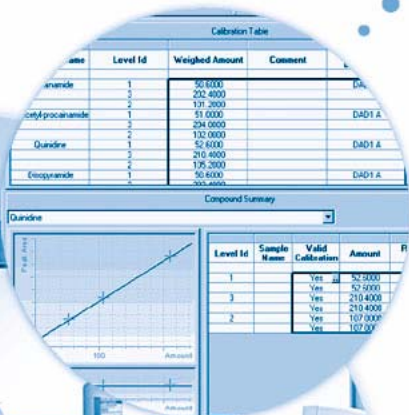
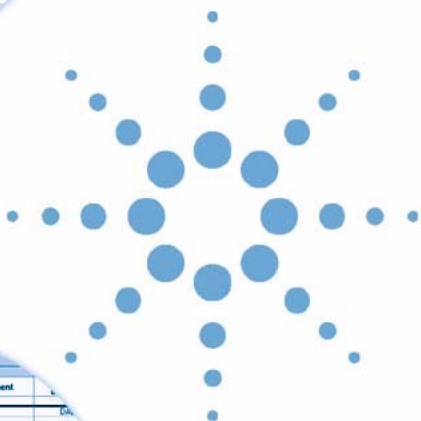


Agilent Cerity ネット ワークデータシステム 医薬品 QA/QC



テクニカルリファレンス ガイド



Agilent Technologies

注意

© Agilent Technologies, Inc. 2003

本マニュアルは米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc. の書面による事前の許可なく、本書の一部または全部を複製することはいかなる形式や方法 (電子媒体による保存や読み出し、外国語への翻訳なども含む) においても禁止されています。

マニュアルパーツ番号

G4000-96043

エディション

12/2003

Printed in Germany

Agilent Technologies Deutschland GmbH
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn, Germany

Microsoft® - Microsoft は米国 Microsoft Corporation の登録商標です。

ソフトウェアリビジョン

本マニュアルは Agilent Cerity ネットワークデータシステム医薬品 QA/QC ソフトウェアの A.02.xx リビジョンに対して有効です。xx は 02 以上のソフトウェアのマイナーリビジョンを表す数字であり、本マニュアルの技術的な正確さに影響を与えるものではありません。

保証

本 マニュアルに含まれる内容は「現状のまま」提供されるもので、将来のエディションにおいて予告なく変更されることがあります。また、Agilent は、適用される法律によって最大限に許可される範囲において、本マニュアルおよびそれに含まれる情報の商品性および特定の目的に対する適合性に関する黙示の保証を含めて (ただしそれだけには限定されない)、いかなる明示または黙示の保証も行いません。Agilent は、本マニュアルまたはそれに含まれる情報の所有、使用、または実行に付随する過誤、または偶然的または間接的な損害に対する責任を一切負わないものとします。Agilent とお客様の間に書面による別の契約があり、本マニュアルの内容に対する保証条項が同文書の条項と矛盾する場合は、別の契約の保証条項が適用されます。

技術ライセンス

本マニュアルで説明されたハードウェアおよびソフトウェアはライセンスに基づいて提供され、該当ライセンスの条項に従って使用またはコピーできます。

安全に関する注意

注意

注意は、危険を表します。これは、正しく実行しなかったり、指示を順守しないと、製品の損害または重要なデータの損失にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起します。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、注意を無視して先に進んではなりません。

警告

警告は、危険を表します。これは、正しく実行しなかったり、指示を順守しないと、人身への傷害または死亡にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起します。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、警告を無視して先に進んではなりません。

本書の内容



このガイドは、上級ユーザー、システム管理者、および Cerity ネットワークデータシステム医薬品 QA/QC のバリデーション担当者向けに書かれたものです。

このガイドには、**Cerity** で結果を算出するための計算の詳細が含まれています。

本書を利用して、システムの機能が必要な要件を満たしているかを検証したり、バリデーション計画で定義されたシステムバリデーションタスクの定義や実行を行うことができます。

以下のリソースにも補足的な情報が含まれています。

- コンテキスト固有のタスク (How To&) に関する情報：ヘルプシステム
- システムのインストールおよびサイトの準備に関する情報：『インストールガイド』
- システム管理の原則とタスクに関する情報：オンラインのシステム管理ガイドヘルプ

