков, в то время как шаблон **Standard Statistics** распечатывает только текст. Настройки, выбранные в диалоговом окне **Items and Limits for Extended Statistics**, используются только при выборе варианта **Extended Statistic** в диалоговом окне **Sequence Summary Parameters**.

При выборе варианта **Standard Statistic** в диалоговом окне **Sequence Summary Parameters** в отчет будет включена статистика по следующим параметрам:

- время удерживания/миграции;
- площадь;
- высота;
- количество;
- ширина пика (с учетом стиля отчета, см. «Стили отчетов» на странице 209);

- симметрия.

Статистический расчет выполняется одинаково для разных уровней калибровки в последовательности, использующей методы с многоуровневой калибровкой. Это означает, что зависящие от концентрации параметры, например, площадь, высота, количество (см. диалоговое окно элементов и ограничений расширенной статистики), берутся все вместе независимо от уровня калибровки. Поэтому значения, полученные при выборе варианта **Statistics for Calibration Runs**, непригодны для методов с многоуровневой калибровкой в последовательностях.

Сводка.

При выборе пункта **Summary** будет распечатан обзор серии проанализированных проб и использованных методов. Если вариант Summary (Сводка) выбран вместе с другими пунктами сводного отчета о последовательности, то добавляются номера страниц, указывающие другие части сводного отчета о последовательности. Доступны два стиля сводки:

Sample Summary отображает в табличном виде подробные сведения о выполнении анализов проб в последовательности вместе с некоторыми сведениями о пробе, такими как имя пробы, имя файла данных, метод и номер виалы.

Compound Summary отображает в табличном виде результаты анализа проб вместе с основными количественными результатами для каждого калиброванного соединения или каждого пика в зависимости от типа отчета, указанного в методе.

Вывод последовательности.

В диалоговом окне **Sequence Output** можно задать, где будет печататься сводный отчет о последовательности.

Выберите **Report to file** и введите имя файла, чтобы выполнить печать отчета в указанный файл. Согласно настройке по умолчанию данные сохраняются в файл GLPrprt.txt. В системах GX с двойным вводом пробы данные сохраняются в файлах GLPrptF.txt и GLPrptB.txt для ближнего и дальнего инжекторов соответственно.

Выберите **Report to PDF**, чтобы сохранить отчет как документ PDF. Отчет сохраняется в папке последовательности под именем CLPrprt.PDF.

Выберите **Report to HTM**, чтобы распечатать отчет в формате HTML. Отчет сохраняется в подкаталоге HTM каталога данных, указанного в диалоговом окне **Sequence Parameters**. Отчет в формате HTM состоит из индексного файла (index.htm) и по меньшей мере двух других файлов: файла содержания (contents.htm) и файла в формате графического обмена (Graphics Interchange Format, GIF) для каждой страницы отчета (например, page1.gif). Чтобы просмотреть отчет в формате html, откройте индексный файл в обозревателе.

Выберите **Report to printer**, чтобы распечатать отчет на системном принтере. Вывод на печать отдельных отчетов для каждого выполнения анализа активирует также печать отчетов о пробах после каждого анализа. Эти отчеты распечатываются в дополнение к отчетам, указанным для сводного отчета о последовательности, который создается в конце всей последовательности. Для этих отчетов можно указать новое место назначения в диалоговом окне **Sequence Output** или использовать место назначения, заданное в отдельных методах.

Форматы файлов отчетов

Отчет можно сохранить в различных форматах. У каждого формата свое расширение. Для отчета можно выбрать несколько форматов.

- .TXT** Текст отчета печатается в текстовый файл в кодировке UNICODE.
- .EMF** Каждый график отчета (сигнал или калибровочная кривая) сохраняется в виде метафайла Microsoft Windows (WMF). Для одного отчета возможны несколько файлов .WMF. Формируемый формат файла соответствует стандартному формату метафайлов Microsoft, определенному в документации разработки программного обеспечения Windows. Эти файлы совместимы с форматом Aldus Placeable Metafile (APM), используемым рядом фирменных пакетов программного обеспечения.
- .DIF** Табличные данные отчета сохраняются в формате обмена данными (Data Interchange Format, DIF). Этот формат поддерживается программами для работы с электронными таблицами, например Micro-

soft Windows EXCEL. Независимо от выбранного стиля отчета сохраняться будет только информация, содержащаяся в «кратком» отчете.

.CSV Отчет в формате значений с разделителями-запятыми (Comma Separated Values, CSV). Это очень простой формат для табличных данных, поддерживаемый многими программами для работы с электронными таблицами и базами данных. Независимо от выбранного стиля отчета сохраняться будет только информация, содержащаяся в «кратком» отчете.

Для одного отчета может быть несколько файлов .DIF и .CSV. В каждом блоке отчета первый файл, например REPORT00.CSV, содержит информацию заголовка отчета. Последующие файлы содержат табличные результаты.

Если результаты отсортированы по времени удерживания/миграции, то для всей таблицы требуется только один файл, например REPORT01.CSV.

Если результаты отсортированы по сигналу, для каждого сигнала требуется отдельная таблица. В этом случае файлам присваиваются имена от Report01.CSV до ReportNN.CSV, где NN — номер сигнала.

