ChemStore C/S Agilent



Avvisi

© Agilent Technologies, Inc. 2002, 2004

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

Microsoft [®] è un marchio registrato negli Stati Uniti della Microsoft Corporation.

Codice del manuale

G2181-94010

Edizione

03/04

Stampato in Germania

Agilent Technologies Hewlett-Packard-Strasse 8 76337 Waldbronn, Germania

Revisione software

Questo manuale è destinato a un modulo del software per ChemStation Plus Agilent. Nella sezione "In questo volume..." a pagina 3 vengono forniti dettagli sul modulo e sulla revisione del modulo a cui si riferisce questo manuale.

Garanzia

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

Licenze sulla tecnologia

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

Indicazioni di sicurezza

AVVERTENZA

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

ATTENZIONE

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

In questo volume...

Nel presente manuale vengono presentati i concetti principali di ChemStore C/S Agilent revisione *B.03.01*, unitamente a una descrizione delle caratteristiche principali del prodotto e alle istruzioni per l'impostazione degli studi e la gestione dei dati. Il manuale è organizzato nel modo seguente:

1 Introduzione a ChemStore C/S

In questo capitolo viene fornita una panoramica delle funzionalità di ChemStore C/S Agilent per agevolarne l'utilizzo.

Informazioni per gli operatori Agli operatori di ChemStore C/S Agilent che desiderano informazioni dettagliate sul funzionamento del sistema sono dedicati il Capitolo 2, il Capitolo 3 ed il Capitolo 4.

2 Concetti di ChemStore C/S

In questo capitolo vengono descritti i principali concetti relativi all'impiego del database ChemStore C/S nel laboratorio di analisi e i vantaggi che ne derivano.

3 Uso della calcolatrice personalizzata

In questo capitolo viene fornita una panoramica sulla creazione e sull'utilizzo dei modelli di calcolo.

4 Utilizzo di Report Template Editor

In questo capitolo viene fornita una panoramica della creazione e utilizzo dei modelli di rapporto.

Informazioni per gli amministratori

Agli amministratori di ChemStore C/S Agilent che desiderano informazioni sull'impostazione del sistema in base alle esigenze di diversi laboratori e utenti sono dedicati il Capitolo 5 e il Capitolo 6.

5 Protezione dei dati

Questo capitolo descrive le funzionalità di ChemStore C/S che garantiscono la sicurezza dei dati contenuti nel database.

6 Gestione dei dati

In questo capitolo viene descritta la gestione dei dati contenuti nel database mediante le operazioni di backup, ripristino e archiviazione.

7 Calcoli di ChemStore C/S

ChemStore C/S Agilent include una suite completa di calcoli statistici. In questo capitolo sono riportate informazioni dettagliate sull'esecuzione di tali calcoli, nonché una descrizione dei calcoli statistici, dei comandi e dei codici di errore della calcolatrice personalizzata, dei calcoli effettuabili con i campi personalizzati e i calcoli del tempo effettuati da ChemStore C/S.

1 Introduzione a ChemStore C/S

ChemStation e ChemStore C/S 12

Breve presentazione di ChemStore C/S 13

2 Concetti di ChemStore C/S

Flusso di lavoro di ChemStore C/S 18 Flusso di dati di ChemStore C/S 19 Organizzazione dei risultati 20 Organizzazione dei risultati in uno studio 20 Utilizzo di campi personalizzati 21 Trasferimento di dati dalla ChemStation 23 24 Recupero di dati dal database Impostazione di una query 24 Filtro dell'insieme di dati 27 Revisione e approvazione di risultati 29 29 Stato di approvazione delle analisi 33 Interfaccia utente Finestra campione 36 41 Finestra composto Configurazione delle tabelle 45 Calcoli nell'ambito dello stesso campione 46 Statistiche 46 Creazione di grafici di controllo 47 Impostazioni dell'interfaccia utente 48 Trasferimento di dati alla ChemStation 50

Gestione delle versioni 51

Eliminazione di analisi dal database 53

3 Uso della calcolatrice personalizzata

Informazioni generali sulla calcolatrice personalizzata 56

Operazioni preliminari all'utilizzo dell'editor di script della calcolatrice personalizzata 57 Recupero dell'insieme di dati del calcolo 57 Finestre dell'editor di script della calcolatrice personalizzata 57

Editor di script della calcolatrice personalizzata 60
Finestre delle wizard degli script della calcolatrice personalizzata 60
Esempio: creazione di uno script di calcolo per il rapporto 69
Uso dell'editor di script della calcolatrice personalizzata 81

4 Utilizzo di Report Template Editor

Informazioni su Report Template Editor 90 Operazioni preliminari all'utilizzo di Report Template Editor 92 Recupero dell'insieme di dati del rapporto 92 Visualizzazioni delle strutture di Report Template Editor 93 Utilizzo di Report Template Editor 95 Utilizzo delle finestre di dialogo per creare sezioni del rapporto 95 Utilizzo delle visualizzazioni della struttura per tabelle e grafici 97 Componenti del modello di rapporto 98 Intestazioni e piè di pagina 98 Sezioni dei dati 99 Intestazioni di sezione 102 Elementi della sezione 102

Tabelle108Raggruppamento e riepiloghi delle tabelle108Tipi di tabelle110Creazione di un rapporto mediante un modello123Creazione automatica di rapporti123

5 Protezione dei dati

Introduzione 126 Protezione 127 Impostazione e gestione degli utenti 129 Impostazione di informazioni organizzative 132 Impostazione e gestione di studi 132 Impostazione e gestione di campi personalizzati 133 135 Impostazione e gestione degli elementi di ChemStore C/S Archiviazione e ripristino 136 Archiviazione automatizzata 136 Archiviazione interattiva 140 Unità di archiviazione 142 Eliminazione delle analisi 144 Riapertura delle analisi 144 144 Ripristino delle analisi Interfaccia di archiviazione XLM generica 145 Stato di archiviazione 147 Revisione dello stato di archiviazione e rapporti 149 Esempio di processo di archiviazione e di ripristino 150 Gestione delle operazioni di archiviazione e di ripristino in Admin Client 152 Informazioni generali sul processo di archiviazione e di eliminazione 153 Analisi delle operazioni di archiviazione e di ripristino in Admin Client 154

Itinerario di controllo (Audit Trail) 156 Notifica tramite e-mail 158 Registro del database 161 Validazione e protezione dei file stampati 162 Validazione di file durante l'operazione 162 Funzioni di validazione dei file 163 Sostituzione dello schema di protezione incorporato con una soluzione personalizzata 163

6 Gestione dei dati

Backup del database 166 167 Backup o archiviazione Backup con la versione per computer singolo 168 Backup con Windows 2000/XP 169 Automazione e pianificazione di backup con Windows NT/2000 169 Unità a nastro 170 CD-ROM 170 Backup con la versione client/server 172 Tipi di backup Oracle 172 Manutenzione del computer ChemStation 173 Eliminazione dei file temporanei residui 173 Manutenzione del file system del PC 173 Funzionamento continuo 174 Piano di ripristino di emergenza 176 Errore nell'unità disco rigido 176 Interruzione dell'alimentazione 176 Database danneggiato 177

7 Calcoli di ChemStore C/S

Calcoli statistici 180
Calcoli di un valore singolo 180
Calcoli di regressione 181
Modello di regressione lineare 182
Matrice della regressione 182
Valori statistici e correlati 183
Modifiche della regressione lineare ponderata 184
Modifiche delle funzioni non lineari 185
Comandi della calcolatrice personalizzata 187 Codici di errore e descrizioni 196
Calcoli mediante i campi personalizzati 200
Fattore di risposta originale 200
Elenco di funzioni incorporate 201
Calcolo dell'ora 203
Sincronizzazione dell'ora 203
Timestamp 203
Fusi orari 204
Impostazione dei fusi orari sul PC 205

Indice

207



ChemStore C/S Agilent Guida ai concetti

1

Introduzione a ChemStore C/S

ChemStation e ChemStore C/S 12 Breve presentazione di ChemStore C/S 13



11

1 Introduzione a ChemStore C/S ChemStation e ChemStore C/S

ChemStation e ChemStore C/S

ChemStore C/S è un modulo di valutazione e memorizzazione dei dati per la ChemStation per sistemi LC, LC/MS, GC, CE, CE/MS o A/D. Basato su funzionalità di database standard, ChemStore C/S consente la memorizzazione e il recupero di dati da un database relazionale e include funzioni di revisione dei calcoli e creazione di rapporti su diversi campioni e strumenti.

Dopo l'installazione e la selezione della casella di controllo Connection to Database, le funzionalità di ChemStore C/S vengono aggiunte alla ChemStation. Viene richiesto un accesso utente specifico alla ChemStation e l'interfaccia utente viene potenziata per gestire il trasferimento dei risultati delle analisi nel database, la revisione di dati, il trasferimento degli stessi alla ChemStation per la revisione e/o la rielaborazione di batch e altre funzioni.

L'interfaccia utente del software client di ChemStore C/S viene installata separatamente e consente di estrarre informazioni da un database ChemStore C/S utilizzando query, nonché di creare calcoli, rapporti e grafici su diversi campioni.

ChemStore C/S è disponibile come prodotto autonomo, da eseguire su una singola ChemStation, o come client/server. La versione per computer singolo prevede l'uso di un database MS Access installato su una sola ChemStation. La versione client/server è invece basata su un database Oracle installato su server MS Windows or Unix. Entrambe le versioni offrono la memorizzazione centralizzata di dati e risultati non elaborati unitamente ai metadati, ossia file di metodo e sequenza, utilizzati per creare i risultati.

In entrambi i casi, il software client di ChemStore C/S Client e il database comunicano tramite un driver ODBC standard. Il software client di ChemStore C/S è identico per entrambe le configurazioni, ma la versione client/server offre funzioni aggiuntive per l'archiviazione e il recupero dei dati. Entrambe le versioni tengono traccia delle analisi rielaborate, mantenendo la versione corrente e quelle precedenti in ordine strettamente cronologico, e contengono funzionalità per garantire l'integrità dei dati mediante il collegamento dei dati non elaborati alle informazioni di metodo e sequenza.

Breve presentazione di ChemStore C/S

ChemStore C/S è un modulo di database aggiuntivo per le ChemStation per sistemi LC, LC/MS, GC, CE, CE/MS e A/D.

Prevede le seguenti funzionalità:

Organizzazione di dati

ChemStore C/S è progettato per agevolare l'organizzazione dei risultati in modo flessibile ed efficiente in un database. È possibile impostare studi nei quali raccogliere tutte le analisi associate a un determinato progetto. L'accesso agli studi può essere limitato a determinati utenti per garantire la sicurezza dei dati e la facilità di utilizzo. ChemStore C/S consente inoltre di specificare campi personalizzati nei quali incorporare ulteriori dati e informazioni organizzative associate alle analisi e/o agli studi.

Trasferimento di risultati

Il software ChemStore C/S è strettamente integrato con il software ChemStation. Dopo l'analisi dei risultati, è possibile trasferire le informazioni per una singola analisi, sequenza o batch in modo automatico o interattivo a ChemStore C/S. Oltre ai risultati, le informazioni trasferite possono includere cromatogrammi e spettri, dati non elaborati reali, informazioni relative a metodi e sequenze.

Recupero di insiemi di dati

Una volta raccolti i dati nel database, è possibile recuperare l'insieme di dati desiderato mediante Query Builder, che consente di specificare facilmente i criteri di ricerca. Con Query Builder, l'impostazione delle query è semplificata grazie all'impiego di un'interfaccia grafica invece di una complessa istruzione SQL (Structured Query Language).

Per semplificare le operazioni, è anche possibile memorizzare le query per riutilizzarle successivamente. Breve presentazione di ChemStore C/S

Dopo aver specificato il sottoinsieme di dati desiderato, ossia la query, è possibile elaborarlo in operazioni successive: revisione e approvazione, calcoli su diversi campioni, grafici di controllo, trasferimento a una ChemStation per ulteriore elaborazione di batch e creazione di rapporti. I dati possono inoltre essere esportati in altre applicazioni, quali MS Excel e LIMS.

Revisione e approvazione di dati

La revisione on line dei dati recuperati mediante una query consente di verificare un insieme di risultati di analisi nel relativo contesto. Sulla base delle informazioni concentrate, è possibile utilizzare le funzioni di approvazione e rifiuto integrate o contrassegnare le analisi per il reinoltro alla revisione di batch della ChemStation per operazioni di verifica e rielaborazione più approfondite. La funzione di approvazione prevede fino a tre firme elettroniche per ciascuna versione dei risultati.

Itinerario di controllo delle modifiche

È possibile visualizzare un itinerario di controllo (audit trail), gestito in modo indipendente dai dati delle analisi, che tiene traccia di tutte le modifiche effettuate nell'analisi, nonché informazioni dettagliate sulle modifiche apportate per ciascuna analisi.

Generazione di grafici di controllo

Per visualizzare le tendenze nei dati di risultato selezionati, utilizzare i grafici di controllo inclusi. È possibile visualizzare qualsiasi combinazione di risultati nel contesto, nonché grafici sovrapposti, se lo si desidera. I grafici possono inoltre essere personalizzati in base a specifiche esigenze.

Esecuzione di calcoli personalizzati

Grazie a una calcolatrice personalizzata incorporata è possibile definire calcoli e statistiche su campioni diversi. Il calcolo si basa su uno script facilmente sviluppabile con appositi wizard.

Per la memorizzazione degli script viene utilizzata una funzione di controllo delle versioni. Gli script possono essere riutilizzati per insiemi di dati simili. I risultati del calcolo ed i grafici possono essere inseriti nei rapporti.

Creazione dei rapporti

Dopo aver rivisto e approvato i dati, è in genere necessario creare un rapporto. Grazie a un pulsante sulla barra degli strumenti principale, è possibile creare in modo rapido un rapporto mediante uno dei modelli di rapporto standard. I rapporti possono essere stampati o salvati in un file in vari formati.

Personalizzazione dei rapporti

Se i modelli di rapporto standard compresi in ChemStore C/S non corrispondono ai requisiti richiesti, è possibile modificarli facilmente utilizzando un editor di modelli di rapporto. Tale editor può essere utilizzato anche per creare modelli di rapporto personalizzati. Tutti i dati visibili in ChemStore possono fondamentalmente essere inclusi nel rapporto, così come i dati aggiuntivi definiti dai calcoli specificati dall'utente.

Esportazione in altre applicazioni

Per un'ulteriore elaborazione dei dati, ChemStore C/S consente di esportare le informazioni in MS Excel o stampare i rapporti in un file in formato html, xml o csv. I dati possono inoltre essere esportati negli Appunti di Windows per essere utilizzati in altre applicazioni Windows.

Archiviazione e recupero delle analisi

La versione client/server consente inoltre di copiare i dati in un archivio e, se richiesto, eliminare le analisi archiviate dal database. Le analisi archiviate che non vengono eliminate dal database sono bloccate e non è possibile apportarvi modifiche senza riaprirle. Non è naturalmente possibile recuperare e riaprire le analisi archiviate eliminate in precedenza.

L'archiviazione consente la memorizzazione a lungo termine di dati separati dal database del server. La limitazione del numero di esecuzioni attive nel database è essenziale ai fini delle dimensioni e delle prestazioni del database.

È possibile archiviare in modo interattivo o di volta in volta, oppure impostare l'archiviazione automatica a intervalli regolari. È inoltre possibile utilizzare l'utilità di archiviazione interna ChemStore o utilizzare strumenti di terzi basati su tecnologia XLM. Sul CD di installazione è disponibile un'utilità di archiviazione XLM generica. Per ulteriori informazioni rivolgersi ad un rappresentante Agilent Technologies.

1 Introduzione a ChemStore C/S

Breve presentazione di ChemStore C/S

Protezione e integrità dei dati

Per impedire l'accesso non autorizzato al database o la manomissione dei risultati, a ciascun utente ChemStore C/S viene fornita una password di accesso e un insieme di autorizzazioni che definiscono le funzionalità disponibili per l'utente. Solo l'amministratore o l'utente con i privilegi richiesti può modificare le autorizzazioni utente. In caso di blocco di un account dovuto ad accessi non autorizzati, è possibile impostare ChemStore in modo che notifichi tutti gli utenti interessati tramite e-mail.

A ciascuna analisi nel database è associato un itinerario di controllo contenente un registro di tutte le modifiche apportate all'analisi. Una funzione incorporata di controllo delle versioni, inoltre, assicura che le iniezioni elaborate più volte siano mantenute in ChemStore C/S come insieme e consente di recuperarle in ordine strettamente cronologico. È possibile scegliere di recuperare tutte le versioni, ossia l'insieme completo dei risultati rielaborati, o solo le ultime. Nel primo caso, è possibile decidere di visualizzare solo le versioni più recenti. Un asterisco nella tabella delle analisi indica la presenza di più versioni dell'analisi nel database.

Tutte le interazioni di database che influiscono sulla sicurezza, inoltre, vengono inserite in un registro di database visualizzabile dagli utenti che dispongono di livello di accesso adeguato.

Scalabilità

Il database cresce parallelamente alle esigenze di chi lo utilizza. È possibile iniziare con un sistema autonomo basato su MS Access e passare alla versione client/server basata su Oracle man mano che si aggiungono altri sistemi. Una suite di utility consente di gestire la migrazione dei database autonomi alla versione client/server, che offre la possibilità di archiviare e recuperare i dati e di disporre di database dalle dimensioni notevolmente superiori. Il sistema è in grado di crescere in base alle esigenze relative all'organizzazione e alla creazione di rapporti dei risultati, senza che l'investimento in termini di dati e formazione venga perso durante il processo, poiché l'interfaccia utente di base non subisce modifiche.



ChemStore C/S Agilent Guida ai concetti

2

Concetti di ChemStore C/S

Flusso di lavoro di ChemStore C/S 18 Flusso di dati di ChemStore C/S 19 Organizzazione dei risultati 20 Trasferimento di dati dalla ChemStation 23 Recupero di dati dal database 24 Revisione e approvazione di risultati 29 Interfaccia utente 33 Trasferimento di dati alla ChemStation 50 Gestione delle versioni 51 Eliminazione di analisi dal database 53



2 Concetti di ChemStore C/S

Flusso di lavoro di ChemStore C/S

Flusso di lavoro di ChemStore C/S



Figura 1 Flusso di lavoro tipico di ChemStore C/S

Concetti di ChemStore C/S 2

Flusso di dati di ChemStore C/S

Flusso di dati di ChemStore C/S



Figura 2 Flusso di dati di ChemStore C/S

2 Concetti di ChemStore C/S Organizzazione dei risultati

Organizzazione dei risultati

L'entità centrale organizzativa in ChemStore C/S è l'analisi. Per analisi si intende l'insieme dei risultati ottenuti dall'applicazione di un metodo di analisi ai dati non elaborati derivanti da una singola iniezione. Quando si inserisce un'analisi nel database ChemStore C/S, vengono immesse anche tutte le informazioni associate disponibili relative all'iniezione, al campione e così via. Si tratta dell'unico metodo disponibile per inserire dati nel database.

Organizzazione dei risultati in uno studio

All'interno del database ChemStore C/S le analisi possono essere raggruppate secondo criteri logici. Ad esempio, può essere opportuno raggruppare insieme tutti i risultati analitici relativi a una prova clinica o a uno studio di stabilità. Tale gruppo di analisi viene definito studio. Gli utenti che dispongono delle autorizzazioni richieste (vedere "Protezione" a pagina 125) possono definire il numero desiderato di studi, tuttavia ogni studio deve essere identificato con un nome univoco. Quando i risultati vengono trasferiti dalla ChemStation a ChemStore C/S, le singole analisi, o gruppi di esse, vengono assegnate a uno studio; queste analisi, unite a quelle precedenti assegnate allo stesso studio, sono quindi disponibili come un'unità logica.

È possibile scegliere di memorizzare i dati aggiuntivi insieme ai dati dei risultati, ad esempio il cromatogramma e/o gli spettri. È anche possibile memorizzare i dati non elaborati, il file di metodo e il file di sequenza per garantire la completa integrità dei dati.

Per facilitare l'organizzazione e la creazione di rapporti dei risultati, è possibile associare a uno studio un insieme di campi personalizzati. Vedere "Utilizzo di campi personalizzati" a pagina 21. Questi campi personalizzati possono essere specifici dello studio o utilizzati da altri studi. Tutti i nuovi campi personalizzati specificati durante l'impostazione dello studio diventano immediatamente disponibili per essere utilizzati in altri studi.

Quando si imposta uno studio che utilizza un campo personalizzato, è necessario specificare la modalità di immissione dei dati del campo personalizzato. È possibile scegliere di immettere i dati in modo automatico (tramite una macro della ChemStation) oppure manualmente. In caso di immissione manuale, è possibile impostare il campo in modo che sia sempre richiesta l'immissione di un valore oppure è possibile specificare un valore predefinito. Se si imposta il campo in modo da richiedere sempre l'immissione di un valore, è necessario immettere un valore valido nel campo per consentire il trasferimento dei risultati dell'analisi a ChemStore C/S. Inoltre, per alcuni tipi di campi è possibile specificare alcune caratteristiche, quali valori minimi e massimi per i campi numerici, lunghezza massima della stringa per i campi di testo. Le caratteristiche dell'immissione dati sono specifiche dello studio; se il campo personalizzato viene utilizzato in altri studi, tali caratteristiche possono variare.

Gli studi sono limitati a un elenco di utenti assegnati. Solo gli utenti assegnati a uno studio possono aggiungere o accedere ai dati di tale studio. In questo modo, gruppi diversi possono utilizzare lo stesso database e impedire l'accesso ai dati relativi da parte di utenti non autorizzati. L'accesso limitato agli studi semplifica l'uso del prodotto in quanto l'utente visualizza soltanto i dati appartenenti agli studi a cui è assegnato. L'assegnazione degli studi agli utenti può essere effettuata solo da un amministratore o da un altro utente che disponga dell'autorizzazione ChemStore adeguata.

Utilizzo di campi personalizzati

Oltre ai dati normalmente associati ai risultati analitici e forniti dalla ChemStation, è possibile aggiungere dati esterni al record del database. Tali dati vengono aggiunti sotto forma di campi personalizzati, ossia campi definiti dall'utente contenenti qualsiasi tipo di informazione. Questi campi possono essere definiti in modo che corrispondano al tipo di analisi effettuato normalmente per consentire l'organizzazione dei dati dei risultati.

Ad esempio, in uno studio preclinico può essere necessario impostare campi per aggiungere a ognuno dei gruppi di risultati informazioni relative a:

- Valore pH
- Nome del paziente
- Età del paziente
- Non fumatore
- Data del test
- Sesso del paziente
- Dosaggio applicato
- Altro

Questi dati potranno essere in seguito utilizzati per recuperare uno specifico insieme di risultati di analisi, ad esempio tutti i risultati relativi a un determinato paziente.

Sono disponibili sei tipi di campi personalizzati:

True/False	Il campo può contenere solo il valore True o False (Vero o Falso), ad esempio il campo Non fumatore.
Selection list	Il valore è limitato a un valore specifico contenuto in un elenco definito dall'utente, ad esempio il campo Sesso del paziente consente i valori Maschio o Femmina.
Integer	ll campo può contenere solo un valore intero, ad esempio l'età del paziente è in genere data da un numero intero.
Real	ll campo può contenere qualsiasi valore numerico, ad esempio il dosaggio applicato può essere dato da un valore non intero.
Text	ll campo può contenere solo testo, ad esempio il nome del paziente.
Date/Time	ll campo può contenere solo informazioni relative a data e ora, ad esempio la data del test.

L'organizzazione delle informazioni in un database non consente solo la memorizzazione centralizzata dei risultati di analisi, ma anche la creazione flessibile di rapporti relativi a più campioni e/o più strumenti e analisi di tendenza su un insieme di risultati.

Seguendo la struttura dell'esempio precedente, è possibile confrontare i risultati di alcuni dosaggi e creare un grafico di controllo che visualizzi la concentrazione del componente attivo rilevato.

I campi personalizzati sono relativi all'intero contenuto del database, pertanto è possibile aggiungere a uno studio qualsiasi campo personalizzato definito. Lo stato dei campi personalizzati può essere **attivo** o **inattivo**. L'impostazione dello stato di un campo personalizzato su inattivo non ne impedisce l'utilizzo negli studi configurati per utilizzarlo, ma ne impedisce l'inserimento in studi aggiuntivi.

I campi personalizzati utilizzati in uno studio possono essere configurati per essere sempre richiesti. In tali campi sarà necessario immettere valori validi per consentire il trasferimento dei risultati di analisi a ChemStore C/S.

I campi personalizzati sono protetti da autorizzazioni utente e da password. Vedere "Protezione" a pagina 125. Solo gli utenti che dispongono di apposita autorizzazione possono creare o modificare campi personalizzati; inoltre le modifiche devono essere confermate da firma elettronica.

Trasferimento di dati dalla ChemStation

I risultati di analisi possono essere trasferiti dalla ChemStation a ChemStore C/S in modo interattivo o automatico come parte di una sequenza, in un batch o come campioni singoli. Dopo l'analisi, i dati vengono trasferiti nel database attraverso uno spooler, il quale agisce in background e non impedisce che la ChemStation continui ad operare. Questo processo assicura che la ChemStation non venga rallentata dal processo di trasferimento e protegge dalla perdita di dati nei casi in cui l'inserimento nel database non abbia esito positivo.

Il trasferimento interattivo dei dati viene effettuato dalla finestra Data Analysis della ChemStation, in modalità file di dati singolo, tramite rielaborazione di una sequenza o in Batch Review. È possibile trasferire il file di dati corrente in qualsiasi studio attivo assegnato. Al momento del trasferimento si forniscono i valori necessari del campo personalizzato. È anche possibile modificare i valori predefiniti dei campi personalizzati assegnati al momento dell'impostazione.

Il trasferimento automatico dei dati viene effettuato da una sequenza o da un batch. Ogni analisi della sequenza o del batch viene assegnata a uno studio. È possibile utilizzare più studi e assegnare ogni analisi a uno studio diverso. I valori dei campi personalizzati associati allo studio vengono forniti durante l'impostazione della sequenza o l'elaborazione del batch.

NOTA

Per poter effettuare il trasferimento dei dati interattivo o automatico, è necessario fornire i valori per i campi personalizzati sempre richiesti indicati come *always required*. Le intestazioni di questi campi sono contrassegnate da un asterisco.

I dati selezionati per essere salvati con i risultati (cromatogrammi, spettri o file di dati non elaborati, di metodo e di sequenza) vengono trasferiti con i risultati di analisi.

Recupero di dati dal database

Le analisi vengono recuperate dal database ChemStore C/S mediante una query. Vedere "Impostazione di una query" a pagina 24. Una query è una richiesta che consente di recuperare, fra le migliaia di analisi presenti, un insieme di analisi che soddisfi determinati criteri, ad esempio una query che risponda alla domanda "Quali campioni contengono procaina?". Più specifici sono i criteri, più ridotto sarà l'insieme di analisi recuperate. Prima di recuperare l'insieme di analisi, ChemStore C/S conferma il numero di analisi che verranno recuperate utilizzando i criteri di query correnti.

I dati conformi ai criteri definiti nella query vengono raccolti e copiati nel sistema ChemStore C/S locale come insieme di dati, vale a dire una ns"istantanea" (snapshot) dei dati da rivedere. Vedere la Figura 2 a pagina 19.

Il modo in cui le analisi sono organizzate nel database e le informazioni memorizzate con ogni analisi aumentano notevolemente l'efficienza del recupero dei dati. Le analisi assegnate agli studi, progettate secondo le esigenze del ciclo di lavoro del laboratorio, consentono di ottimizzare il recupero dei risultati di analisi. Ciò è supportato dalla definizione di un insieme debitamente strutturato di campi personalizzati che rispondono nel modo migliore alle esigenze di ricerca di dati.

Ad esempio, se normalmente si raggruppano i risultati in base ai partecipanti al test, è possibile definire il campo personalizzato Partecipante al test. Le ricerche possono essere eseguite nei campi personalizzati mediante criteri di ricerca standard, quali il nome dell'operatore e dello strumento, memorizzati nel database per impostazione predefinita.

Impostazione di una query

ChemStore C/S fornisce due livelli di query: semplice e avanzata. Entrambi i livelli possono essere impostati tramite un costruttore grafico che consente di definire con facilità i criteri di ricerca senza dover apprendere il linguaggio standardizzato SQL (Structured Query Language) utilizzato per specificare i criteri di ricerca nei database relazionali. L'editor grafico consente di selezionare le categorie di dati desiderate e di scegliere voci di dati preesistenti o immettere manualmente dei valori. Per limitare il numero di dati esistenti riportati nella finestra di dialogo è disponibile una selezione degli studi. La query più semplice utilizza un solo dato di una categoria di informazione, ad esempio "Find the samples from the Study called Beta1", dove "Study" è la categoria di dati e "Beta1" è il dato stesso. Se con la query più semplice non vengono trovate le analisi richieste, è possibile estendere i criteri utilizzando più dati o più categorie di dati. Se si selezionano più dati all'interno di una categoria, questi vengono combinati nella query semplice con l'operatore logico OR. Ad esempio "Find the samples from Study Beta1 OR Beta2". Se si selezionano più categorie di dati, queste vengono combinate nella query semplice con l'operatore logico AND. Ad esempio "Find the samples which contain Procaine AND which are control samples". Nelle query avanzate la specifica viene estesa tramite l'utilizzo di altri operatori logici (OR, NOT) e la definizione di gamme di valori. Ad esempio, "Find the samples which contain Procaine AND NOT control samples".

	Query Builder - Simple : <untitled></untitled>			
Seleziona tutte le ver-	Download runs Only latest version All versions	View studies Selected procaine decay C All Studies		Limita la visualizza-
recente	Select data category	Select data item of 1 entries	<u>R</u> etrieve	zione ai dati sotto riportati
Il costruttore grafico consente di seleziona- re le categorie di dati in cui cercare	Counciliant Councilia		Cancel Help Save Save <u>As</u> Ogen Advanced	Valori possibili del dato selezionato
Specifica della query creata mediante il co- struttore grafico	Sample Sample EQUALS 'Control Proceine'		<u>D</u> elete	

Figura 3 Query Builder

In ChemStore C/S sono disponibili due forme di query builder:

• La forma semplice, illustrata nella Figura 3, consente di generare la query selezionando i dati e relativi valori tramite l'interfaccia grafica. I criteri multipli sono combinati con operatore logico AND: vengono recuperate le analisi che soddisfano tutte le condizioni.

2 Concetti di ChemStore C/S

Recupero di dati dal database

• La forma avanzata utilizza la stessa interfaccia grafica, ma consente l'estensione dei criteri tramite le clausole WHERE assolute e relative, l'operatore OR e la negazione. Le clausole WHERE disponibili variano a seconda del tipo di dati, come illustrato nella Figura 1 a pagina 18.

	Numeric	Date/Time	Text	Selection List
is equal	Sì	Sì	Sì	Sì
is greater than	Si	Sì		
is less than	Sì	Sì		
is between	Sì	Sì		
contains			Sì	
clausola relativa		not older than		Utente attualmente registrato, computer corrente

Tabella 1 Clausole WHERE in Advanced Query Builder

L'operatore NOT nega la condizione: is not equal, is not greater than, is not less than, is not between e does not contain.

Dopo aver specificato la query, l'insieme di dati recuperato è disponibile per le operazioni successive:

- revisione e approvazione su schermo;
- calcoli personalizzati;
- creazione di grafici di controllo;
- creazione di rapporti.

Poiché può essere necessario recuperare più volte lo stesso insieme di dati, è possibile salvare le query per eseguirle successivamente.

Le query fanno parte delle impostazioni ChemStore C/S che possono essere condivise tra utenti selezionati. Dopo aver specificato e salvato una query, è anche possibile assegnarla ad altri utenti. Le query sono anche protette dall'utilizzo non autorizzato mediante apposite autorizzazioni utente. Solo gli utenti che dispongono di tali autorizzazioni possono salvare le query o assegnare le query salvate ad altri utenti. Vedere "Protezione" a pagina 125.

Filtro dell'insieme di dati

Spesso l'insieme di dati recuperato mediante una query contiene analisi non richieste per la creazione di uno specifico rapporto o grafico di controllo. In questi casi, è possibile utilizzare un filtro per ottenere solo le analisi richieste e nascondere le altre informazioni. Se ad esempio, una query restituisce 50 campioni eseguiti da due operatori diversi, è possibile applicare un filtro per visualizzare i risultati di un operatore alla volta. Il filtro agisce solo sull'insieme di dati corrente, non sull'intero database e non ne modifica il contenuto. L'impiego di un filtro accelera inoltre il tempo di lavoro.

Sono disponibili due filtri:

- Un filtro personalizzato che può essere specificato utilizzando un costruttore grafico per filtrare l'insieme di dati con criteri di ricerca del tipo impiegato per la creazione di query (vedere la Figura 4). I criteri di ricerca disponibili sono le colonne configurate della tabella dei risultati.
- Il filtro standard contiene un insieme di filtri predefiniti selezionati per riflettere i criteri utilizzati con maggiore frequenza. I criteri disponibili sono Approval Status, Archive Status e Run Version. Vedere la Figura 5 a pagina 28. Il filtro Run Version è utile quando si sceglie di recuperare tutte le versioni di un'analisi, ma si desidera rivedere solo la versione più recente.

Se si applicano insieme il filtro standard e un filtro personalizzato, i criteri vengono combinati con un operatore AND.



Figura 4 Costruttore grafico del filtro personalizzato

2 Concetti di ChemStore C/S

Recupero di dati dal database

Standard Filter		
Approval status	a that comply with	ОК
Archive status	No Filter	Cancel
Run version	Only latest	

Figura 5 Voci di selezione del filtro standard

I filtri sono disponibili in due stati:

- Con lo stato Filter vengono visualizzate solo le analisi che soddisfano le condizioni del filtro, le altre analisi vengono nascoste.
- Con lo stato Complement Filter vengono visualizzate solo le analisi che *non* soddisfano le condizioni del filtro, quelle che le soddisfano vengono invece nascoste.

Entrambi gli stati del filtro vengono impostati esattamente nello stesso modo e possono essere attivati e disattivati. È possibile attivare alternativamente Filter e Complement Filter per visualizzare i due insiemi complementari di analisi che compongono l'insieme di dati.

Come le query, i filtri personalizzati fanno parte delle impostazioni di ChemStore C/S che possono essere condivise tra utenti selezionati. Dopo aver specificato e salvato un filtro personalizzato, è possibile assegnarlo anche ad altri utenti. I filtri personalizzati sono anche protetti dall'utilizzo non autorizzato mediante apposite autorizzazioni utente. Solo gli utenti che dispongono di tali autorizzazioni possono salvare un filtro personalizzato o assegnarlo ad altri utenti. Vedere "Protezione" a pagina 125.