Agilent Technologies の製品をお買い上げいただき、有り難うございます。

1 スペクトルの処理

この章では、スペクトル抽出の原理、およびスペクトルによる化合物確認や UV 純度の計算について説明します。

2 キャリブレーション

この章では、キャリブレーション処理で使われる計算の詳細について説明します。

3 定量

この章では、ピークを定量する方法、および定量に使う計算について説明します。

4 カスタム計算の演算子と関数

この章では、Cerity カスタム計算で利用することのできる、算術演算子と関数の概要を説明します。

5 品質管理

この章では、Cerity システムがその本来の機能通りに動作しているかどうかを確認するためのメカニズムについて説明します。

6 システムリファレンス

この章では、システム全体の書式に関する情報を提供すると同時に、XML ファイルによるサンプルやシーケンスのインポートについて詳しく説明します。

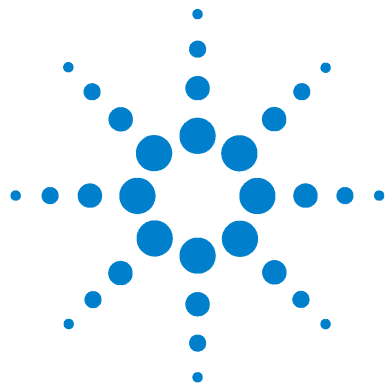
目次

1	スペクトルの処理	9
	スペクトルの取込と処理	10
	スペクトル抽出	11
	波長範囲	11
	ピークスペクトル	11
	バックグラウンド補正	15
	ノイズスレッシュホールド	17
	類似性の計算	18
	UV スペクトル化合物確認	18
	UV 純度の計算	19
	レベル	20
2	キャリブレーション	21
	キャリブレーション曲線近似	22
	折れ線	22
	直線	22
	対数	23
	べき乗	23
	指数	24
	二次式	24
	三次式	25
	平均スロープ	25
	タイムウィンドウリミット値の計算	27
	キャリブレーションテーブルの更新	29

キャリブレーション計算式	31
直線近似	32
二次近似および三次近似	33
対数近似、指数近似、べき乗近似	35
折れ線近似 (固定アマウントのみ)	36
平均レスポンスファクタ近似	37
キャリブレーションポイントの重み付け	37
検量線を評価する	40
相関係数	40
残差標準偏差	41
相対残差	41
範囲曲線	42
3 定量	45
定量の計算	46
キャリブレーションを含まない計算方法	48
レスポンス %	48
レスポンスファクタ	49
補正ファクタ	50
乗数	50
サンプルアマウント	51
キャリブレーションを含む計算方法	52
ESTD の計算	52
ISTD の計算	53
ESTD% および ISTD%	56
補正 % の計算	57
キャリブレーションされていない化合物と同定されていないピークの定量	58
固定レスポンスファクタを使用する定量	58
キャリブレーションされた化合物を使用する間接定量	59

化合物グループの定量	60
ピークグループの定量	60
マルチシグナルの定量	60
4 カスタム計算の演算子と関数	61
算術演算子	62
一般関数	63
統計関数	72
三角関数	74
論理演算子	76
定数関数	78
5 品質管理	79
はじめに	80
薬局方およびその他の規制文書	81
システムスータビリティ	82
ピークのパラメータ	82
品質チェック	93
リミット値チェックの設定	93
リミット値チェック	96
6 システムリファレンス	101
データ書式	102
システムの精度と有効桁数	102
カスタム計算の精度と有効桁数	106
数値書式の規則	108
丸め規則	108
サンプルまたはシーケンスのインポート	110

索引 115



1

スペクトルの処理

スペクトルの取込と処理	10
スペクトル抽出	11
バックグラウンド補正	15
ノイズスレッシュホールド	17
類似性の計算	18
UV 純度の計算	19
レベル	20