.XLS Отчет экспортируется в электронную таблицу формата Microsoft Excel (XLS). Обычно данные требуют дополнительной обработки.

.PDF Отчет печатается в файл .pdf. Программа установки системы ChemStation устанавливает принтер PDF, называемый PDF-XChange 4.0. Этот принтер будет виден в меню **Start Menu/Settings/Printers and Faxes** только до тех пор, пока не перезапустят компьютер. При запуске системы ChemStation создается другой временный принтер под названием ChemStation PDF, основанный на принтере PDF-XChange. Во время любого сеанса ChemStation принтер ChemStation PDF будет в списке устройств в меню **Start Menu/Setting/Printers and Faxes**. Настройка **Unique pdf file name** позволяет сохранять отчеты .pdf независимо от самих отчетов в файлах с именами
<имя_контейнера_последовательности>_<имя_файла_данных>.pdf.



9

Понятия и функции КЭ

Предназначенные для КЭ функции системы Agilent ChemStation, представленные на экране управления методом и выполнением 220

Таблица виал 220

Таблица конфликтов метода 221

Таблица конфликтов последовательности 222

Имитация метода 222

Тип вершины пика 223

Типы калибровки 224

Калибровки на основе времени миграции 225

Калибровка с помощью коррекции подвижности 225

КЭ-МС 227

Вычитание фона 227

Подкаталоги методов для различных режимов КЭ 228

Этот раздел относится к использованию ChemStation для управления приборами КЭ.



Предназначенные для КЭ функции системы Agilent ChemStation, представленные на экране управления методом и выполнением

Таблица виал

Примечание

Функция **Vial Table** доступна только в онлайн-сеансе ChemStation.

Vial Table — это таблица, которая устанавливает связь с виалами, находящимися в лотке для виал с пробами, и, что более важно, с виалами, предназначенными для выполнения конкретной задачи, например с виалами для буферных растворов, промывочного раствора, очистки трубок и отходов. **Vial Table** привязана к таблице последовательности. При загрузке последовательности информация из таблицы последовательности копируется в таблицу виал. Однако записи в таблицы виал не передаются обратно в таблицу последовательности. Диалоговое окно **Vial Table Advanced Settings** отображается нажатием кнопки **Advanced** в окне **Vial Table**. Оно позволяет включать предупреждения о конфликтах между **Vial Table** и методом или последовательностью и использовать символические имена. Нужно установить флажок **Enable vial table checks and warnings**, чтобы проверять наличие конфликтов **Vial Table** с методом и последовательностью.

Во время загрузки метода или последовательности выполняется проверка согласованности между расположением виал в **Vial Table** и их расположением в методе или последовательности. Любой возникающий конфликт виал можно легко разрешить с помощью таблиц **Conflict**.

Примечание

В лотке для виал позицию 49 используют для виалы с промывочным раствором для иглы, а позицию 50 специально оставляют пустой для возврата подъемного механизма виалы. Эти позиции недоступны в **Vial Table**.

Предназначенные для КЭ функции системы Agilent ChemStation, представленные на экране управления методом и выполнением

Столбец **Used in** таблицы виал позволяет указать способ использования виалы. Существует пять допустимых значений полей. **Used in:**

Безразлично. Согласованность не проверяется.

Метод. Виала упоминается в методе.

Последовательность. Виала упоминается в таблице последовательности.

Система. Это специальная виала, принадлежащая конфигурации системы. Значением параметра **Name** должно быть одно из следующих символических имен:

- **@INLET** — виала для ввода;
- **@OUTLET** — виала для вывода;
- **@FLUSH** — промывочная виала;
- **@WASTE** — виала для отходов;
- **@clean tubes** — виала, используемая для чистки пополняющих трубок;
- **@USER X** — (где X — число от 1 до 10) заполнитель последовательности.

Этот параметр позволяет указывать отдельные номера виал для символических имен, используемых в методе. Благодаря этому можно указать различные виалы для команд Inlet Home (В исходное положение для ввода), Outlet Home (Исходное положение для вывода), Replenishment (Пополнение), Preconditioning (Предварительная обработка), Postconditioning (Последующая обработка) и т. д. в каждой строке последовательности.

Не используется. В этой позиции виалы нет.

Таблица конфликтов метода

Method Conflict Table отображается при загрузке метода, в котором заданы виалы, конфликтующие с виалами, заданными в таблице виал. **Method Conflict Table** разбита пополам: слева изображена **Vial Table**, справа показаны конфликтующие виалы.

Чтобы разрешить конфликты, можно либо заменить (одинарная стрелка), либо переместить виалу из метода в следующую свободную

позицию в **Vial Table** (двойная стрелка). Это можно проделать с каждой конфликтующей виалой в таблице.

Когда используются заданные пользователем виалы (с символическими именами @User1, @User2 и т. п.), их невозможно проверить на предмет конфликтов, так как без сведений о последовательности невозможно решить, есть ли конфликт или его нет.