Revisione e approvazione di risultati

ChemStore C/S è progettato per la revisione dei risultati di analisi nel contesto. La funzione Batch Review della ChemStation è lo strumento ideale per rivedere e trasferire i dati dalla ChemStation al database ChemStore C/S.

Una volta immessi i risultati nel database, è possibile consolidarli e rivederli nel contesto. Dopo aver recuperato i dati desiderati mediante una query e, se necessario, dopo aver filtrato un sottoinsieme dei dati recuperati, è possibile visualizzare i risultati rimanenti organizzandoli per campione (Sample Review) o per composto (Compound Review).

Stato di approvazione delle analisi

Ad ogni analisi trasferita dalla ChemStation a ChemStore C/S viene assegnato lo stato di approvazione Approval Pending. A seconda della configurazione dello studio, tutte le analisi possono essere approvate elettronicamente e firmate da uno o più revisori di primo livello e uno o due revisori di secondo livello. L'approvazione può anche essere negata tramite l'opzione "Reject". In caso di rifiuto da parte di un utente, l'approvazione di altri revisori viene annullata.

Le autorizzazioni utente per il primo ed il secondo livello di approvazione (vedere "Protezione" a pagina 125) possono essere assegnate individualmente. Le due approvazioni di secondo livello si equivalgono dal punto di vista dell'ordine di esecuzione. Un'approvazione di secondo livello può essere applicata per analisi senza approvazione di primo livello.

Un utente con le debite autorizzazioni può approvare o rifiutare singole analisi o interi insiemi di analisi. Il procedimento di approvazione o rifiuto si divide in due parti, come riportato nella Figura 6 a pagina 30.

2 Concetti di ChemStore C/S

Revisione e approvazione di risultati

Samp	le Compou	nd]			
		i o j o	1.= 2.= 3.=		
Run	Mark run for	Sample name	Audit	Status 📩	
69		Procaine decay		Approval Pending	
70	°	Procaine decay		Approval Pending	
71		Control PABS		Approval Pending	
72	°	Control Procaine		Approval Pending	
73		Procaine decay		Approval Pending	
74		Procaine decay	Ť.	Approval Pending	
75	°	Procaine decay	1	Approval Pending	
76	·	Procaine decay		Approval Pending	
77		Procaine decay		Approval Pending	
78	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	Control PABS		Approval Pending	
79		Control Procaine		Approval Pending	
80	S	Procaine decay		Approval Pending	
81	·	Procaine decay	1	Approval Pending	
82	°	Procaine decay		Approval Pending	
83	·	Procaine decay	1	Approval Pending	
84	°	Procaine decay		Approval Pending	
85		Control PABS		Approval Pending	
86		Control Procaine		Annroval Pending	
87	°	Procaine decay		Batch Processing	
88		Procaine decay		Approval	
89	°	Procaine decay		<u>R</u> ejecting	
90		Procaine decay			
91		Procaine decay	· · · · ·	All For Batch Processing	
92		Control PABS		All For <u>Approval</u>	
93		Control Procaine	1	All For Rejecting	
94		Procaine decay		None For Batch Processing	
95		Procaine decay		None For Approval	
96		Procaine decay		None For Poinsting	
97	P	Procaine decay		None For helecting	
98	RB	Procaine decay		Exclude Run	
I Approve I Reject I Batch		_	E <u>x</u> clude All Runs Include Run Include All Runs		



- Fase 1contrassegno delle analisi per l'approvazione o il rifiuto durante la revisione
dei risultati
- Fase 2 applicazione della firma elettronica ed osservazione di approvazione/rifiuto ad una singola analisi o a tutte le analisi contrassegnate nella fase 1. Per uniformare le osservazioni alle approvazioni, gli amministratori possono predefinire un insieme di osservazioni standard dal menu Approval configuration (Figura 7 a pagina 31). Tuttavia l'utente può aggiungere nuove osservazioni oppure modificare o estendere osservazioni predefinite durante la procedura di approvazione.

Concetti di ChemStore C/S 2

Revisione e approvazione di risultati

pproval configuration			
Default approval configuration	Appr	oval configurat	ion template
Available approval comments:			
Approved Rejected [calibration range exceeded Rejected [non-resolved peaks]	1]		
S <u>h</u> ort description:			
Approved			
The results meet the aproval criteria a	ccording to SOP	240-A98	
	New	Save	<u>D</u> elete
	OK	Cancel	Help

Figura 7 Finestra di configurazione Approval Comments

Ogni operazione è documentata in un itinerario di controllo (vedere "Itinerario di controllo (Audit Trail)" a pagina 155) con l'ora dell'operazione, lo stato dell'analisi, il nome dell'operatore e un'osservazione fornita o selezionata dall'operatore. La modifica dello stato di approvazione è confermato come '1st level approved', '2nd level approved' o 'Rejected'.

Un'analisi approvata può essere successivamente rifiutata e viceversa. Quando si esegue un'operazione di questo tipo viene richiesto il motivo del cambiamento di stato. Il cambiamento di stato genera inoltre una voce nell'itinerario di controllo.

Le analisi possono anche essere bloccate automaticamente una volta raggiunto uno stato di approvazione specificato. Il blocco di un'analisi impedisce un'ulteriore rielaborazione della stessa. Per eliminare il blocco, l'approvazione deve essere rifiutata. Revisione e approvazione di risultati

Se si modificano i valori dei campi personalizzati di un'analisi approvata, il relativo stato di approvazione viene reimpostato su Approval Pending. Nella versione client/server, a un'analisi riaperta viene automaticamente assegnato lo stato di approvazione Approval Pending.



Figura 8 Transizioni dello stato di approvazione delle analisi

Interfaccia utente

La finestra di ChemStore C/S è suddivisa in quattro aree (vedere la Figura 9 a pagina 36 e la Figura 10 a pagina 41):

- barra degli strumenti principale;
- barra degli strumenti secondaria;
- riquadro sinistro del video;
- riquadro destro del video.

Le impostazioni dell'interfaccia utente, incluse quelle relative agli elementi interamente configurabili dall'utente, possono essere salvate e richiamate successivamente. Vedere "Impostazioni dell'interfaccia utente" a pagina 48.

Barra degli strumenti principale

La barra degli strumenti principale è visualizzata sotto la barra dei menu nella parte superiore della finestra ChemStore C/S. Contiene gli strumenti che consentono di impostare query e filtri, di passare da una finestra all'altra e scorrere i layout, nonché di impostare e stampare i rapporti. Tutte le attività supportate dagli strumenti delle barre sono disponibili anche attraverso voci di menu.

I seguenti strumenti sono disponibili in tutte le modalità:



Attiva le finestre Sample o Compound, utilizzate per la revisione, l'approvazione, il rifiuto e il contrassegno delle analisi per l'elaborazione batch.



Attiva la finestra Delete nella versione autonoma o la finestra Archive/Delete nella versione client/server, utilizzata per contrassegnare le analisi per l'archiviazione e/o l'eliminazione. Questo pulsante non è presente se l'utente corrente non dispone dell'autorizzazione Archive/Delete.

2 Concetti di ChemStore C/S

Interfaccia utente



Questo strumento appare due volte, nella calcolatrice personalizzata e nel contesto del rapporto. Visualizza un menu di scelta rapida contenente opzioni per creare, modificare oppure gestire modelli di rapporto o di calcolo.



Visualizza un'anteprima dei risultati dei calcoli correnti utilizzando il modello di calcolo attualmente selezionato.



Visualizza un'anteprima del rapporto corrente utilizzando il modello di rapporto attualmente selezionato.



Stampa un rapporto dei risultati correnti utilizzando il modello di rapporto attualmente selezionato sulla stampante selezionata.



Visualizza un menu di scelta rapida contenente opzioni per salvare le attuali impostazioni dell'interfaccia utente per richiamarle successivamente, gestire quelle precedentemente salvate o selezionarne una.

Le due schede, Sample e Compound, attivano le finestre Sample e Compound. Ogni layout include una barra degli strumenti secondaria, il cui formato dipende dal layout selezionato (vedere "Finestra campione" a pagina 36 e "Finestra composto" a pagina 41).

I seguenti strumenti sono disponibili nella finestra Sample:



Attiva il layout Sample Review



Attiva il layout Sample Table



Attiva il layout Sample Chart

Quando si seleziona Regression Statistics nella finestra campione sono disponibili due strumenti aggiuntivi:



Visualizza la tabella Regression Results e le statistiche calcolate



Visualizza il grafico Regression Residuals

I seguenti strumenti sono disponibili nella finestra Compound:



Attiva il layout Compound Review



Attiva il layout Compound Table



Attiva il layout Compound Chart

Quando si seleziona Regression Statistics nella finestra composto sono disponibili due strumenti aggiuntivi:



Visualizza la tabella Regression Results e le statistiche calcolate



Visualizza il grafico Regression Residuals

2 Concetti di ChemStore C/S Interfaccia utente

Finestra campione



Figura 9 Layout Sample Review

La finestra campione contiene le analisi recuperate in base alle informazioni del campione. Offre tre layout, contenenti ognuno informazioni diverse sull'insieme di dati corrente:

- Il layout Sample Review è composto da tre pannelli: il pannello di sinistra contiene l'elenco delle analisi, la parte superiore del pannello di destra contiene la finestra Chromatogram e la parte inferiore la tabella Summary Sample. Vedere la Figura 9 a pagina 36.
- Il layout Sample Table è composto da due pannelli: il pannello di sinistra contiene l'elenco delle analisi e il pannello di destra la tabella Sample.
- Il layout Sample Chart è composto da due pannelli: a sinistra l'elenco Run List e a destra il grafico Sample.

Inoltre, nella finestra campione possono essere visualizzati due diversi insiemi di risultati statistici.

- Con Summary Statistics il riquadro destro del layout Sample Table viene suddiviso in due parti, con la tabella Sample nella parte superiore e i risultati delle statistiche di riepilogo nella parte inferiore.
- Con Regression Statistics sono disponibili due layout:
Il layout Regression Results è composto da tre pannelli: il pannello di sinistra contiene l'elenco delle analisi, la parte superiore del pannello di destra contiene la tabella Regression Result e la parte inferiore le statistiche di regressione calcolate.

Il layout Regression Residuals è composto da due pannelli: il pannello di sinistra contiene l'elenco delle analisi e il pannello di destra il grafico Residuals.

Barra degli strumenti secondaria nella finestra campione

Gli strumenti disponibili nella barra degli strumenti secondaria nella finestra campione dipendono dal layout selezionato.

I seguenti strumenti sono disponibili in tutti i layout della finestra campione:



Consente di impostare su Approved lo stato di approvazione di tutte le analisi contrassegnate per l'approvazione.



Consente di impostare su Rejected lo stato di approvazione di tutte le analisi contrassegnate per il rifiuto.



Consente di impostare uno o più batch per le analisi contrassegnate per la rielaborazione batch.



Visualizza le informazioni relative ai campioni per l'analisi corrente, inclusi i parametri di elaborazione relativi al campione.



Visualizza le informazioni relative alle analisi e ai dati per l'analisi corrente.

Visualizza l'itinerario di controllo per tutte le versioni dell'iniezione corrente.



Visualizza i parametri di metodo della ChemStation per l'analisi selezionata. La funzione attiva solo per le versioni di analisi trasferite in ChemStore, versione B.02.02 o superiore.



Visualizza la finestra di dialogo di selezione per la selezione delle colonne da includere nella tabella Sample.

2 Concetti di ChemStore C/S

Interfaccia utente



Visualizza un menu che consente di passare dal filtro personalizzato normale al filtro complementare.



Attiva e disattiva lo stato del filtro personalizzato normale corrente.



Attiva e disattiva lo stato del filtro complementare corrente.



Consente di esportare i dati negli Appunti di Windows o in un file in formato Microsoft Excel.



Consente di stampare una o più sezioni della finestra corrente sulla stampante selezionata.

Il layout Sample Review aggiunge uno strumento all'insieme degli strumenti generali:



Avvia una procedura automatica di revisione di un'analisi alla volta. Per interrompere la procedura automatica, selezionare il pulsante Stop che sostituisce il pulsante Start. È possibile configurare l'intervallo di tempo delle fasi della procedura automatica.

Il layout Sample Table aggiunge due strumenti all'insieme degli strumenti generali:



Dispone i risultati della colonna selezionata della tabella Sample in ordine alfanumerico o in base alla data/ora.



Dispone i risultati della colonna selezionata della tabella Sample in ordine inverso alfanumerico o in base alla data/ora.

Il layout Sample Chart aggiunge uno strumento all'insieme degli strumenti generali:



Consente di specificare le opzioni del grafico.

Regression Statistics aggiunge uno strumento agli strumenti precedentemente indicati:



Consente di impostare i parametri per il calcolo delle statistiche di regressione e dei residui.

Elenco delle analisi

L'elenco delle analisi (vedere la Figura 9 a pagina 36) è una tabella contenente le informazioni sulle analisi e sull'insieme di dati corrente. La tabella contiene cinque colonne.

- Nella colonna Run è riportato il numero di analisi dell'insieme di dati.
- Nella colonna Mark run for è riportato il contrassegno dato dell'analisi:
 - P indica che l'analisi è stata contrassegnata per l'approvazione
 - R indica che l'analisi è stata contrassegnata per il rifiuto
 - B indica che l'analisi è stata contrassegnata per l'inclusione in un batch per essere rielaborata nella ChemStation
 - EXC indica che l'analisi è stata esclusa dai rapporti e dai calcoli statistici
- Nella colonna Sample name è riportato il nome del campione.
- Nella colonna Audit è indicato se un'analisi è già stata rielaborata:
 - Se è stata recuperata solo la versione più recente, un asterisco indica che esistono più versioni di un'analisi.
 - Se sono state recuperate tutte le versioni, queste vengono numerate in sequenza, 1 indica la prima, + indica la più recente.
 - Visualizza i parametri di metodo della ChemStation per l'analisi selezionata. La funzione attiva solo per le versioni di analisi trasferite in ChemStore, versione B.02.02 o superiore.
- Nella colonna Status è riportato lo stato dell'analisi, lo stato dell'approvazione nella revisione dati o lo stato di archiviazione nella finestra Archive/Delete.

Utilizzare le caselle di controllo poste nella parte inferiore del pannello per contrassegnare le analisi per l'approvazione, il rifiuto o l'elaborazione batch oppure fare clic con il pulsante destro del mouse e selezionare un'opzione dal menu di scelta rapida che viene visualizzato. Contrassegnando le analisi non se ne modifica lo stato di approvazione (vedere "Stato di approvazione delle analisi" a pagina 29) né si trasferiscono in un batch. Lo stato di approvazione delle analisi si modifica solo utilizzando lo strumento appropriato, ossia lo strumento Approve per impostare su Approved lo stato di approvazione delle analisi contrassegnate per l'approvazione o lo strumento Reject per impostare su Rejected lo stato delle analisi contrassegnate per il rifiuto, mentre il batch si imposta solo utilizzando lo strumento Batch Processing. Se si approva o rifiuta un'analisi, è necessario fornire una motivazione del cambiamento di stato. Questa informazione viene immessa nell'itinerario di controllo dell'analisi insieme con il cambiamento di stato.

Tabella Summary Sample

La tabella Summary Sample contiene le informazioni relative a ciascun picco dell'analisi selezionata nel relativo elenco. È possibile configurarla e selezionare le informazioni visualizzate. Vedere "Configurazione delle tabelle" a pagina 45. Per procedere di un'analisi alla volta è possibile utilizzare i pulsanti Next e Previous posti al di sotto della tabella. Il pulsante Exclude contrassegna l'analisi come Excluded e la rimuove dal pannello di destra di Sample Review. Per rimuovere il contrassegno di esclusione utilizzare il pulsante Include.

Tabella Sample

La tabella Sample della finestra Table Layout contiene informazioni su ogni analisi presente nel relativo elenco. È possibile configurarla e selezionare le informazioni visualizzate. Vedere "Configurazione delle tabelle" a pagina 45. In genere la finestra viene utilizzata per visualizzare l'equivalente alla tavola di sequenza in un flusso di lavoro orientato alla sequenza.



Finestra composto

Figura 10 Layout Compound Review

Nella finestra composto sono visualizzate le analisi recuperate in base alle informazioni sul composto. Come la finestra campione, dispone di tre layout che forniscono informazioni diverse sull'insieme di dati corrente:

- Il layout Compound Review è composto da quattro pannelli: l'elenco dei composti nel pannello di sinistra, la finestra Chromatogram nella parte superiore sinistra del pannello destro, la finestra Spectrum nella parte superiore destra del pannello destro e la tabella Summary Results nella parte inferiore del pannello destro. Vedere la Figura 10 a pagina 41.
- Il layout Compound Table è composto da due pannelli: il pannello di sinistra contiene l'elenco dei composti e il pannello di destra la tabella Results.
- Il layout Compound Chart è composto da due pannelli: il pannello di sinistra contiene l'elenco dei composti e il pannello di destra il grafico Compound.

Inoltre, nella finestra composto possono essere visualizzati due diversi insiemi di risultati statistici:

• Con Summary Statistics il riquadro destro del layout Compound Table viene suddiviso in due parti: la tabella dei risultati viene visualizzata nella parte superiore e i risultati delle statistiche di riepilogo nella parte inferiore.

Interfaccia utente

- Con Regression Statistics sono disponibili due layout:
 - Il layout Regression Results è composto da tre pannelli: il pannello di sinistra contiene l'elenco dei composti, la parte superiore del pannello di destra contiene la tabella Regression Results e la parte inferiore le statistiche di regressione calcolate.
 - Il layout Regression Residuals è composto da due pannelli: il pannello di sinistra contiene l'elenco dei composti e il pannello di destra il grafico Residuals.

Barra degli strumenti secondaria nella finestra composto

Gli strumenti disponibili nella barra degli strumenti secondaria nella finestra composto dipendono dal layout selezionato.

I seguenti strumenti sono disponibili in tutti i layout della finestra composto:



Visualizza la finestra di dialogo di selezione per consentire la selezione delle colonne da includere nella tabella Results.



Visualizza un menu che consente di passare dal filtro personalizzato normale al filtro complementare.



Attiva e disattiva lo stato del filtro personalizzato corrente.



Attiva e disattiva lo stato del filtro complementare corrente.

NOTA

I dati disponibili per il filtro si basano esclusivamente sui dati relativi ai campioni.



Consente di esportare i dati negli Appunti di Windows o in un file in formato Microsoft Excel.



Consente di stampare una o più sezioni della finestra corrente sulla stampante selezionata. Il layout Compound Review aggiunge cinque strumenti all'insieme degli strumenti generali:



Consente di impostare su Approved lo stato di approvazione di tutte le analisi contrassegnate per l'approvazione.



Consente di impostare su Rejected lo stato di approvazione di tutte le analisi contrassegnate per il rifiuto.



Consente di impostare uno o più batch per le analisi contrassegnate per la rielaborazione batch.



Visualizza le informazioni relative ai picchi del composto corrente.



Avvia una procedura automatica di revisione di un'analisi alla volta. Per interrompere la procedura automatica, selezionare il pulsante Stop che sostituisce il pulsante Start. È possibile configurare l'intervallo di tempo delle fasi della procedura automatica.

Il layout Compound Table aggiunge due strumenti all'insieme degli strumenti generali:



Dispone i risultati della colonna selezionata della tabella Results in ordine alfanumerico o in base a data e ora.



Dispone i risultati della colonna selezionata della tabella Results in ordine inverso alfanumerico o in base a data e ora.

Il layout Compound Chart aggiunge uno strumento all'insieme degli strumenti generali:



Consente di specificare le opzioni del grafico.

Il layout Regression Statistics aggiunge uno strumento agli strumenti precedentemente indicati:



Consente di impostare i parametri per il calcolo delle statistiche di regressione e dei residui.

2 Concetti di ChemStore C/S Interfaccia utente

Elenco dei composti

L'elenco dei composti contiene tutti i composti di analisi (analiti) presenti nell'insieme di dati corrente. Vedere la Figura 10 a pagina 41. I composti calibrati sono riportati con il nome, quelli non calibrati sono riporati come Uncalibrated Compounds. Per visualizzare un composto selezionarlo dall'elenco. Nel layout Compound Review è possibile selezionare solo un composto, mentre nel layout Compound Table è disponibile una colonna aggiuntiva che consente di selezionare più composti da visualizzare. Nel layout Compound Chart è possibile rappresentare graficamente più parametri di un unico composto o singoli parametri di più composti. Se si rappresenta graficamente più parametri di un unico composto, le tracce vengono normalizzate al valore maggiore dell'insieme di dati.

Tabella Summary Results

La tabella Summary Results visualizza le informazioni per il composto selezionato in ogni analisi. La tabella è configurabile e consente di selezionare le informazioni visualizzate. Vedere "Configurazione delle tabelle" a pagina 45. Utilizzare le caselle di controllo poste al di sotto della tabella per contrassegnare le analisi per l'approvazione, il rifiuto o l'elaborazione batch. Contrassegnando le analisi non se ne modifica lo stato di approvazione (vedere "Stato di approvazione delle analisi" a pagina 29) né si trasferiscono in un batch. Lo stato di approvazione delle analisi si modifica solo utilizzando lo strumento appropriato, ossia lo strumento Approve per impostare su Approved lo stato di approvazione delle analisi contrassegnate per l'approvazione o lo strumento Reject per impostare su Rejected lo stato delle analisi contrassegnate per il rifiuto, mentre il batch si imposta solo utilizzando lo strumento Batch Processing.

Tabella Results

La tabella Results visualizza le informazioni per tutti i composti selezionati in ogni analisi. È possibile configurarla e selezionare le informazioni visualizzate. Vedere "Configurazione delle tabelle" a pagina 45. È inoltre possibile utilizzarla per selezionare gli enumeratori degli assi X e Y dei grafici. Vedere Figura 11 a pagina 45.

Configurazione delle tabelle

È possibile configurare tutte le tabelle visualizzate nel pannello destro della finestra di ChemStore C/S. Utilizzando una finestra di dialogo è possibile selezionare le colonne che costituiscono ogni tabella e le rispettive sequenze nella tabella. Per le colonne numeriche, è invece possibile selezionare il formato e laprecisione del numero, mentre per quelle della data è anche possibile scegliere lo stile di finestra. La finestra di dialogo di configurazione contiene solo le colonne valide per la tabella che si sta configurando.

Durante la configurazione delle colonne, è anche possibile selezionare gli enumeratori per gli assi X e Y dei grafici, utilizzando le caselle di controllo della relativa finestra di dialogo di configurazione. Gli enumeratori degli assi X e Y possono essere selezionati solo dalle colonne incluse nella tabella. È possibile scegliere un solo enumeratore dell'asse X, ma il numero di enumeratori desiderati sull'asse Y.



Figura 11 Finestra di dialogo Column configuration

Oltre ai risultati standard disponibili dalla ChemStation, è possibile definire le colonne risultanti dei calcoli aritmetici utilizzando i dati disponibili nella tabella configurata.

Calcoli nell'ambito dello stesso campione

Nelle tabelle dei risultati, è possibile configurare una colonna che contenga un'espressione matematica per eseguire un calcolo semplice nell'ambito dello stesso campione, ad esempio una somma o una proporzione, sui risultati relativi a ogni analisi o composto.

Questi calcoli nell'ambito dello stesso campione si riferiscono all'analisi o al picco presente nella riga della tabella. Per calcoli su diversi campioni e calcoli complessi nell'ambito dello stesso campione (relativamente ad una colonna della tabella) vedere "Statistiche" a pagina 46 e "Operazioni preliminari all'utilizzo dell'editor di script della calcolatrice personalizzata" a pagina 57.

Nei calcoli personalizzati, è possibile utilizzare qualsiasi dato della tabella, l'espressione matematica può includere operatori aritmetici e funzioni matematiche, nonché costanti numeriche.

Statistiche

ChemStore C/S fornisce tre livelli di statistiche:

- Le statistiche di riepilogo sono visualizzate al di sotto della tabella Sample in Sample Review o al di sotto della tabella Results in Compound Review.
- Le statistiche di regressione sono visualizzate in due layout separati: il layout Regression Results Table e il layout Residuals Chart.
- Se i risultati della statistica devono essere utilizzati per ulteriori calcoli, le statistiche riassuntive e di regressione possono anch'esse essere calcolate tramite un sistema personalizzato. Vedere "Esempio: creazione di uno script di calcolo per il rapporto" a pagina 69.

Statistiche di riepilogo

Per ogni colonna della tabella Sample o della tabella Results vengono calcolate e visualizzate statistiche di riepilogo. Le statistiche sono le seguenti:

Count	Numero di valori nell'insieme di dati
Max	Valore massimo nell'insieme di dati
Mean	Valore medio nell'insieme di dati
Min	Valore minimo nell'insieme di dati

Concetti di ChemStore C/S 2 Interfaccia utente

RSD	Deviazione standard relativa dei valori nell'insieme di dati
Std. Dev	Deviazione standard dei valori nell'insieme di dati
Sum	Somma dei valori nell'insieme di dati
Variance	Varianza dei valori nell'insieme di dati

Per informazioni dettagliate sui calcoli utilizzati nelle statistiche di riepilogo, vedere "Calcoli statistici" a pagina 176.

Statistiche di regressione

Per informazioni dettagliate sui calcoli utilizzati nelle statistiche di regressione, vedere "Calcoli di regressione" a pagina 177.

Creazione di grafici di controllo

È possibile creare grafici dai risultati che si decide di includere nella tabella Sample in Sample Review o nella tabella Results nella finestra composto. Gli enumeratori degli assi X e Y scelti quando si è impostata la tabella vengono trasferiti nel grafico. È comunque possibile utilizzare i pulsanti sugli assi X e Y per modificare le selezioni, ad esempio per semplificare il grafico.

Utilizzando la finestra di dialogo Chart Options, accessibile mediante il menu opzioni o dalla barra degli strumenti, è possibile scegliere il colore, lo stile e la forma di punti e linee di ogni riga del grafico. È anche possibile scegliere lo stile, le dimensioni e la posizione del titolo, le etichette degli assi e la legenda del grafico.

Per impostazione predefinita, i grafici sono visualizzati con una scala automatica degli assi: le dimensioni degli assi X e Y sono regolate dal valore minimo al valore massimo dei rispettivi enumeratori. È possibile modificare la scala impostando valori massimi e minimi e specificare la precisione dei valori di scala degli assi. È anche possibile scegliere di visualizzare i dati su assi logaritmici, in questo caso le impostazioni di precisione non hanno effetto. Non è possibile visualizzare gli enumeratori del tempo in forma logaritmica. Punti dati inferiori o pari a zero non vengono visualizzati sulle tracce logaritmiche.

Aggiunta di linee limite

Oltre alla traccia dei risultati è possibile aggiungere ai grafici fino a cinque linee limite: linea centrale, limiti di avviso inferiori e superiori e limiti critici inferiori e superiori. Per impostare le posizioni di queste linee sull'asse Y, è possibile utilizzare valori calcolati (valore medio e deviazione standard) oppure valori specificati:

Center Line	Può essere basata sul valore medio di uno degli enumeratori dell'asse Y oppure impostata su un valore specificato.
Limit Lines	Può trattarsi di valori specificati o impostati su una differenza specificata dalla linea centrale. La differenza specificata può essere un valore assoluto o basata sulla deviazione standard dell'enumeratore dell'asse Y selezionato.

Impostazioni dell'interfaccia utente

Dopo aver rivisto i dati e impostato le tabelle, i calcoli personalizzati, i grafici di controllo e le opzioni di statistica, è possibile salvare queste impostazioni dell'interfaccia utente per poterle richiamare successivamente. Vedere la Figura 12. Le informazioni salvate non includono solo la configurazione e il formato delle tabelle e dei grafici configurabili, ma anche la larghezza delle colonne nelle tabelle non configurabili, come gli elenchi delle analisi e dei composti e le dimensioni dei pannelli di ogni layout. Le impostazioni dell'interfaccia utente vengono salvate con un nome e sono disponibili per essere riutilizzate successivamente. Gli utenti che dispongono dell"autorizzazione alla gestione delle impostazioni dell'interfaccia utente possono anche allocare le impostazioni salvate ad altri utenti affinché possano anch'essi utilizzarle.



Figura 12 Impostazioni configurabili dell'interfaccia utente

Trasferimento di dati alla ChemStation

Il trasferimento di dati da ChemStore C/S alla ChemStation si svolge in due fasi.

La prima fase ha luogo durante il processo di revisione in ChemStore C/S, quando si selezionano le analisi da trasferire nuovamente alla ChemStation per la rielaborazione o una nuova analisi. L'aggiunta di un'analisi alla richiesta di un batch implica la creazione di una voce nell'itinerario di controllo. Dopo aver selezionato tutte le analisi desiderate, queste vengono trasferite in uno o più batch, insieme a tutte le informazioni associate, nome dello studio, valori dei campi personalizzati e attributi. Se nella posizione originale vengono trovati file identici a quelli da trasferire, il trasferimento non viene effettuato. Se i file non esistono nella posizione originale e sono disponibili nel database, vengono trasferiti alla ChemStation in un'area di memorizzazione temporanea separata.

La seconda fase ha luogo nella ChemStation quando si sceglie di caricare un batch ChemStore C/S nella funzione Batch Review. Se in ChemStore C/S è stato impostato più di un batch, selezionare quello da caricare da un elenco di batch in sospeso. L'elenco include solo i batch assegnati all'utente corrente della ChemStation o a tutti gli utenti.

È anche possibile scegliere di ricaricare interattivamente i file salvati con un'analisi o un'intera sequenza dall'interfaccia di informazioni dell'analisi (file di dati non elaborati, di metodo o di sequenza). In questo caso, se i file esistono già nella ChemStation, viene richiesto di modificare il percorso di destinazione o di annullare il trasferimento.

Le analisi rielaborate trasferite in ChemStore C/S vengono memorizzate nel database come nuove analisi e non sovrascrivono i risultati originali. Questi ultimi vengono mantenuti nel database e possono essere recuperati (se soddisfano i criteri di ricerca). È possibile utilizzare il filtro standard per visualizzare tutte le versioni (la più recente insieme alle precedenti) oppure solo la più recente.

Gestione delle versioni

ChemStore C/S mantiene tutte le versioni precedenti dei file rielaborati dalla ChemStation. Se si sceglie di memorizzare con i dati i file di dati non elaborati, di metodo e di sequenza, solo i file che sono stati modificati vengono memorizzati con la nuova versione; ciò significa che il file di dati non elaborati viene memorizzato una sola volta, il file di metodo viene memorizzato solo se si è modificato il metodo e il file di sequenza viene memorizzato solo se l'analisi è trasferita in una sequenza e non in un batch o manualmente.

Quando si imposta una query, è possibile scegliere di recuperare tutte le versioni dell'analisi o solo la più recente. Se si sceglie di recuperare tutte le versioni, è possibile applicare un filtro standard per visualizzare solo la versione più recente.

Quando vengono visualizzate tutte le versioni dell'analisi, nella colonna Audit dell'elenco delle analisi viene riportato il numero di versione: 1 indica la versione meno recente, 2 indica la successiva, mentre + indica la versione più recente.

Se viene visualizzata solo la versione più recente, un asterisco (*) nella colonna Audit indica che nel database sono presenti più versioni dell'analisi.

Una <A> nella colonna Audit indica in genere che sono disponibili informazioni dettagliate per l'analisi oltre a quelle aggiunte alla versione nel database (evento: NEW). Gli eventi riportati di seguito sono caratterizzati dal segno <A>:

- analisi aggiunta a un nuovo batch
- · stato di approvazione dell'analisi modificato o approvazione rifiutata
- analisi riaperta
- · valore di campo personalizzato modificato
- nome del campione modificato

2 Concetti di ChemStore C/S

Gestione delle versioni

	Run	Mark run for	Sample name	Audit	Status	1
	1		PABS level 1	<a>	Approved	
	2		PABS level 2	* <a>	Approved	_
	3		PABS level 3	* <a>	Approved	
Indica che nel data- base sono presenti più versioni		Recupe	ero di tutte	le ve	rsioni	Indica una voce nell'itinerario di con- trollo per la versione più recente
Indica la versione	D	halash suu fas	Constantion	A Da	Chabus	7
più recente	Run	Mark run ror	Sample name	Audit	Status	_
-	8		PABS level 3	+ <a>	Approved	_
	9		PABS level 3	2 < A>	Rejected	_
	10		PABS level 3	1 (A)	Rejected	_
Versioni precedenti					Indie nell'	ca una voce estesa itinerario di controllo nuesta versione

Recupero della sola versione più recente

Figura 13 Recupero e visualizzazione delle versioni

Eliminazione di analisi dal database

È possibile eliminare analisi dal database ChemStore C/S utilizzando la finestra Delete della versione autonoma o la finestra Archive/Delete della versione client/server. Nella versione client/server, è possibile scegliere di archiviare le analisi prima di eliminarle o di eliminarle senza archiviarle. Per archiviare i dati nella versione autonoma, copiare i file del database *.mdb sul supporto di archiviazione.

AVVERTENZA

Le analisi eliminate vengono rimosse dal database e non possono essere recuperate. Accertarsi di eliminare solo le analisi già archiviate, copiate su un altro supporto o non più necessarie.

Selezionare le analisi da eliminare dal relativo elenco nel pannello sinistro della finestra Delete della versione autonoma o nella finestra Archive/Delete della versione client/server. Per eliminare le analisi, selezionare il pulsante Delete dalla barra degli strumenti.

L'eliminazione è protetta mediante autorizzazione utente e password. Le finestre Archive/Delete e Delete sono disponibili solo per gli utenti che dispongono delle autorizzazioni appropriate e per dare inizio all'eliminazione è necessario immettere la password.

2 Concetti di ChemStore C/S

Eliminazione di analisi dal database



ChemStore C/S Agilent Guida ai concetti

3

Uso della calcolatrice personalizzata

Informazioni generali sulla calcolatrice personalizzata 56
Operazioni preliminari all'utilizzo dell'editor di script della calcolatrice personalizzata 57
Editor di script della calcolatrice personalizzata 60

In questo capitolo viene descritto l'uso della calcolatrice personalizzata. Viene inoltre spiegato come creare calcoli personalizzati su insiemi di dati del database ChemStore e come integrare i risultati in un rapporto ChemStore.



Informazioni generali sulla calcolatrice personalizzata

Informazioni generali sulla calcolatrice personalizzata

La calcolatrice personalizzata è un componente integrato di ChemStore che fornisce funzioni di calcolo avanzate.