この章では、スペクトル抽出の原理、およびスペクトルによる化合物確認や UV 純度の計算について説明します。



スペクトルの取込と処理

Cerity NDS 医薬品 QA/QC では、Agilent 1100 ダイオードアレイ検出器 (DAD)、もしくは、蛍光検出器 (FLD) を使ったスペクトル取込のための機能を用意しています。スペクトルの取込や処理を含むメソッドを作成するには、**Cerity UV スペクトル取込モジュール** のライセンスが必要です。

取得したスペクトルは、以下のような用途に利用することができます。

- 既知のリファレンススペクトルとの比較により、化合物の同定結果を確認する (UV スペクトル化合物確認)
- ピーク中の各スペクトルと頂点スペクトルとの類似性を計算することにより、クロマトグラフピークに含まれる成分の均一性をチェックする (UV 純度)。
- クロマトグラフピーク上の任意の点のスペクトルや、複数ピークの平均を表示する。

バックグラウンド補正 (1 ~ 2 のバックグラウンドスペクトルを差し引く) や縮小波長範囲 (干渉を減らして特異性を際立たせる) は、どのようなスペクトル処理タスクにも取り入れることができます。

注

復元データに含まれるスペクトルデータなどを、単に処理するだけなら、**Cerity UV スペクトル取込モジュール** ライセンスは不要です。

スペクトル抽出

抽出可能なスペクトルの範囲は、取得中のスペクトル保存モードによって異なります。ピーク制御の保存モード（**[頂点 + ベースライン]** および **[頂点 + スロープ + ベースライン]**）では、クロマトグラフピークの限られた数（3 ～ 5）のスペクトルしか利用できないので、**[ピークのすべて]**、**[隔スペクトルすべて]**、**[すべて]**などのスペクトル保存モードの方が、利用できるスペクトルの範囲は広がります。ただし、ピーク制御のモードの方が、必要なデータ保存領域は大幅に少なくなります。

スペクトル処理機能の中には、頂点スペクトル、分析中の任意の位置に最も近いスペクトル、特定の時間範囲の平均スペクトル、ピークの全スペクトルなどを抽出する機能が用意されています。

波長範囲

スペクトルの抽出時には、取り込む波長範囲を指定することができます。ただし、通常は、波長範囲の上下限近くでの望ましくない影響（ノイズ、低レスポンス）を避けるために、波長範囲を狭くして、特徴的なレスポンス帯のスペクトルだけを処理します。波長範囲を制限することは、処理時間や必要なデータ保存領域の削減にも役立ちます。

スペクトル処理に使われる波長範囲のデフォルトは、取り込まれた波長の範囲です。ただし、スペクトル処理に使われる波長の範囲は、上下限を指定して縮小することができます。

ピークスペクトル

UV 純度 の計算や **スペクトルの処理** では、使用するスペクトルの数を少なめにするをお勧めします。スペクトルの数を減らすには、ピークから抽出したスペクトルに対して、**最小レスポンス範囲** を適用します。

スペクトルの数

ピーク頂点、および、頂点から等距離の点（対称ピークの場合）のスペクトルを抽出した結果は、表 1 のようになります。抽出したスペクトルがバックグラウンドスペクトルだった場合には、この組からは除かれます。

表 1 取得データからのスペクトルの抽出

スペクトルの数	抽出位置
3 スペクトル	ピークタイム $-2/3$ ピークのフロント幅 ピークタイム ピークタイム $+2/3$ ピークのテール幅
5 スペクトル	ピークタイム $-4/5$ ピークのフロント幅 ピークタイム $-3/8$ ピークのフロント幅 ピークタイム ピークタイム $+3/8$ ピークのテール幅 ピークタイム $+4/5$ ピークのテール幅
7 スペクトル	ピークタイム -1 ピークのフロント幅 ピークタイム $-6/8$ ピークのフロント幅 ピークタイム $-3/8$ ピークのフロント幅 ピークタイム ピークタイム $+3/8$ ピークのテール幅 ピークタイム $+6/8$ ピークのテール幅 ピークタイム $+1$ ピークのテール幅

表 1 取得データからのスペクトルの抽出 (続き)