Таблица конфликтов последовательности

Sequence Conflict Table отображается при настройке или загрузке последовательности, в которой заданы виалы, конфликтующие с виалами, заданными в таблице виал. **Sequence Conflict Table** разбита пополам: слева изображена **Vial Table**, справа показаны конфликтующие виалы.

Для того чтобы разрешить конфликты, можно заменить информацию в **Vial Table** информацией из **Sequence Table**. Если конфликт вызван системной записью, то перезаписать информацию невозможно.

Sequence Conflict Table можно закрыть без разрешения конфликтов.

Когда используются заданные пользователем виалы (в столбцах User1, User2 и т. п.), их невозможно проверить на предмет конфликтов, так как без сведений о методе невозможно решить, есть ли конфликт или его нет.

Имитация метода

Функция имитации позволяет проверить метод. Во время имитации на диаграмме отражаются действия, которые выполнялись бы при использовании метода, т. е., указанные в методе виалы отображаются в подъемных механизмах, применяемые мощность и напряжение отображаются как при реальном выполнении анализа. Имитация происходит быстрее выполнения анализа — каждый этап занимает около 3 сек. Этап определяется изменением диаграммы КЭ.

Чтобы начать имитацию, загрузите метод, который нужно имитировать, и выберите пункт **Simulation** в меню **Instrument**.

Тип вершины пика

В отличие от ЖХ, ГХ или МС асимметрия пиков — это вполне нормальное явление для КЭ. Поэтому крайне важно иметь возможность выбирать параметры интегрирования, которые обеспечат наивысший уровень точности и воспроизводимости результатов количественного анализа.

При выборе пункта **Peak Top Type** в раскрывающемся меню **Integration** доступны следующие типы вершины пика.

Высшая точка.

- Выбирайте в случае пика треугольной формы и
- при работе с разными концентрациями.

Параболическая интерполяция.

- Используйте для неразделенных пиков с растянутым задним краем.

Центр тяжести.

- Обеспечивает более точные расчеты для пиков треугольной формы.
- Пробы со сходными концентрациями.

Гауссовская аппроксимация.

- Используйте для симметричных пиков.

Типы калибровки

Стандартная калибровка основывается на площади или высоте пика. При выборе типа калибровки **Standard Calibration** возможны варианты расчета **Calculate Signals Separately** или **Calculate with Corrected Areas**.

Расчет сигналов по отдельности выбирают, когда нужно обеспечить (при расчете отчетов Norm%), чтобы процентные доли количеств веществ в сигналах, по которым составляются отдельные отчеты, составляли в сумме 100% для каждого сигнала. Если флажок **Calculate signals separately** снят, процентные доли количеств веществ во всех сигналах составляют в сумме 100%. Выбор варианта **Calculate signals separately** является неизменным условием для сортировки по сигналу в таблице калибровки.

Выберите вариант **Calculate with Corrected Areas**, чтобы вносить поправку в площадь пика на основе времени миграции. В этом режиме площадь делится на время миграции, что может улучшить воспроизводимость количественного анализа, когда времена миграции нестабильные.

В дополнение к стандартной калибровке имеются три калибровки специально для капиллярного электрофореза, основанные на времени миграции по одному сигналу.

В раскрывающемся списке для таблицы калибровки имеются следующие типы калибровки:

- **Standard Calibration**
- **Protein Molecular Weight Calibration**
- **DNA Base-Pair Calibration**
- **Capillary Isoelectric Focusing Calibration**

Дополнительные сведения по калибровкам для капиллярного электрофореза см в документе *OpenLAB CDS ChemStation Edition – справочник по принципам работы*.

Калибровки на основе времени миграции

Использование основанных на времени миграции калибровок в последовательности.

Калибровки и перекалибровки на основе времени миграции можно включить в последовательность, однако поддерживаются только явно заданные и циклические калибровки, а вилочные калибровки — нет. Сводного отчета по последовательности с калибровками на основе времени миграции не существует.

Стили отчетов для калибровок на основе времени миграции

Для калибровок на основе времени миграции доступны только два стиля отчетов — **Short** (количественные результаты в текстовом виде) и **Full** (заголовок, сведения о пробе, условия работы прибора, журнал, количественные результаты и график чистоты пика).

Калибровка с помощью коррекции подвижности

Незначительные изменения состава буферной смеси, температуры при выполнении анализа или вязкости, как и адсорбция на стенках капилляра, могут повлиять на электроосмотический поток (ЭОП) или сделать его нестабильным. Получающееся в результате изменение ЭОП может привести к довольно высокому стандартному отклонению времен миграции. Поправки на подвижность могут значительно снизить влияние смещений времени миграции между выполнениями анализа благодаря отслеживанию времени миграции эталонного пика подвижности и, как следствие, значительному повышению воспроизводимости времени миграции.

При выборе эталонного пика подвижности следует руководствоваться следующими приоритетами.

- Выбирайте пик с самым высоким сигналом.
- Выбирайте самый изолированный пик.
- В качестве эталонного пика подвижности можно также использовать маркер ЭОП или внутренний стандарт.

- Всегда разворачивайте окно поиска, когда ищете эталонный пик подвижности.
- Если в окно поиска попадают несколько пиков, то пик с наивысшим сигналом автоматически выбирается в качестве эталонного пика подвижности.