I calcoli sono descritti da modelli di calcolo (script) che utilizzano un linguaggio di programmazione semplice simile ad SQL. Grazie a una serie di wizard disponibili è possibile sviluppare modelli di calcolo corretti dal punto di vista sintattico. Tali wizard guidano l'utente nella creazione delle singole fasi di calcolo. Per gli utenti esperti, un editor di script consente la programmazione di diretta degli script di calcolo.

Il linguaggio di programmazione contiene costrutti che vanno da semplici funzioni e operazioni matematiche fino a calcoli complessi. È inoltre stato creato un insieme di modelli di calcolo incorporati per i calcoli più comuni, utilizzabile come punto di partenza per lo sviluppo di modelli di calcolo personalizzati.

Una volta scritto un modello di calcolo, è possibile testarlo ed eseguirne il debug con appositi strumenti, quali le esecuzioni passo passo e i breakpoint. I modelli di calcolo possono essere memorizzati ed assegnati ad utenti specifici per la sola esecuzione. Un modello di calcolo modificato può essere memorizzato come versione distinta o come nuovo modello di calcolo. Il registro elettronico di ChemStore C/S tiene traccia di tali operazioni.

L'utente può visualizzare in anteprima i risultati di un modello di calcolo, formattarli ed inserirli nei rapporti. I modelli di calcolo compresi nei rapporti vengono eseguiti automaticamente ogni volta che si genera un rapporto. I risultati di tali calcoli possono essere stampati sotto forma di tabella o di grafici.

L'accesso a queste funzioni di calcolo è regolato da uno speciale privilegio utente, dall'assegnazione di modelli di calcolo agli utenti e dalla gestione della proprietà del modello di calcolo.

Operazioni preliminari all'utilizzo dell'editor di script della calcolatrice personalizzata

Recupero dell'insieme di dati del calcolo

Il modello della calcolatrice può essere utilizzato sull'insieme di dati corrente scaricato tramite una query di database. Si tratta dell'insieme di dati visualizzabile nella tabella di revisione. Tuttavia, non è necessario che le tabelle di revisione visualizzino tutte le colonne che si ritiene vengano utilizzate per i calcoli. La Table Wizard della calcolatrice personalizzata consente di specificare tutte le colonne dell'insieme di dati corrente, indipendentemente dalle impostazioni di interfaccia utente.

Nelle fasi iniziali dello sviluppo di un nuovo modello di calcolo, è importante ricercare un insieme di dati che sia rappresentativo dei dati per i quali deve essere utilizzato il modello.

Finestre dell'editor di script della calcolatrice personalizzata

Struttura di selezione delle finestre

Il navigatore della finestra è una struttura di visualizzazione ad albero che consente di spostarsi nelle finestre dei calcoli personalizzati rappresentate come foglie. Facendo doppio clic sul nodo foglia di tale struttura, comparirà la finestra selezionata nella parte superiore, parzialmente o completamente coperta da altre finestre o a volte invisibile. I nodi delle due foglie superiori (Calculation, Errors) sono sempre presenti. Questi nodi consentono di accedere alla parte superiore delle finestre Calculation editor e Calculation errors. Al di sotto del nodo Tables vengono elencate tutte le finestre delle tabelle di calcolo attualmente disponibili. Tali nodi consentono di accedere alla parte superiore della tabella di calcolo personalizzata.

3

Operazioni preliminari all'utilizzo dell'editor di script della calcolatrice personalizzata



Figura 14 Struttura di selezione delle finestre

Finestra di calcolo

Questa finestra è utilizzata per la modifica e il debug degli script di calcolo. La barra del titolo riporta il nome e la versione del modello di calcolo caricato, se disponibile. Sul bordo sinistro è visualizzata la riga di esecuzione corrente ed i contrassegni di breakpoint. Sul bordo inferiore è invece visualizzata la posizione del cursore (linea e colonna) ed una barra di avanzamento dell'esecuzione. L'area client della finestra viene utilizzata per la modifica dello script di calcolo. Le righe dello script di calcolo sono scritte in nero, a meno che non venga rilevato un errore o compaia un messaggio di avviso. Le righe di errore sono scritte in rosso, mentre la riga dei messaggi di avviso è visualizzata in blu.



Figura 15 Finestra di calcolo

Operazioni preliminari all'utilizzo dell'editor di script della calcolatrice personalizzata

Elenco delle variabili

L'elenco delle variabili contiene nomi e valori delle variabili attualmente disponibili per un calcolo. Facendo doppio clic su una variabile dell'elenco, comparirà una finestra di dialogo contenente una copia di sola lettura del nome e del valore della variabile. Questa finestra di dialogo viene utilizzata per la visualizzazione di valori e nomi di variabili lunghi. È inoltre possibile copiare questi valori negli appunti.

Custom Ca				
Eile <u>E</u> dit <u>V</u> ie	w <u>C</u> alculati	on <u>W</u> indow	vs Help	
) 🖻 日)	<u></u> X	_⊞ ∰ ∰ a=	kt .3 ⊞ ⊞
Variable	Vali	ue		
Avg	537	.0549805		
	Variable V	/alue		×
	Variable:	Avg		
	Value:	537.054980)5	
				OK.
	Eile Edit Vie Variable Avg	Tie Edit View Calculati Variable Value Avg 537 Variable Value Variable: Value:	ile Edit View Calculation Window Variable Value Variable Value Variable Value Variable: Avg Variable: Avg Value: 537.054980	Image: Second state of the se

Figura 16 Elenco delle variabili

Finestra degli errori e degli avvisi

Questa finestra riporta informazioni dettagliate su tutti gli errori e gli avvisi che risultano dall'esecuzione di uno script di calcolo. Un riferimento alla riga dello script ed un'indicazione visiva del punto in cui si verificato il problema aiutano a risolvere l'errore.

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Si tratta di una finestra di calcolo di colore giallo in cui viene creato/modificato lo script del modello di calcolo personalizzato. Tale operazione può essere effettuata anche utilizzando le wizard della calcolatrice personalizzata per creare l'apposito codice di script o scrivendo semplicemente il codice di programmazione, come nel caso di una macro.

Finestre delle wizard degli script della calcolatrice personalizzata

Grazie alle wizard è possibile creare facilmente un codice di script per il calcolo desiderato. Per ogni singola operazione di calcolo viene utilizzata una wizard specifica che permette di creare quella parte specifica dello script.

È possibile accedere alle wizard dalla barra degli strumenti o facendo clic su una riga del modello (fare clic con il pulsante destro del mouse, quindi selezionare *Edit* dal menu a comparsa). A seconda del contenuto della riga, viene visualizzata una wizard diversa; inoltre il contenuto della riga risulta già inserito nei campi appropriati.

È possibile utilizzare le wizard per creare nuove righe o modificare righe specifiche del modello.

Caratteristiche comuni delle wizard

La Figura 17 riporta un esempio di wizard semplice per una tabella. A sinistra di ogni finestra di dialogo della wizard compare un simbolo che visualizza lo scopo dell'istruzione di calcolo. Una wizard di tabella viene ad esempio utilizzata per immettere in una tabella i dati dell'insieme corrente.

Nella parte centrale sono presenti i componenti sintattici che definiscono le parti della riga di comando da creare. L'ordine di questi componenti è identico a quello che compare più avanti nell'istruzione di calcolo. Ogni componente sintattico contiene un nome terminale (grandi lettere blu), una descrizione (piccole lettere nere) e controlli per la selezione e/o l'immissione di informazioni specifiche per l'istruzione.

Table Wizard			×
	SELECT Define colums for table.	Study 'Study Name' Sample: Sample Name' Sample: Sample Type' ICompound 'Compound Name' IPeak.'Retention Time'	
	FOR Define compounds for table.	Antipyrine Phenacetine	
	WHERE Define filter conditions (optional).	Phenacetine.Peak.Area>0	
	INTO Enter name for new table.	1_overview	

Figura 17 Table Wizard

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Wizard secondarie comuni

Selezione di colonne

La Figura 18 riporta una finestra di dialogo utilizzata per la selezione di colonne della tabella, ad esempio quando si sfoglia la funzione SELECT della Table Wizard. La struttura di visualizzazione a sinistra contiene tutte le tabelle disponibili e le relative colonne. Spostando gli elementi a destra si definisce la nuova tabella. Un elenco di colonne selezionate viene posizionato nella parte destra della finestra di dialogo. Le icone che precedono i nodi di struttura selezionati sono verdi, mentre quelli non selezionati sono bianchi.



Figura 18 Finestra di selezione delle colonne (calcolatrice personalizzata)

Espressioni

La finestra di dialogo Expressions riportata nella Figura 19 rappresenta il nucleo della calcolatrice personalizzata. Consente infatti di creare e modificare espressioni e condizioni. La casella di modifica nel riquadro superiore contiene l'espressione composta fino ad ora. Per comporre il contenuto, selezionare le voci dai riquadri Data Items e Functions e fare clic sui pulsanti 'Add to Expression'. Il contenuto della casella di modifica può anche essere digitato manualmente. Un'icona con segno di spunta nell'angolo in alto a destra ed una riga di informazioni aggiuntive indicano se l'espressione appena creata è sintatticamente corretta. Queste due voci vengono continuamente aggiornate se è stata selezionata la casella di controllo Continuous check. Se l'espressione appena creata non è sintatticamente corretta, il segno di spunta presente sull'icona si trasforma in un punto interrogativo. Le informazioni di controllo forniscono suggerimenti utili sul problema, mentre la parte errata dell'espressione è visualizzata in rosso nella casella di modifica.

Set Condition			×
Phenacetine.Peak.Area>0			
Data Items: Image: Available Data >> Study. Study Name' >> Sample: Sample Name' >> Sample: Sample Amount' >> Sample: Sample Name' >> Antipyrine Peak. Retention Time' >> Antipyrine. Peak. Height >> Antipyrine. Peak. Width	Functions: abs() Absolute value count() Count exp() Exponential log() Briggs logarithm mean() Natural logarithm mean() Mean min() Minimum max() Maximum rstdev() Relative stdev sqr() Square sqr() Square root stdev() Standard deviation sum() Column Sum var() Variance	7 8 9 4 5 6 1 2 3 0 . AND OR TRUE FALS <> <	/ * · + () · · NOT E NULL >= <= E' ~ =
Clear Continuos check Ch	eck <u>O</u> K	Cancel	<u>H</u> elp

Figura 19 Finestra di dialogo Set Condition

Table Wizard

La Table Wizard riportata nella Figura 17 permette di selezionare un insieme di colonne dall'insieme di dati corrente e di memorizzarlo in una nuova tabella di calcolo. Tale operazione rappresenta il primo passo per la creazione di un nuovo modello di calcolo. Inizialmente si consiglia di aggiungere tutte le colonne utilizzate per l'identificazione del campione e per le operazioni di calcolo desiderate in un'unica tabella generale.

Editor di script della calcolatrice personalizzata

La wizard scrive il risultato della selezione dell'utente in una finestra di script, come nel seguente esempio:

SELECT Study, 'StudyName', Sample.'Sample Name', etc.

FOR "Antipyrine", "Phenacteine"

WHERE (Phenacetine.PeakArea>0

INTO "1_overview"

In questo esempio la colonna *Study name* è stata selezionata dalla tabella *study* e la colonna *Sample* è stata selezionata dalla tabella *sample*. La selezione si basa sui composti *Antipyrine* e *Phenacetine* ed è limitata a tutti i campioni in cui compare un picco di fenacetina (Phenacetine). Il risultato di questa sezione verrà scritto nella nuova tabella denominata 1_overview.

Column Wizard

Column Wizard			×
	Add / Modify For Table:	1_overview	
	Enter/Select Column:	ResRatio	
	Defined by Define expression for table column.	1_overview'.Ethanol.Peak.Area/'1_overview'.Methanol.Pea k.Area	
		<u> </u>	lp

Figura 20 Column Wizard

La Column Wizard consente di estendere una data tabella in base a una nuova colonna di calcolo. Tale colonna contiene valori basati su un'espressione definita utilizzando la Expression Wizard con modalità simili a quelle illustrate nella Figura 19.

Nell'esempio riportato nella Figura 20 viene aggiunta una nuova colonna 'ResRatio' alla tabella '1_overview'. Il contenuto della colonna viene definito dal rapporto di area dei composti 'Ethanol' e 'Methanol'.

Variable Wizard

La Variable Wizard è simile alla Column Wizard. L'utente può applicare un'espressione matematica dei valori di una o più colonne, memorizzando il risultato in una variabile. In genere ciò si verifica quando il risultato comprende la valutazione di una serie di valori.

If Wizard

Negli esempi precedenti è stato spiegato come calcolare nuovi valori sulla base di valori dati in colonne ed assegnarli a valori nuovi in una colonna o ad una singola variabile.

Nei casi in cui l'assegnazione dipenda da una certa condizione, è possibile utilizzare la If Wizard.

Format Wizard

La calcolatrice personalizzata visualizza i numeri come valori non elaborati utilizzando tutti i decimali disponibili. Per garantire una miglior leggibilità o visualizzare solo le cifre significative, è possibile utilizzare la Format Wizard, che consente di formattare i singoli valori (variabili), una colonna di una tabella specifica o persino un insieme di colonne di più tabelle. La formattazione dei numeri non influisce sulla precisione del calcolo.

Oltre ai numeri è possibile formattare stringhe, date, orari e persino celle vuote. La guida in linea della Format Wizard contiene esempi di queste opzioni avanzate di formattazione.

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Transpose Wizard

La Transpose Wizard consente di trasporre una tabella esistente trasformando le colonne in righe e le righe in colonne. Tale operazione può essere utile quando si calcolano le statistiche relative a valori dati in una riga. Tali valori possono infatti risultare da un calcolo precedente. Tuttavia, poiché è possibile calcolare le statistiche solo di valori in colonna, è necessario effettuare la trasposizione prima del calcolo delle statistiche.

La finestra di dialogo Transpose Wizard, riportata nella Figura 21 a pagina 66, contiene i seguenti componenti sintattici:

- Nella casella combinata TRANSPOSE l'utente può specificare il nome della tabella da trasporre. Nota: la selezione contiene solo le tabelle disponibili nella riga di calcolo data , ossia tutte le tabelle create in precedenza.
- Nella casella combinata BY specificare quale colonna della tabella deve essere utilizzata come riga di intestazione della tabella trasposta. In genere si tratta del nome del campione o dell'identificativo dell'analisi, in quanto tali voci definivano le righe della tabella originale.
- Nella casella di modifica INTO è possibile specificare un nome per la tabella trasposta.

TRANSPOSE Wiz	ard		X
	TRANSPOSE Select table.	2_Sample_runs	
	BY Select column to be header of new table.	Sample.Sample Name	
	ΙΝΤΟ	3 TranspTable	
	Enter name for new table.	y_ manpprove	
		<u>QK</u> ancel <u>H</u> elp	

Figura 21 Transpose Wizard

Group Wizard

Il raggruppamento di una tabella è utile ad esempio nel caso di calcoli statistici su un certo insieme di campioni, anziché per statistiche globali. È possibile ottenere lo stesso risultato definendo più tabelle secondarie, tuttavia con la Group Wizard queste operazioni sono combinate in un unico passaggio.

La finestra di dialogo riportata nell'Equazione 22 a pagina 68 contiene i seguenti componenti sintattici:

- Nella casella combinata GROUP viene specificato il nome della tabella su cui applicare il raggruppamento.
- Nella casella combinata BY viene specificato l'identificatore del gruppo. Ad esempio, applicando il raggruppamento 'Sample calibration level' (Livello di calibrazione del campione), è possibile combinare campioni e calibrazione di gruppi diversi e anche le analisi di calibrazione verranno raggruppate in base al livello di calibrazione.
- Il componente DO definisce una funzione (statistica) da applicare ad una data colonna della tabella, che comporta la creazione di una nuova colonna con nome.

Editor di script della calcolatrice personalizzata

GROUP Wizard					×
	GROUP Select table.	1_overview		_	
	BY Select column for grouping.	Sample.Sample Calib	ration Level	•	
	INTO	5_antipyrine_results			
	Enter name for new table.				
	Select calculation function	on to be done per grou	р.		
	DO mean 💌	of (Antipyrine.Pea	k.Area		<u> </u>
	and create new table co	lumn AS MeanAre	a ,		
	Function T	able Column ntipyrine.Peak.Area	Result Column MeanArea		
	stdev A	ntipyrine.Peak.Area	StdvArea		
			<u>0</u> K	<u>C</u> ancel <u>H</u>	<u>l</u> elp

Nella casella INTO è necessario specificare un nome per la tabella risultante.

Figura 22 Group Wizard

Esempio: creazione di uno script di calcolo per il rapporto

Di seguito viene spiegato come sviluppare un semplice modello di esempio. L'esempio si basa sui dati ricevuti quando si esegue la query 'SSR for quality control' sul database ChemStoredemo.mdb installato su ChemStore C/S. Si consiglia di attenersi ai passaggi riportati in questo capitolo per acquisire familiarità con l'uso e le funzionalità delle wizard della calcolatrice. In questo esempio non vengono forniti consigli sulla valutazione dei criteri di accettazione per un insieme di dati.

NOTA

Una copia dello script di esempio è reperibile sul CD di installazione di ChemStation Plus. Individuare il file **simple_example.cct** nella cartella support. Per importare lo script di esempio nel database dimostrativo, utilizzare la funzione di importazione della calcolatrice personalizzata.

Si supponga di dover effettuare la seguente operazione:

Sviluppare un modello in cui la deviazione standard relativa delle aree di un dato composto venga calcolata per le analisi di calibrazione e le analisi del campione. La comparazione deve definire le analisi del campione come "pass" se la deviazione standard relativa è inferiore rispetto alla deviazione standard relativa per le analisi di calibrazione. I risultati devono quindi essere integrati in un rapporto.

Le fasi previste per effettuare questa operazione sono le seguenti:

- 1 Impostare un piano che comprenda le fasi necessarie per giungere ad una soluzione.
- 2 Sviluppare il modello in base a questo piano.Tale fase comprende la verifica e la correzione di ogni fase di sviluppo.
- **3** Migliorare il modello.
- 4 Inserire il modello nel rapporto.

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Impostazione di un piano

Per impostare il piano, è necessario aver compreso esattamente quale operazione effettuare. Suddividere l'operazione in fasi e scrivere quanto si desidera ottenere ad ogni fase:

- 1 Creare una tavola che comprenda tutti i parametri necessari per il calcolo e tutti i parametri del campione necessari per l'identificazione del campione e la stesura di rapporti. Per il calcolo sono necessari:
 - Area del picco
 - Tipo di campione per distinguere le analisi di calibrazione dalle analisi del campione

Per l'identificazione del campione è necessario:

- Nome del campione
- Nome del file di dati non elaborati
- **2** Calcolare la deviazione standard relativa delle aree del picco per livello di calibrazione e memorizzarla in una nuova tabella.
- **3** Calcolare la media delle deviazioni standard relative e memorizzarle in una variabile.
- **4** Calcolare le aree delle medie per tutte le analisi dei campioni e la deviazione assoluta e relativa da questa quantità media. L'operazione deve effettuata ad ogni analisi.
- **5** Verificare se la deviazione standard relativa di ogni campione è inferiore alla deviazione standard relativa delle analisi di calibrazione e contrassegnarla adeguatamente.

Dopo ogni fase è necessario verificare il risultato intermedio per accertarsi della correttezza della procedura. Se il risultato intermedio è diverso rispetto ai risultati previsti, è necessario intraprendere azioni correttive.

Sviluppo del modello

Creazione di una tabella generale

Per creare la tabella iniziale, utilizzare la Table Wizard riportata nella Figura 23 a pagina 71. Selezionare le colonne Sample Name, Sample Calibration level, Sample type, Acq. Sequence name, Raw data file name e Peak area per il composto 'Antipyrine' e memorizzarlo nella tabella '1_overview'. È buona norma aggiungere un numero iniziale alle tabelle create dallo script, in modo da rifletterne la struttura nei risultati.

Table Wizard			×
	SELECT Define colums for table.	Sample.'Sample Name' Sample.'Sample Calibration Level' Sample.'Sample Type' 'Acq Sequence'.'Acq. Sequence Name' 'Raw Data'.'Raw Data File Name' !Peak.Area	
	FOR Define compounds for table.	Antipyrine	
	WHERE Define filter conditions (optional).		
	INTO Enter name for new table.	1_overview	_

Figura 23 Table Wizard

Editor di script della calcolatrice personalizzata

III 1_overview					
Sample			Acq Sequence	Raw Data	Antipyrine
Sample Name	 Calibration 	Sample Type	Acq. Sequence Name	Raw Data File Name	Peak.Area
calib1	1	Calibration	LINSEQ.S	NEW00045.D	153.110489
calib1	1	Calibration	LINSEQ.S	NEW00046.D	151.006012
calib1	1	Calibration	LINSEQ.S	NEW00047.D	151.757874
calib2	2	Calibration	LINSEQ.S	NEW00055.D	497.751862
calib2	2	Calibration	LINSEQ.S	NEW00056.D	496.648102
calib2	2	Calibration	LINSEQ.S	NEW00057.D	496.732056
calib3	3	Calibration	LINSEQ.S	NEW00065.D	839.842834
calib3	3	Calibration	LINSEQ.S	NEW00066.D	838.583191
calib3	3	Calibration	LINSEQ.S	NEW00067.D	841.310486
sam1	0	Sample	LINSEQ.S	NEW00081.D	374.544006
sam2	0	Sample	LINSEQ.S	NEW00082.D	374.5289
sam3	0	Sample	LINSEQ.S	NEW00083.D	374.48291
sam4	0	Sample	LINSEQ.S	NEW00084.D	374.128235
sam5	0	Sample	LINSEQ.S	NEW00085.D	374.773499
sam6	0	Sample	LINSEQ.S	NEW00086.D	374.385742
sam7	0	Sample	LINSEQ.S	NEW00087.D	374.245667
sam8	0	Sample	LINSEQ.S	NEW00088.D	374.140045
sam9	0	Sample	LINSEQ.S	NEW00089.D	374.328796
sam10	0	Sample	LINSEQ.S	NEW00090.D	374.229187

Figura 24 Tabella generale

Per verificare questa fase, eseguire lo script. Si dovrebbe ottenere una tabella in cui i nomi di campioni, i livelli di calibrazione, i tipi di campione, i nomi delle sequenze di acquisizione, i nomi dei file di dati non elaborati e le aree dei picchi per il composto "Antipyrine" sono elencati per tutti i campioni recuperati dalla query 'SSR for quality control' (vedere Figura 24 a pagina 72).

Creazione di tabelle secondarie

La fase successiva prevede la creazione di tabelle secondarie per separare le analisi di calibrazione dalle analisi del campione. Per questa fase è possibile utilizzare la Subtable Wizard. La chiave per la separazione dei tipi di campione è la condizione WHERE, che deve corrispondere esattamente all'esempio illustrato nella Figura 25 a pagina 73. La condizione "Calibration" deve essere digitata manualmente nella finestra di dialogo di definizione delle condizioni e deve essere racchiusa fra virgolette.
Editor di script della calcolatrice personalizzata

Subtable Wizard			×
- 10	FROM Base new table on.	1_overview	
	SELECT Define colums for table.	Sample 'Sample Name' Sample, 'Sample Calibration Level' 'Raw Data'. 'Raw Data File Name' IPeak.Area	
	FOR Define compounds for table.	Antipyrine	
	WHERE Define filter conditions (optional).	'1_overview'.Sample.'Sample Type'=''Calibration''	
	INTO Enter name for new table.	2_calib_runs	
		(<u> </u>	elp

Figura 25 Finestra Subtable Wizard per la separazione delle analisi di calibrazione

In seguito all'esecuzione dello script, si otterrà una tabella semplice in cui sono elencati tutti i campioni di calibrazione con il relativo livello di calibrazione e le aree dei picchi per il composto 'Antipyrine' (vedere la Figura 26 a pagina 73).

III 2_calib_runs			_ 🗆 ×
	Sample	Raw Data	Antipyrine
Sample Name	Sample Calibration Level	Raw Data File Name	Peak.Area
calib1	1	NEW00045.D	153.110489
calib1	1	NEW00046.D	151.006012
calib1	1	NEW00047.D	151.757874
calib2	2	NEW00055.D	497.751862
calib2	2	NEW00056.D	496.648102
calib2	2	NEW00057.D	496.732056
calib3	3	NEW00065.D	839.842834
calib3	3	NEW00066.D	838.583191
calib3	3	NEW00067.D	841.310486

Figura 26 Tabella secondaria dell'analisi di calibrazione

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Calcolo della deviazione standard relativa delle aree del picco per ogni livello di calibrazione

Per calcolare la deviazione standard relativa per livello di calibrazione, è possibile utilizzare la Group Wizard. Il raggruppamento della tabella '2_calib_runs' sui livelli di calibrazione consente di ottenere un risultato per livello e di

GROUP Wizard				×
- 11	GROUP Select table.	2_calib_runs		•
	BY Select column for grouping.	Sample.Sample Calibration	Level	•
	INTO Enter name for new table.	3_Calibstatistics		
	Select calculation function	on to be done per group.	3	-)
	and create new table col	lumn AS RSTD_Antip_a	rea	
	Function rstdev	Table Column Antipyrine.Peak.Area	Result Column RSTD, Antip, area	
		<u>0</u>	K <u>C</u> ancel	Help

Figura 27 Group Wizard

memorizzarlo nella nuova tavola '3_calibstatistics'. Il calcolo da eseguire per ciascun gruppo viene definito nella sezione DO/AS della Group Wizard (Figura 27 a pagina 74). La Group Wizard consente di definire contemporaneamente più calcoli per più composti, tuttavia per semplicità nell'esempio corrente ne viene indicato solo uno.

Editor di script della calcolatrice personalizzata

In seguito all'esecuzione dello script, si otterrà una piccola tabella contenente la deviazione standard relativa per ogni livello di calibrazione.

3_Calibstatistics	_ 🗆 ×
Sample.Sample Calibration Level	RSTD_Antip_area
1	0.701794572842738
2	0.123622096505617
3	0.16251329211458



Per calcolare la media delle deviazioni standard relative, utilizzare la Variables Wizard specificando la seguente istruzione di definizione:

Avg(RSTD_Antipyrine)=mean('3_Calibstatistics'.'RSTD_Antip_area')

Per verificare questa fase, eseguire il calcolo. La variabile e il risultato appropriato verranno visualizzati nell'elenco delle variabili. Il calcolo sulle analisi di calibrazione è terminato; la fase successiva prevede l'effettuazione dei calcoli sui risultati delle analisi del campione ed infine il confronto tra tali calcoli.

Calcolo della deviazione di area relativa per le analisi dei campioni

Per elencare le analisi dei campioni in una tabella separata, creare una tabella secondaria come indicato nella Figura 25 a pagina 73, sostituendo il tipo di campione 'Calibration' nella condizione WHERE con 'Sample' ed il nome della tabella di destinazione in '4_sample_runs'.

Nelle due fasi successive verranno aggiunte due colonne alla tabella dei campioni, una per il calcolo della risposta media su tutti i campioni (vedere la Figura 29) e l'altra per il calcolo della deviazione assoluta delle risposte singole rispetto alla media. Utilizzare la wizard 'add columns' per due volte per ottenere tale risultato. La finestra di dialogo 'set condition' per il calcolo della deviazione assoluta è riportata nella Figura 30.

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Column Wizard			×
	Add / Modify For Table:	4_sample_runs	
	Enter/Select Column:	AvgAntArea	
	Defined by Define expression for table column.	mean('4_sample_runs'.Antipyrine.Peak.Area)	
		<u> </u>	



Set Expression		×
abs('4_sample_runs'.Antipyrine.Pe	ak.Area-'4_sample_runs'	. AvgAntArea)
Data Items:	- Functions:	
Available Data	abs() Absolute value	7 8 9 / *
B⊡⊞ Variables B⊡∰ Tables	exp() Exponential	4 5 6 · +
	In() Natural logarithm	1 2 3 ()
	min() Minimum	
	rstdev() Relative stdev	
	sqrt) Square sqrt() Square root	AND OR NOT
	stdev() Standard deviation sum() Column Sum	TRUE FALSE NULL
	var() Variance	
Add to Expression	Add to Expression	String compare 'LIKE' ~ =
Clear Continuos check C	heck <u>D</u> K	Cancel <u>H</u> elp

Figura 30 Deviazione assoluta dell'area dell'antipirina rispetto al valore medio

Editor di script della calcolatrice personalizzata

# 4_ sample_runs	4_sample_runs				
Sample	Raw Data	Antipyrine			
Sample Name	Raw Data File Name	Peak.Area	AvgAntArea	delta_Ant	
sam1	NEW00081.D	374.544006	374.3786987	0.1653	
sam2	NEW00082.D	374.5289	374.3786987	0.1502	
sam3	NEW00083.D	374.48291	374.3786987	0.1042	
sam4	NEW00084.D	374.128235	374.3786987	0.2505	
sam5	NEW00085.D	374.773499	374.3786987	0.3948	
sam6	NEW00086.D	374.385742	374.3786987	0.0070	
sam7	NEW00087.D	374.245667	374.3786987	0.1330	
sam8	NEW00088.D	374.140045	374.3786987	0.2387	
sam9	NEW00089.D	374.328796	374.3786987	0.0499	
sam10	NEW00090.D	374.229187	374.3786987	0.1495	

In seguito all'esecuzione degli script viene creata la seguente tabella di campioni:

Figura 31 Risultati dei calcoli di deviazione

Controllo e contrassegno

A questo punto sono disponibili tutti i risultati necessari per la definizione di una tabella di risultati finale in cui verrà eseguito il confronto. Utilizzare una Subtable Wizard per creare un estratto della tabella '4_sample_runs' e memorizzarlo nella tabella dei risultati finale '5_Antipyrine_results'.



Figura 32 Calcolo della deviazione di area relativa

Nell'esempio vengono utilizzate le colonne sample name, raw data file name, peak area, delta_ant. Se nel rapporto finale si desidera inserire altre colonne per l'identificazione del campione, aggiungerle alla tabella dei risultati.

Prima di confrontare le analisi dei campioni con quelle delle calibrazioni, è necessario dividere per l'area la deviazione assoluta dell'area delle analisi dei campioni in modo da ottenere la deviazione relativa. La wizard che consente di aggiungere la colonna per questo calcolo è riportata nella Figura 32 a pagina 77.

Se la deviazione di area relativa è inferiore al valore medio delle analisi di calibrazione, le analisi devono essere contrassegnate con PASS; in caso contrario con FAIL. È possibile effettuare tale operazione con la If wizard. Il confronto è illustrato dalla condizione IF nella Figura 33 a pagina 78. Le istruzioni THEN e ELSE vengono definite nelle Column Wizard, accessibili tramite i pulsanti di esplorazione della If Wizard. In questa fase, illustrata nella Figura 34 a pagina 79, verrà aggiunta una colonna 'status' alla tabella dei risultati.



Figura 33 If Wizard per la valutazione dei risultati

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Column Wizard			×
	Add / Modify C Enter/Select Variable: C For Table: Enter/Select Column:	: 5_Antipyrine_results Status	
	Defined by Define expression for table column.	"Pass"	
		<u> </u>	lelp

Figura 34 Definizione di un'istruzione THEN tramite una Column Wizard

Per la verifica di questa fase finale, eseguire lo script. Verrà aggiunta una nuova colonna alla tabella dei risultati riportante un PASS o un FAIL accanto alla colonna di deviazione relativa (Figura 35 a pagina 79)

5_Antipyrine_results					_ 🗆 ×
Sample	Raw Data	Antipyrine			
Sample Name	Raw Data File Name	Peak.Area	delta_Ant	rel_dev	Status
sam1	NEW00081.D	374.5440	0.1653	0.0441	Pass
sam2	NEW00082.D	374.5289	0.1502	0.0401	Pass
sam3	NEW00083.D	374.4829	0.1042	0.0278	Pass
sam4	NEW00084.D	374.1282	0.2505	0.0669	Pass
sam5	NEW00085.D	374.7735	0.3948	0.1053	Pass
sam6	NEW00086.D	374.3857	0.0070	0.0019	Pass
sam7	NEW00087.D	374.2457	0.1330	0.0355	Pass
sam8	NEW00088.D	374.1400	0.2387	0.0638	Pass
sam9	NEW00089.D	374.3288	0.0499	0.0133	Pass
sam10	NEW00090.D	374.2292	0.1495	0.0400	Pass

Figura 35 Tabella dei risultati finali

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Miglioramento del modello

Formattazione delle colonne

A questo punto potrebbe essere necessario formattare alcune delle colonne. Utilizzare la Format Wizard per formattare ad esempio la colonna delta_Ant della tabella '4_sample_runs' e le colonne 'rel_dev' e Antipyrine.Peak.Area della tabella '5_Antipyrine_results', come illustrato nella Figura 36.

Tutte le colonne della tabella e tutte le variabili per le quali si desidera utilizzare la stessa formattazione dei numeri possono essere definite in una sola Table Wizard.

FORMAT Wizard		X
	FORMAT What would you like to format?	'4_sample_runs'.'delta_Ant' '5_Antipyrine_results'.'delta_Ant' '5_Antipyrine_results'.tel_dev' '5_Antipyrine_results'.Antipyrine.Peak.Area
	USING Enter fixed or variable format:	0.0000 Syntax example:
0.0 0.00 0.000 0.0000 0.00000 0.00000		0.000 fixed format for all values 0.000; -0.00; 0 variable formats for positive, negative and zero values For further formatting options press F1.
	Or define format:	Precision: 4 floating point C exponential
		<u>QK</u> <u>C</u> ancel <u>H</u> elp

Figura 36 Formattazione della tabella dei risultati finali

Inserimento di un modello nel rapporto

Nella sezione "Calcoli" a pagina 104 viene descritto come inserire una tabella di risultati di calcolo in un rapporto.

Uso dell'editor di script della calcolatrice personalizzata

L'editor di script è simile ad un editor di testo ma viene utilizzato per la modifica degli script della calcolatrice personalizzata. Gli utenti esperti sono in grado di scrivere script anche senza ricorrere a wizard, creando in tal modo costrutti di script non previsti dalle wizard. Tali costrutti contribuiscono a rendere il codice di script molto più breve e chiaro da esaminare.

Comandi

Nella sezione che segue sono brevemente descritti i principali comandi utilizzati per la creazione di script per il modello. Per una descrizione dettagliata di tutti i comandi, consultare la sezione di riferimento "Comandi della calcolatrice personalizzata" a pagina 183.

Selezione di colonne dal database

Il comando SELECT consente di selezionare le colonne dal database, utilizzando come opzione una condizione per la riduzione dell'insieme di dati risultante.