スペクトルの数	抽出位置
9 スペクトル	ピークタイム -9/8 ピークのフロント幅
	ピークタイム -7/8 ピークのフロント幅
	ピークタイム -5/8 ピークのフロント幅
	ピークタイム -3/8 ピークのフロント幅
	ピークタイム
	ピークタイム +3/8 ピークのテール幅
	ピークタイム +5/8 ピークのテール幅
	ピークタイム +7/8 ピークのテール幅
	ピークタイム +9/8 ピークのテール幅

1 スペクトルの処理

スペクトル抽出

表 1 では次の式を使用しています。

$$peak\ front\ width = 1.9 \times width \times symmetry / (symmetry + 1)$$

および

$$peak\ tail\ width = 1.9 \times width - peak\ front$$

これにより、スペクトル抽出時に、ピークの対称性が考慮に入れられることが保証されます。

最小レスポンス範囲

スペクトルのレスポンス範囲は、以下のように計算されます。

$$Response\ range = Maximum\ response - Minimum\ response$$

抽出されたスペクトルは、レスポンス範囲が最小値を下回っていないかどうかチェックされ、該当するスペクトルは、スペクトルの組から除かれます。

組に残ったスペクトルは、**UV 純度** の計算や**スペクトルの処理**に利用することができます。

バックグラウンド補正

バックグラウンド補正用のスペクトルの指定は、自動と手動の両方で行うことができます。

自動

この場合、ピーク開始位置もしくは終了位置から、1 ～ 2 個のバックグラウンドスペクトルを抽出することができます。したがって、この場合のバックグラウンドスペクトルは、ピーク固有のものになります。

手動

この場合、分析中の任意の位置から、1 ～ 2 個のバックグラウンドスペクトルを抽出することができます。この場合、ピークごとに別々のバックグラウンドスペクトルを選択することも、分析中の全ピークに同一のバックグラウンドスペクトルを使うことも可能です。

バックグラウンド補正の計算

バックグラウンドスペクトルが 1 つしかない場合、抽出した全スペクトルからバックグラウンドスペクトルが差し引かれます。

バックグラウンドスペクトルが 2 つある場合、スペクトルを抽出した位置に応じて、2 つのバックグラウンドスペクトルを線形補間したものを差し引きます。補間スペクトルは、以下のよう

$$S_t = \left(\frac{t_2 - t}{t_2 - t_1} \right) S_{t_1} + \left(\frac{t - t_1}{t_2 - t_1} \right) S_{t_2}$$

各用語の意味は次のとおりです。

t = 抽出スペクトルの時間

t_1 = バックグラウンドスペクトル 1 の時間

t_2 = バックグラウンドスペクトル 2 の時間

S_t = 補間バックグラウンドスペクトル

1 スペクトルの処理

バックグラウンド補正

S_{t_1} = バックグラウンドスペクトル 1

S_{t_2} = バックグラウンドスペクトル 2

ノイズスレッシュホールド

ノイズスレッシュホールド は、スペクトル確認や UV 純度のスペクトルの比較に、ノイズ以外のデータポイントだけが使われることを保証するため使われます。**ノイズスレッシュホールド** を下回るデータポイントは、スペクトル類似性の計算に使用されません。

類似性の計算

2 つのスペクトル $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ 、および、 $y = (y_1, y_2, \dots, y_N)$ は、 N 個のデータポイントを使ってピアソンの相関係数 r を計算することにより、比較されます。

$$r = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}}$$

相関係数の計算に使われるのは、値が**ノイズスレッショールド**（17 ページの「**ノイズスレッショールド**」参照）より大きなデータポイントだけです。ノイズスレッショールドが 0 の場合には、すべてのポイントが使われます。

さらに、このピアソンの相関係数を二乗して、0 ～ 1000 の範囲に線形にスケールしたものが、類似性の値として計算されます。このスケールは、回帰直線の傾きに依存します。傾き s が負の場合、2 つのスペクトルは負の相関（ r も負）を持ちます。高い類似値を持つのは、正の相関をもつスペクトル同士だけです。負の相関を持つスペクトルは、0 ～ 10 の範囲にスケールされます。