Доступны два типа коррекции подвижности:

**коррекция
эффективной
подвижности.**

Effective Mobility Correction использует эффективные подвижности всех пиков и требует наличия данных линейного изменения напряжения наряду с электрофореграммой. Кроме того, применение коррекции эффективной подвижности позволяет определять истинные эффективные подвижности для всех компонентов пробы;

**коррекция
относительной
подвижности**

Relative Mobility Correction может осуществляться в отсутствие данных о напряжении и поэтому предполагает постоянное напряжение для всех измерений.

КЭ-МС

Вычитание фона

При выборе пункта меню **Subtract Background BSB**) из каждой точки текущей электрофореграммы вычитается масс-спектр, выбранный в последний раз. Получающиеся в результате данные сохраняются в том же каталоге и под тем же именем, что и исходный файл данных, но расширение файла меняется на .BSB.

Новый файл данных становится текущим файлом данных, отображается электрофореграмма с вычтенным фоном. В пункте Operator (Оператор) заголовка файла данных ведется учет числа выполненных вычитаний фона.

При просмотре распечатки данных BSB в табличном виде можно заметить различия, обусловленные точностью представления данных.

Примечание

Текстовые файлы СПРАВКИ в программном обеспечении ЖХ/МС относятся только к параметрам ЖХ, но не к КЭ. Некоторые функции, доступные в программном обеспечении ЖХ/МС, отсутствуют или неприменимы к приложениям КЭ/МС, однако могут использоваться в ЖХ. Функция **peak matching** неприменима для КЭ-МС и поэтому неактивна. В КЭ-МС, УФ и МС обнаружение происходит при различных эффективных длинах разделения капилляра. Из-за разного разрешения на различных эффективных длинах сопоставление пиков невозможно.

Подкаталоги методов для различных режимов КЭ

Методы в КЭ зависят от выбранного режима КЭ. Поэтому они хранятся в разных подкаталогах в подкаталоге методов:

- CE** Хранит методы для режима КЭ.
- SEC** Хранит методы для режима КЭХ.
- CEp** Хранит методы для режима КЭ плюс давление.
- CEMS** Хранит методы для режима КЭ МС.
- CEMSp** Хранит методы для режима КЭ МС плюс давление.

Словарь элементов интерфейса

A

Acq Method
Метод сбора данных

Acquisition Method Viewer
Средство просмотра метода сбора данных

Acquisition Method Viewer...
Средство просмотра метода сбора данных

Add
Добавить

Add Data Files...
Добавить файлы данных...

Add Pause to Queue
Добавить паузу в очередь

Advanced
Дополнительные

Always ask user to choose an option
Всегда предлагать пользователю выбрать вариант

Analysis Method
Метод анализа

Analysis Reports
Отчеты об анализе.

Append Lines
Добавить строки

Apply Manual Events from Method
Применить события интегрирования вручную метода

Area%
% площади

Automatic update for selected runs
Автоматически обновлять для выбранных выполнений анализа

B

Back
Задний

Back Sample List
Резервный список проб

Batch
Партия

Blank
Холостая

Bracketing
Метод заключения в скобки

Bracketing/Cyclic
Метод заключения в скобки/циклическая.

Break Session Lock
Приостановка блокировки сеанса

Browse
Обзор

Browse for methods in master paths
Поиск методов в путях к образцам

Browse for Report Templates in Result Set
Поиск шаблонов отчета в наборе результатов

Browse for templates in master paths
Поиск шаблонов в путях к образцам

C

Calculate signals separately
Рассчитывать сигналы по отдельности

Calculate Signals Separately
Рассчитывать сигналы по отдельности

Calculate with Corrected Areas
Рассчитывать с откорректированными площадями

Calibrant
Калибровочный раствор

Calibration
Калибровка

Calibration Interval
Интервал калибровки

Calibration Mode
Режим калибровки

Capillary Isoelectric Focusing Calibration
Калибровка капиллярного электрофореза по изоэлектрическим точкам.

Change Root...
Сменить корневой...

Character
Символ

Chem32\<instrument>\TEMP\AESEQ
Chem32\<прибор>\TEMP\AESEQ

ChemStation Administrator
администратор ChemStation

ChemStation Analyst
аналитик ChemStation

ChemStation Data Analysis
Анализ данных ChemStation

ChemStation Lab Manager
руководитель лаборатории ChemStation

ChemStation Operator
оператор ChemStation

Choose Master Method to update
Выбор метода-образца для обновления

Close
Заккрыть

Column Chooser
Выбор столбца

Commands
Команды

Compound Details
Сведения о соединении

Compound Summary
Сводка по соединению

Computer name
имя компьютера

Configuration
Конфигурация.