SELECT column(s) FOR compound(s) WHERE aCondition INTO aTable

column(s) può essere una o più colonne, specificate in base al nome, di qualsiasi tabella disponibile nel database.

compound(s) può essere uno o più composti, specificati in base al nome, per il quale è necessario selezionare le colonne. È consentito l'uso di caratteri jolly. Per ulteriori informazioni, vedere la parte di riferimento di "Comandi della calcolatrice personalizzata" *a pagina 183*.

aCondition è opzionale e specifica una condizione per la selezione.

aTable è il nome di una tabella nella quale verrà scritta la selezione.

Selezione di colonne da una tabella

Per selezionare colonne da una tabella di calcolo personalizzata, utilizzare il comando FROM:

FROM aTable SELECT column(s) FOR compound(s) WHERE aCondition INTO anotherTable

Questo comando consente di effettuare le stesse operazioni del comando SELECT, tuttavia recupera le colonne unicamente da *una tabella* ricevuta precedentemente da un comando SELECT o FOR.

NOTA

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Processi decisionali

Le decisioni possono essere prese utilizzando istruzioni condizionali. Per effettuare questa operazione, viene utilizzato il comando IF THEN ELSE:

IF aCondition THEN doThis ELSE doThat

Se la condizione è soddisfatta, la parte THEN verrà valutata; in caso contrario, verrà valutata la parte ELSE. La parte ELSE è opzionale e può essere omessa.

É possibile assegnare l'istruzione condizionale solo ad operazioni su variabili o colonne di tabelle. Non può essere utilizzata per la valutazione condizionale dello script di modello.

Formattazione di risultati in tabelle

Utilizzare il comando FORMAT per formattare i valori risultanti nelle tabelle della calcolatrice personalizzata o da variabili:

FORMAT column(s)/variable(s) USING aFormat

aFormat è una stringa (racchiusa fra virgolette) contenente la specifica del formato. Per ulteriori informazioni, vedere la parte di riferimento di "Comandi della calcolatrice personalizzata" *a pagina 183*.

Trasposizione di tabelle

I calcoli vengono eseguiti su colonne selezionate di ciascuna riga. I risultati vengono scritti in nuove colonne. Alcuni calcoli statistici devono essere effettuati su una sola riga per ciascuna colonna. Tale operazione non può essere effettuata direttamente, in quanto la riga deve essere trasformata in una colonna. A tale scopo, viene utilizzato il comando TRANSPOSE:

TRANSPOSE aTable BY aColumn INTO destinationTable

Una colonna viene utilizzata come chiave per l'operazione di trasposizione. Le voci contenute in tale colonna verranno utilizzate come intestazioni di colonna per la *tabella di destinazione*. Poiché i nomi di colonna devono essere univoci, *la tabella di destinazione* non contiene nessuna colonna il cui nome compare più di una volta.

Raggruppamento di tabelle

Il raggruppamento delle tabelle consente di organizzarne meglio il contenuto e di effettuare alcuni calcoli statistici. Le tabelle vengono raggruppate mediante il comando GROUP:

GROUP aTable BY aColumn DO operation(s) INTO destinationTable

Il raggruppamento di *una tabella* è definito dai valori di *una colonna*. Ogni gruppo di righe contiene righe contenenti valori uguali nella colonna. Le operazioni da effettuare su ogni gruppo di colonne vengono definite dalle *operazioni*.

Aggiunta di osservazioni

Il simbolo #- è utilizzato per iniziare un'osservazione. Il testo scritto dopo il simbolo #- NON verrà incluso nella valutazione:

Questa è un'osservazione!

Nonostante una futura wizard che gestirà la parte dello script relativa alla dichiarazione, le osservazioni vengono aggiunte dopo la definizione delle variabili nel caso in cui siano correlate a questa definizione:

strCompund = "Barbital" # Questa è la definizione del composto

La parte di script relativa alla dichiarazione inizia con l'annotazione

DECLARATION

e termina con l'osservazione

IMPLENTATION

Sintassi

La descrizione dettagliata della sintassi di tutti i comandi e delle parti di scritte è riportata nella sezione di riferimento di "Comandi della calcolatrice personalizzata" a pagina 183.

Di seguito sono riportate alcune indicazioni speciali da tenere in considerazione per evitare errori non necessari nello script.

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Utilizzo delle virgolette

Le stringhe devono sempre essere racchiuse tra virgolette. Le stringhe sono nomi di composti, campioni e così via, nonché nomi di colonne. Inoltre, come si vedrà nella sezione successiva, le stringhe possono contenere anche comandi.

Se la stringa contiene anche virgolette, queste ultime devono essere trasformate in virgolette doppie.

Gli apostrofi presenti nei nomi di colonne non devono essere rimossi quando racchiusi fra virgolette.

Utilizzo delle parentesi

Utilizzare sempre le parentesi quando è necessario ordinare gerarchicamente diverse operazioni di un'espressione. Le espressioni fra parentesi verranno valutate per prime. Pertanto ogni parte dell'espressione che deve essere valutata prima di un'altra deve essere racchiusa fra parentesi.

Distinzione tra maiuscole e minuscole

In genere negli script (comandi, nomi di colonne, espressioni) non viene fatta distinzione tra maiuscole e minuscole. Esistono due sole eccezioni:

- Viene fatta distinzione tra maiuscole e minuscole quando si confrontano le stringhe per controllarne l'identità (string1=string2).
- I nomi delle variabili devono essere usati nello script come definiti all'inizio.

Uso delle variabili di stringa

La caratteristica principale dell'editor di script è la creazione di *variabili di stringa*. Nella sezione che segue verrà aggiunto un prefisso *str* ai nomi di variabili di stringa. Una variabile di stringa è un testo racchiuso fra virgolette. Il contenuto di queste variabili di stringa può essere un nome semplice, ad esempio un nome di composto o la definizione della colonna del nome del campione:

```
strCompound = "Barbital"
```

strSmplName = "Sample.'Sample Name"

ma anche una parte del codice di script stesso, ad esempio le istruzioni per selezionare colonne dal database:

```
strSelect = "SELECT Sample.'Sample Name' FOR Barbital INTO aTable"
```

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Tenere presente che i nomi delle colonne che includono uno spazio vuoto:

Sample.'Sample Name'

oppure i caratteri speciali all'interno dei nomi (come '1_overview')

devono essere racchiusi da un ' (apostrofo).

L'utilizzo di variabili di stringa consente di definire tali variabili una sola volta e riutilizzarle per il resto dello script, anche più volte.

Per riutilizzare queste variabili di stringa, è necessario aggiungere prefisso con un segno \$:

\$strCompound

\$strSelect

Il segno \$ indica all'interprete di script come considerare il contenuto della variabile. Anziché scrivere:

SELECT Sample.SampleName FOR Barbital INTO aTable

si può scrivere:

SELECT Sample.SampleName FOR \$strCompound INTO aTable

L'interprete sostituirà *\$strCompound* con *Barbital* prima di valutare il comando SELECT ed effettuare la selezione del database.

Tale operazione permette di definire il nome del composto una sola volta all'inizio dello script e di farvi riferimento nel resto dello script. In tal modo, se necessario, è possibile modificare il nome del composto una sola volta in questa variabile all'inizio dello script.

Come illustrato nell'esempio precedente, è anche possibile definire variabili di stringa per la codifica di script:

strSelect = "SELECT Sample.SampleName FOR Barbital INTO aTable"

oppure considerare la sostituzione del nome:

strSelect = "SELECT \$strSmplName FOR \$strCompound INTO aTable"

Per utilizzare questo tipo di costrutto, è sufficiente scrivere nell'editor di script la variabile di stringa preceduta dal prefisso \$:

\$strSelect

Editor di script della calcolatrice personalizzata

L'interprete di script dapprima sostituirà le variabili di stringa relative ai nomi di campioni e composti con il rispettivo contenuto, quindi effettuerà la selezione vera e propria, che in questo caso significa selezionare tutti i nomi di campioni per il Barbital.

Come è possibile notare, le variabili di stringa possono contenere anche variabili di stringa (con un prefisso \$). Le variabili di stringa vengono sostituite dal rispettivo contenuto quando l'interprete di script valuta ed esegue il comando sia da una variabile di stringa, come illustrato nell'ultimo esempio:

\$strSelect

sia dal comando inserito stesso, come illustrato nell'esempio precedente:

SELECT \$strSmplName FOR \$strCompound INTO aTable

Esiste un altro segno molto speciale per la sostituzione. I parametri del picco, quali area, altezza o fattore di scodamento, risoluzione e così via, dipendono dal composto scelto. In genere questi parametri vengono selezionati per composti specifici. L'editor di script consente di utilizzare il punto esclamativo (!) per la selezione dei parametri del picco che si riferiscono al composto attualmente utilizzato:

SELECT !Peak.Area FOR \$strCompound INTO aTable

In seguito all'esecuzione di questo comando, verranno selezionate unicamente aree di picco del composto definite in strCompound (es. Barbital). Il punto esclamativo ! si riferisce al Barbital o a qualsiasi altro nome di composto definito nella variabile di stringa strCompound.

È possibile anche scrivere:

SELECT Barbital.Peak.Area FOR \$strCompound INTO aTable

tuttavia, in questo caso, si è limitati al Barbital oppure:

SELECT \$strCompound.Peak.Area FOR \$strCompound INTO aTable

anche se l'uso del punto esclamativo risulta più semplice.

Esempio: creazione di uno script di calcolo per il rapporto

Ricordare l'esempio sviluppato nella sezione precedente. In questo capitolo l'esempio permette di dimostrare i vantaggi derivanti dall'utilizzo delle variabili di stringa. Le variabili consentono infatti di disporre di maggior flessibilità quando si adatta lo script per altri insiemi di dati.

NOTA

Una copia dello script di esempio è reperibile sul CD di installazione di ChemStation Plus. Individuare il file **refined_example.cct** nella cartella support. Per importare lo script di esempio nel database dimostrativo, utilizzare la funzione di importazione della calcolatrice personalizzata.

Definire innanzitutto alcune variabili di stringa, che diventeranno la sezione di definizione dello script. Sostituire quindi la parte appropriata dello script con queste variabili. Questa diventerà la sezione di implementazione dello script. Infine aggiungere alcune osservazioni per lo script.

Definizione di variabili di stringa

Definire le variabili di stringa per il nome del composto. In tal modo risulterà più agevole sostituire il nome del composto nel caso in cui sia necessario utilizzare lo script per un altro composto:

strCompound = "Antipyrine"

Definire le variabili di stringa per il nome della colonna di risposta. In tal modo sarà più facile alternare tra area ed altezza come indicatore di risposta:

strResponse = "Peak.Area"

Per una migliore leggibilità definire una variabile di stringa per la selezione. In tal modo risulterà più semplice modificare la selezione completa. È persino possibile utilizzare le variabili di stringa definite in precedenza come parte di quella corrente, tramite il prefisso \$:

strSelection="Sample.'Sample Name', Sample.'Sample Calibration Level', Sample.'Sample Type', 'Acq Sequence'.'Acq. Sequence Name', 'Raw Data'.'Raw Data File Name', !\$strResponse"

Applicazione di variabili di stringa

La prima istruzione SELECT diventerà:

SELECT \$strSelection FOR \$strCompound INTO '1_overview'

mentre la seconda sarà ridotta a:

FROM '1_overview' SELECT \$strSelection FOR \$strCompound WHERE '1_overview'.Sample.'Sample Type'="Calibration" INTO '2_calib_runs'

Editor di script della calcolatrice personalizzata

Le tre istruzioni di calcolo verranno semplificate in:

GROUP '2_calib_runs' BY 'Sample.Sample Calibration Level' DO rstdev (\$strCompound.\$strResponse) AS 'RSTD_Antip_area' INTO '3_Calibstatistics'

'5_compound_results'.'rel_dev'='5_compound_results'.'delta_Ant'/ '5_compound_results'.\$strCompound.\$strResponse

Aggiunta di osservazioni allo script

L'ultima fase consiste nell'aggiunta di osservazioni significative per separare la sezione di definizione da quella di implementazione e per semplificare la personalizzazione della sezione di definizione. Vedere anche il modello **refined_example.cct** sul CD-ROM di installazione.



ChemStore C/S Agilent Guida ai concetti

4

Utilizzo di Report Template Editor

Informazioni su Report Template Editor 88 Operazioni preliminari all'utilizzo di Report Template Editor 90 Utilizzo di Report Template Editor 93 Componenti del modello di rapporto 96 Tabelle 106 Creazione di un rapporto mediante un modello 121 Creazione automatica di rapporti 121



Agilent Technologies

Informazioni su Report Template Editor

Report Template Editor è un'applicazione che diventa disponibile quando si fa clic sull'icona sinistra posta al di sotto del nome del rapporto (Compound Amounts Report [(built-in)] nella figura riportata di seguito) oppure quando si sceglie una voce dal menu Report nella finestra di dialogo principale di ChemStore C/S.



Figura 37 Report Template Editor

Report Template Editor consente di creare e modificare i modelli da utilizzare per la creazione di rapporti. Poiché può essere necessario utilizzare più volte lo stesso rapporto, ma con specifiche e dati diversi, Report Template Editor è stato progettato per consentire la creazione di modelli di rapporto agevolmente modificabili.

Report Template Editor	
<u>File E</u> dit Format <u>H</u> elp	
Compound Amounts (Built In) Page Header B Report Header B Report Body Page Footer	Report Template Name: Compound Amounts Comment: Template for Compound Amounts Compounds to Include: All Calibrated Compounds Specified at Run Time All Calibrated Compounds Specified Compounds: [no compounds specified] Compounds Preview Help

Figura 38 Report Template Editor

Quando si crea un modello di rapporto, si specificano informazioni quali il contenuto e la posizione di un'intestazione o di un piè di pagina, le tabelle o i grafici da inserire e i caratteri da utilizzare in ogni area del rapporto. Di fatto, si crea una struttura specifica per il layout e il contenuto di un rapporto e la si salva per riutilizzarla al momento di creare nuovamente tale rapporto. È inoltre possibile modificare la struttura di qualsiasi modello di rapporto e salvarlo con un nuovo nome.

Operazioni preliminari all'utilizzo di Report Template Editor

Recupero dell'insieme di dati del rapporto

In ChemStore C/S, si effettuano le query nel database in base ai campi dati scelti e per i quali si specificano i valori. L'insieme di record di dati restituiti dalla query è definito insieme di dati corrente (o "snapshot"). Viene quindi selezionato un modello di rapporto da utilizzare per la creazione di un rapporto. Questo rapporto consente di stampare le informazioni contenute nell'insieme di dati corrente in base alla struttura del rapporto. È anche possibile ridurre ulteriormente i dati da visualizzare nel rapporto, ma non inserire dati non presenti nell'insieme di dati corrente.

Visualizzazioni delle strutture di Report Template Editor

Report Template Editor utilizza **una visualizzazione della struttura** per mostrare i diversi oggetti.



Figura 39 Visualizzazione della struttura del modello di rapporto in Report Template Editor

Il primo oggetto che compare in una visualizzazione della struttura quando si apre un modello è il modello di rapporto stesso, posto sul lato sinistro della finestra di dialogo principale. Quando si modifica un modello di rapporto esistente, la finestra di dialogo principale di Report Template Editor contiene una visualizzazione della struttura del modello. Nella parte superiore della struttura è indicato il nome del modello di rapporto. Al di sotto di quest'ultimo sono invece visibili i componenti del modello di rapporto:

- intestazioni e piè di pagina;
- sezioni dati;
- intestazioni sezione;
- elementi della sezione, quali tabelle, grafici, calcoli, cromatogrammi e spettri.

4

Operazioni preliminari all'utilizzo di Report Template Editor

Come nella struttura ad albero delle directory di Windows Explorer, gli elementi che è possibile espandere sono riconoscibili grazie a un segno "più" (+) in un riquadro. Accanto alle intestazioni di pagina non è mai visibile un segno "più" perché non è possibile espanderle. Poiché le sezioni dei dati contengono tabelle e grafici, facendo clic sul segno "più" accanto al relativo nome si visualizzano gli elementi che le compongono.

Per ulteriori informazioni sulle sezioni e sugli elementi che compongono un modello di rapporto, vedere "Componenti del modello di rapporto" a pagina 96.

Utilizzo di Report Template Editor

Utilizzo delle finestre di dialogo per creare sezioni del rapporto

Utilizzare la finestra di dialogo principale di Report Template Editor per creare le sezioni e gli elementi del rapporto utilizzando le voci di menu o facendo clic con il pulsante destro del mouse.

Report T	emplate Editor : Administrator /	d
<u>File E</u> dit F	ormat <u>H</u> elp	
Compou	nd Amounts Report (Built In) e Header / Data So a Section e Footer Footer V Include in Report Delete	
	Insert Section Header Insert Selection Criteria Insert Chart Insert Chromatogram Insert Spectrum Insert Calculation Insert Table Insert Page Break	•

Figura 40 Menu per la creazione di elementi delle sezioni dei dati

I parametri associati alla sezione o all'elemento oggetto di modifica vengono visualizzati sul lato destro della finestra di dialogo. Se ad esempio si intende aggiungere un'intestazione di pagina (page header), la parte destra della finestra di dialogo contiene i parametri che consentono di specificare se stampare l'intestazione su ogni pagina, se delimitarla con un bordo e così via.

Report Template Editor					_ 🗆 >
<u>Eile E</u> dit Format <u>H</u> elp					
Compound Amounts (Built In)			Page Header		
E Report Header		Description: Page H	eader		
Report Body	×	Include in Report	Print On All Pages	Height: 0.	30 In.
		Include Border	O Skip First Page		
		Text Items Compo	und Amounts Benort		
		Displayed in This Section			
		Edit			
				Preview H	elp

Figura 41 Finestra di dialogo Page Header di Report Template Editor

Nella parte inferiore della finestra di dialogo sono presenti uno o più pulsanti che consentono di visualizzare le finestre di dialogo utilizzate per modificare i parametri. Quando si modifica un'intestazione di pagina, nella finestra di dialogo principale di Report Template Editor è presente il solo pulsante "Edit". Facendo clic su tale pulsante, è possibile modificare i diversi parametri associati a un'intestazione, quali il numero di righe e di colonne e il testo o i dati da stampare al loro interno.

Se è in corso la modifica di una tabella, nella finestra di dialogo principale di Report Template Editor sono presenti molti più pulsanti, poiché vi sono molti più parametri da configurare rispetto a un'intestazione.

Report Template Editor					_ 🗆 X
Elle Edit Format Help Image: Compound Amounts (Built In) Image: Page Header Image: Page Header <td><u></u></td> <td>Description: Page H</td> <td>Page Header</td> <td></td> <td>0.201</td>	<u></u>	Description: Page H	Page Header		0.201
Page Footer	V	Include Border Text Items Displayed in This Section	C Skip First Page		0.00 m.
		E dit		Preview	Help



Utilizzo delle visualizzazioni della struttura per tabelle e grafici

Anche per la selezione dei campi dati, ad esempio per le colonne delle tabelle o gli assi dei grafici, si utilizza una visualizzazione della struttura. È opportuno utilizzare tale visualizzazione quando si selezionano i campi del database perché essi sono parte di record che a loro volta sono parte di un insieme di dati. Ad esempio, quando si selezionano le colonne per una tabella dei campioni, può essere necessario espandere la visualizzazione dell'insieme di dati che contiene le informazioni relative all'organizzazione dei campioni in modo da visualizzare tutti i campi ad essi associati.



Figura 43 Visualizzazione della struttura per la creazione di una tabella

4 Utilizzo di Report Template Editor Componenti del modello di rapporto

Componenti del modello di rapporto

Un modello di rapporto è composto da uno o più dei seguenti oggetti: un'intestazione, un piè di pagina, interruzioni di pagina e sezioni dei dati. Queste ultime contengono elementi quali tabelle, calcoli, cromatogrammi, spettri e grafici. Mediante la relativa casella di controllo è possibile escludere dal rapporto creato questi elementi o sezioni senza eliminarli dal modello. I componenti del modello sono definiti oggetti perché è possibile modificarli singolarmente e non dipendono da altri componenti selezionati.

Intestazioni e piè di pagina

È possibile impostare un'intestazione di pagina o un piè di pagina per indicare il nome del rapporto, un commento, l'utente, l'ora, la pagina, la data di modifica e l'autore della modifica. Ognuno di questi elementi può essere inserito in una delle tre colonne del titolo e formattato con qualsiasi carattere supportato dal computer, nonché etichettato ed allineato nell'ambito della colonna. È anche possibile inserire nell'intestazione o nel piè di pagina elementi grafici quali il logo della società. La modifica delle intestazioni e dei piè di pagina viene eseguita in una finestra di dialogo nella quale è visualizzata la posizione di ogni elemento rispetto all'intestazione e agli altri elementi in essa presenti. Questa finestra di dialogo è impostata per visualizzare l'aspetto dell'intestazione o del piè di pagina durante la modifica.

Report Template Editor		
<u>F</u> ile <u>E</u> dit Format <u>H</u> elp		
Compound Amounts (Built In)	Page He	eader
⊕	Description: Page Header	
Bege Footer	 Include in Report Print On All F 	Pages Height: 0.30 In.
	Include Border O Skip First Pa	ige
	Text Items Displayed in This Section	
	Edit	
		Preview Help

Figura 44 Modifica di intestazioni e piè di pagina

Sezioni dei dati

Le sezioni dei dati contengono uno o più elementi del rapporto quali tabelle, calcoli, grafici, cromatogrammi e spettri. Alcuni parametri sono associati direttamente a una sezione dei dati, come si può vedere facendo clic sul nome di una sezione nella visualizzazione della struttura di un modello di rapporto. In questa visualizzazione è presente un campo di descrizione e una casella di controllo per specificare se includere o meno in un rapporto la sezione dei dati ad essa associata. Il pulsante "Repeated", visualizzato nella finestra di dialogo, consente di selezionare i campi da ripetere. La funzione di ripetizione influisce maggiormente sull'ordine interno del rapporto creato, rappresentando la chiave per creare tutti i diversi tipi di rapporto.

4 Utilizzo di Report Template Editor

Componenti del modello di rapporto

Report Template Editor		
<u>File E</u> dit Format <u>H</u> elp		
Compound Amounts (Built In) Page Header B Report Header Hereit Bedge Page Footer	▲ ⊠	Data Section Description: Report Body Include in Report Include in Report
	V	Study Name Compound Name
		Repeat Preview Help

Figura 45 Sezioni dei dati

Ripetizione di una sezione

È possibile ripetere una sezione dei dati per ogni combinazione univoca di campi selezionata. Ad esempio, si supponga di voler creare un rapporto riassuntivo per le sequenze che comprenda calcoli statistici, ma che non si desideri calcolare una statistica globale di tutti i livelli di calibrazione e di tutte le analisi dei campioni. Per inserire i livelli di calibrazione ed i tipi di campione in rapporti separati, è necessario aggiungere le voci 'Sample calibration level' e 'Sample type' alla sezione di ripetizione, come illustrato nella Figura 45.

Peak Compound Name Retention Time Area Height	Combination or mese values: Study Name Acq. Method Name Acq. Sequence Name Sample Type Sample Calibration Level Compound Name
Assigned To Assigned To Baseline Code Calibration Peak Type Corrected Expected RT Mobility (Expected) Mobility (Measured)	
Expressions	<u>×</u>

Figura 46 Ripetizione

Nell'esempio si desidera evitare statistiche relative a sequenze o studi diversi, pertanto queste voci vengono aggiunte ai separatori.

Infine si desidera inserire i risultati della sequenza relativa a ciascun composto in una tabella diversa, comprendente statistiche. Pertanto, viene aggiunta la voce 'Compound name'.

Un altro criterio importante è l'ordine delle voci del campo nella sezione dati. La voce nella posizione inferiore nell'elenco viene elaborata per prima. Nell'esempio le pagine del rapporto mostrano l'ordine che segue:

Compound A (Cal.level 1), Compound B (Cal.level 1), Compound A (Cal.level 2), Compound B (Cal.level 2), Compound A (samples), Compound B (samples)

Per ottenere tutti i rapporti del composto A in una serie di pagine di rapporto, la voce 'Compound Name' deve essere spostata sopra la voce 'sample type'. Queste operazioni risultano nel seguente ordine di stampa:

Compound A (Cal.level 1), Compound B (Cal.level 1), Compound A (Cal.level 2), Compound B (Cal.level 2), Compound A (samples), Compound B (samples)

Campi calcolati

È possibile creare campi calcolati utilizzando i campi dell'insieme di dati corrente. Dopo aver creato i campi calcolati è possibile utilizzarli per determinare la sezione di ripetizione, nonché le colonne di una tabella o gli assi di un grafico. I campi calcolati vengono selezionati analogamente agli altri campi dati, l'unica differenza è che compaiono tutti insieme con il nome "Calculated Fields", campi calcolati, nella visualizzazione della struttura dell'insieme di dati.

Intestazioni di sezione

Le intestazioni di sezione hanno lo scopo di distinguere le sezioni del rapporto. Oltre agli elementi elencati per le intestazioni di pagina e i piè di pagina, nome rapporto, commento rapporto, pagina e così via, le intestazioni di sezione possono contenere qualsiasi dato selezionato come elemento da ripetere. Se ad esempio si è scelto di ripetere la sezione sulla base delle combinazioni univoche di Sample Type (Tipo campione) e Study Name, questi due dati vengono visualizzati nell'elenco di dati che è possibile inserire nell'intestazione della sezione. Se non si imposta la ripetizione dei dati, è possibile inserire nell'intestazione di sezione solo gli elementi disponibili per l'intestazione di pagina standard.

Elementi della sezione

Tabelle

È possibile creare otto tipi diversi di tabelle; il tipo di tabella selezionato determina i campi dati utilizzabili. I tipi possibili sono Injection (iniezione), Run (analisi), Signal (segnale), Compound (composto), Peak (picco), Column Configuration (configurazione colonna), Instrument Components (componenti strumento) e Audit Trail (itinerario di controllo). Per ulteriori informazioni sul funzionamento di queste tabelle, vedere "Tabelle" in questo capitolo.

Per ogni tabella, specificare quanto indicato di seguito:

- i campi dati da utilizzare come colonne della tabella;
- i campi dati da utilizzare per raggruppare i dati nella tabella;
- le colonne in base alle quali eseguire l'ordinamento (massimo 3);

- gli eventuali riepiloghi da creare per ogni gruppo o per il rapporto nel suo complesso;
- il carattere e le dimensioni delle informazioni stampate.

Compound Amounts (Built In)	Run Table
Page Header	Description: New Run Table
Report Body	🔽 🔽 Include in Report Alignment: Center 💌 Width: 0.00 In
Securin Reader New Run Table Compound Amount Chart Compound Results	Table Columns (No columns specified)
Page Footer	Repeat Captions on Each Page 🔲 Use Description as Title 🔲 Wrap Text in Columns
	Data Restrictions:
	(No data restrictions specified) Data Grouping:
	Group Data Group On: (No grouping field specified)
	Group Header Label: (Grouping is not enabled)
	Data Sorting:
	Sort:Data Sort On: (No sort fields specified)
	Statistical Summaries:
	(no overall statistics specified)
	Ino group statistics specified) C (no summaries enabled)
	Columns Restrictions Grouping Sorting Summaries Style

Figura 47 Tabella Run

Quando una tabella utilizza più colonne contenenti solo nomi o stringhe e nessuna voce numerica, le righe che contengono le stesse voci vengono compresse in una sola.

Quando una tabella utilizza colonne che contengono voci numeriche, le righe restano separate, anche se le voci contenute sono identiche, come nelle righe uno e tre della tabella Peak riportata di seguito.

4 Utilizzo di Report Template Editor

Componenti del modello di rapporto

Study Name	Sample Name	Inj Vol	Compound Name	Expected RT
Procaine	Procaine decay	3.0	Amino-Benzoic Acid	1.734
Procaine	Control Procaine	3.0	Amino-Benzoic Acid	1.734
Procaine	Procaine decay	3.0	Amino-Benzoic Acid	1.734

Grafici

È possibile creare due tipi di grafico per il rapporto: del composto (Compound Chart) o del campione (Sample Chart). Per entrambi i tipi specificare quanto indicato di seguito:

- i campi dati da utilizzare per creare gli assi X e Y;
- le limitazioni ai dati effettivi utilizzati nella creazione del grafico e, per i grafici del composto (Compound Chart), il numero di composti da inserire;
- i campi dati da utilizzare per raggruppare i grafici;
- le opzioni aggiuntive dei grafici che includono tipo di curva, ponderazione, trattamento dell'origine, limiti, titoli e scala.

Utilizzo di Report Template Editor 4

Componenti del modello di rapporto

Eile Edit Format Help	Compound Chart
Page Header	Description: Compound Amount Chart
End Report Body	L Include in Benort Alianment: Center ▼ Height: 2.50 ➡ In
Section Header	Vidth: 6.30
New Hun Lable Compound Amount Chart	Axes
Compound Results	X Axis: Run Number
Page Footer	Y Axis: Amount
	Data Grouping: Group Data Group Dn: (No grouping field specified) Group Header Labet: (Grouping is not enabled)
	Compounds to Include: C All Compounds All Calibrated Compounds [no compounds specified]
	Axes Restrictions Grouping Compounds Options Preview Help

Figura 48 Grafico Compound

Quando si crea un grafico del campione (Sample Chart), i valori dell'asse Y possono essere scelti da campi per analisi. Per ogni campo dell'asse Y selezionato, vi è un singolo punto per analisi, con i valori delle varie analisi distribuiti lungo l'asse X del grafico.

Quando si crea un grafico del composto (Compound Chart), i valori dell'asse Y possono essere scelti da campi per composto. Se la sezione contiene dati per più composti, è possibile che tali dati vengano sovrapposti su un grafico, con una curva per composto, o su più grafici.

È anche possibile raggruppare i dati in grafici. Se i dati sono raggruppati, in un grafico vengono inseriti solo i dati di un gruppo. Pertanto, viene stampato un grafico per ogni gruppo di dati.

Calcoli

È possibile includere nel rapporto i risultati prodotti da uno script di calcolo personalizzato.

I risultati da visualizzare sono una tabella di calcolo, un elenco di variabili utilizzato per il calcolo oppure un grafico di calcolo che riporta i risultati.

Inoltre, è possibile aggiungere al rapporto anche lo script di calcolo stesso e l'elenco degli errori di calcolo e degli avvertimenti.

📕 Report Template Editor : Administrator / de	mo 💶 🗖 🗙
<u>F</u> ile <u>E</u> dit Format <u>H</u> elp	
🗊 Response ratio	Calculation Table
E Calculation Section	Description: Response ratio
	✓ Include in Report Alignment: Center ▼ Width: 5.20 In.
V	Calculation:
	Table:]2_Sample_runs
	Table Columns: Sample.Sample Name Antipyrine.Peak.Area Phenacetine.Peak.Area ratio
	🔽 Repeat Captions on Each Page 🛛 🔽 Use Description as Title 🗌 Wrap Text in Columns
	Columns Style
	Preview Help

Figura 49 Tabella Calculation

Per ogni voce, specificare quanto indicato di seguito:

- il nome del modello di calcolo;
- la versione del modello di calcolo;
- il carattere e le dimensioni delle informazioni stampate.

• Per le tabelle di calcolo ed i grafici è necessario selezionare anche il nome della tabella dei risultati generati dal modello di calcolo. Una volta scelto il modello di calcolo e la versione, le tabelle di calcolo sono selezionabili. La finestra di dialogo 'data series' consente di selezionare le colonne da visualizzare o da tracciare.

AVVERTENZA

Per creare correttamente un modello di rapporto, che comprenda calcoli personalizzati, è importante disporre di un modello di calcolo utilizzabile con l'insieme di dati corrente.

I modelli di calcolo e di rapporto non sono collegati quando i primi vengono esportati in un file system. Entrambi i modelli devono essere esportati ed importati singolarmente.

Cromatogrammi

È possibile aggiungere cromatogrammi al rapporto solo se sono memorizzati nel database. La memorizzazione di cromatogrammi è un'opzione delle impostazioni di trasferimento dello studio. Quando i cromatogrammi vengono stampati nel rapporto, vengono presentati come rappresentazioni metafile grafiche dei tracciati dei cromatogrammi generati nel software della ChemStation. Non possono essere ulteriormente personalizzati all'interno dei rapporti di ChemStore.

Se la ChemStation utilizza un driver della stampante a colori o a scala di grigi, i cromatogrammi memorizzati in ChemStore vengono stampati a colori, altrimenti in bianco e nero.

Le dimensioni, la posizione e il raggruppamento dei cromatogrammi possono essere specificati dall'ideatore del modello di rapporto.

Tracciati dello spettro

Se memorizzati con i dati, anche gli spettri possono essere inseriti nel rapporto. Anche la memorizzazione degli spettri è controllata dalle impostazioni di trasferimento dello studio. Come per le tabelle e alcuni grafici, è possibile definire ulteriormente le impostazioni, ad esempio per stampare gli spettri solo per un particolare composto o gruppo di composti.

Se la ChemStation utilizza un driver della stampante a colori o a scala di grigi, i tracciati dello spettro memorizzati in ChemStore vengono stampati a colori, altrimenti in bianco e nero.

Le dimensioni, la posizione e il raggruppamento dei tracciati dello spettro possono essere specificati dall'ideatore del modello di rapporto.

4 Utilizzo di Report Template Editor Tabelle

Tabelle

I concetti legati al processo di creazione delle tabelle con ChemStore Report Template Editor sono i più complessi del software. In questa sezione vengono presentati tali concetti al fine di spiegare come vengono create le tabelle sulla base delle selezioni effettuate.

Raggruppamento e riepiloghi delle tabelle

Raggruppamento

I dati contenuti nelle tabelle possono essere raggruppati, vale a dire tutte le righe con lo stesso valore di un campo vengono unite in un unico gruppo. I gruppi vengono ordinati in base al campo che controlla il raggruppamento, mentre le righe di ogni gruppo seguono il criterio di ordinamento selezionato. Se si sceglie di raggruppare le righe di una tabella, è possibile salvare una colonna della tabella non includendo la voce di raggruppamento come colonna. Di fatto, se si sono impostate le colonne della tabella e quindi il raggruppamento, quando si utilizza un campo già rappresentato da una colonna, un messaggio notifica la duplicazione.