$s \geq 0$ の場合、類似値 = $1000r^2$

$s < 0$ の場合、類似値 = $10r^2$

UV スペクトル化合物確認

UV スペクトル化合物確認のリポートに使われる類似値は、ピークの頂点スペクトルを、既知のリファレンスペクトルと比較することにより得られます。

UV 純度の計算

抽出されたピークスペクトルは、指定に応じて、バックグラウンド補正されます。さらに、（頂点スペクトルを除いて）それぞれ頂点スペクトルと比較され、類似値が計算されます（[18 ページの「類似性の計算」](#)参照）。そして、この類似値の平均をとることにより、純度値が計算されます。

残差スペクトル

計算されるスペクトルとしては、抽出されたピークスペクトルやバックグラウンドスペクトル以外に、残差スペクトルというものがあります。残差スペクトルは、頂点スペクトルから（頂点スペクトル以外の）各抽出スペクトルを差し引くことにより計算されます。残差スペクトルは、表示することが可能です。

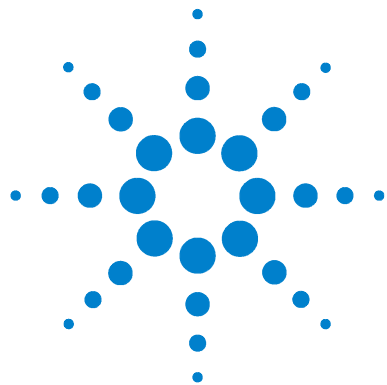
レベル

化合物確認（類似値）やピーク純度（純度値）のリポートに対しては、3 つの通知レベルを利用することができます。この 3 つのレベルは、2 つのスレッシュホールド値を使って設定します。

- **警告** というのは、類似値（化合物確認の場合）や純度値（UV 純度の場合）がこの値を超えると、緑の背景に**承認** の通知が表示されるというスレッシュホールドです。
- **却下** というのは、類似値（化合物確認の場合）や純度値（UV 純度の場合）がこの値より低くなると、赤の背景に**却下** の通知が表示されるというスレッシュホールドです。

類似値（化合物確認の場合）や純度値（UV 純度の場合）が、**警告** スレッシュホールドと **却下** スレッシュホールドの間になった場合には、黄色の背景に **警告** の通知が表示されます。

警告 スレッシュホールドと **却下** スレッシュホールドに同一の値が設定された場合には、**承認** と **却下** だけが通知されます。



2

キャリブレーション

キャリブレーション曲線近似	22
タイムウィンドウリミット値の計算	27
キャリブレーションテーブルの更新	29
キャリブレーション計算式	31
検量線を評価する	40

この章では、キャリブレーション処理で使われる計算の詳細について説明します。



キャリブレーション曲線近似

マルチレベルキャリブレーションでは、次のようなさまざまな曲線近似計算を使用できます。

折れ線

線分を使用して、キャリブレーションポイントを接続します。

原点を処理する方法には、次のいずれかを選択します。

無視する： 最小キャリブレーションポイントより前の部分の曲線は、折れ線中の最初の線分を外挿することにより作成されます。キャリブレーションポイントが少なくとも 2 つ必要です。

含める： 原点は、キャリブレーションポイントとして使用されます。他のキャリブレーションポイントが少なくとも 1 つ必要です。

強制： 折れ線の場合は、[含める] と同じです。

接続： 折れ線の場合は、[含める] と同じです。

直線

この場合、近似曲線は、キャリブレーションテーブル中のデータポイントに対して、最小二乗近似を適用することによって得られる直線になります。この曲線の式は次のとおりです。

$$y = mx + b$$

変数の意味は次のとおりです。

x = 化合物のアマウント

y = 面積または高さ単位のレスポンス（カウント）

m = 直線の傾き

b = y - 切片

原点を処理する方法には、次のいずれかを選択します。

無視する：原点は使用されません。キャリブレーションポイントが少なくとも 2 つ必要です。

含める：原点は、キャリブレーションポイントとして使用されます。他のキャリブレーションポイントが少なくとも 1 つ必要です。

強制：式 $y=mx+b$ のオフセット項 b を強制的に 0 とみなします。つまり、 $y=mx$ という形の式を使います。キャリブレーションポイントが少なくとも 1 つ必要です。