Configuration Editor
Редактор конфигураций

Conflict
Конфликт

Control Chart
Контрольные таблицы

Counter
счетчик

Create New Result Set
Создание нового набора результатов

Cross-Sequence Summary
Перекрестная сводка по последовательностям

Current date
текущая дата

Current time
текущее время

Cyclic
Циклическая

D

Data
Данные

Data Analysis
Анализ данных

Data Analysis Navigation table
Таблице навигации анализа данных

Data Analysis Task
Задача анализа данных

Data Location
Местоположение данных

Data Storage
Хранилище данных

Datafile
Файл данных

Delete Lines
Удалить строки

Delete temporary Sequence Template after completion
По завершении удалять временный шаблон последовательности

Detail
Подробный

Details
Подробности

Disconnect
Отключить

DNA Base-Pair Calibration
калибровка по паре оснований ДНК;

Download method to instrument
Загрузить метод в прибор

Dual Simultaneous Injections
Двойные одновременные вводы пробы

E

Easy Sequence
Простая последовательность

Easy Sequence Setup
Настройка простой последовательности

Effective Mobility Correction
Коррекция эффективной подвижности

Enable vial table checks and warnings
Разрешить проверки и предупреждения таблицы виал

ESTD
Внешний стандарт

ESTD%
% внешнего стандарта

Exit
Выход

Extended
Расширенный

Extended Statistic
Расширенная статистика

Extended Statistics
Расширенная статистика

F

File
Файл

Fill Samples
Заполнить пробы

Filldown
(Заполнить вниз)

Filldown Options
Параметры заполнения вниз

Filter Options
Параметры фильтра

Finish Queue Sequence
Завершение очереди выполнения

Fract. Start
Начало фрак.

Front
Передний

Full
Полный

N

Header
Заголовок

Height%
% высоты

Help
Справка

Hide
Скрыть

I

Import Samples
Импортировать пробы

Import Samples...
Импортировать пробы...

injection volume
объем введенной пробы

injections/vial
вводов/виал

Injector Location
Местоположение инжектора

Insert Line
Вставить строку

Insert/Filldown Wizard
Мастер вставки/заполнения
вниз

Instrument
Прибор

Instrument Control
Управление прибором

Instrument name
имя прибора;

Integration
Интегрирование

Integration Events Table
Таблица событий интегрирования

ISTD
Внутренний стандарт

ISTD amount
количество ISTD

ISTD%
% внутреннего стандарта

Items and Limits for Extended Statistics
Элементы и ограничения
расширенной статистики

L

Library Search
Поиск в библиотеке

Load
Загрузить

Load Easy Sequence Setup
Загрузить настройку простой
последовательности

Logbook
Журнал.

M

Manage Rules and Alerts...
Управление правилами и
предупреждениями...

Manual Events
События интегрирования
вручную

Manual update ...
Обновление вручную...

Menu
Меню

Messages and warnings
Сообщения и предупреждения

Method
Метод

Method and Run Control
Управление методом и
выполнением

Method Conflict Table
Таблица конфликтов метода

Method Resolution Info
Сведения об урегулировании
метода

Methods
Методы.

N

Name
Имя

Name Pattern
Шаблон имени

New
Новый

New method from instrument
Новый метод из прибора

No Recalibration
Без перекалибровки

Noise
Шум

None
Нет

Norm%
Нормированный %

Number of Samples
Число проб

O

Ok
OK

One Page Header
Одностраничный заголовок.

Open Easy Sequence Setup
Открыть настройку простой
последовательности

Options

Параметры

P

Part of method to run

Выполняемая часть метода

Partial Recalibration

Частичная перекалибровка

Partial Sequence

Частичная последовательность

Path

Путь

Paths

Пути

peak matching

сопоставления пиков

Peak Top Type

Тип вершины пика

Pending

Ожидание

Performance

Рабочие характеристики

Preferences

Предпочтения

Preview/Print Sequence...

Предварительный
просмотр/Печать
последовательности...

Print

Печатать

Printer

Принтер

Printers and Faxes

Принтеры и факсы

Protein Molecular Weight Calibration

калибровка по молекулярному
весу белка;

Q

QC Sample

Проба КК

Queue Method

Метод последовательности

Queue Method...

Поставить метод в очередь...

Queue Planner...

Планировщик очереди...

Queue Sequence...

Поставить последовательность в
очередь...