Ad esempio, è possibile raggruppare le righe di una tabella in base a Study Name affinché tutti i dati dello stesso studio vengano visualizzati insieme. La voce di raggruppamento Study Name viene visualizzata nella parte superiore di ogni gruppo e tutti i dati del gruppo vengono ordinati secondo l'ordine impostato. Un altro modo di procedere consiste nell'includere Study Name come colonna e quindi nell'assegnare Study Name come prima voce di ordinamento. Eseguendo il raggruppamento in base a Study Name, invece, è possibile creare spazio nella tabella per inserire un'altra colonna.
Report Template Editor : Administrator / h	ipcs
File Edit Format Help Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Proceine Report Image: Procein	Compound Table Description: Compound Results Include in Report Alignment: Center Width: 12,30 cm.
Ī	Table Columns Run Number Sample Name Retention Time Compound Name
	Papear Capitons on Each Page Ose Description as Title wrap Text in Columns Data Restrictions: (No data where:
	Data Sorting: Sort Data Sort On: Compound Name (ascending) Run Number (ascending)
	Statistical Summaries: Overall Summary Group Summaries (grouping not enabled) Columns Restrictions Grouping Sorting Summaries Statistical Summaries Overall Summaries Group Summaries Statistical Summaries Restrictions Grouping Sorting Summaries Style
	Preview Help

Figura 50 Tabella Compound

Statistiche

Le statistiche possono essere stampate nei riepiloghi delle tabelle. È possibile richiedere un riepilogo generale e/o riepiloghi di gruppo, in caso sia stato specificato un dato per il raggruppamento. I riepiloghi sono formati da un massimo di sette righe di informazioni statistiche quali deviazione standard, valori medio, minimo, massimo e così via. È possibile specificare se includere o meno una colonna nei riepiloghi di gruppo o in quelli generali.

Tipi di tabelle

Relazioni tra gli elementi delle tabelle

Le relazioni tra gli elementi delle tabelle possono essere molto complesse, anche nei database di piccole dimensioni. La figura riportata di seguito mostra un esempio della correlazione esistente tra alcuni elementi delle tabelle all'interno di un database di piccole dimensioni.



Figura 51 Relazioni tra gli elementi delle tabelle

Nella figura, iniezioni, analisi, composti, segnali e picchi sono correlati tra loro nei modi indicati di seguito.

- Il database contiene i dati relativi a due iniezioni diverse. Poiché ognuna di queste è stata analizzata due volte, sono presenti quattro analisi in totale.
- Durante la prima iniezione, sono stati acquisiti i segnali (cromatogrammi) I e II, ad esempio i segnali provenienti da due diversi rivelatori o da due diversi canali di un rivelatore a più canali. Durante la seconda iniezione, sono stati analizzati tre segnali (I, II e III).
- Nell'analisi 1 è stato rilevato solo il composto X, mentre nell'analisi 2 sono stati rilevati entrambi i composti X e Y. Nelle analisi 3 e 4 sono stati rilevati i composti Y e Z.

- I risultati per il segnale I dell'analisi 2 includono picchi a 1,0, 2,0 e 3,0 minuti. Il segnale II per tale analisi presenta picchi a 1,0, 2,0 e 3,5 minuti.
- Il segnale I è stato utilizzato per quantificare il composto X, in modo che il picco (2, I, 1,0) sia identificato come picco principale. Anche il picco del segnale II verificatosi nello stesso tempo è associato al composto X, ma non come picco principale.
- Vi sono anche picchi associati al composto Y per l'analisi 2; in questo caso il segnale II è identificato come picco principale.

Si noti come i picchi per l'analisi 2 a 3,0 e 3,5 minuti non siano associati ad alcun composto.

Questo esempio verrà ora utilizzato per spiegare le tabelle Injection, Run, Signal, Compound e Peak (Iniezione, Analisi, Segnale, Composto e Picco).

Tabella Injection

In una tabella Injection, gli unici campi (colonne) che è possibile includere sono quelli con un solo valore per iniezione, ad esempio, data o ora dell'iniezione, nome dello strumento utilizzato, numero vial, nome del file di dati. Il modello dati riportato nella Figura 51 a pagina 108 è stato semplificato in quello della Figura 52.

Injections

1	
2	

Figura 52 Modello dati per una tabella di iniezioni

In generale, la tabella nel rapporto non conterrà più di una riga per ogni iniezione nel database "snapshot" (in questo caso due righe). Vedere la Tabella 3 a pagina 110.

Injection Date	Instrument	Operator	Vial Number
1-Apr-1977 08:00	LC System A	Fred	10
1-Apr-1977 08:20	LC System A	Fred	33

 Tabella 3
 Esempio di tabella di un rapporto

Per varie ragioni può essere presente un numero di righe inferiore a questo:

- Se la tabella si trova in una sezione ripetuta, ogni ripetizione della tabella mostrerà solo le righe associate ai valori dei campi ripetuti. Ad esempio, se la sezione viene ripetuta in base al nome di un composto, vi saranno tre ripetizioni, (una per X, Y e Z). La tabella Injection nella prima ripetizione presenterà solo l'iniezione I, perché il composto X viene rivelato solo nelle analisi basate sulla prima iniezione. La ripetizione Y presenterà le iniezioni I e II, mentre la ripetizione Z presenterà solo una riga per l'iniezione II.
- Se sono state specificate limitazioni dei dati per l'elemento della tabella, le righe che non soddisfano i criteri vengono eliminate.
- Se la tabella non contiene colonne numeriche o di data e ora, vengono visualizzate solo le righe univoche. Nell'esempio precedente, se si includono solo le colonne "Instrument" e "Operator", viene visualizzata una sola riga anziché due righe con contenuto identico.

Tabella Run

I soli campi che è possibile includere in una tabella Run sono quelli che presentano un solo valore per iniezione o un solo valore per analisi, ad esempio nome dello studio, valori dei campi personalizzati o nome del metodo di elaborazione. Il modello dati riportato nella Figura 51 a pagina 108 è ridotto rispetto a quello della Figura 53.



Figura 53 Campi di una tabella Run

In generale, la tabella del rapporto non conterrà più di una riga per ogni analisi nel database "snapshot" (in questo caso quattro righe). Vedere la Tabella 4.

Tabella 4Esempio di tabella di un rapporto

Run No.	Injection Date	Vial	Run Version	Approval	Patient Code
1	1-Apr-1977 08:00	10	2	Pending	PKH9653
2	1-Apr-1977 08:00	10	1	Approved	PKH9653
3	1-Apr-1977 08:20	33	2	Pending	PKH9004
4	1-Apr-1977 08:20	33	1	Approved	PKH9004

Come nel caso delle tabelle Injection, è possibile che il numero di righe sia inferiore per i seguenti motivi:

- La tabella si trova in una sezione ripetuta.
- Sono state specificate delle limitazioni dei dati per l'elemento della tabella.
- Non sono presenti colonne numeriche o di data e ora, altrimenti vi sarebbero righe identiche. Ad esempio, se si includono solo le colonne Approval oppure Patient Code, sono presenti solo due righe. Se si includono entrambe le colonne Approval e Patient Code vi sono quattro righe, poiché esistono quattro combinazioni univoche di queste colonne.

Tabella Signal

I soli campi che è possibile includere in una tabella Signal sono quelli che presentano un solo valore per iniezione o un solo valore per analisi o segnale, ad esempio descrizione del segnale, ora di inizio, ora di fine, tipo. Il modello dati accessibile è riportato nella Figura 54.



Figura 54 Modello dati di una tabella Signal

In generale, il rapporto non conterrà più di una riga per ogni combinazione di analisi e segnale. In questo caso, due segnali sono associati alle analisi 1 e 2 e tre segnali sono associati alle analisi 3 e 4, pertanto saranno presenti dieci righe. Vedere la Tabella 5 a pagina 113.

Run No.	Version	Vial	Channel
1	1	10	DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100
1	1	10	DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100
2	2	10	DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100
2	2	10	DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100
3	1	33	DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100
3	1	33	DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100
3	1	33	DAD1 C, Sig=320,8 Ref=550,100
4	2	33	DAD1 A, Sig=282,8 Ref=550,100
4	2	33	DAD1 B, Sig=295,8 Ref=550,100
4	2	33	DAD1 C, Sig=320,8 Ref=550,100

 Tabella 5
 Esempio di tabella di un rapporto

Come nel caso delle tabelle Injection e Run, è possibile che il numero di righe sia inferiore per i seguenti motivi:

- La tabella si trova in una sezione ripetuta.
- Sono state specificate delle limitazioni dei dati per l'elemento della tabella.
- Non sono presenti colonne numeriche o di data e ora, altrimenti vi sarebbero righe identiche. Ad esempio, se fosse inclusa solo la colonna Channel, la tabella presenterebbe solo tre righe, una per ognuno dei tre segnali.

4 Utilizzo di Report Template Editor Tabelle

Tabella Compound

La tabella Compound può includere campi con un solo valore per iniezione, analisi o composto. Può inoltre includere campi di picco e di segnale. Tuttavia, gli unici valori di picco che possono essere inclusi sono quelli relativi al picco principale di ogni risultato di composto. Ciò significa che sarà presente un solo valore per area di picco associata al composto X nell'analisi 1. Analogamente, l'unica informazione di segnale inclusa nella tabella Compound proviene dal segnale associato al picco principale per il composto.

Il modello dati in questo caso è riportato nella Figura 55. Si noti come vengano visualizzati solo i picchi principali, i quali presentano una relazione 1:1 con risultato di composto e voci di segnale.



Figura 55 Modello dati per la tabella Compound

In questo esempio, sono presenti tre composti diversi e un totale di sette insiemi di risultati di composto per le quattro analisi, poiché alcuni composti sono stati rilevati in più di un'analisi. La tabella può pertanto presentare fino a sette righe. Vedere la Tabella 6 a pagina 115.

Run No.	Vial	Cpd Name	Cpd Amt	RT	Channel
1	10	Х	n.nnn	1.000	DAD1 A,
2	10	Х	n.nnn	1.000	DAD1 A,
2	10	Y	n.nnn	2.000	DAD1 B,
3	33	Y	n.nnn	2.000	DAD1 A,
3	33	Z	n.nnn	4.500	DAD1 B,
4	33	Y	n.nnn	2.000	DAD1A,
4	33	Z	n.nnn	4.500	DAD1 B,

 Tabella 6
 Esempio di tabella Compound Result

Come per altre tabelle, è possibile che il numero di righe sia inferiore per i seguenti motivi:

- La tabella si trova in una sezione ripetuta.
- Sono state specificate delle limitazioni dei dati per l'elemento della tabella.
- Non sono presenti colonne numeriche o di data e ora, altrimenti vi sarebbero righe identiche. Ad esempio, se fosse inclusa solo la colonna Cpd Name, la tabella presenterebbe solo tre righe, una per ognuno dei tre composti.

Tabella Peak

Come la tabella Compound, le tabelle Peak possono includere campi con un solo valore per iniezione, analisi, composto segnale o picco. A differenza dei picchi nella tabella Compound, i picchi analisinella tabella Peak non sono limitati al picco principale per ogni composto. Ciò significa che la tabella può contenere informazioni per tutti i picchi, anche per quelli non associati ad alcun composto. Il modello dati in questo caso è riportato nella Figura 56 a pagina 116.



Figura 56 Modello dati per la tabella Peak

Nell'esempio riportato di seguito sono presenti otto voci di picco solo per le prime due analisi.

Se si intende creare una tabella Peak con esattamente le stesse colonne della tabella Compound dell'esempio precedente, questa presenterebbe molte più righe, come illustrato di seguito. I picchi non associati al composto di destinazione non contengono alcuna quantità e presentano nomi quali "Unknown n".

Run No.	Vial	Cpd Name	Cpd Amt	RT	Channel
1	10	Х	n.nnn	1.000	DAD1 A,
1	10	Х	n.nnn	1.000	DAD1 B,
2	10	Х	n.nnn	1.000	DAD1 A,
2	10	Х	n.nnn	1.000	DAD1 B,
2	10	Y	n.nnn	2.000	DAD1 A,
2	10	Y	n.nnn	2.000	DAD1 B,
2	10	<unknown 1=""></unknown>		3.000	DAD1 A,
2	10	<unknown 2=""></unknown>		3.500	DAD1 B,
3	33	Y	n.nnn	2.000	DAD1 A,
3	33	Y	n.nnn	2.000	DAD1 B,
3	33	Y	n.nnn	2.000	DAD1 C,

 Tabella 7
 Esempio di tabella Peak in un rapporto

Come per altre tabelle, è possibile che il numero di righe sia inferiore per i seguenti motivi:

- La tabella si trova in una sezione ripetuta.
- Sono state specificate delle limitazioni dei dati per l'elemento della tabella.
- Non sono presenti colonne numeriche o di data e ora, altrimenti vi sarebbero righe identiche. Ad esempio, se si fosse inclusa solo la colonna Cpd Name, la tabella presenterebbe cinque righe, per i composti X, Y, Z, Unknown 1 e Unknown 2.

AVVERTENZA

Quando si acquisiscono più canali di dati, la tabella Peak può presentare più voci rispetto alle altre tabelle del database e utilizzare una quantità considerevole di risorse (tempo del computer e carta di stampa).

Tabella Instrument Components

In una tabella Instrument Components, è possibile inserire colonne con un valore per analisi, iniezione o componenti dello strumento. Ogni analisi è associata a un solo strumento, che a sua volta può essere associato a diversi componenti.



Figura 57Modello dati per la tabella Instrument Components

Se il diagramma precedente rappresenta i dati in questione, una tabella Instrument Component presenta un massimo di 14 righe: i quattro componenti dello strumento 1 sono utilizzati per l'iniezione 1 e le analisi 1 e 2; i tre componenti dello strumento 2 sono utilizzati per le analisi 3 e 4. Vedere la Tabella 8 a pagina 119.

Component Name	Injection No.	Run No.	
Pump 1	1	1	
Oven 1	1	1	
FLD 1	1	1	
DAD1	1	1	
Pump 1	1	2	
Oven 1	1	2	
FLD 1	1	2	
DAD 1	1	2	
Pump 2	2	3	
DAD 2	2	3	
VWD 2	2	3	
Pump 2	2	4	
DAD 2	2	4	
VWD 2	2	4	

Tabella 8 Esempio di tabella Instrument Components

Il numero di righe può essere ridotto mediante uno dei tre fattori precedentemente illustrati per le altre tabelle.

Tabella Column Configuration

Questa tabella funziona esattamente come la tabella Instrument Components. In questa tabella, infatti, le informazioni di configurazione delle colonne sostituiscono le informazioni sui componenti dello strumento (ogni iniezione può essere associata a più voci di configurazione delle colonne). Pertanto, è possibile includere solo le colonne Injection, Run, o Column Config Fields.

Tabella Audit Trail

In questa tabella è possibile inserire colonne con un valore per iniezione, analisi o itinerario di controllo. Ogni voce di analisi è associata a una o più voci di itinerario di controllo, una per ogni voce quando si modifica lo stato di approvazione o i valori dei campi personalizzati.



Figura 58 Modello dati per la tabella Audit Trail

Tabella 9Esempio di tabella Audit Trail

Inj. No.	Run No.	Approval Status	Audit Time
1	1	Pending	01-Apr-97 08:10
1	2	Pending	02-Apr-98 10:15
1	2	Approved	02-Apr-98 14:30
2	3	Pending	01-Apr-97 08:30
2	4	Pending	02-Apr-98 10:20
2	4	Approved	02-Apr-98 14:30

Creazione di un rapporto mediante un modello

Una volta terminate le modifiche preliminari di un modello di rapporto, è possibile vedere in anteprima il rapporto che verrà creato utilizzando il modello e apportare eventuali modifiche al modello, senza uscire dall'applicazione Report Template Editor. Quando il modello risulta soddisfacente, è possibile stampare il rapporto.

Dall'applicazione ChemStore C/S, selezionare l'insieme di risultati di analisi che si desidera inserire nel rapporto specificando una query, quindi selezionare il modello da utilizzare.

Creazione automatica di rapporti

ChemStore C/S consente la creazione automatica di rapporti dopo una sequenza. Successivamente, è possibile creare un rapporto di riepilogo basato sui risultati della sequenza corrente. I rapporti vengono iniziati tramite un collegamento DDE (Microsoft Dynamic Data Exchange) a ChemStore C/S. La finestra di dialogo Preferences del menu ChemStore nella finestra ChemStation Method and Run Control consente di impostare il nome e il tipo di rapporto successivo alla sequenza. Per il rapporto successivo alla sequenza è possibile scegliere qualsiasi rapporto di ChemStore C/S disponibile, modelli standard e personalizzati inclusi. 4 Utilizzo di Report Template Editor Tabelle

ChemStore C/S Agilent - Guida ai concetti



ChemStore C/S Agilent Guida ai concetti

5

Protezione dei dati

Introduzione 124 Impostazione e gestione degli utenti 127 Impostazione di informazioni organizzative 130 Impostazione e gestione degli elementi di ChemStore C/S 133 Gestione delle operazioni di archiviazione e di ripristino in Admin Client 150 Itinerario di controllo (Audit Trail) 154 Notifica tramite e-mail 156 Validazione e protezione dei file stampati 160



Agilent Technologies

Introduzione

La protezione e l'integrità dei dati rappresentano uno dei problemi principali di un laboratorio di analisi che deve rispettare regolamenti quali le norme GPL (Good Laboratory Practice) e cGMP (current Good Manufacturing Practice).

NOTA

In caso sia richiesto il software per adempiere esplicitamente alle norme GLP/GMP, aggiungere all'installazione di ChemStore C/S il software Security Pack G2183AA, disponibile presso il fornitore Agilent Technologies locale. Per soddisfare queste esigenze, ChemStore C/S fornisce le funzionalità descritte di seguito.

L'accesso a ChemStore C/S è protetto da password.

- Per avviare ChemStore C/S gli utenti devono fornire una password valida. Inoltre, anche molte altre attività che consentono di modificare il database richiedono l'immissione di una password.
- ChemStore C/S utilizza un sistema di autorizzazioni utente per impedire agli utenti non autorizzati di eseguire funzioni di gestione quali la definizione dei layout dei rapporti o l'eliminazione di analisi dal database. Il profilo utente specifica le autorizzazioni dell'utente; è possibile utilizzare uno dei profili utente incorporati o personalizzare i profili di ogni singolo utente.
- ChemStore C/S non consente la modifica dei risultati di analisi memorizzati; tali risultati sono protetti. L'utente può modificare solo i campi personalizzati o lo stato di approvazione di un record. Tutte le modifiche sono documentate in un itinerario di controllo.
- La versione client/server di ChemStore C/S fornisce funzioni che consentono di archiviare i dati una volta completato il progetto e di ripristinarli al momento necessario.
- Per tracciare il trasferimento dei dati, ChemStore C/S fornisce un itinerario di controllo che registra gli eventi riportati di seguito:
 - aggiunte al database (analisi);
 - modifiche ai campi personalizzati;
 - modifiche dello stato di approvazione di un'analisi;
 - aggiunta o eliminazione da un batch;
 - modifiche dello stato di archiviazione di un'analisi.

• La ChemStation e ChemStore possono essere bloccati durante la loro analisi per impedire interventi non autorizzati. Il blocco può essere di tipo privato quando è necessario fornire la password dell'utente corrente o di un amministratore per sbloccare la sessione o non privato, quando è sufficiente una combinazione valida di ID e password.

Protezione

ChemStore C/S fornisce due livelli di protezione per impedire l'accesso o l'utilizzo non autorizzato del database. Il primo livello di protezione è costituito dalla password che impedisce l'accesso non autorizzato, mentre il secondo livello di protezione si attua mediante autorizzazioni utente che limitano le funzionalità disponibili agli utenti autorizzati. Password e autorizzazioni utente non sono globali, ma vengono configurate singolarmente per ogni database ChemStore C/S.

Protezione da password

ChemStore C/S è protetto da password. Per avviare ChemStore C/S, l'utente deve fornire una password valida. Anche altre attività all'interno di ChemStore C/S richiedono la verifica della password oltre all'autorizzazione utente, ad esempio:

- passaggio a un utente diverso;
- modifica delle password;
- modifica dei campi personalizzati;
- riapertura di un'analisi precedentemente archiviata;
- eliminazione di un'analisi;
- archiviazione e ripristino di analisi;
- approvazione e rifiuto di analisi.

NOTA

Per motivi di sicurezza, è consigliabile modificare le password utente predefinite dopo l'installazione di ChemStore C/S. Vedere "Server—Change default Passwords" nella *Guida all'installazione di ChemStore C/S*.

Impostazioni delle password

Alla validità e alla durata delle password vengono applicate varie condizioni. L'amministratore può specificare i valori di queste condizioni.

Minimum length	Lunghezza minima accettata della password (in caratteri). Le password inferiori alla lunghezza minima non sono valide e vengono rifiutate. La lunghezza minima predefinita è di 8 caratteri.
Password validity	Periodo di tempo in cui la password rimane valida (in giorni). Dopo il periodo di validità specificato la password scade e occorre fornirne una nuova. La validità predefinita è 90 giorni.
Minimum password recycle	Numero minimo di nuove password univoche che un utente deve utilizzare prima di poterne riutilizzare una. Il valore predefinito è 12, che indica che un utente deve cambiare password almeno 12 volte prima di poter riutilizzare la password originale.
Retries before rejection	Numero massimo di tentativi consecutivi con esito negativo che un utente può effettuare prima di essere rifiutato dal sistema Chemstore C/S. II valore predefinito è 3. Se si supera il numero massimo di tentativi, la password corrente viene invalidata.

Impostazione e gestione degli utenti

Molte delle funzioni di ChemStore C/S possono essere rese inaccessibili da parte di personale non autorizzato tramite un insieme di autorizzazioni utente. Ogni utente ChemStore C/S ottiene l'autorizzazione a eseguire determinate operazioni. Il singolo utente può ottenere diversi insiemi di autorizzazioni, a seconda delle esigenze aziendali del laboratorio e dei requisiti professionali dello stesso.

Un utente ChemStore C/S è una persona registrata in ChemStore C/S con un nome utente di accesso, un nome utente di visualizzazione che compare negli itinerari di controllo e in altri rapporti, una password e un insieme di autorizzazioni. L'insieme di autorizzazioni identifica le funzioni ChemStore C/S disponibili all'utente.

Solo un amministratore o un utente che dispone delle adeguate autorizzazioni può impostare un nuovo utente ChemStore C/S. Il sistema fornisce quattro profili utente standard per facilitare la configurazione delle autorizzazioni.

Operator	Si tratta dell'utente di base, può recuperare dati dal database, ma non è autorizzato a modificare la configurazione di ChemStore C/S. Autorizzazioni : solo creazione di batch.
Chemist	L'utente Chemist può modificare lo stato di approvazione dei dati recuperati e i valori dei campi personalizzati. Può inoltre salvare le impostazioni dell'interfaccia utente e, nella versione client/server, archiviare e ripristinare file.
	Autorizzazioni : archiviazione/recupero di analisi, approvazione di primo livello, creazione di batch, creazione/modifica di query, filtri avanzati, modelli di calcolo e di rapporto; definizione di colonne/espressioni, salvataggio/modifica di impostazioni.

5 Protezione dei dati

Impostazione e gestione degli utenti

Lab Manager	L'utente Lab Manager dispone di tutte le autorizzazioni dell'utente Chemist oltre alle autorizzazioni alla creazione e modifica di studi e campi personalizzati. Il responsabile può approvare analisi fino al secondo livello e modificare la configurazione di ricaricamento dei dati. Può inoltre allocare le impostazioni di ChemStore C/S ad altri utenti ed eliminare le analisi. Autorizzazioni : tutte tranne la modalità test Admin Client (particolare modalità di diagnostica e manutenzione), l'amministrazione del server del database, l'amministrazione degli utenti (vedere la Tabella 10 a pagina 128), l'assegnazione di studi agli utenti e l'esecuzione della migrazione del database.
Administrator	L'utente Administrator dispone delle stesse autorizzazioni dell'utente Lab Manager, ma è anche in grado di amministrare gli utenti, assegnare studi agli utenti e, nella versione client/server, di amministrare il server ChemStore C/S e di eseguire la migrazione del database. Autorizzazioni : tutte, vedere la Tabella 10 a pagina 128.

Gli utenti possono essere impostati utilizzando uno dei quattro profili utente standard; tuttavia è possibile assegnare o rifiutare singole autorizzazioni per fornire a ogni utente un insieme personalizzato di autorizzazioni. Le autorizzazioni contenute nei modelli forniti sono illustrate nella Tabella 10.

NOTA

Se è installato Security Pack, le autorizzazioni per operazioni quali la messa in pausa dello spooler, l'eliminazione di lavori di spool o la preselezione di un database, vengono gestite a livello di sistema operativo. Le operazioni standard del software dovrebbero essere effettuate da un membro del gruppo di utenti Windows *users*. Vedere anche la guida per l'utente di *ChemStation Plus Security Pack*.

Tabella 10 Modelli di autorizzazioni utente

Autorizzazione	Operator	Chemist	Lab. Manager	Administrator
Modalità test Admin Client				Sì
Amministrazione del server del database				Sì
Amministrazione dei campi personalizzati			Sì	Sì
Amministrazione degli utenti				Sì
Amministrazione delle impostazioni utente			Sì	Sì

Impostazione e gestione degli utenti

Autorizzazione	Operator	Chemist	Lab. Manager	Administrator	
Assegnazione di studi agli utenti				Sì	
Archiviazione e ripristino delle analisi		Sì	Sì	Sì	
Approvazione di primo livello		Sì	Sì	Sì	
Approvazione di secondo livello			Sì	Sì	
Creazione e modifica di query		Sì	Sì	Sì	
Creazione e modifica di filtri avanzati		Sì	Sì	Sì	
Creazione e modifica di modelli di rapporto		Sì	Sì	Sì	
Creazione/modifica di modelli di calcolo		Sì	Sì	Sì	
Creazione e modifica di studi			Sì	Sì	
Definizione di colonne ed espressioni		Sì	Sì	Sì	
Eliminazione di analisi			Sì	Sì	
Modifica dei valori dei campi personalizzati		Sì	Sì	Sì	
Riapertura di analisi			Sì	Sì	
Creazione di batch	Sì	Sì	Sì	Sì	
Compattazione database (solo computer singoli)				Sì	
Modifica e salvataggio di impostazioni		Sì	Sì	Sì	
Migrazione di database				Sì	

 Tabella 10
 Modelli di autorizzazioni utente (continua)

Per le seguenti operazioni non è necessaria alcuna autorizzazione.

- Memorizzazione di risultati nel database.
- Recupero e rivisualizzazione di dati mediante le query salvate a cui l'utente è autorizzato ad accedere.
- Accesso a qualsiasi impostazione dell'utente (query, filtro, modello di rapporto o impostazione dell'interfaccia utente) non controllata da autorizzazioni di protezione, di proprietà dell'utente o a cui l'utente è autorizzato ad accedere.

5 Protezione dei dati

Impostazione di informazioni organizzative

• Il ricaricamento di file di dati non elaborati, di file di metodo o di file di sequenza richiede l'autorizzazione alla creazione di batch.

Disattivazione di utenti

Un utente Administrator o un utente con l'autorizzazione ad amministrare gli utenti può disattivare qualsiasi utente ChemStore C/S registrato. Gli utenti disattivati non possono accedere a ChemStore C/S.

Impostazione di informazioni organizzative

Solo gli utenti che dispongono delle autorizzazioni appropriate possono impostare e gestire studi e campi personalizzati. Tra i profili utente standard, solo gli utenti Lab Manager e Administrator dispongono di tali autorizzazioni.

Impostazione e gestione di studi

Solo gli utenti Administrator, Lab Manager o coloro che dispongono dell'autorizzazione appropriata possono creare o modificare uno studio. È possibile creare uno studio da zero oppure basarsi su uno esistente. Durante la creazione dello studio, è necessario identificare gli elementi (cromatogrammi, spettri, dati non elaborati, informazioni di metodo e sequenza) da memorizzare in ChemStore C/S insieme ai risultati e specificare i campi personalizzati da associare allo studio. Tutti i campi personalizzati creati per altri studi e non disattivati possono essere inseriti nel nuovo studio. È anche possibile specificare eventuali campi personalizzati da inserire nello studio. Vedere "Impostazione e gestione di campi personalizzati" a pagina 131. Indipendentemente dal fatto che i campi personalizzati inseriti nello studio siano nuovi o preesistenti, i valori in essi contenuti sono univoci per le analisi dello studio.

Dopo aver impostato lo studio se ne concede o nega l'accesso agli utenti a seconda delle relative assegnazioni. Vedere "Assegnazione degli studi" a pagina 132. Gli utenti assegnati allo studio possono aggiungervi dati e recuperare analisi utilizzando il nome dello studio come criterio di ricerca. Quando viene creato un nuovo studio, un utente con privilegi sufficienti di accesso può inoltre modificare la modalità di approvazione, nonché utilizzare la modalità di blocco e di notifica LIMS.

Gli utenti con l'autorizzazione appropriata possono assegnare agli studi lo stato Active o Inactive. È disponibile uno studio attivo per tutte le attività della ChemStation e di ChemStore C/S. Non sono più disponibili studi inattivi per la ChemsStation in cui aggiungere dati. In ChemStore C/S la funzione è ancora disponibile per il recupero di dati, ma non può essere utilizzata come modello per un nuovo studio o per la modifica.

Impostazione e gestione di campi personalizzati

Solo gli utenti Administrator, Lab Manager o altri utenti che dispongono dell'autorizzazione richiesta possono creare o modificare i campi personalizzati. Per la creazione di un campo personalizzato è necessario fornire un nome e specificare il tipo di dati; per alcuni tipi di dati sono inoltre richieste informazioni aggiuntive, quali unità e un elenco dei valori possibili. Vedere "Utilizzo di campi personalizzati" a pagina 21. È possibile inserire negli studi un campo personalizzato appena creato.

Immissione di dati nei campi personalizzati

Durante l'impostazione del campo personalizzato si specifica il metodo di immissione dati. I valori dei campi personalizzati possono essere immessi automaticamente da una macro della ChemStation oppure manualmente. Se si imposta il campo in modo da *richiedere sempre* l'immissione di un valore, è necessario immettere un valore valido nel campo per consentire il trasferimento dei risultati dell'analisi a ChemStore C/S. Se non è sempre richiesta l'immissione di un valore, è possibile specificare un valore predefinito; tale valore può essere sovrascritto prima del trasferimento dei dati. Per alcuni tipi di campo è anche possibile specificare maschere di dati: valori massimi e minimi per i campi numerici e lunghezze di stringa massime per i campi di testo. Queste maschere di dati sono specifiche dello studio; se il campo personalizzato viene utilizzato in altri studi, le relative maschere di dati possono presentare specifiche diverse. Impostazione di informazioni organizzative

Perché i dati vengano immessi automaticamente nel campo personalizzato tramite una macro ChemStation, verificare quanto indicato di seguito:

- la macro deve restituire il tipo di dati corretto secondo le specifiche del campo personalizzato;
- la macro deve essere caricata nella ChemStation.

Per ulteriori dettagli sulle macro, consultare la Guida in linea della ChemStation alla voce Commands.

Gli utenti con l'autorizzazione appropriata possono assegnare ai campi personalizzati lo stato Active o Inactive. Se lo stato di un campo personalizzato viene impostato su Inactive, tale campo non sarà più disponibile per alcuna attività della ChemStation e di ChemStore C/S, potrà essere utilizzato solo come criterio di query.

Assegnazione degli studi

Solo gli utenti assegnati a uno studio possono accedervi. L'assegnazione degli studi agli utenti può essere effettuata durante la creazione e la modifica degli stessi oppure tramite un'interfaccia separata in cui è possibile modificare le assegnazioni.

Gli utenti possono accedere solo agli studi a loro assegnati nelle interfacce software di ChemStore e della ChemStation. Ciò protegge gli studi dalla modifica, dall'accesso o dall'aggiunta di dati inappropriati da parte di utenti non autorizzati. Inoltre, l'assegnazione di un numero limitato di studi a ogni utente rende più agevole l'utilizzo del software, in quanto viene visualizzato un numero minore di studi e di opzioni.

Per assegnare gli studi è richiesta l'autorizzazione specifica "Assign Studies to Users".

Impostazione e gestione degli elementi di ChemStore C/S

È possibile salvare e riaprire quattro elementi principali della configurazione di ChemStore C/S. Questi elementi possono anche essere specificati per l'utilizzo da parte di altri utenti ChemStore C/S, anche se questi non dispongono delle autorizzazioni necessarie per creare o salvare gli elementi. Questa impostazione limita l'accesso ai dati a sottoinsiemi di dati predefiniti. L'utente che crea l'elemento viene definito come proprietario, tuttavia la proprietà può essere trasferita ad altri da un utente che dispone dell'autorizzazione necessaria.

Query	È possibile salvare le query con un nome per poterle riutilizzare successivamente. Le query salvate possono essere allocate ad altri utenti affinché possano utilizzarle.
Filtri	È possibile salvare i filtri personalizzati con un nome per poterli riutilizzare successivamente. I filtri personalizzati salvati possono essere allocati ad altri utenti affinché possano utilizzarli.
Modelli di rapporto	I modelli di rapporto possono essere salvati con un nome per poterli riutilizzare successivamente. I modelli di rapporto salvati possono essere allocati ad altri utenti affinché possano utilizzarli.
Impostazioni dell'interfaccia utente	Le impostazioni dell'interfaccia utente includono tutte le configurazioni correnti di tutte le finestre, le tabelle e ed i grafici. Queste impostazioni possono essere salvate con un nome per poterle utilizzare successivamente. Le impostazioni salvate possono essere allocate ad altri utenti affinché possano utilizzarle.
Modelli di calcolo	I modelli di calcolo possono essere salvati con un nome e un numero di versione per poterli riutilizzare successivamente. I modelli di calcolo salvati possono essere allocati ad altri utenti affinché possano utilizzarli. L'allocazione di modelli di calcolo interessa tutte le versioni con lo stesso nome.

Oltre ad allocare gli elementi di ChemStore C/S affinché possano essere utilizzati da altri utenti e a trasferire la proprietà ad altri utenti, un utente con le autorizzazioni necessarie può rinominare un elemento salvato. Gli elementi possono anche essere modificati da un utente che disponga delle necessarie autorizzazioni e salvate di nuovo con un nome alternativo o con lo stesso nome; in tal caso l'elemento originale viene sovrascritto.

5

Archiviazione e ripristino

La versione client/server di ChemStore consente di archiviare (copiare e salvare) le analisi presenti nel database in un file separato su disco o su nastro, purché si disponga delle autorizzazioni richieste. Dopo l'archiviazione delle analisi, è possibile eliminarle automaticamente dal database ChemStore C/S per liberare dello spazio.

Prima di poter archiviare, recuperare o riaprire un file, è necessario ottenere dall'amministratore l'autorizzazione appropriata. L'amministratore inoltre imposta e gestisce alcune funzioni di archiviazione tramite ChemStore C/S Admin Client. Vedere la sezione "Gestione delle operazioni di archiviazione e di ripristino in Admin Client" a pagina 150.