接続：[無視する] と似ていますが、最低物質質量から原点に向かって直線を引きます。キャリブレーションポイントが少なくとも 1 つ必要です。

対数

対数曲線近似の式は次のとおりです。

$$y = m \times \ln(x) + b$$

自然対数が使用されます。

原点を処理する方法には、次のいずれかを選択します。

無視する：原点は使用されません。キャリブレーションポイントが少なくとも 2 つ必要です。

含める：この種類の曲線には適用できません。

強制：この種類の曲線には適用できません。

接続：最低物質質量から原点に向かって直線が引かれます。キャリブレーションポイントが少なくとも 1 つ必要です。

べき乗

べき乗曲線近似の式は、次のようになります。

$$y = b \times x^m$$

2 キャリブレーション

キャリブレーション曲線近似

この種類の曲線では、少なくとも 2 つのキャリブレーションポイントが必要です。

原点を処理する方法には、次のいずれかを選択します。

無視する：原点は使用されません。キャリブレーションポイントが少なくとも 2 つ必要です。

含める：この種類の曲線には適用できません。

強制：この種類の曲線には適用できません。

接続：最低物質質量から原点に向かって直線が引かれます。キャリブレーションポイントが少なくとも 1 つ必要です。

指数

指数曲線近似の式は、次のようになります。

$$y = b \times \exp(x \times m)$$

原点を処理する方法には、次のいずれかを選択します。

無視する：原点は使用されません。キャリブレーションポイントが少なくとも 2 つ必要です。

含める：この種類の曲線には適用できません。

強制：この種類の曲線には適用できません。

接続：最低物質質量から原点に向かって、直線を引きます。

二次式

二次曲線近似の式は、次のようになります。

$$y = ax^2 + bx + c$$

この種類の曲線では、少なくとも 2 つのキャリブレーションポイントが必要です。

原点を処理する方法には、次のいずれかを選択します。

無視する：原点は使用されません。キャリブレーションポイントが少なくとも 3 つ必要です。

含める：原点は、キャリブレーションポイントとして使用されます。キャリブレーションポイントが少なくとも 2 つ必要です。

強制：式 $y = ax^2 + bx + c$ のオフセット項 c を強制的に 0 とみなします。つまり、 $y = ax^2 + bx$ という形の式を使います。

接続：最低物質質量から原点に向かって、直線を引きます。

三次式

三次曲線近似の式は、次のようになります。

$$y = ax^3 + bx^2 + cx + a$$

この種類の曲線では、少なくとも 3 つのキャリブレーションポイントが必要です。

原点を処理する方法には、次のいずれかを選択します。

無視する：原点は使用されません。キャリブレーションポイントが少なくとも 4 つ必要です。

含める：原点は、キャリブレーションポイントとして使用されます。その他のキャリブレーションポイントが少なくとも 3 つ必要です。

強制：式 $y = ax^3 + bx^2 + cx + d$ のオフセット項 d を強制的に 0 とみなします。つまり、 $y = ax^3 + bx^2 + cx$ という形の式を使います。

接続：最低物質質量から原点に向かって、直線を引きます。

平均スロープ

平均曲線近似の式は、次のようになります。

$$r = \text{average of (Response/Amount)} \times .$$

2 キャリブレーション

キャリブレーション曲線近似

この直線は、常に原点を通過します。原点処理のオプションは適用されません。

タイムウィンドウリミット値の計算

タイムリファレンスピークと ISTD リファレンスピークの絶対時間の計算は、次の式で行われます。

$$\begin{aligned} \text{Low Time Limit} &= (\text{Exp Time} - \text{Ref Time Window}_{Abs}/2) \\ &\quad - (\text{Ref Time Window}_{Rel} \times \text{Exp Time}/200) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{High Time Limit} &= (\text{Exp Time} + \text{Ref Time Window}_{Abs}/2) \\ &\quad + (\text{Ref Time Window}_{Rel} \times \text{Exp Time}/200) \end{aligned}$$