R

Read Bar Codes

Считывание штрихкодов

Read-Only

Только для чтения

Recalculate With Method

Перерасчет с помощью метода

Recalibration of all Retention/Migration
Times

Перекалибровка всех времен
удерживания/миграции

Relative Mobility Correction

Коррекция относительной
подвижности

Remove

Удалить

Remove Manual Events from Method

Удалить события интегрирования
вручную метода

Remove selected Data Files

Удалить выбранные файлы
данных

Report

Отчет

Report Layout

Макет отчета

Report Templates

Шаблоны отчетов

Report to file

Отчет в файл

Report to HTM

Отчет в HTM

Report to PDF

Отчет в PDF

Report to printer

Отчет на принтер

reprocess

обработать повторно

Reprocess

Повторная обработка

Reprocess Only

Только повторная обработка

Reprocessing only

Только повторная обработка

Resolve Settings

Урегулировать настройки

Restore initial order

Восстановить исходный порядок

result set

набор результатов

Result Set Migration

Перенос набора результатов

Review

Просмотр

Run Method

Выполнить метод

Run Queue

Очередь выполнения

Run Sequence

Выполнить последовательность

Run Time Checklist

Контрольный список выполнения

RunControl

Управление выполнением

S

sample amount	Sequence > Create New Result Set	Settings
количество пробы	Последовательность > Создать	Настройки
Sample Info	новый набор результатов	Short
Сведения о пробе	Sequence Conflict Table	Короткий
Sample Name	Таблица конфликтов	shutdown
Наименование пробы	последовательности	завершить работу
Sample Summary	Sequence Diagram	Signal/Review options
Сводка по пробе	Схема последовательности	Параметры сигнала/просмотра
Sample type	Sequence End	Signal/Review Options
Тип пробы	Конец последовательности	Параметры сигнала/просмотра
Sample Type	Sequence Location	Simple Calibration
Тип пробы	Местоположение	Простая калибровка
Samples	последовательности	Simulation
Пробы	Sequence Method	Имитация
Samples/Injections	Метод последовательности	Single Injection
Пробы/введения пробы	sequence methods	Один ввод пробы
Save and Add to Queue	методами последовательности	Single Sequence Summary
Сохранить и добавить в очередь	Sequence name	Сводка по одной
Save as New Master Method	имя последовательности	последовательности
Сохранение как нового	Sequence Name	Specify Report
метода-образца	Имя последовательности	Определение отчета
Save method with Data	Sequence Output	Spectrum
Сохранение метода вместе с	Вывод последовательности	Спектр
данными	Sequence Parameters	Standard Calibration
Screen	Параметры последовательности	Стандартная калибровка
Экран	Sequence Preview	Standard Statistic
Select Destination	Предварительный просмотр	Стандартная статистика
Выберите место назначения	последовательности	Standard Statistics
Select Method Path	Sequence Start	Стандартная статистика
Выберите путь к методу	Начало последовательности	Start Menu
Select Sequence Template	Sequence Summary Parameters	Пуск
Выберите шаблон	Сводные параметры	Starting Vial Location
последовательности	последовательности	Начальное положение вials
Select Source	Sequence Summary Reporting	Statistics
Выберите источник	Составление сводного отчета о	Статистика
Sequence	последовательности	Statistics for Calibration Runs
Последовательность	Sequence Table	Статистика выполнений анализа
	Таблица последовательности.	калибровочных образцов
	Setting	Status
	Настройки	Состояние

Subtract Background

Вычитание фона

SUILabel Type = Application > Statistics for Calibrated and Sample Runs

SUILabel Type = Приложение > Статистика выполнений анализа калибровочных образцов и проб.

Summary

Сводка

T

Take over ChemStation Remote Session

Взятие удаленного сеанса Chem-Station под свое управление

Target Mass

Масса целевого вещества

U

Unique folder Creation

Создание уникальной папки

Unique Folder Creation

создание уникальной папки

Unique folder Creation OFF

Создание уникальной папки - ВЫКЛ

Unique Folder Creation Off

Создания уникальной папки ВЫКЛ

Unique Folder Creation OFF

Создание уникальной папки ВЫКЛ

Unique Folder Creation ON

Создание уникальной папки ВКЛ

Unique pdf file name

Уникальное имя pdf-файла

Unload Current Dataset

Выгрузить текущий набор данных

Update any Master Method ...

Обновить любой метод-образец...

Update Manual Events of Method

Обновить события интегрирования вручную метода

Update Master Method

Обновить метод-образец

Update master methods

Обновлять методы-образцы

Update Methods

Обновление методов

Update Methods...

Обновить методы...

Upload method from instrument

Отправить метод из прибора

Use current method

Использовать текущий метод

Use method from data file

Использовать метод из файла данных

Use reference

Использовать эталон

Use sequence method

Использовать метод последовательности

Use Sequence Table information

Использовать сведения таблицы последовательности

Used in

Используется в

User name

имя пользователя;

V

Vial Table

Таблица виал

Vial Table Advanced Settings

Дополнительные настройки таблицы виал

View

Вид

View Method

Просмотр метода

View Report File

Просмотреть файл отчета

View saved Report File(s)

Просмотреть сохраненные файлы отчетов

View Saved Report File(s)

Просмотреть сохраненные файлы отчета

View Saved Sequence Summary Report File(s)

Просмотреть сохраненные файлы сводного отчета

View Summary Report File

Просмотреть файл сводного отчета

View with Instrument Configuration...

Просмотр в конфигурации прибора...

View with Original Configuration...

Просмотр в исходной конфигурации...