Se dopo l'archiviazione non si eliminano le analisi, risulta ancora possibile accedervi dal database, ma non modificarle, ad esempio approvarle, senza prima riaprirle. Per poter riaprire un'analisi eliminata, è necessario rimuoverla dall'archivio e ripristinarla nel database.

Archiviazione, cancellazione, ripristino e riapertura interessano tutte le versioni di un'analisi. Tutte le versioni esistenti di un'analisi vengono archiviate, anche se distribuite su diversi studi. Analogamente, se si specifica di eliminare automaticamente le analisi dopo l'archiviazione, vengono eliminate tutte le versioni.

ChemStore C/S comprende due modalità di archiviazione: automatizzata ed interattiva.

Archiviazione automatizzata

Un utente che dispone delle autorizzazioni dell'amministratore può impostare l'archiviazione automatica di analisi specificate ad intervalli regolari. Le analisi da archiviare sono selezionate tramite una query. Per impostare nuove query per l'archiviazione, l'utente deve selezionare **Automated Archiver** dal menu 'administration' del client di revisione. La sezione di archiviazione della query consente di immettere informazioni simili a quelle della finestra di dialogo **Create Archive Unit** usata per l'archiviazione manuale. È necessario specificare un nome per la query di archivio (obbligatorio ed univoco) unitamente al nome dell'unità di archiviazione e al percorso. Al nome dell'unità di archiviazione viene aggiunta la data di creazione, ad esempio '<nomefile>-aaaa-mm-gg'.

La casella **Active** consente di abilitare una query di archivio. La query di archivio comparirà come attiva nell'elenco di query di archivio automatica. Se si rimuove il segno di spunta, la query verrà disabilitata e lo stato visualizzato sarà **inactive**.

In alternativa è possibile eliminare analisi dal database una volta archiviate con esito positivo.

I criteri di query comprendono voci quali il tempo di iniezione, il nome dello strumento, il nome dell'operatore, il nome della sequenza di acquisizione, il nome del campione, il nome dello studio, i campi personalizzati, l'operatore di iniezione, lo stato di approvazione e così via. Gli operandi dipendono dalla categoria di dati e possono essere negati con l'operatore **NOT**.

5 Protezione dei dati

Archiviazione e ripristino

utomate	d Archive Details						
-Archive (Juero						
	Path is relative to CN						
Name:	Eastern Lab, weekly archive						
Path	archive						
<u>r</u> oon.	alusaklu						
<u>r</u> ile:							
_							
	nt: u archival of all runs older than one year						
Weeki	y alcriver of all runs of element one year.						
	×						
- Query Cc	ndition use) Op. AND OR t reprocessing timestamp Older than '365' Days ago Add clause Modify clause Delete clause						
Frequer every	ncy (wake up interval is 15.min): 1 Week(s) First starting date: Dag: 01.01.2003 Ime: 03:00:00						
Reenter yo	ur login name: Reenter your password:						
Test	Query OK Cancel Help						

Figura 59 Finestra di dialogo Automated Archives

- Dati basati su testo: is equal, contains (jolly)
- Dati numerici: is equal, is greater than, is lower than, is between
- Data : is older than X days/months

Per prestazioni ottimali, il numero di clausole definibili per archivi automatizzati è limitato a 10.

Per ogni query di archivio è possibile impostare una frequenza singola di archiviazione. L'intervallo di tempo è configurabile, ad esempio con cadenza giornaliera, settimanale, mensile o in base ad un contatore (ogni x giorni, settimane, ecc.). È necessario inserire un valore in **First starting date** (Prima data di inizio) quando la query deve essere eseguita sul server. L'utente deve autenticarsi e confermare la creazione o la modifica di un archivio con **UserID** e **Password**, come avviene per la finestra di dialogo **Create archive unit** per la creazione di archivi manuali. Il pulsante **Test Query** fornisce informazioni sul numero di analisi restituite dalla query corrente con le condizioni specificate.

Quando una query di archivio è abilitata, verrà eseguita automaticamente per la prima volta come definito in **First starting date**. I seguenti archivi verranno creati in base all'intervallo di tempo specificato.

Archiviazione interattiva

Gli utenti possono selezionare le analisi da archiviare dalla finestra Archive/ Delete o dal layout grafico del pannello principale di ChemStore.

<u>F</u> ile ⊻i	ew <u>O</u> ptions	<u>Review</u> Report	Administration	n <u>H</u> elp						
		Procaine de	cav							Compound
•										
60		2.4	1.0.							
Sam	ple									
			@1.=		11					Start
DTE	X 🗂) 🔒 🔂 🕌	1 2.Ξ 3.Ξ		Ctrl	Procaine				AI
Run	Mark run	Sample name	Audit	Status	^		DAD1 A, Sig	=282,8 Ref=6	550,100	(PROCAINE
7		Procaine level 2		Never Archived		mAU	ļ	äd		
8		Procaine level 3		Never Archived				¥		
9		Procaine level 4		Never Archived		17	5	li l		
10		Procaine level 5		Never Archived		I '''	ŕ	₽ I		
11		Procaine decay		Never Archived		156)	<u>la</u>		
12	Ĥ	Control PABS		Never Archived		125	ñ	厚		
13	Ĥ	Control Procaine		Never Archived		12		lê.		
14		Procaine decay		Never Archived		106)	I₹		
15		Procaine decay		Never Archived		75		4		
16		Procaine decay		Never Archived		l 'ĭ				
17		Procaine decay		Never Archived		50				
18		Procaine decay		Never Archived		25				
19		Control PABS		Never Archived						
20		Control Procaine		Never Archived		머			_	
21		Procaine decay		Never Archived				1	,	3
22		Procaine decay		Never Archived					- 	
23		Procaine decay		Never Archived		Hun	Sample	Data File	Amount	U
24		Procaine decay		Never Archived		12	Control PABS	PH9_0011.D	85,47	DAD1 A, Sig=2
25		Procaine decay		Never Archived		12	Control PABS	PH9_0011.D	0,00	DAD1 A, Sig=2
26		Control PABS		Never Archived		12	Control PABS	PH9_0011.D	0,00	DAD1 B, Sig=2
27		Control Procaine		Never Archived		12	Control PABS	PH9_0011.D	85,47	DAD1 B, Sig=2
28		Procaine decay		Never Archived		12	Control PABS	PH9_0011.D	0,00	DAD1 C, Sig=3
29		Procaine decay		Never Archived		12	Control PABS	PH9_0011.D	85,47	DAD1 C, Sig=3
30		Procaine decay		Never Archived						
31		Procaine decay		Never Archived						
32		Procaine decay		Never Archived						
33		Control PABS		Never Archived						
34		Control Procaine		Never Archived						
35		Procaine decay		Never Archived						
36		Procaine decay		Never Archived						
37		Procaine decay		Never Archived						
38		Proceine deceu		Never Archived	_					
🔽 🗹 Ar	chive 🗖 🛙	Delete 🗖 Reop	en							
<u> </u>										
Status										

Figura 60 Finestra Archive/Delete del pannello principale di ChemStore

Si noti che è premuta l'icona Archive, ma non l'icona Sample Review.

La finestra Archive/Delete contiene un insieme di strumenti simile al layout grafico Sample Review, fatta eccezione per le tre icone riportate di seguito:



Consente di specificare dove e quando memorizzare l'unità di archiviazione.



Elimina tutte le analisi contrassegnate per l'eliminazione nell'elenco relativo. Questo pulsante è anche presente nella finestra Delete della versione autonoma.



Riapre tutte le analisi contrassegnate per la riapertura nell'elenco e imposta il relativo stato su Approval Pending. Vedere "Stato di approvazione delle analisi" a pagina 29.

Per ulteriori informazioni sul layout grafico Sample Review, vedere "Finestra campione" a pagina 36.

Le analisi da archiviare vengono selezionate dall'elenco relativo nel pannello sinistro della finestra **Archive/Delete**, come avviene per la ricerca di dati a scopo di revisione o creazione di rapporti nella finestra Review. Le analisi contrassegnate per l'archiviazione vengono protette da eventuali modifiche successive dello stato di approvazione o dei valori dei campi personalizzati. Poiché l'archiviazione può essere rimandata a un altro orario più adatto, ad esempio può essere effettuata durante le ore non lavorative, le analisi contrassegnate per l'archiviazione vengono memorizzate in un insieme di dati fino al termine dell'archiviazione.

In linea di massima, le operazioni di archiviazione manuale non interferiscono con quelle impostate in automatico. Il sistema gestisce le operazioni in base all'ordine con cui sono state impostate. Un'analisi impostata per l'archiviazione in due lavori separati verrà archiviata unitamente al primo lavoro in coda.

5 Protezione dei dati

Archiviazione e ripristino

Create Archive Unit
Archive Unit
Path is relative to: C:\archive on Server: CSSERVER
Path: study1AFZ
File: batch0e3
Delete runs after archiving
Comment:
My Ar
Schedule
 now (wake up interval is 15 min.)
C for: Day:
Reenter your password:
Archive <u>C</u> ancel <u>H</u> elp

Figura 61 Pannello Create Archive Unit

Unità di archiviazione

Le analisi archiviate vengono memorizzate come *unità di archiviazione*; un'unità di archiviazione contiene tutte le versioni delle analisi specificate e viene creata automaticamente o manualmente, come descritto in precedenza. Quando si imposta l'unità di archiviazione, si specifica un nome file e un percorso ed eventualmente si aggiunge una descrizione. Questi dati potranno essere utilizzati insieme per la ricerca di una specifica unità di archiviazione. Quando ChemStore C/S crea un'unità di archiviazione, allega un identificativo di archivio creato dal sistema ed un file di catalogo in formato XML che descrive il contenuto dell'unità di archiviazione binaria. Il nome del file corrisponde al nome dell'unità di archiviazione con estensione XML. La Figura 62 a pagina 141 mostra un esempio di file di catalogo XML.



Figura 62 Esempio di file di catalogo XML

Per una gestione avanzata dell'archivio, ad esempio in un sistema per la gestione di documenti esterno (DMS), questo file di catalogo può essere utilizzato per le realizzazione di indici.

L'archiviazione è protetta tramite autorizzazione utente e password. La finestra Archive/Delete e il menu 'Automated archives' sono disponibili solo per utenti con le autorizzazioni di accesso necessarie. Per inviare un lavoro di archiviazione, l'utente deve immettere un nome utente ed una password.

Eliminazione delle analisi

Se Security Pack non è installato, è possibile eliminare le analisi senza archiviarle. È possibile contrassegnare le analisi per l'eliminazione nella finestra Delete della versione di ChemStore C/S per computer singoli e nella finestra Archive/Delete della versione client/server. La protezione dei dati è garantita dal fatto che solo gli utenti con le autorizzazioni richieste possono effettuare questa operazione ed è necessaria una conferma protetta da password per l'eliminazione delle analisi. Vedere "Impostazione e gestione degli utenti" a pagina 127.

Nella versione client/server, è anche possibile eliminare automaticamente le analisi dal database dopo l'archiviazione.

AVVERTENZA

Le analisi eliminate vengono rimosse dal database e non possono essere recuperate. Accertarsi di eliminare solo le analisi già archiviate o non più necessarie.

Riapertura delle analisi

Le analisi archiviate ma non eliminate continuano a essere presenti nel database, ma sono bloccate e non possono essere modificate. Per riaprire le analisi archiviate selezionarle per la riapertura dall'elenco analisi nel riquadro sinistro della finestra Archive/Delete e fare clic sull'icona Reopen descritta alla pagina precedente.

Come l'archiviazione, la riapertura è disponibile solo per gli utenti che dispongono dell'autorizzazione appropriata.

Ripristino delle analisi

Le analisi archiviate ed eliminate non sono più presenti nel database. Per accedere alle analisi archiviate ed eliminate è necessario ripristinarle, ossia copiarle nuovamente nel database e riaprirle.

È possibile ripristinare un'intera unità di archiviazione o selezionare una o più analisi all'interno di un'unità. Per selezionare un'unità di archiviazione per il ripristino, si utilizza Archive History in cui sono visualizzate tutte le unità di archiviazione in ordine cronologico di creazione. Poiché nel database possono essere presenti molte unità di archiviazione e può essere difficile trovare quella che contiene l'analisi o le analisi richieste, è disponibile uno strumento di ricerca che consente di trovare l'unità di archiviazione richiesta all'interno dell'elenco.
È possibile specificare che il ripristino, come l'archiviazione, inizi immediatamente (entro l'intervallo di riattivazione del server), oppure è possibile posticiparlo a un momento successivo. Tramite il ripristino tutte le versioni dell'analisi selezionata contenute nell'archivio vengono ricopiate nel database.

Questa operazione è protetta tramite autorizzazione, ID utente e password. Solo gli utenti che dispongono dell'autorizzazione richiesta hanno accesso alla finestra Archive/Delete, inoltre per poter avviare il processo di ripristino è necessario immettere l'ID e la password utente.

Interfaccia di archiviazione XLM generica

È inoltre possibile aggiungere al server ChemStore C/S un'interfaccia di archiviazione opzionale generica basata su XLM e in tal modo implementare un collegamento a sistemi esterni di gestione dell'archivio (DMS, HSM, ecc.). L'interfaccia di archiviazione viene installata dalla directory \G1410a\ archiver_interface sul CD-ROM ChemStation Plus. Per informazioni dettagliate sull'installazione, consultare il file readme.txt.

Se installata, ChemStore C/S notifica all'interfaccia di archiviazione basata su XLM ogni volta che viene creata un'unità di archiviazione. Il nome e la posizione dell'unità di archiviazione ed il corrispondente file XLM vengono passati al plug-in predefinito. A seconda del tipo di plug-in, possono essere avviati diversi tipi di attività, quali il trasferimento dell'unità di archiviazione ad un DMS seguito da un'operazione di cancellazione a livello locale. In seguito alla corretta elaborazione dell'unità di archiviazione, è possibile restituire un messaggio di notifica, contenente un identificativo esterno relativo alla posizione di memorizzazione, all'interfaccia di archiviazione basata su XLM, la quale invia questa informazione a ChemStore C/S.

Un requisito indispensabile per l'utilizzo di un'interfaccia di archiviazione generica basata su XLM è lo sviluppo di un plug-in. Agilent fornisce su richiesta un kit di sviluppo con le informazioni necessarie per programmare il plug-in.

Un semplice esempio di plug-in è fornito con l'installazione dell'interfaccia di archiviazione XLM e non richiede ulteriore configurazione. Il plug-in apre una finestra di dialogo che compare sul PC server ogni volta che viene creato un nuovo file. Archiviazione e ripristino



Figura 63 Messaggio creato da un semplice plug-in dell'interfaccia generica di archiviazione basata su XLM

Il messaggio e la funzione del plug-in possono essere cambiati modificando il file AddArchive.cmd nella cartella del plug-in ("C:\Program Files\Agilent Technologies\XML-based Archive Restore\Examples\Simple Plugin").

La Figura 64 riporta una panoramica schematica del flusso di dati con il plug-in, l'estensione potenziale ed un plug-in personalizzato.



Figura 64 Interfaccia di archiviazione XML generica

Il ripristino deve essere effettuato dapprima manualmente riportando il file binario di archiviazione alla posizione precedente, quindi tramite ChemStore con modalità simili a quelle delle precedenti revisioni di ChemStore.

Stato di archiviazione

Ad ogni analisi trasferita dalla ChemStation a ChemStore C/S viene assegnato lo stato di archiviazione *Never Archived*. Quando un'analisi viene selezionata per l'archiviazione ottiene lo stato di archiviazione *Archive Pending* e viene protetta da successive modifiche. Se dopo l'archiviazione si intende procedere all'eliminazione, all'analisi viene assegnato lo stato *Archive Delete Pending*. Questo stato non consente il recupero delle analisi tramite query. Gli stati *Archive Pending* e *Archive Delete Pending* sono validi fino al termine dell'archiviazione, quando lo stato di archiviazione dell'analisi diventa Archived for a completed archive operation. Per le operazioni Archive Delete, le informazioni di archiviazione e di eliminazione sono disponibili solo dall'interfaccia dell'unità di archiviazione nell'applicazione Admin Client.

NOTA

Lo stato di archiviazione non viene aggiornato automaticamente, è necessario aggiornarlo effettuando un'altra query sulle analisi desiderate.

Se l'archiviazione non viene effettuata correttamente, ad esempio perché lo spazio di memorizzazione disponibile si esaurisce prima del completamento dell'archivio, all'analisi viene assegnato lo stato *Archive Failed*. In questo caso, l'amministratore dovrà utilizzare l'applicazione Admin Client per risolvere il problema e ripianificare l'archivio.

Un'analisi archiviata ma non eliminata, vale a dire ancora presente nel database, è protetta da qualsiasi modifica, quali variazione dello stato di approvazione o dei valori dei campi personalizzati, finché non viene riaperta. A tale analisi viene quindi assegnato lo stato *Reopened*. Le analisi riaperte possono essere nuovamente archiviate secondo la normale procedura.

Sono disponibili alcune regole per determinare lo stato di un'analisi quando viene ripristinata e reinserita nel database.

Se l'analisi non è più presente nel database, vengono applicate le regole indicate di seguito:

Archiviazione e ripristino

- Se si tenta di ripristinare l'ultima archiviazione, l'analisi viene trasferita al database e contrassegnata come *Dearchived*.
- Se l'analisi è stata archiviata più volte e si tenta di ripristinare un archivio che non è il più recente, l'analisi viene trasferita nel database e contrassegnata come *Read-Only*.

Se l'analisi è presente nel database dopo un processo di eliminazione e di ripristino, vengono applicate le regole indicate di seguito:

- Se si tenta di ripristinare l'archivio più recente, l'analisi viene trasferita al database con lo stato *Dearchived*.
- Se si cerca di ripristinare un archivio precedente all'ultimo, l'analisi viene recuperata e contrassegnata come *Read-only*. Se successivamente si ripristina un archivio recente ma l'ultimo, l'analisi meno recente ripristinata viene sovrascritta e a tutte le analisi viene assegnato lo stato *Read-only*. L'applicazione non consente il ripristino di versioni meno recenti rispetto a quelle già ripristinate e la conseguente sovrascrittura delle analisi nel database.

L'applicazione non consente il ripristino o la sovrascrittura di analisi presenti nel database e finora non ripristinate da un'unità di archiviazione.

Un elenco delle analisi sovrascritte o non sovrascritte per l'ultima operazione di ripristino di un'unità di archiviazione è contenuto nella finestra Archive Reports di Admin Client. Queste informazioni sono anche scritte nel file di registro del server.

Le relazioni esistenti tra gli stati di archiviazione sono illustrate nella Figura 65. Per un esempio specifico di come il processo di archiviazione e di ripristino incida sullo stato dell'analisi, vedere anche "Esempio di processo di archiviazione e di recupero" in questa sezione.



Figura 65 Relazioni tra gli stati di archiviazione

Revisione dello stato di archiviazione e rapporti

La pianificazione delle archiviazioni e dei ripristini in sospeso è visualizzabile nel menu Review nella parte superiore del pannello principale della finestra Archive/Dolete (vedere la Figura 60 a pagina 138). Dallo stesso menu è possibile rivedere la cronologia di un archivio e valutare il motivo per cui un'operazione di archiviazione o di ripristino non è riuscita.

Gli archivi automatizzati non vengono elencati nel programma degli archivi in sospeso perché le query di archivio automatiche vengono eseguite direttamente alla data ed all'ora specificate.

Anche dal pannello Admin Client è possibile visualizzare la pianificazione e la cronologia dell'archivio. Qualsiasi utente può accedere a questi rapporti da Admin Client senza immettere una password. In Admin Client è anche possibile visualizzare i rapporti indicati di seguito:

- Unità di archiviazione
- Analisi in un'unità di archiviazione
- Analisi da eliminare
- Itinerario di controllo
- Informazioni per un oggetto
- · Percorso base, intervallo di ripristino ed intervallo di time-out
- Tabella spool/download attivo

Esempio di processo di archiviazione e di ripristino

Un esempio può essere utile per chiarire maggiormente il processo di archiviazione e di ripristino.

Esempio Nel seguente esempio sono riportate due figure: la Figura 66 a pagina 148 rappresenta le fasi del processo di archiviazione di un'analisi in diverse unità di archiviazione, mentre la Figura 67 a pagina 149 è un esempio di processo di ripristino di un'analisi non più contenuta nel database, basato sulla Figura 66.



Figura 66 Esempio di processo di archiviazione

ID unità di
archiviazione
ID1 (12/3)
ID2 (12/7)
ID3 (12/11)
-



5 Protezione dei dati

Gestione delle operazioni di archiviazione e di ripristino in Admin Client

Gestione delle operazioni di archiviazione e di ripristino in Admin Client

Gli amministratori possono eseguire determinate operazioni di impostazione in ChemStore C/S Admin Client prima che gli utenti con le autorizzazioni appropriate possano archiviare o ripristinare determinate analisi. ChemStore C/S Admin Client è un'applicazione basata sul Web che può essere utilizzata da qualsiasi PC collegato alla rete per gestire agevolmente le funzioni di archiviazione e di ripristino e altri processi server. Admin Client comunica con il server di archiviazione che viene eseguito come servizio NT sul computer server. Si accede ad Admin Client tramite un browser Web. Admin Client consente di eseguire le seguenti operazioni:

- pianificare le operazioni di archiviazione, di ripristino e di eliminazione;
- modificare le operazioni pianificate;
- visualizzare rapporti contenenti dettagli sulle operazioni in sospeso;
- rivedere la cronologia di archiviazione e di ripristino;
- visualizzare informazioni relative ad archivi, analisi e altri oggetti;
- eseguire immediatamente operazioni di archiviazione, ripristino ed eliminazione;
- impostare i parametri operativi del server, ad esempio l'intervallo di riattivazione;
- connettere a Oracle il server di archiviazione;
- aggiungere e modificare le informazioni di connessione al database.

Per ulteriori informazioni sull'utilizzo di queste funzioni amministrative, consultare la Guida in linea di Admin Client.

Per informazioni dettagliate sui concetti relativi alle operazioni di archiviazione e di ripristino con il software ChemStore C/S, consultare la sezione "Archiviazione e ripristino" a pagina 134.

Informazioni generali sul processo di archiviazione e di eliminazione

Admin Client consente di gestire il processo di archiviazione sul server. Di seguito sono riportate le operazioni relative all'archiviazione e all'eliminazione di un'analisi.

- 1 Una funzione di ChemStore C/S consente di specificare quali analisi del database archiviare e di impostare l'ora in cui archiviarle. Queste analisi sono spostate in tabelle Archive utilizzate esclusivamente dal server di archiviazione. L'operazione e l'ora pianificata vengono inserite nella tabella Schedule.
- **2** Alla riattivazione del server, la tabella Schedule viene controllata per determinare se sono presenti richieste di archiviazione in sospeso. In caso ne siano presenti, ne viene controllata l'integrità; ad esempio le analisi possono essere archiviate solo in determinati stati.
- **3** Se un'analisi viene ritenuta valida per l'archiviazione, i dati relativi vengono scritti in un file binario nella directory specificata dalla variabile del percorso di base. Oltre ai dati dell'analisi, vengono scritti nel file di archivio anche tutti i dati relativi agli oggetti correlati, quali metodo e dati non elaborati. In caso si verifichi un errore durante questa fase del processo, l'archiviazione viene contrassegnata come "Failed" nelle tabelle Archive e viene eliminata dalla tabella Schedule.
- **4** Una volta terminata la scrittura dei dati nel file binario, le analisi archiviate vengono contrassegnate per l'eliminazione dal database, in caso l'archiviazione includa il flag AutoDel impostato su TRUE.
- **5** L'operazione di eliminazione viene eseguita automaticamente dopo ogni archiviazione riuscita. Gli amministratori possono utilizzare in qualsiasi momento ChemStore C/S Admin Client per pianificare manualmente un'operazione di eliminazione di un'analisi.
- **6** Nel corso dell'eliminazione, vengono eliminate tutte le analisi contrassegnate per l'eliminazione durante l'archiviazione o manualmente da ChemStore C/S.

5

Gestione delle operazioni di archiviazione e di ripristino in Admin Client

Analisi delle operazioni di archiviazione e di ripristino in Admin Client

Le operazioni elencate all'inizio di questa sezione sono suddivise in cinque gruppi. Si tratta di rapporti di archiviazione, operazioni di archiviazione, controllo del server, opzioni di configurazione globale e funzioni di test. Gli amministratori devono accedere ad Admin Client con un nome utente e una password che consentano di eseguire operazioni di archiviazione, di controllo del server o di test. Qualsiasi utente con accesso alla rete può visualizzare i rapporti di archiviazione senza accedere ad Admin Client.

Alle operazioni incluse in questi gruppi si accede tramite la pagina Web principale di Admin Client.

e <u>E</u> dit <u>V</u> iew <u>G</u> o	Favorites	Help											
← . → .	(X) Shan	(d) Refresh	<u>a</u>	Q	B auaritaa	()	Spannaka						
ress 🔊 http://howbm0	60/ChemSto	r/HPCSAdr	nin.htm	Jedicii	1 4401465	Thistory	Citatilies	T discreen	mai	THIR	LOK		-
			(Chem	Sto	re C	'/S A	dmi	n Cl	ient			
							Help						
Server Connection -							_						
ChemStore Alias: hpc	s												
Clients Connected: 1													
ictive Clients: A													
ania Unan													
.ogin User:													
-	Login	Refi	resh	Users									
ubius Danauta	lou unto												
crive Reports	Select R	epon to vi	8W - >										
chive Tasks	Select Ta	ask to Per	form ->				•						
							-						
arver Control	Select S	erver Con	trol Comn	nand ->			•						
lobal Config	Select C	onfig Con	nmand ->				•						
							-						
est	Selectite	stcomma	and ->				*						
essage													
						_							

Figura 68 Pagina Web principale di Admin Client

Gestione delle operazioni di archiviazione e di ripristino in Admin Client

Dopo essersi connessi alla pagina Web principale di Admin Client, è possibile accedere alle operazioni consentite dalle autorizzazioni di cui si dispone. La maggior parte delle finestre e dei rapporti presenta il seguente formato:

Arch	👹 Archive Server History Report (double click on '+' to view)							×	
Index	Ar ID	Status	Date	Ar User	Sh User	Op User	Description	ErrNum	Message
17		Run Delete Failed	November 18, 1998 15:39		admin	Ar Server			+
16		Run Delete Failed	November 18, 1998 15:39		admin	Ar Server			+
15		Run Deleter Ran	November 18, 1998 13:58		admin	Ar Server			+
14	1507	Archived	November 18, 1998 13:58	admin	admin	Ar Server	+		
13	1504	Dearchived	November 18, 1998 13:43	admin	admin	Ar Server	+		+
12		Run Deleter Ran	November 18, 1998 13:43		admin	Ar Server			+
11	1506	Archived	November 18, 1998 13:43	admin	admin	Ar Server	+		
10		Run Deleter Ran	November 18, 1998 11:48		admin	Ar Server			+
9	1505	Archived	November 18, 1998 11:48	admin	admin	Ar Server			
8		Run Deleter Ran	November 18, 1998 11:48		admin	Ar Server			+
7	1504	Archived	November 18, 1998 11:47	admin	admin	Ar Server	+		
6	1502	Dearchived	November 18, 1998 10:09	admin	admin	Ar Server	+		+
5	1501	Dearchived	November 18, 1998 10:09	admin	admin	Ar Server	+		+
4		Run Deleter Ran	November 18, 1998 09:39		admin	Ar Server			+
3	1502	Archived	November 18, 1998 09:39	admin	admin	Ar Server	+		
2		Run Deleter Ran	November 18, 1998 09:39		admin	Ar Server			+
1	1501	Archived	November 18, 1998 09:39	admin	admin	Ar Server	+		
			Close						

Figura 69 Rapporto cronologico Archive Server

5 Protezione dei dati

Itinerario di controllo (Audit Trail)

Itinerario di controllo (Audit Trail)

L'itinerario di controllo (Audit Trail) tiene traccia di tutte le modifiche apportate a un'analisi. Ogni campione dispone di un itinerario di controllo mantenuto separato dai dati del campione. L'itinerario di controllo non viene archiviato con l'analisi, pertanto è possibile aggiungervi attività di archiviazione e di ripristino; il collegamento all'itinerario di controllo è mantenuto anche quando l'analisi viene archiviata. Le attività che implicano la creazione di una voce nell'itinerario di controllo sono:

- modifica dei valori dei campi personalizzati;
- modifica dello stato di approvazione;
- modifiche al nome del campione;
- modifica dello stato di rielaborazione;
- aggiunta o eliminazione da un batch;
- modifica dello stato di archiviazione.

È possibile visualizzare l'itinerario di controllo di qualsiasi analisi; esso contiene una tabella di riepilogo di tutte modifiche apportate all'analisi, degli autori di tali modifiche e della data e ora relativa. Vedere la Figura 70 a pagina 155. Sono inoltre disponibili pulsanti che consentono di visualizzare informazioni aggiuntive sulle modifiche dei campi personalizzati e dello stato di archiviazione.

ersion	Reason for entry	Status	Modified by	Modified at	Processed
	New	Approval Pending	Administrator	11/22/1999 20:02:34	11/22/1999 20:02:34
	New	Approval Pending	cork group	11/17/1999 17:47:32	11/17/1999 17:47:32
	New	Approval Pending	christoph	11/17/1999 17:25:22	11/17/1999 17:25:22
	Status Changed	Approved	WWINTER ora	09/20/1999 16:59:29	08/23/1999 18:08:17
	New	Approval Pending	christoph	08/23/1999 18:08:17	08/23/1999 18:08:17
	Status Changed	Approved	WWINTER ora	09/20/1999 16:58:11	07/28/1999 11:22:17
	Edit Custom Field	Approval Pending	christoph	09/20/1999 16:53:02	07/28/1999 11:22:17
	New	Approval Pending	christoph	07/28/1999 11:22:17	07/28/1999 11:22:17
	Status Changed	Rejected	WWINTER ora	09/20/1999 17:00:16	07/16/1999 16:14:32
	New	Approval Pending	christoph	07/16/1999 16:14:32	07/16/1999 16:14:32
	Status Changed	Rejected	WWINTER ora	09/20/1999 17:00:20	07/14/1999 16:49:37
	New	Approval Pending	Administrator	07/14/1999 16:49:37	07/14/1999 16:49:37
mment	for selected entry:				
ocesse	d on Instrument 1, HP	√BM187			

Figura 70 Itinerario di controllo (Audit Trail)

5 Protezione dei dati

Notifica tramite e-mail

Notifica tramite e-mail

La funzione descritta di seguito è disponibile unicamente per sistemi client/server e prevede l'invio automatico di una notificatramite e-mail in caso di eventi e necessità specifiche che vengono impostate dall'amministratore di sistema da un altro utente con le autorizzazioni dell'amministratore. Gli eventi che attivano la notifica automatica via e-mail sono:

- blocco di un account utente dopo un numero eccessivo di tentativi di accesso non andati a buon fine;
- invio di un batch per la revisione;
- cancellazione di una password;
- creazione di un nuovo utente;
- modifica delle autorizzazioni.

Ad eccezione del tipo 'notification of batch submission', le notifiche tramite e-mail devono essere inviate agli amministratori in modo da consentire la rilevazione delle violazioni del sistema di sicurezza. Per l'uso della funzione di notifica tramite e-mail è necessario disporre di un server e-mail funzionante. Il messaggio può essere inviato in due modi:

• da un SMTP anonimo a un server di posta.

In questo caso, il server di posta deve essere configurato per consentire l'accesso SMTP anonimo. Per maggiore sicurezza, il server di posta può aggiungere l'indirizzo IP del server di database ChemStore al proprio elenco degli indirizzi attendibili e autorizzare solo SMTP anonimi provenienti da server attendibili.

• Uso di LDAP

A questo scopo può essere utilizzato il server virtuale SMTP del server Windows 2000, che supporta funzionalità LDAP. La notifica tramite e-mail viene quindi inviata al server di posta grazie a LDAP. È tuttavia necessario disporre di un account esistente sul server di posta utilizzato per l'invio del messaggio; è da tale account che verrà originato il messaggio.

E-Mail Notification Setup
[Mail server setup]
Mailhost: dbserver Port: 25
Sender: ChemStoreServer@company.com
Account Locked Created batch Cleared password Created new user Modified permissions
☑ Enable
To: system_admin@company.com
Subject: Account Locked
User Text: Account of the user above has been locked. Please take appropriate action.
Send test mail
OK Cancel Help

Figura 71 Finestra di dialogo E-Mail Notification Setup

La finestra di dialogo E-Mail Notification Setup riportata nella Figura 71 contiene impostazioni per i collegamenti del server di posta e gli indirizzi e-mail dei destinatari della notifica. È possibile modificare un argomento predefinito, ad esempio "Account locked", nonché aggiungere testo.

Il messaggio di notifica tramite e-mail contiene la data e l'ora di inizio del messaggio, l'ID utente dell'interessato, le informazioni sul client ChemStore ed il testo aggiuntivo specificato durante l'impostazione.

Una funzione di prova consente di verificare la corretta impostazione di questa funzione.

5 Protezione dei dati

Notifica tramite e-mail

ΝΟΤΑ	Formati di indirizzo e-mail validi:	
	a) nomeutente@nome.dominio	e.s.: jim.sample@company.com
	b) testo <nomeutente@nome.dominio></nomeutente@nome.dominio>	e.s.: Jim Sample <jim.sample@company.com></jim.sample@company.com>
	b) "testo" <nomeutente@nome.dominio></nomeutente@nome.dominio>	es.: "Jim Sample" <jim.sample@company.com></jim.sample@company.com>
	Separare più indirizzi e-mail con un punto	e virgola (;).

Registro del database

Tutte le interazioni che influiscono sulla protezione del database e dell'applicazione vengono immesse in un registro. Le voci del registro possono essere visualizzate in una tabella. Utilizzare una query per visualizzare solo le voci che soddisfano i criteri selezionati. Le operazioni che implicano la creazione di una voce di registro sono:

- impostazioni utente (creazione di un nuovo utente, modifica di autorizzazioni, modifica della password, cancellazione della password, disattivazione dell'utente, riattivazione dell'utente, modifica del nome visualizzato dell'utente);
- modifica dello stato dell'analisi (approvazione di analisi, rifiuto di analisi, riapertura di analisi, cancellazione da richiesta batch;
- cancellazione di attività dello spooler, modifica di campi personalizzati);
- archiviazione e manutenzione del database (archiviazione di analisi, ripristino di analisi, archiviazione di analisi con eliminazione, modifica dell'archivio, modifica dell'archivio con eliminazione, eliminazione di analisi, migrazione di dati, aggiornamento dello schema del database);
- calcoli (creazione del modello di calcolo, creazione della nuova versione del modello di calcolo);

La tabella del registro viene visualizzata con la voce più recente per prima e può essere stampata.