タイムリファレンスピークと ISTD リファレンスピークの相対時間の計算は、次の式で行われます。

$$\begin{aligned} \text{Low Rel Time Limit} &= \text{Exp Rel Time} - \text{Ref Time Window}_{Abs} \times \text{Exp Rel Time} \\ &\quad / \text{Exp Time} \\ &\quad - (\text{Ref Time Window}_{Rel} \times \text{Exp Rel Time}/200) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{High Rel Time Limit} &= \text{Exp Rel Time} + \text{Ref Time Window}_{Abs} \times \text{Exp Rel Time} \\ &\quad / \text{Exp Time} \\ &\quad + (\text{Ref Time Window}_{Rel} \times \text{Exp Rel Time}/200) \end{aligned}$$

他のすべてのピークの絶対タイムの計算は、次の式で行われます。

$$\begin{aligned} \text{Low Time Limit} &= (\text{Exp Time} - \text{Time Window}_{Abs}/2) \\ &\quad - (\text{Time Window}_{Rel} \times \text{Exp Time}/200) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{High Time Limit} &= (\text{Exp Time} + \text{Time Window}_{Abs}/2) \\ &\quad + (\text{Time Window}_{Rel} \times \text{Exp Time}/200) \end{aligned}$$

2 キャリブレーション

タイムウィンドウリミット値の計算

相対時間の計算は、次の式で行われます。

$$\begin{aligned} &Low\ Rel\ Time\ Limit \\ &= Exp\ Rel\ Time - Time\ Window_{Abs} \times Exp\ Rel\ Time / Exp\ Time \\ &\quad - (Time\ Window_{Rel} \times Exp\ Rel\ Time / 200) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &High\ Rel\ Time\ Limit \\ &= Exp\ Rel\ Time + Time\ Window_{Abs} \times Exp\ Rel\ Time / Exp\ Time \\ &\quad + (Time\ Window_{Rel} \times Exp\ Rel\ Time / 200) \end{aligned}$$

上の式で、各略語の意味は次のとおりです。

Exp = 予想

Rel = 相対

Abs = 絶対

Ref = リファレンス

キャリブレーションテーブルの更新

浮動平均を利用したリテンションタイム更新

浮動平均では、新しいキャリブレーション値を、重み付けされた測定値を使って計算します。計算は次のとおりです。

$$\text{Exp Time} = (1 - \text{Time Update Weight}/100) \times \text{Exp Time} + \text{Time Update Weight}/100 \times \text{Meas Time}$$

$$\text{Exp Rel Time} = (1 - \text{Time Update Weight}/100) \times \text{Exp Rel Time} + \text{Time Update Weight}/100 \times \text{Rel Time}$$

各用語の意味は次のとおりです。

Exp Time および *Exp Rel Time* は、キャリブレーション情報の予想時間および予想相対時間です

Time Update Weight は、新しい測定値の重み係数です。*Meas Time* および *Rel Time* は、ピーク結果の測定時間および相対時間です

固定アマウントキャリブレーションにおけるキャリブレーションポイントの平均計算

最後にキャリブレーション値が置換された後の平均の計算は、次のように行われます。

$$\text{Area} = \frac{\text{Value Counter} \times \text{Cal Point Area} + \text{Meas Area}}{\text{Value Counter} + 1}$$

$$\text{Height} = \frac{\text{Value Counter} \times \text{Cal Point Height} + \text{Meas Height}}{\text{Value Counter} + 1}$$

$$\text{Amount} = \frac{\text{Value Counter} \times \text{Amount} + \text{Known Amount}}{\text{Value Counter} + 1}$$

各用語の意味は次のとおりです。

Meas Area および *Meas Height* は、測定されたピークの面積および高さです。

2 キャリブレーション

キャリブレーションテーブルの更新

Known Amount は、キャリブレーション標準内の化合物のアマウントです。

ISTD メソッド

ISTD 計算では、高さ、面積、およびアマウントの生データが、その化合物と ISTD のレスポンス比に置換されます。検量線は、キャリブレーションポイントのレスポンス比とアマウント比から計算されます。たとえば、平均の計算は次のように行われます。

$$\text{Area Ratio} = \frac{\text{Value Counter} \times \text{Cal Point Area Ratio} + \text{Meas Area Ratio}}{\text{Value Counter} + 1}$$

$$\text{Height Ratio} = \frac{\text{Value Counter} \times \text{Cal Point Height Ratio} + \text{Meas Height Ratio}}{\text{Value Counter} + 1}$$

$$\text{Amount Ratio} = \frac{\text{Value Counter} \times \text{Amount Ratio} + \text{Meas Amount Ratio}}{\text{Value Counter} + 1}$$