Индекс

%

- % высоты
 - отчет 208
- % площади
 - отчет 208
- % разницы 132

A

- ACAML 172
- ACQ.TXT 41

B

- BI Studio 198
- Business Intelligence Development Studio 198

C

- CDS 12
- ChemStation, 11
- ChemStation
 - общее описание 24
 - пользовательская настройка 31
 - проводник 56

D

- DA.M 41, 71, 161
- Data Store 11, 16
- DOC 174

E

- ЕСМ, 11
- ЕСМ 16

ESTD

- отчет 208, 206
- EZChrom, 11

G

- GLPSave.Reg 70
- сохранение вместе с методом 70

I

- ISTD
 - отчет 207

P

- PDF 174, 174

R

- RDL 198
- RTE 198

T

- TXT 174

V

- Visual Basic 197, 201

X

- XLS 174, 174

A

- автоматизация 32, 83
 - что это такое? 86
- автоматическая

- повторная калибровка 129

- автоматический
 - поиск в библиотеке 69

- автоматическое
 - завершение работы 127

- анализ данных 46, 156
 - интегрирование 28
 - количественный анализ 28
 - метод 50
 - перерасчет 30
 - повторная обработка 30
 - пользовательский 70
 - просмотр партии 29

- анализ
 - точность 191
- аналоговый сигнал 74
- аппроксимации
 - кривой 184
 - нелинейные 183

B

- вес
 - квадратичный 184
 - линейный 184
 - равный 184
 - точки калибровки 184
- взятие сеанса под свое
 - управление 14
- взятие удаленного сеанса под свое
 - управление 14
- вилочная
 - калибровка 131
- восстановить соединение 14
- время ожидания в состоянии
 - неготовности 127

время удерживания
 обновить 130
 перекалибровка 192
 выражение 197, 201

Д

действия после выполнения
 последовательности 127
 демонстрационные данные 201
 дерево методов 56
 диапазоны
 калибровка 182
 Дистанционное управление 13

Е

Европейская фармакопея 160,
 197
 Европейская фармакопея 33, 104,
 112

Ж

журнал 78

З

завершение работы
 автоматическое 127
 системы 127
 завершить работу
 макрос 127
 заданные в явном виде
 последовательности
 калибровки 133
 заключение в скобки 106
 циклическая калибровка 139
 заменить 131

И

имя файла

отчет по одному вводу
 пробы 204
 префикс 124
 сводный отчет о
 последовательности 205
 интегрирование 68
 события 47
 таблица результатов 68
 интервал
 перекалибровка 132

К

калибровка 47
 аппроксимации кривой 184
 вилочная 131
 диапазоны 182
 заданная в явном виде 133
 заключение в скобки 140
 многоуровневая 181
 образец 178
 соединение 178
 точка 178
 уровень 178
 циклическая
 многоуровневая 134
 циклическая
 одноуровневая 134
 циклическая 143
 частота 132
 калибровочная кривая
 аппроксимации 184
 многоуровневая 181
 одноуровневая 179
 принудительно через нуль
 (начало координат) 184
 присвоение веса точке
 калибровки 184
 типы 179
 каталог
 метод 54
 набор результатов 121

контрольный список
 выполнения 47
 анализ данных 68
 последующая команда 71
 последующий макрос 71
 предварительная команда 68
 предварительный макрос 68
 сбор данных 68
 сохранение данных GLP 70
 сохранение копии метода 71
 конфигурация 17
 кривая
 аппроксимации 184

М

макрос
 завершить работу 127
 маркировка результатов 197
 место назначения
 отчет 195
 метод
 GLPSave.Reg 70
 автоматическое
 обновление 110, 102
 автономный режим 55
 изменить 51
 интегрирование 68
 использовать
 определенный 159
 каталог 54
 обновление вручную 110, 61,
 60
 ожидание 128
 поиск в библиотеке 69
 просмотр параметров сбора
 данных 57
 редактировать 52
 режим онлайн 54
 сводка по работе 65
 создать 51
 состояние 80

части 46
 многоуровневая калибровка 181
 многоуровневая
 калибровка 181
 многоуровневые
 циклические
 последовательности 134
 монитор
 сигнал 77
 состояние прибора 80

Н

набор результатов 41
 перенос 124
 самособирающийся 166
 надлежащая лабораторная
 практика 34
 настраиваемые поля 47, 197
 настраиваемый расчет 201
 начало координат
 включить принудительно 184
 включить 184
 игнорировать 184
 обработка 184
 соединить 184
 не обновлять 131
 неидентифицированные пики
 перекалибровка 192
 неизвестная проба 189
 нелинейный
 аппроксимации кривой 183
 несколько стандартов 143
 нормированный %
 отчет 208

методы и
 последовательности 17
 модель данных 19
 операционная система 16
 обновить
 время удерживания 130
 метод 102, 61
 метод-образец 60
 фактор отклика 130
 образец
 калибровка 178
 одноуровневая калибровка
 циклические
 последовательности 134
 оличественные ограничения 180
 онлайн
 мониторы 77
 остановить
 последовательность 108
 отклик детектора 179, 206
 отклик
 детектора 179
 отключение сеанса 13
 отключить 13
 отношение сигнал-шум 104, 112,
 160
 отчет по одной
 последовательности 198
 отчет по одному вводу пробы 198
 отчет
 % высоты 208
 % площади 208
 ESTD 208, 206
 без калибровки 206
 имя файла 204
 классический или
 интеллектуальный? 196
 маркировка результатов 197
 место назначения 195
 настраиваемые поля 197

нормированный % 208
 по одному вводу пробы 194
 с калибровкой 206
 сводка по
 последовательности 194
 стиль 209
 форматы файлов 217
 что это такое? 194
 ошибки
 последовательность 113