Validazione e protezione dei file stampati

Per supportare l'esportazione dei risultati ai sistemi LIMS, ChemStore C/S consente di stampare rapporti su file in formato xml o csv. Questi formati sono semplici file di testo facilmente modificabili. Per risolvere questo problema, ChemStore C/S contiene un hook di validazione che può essere utilizzato per assicurare che i file del rapporto non vengano modificati.

Validazione di file durante l'operazione

Una volta completata la scrittura nel file di testo, viene richiamata una funzione di protezione del file. ChemStore C/S include una funzione "secure file" che calcola una firma numerica per il file e la memorizza con il file stesso. In qualsiasi momento, la firma numerica potrà essere ricalcolata e confrontata con il valore memorizzato; una differenza tra le due firme indica che il file è stato modificato.

Per verificare automaticamente l'identità dei file di rapporto esportati a fronte dei dati originali, è possibile utilizzare un file batch di validazione per calcolare la checksum. Il file batch c:\hpchem\chemstor\validatefile.bat richiama hpexfs.exe e visualizza un messaggio di errore se i codici di protezione non corrispondono.

NOTA

Quando hpexfs00.exe è installato su un computer su cui non è installato ChemStore C/S, è necessario installare e registrare manualmente i file hpcsfs00.dll e msvbwm50.dll. Hpcsfs00.dll e hpexfs00.exe vengono eseguiti sui sistemi operativi Microsoft Windows e non in UNIX.

Funzioni di validazione dei file

Un file DLL (hpcsfs00.dll) implementa tre funzioni:

SecureFile(filepath) Questa funzione consente di proteggere il file specificato. Calcola una "firma" del file e la inserisce nel file. La firma è il valore hash, un valore di 24 caratteri basato sull'algoritmo RSA Data Security, Inc. MD5 Message Digest.

ValidateFile(filepath, key) Questa funzione ricalcola la firma del file e la confronta con la firma registrata da SecureFile(). Se le firme non corrispondono o il file non presenta alcuna firma, il file è stato modificato e viene riportato un codice di errore. Il parametro *key* non viene utilizzato nell'implementazione corrente.

UnsecureFile(filepath, key, newpath) Questa funzione ricava dal file la firma e scrive una nuova versione del file in *newpath*. Il parametro *key* non viene utilizzato nell'implementazione corrente.

Sostituzione dello schema di protezione incorporato con una soluzione personalizzata

Se è necessaria una protezione maggiore rispetto a quella fornita da ChemStore C/S, è possibile sostituire il file hpcsfs00.dll con il proprio file hpcsfs00.dll.

NOTA

È necessario annullare la registrazione di Agilent hpcsfs00.dll e registrare il nuovo file hpcsfs00.dll tramite regsrv32.

Assicurarsi che il file hpcsfs00.dll fornisca le tre funzioni descritte in questa sezione.

Public Function SecureFile (strFilePath As String, strKey As String) As Long

Restituisce zero se l'operazione riesce, altrimenti restituisce un codice di errore. Questa funzione viene richiamata alla fine della scrittura dei dati nel file di testo. Validazione e protezione dei file stampati

Public Function ValidateFile (strFilePath As String, strKey As String) As Long

Verifica se il file che si trova nel percorso specificato è protetto e non è mai stato alterato.

Restituisce zero se il file risulta protetto e le firme corrispondono, altrimenti restituisce un codice di errore.

Si noti che strKey può essere utilizzato o meno, a seconda dell'implementazione. Non viene utilizzato nell'implementazione predefinita, che convalida un file verificando che presenti una firma corrispondente al contenuto, strKey potrebbe invece essere utilizzato in un'implementazione che protegge il file tramite crittografia.

Public Function UnsecureFile (strFilePath As String, strKey As String) As Long

Annulla la protezione del file che si trova nel percorso specificato.

Restituisce zero se l'operazione riesce, altrimenti restituisce un codice di errore.

Si noti che strKey può essere utilizzato o meno, a seconda dell'implementazione. Non viene utilizzato nell'implementazione predefinita, che annulla la protezione di un file rimuovendo la firma incorporata tra i tag di apertura e di chiusura; lasciando i tag nel file. strKey potrebbe invece essere utilizzato in un'implementazione che protegge il file tramite crittografia.



ChemStore C/S Agilent Guida ai concetti

6

Gestione dei dati

Backup del database 166 Backup con la versione per computer singolo 168 Backup con la versione client/server 172 Manutenzione del computer ChemStation 173 Piano di ripristino di emergenza 176



Agilent Technologies

6 Gestione dei dati Backup del database

Backup del database

Per la protezione dei dati è assolutamente necessario definire un'adeguata strategia di backup, effettuando il backup dei file di dati ad intervalli regolari e archiviando e cancellando dal disco i dati non più necessari in linea, al fine di liberare spazio prezioso sul disco rigido del computer.

Tramite il processo di backup si copiano i file del database e qualsiasi altro file si desideri conservare, dal disco rigido del computer a un altro supporto, in genere un CD-ROM registrabile o un nastro magnetico. È consigliabile eseguire il backup di tutte le informazioni importanti memorizzate su qualsiasi computer. Il processo di backup deve essere eseguito con la frequenza appropriata per proteggere i dati più importanti: generalmente il backup completo del database viene eseguito con cadenza settimanale, tuttavia, in caso di produzione elevata di campioni, può essere opportuno eseguire il backup quotidianamente.

La versione autonoma del database è un file MS Access; è possibile utilizzare qualsiasi programma di backup disponibile per copiare il contenuto della cartella hpchem/database su un altro supporto.

Il database client/server è un database Oracle; per eseguire un backup completo, è necessario arrestare l'istanza del database.

NOTA

Poiché sia nella versione per computer singolo che nella versione client/server del prodotto non si deve accedere al database durante un processo di backup, è importante pianificare questa importante operazione di manutenzione durante i periodi di inattività.

Backup o archiviazione

A differenza dell'archiviazione (vedere il Capitolo 5, "Protezione dei dati") il backup interessa l'intero insieme di dati. In caso di errore del sistema, è possibile ripristinare nel sistema il database completo dopo la riparazione.

L'archiviazione consente di trasferire singoli record dal database a un'unità di archiviazione, separata dal database. I record trasferiti possono essere eliminati dal database dopo l'archiviazione. L'archiviazione è disponibile solo con la versione client/server di ChemStore C/S.

AVVERTENZA

È importante tenere presente che gli archivi creati con ChemStore C/S possono essere ripristinati solo nel database da cui sono stati creati, pertanto il backup dell'intero database è essenziale.

Un backup del database consente di ripristinare l'intero database, comprese le unità di archiviazione, in caso di errore del sistema. Viceversa, non è possibile ripristinare il database dalle unità di archiviazione. Per questa ragione, è essenziale eseguire regolarmente il backup del database.

6 Gestione dei dati

Backup con la versione per computer singolo

Backup con la versione per computer singolo

La versione del database per computer singolo è un file MS Access; è possibile utilizzare qualsiasi programma di backup disponibile per copiare su un altro supporto il contenuto della cartella del database. Il software di backup e di ripristino viene spesso fornito con periferiche di backup quali unità CD-ROM scrivibili o unità a nastro magnetico.

AVVERTENZA

È importante che il client di ChemStore C/S e la ChemStation non siano in esecuzione durante il processo di backup, poiché quest'ultimo richiede accesso esclusivo ai file.

NOTA

Quando si ripristina un database da un CD-ROM, è necessario rimuovere l'attributo di file sola lettura del file copiato dal CD-ROM al disco. A tal fine, fare clic con il pulsante destro del mouse sul file dopo averlo ripristinato, selezionare "Properties" dal menu di scelta rapida e deselezionare la casella di controllo Read-only.

È disponibile un'utilità per riparare i database MS Access danneggiati. Questa utilità è un'applicazione per computer singolo eseguibile dal gruppo ChemStore C/S del menu Programs. L'utilità contiene anche le funzioni per la compressione di un database MS Access. È opportuno comprimere regolarmente il database, in particolare se si sono modificate o eliminate analisi. È anche possibile utilizzare la utility per creare un nuovo database vuoto in cui includere le impostazioni (query, filtri, impostazioni utente e modelli di rapporto) di un database esistente.

Se il database è irrimediabilmente danneggiato, eliminare dal disco rigido del computer i file danneggiati prima di ripristinare i file del database dal backup più recente. È inoltre consigliabile ottimizzare il disco rigido dopo l'eliminazione dei file danneggiati prima di ripristinare i file del database utilizzando, ad esempio, lo strumento di deframmentazione fornito con il software del sistema operativo. Ciò garantisce che qualsiasi danno fisico alla superficie del disco rigido venga identificato ed escluso e che il disco risulti ottimizzato per quanto riguarda spazio di memorizzazione e velocità.

Backup con Windows 2000/XP

In Windows 2000 e Windows XP sono disponibili programmi di backup che supportano molte periferiche a nastro standard. L'utilità di backup fornita con il sistema operativo consente anche il backup di un solo file che può quindi essere inserito su un supporto non in linea. Entrambe le utilità consentono il backup del Registro di Windows e dei dati.

Automazione e pianificazione di backup con Windows NT/2000

Windows consente di eseguire processi di backup automatici e pianificati tramite l'utilizzo di file batch e del servizio Scheduler.

Per configurare il servizio Scheduler in modo che venga avviato ogni volta automaticamente, scegliere **Start** e **Run**. Sulla riga di comando digitare ntbackup.

Utilizzare la wizard del backup per specificare i processi di backup ricorrenti e i dati da copiare. Per ulteriori informazioni, fare riferimento alla Guida in linea dello strumento Backup.

AVVERTENZA

Non effettuare mai un backup su un sistema per computer singolo mentre il client di revisione è aperto. In caso contrario, il file di backup non risulterà adatto per il ripristino del database.

Non eseguire mai un backup durante l'acquisizione di dati, poiché questa operazione comprometterebbe le prestazioni del disco rigido e la velocità di scrittura dei dati acquisiti potrebbe non essere sufficiente, causando un messaggio di interruzione di alimentazione o di sovraccarico del buffer nel registro dello strumento, nonché la possibile perdita di dati.

6 Gestione dei dati

Backup con la versione per computer singolo

Unità a nastro

Le unità a nastro sono le più comuni periferiche di backup attualmente disponibili. Le unità più semplici leggono e scrivono su nastri Travan o su nastri standard meno recenti quali le cartucce QIC-3020, QIC-3010, QIC-80, TR-3 e TR-1, unendo il ridotto costo hardware iniziale a prestazioni accettabili, fino a 70 MB/min. In un nastro Travan è possibile memorizzare oltre 2 GB di dati, sufficienti a contenere il backup del database MS Access. Le unità a nastro Travan possono essere collegate alla porta IDE interna o alla porta parallela esterna e non richiedono hardware aggiuntivo, oltre al driver e ai nastri. Tuttavia, a causa delle prestazioni ridotte delle unità Travan non se ne consiglia l'utilizzo per backup del server.

I nastri DAT, in genere collegati alla porta SCSI, offrono capacità di memorizzazione superiori e velocità di trasferimento più elevate rispetto ai nastri Travan. Sono inoltre più affidabili se usati con frequenza. Richiedono l'installazione di un adattatore SCSI e sono in genere disponibili sia in versione interna che esterna. I nastri DAT costituiscono un supporto economico per il backup di sistemi server di dimensioni ridotte o di database autonomi di grandi dimensioni.

Le unità a nastro DLT, anche queste in genere collegate alla porta SCSI, offrono una velocità di backup e una capacità di memorizzazione da 2 a 4 volte superiori rispetto alle unità a nastro DAT. Queste unità sono consigliate per il backup di database Oracle nella versione Client/Server del prodotto.

CD-ROM

I sistemi CD-R (CD-registrabili) consentono di registrare fino a 700 MB di dati su un singolo disco CD-R. Il lettore/registratore di CD viene in genere collegato all'interfaccia IDE del PC. I supporti CD-R sono caratterizzati da una durata molto lunga, ottimale per l'archiviazione. I dischi CD-R possono essere letti da altri computer dotati di unità CD-ROM e software appropriati.

Se si prevede di utilizzare dischi CD-R per il backup di database MS Access autonomi, è necessario mantenere le dimensioni dei database al di sotto dei 700 MB. La cartella G2181 del CD di installazione contiene un'impostazione di un servizio NT che può essere installato per il monitoraggio automatico delle dimensioni del database.

AVVERTENZA

Non eseguire mai un backup con un'utilità basata su Windows durante l'acquisizione di dati da parte della ChemStation. Questa operazione può causare incoerenze nella struttura dei file memorizzata sul supporto di backup. Backup con la versione client/server

Backup con la versione client/server

Il backup e il ripristino del database del server ChemStore C/S vengono eseguiti con gli strumenti Oracle. Fare riferimento alla documentazione Oracle relativa.

NOTA

È consigliabile eseguire questa operazione con la supervisione di un esperto Oracle.

Tipi di backup Oracle

Due sono i tipi di backup eseguibili sui database Oracle: backup a freddo e backup a caldo. I backup a freddo si eseguono quando l'istanza del database non è in esecuzione, mentre i backup a caldo possono essere eseguiti quando il database è in uso. Per un esempio di processo di backup a freddo e di ripristino, consultare la Guida all'installazione di ChemStore, sezione "Administration Tasks and Reference Information".

Backup a freddo

Un backup a freddo è un semplice backup dei file che compongono un database Oracle. Per eseguire un backup a freddo, è necessario arrestare l'istanza del database e disconnettere tutti gli utenti in modo che il database possa bloccare i file per uso esclusivo. Il mancato arresto dell'istanza del database prima del backup può causare backup incompleti e/o un database non coerente. In entrambe le condizioni, il set di backup non potrà essere ripristinato per produrre un database funzionante.

Backup a caldo

Un backup a caldo si esegue mentre il database è in modalità registro di archiviazione e può essere eseguito senza arrestare l'istanza del database. Tuttavia, poiché l'applicazione ChemStore C/S utilizza record di dati binari di grandi dimensioni, è sconsigliabile eseguire il database in modalità registro di archiviazione in quanto ne riduce notevolmente le prestazioni. In genere si consiglia di eseguire solo backup a freddo, a meno che il sistema non sia stato ottimizzato per l'esecuzione costante in modalità registro di archiviazione.

Manutenzione del computer ChemStation

Per garantire il corretto funzionamento di qualsiasi sistema, occorre eseguire una manutenzione regolare.

Questa sezione descrive le operazioni di manutenzione da effetture su base regolare. Queste operazioni comprendono la pulizia di file temporanei inutilizzati, il controllo dell'integrità della struttura fisica e logica del file system, l'individuazione di eventuali virus e l'effettuazione di backup ad intervalli regolari.

Eliminazione dei file temporanei residui

È possibile che si accumulino file temporanei nella directory specificata dalla variabile di ambiente TEMP. Questi file vengono in genere creati quando Windows viene terminato in modo improprio, ad esempio quando si spegne il computer senza prima chiudere Windows. I file temporanei di Windows sono denominati ~XXXXXX.TMP, dove XXXXXX sono i caratteri e i numeri prodotti dal programma che li ha creati. Per recuperare lo spazio temporaneo, è opportuno eliminare questi file dopo aver chiuso tutte le applicazioni attive.

Per determinare la directory utilizzata dai file temporanei, digitare SET al prompt dei comandi. In questo modo, si richiamano le impostazioni correnti di tutte le variabili di ambiente di sistema e utente.

Manutenzione del file system del PC

Analisi e riparazione dei volumi NTFS

Utilizzare la utility CHKDSK di Windows dal prompt dei comandi per sottoporre a scansione e riparare i volumi NTFS. Questo programma include tutte le funzionalità delle utility MS DOS Chkdsk e Scandisk e l'analisi della superficie. Per eseguire la scansione della superficie, utilizzare **CHKDSK** /**R**. È anche possibile eseguire la verifica del disco selezionando la scheda Tools dalla finestra Properties dell'unità disco. Manutenzione del computer ChemStation

In Windows XP e Windows 2000 è possibile eseguire una routine di verifica automatica ad ogni avvio. Se durante questa routine viene rilevato un errore di uniformità del volume, viene automaticamente eseguito il comando **CHKDSK** /**F** per la correzione dell'errore. In caso non sia possibile eseguire il comando **CHKDSK** /**F**, ad esempio perché si desidera eseguirlo sulla partizione di avvio o perché un utente è connesso alla partizione dalla rete, questa operazione viene posticipata al successivo riavvio del sistema.

Utilizzo della compressione sulle partizioni NTFS

Poiché l'utilizzo della funzione di compressione di Windows può causare un calo delle prestazioni, è consigliabile utilizzarla per i sistemi ChemStation Plus. I dati ChemStation sono già compressi nel formato originale, pertanto la compressione del disco non consente in genere un risparmio di spazio considerevole.

Utilizzo della crittografia in Windows 2000 ed XP

Poiché la funzione di crittografia di Windows causa ka diminuzione delle prestazioni e il rischio di perdita dell'accesso ai dati, questa funzione è consigliata per i sistemi ChemStation Plus. I dati ChemStation presentano in genere dimensioni elevate e sono memorizzati in file binari protetti da checksum, pertanto la crittografia non è necessaria e compromette le prestazioni del sistema.

Funzionamento continuo

In caso sia richiesto un funzionamento di routine continuo del sistema ChemStation Plus, per giorni o settimane senza riavvio del sistema client, è possibile che con il tempo le prestazioni subiscano un calo a causa della mancanza di memoria e di risorse. Per risolvere il problema, è consigliabile installare i Service Pack man mano che diventano disponibili e supportati da Agilent. I Service Pack del sistema operativo sono disponibili dalla Home Page di Microsoft.

È inoltre consigliabile deframmentare regolarmente il disco rigido, almeno una volta alla settimana.

Deframmentazione di un volume NTFS

Rispetto a quella di un file system FAT, la frammentazione dei file su un volume NTFS è notevolmente ridotta. In un volume NTFS si verifica frammentazione sono se un file aumenta di dimensioni dopo che è stato memorizzato sull'unità. Pertanto, se si esegue il backup su nastro di un volume e successivamente lo si ripristina dal nastro, il volume risultante non sarà frammentato.

Windows 2000 Professional ed XP non comprendono utilità semplici per tale operazione. Sono disponibili programmi di terzi che permettono di deframmentare volumi di Windows 2000 ed XP. Agilent consiglia di utilizzare Diskeeper di Executive Software (http://www.execsoft.com/).

AVVERTENZA Nor

Non deframmentare l'unità disco rigido durante l'acquisizione di dati.

Per ulteriori informazioni sulla manutenzione e sull'amministrazione del sistema, vedere la Guida all'installazione di ChemStore alla sezione "Administrative Tasks and Reference Information".

Piano di ripristino di emergenza

Piano di ripristino di emergenza

È opportuno formulare un piano di ripristino di emergenza che comprenda copie dell'intero database da proteggere dal blocco totale del sistema quale un problema del disco rigido. Lo scopo del piano di ripristino di emergenza è prevedere le situazioni di errore, quindi individuare e implementare le procedure di ripristino in caso si verifichino tali situazioni. Di seguito sono elencate situazioni comuni di errore.

Errore nell'unità disco rigido

In caso di errore dell'unità disco rigido, è necessario riparare il sistema e ripristinarlo da un backup.

È consigliabile utilizzare per i sistemi server controller RAID dell'hardware con configurazioni del disco ridondanti, in modo che un errore di una sola unità disco non causi un periodo di inattività o la perdita di dati.

Interruzione dell'alimentazione

L'interruzione dell'alimentazione su un sistema di database può danneggiare i dati, a meno che il sistema non possa essere chiuso correttamente. Ciò è particolarmente importante nei sistemi server Oracle, per i quali è richiesta l'installazione di un gruppo di continuità.

Database danneggiato

Il piano di ripristino di emergenza deve includere la frequenza con cui eseguire il backup per poter ripristinare i dati in caso di danneggiamento del database. In questo modo, è possibile recuperare il database dall'ultimo backup.

- 1 Eliminare tutti i file e le directory danneggiate che dovranno essere recuperate dall'ultimo backup.
- 2 Ottimizzare il disco utilizzando un'utilità di deframmentazione valida.
- **3** Ripristinare i dati dal backup.

6 Gestione dei dati

Piano di ripristino di emergenza



ChemStore C/S Agilent Guida ai concetti

7

Calcoli di ChemStore C/S

Calcoli statistici 176 Calcoli mediante i campi personalizzati 196 Calcolo dell'ora 199



Agilent Technologies

Calcoli statistici

Calcoli di un valore singolo

I seguenti calcoli non richiedono coppie di valori.

In tutti i casi, i calcoli sono basati sull'insieme di dati corrente visualizzato nella finestra o nel rapporto di ChemStore C/S, escluse le analisi contrassegnate come Excluded.

Number	Visualizza il numero di valori:
	Number = (n)
Sum	Visualizza la somma dei valori:
	$Sum = (\sum X_i)$
Minimum	Visualizza il valore minimo.
Maximum	Visualizza il valore massimo.
Mean	Visualizza la media aritmetica (somma / numero) di tutti i valori.
	$(\sum X_i)$

$$Mean = \langle x \rangle = \frac{(\sum X_i)}{n}$$

Variance Visualizza il quadrato della deviazione standard.

Variance =
$$s^2 = \frac{\left[\sum (x - \langle x \rangle)^2\right]}{(n-1)}$$
Calcoli di ChemStore C/S 7 Calcoli statistici

Standard	Visualizza la deviazione standard dei valori.		
Deviation	Std. Dev. = s = $\sqrt{(Variance)}$		
Relative	Visualizza la deviazione standard relativa, ossia la devia-		
Standard	zione standard divisa per la media. Quando visualizzata		
Deviation	come valore percentuale, la deviazione standard relativa viene moltiplicata per 100.		
	$\frac{\text{RSD}}{\%} = \left(\frac{\text{s}}{\langle \mathbf{x} \rangle}\right) 100$		

I calcoli supportati per le coppie di valori sono basati sulla regressione lineare ponderata. È necessario specificare parametri aggiuntivi.

Non è necessario specificare i parametri finché non è richiesto un calcolo statistico. I parametri sono:

Curve Type	Determina il tipo di funzione a cui i dati sono adatti. Sono supportati i seguenti tipi: Linear Types: ordine zero (media), primo ordine (lineare), secondo ordine (quadrato), terzo ordine (cubico). Non-linear Types: esponenziale, logaritmico, potenza.
Origin Treatment	 Determina come viene utilizzato il punto di origine (0,0). Sono supportati i seguenti tipi: Ignore: utilizza l'insieme di dati come si presenta, senza trattamenti particolari. Include: aggiunge un punto alle coordinate (0,0) all'insieme di dati corrente. Force: vincola la curva a passare per il punto (0,0).
Weighting	Determina come vengono ponderati i valori nel calcolo, da None, $1/x$, $1/x^2$, $1/y$, $1/y^2$

Modello di regressione lineare

Il modello di regressione utilizzato per i tipi di curva di ordine zero, primo, secondo e terzo varia a seconda che la curva sia vincolata o meno a passare per l'origine:

 $y'_i = a_0 + a_1 x_1 + ... + a_m x_i^m$ (I) origine non vincolata

 $y'_{i} = a_{1}x_{1} + ... + a_{m}x_{i}^{m}$ (II) origine vincolata

dove:

x_i sono i valori x indipendenti

 y_i sono i valori y dipendenti (misurati)

n è il numero di punti dati

m è l'ordine di regressione

 $\mathbf{a}_{\mathbf{o}}...\mathbf{a}_{\mathbf{m}}$ sono i coefficienti di regressione calcolati

 $\mathbf{y'}_i$ sono i valori y calcolati dalla funzione tramite $\mathbf{a}_o \dots \mathbf{a}_m$

NOTA

Se m = 0, deve essere utilizzato il caso (I) e il valore risultante y'_i è la media dei y_i valori.

Matrice della regressione

Gli stessi modelli di regressione possono essere espressi sottoforma di matrice come:

y' = Fa

dove:

 $y' = (y_1'...y_n')^T$ è il vettore colonna dei valori calcolati

 $a = (a_1...a_m)^T$ è il vettore colonna dei coefficienti

e F è una delle matrici rettangolari riportate di seguito, a seconda che la curva sia vincolata o meno a passare per l'origine:

Calcoli di ChemStore C/S 7 Calcoli statistici

$$F = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^m \\ 1 & x_n & x_n^m \end{bmatrix} \text{ caso (I), matrice } \begin{bmatrix} n & x & (m+1) \end{bmatrix} \text{ di valori dipendenti}$$
$$F = \begin{bmatrix} x_1 & x_1^m \\ x_n & x_n^m \end{bmatrix} \text{ caso (II), matrice } \begin{bmatrix} n & x & m \end{bmatrix} \text{ di valori dipendenti}$$

I valori del vettore di coefficienti, a, può essere trovato tramite

$$a = F^{\#}y$$

dove:

y è il vettore di variabili dipendenti

 $F^{\#} = V\Lambda^{-1}U^{T}$ è l'inverso di F calcolato dalla scomposizione del valore singolare (F = U ΛV^{T}), un valido metodo che consente di minimizzare gli errori di arrotondamento e i problemi con equazioni quasi singolari.

Valori statistici e correlati

Dopo aver trovato i coefficienti è possibile calcolare le seguenti statistiche e i valori correlati:

Residui

Un valore per ogni variabile misuratay_i:

$$\mathbf{e}_{\mathbf{i}} = \mathbf{y'}_{\mathbf{i}} - \mathbf{y}_{\mathbf{i}}$$

Deviazione standard campione

Un valore. Anche detta "deviazione standard residua":

$$s = \sqrt{\left(\sum (y'_i - y_i)^2\right)/q}$$

dove:

q = n - m - 1 è il numero di gradi di libertà, caso (I)

q = n - m è il numero di gradi di libertà, caso (II)

7 Calcoli di ChemStore C/S Calcoli statistici

Deviazione standard dei coefficienti

Un valore per ognuno dei coefficienti (m+1). Deviazione standard del coefficiente a_i:

$$s_{a_i} = s \sqrt{(V \Lambda^{-2} V^T)_{ii}}$$

dove V,A derivano dalla scomposizione del valore singolare.

Coefficiente di correlazione (espresso come coefficiente di determinazione)

Un valore.

$$R^{2} = \sum \frac{(y'_{i} - y_{avg})^{2}}{(y_{i} - y_{avg})^{2}}$$

dove:

 $y_{avg} = \Sigma y_i / n \text{ per il caso (I)}$

 $y_{avg} = 0$ per il caso (II)

Modifiche della regressione lineare ponderata

Nel caso della ponderazione, i pesi sono memorizzati come elementi diagonali di una matrice W:

 $W = (w_{ii})$ Matrice diagonale dei pesi

 w_i pesi (uno di $(1/x_i), (1/x_i^2), (1/y_i), (1/y_i^2)$)

In caso ${\bf x}_i$ o ${\bf y}_i$ sia pari a zero, la variabile ${\bf w}_i$ viene calcolata come la media dei valori rimanenti diversi da zero.

Impostando:

$$\Phi = W^{-\frac{1}{2}} = diag((\sqrt{w_1})...(\sqrt{w_n}))$$

la soluzione dell'equazione di regressione risulta

$$a = (\Phi F)^{\#} \Phi y$$

dove:

 $(\Phi F)^{\#} = V \Lambda^{-1} U^{T}$ rappresenta l'inverso di ΦF calcolato dalla scomposizione del valore singolare.

I calcoli della deviazione standard dei coefficienti e del coefficiente di correlazione vengono modificati come segue:

Errore relativo

$$s_{w} = \sqrt{\sum (w_{ii}(y'_{i} - y_{i})^{2})/q}$$

Deviazione standard dei coefficienti

$$s_{a_i} = s_w \sqrt{(V\Lambda^{-2}V^T)_{ii}}$$

Coefficiente di correlazione (espresso come coefficiente di determinazione)

$$R^{2} = \frac{\sum (w_{ii}(y'_{i} - y_{avg})^{2})}{\sum (w_{ii}(y_{i} - y_{avg})^{2})}$$

dove

$$y_{avg} = \sum (w_{ii}y_i) / \sum (w_{ii}) \text{ caso (I)}$$

$$y_{avg} = 0 \text{ caso (II)}$$

Modifiche delle funzioni non lineari

La stessa equazione della matrice di regressione lineare viene utilizzata per adeguare i dati alle funzioni non lineari se tali funzioni possono essere "linearizzate".

Esponenziale

L'equazione "reale" è:

 $y_i = a \cdot exp(bx_i)$

Questa funzione risulta lineare nei coefficienti:

$$\ln(y_i) = \ln(a) + bx_i$$

Calcoli statistici

In pratica i valori y modificati vengono calcolati come:

$$Y_i = ln(y_i)$$

e la seguente equazione viene utilizzata nella regressione:

$$\mathbf{Y}_i = \mathbf{a}_0 + \mathbf{a}_1 \mathbf{x}_i$$

Potenza

 $y_i = ax_i^b$ equazione reale $ln(y_i) = ln(a) + b \cdot ln(x_i) \text{ funzione lineare nei coefficienti}$ $Y_i = ln(y_i), X_i = ln(x_i) \text{ modifiche dei valori x e y}$ $Y_i = a_0 + a_1 X_i \text{ funzione utilizzata per la regressione}$

Logaritmico

 $y_i = a + b \cdot \ln(x_i)$ equazione reale (già lineare nei coefficienti)

 $X_i = \ln(x_i)$ modifica dei valori x

 $y_i = a_0 + a_1 X_i$ funzione utilizzata per la regressione

Comandi della calcolatrice personalizzata

SELECT

Sintassi:

select <elenco colonne> for <elenco composti> where <condizione>
into <tabella>

Descrizione:

Questa istruzione viene utilizzata per recuperare dati da righe selezionate di una o più tabelle di database da inserire in una tabella per calcoli personalizzati. Dopo la parola riservata, selezionare un <elenco colonne> di tabelle di database da specificare. Le colonne possono essere semplici o colonne secondarie.

Le colonne secondarie sono quelle disponibili per ogni composto specificato da una clausola for nell'<elenco composti>. Le colonne secondarie devono essere precedute da un punto esclamativo '!'. Se nell'<elenco colonne> è stata specificata almeno una colonna secondaria, la clausola for è obbligatoria. È possibile specificare i composti della clausola for anche utilizzando un carattere jolly '*'. Il carattere jolly da solo indica tutti i composti. Aggiungere un carattere jolly al prefisso di un composto per indicare tutti i composti che iniziano con un dato prefisso. La clausola for riportata di seguito specifica tutti i composti che iniziano per "bar" e quelli che iniziano per "C".

For Bar*,C*

La clausola opzionale where definisce un sottoinsieme di righe di tabella recuperate utilizzando un'espressione <condizione>. La <tabella> risultante viene specificata con la clausola into.

FROM

Sintassi:

from <tabella> select <elenco colonne> for <elenco composti> where <condizione> into <tabella>

Comandi della calcolatrice personalizzata

Descrizione:

Questa istruzione viene utilizzata per recuperare dati da una tabella per calcoli personalizzati (tabella sorgente) e inserirli in un'altra (tabella di destinazione). La tabella sorgente viene specificata dopo la parola riservata from. La rimanente parte dell'istruzione è identica a quella dell'istruzione select sopra riportata, ad eccezione di quanto segue: <elenco colonne> e <elenco composti>

IF

Sintassi:

if <condizione> then <prima assegnazione> else <seconda assegnazione>

Descrizione:

Questa istruzione viene utilizzata per l'assegnazione condizionale. La parte "else" dell'istruzione è facoltativa. Se la condizione viene valutata in base a un singolo valore e la <condizione> dell'espressione è soddisfatta, allora viene effettuata la <prima assegnazione>; in caso contrario, viene effettuata la <seconda assegnazione>. Se la condizione viene valutata in base a una colonna ma l'assegnazione non è in forma di colonna, allora la condizione viene ulteriormente valutata come logica e in base a tutte le righe della colonna, quindi viene effettuata l'assegnazione. Se sia la condizione che l'assegnazione sono in forma di colonna, viene effettuata un'assegnazione condizionale riga per riga, a seconda del valore della riga della colonna relativa alla condizione. Se la lunghezza della colonna relativa alla condizione (m) è superiore alla lunghezza della colonna relativa all'assegnazione (n), viene effettuata l'assegnazione condizionale solo delle prime righe della colonna n. La parte eccedente della colonna condizionale viene ignorata. Se la lunghezza della colonna relativa alla condizione (m) è inferiore alla lunghezza della colonna relativa all'assegnazione (n), viene effettuata l'assegnazione condizionale solo delle prime righe della colonna m. Le rimanenti assegnazioni non vengono effettuate.

FORMAT

Sintassi:

format <elenco operandi> using <specifica formato>

Descrizione:

Questa istruzione viene utilizzata per la formattazione dei dati relativi a colonne e variabili. L'elenco di colonne e variabili separate da virgole è indicato nell'<elenco operandi>, mentre la formattazione viene specificata nella stringa <specifica formato>. La formattazione interessa solo la rappresentazione di output dei dati su schermo o carta; i dati effettivi rimangono invariati.

Specifica di formato

La specifica di formato corrisponde a una stringa contenente istruzioni per la formattazione dell'operando. Tali istruzioni vengono fornite da caratteri della specifica del formato aventi uno speciale significato, descritto nelle sezioni seguenti. I caratteri che non hanno alcun significato speciale vengono visualizzati in modo letterale. Per visualizzare in modo letterale un carattere con significato speciale, farlo precedere da una barra inversa (\) o racchiuderlo fra virgolette doppie (" "). La barra inversa e le virgolette doppie non vengono visualizzate. Per visualizzare una barra inversa, specificarne due (\\).

Formattazione di operandi numerici

Una specifica di formato per operandi numerici può comprendere da una a quattro sezioni separate da punto e virgola.

Utilizzando	ll risultato è	
Una sola sezione	La specifica di formato si applica a tutti i valori.	
Due sezioni	La prima sezione si applica a valori positivi ed agli ze- ri, la seconda a valori negativi.	
Tre sezioni	La prima sezione si applica a valori positivi, la secon- da a valori negativi e la terza agli zeri.	
Quattro sezioni	La prima sezione si applica a valori positivi, la seconda a valori negativi, la terza agli zeri e la quarta ai valori null.	

Comandi della calcolatrice personalizzata

La seguente specifica di formato include due sezioni: la prima specifica il formato per valori positivi e gli zeri, la seconda sezione specifica il formato per i valori negativi.

"\$#,##0;(\$#,##0)"

Se si includono punti e virgola senza specificare nulla tra di essi, la sezione mancante viene stampata utilizzando il formato del valore positivo. Ad esempio, la seguente specifica di formato visualizza valori positivi e negativi utilizzando il formato della prima sezione e visualizza "Zero" se il valore è zero.

"\$#,##0;;\Z\e\r\o"

I seguenti caratteri possono essere utilizzati per specifiche di formato numerico:

Carattere	Descrizione
Nessuno	Visualizza il numero senza formattazione.
0	Segnaposto di cifra. Visualizza una cifra o uno zero. Se presenta una cifra nella posizione in cui compare lo zero nella specifica di formato, l'operando viene visualizzato; in caso contrario, in tale posizione viene visualizzato uno zero. Se l'operando presenta un numero inferiore di cifre rispetto agli zeri presenti prima o dopo la virgola decimale nella specifica di formato, vengono visualizzati gli zeri iniziali o finali. Se l'operando presenta un numero superiore di cifre rispetto agli zeri presenti alla destra del separatore decimale nella specifica di formato, il numero verrà arrotondato di altrettanti decimali quanti sono gli zeri. Se l'operando presenta un numero superiore di cifre rispetto agli zeri presenti alla sinistra del separatore decimale nella specifica di formato, le cifre in eccesso verranno visualizzate senza alcuna modifica.
#	Segnaposto di cifra . Visualizza una cifra o nulla. Se presenta una cifra nella posizione in cui compare lo zero nella specifica di formato, l'operando viene visualizzato; in caso contrario, in tale posizione non viene visualizzato nulla. Questo simbolo funziona in modo simile al segnaposto di cifra 0; tuttavia in questo caso gli zeri iniziali e finali non vengono visualizzati se l'operando presenta lo stesso numero o un numero inferiore di cifre rispetto al numero di caratteri # presenti prima o dopo del separatore decimale nella specifica di formato.

Segnaposto decimale. Il segnaposto decimale determina il numero di cifre visualizzate a sinistra ed a destra del separatore decimale. Se la specifica di formato contiene solo segni numerici a sinistra del simbolo, i numeri inferiori ad 1 iniziano con un separatore decimale. Per visualizzare uno zero iniziale con numeri frazionari, utilizzare 0 come primo segnaposto di cifra a sinistra del separatore decimale.

- % Segnaposto di percentuale. L'operando viene moltiplicato per 100. Il carattere percentuale (%) viene inserito nella posizione in cui compare nella stringa di formato.
 - **Separatore delle migliaia**. Il separatore delle migliaia consente di distinguere le migliaia dalle centinaia nell'ambito di un numero a quattro o più cifre a sinistra del separatore decimale. L'utilizzo standard del separatore delle migliaia viene specificato se la specifica di formato contiene un separatore delle migliaia circondato da segnaposto di cifra (**0** o #). La presenza di due separatori delle migliaia adiacenti o un separatore delle migliaia immediatamente a sinistra del separatore decimale (sia che sia stato specificato o meno un decimale) indica che l'operando verrà scalato dividendolo per 1000 e arrotondandolo se necessario. Ad esempio, è possibile utilizzare la specifica di formato "##0," per rappresentare 100 milioni come 100. Gli operandi inferiori ad un milione vengono visualizzati come 0. Due separatori delle migliaia adiacenti in qualsiasi posizione diversa da quella immediatamente a sinistra del separatore decimale indicano semplicemente l'utilizzo di un separatore delle migliaia.
- E- E+ e- e+ Formato scientifico. Se la specifica di formato contiene almeno un segnaposto di cifra (0 o #) alla destra di E-, E+, e- oppure e+, l'operando viene visualizzato in formato scientifico e fra il numero ed il relativo esponente viene inserito E o e. Il numero di segnaposto di cifra a destra determina il numero di cifre dell'esponente. Utilizzare E- o e- per inserire un segno meno accanto agli esponenti negativi. Usare E+ o e+ per inserire un segno meno accanto agli esponenti negativi ed un segno più accanto agli esponenti positivi.

Formattazione di operandi di data/ora

I caratteri che seguono possono essere utilizzati per specifiche di formato data/ora:

Carattere	Descrizione
:	Separatore dell'ora. Il separatore dell'ora consente di distinguere ore, minuti
	e secondi quando i valori di tempo vengono formattati.

,

Comandi della calcolatrice personalizzata

/	Separatore della data. Il separatore della data consente di distinguere giorni, mesi ed anni quando i valori di data vengono formattati.	
С	Visualizza la data come ddddd e visualizza l'ora come ttttt, nello stesso ordine. Visualizza solo informazioni relative alla data se non esiste parte frazionaria al numero di serie della data; visualizza solo informazioni relative all'ora se non esiste parte intera.	
D	Visualizza il giorno come numero senza zero iniziale (1 31).	
Dd	Visualizza il giorno come numero con zero iniziale (01 31).	
Ddd	Visualizza il giorno come abbreviazione (Sun Sat).	
Dddd	Visualizza il giorno come nome completo (Sunday Saturday).	
Ddddd	Visualizza la data completa, comprendente giorno, mese ed anno. Il formato predefinito della data abbreviata è m/g/aa.	
Dddddd	Visualizza un numero di serie della data come data completa, comprendente giorno, mese ed anno. Il formato predefinito per la data lunga è mmmm dd, yyyy.	
W	Visualizza il giorno della settimana come numero (da 1 per domenica a 7 per sabato).	
Ww	Visualizza la settimana dell'anno come numero (1 54).	
М	Visualizza il mese come numero senza zero iniziale (1 12). Se m segue immediatamente h o hh, viene visualizzato il minuto anziché il mese.	
Mm	Visualizza il mese come numero con zero iniziale (1 12). Se m segue immediatamente h o hh, viene visualizzato il minuto anziché il mese.	
Mmm	Visualizza il mese come abbreviazione (Jan Dec).	
Mmmm	Visualizza il mese come nome completo (January December).	
Q	Visualizza il trimestre dell'anno come numero (1 4).	
Y	Visualizza il giorno dell'anno come numero (1 366).	
Yy	Visualizza l'anno come numero a 2 cifre (00 99).	
Үууу	Visualizza l'anno come numero a 4 cifre (100 9999).	
Н	Visualizza l'ora come numero senza zero iniziale (0 23).	
Hh	Visualizza l'ora come numero con zero iniziale (00 23).	

Comandi della calcolatrice personalizzata

Ν	Visualizza il minuto come numero senza zero iniziale (0 59).	
Nn	Visualizza l'ora come numero con zero iniziale (00 59).	
S	Visualizza il secondo come numero senza zero iniziale (0 59).	
Ss	Visualizza il secondo come numero con zero iniziale (00 59).	
tttt	Visualizza un orario completo, comprendente ora, minuto e secondo. Viene visualizzato uno zero iniziale se è stata selezionata l'opzione relativa e l'ora è anteriore alle 10.00 o alle 22.00. Il formato predefinito per l'ora è h:mm:ss.	
AM/PM	Utilizza l'orologio di 12 ore e visualizza la dicitura AM in lettere maiuscole per indicare qualsiasi orario prima di mezzogiorno; visualizza la dicitura PM in lettere maiuscole con qualsiasi orario compreso fra mezzogiorno e le 23.59.	
am/pm	Utilizza l'orologio di 12 ore e visualizza la dicitura AM in lettere minuscole per indicare qualsiasi orario prima di mezzogiorno; visualizza la dicitura PM in lettere minuscole con qualsiasi orario compreso fra mezzogiorno e le 23.59.	
A/P	Utilizza l'orologio di 12 ore e visualizza la lettera A maiuscola per indicare qualsiasi orario prima di mezzogiorno; visualizza la lettera P maiuscola con qualsiasi orario compreso fra mezzogiorno e le 23.59.	
a/p	Utilizza l'orologio di 12 ore e visualizza la lettera a minuscola per indicare qualsiasi orario prima di mezzogiorno; visualizza la lettera p minuscola con qualsiasi orario compreso fra mezzogiorno e le 23.59.	
АМРМ	Utilizza l'orologio di 12 ore e visualizza la stringa AM per indicare qualsiasi orario prima di mezzogiorno; visualizza la stringa PM con qualsiasi orario compreso fra mezzogiorno e le 23.59.	

Formattazione di operandi di stringa

Una specifica di formato per le stringhe può includere una o due sezioni separate da un punto e virgola (;).

Utilizzando	Il risultato è
Una sola se- zione	ll formato si applica a tutti i dati della stringa.
Due sezioni	La prima sezione si applica ai dati della stringa, la seconda a valori null ed a stringhe di lunghezza zero ("").

Comandi della calcolatrice personalizzata

I seguenti caratteri possono essere utilizzati per specifiche di formato delle stringhe:

Carattere	Descrizione
@	Segnaposto di carattere . Visualizza un carattere o uno spazio. Se presenta un carattere nella posizione in cui il simbolo di chiocciola (@) compare nella stringa di formato, la stringa viene visualizzata; in caso contrario, in tale posizione viene visualizzato uno spazio. I segnaposto vengono compilati da destra verso sinistra a meno che non sia presente un punto esclamativo (!) nella stringa di formato.
&	Segnaposto di carattere . Visualizza un carattere o nulla. Se presenta un carattere nella posizione in cui compare il segno di e commerciale (&), la stringa viene visualizzata; in caso contrario non viene visualizzato nulla. I segnaposto vengono compilati da destra verso sinistra a meno che non sia presente un punto esclamativo (!) nella stringa di formato.
<	Forza minuscole. Visualizza tutti i caratteri in minuscolo.
>	Forza maiuscole. Visualizza tutti i caratteri in maiuscolo.
!	Forza la compilazione dei segnaposto da sinistra verso destra. Per impostazione predefinita, i segnaposto vengono compilati da destra verso sinistra.

TRANSPOSE

Sintassi:

Transpose <tabella sorgente> by <colonna> into <tabella di destinazione>

Descrizione:

Questa istruzione viene utilizzata per la trasposizione di una tabella di calcolo personalizzata. La tabella da trasporre viene definita in <tabella sorgente> mentre il risultato viene inserito nella <tabella di destinazione>. La <colonna> specificata dopo by indica quale colonna della tabella sorgente verrà utilizzata per i nomi di colonna (intestazione) della tabella di destinazione. Poiché i nomi di colonna devono essere univoci, la tabella di destinazione non contiene nessuna colonna il cui nome compare più di una volta nella <colonna> specificata dopo by. La <tabella di destinazione > risultante viene specificata con la clausola into.

GROUP

Sintassi:

Group <tabella sorgente> by <colonna> do <elenco di operazioni> into <tabella di destinazione>

Descrizione:

Questa istruzione viene utilizzata per effettuare un elenco di operazioni su gruppi di righe. La tabella sorgente per questa istruzione è specificata in <tabella sorgente>, mentre il risultato viene scritto nella <tabella di destinazione>. Il raggruppamento delle righe della <tabella sorgente> è definito dai valori della colonna by. Ogni gruppo di righe contiene righe con valori uguali nella colonna by. Le operazioni da effettuare su ogni gruppo di righe vengono definite in un <elenco di operazioni> separate da virgola. La sintassi di ciascun elemento dell'elenco è la seguente:

<aggregato> (<colonna>) as <alias>

La funzione di aggregazione <aggregato> viene applicata a ciascun gruppo di righe della <colonna>. I risultati di queste operazioni costituiscono una colonna <alias> nella tabella di destinazione. La <tabella di destinazione> risultante viene specificata nella clausola into.

Codici di errore e descrizioni

In questa sezione è riportata una descrizione di tutti gli errori rilevati dalla calcolatrice personalizzata. Tali errori possono essere di sintassi o di runtime. Gli errori di sintassi vengono rilevati durante il controllo della sintassi dell'istruzione di calcolo. Un'istruzione che contiene un errore di sintassi non viene riconosciuta dalla calcolatrice personalizzata e pertanto non può essere valutata. La calcolatrice personalizzata indica la posizione di un errore di sintassi all'interno dell'istruzione di calcolo tramite testo di colore rosso e un apposito contrassegno di posizione (^). Il contrassegno di posizione dell'errore punta all'elemento imprevisto della sintassi.

Vengono valutate solo le istruzioni di calcolo sintatticamente corrette. Anche se sintatticamente corretta, un'istruzione può comunque produrre errori di runtime in caso di indisponibilità dei dati o alla presenza di tipi di dati o di valori imprevisti. La calcolatrice personalizzata non rileva la posizione degli errori di runtime.

Errori di sintassi

Questi errori vengono rilevati durante il controllo della sintassi. In seguito alla rilevazione di un qualsiasi errore di sintassi, il controllo viene immediatamente interrotto e viene visualizzato un messaggio di errore. Se un'istruzione di calcolo contiene più di un errore di sintassi, viene rilevato e visualizzato solo il primo.

Codice	Descrizione	Causa
2	Previsto 'by'	By mancante (istruzioni transpose e group).
4	Previsto 'do'	Do mancante (istruzione group).
5	Prevista fine riga	Istruzione che termina con uno o più elementi sintattici non necessari e pertanto imprevisti.
6	Previsto '='	Segno di uguale mancante (prima parola di un'istruzione non digitata correttamente e considerata come nome di variabile dalla calcolatrice personalizzata).
7	Prevista espressione	Espressione mancante (manca la parte corretta di un'espressione contenente un operatore di relazione).
8	Previsto fattore	Fattore mancante (in un'espressione dopo un operatore *, / o and).
9	Previsto for	For mancante in un'istruzione contenente almeno una colonna secondaria. (istruzioni e from).

Comandi della calcolatrice personalizzata

11	Previsto 'into'	Into mancante (istruzioni select, from, transpose e group).
12	Previsto '('	Parentesi di apertura mancante (in una chiamata di funzione).
14	Previsto nome	Nome non corretto. Il nome non inizia con una lettera.
15	Previsto numero	Numero non corretto (cifre seguiti da una virgola decimale seguita da lettere).
17	Previsto ')'	Parentesi di chiusura mancante. In una chiamata di funzione il numero di parentesi di apertura non è uguale a quello delle parentesi di chiusura.
18	Previsto 'select'	Select mancante (istruzione from).
19	Prevista stringa	Stringa mancante (specifica di formato in un'istruzione format)
20	Previsto termine	Termine mancante (in un'espressione dopo un segno + o - oppure un operatore).
21	Previsto 'then'	Then mancante (istruzione if).
22	Previsto 'using'	Using mancante (istruzione format).
24	Tipo di colonna non corretto	È stata specificata come colonna secondaria una colonna che non corrisponde a una colonna secondaria oppure una colonna che corrisponde a una sottocolonna non è specificata come tale (istruzioni select e from).
25	Prevista colonna di database	La colonna specificata non corrisponde a una colonna della tabella di database specificata (istruzione select).
26	Prevista tabella di database	La tabella specificata non esiste nel database (istruzione select).
27	Previsto composto	Il composto specificato non esiste nel database (istruzioni select e from).
28	Variabile non trovata	La variabile specificata non esiste (istruzione format).
29	Tabella non trovata	La tabella specificata non esiste (istruzione format).
30	Colonna non trovata	La colonna specificata non esiste nel database indicato (istruzione format).
32	Tabella già esistente	Specifica di una tabella esistente in una clausola INTO (istruzione select, from, transpose e group).
41	Nome di colonna duplicato	Una colonna è stata specificata più di una volta (istruzioni select e from).
42	Colonna di sola lettura	Assegnazione di un'espressione a una colonna di tabella ottenuta in modo diretto o indiretto dal database (istruzioni di assegnazione colonna).

Comandi della calcolatrice personalizzata

Errori di calcolo

In alcuni casi può essere necessario includere nel rapporto finale messaggi di errore relativi al calcolo. In questa fase della generazione del rapporto si tratta dell'unico metodo per visualizzare i messaggi di errore di un calcolo perché il calcolo viene eseguito proprio durante la generazione del rapporto e il risultato del calcolo è incorporato nel rapporto.

Errori di runtime

Questi errori vengono rilevati durante il runtime. Un errore di runtime che si verifica più di una volta in una singola riga di calcolo viene comunque segnalato una sola volta.

Codice	Descrizione	Causa
37	Argomento non valido	È stata chiamata una funzione con un valore di argomento non ammesso.
38	Overflow	Il risultato dell'operazione è troppo grande.
39	Divisione per zero	Si è cercato di dividere per zero.
40	Mancata corrispondenza dei tipi	Il tipo dell'operando è in conflitto con l'operazione che si è cercato di effettuare.

Argomento non valido

Questo errore di runtime si verifica se si chiama una funzione aritmetica con un valore di argomento non ammesso. Di seguito sono elencate le operazioni che restituiscono questo tipo di errore:

- Funzioni aritmetiche (log, 1n) di argomento zero o negativo. L'argomento deve essere una costante, una variabile o una colonna.
- Funzione aritmetica (sqrt) di un argomento negativo. L'argomento può essere una costante, una variabile o una colonna.

Overflow

Questo errore di runtime si verifica se il risultato numerico di un'operazione è troppo grande o troppo piccolo. Di seguito sono elencate le operazioni che restituiscono questo tipo di errore:

- Addizione (+), sottrazione (-), moltiplicazione (*) di operandi numerici di grandi dimensioni. Entrambi gli operandi possono essere una costante, una variabile o una colonna.
- Divisione (/) di operandi pari o vicini allo zero. Entrambi gli operandi possono essere una costante, una variabile o una colonna.
- Funzioni aritmetiche (exp, sqr) e funzioni aggregate (mean, rstdev, stdev, sum, var) applicate ad operandi di grandi dimensioni. L'argomento può essere una costante, una variabile o una colonna.
- Negazione (not) di valori numerici superiori a 2147483646.

Divisione per zero

Questo errore di runtime si verifica se un valore diverso da zero viene diviso per zero. Di seguito sono elencate le operazioni che restituiscono questo tipo di errore:

• Divisione (/) di un operando diverso da zero per un operando pari a zero. Entrambi gli operandi possono essere una costante, una variabile o una colonna.

Mancata corrispondenza dei tipi

Questo errore di runtime si verifica se l'argomento di una funzione o l'operando di un operatore non è di tipo appropriato. Di seguito sono elencate le operazioni che restituiscono questo tipo di errore:

- Addizione (+), sottrazione (-), moltiplicazione (*), divisione (/), congiunzione (and) e disgiunzione (or) di una stringa e di un operando numerico. Entrambi gli operandi possono essere una costante, una variabile o una colonna. Non è importante quale dei due argomenti appartenga ad una stringa e quale sia di tipo numerico.
- Negazione (not) e modifica di un segno (-) di un operando di stringa. Gli operandi possono essere una costante, una variabile o una colonna.
- Addizione (+), moltiplicazione (*), divisione (/), congiunzione (and) e disgiunzione (or) di due operandi di stringa. Entrambi gli operandi possono essere una costante, una variabile o una colonna.
- Funzioni aritmetiche (abs, exp, ln, log, sqr, sqrt) e funzioni aggregate (mean, rstdev, stdev, sum, var) applicate ad argomenti di stringa. L'argomento può essere una costante, una variabile o una colonna.

7

Calcoli mediante i campi personalizzati

Come illustrato nella sezione "Utilizzo di campi personalizzati" a pagina 21, è possibile utilizzare i campi personalizzati per trasferire nel database ChemStore C/S dati relativi ai campioni non inclusi nel modello di database standard. Questi dati possono essere utilizzati per calcolare i dati relativi ai composti tramite i calcoli personalizzati, come illustrato nella sezione "Finestre delle wizard degli script della calcolatrice personalizzata" a pagina 60.

In questa sezione viene spiegato come calcolare i dati comunemente richiesti tramite le funzioni macro incorporate.

Fattore di risposta originale

Il fattore di risposta originale è il fattore di risposta calcolato dividendo l'importo della tabella di calibrazione con l'area di picco per un composto specifico. Il campo del fattore di risposta del database memorizza solo il fattore di risposta calcolato dopo il calcolo della media, come risulta nella tabella di calibrazione della ChemStation. Utilizzare la funzione ChemStoreCompoundVal per ottenere il fattore di risposta originale per ogni composto nelle analisi di calibrazione del composto specifico.

- 1 Creare campi personalizzati per ogni composto per il quale occorre il fattore di risposta originale. Utilizzare una convenzione di denominazione che includa il nome del composto per una più agevole identificazione.
- **2** Aggiungere i campi personalizzati a uno studio e selezionare il pulsante field details.
- 3 Nella sezione di immissione dati, selezionare **by ChemStation function** e digitare ChemStoreCompoundVal ("AmtPerRespOrg", "CompoundName") come funzione. Sostituire CompoundName con il nome del composto appropriato.

Elenco di funzioni incorporate

ChemStoreAreaSum(signal\$)

La funzione ChemStoreAreaSum calcola la somma di tutte le aree di picco di un cromatogramma per un segnale specificato o per tutti i segnali. Se si specifica un segnale, vengono sommati solo i picchi di tale segnale. Se questo parametro viene omesso, vengono sommati tutti i picchi del cromatogramma.

Parametri:

[signal\$]

È possibile specificare un segnale numericamente tramite l'intera descrizione oppure i primi n caratteri della descrizione del segnale. Il parametro deve essere racchiuso tra virgolette doppie ("..."), poiché deve trattarsi di una stringa.

Esempio ChemStoreAreaSum ("2")

Somma tutti i picchi del secondo segnale in ChromRes[1].Signal

ChemStoreAreaSum (1)

errore - utilizzare ChemStoreAreaSum ("1")

ChemStoreAreaSum ("")

Somma tutti i picchi di tutti i segnali caricati

ChemStoreAreaSum ("DAD1 B, Sig=305,190 Ref=550,100")

Somma tutti i picchi del segnale "DAD1 B, Sig=305,190 Ref=550,100"

ChemStoreAreaSum ("DAD1 B")

Somma tutti i picchi di DAD1 canale B

Calcoli mediante i campi personalizzati

ChemStoreCompoundVal(expression\$,compound\$)

La funzione ChemStoreCompoundVal restituisce un valore per composto indicato da expression\$ per il composto compound\$.

Parametri:

[expression\$]: specifica le informazioni da restituire.

[compound\$]: nome del composto esattamente come compare nella tabella di calibarazione della ChemStation. Il nome del composto non fa distinzione tra maiuscole e minuscole.

Esempio ChemStoreCompoundVal ("FirstPeak~MeasRetTime", "Biphenyl")

Restituisce il tempo di ritenzione del picco identificato come il componente "Biphenyl".

ChemStoreCompoundVal ("AmtPerRespOrg", "Biphenyl")

Restituisce il fattore di risposta originale del componente "Biphenyl".

ChemStoreCompoundText(expression\$,compound\$)

La funzione ChemStoreCompoundText restituisce un testo per composto indicato da expression\$ per il composto compound\$.

Parametri:

[expression\$]: specifica le informazioni da restituire.

[compound\$]: nome del composto esattamente come compare nella tabella di calibarazione della ChemStation. Il nome del composto non fa distinzione tra maiuscole e minuscole.

Esempio ChemStoreCompoundText\$ ("FirstPeak~IntPeakType", "Biphenyl")

Restituisce il tipo di picco del componente "Biphenyl", ad esempio "BV". Per una descrizione dei codici di riferimento, vedere la Guida in linea della ChemStation.

Calcolo dell'ora

Sincronizzazione dell'ora

Poiché il sistema ChemStation Plus è composto da diversi componenti, è necessario sincronizzare i singoli orologi affinché l'ora indicata sia la stessa in tutto il sistema.

Gli orologi del PC client e del server devono essere sincronizzati tramite gli appositi strumenti standard di rete.

Gli strumenti analitici che utilizzano un orologio in tempo reale per la generazione di timestamp, come il sistema Agilent 1100 LC vengono sincronizzati all'avvio della ChemStation.

I singoli moduli Agilent 1100 serie LC si sincronizzano con il sistema ogni volta che viene inserita una nuova ora.

Timestamp

In un sistema ChemStation Plus vengono generati timestamp ogni volta che si verifica un evento. Un evento può essere dato da un'iniezione del campione, dal salvataggio su disco di un metodo, dalla fine di un trasferimento dati nel database, dall'approvazione di un'analisi e così via. In genere, sono disponibili due possibilità di memorizzazione dei timestamp:

- timestamp che utilizzano le impostazioni del fuso orario;
- timestamp che ignorano le impostazioni del fuso orario.

Tutti i timestamp nel database ChemStore C/S (Oracle o Access) vengono memorizzati in modo indipendente dall'impostazione corrente del fuso orario del server o del PC client di revisione. Pertanto, la modifica dell'impostazione del fuso orario su qualsiasi computer non comporta la modifica dei timestamp riportati da ChemStore C/S.

Anche i timestamp nei file di registro della ChemStation sono indipendenti dalle impostazioni del fuso orario del computer. Si tratta ad esempio degli orari di avvio e di arresto di metodo e sequenza, dei messaggi di errore e degli avvisi. I timestamp associati ai metodi e ai file di dati della ChemStation, invece, rispettano le impostazioni del fuso orario del PC su cui sono stati creati. Si tratta, ad esempio, degli orari di iniezione, di calibrazione, di salvataggio del metodo e così via.

Questa dipendenza dalle impostazioni del fuso orario è rilevante solo se i file di dati attraversano i fusi orari o se si modifica il fuso orario sul PC di reporting dopo l'acquisizione dei dati.

Fusi orari

Per poter confrontare gli eventi che si verificano in fusi orari diversi, la ChemStation memorizza sempre i timestamp che dipendono dal fuso orario secondo l'ora UTC (Coordinated Universal Time). L'ora UTC corrisponde sostanzialmente all'ora di Greenwich (GMT) e l'ora locale di tutti gli altri fusi orari è calcolata in base a questa.

I timestamp che dipendono dal fuso orario, come l'orario di iniezione, vengono memorizzati dalla ChemStation nel seguente modo:

- 1 Si verifica l'evento.
- 2 Ha luogo la lettura dell'ora locale dal sistema.
- **3** Ha luogo la lettura della variabile di sistema TZ che indica il fuso orario del computer.
- 4 Viene calcolata l'ora UTC utilizzando la variabile TZ e l'ora locale.
- 5 L'ora UTC viene memorizzata come secondi a partire da 01.01.1970 00:00:00.

I timestamp dipendenti dal fuso orario, come l'orario di iniezione, vengono riportati dalla ChemStation nel seguente modo:

- **1** Ha luogo la lettura della variabile di sistema TZ che indica il fuso orario del computer.
- 2 L'ora UTC viene letta dai file come secondi a partire da 01.01.1970 00:00:00.
- **3** Tramite la variabile di sistema TZ viene calcolata l'ora locale del PC in uso in cui si è verificato l'evento.
- **4** L'ora locale in secondi da 01.01.1970 00:00:00 viene convertita secondo la formattazione selezionata.

Poiché è possibile che questi orari vengano memorizzati è riportati su computer con fusi orari diversi, i timestamp dipendenti dal fuso orario variano a seconda dell'impostazione della variabile di sistema TZ.

Impostazione dei fusi orari sul PC

In Windows 2000 e in Windows XP è possibile impostare il fuso orario del PC dalla scheda Time Zone in Control Panel, applet Date/Time. Sfortunatamente la ChemStation non è in grado di leggere questa impostazione, pertanto è necessario che la variabile di sistema TZ sia impostata correttamente.

Il programma di installazione del client di ChemStore C/S imposta la variabile di sistema TZ nel registro di sistema di Windows. Se l'impostazione del fuso orario del PC viene modificata dopo l'installazione, occorre aggiornare manualmente la variabile TZ dal pannello Properties in 'My Computer'.

Per istruzioni sulla modifica della variabile TZ, fare riferimento alla Guida all'installazione di ChemStore alla sezione "Reference Information".

NOTA

Quando il fuso orario in Control Panel è impostato su un valore positivo, ad esempio *(GMT +01:00) Brussels, Berlin, Bern, Rom, Stockholm, Vienna*, la variabile TZ deve essere negativa, ad esempio *WES-01WED01*.

Calcolo dell'ora

Α

administrator, 128 aggiornamento, 16 analisi, 20, 142 approvazione, 14, 39, 44, 50 contrassegno, 39, 44, 50 elenco, 39 rifiuto, 39, 44, 50 anteprima, 121 approvazione analisi, 14, 39, 44, 50 stato. 27. 39. 44 archiviazione, 15, 134, 165 automatica, 135 automatizzata, 135 interattiva, 138 assi, grafico, 40, 44 autorizzazioni, 124 avviso, limiti, 48

В

backup, 164 strategia, 164 barra degli strumenti principale, 33 secondaria, 37, 42 batch, 40, 44, 50 Batch Review, 29 blocco di ChemStore e ChemStation, 125

C

calcoli, 96 singolo valore, 176 campi calcolati, 100 campi personalizzati, 20, 21, 24, 32 stato, 22 campione, deviazione standard, 179 campioni, rapporto, 22 cGMP, 124 chemist, 127 ChemStation, 12, 23, 50 ChemStoreAreaSum, 197 ChemStoreCompoundText, 198 ChemStoreCompoundVal, 198 CHKDSK. 170 client/server. versione. 12 coefficiente correlazione, 180, 181 deviazione standard, 180, 181 colonna, 95 complement filter, 28 composti analisi, 44 elenco. 44 Compound Review, 35 computer singolo, versione, 12 configurazione delle tabelle, 45 contrassegno delle analisi, 39, 44, 50 controllo, grafico, 14, 22, 47

correlazione, coefficiente di, 180, 181 count, 46 criteri di ricerca, 24 cromatogramma, 20, 96 current Good Manufacturing Practice, 124

D

danneggiato, database, 166, 174 data, stile di visualizzazione, 45 database danneggiati, 166 date/time, 22 dati esportazione, 15 esterni, 21 immissione, 131 integrità, 124 non elaborati, 20, 50 organizzazione, 13 protezione, 124 recupero, 13 revisione, 14 tipi, 22 tipo, 131 trasferimento, 23 deviazione standard, 47, 177 campione, 179 coefficienti, 180, 181 relativa, 47 residua, 179

E

elemento, 92, 96 eliminazione di analisi, 53 e-mail, notifica, 156 emergenza, piano di ripristino, 173 esclusione di analisi, 40 esecuzione rielaborata, 50 esponenziale, 181 esportazione di dati, 15 esterni, dati, 21 etichette paragrafi, 56

F

file danneggiati, 166 di dati non elaborati, 23 di metodo, 23 di sequenza, 23 ricaricamento, 50 validazione, 160 filtro, 27, 133 complement, 28 flusso di dati, 19 flusso di lavoro, 18 formato numero, 45 fusi orari, 200

G

GLP, 124 GMT, 200 Good Laboratory Practice, 124 grafico, 96, 102 assi, 40, 44, 95 controllo, 47 di tendenza, 14

Η

hash, valore, 161

impostazioni interfaccia utente, 48 informazioni, recupero, 24 insieme di dati, 90 installazione, 12 integer, 22 integrità dati, 124 interattiva, archiviazione, 138 interfaccia, impostazioni, 48 interruzione di pagina, 96 intestazione, 96 itinerario di controllo, 14, 30, 124

L

lab manager, 128 limite, linee, 48 linea centrale, 48 lineare, regressione, 177 linee, limite, 48 logaritmico, 182

Μ

macro, 131 manager, 128 media, 176 menu, 33 metodo, 20 modello di rapporto, 133

Ν

notifica e-mail, 156 NT, service pack, 171 numero, 176 numero, formato, 45 numero, precisione, 45

0

ODBC, 12 operator, 127 organizzazione di dati, 13 origine, 177 ottimizzazione del disco, 166

P

pagina, intestazione, 91, 96 paragrafi, etichette, 56 password, 124, 125 personalizzato, rapporto, 15 piè di pagina, 96 ponderazione, 177 potenza, 182 precisione numero, 45 Preferences, finestra di dialogo, 121 principale, barra degli strumenti, 33 protezione, 125 dati, 124

0

query, 24, 133 builder, 25

R

raggruppamento, 106 rapporto, 15, 88 campioni, 22 personalizzato, 15 strumenti, 22 successivo alla sequenza, 121 real, 22 recupero dall'archivio, 15 recupero di dati, 13 registro, 159 Regression Statistics, 35 regressione, statistiche, 47, 177

relativa, deviazione standard, 47, 177 relativo, errore, 181 Report Template Editor, 88 residua, 179 deviazione standard, 179 Results, tabella, 44 revisione campione, 34, 36 composti, 35 dati. 14 ricaricamento di file, 50 ricerca criteri, 24 rielaborata, esecuzione, 50 rielaborazione, 50 riepilogo, statistiche, 46, 176 rifiuto delle analisi, 39, 44, 50 ripristino, analisi, 142 risultati trasferimento, 13 RSD, 47, 177

S

Sample Review, 34, 36 Sample, tabella, 40 scalabilità, 16 secondaria, barra degli strumenti, 37, 42 selection list, 22 sequenza, 20, 121 sequenza, rapporto di riepilogo, 121 service pack, 171 sessione, blocco, 125 sezione, 93 dati, 91, 96, 97 intestazione, 100 singolo valore, calcoli, 176 somma, 47, 176 spettri, 20, 96 SQL, 24 statistiche, 36, 41, 46, 107 regressione, 35, 177 riepilogo, 46, 176

stato approvazione, 27, 39, 44 campi personalizzati, 22 strumenti, rapporto, 22 struttura, visualizzazione, 91 studio, 20, 24, 130 Summary Results, tabella, 44 Summary Sample, tabella, 40

T

tabella, 94, 96, 100 campione, 40 configurazione, 45 risultati, 44 Summary Results, 44 Summary Sample, 40 tendenza, analisi, 22 text, 22 Timestamp, 199 tipo di curva, 177 transazione, registro, 124 trasferimento di risultati, 13 true/false, 22 TZ, 200

U

UTC, 200 utente autorizzazioni, 124, 127 impostazioni interfaccia, 48, 133 profilo, 124, 128

V

validazione file, 160 valore massimo, 46, 176 medio, 46 minimo, 46, 176 varianza, 47, 176 versione, 27 numero, 51 versioni, 51

W

WHERE, clausola, 26

X

XML, 140

www.agilent.com

In questo manuale

Nel presente manuale vengono presentati i concetti principali di ChemStore C/S Agilent, unitamente a una descrizione delle caratteristiche principali del prodotto e alle istruzioni per l'impostazione degli studi e la gestione dei dati.

Il manuale comprende:

- una breve panoramica delle caratteristiche e delle capacità di ChemStore C/S Agilent;
- informazioni dettagliate sul funzionamento di ChemStore C/S Agilent;
- informazioni dettagliate sull'impostazione di ChemStore C/S Agilent in base alle necessità delle diverse tipologie di laboratori e di utenti;
- informazioni dettagliate sulle modalità di esecuzione di calcoli statistici con la suite completa di ChemStore C/S Agilent.

© Agilent Technologies 2002, 2004

Stampato in Germania 03/04