П

параметры
 последовательности 75, 89, 164
 параметры сбора данных 41
 перекалибровка
 время удерживания 192
 для чего 191
 интервал 132
 неидентифицированные
 пики 192
 полная 192
 частичная 192
 что это такое? 191
 перекрестный отчет по
 последовательностям 198
 перенос
 набор результатов 124
 перерасчет 30, 41, 158
 последний результат 161
 пик
 идентификация 47, 69
 количественный анализ 47, 69
 повторная калибровка
 автоматическая 129
 усреднение 131
 повторная обработка 30, 41, 119,
 162
 подключение к удаленному
 рабочему столу 15

поиск в библиотеке 69
 пользовательская настройка
 анализ данных 70
 поля данных 199
 последовательности
 настройка 94
 последовательность
 заданная в явном виде
 калибровка 133
 параметры повторной
 калибровки 130
 повторная калибровка 130
 последовательность 83, 87
 выполнения анализа с холостой
 пробой 123
 загрузить 156
 остановить 108
 ошибки 113
 повторная обработка 162
 прервать 108
 приостановить 107
 редактировать 99
 сбор данных 99
 создать 99, 91
 сохранить 99
 таблица 90
 файл журнала 113
 циклическая калибровка 134, 134
 последующая
 команда 71
 последующий
 макрос 71
 предварительная
 команда 68
 предварительный просмотр
 отчета 174
 предварительный
 макрос 68
 предпочтения 74, 100, 116
 прервать

последовательность 108
 префикс 124
 прибор
 состояние 80
 приграммируемый отчет 30
 приоритетная проба 103
 приостановить
 последовательность 107
 проба
 неизвестная 189
 приоритетная 103
 просмотр 172
 простая последовательность 94
 пути 74
 путь к данным 75

Р

рабочие процессы
 просмотр 174
 Редактор шаблонов отчетов 198
 режим последнего результата 161
 результаты, составление
 отчетов 206
 результаты
 количественные 208

С

самособирающийся набор
 результатов 166
 сбор данных 26, 74
 сведения о методе 46
 сводный о отчет о
 последовательности
 статистика 215
 сводный отчет о
 последовательности
 журнал 214
 заголовок 214
 конфигурация 214

методы 215
 отчеты об анализе 215
 спецификация вывода 216
 страница сводки 216
 таблица
 последовательности 214
 таблица проб 214
 сигнал 74
 монитор 77
 подробные сведения 46
 система
 завершение работы 127
 состояние 79
 системные
 сообщения 78
 соединение 178
 создание уникальной папки 38, 114, 117
 включение/выключение 116
 сообщения о событиях 78
 сообщения об ошибке 78
 составление интеллектуальных
 отчетов
 активировать 196
 предварительный
 просмотр 174
 преимущества 197
 требования 172
 файлы данных 173
 составление классических
 отчетов 30
 составление отчетов о
 результатах 206
 составление отчетов 30, 172
 состояние ожидания 127
 состояние
 прибор 80
 сохранение вместе с данными
 копия метода 71
 сохранение данных GLP 70

средство просмотра метода сбора данных 57

стандарт

перекалибровка с несколькими виалами 143

Т

таблица калибровки

что это такое? 187

таблица навигации 156

выгрузить набор данных 166

удалить файл данных 167

таблица последовательности

повторная калибровка 130

таблица суммированных пиков 212

тип метода

анализ данных 50

образец 49

последовательность 49

файл данных 50

тип отчета

одна последовательность 198

отчет по одному вводу

пробы 198

перекрестный 198

точность

анализ 191

У

управление прибором 46

условное форматирование 201

Ф

файл журнала

последовательность 113

файл метода

параметры прибора 54

файл эталонных данных 104, 160

файл

метод 54

фактор отклика

обновить 130

форматирование

шаблон отчета 201

форматы файлов

отчет о результатах 217

фрагменты 197, 200

Х

холостая проба 104

выполнения анализа 123

хранилище данных 118

Ц

цветовая маркировка 80

центральное хранилище данных 16

циклическая калибровка

заключение в скобки 139

циклическая перекалибровка 143

цифровой сигнал 74

Ч

частичная перекалибровка 192

частичная последовательность

выбор набора результатов 108

строки

последовательности 110

Ш

шаблон имени 100

шаблон отчета

настраиваемый расчет 201

по умолчанию 174

поиск 202

условное форматирование 201

формат экспорта 174

формат 198

фрагменты 197, 200

хранение 202

элементы отчета 200

шаблон последовательности 87

Э

экстраполяция 182

элементы отчета 200

ЭЛЖ 12

эталонный сигнал 33

В этой книге

В настоящем руководстве описаны различные понятия системы хроматографических данных Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition. Оно позволяет лучше понять, как работает ChemStation. В нем содержится информация по следующим темам.

- Основные понятия.
- Сбор данных.
- Автоматизация/последовательности.
- Очередь выполнения и планировщик очереди.
- Понятия анализа и просмотра данных.
- Калибровка.
- Составление отчетов.
- Понятия и функции КЭ.

© Agilent Technologies 2010-2013, 2014

Printed in Germany
01/2014



M8301-98015



Agilent Technologies