各用語の意味は次のとおりです。

$$\text{Meas Area Ratio} = \text{Area}_x / \text{Area}_{\text{ISTD}}$$

$$\text{Meas Height Ratio} = \text{Height}_x / \text{Height}_{\text{ISTD}}$$

$$\text{Meas Amount Ratio} = \text{Amount}_x / \text{Amount}_{\text{ISTD}}$$

キャリブレーション計算式

マルチレベルキャリブレーションは、分析プロセスの非線形性を検証したり、補正したりするために使用されます。非線形レスポンスまたはゼロポイントオフセットは、既知のアマウントと測定レスポンスの組（キャリブレーションポイント）に一致する検量線を使ってモデル化されます。物質未知ピークのアマウントは、固定レスポンスファクタの代わりに曲線計算式を使って計算されます。

キャリブレーションと曲線を照合することによって、最適な検量線が計算されます。この曲線は、最小二乗近似（LSQ）に基づいて計算されます。LSQ は、残差の平方の総和を最小化する多項式を使用します。この曲線近似が、加重されたレスポンスとアマウントに適用されます。

$$\sum (Weight \times (Area - Calculated Area)^2)$$

または

$$\sum (Weight \times (Height - Calculated Height)^2)$$

変数は以下の式で求めます。

加重は、キャリブレーションポイントに対する重み付け係数です（37 ページの「キャリブレーションポイントの重み付け」を参照）。

面積および**高さ**は、測定されたレスポンスです。

計算された面積および**計算された高さ**は、そのキャリブレーションポイントアマウントで、検量線から読み取られたレスポンスです。

非線形曲線、対数、指数、およびべき乗の計算は、次の手順に従います。

- 1 最初に軸が非線形スケールに変換される。
- 2 線形 LSQ 近似が適用される。
- 3 結果の曲線が元の非線形座標に変換される。

2 キャリブレーション

キャリブレーション計算式

キャリブレーションされたすべてのピークには独自の検量線があり、それらを個別に選択できます。

原点の処理

検量線の計算時には、原点を処理する方法を以下の 4 つから選択できます。

- | | |
|----------------|--|
| 原点を無視する | 原点は無視されます。 |
| 原点を含める | ポイント (0, 0) がキャリブレーションポイントの 1 つに追加されます。 |
| 原点を強制する | 曲線のオフセット項を 0 にします。 |
| 原点と接続する | 曲線の計算では原点が無視されます。原点と最低のアマウントポイントの間に線分が引かれます。 |

次の式で、 x はアマウントまたはアマウント比 (ISTD メソッドの場合)、 y はレスポンス (面積、高さ) またはレスポンス比 (面積比、高さ比)、 wt は重み係数 (デフォルトは 1) にそれぞれ対応します。

直線近似

$$y = a + bx$$

変数は以下の式で求めます。

$$a = \frac{\sum(x^2 \times wt) \times \sum(y \times wt) - \sum(x \times y \times wt) \times \sum(x \times wt)}{\sum(wt) \times \sum(x^2 \times wt) - \sum(x \times wt)^2}$$
$$b = \frac{\sum(wt) \times \sum(x \times y \times wt) - \sum(x \times wt) \times \sum(y \times wt)}{\sum(wt) \times \sum(x^2 \times wt) - \sum(x \times wt)^2}$$

直線近似には、少なくとも 2 つのキャリブレーションポイントが必要です。

原点を含める

原点を含めると、点 (0, 0) が追加され、それ以外の点の重みの平均値で重み付けされます。つまり、 $\Sigma(wt)$ の項が、他の点の重みの平均値分だけ増加します。

原点を強制する

原点を強制する場合、曲線の計算式は次のようになります。

$$y = bx$$

変数は以下の式で求めます。

$$b = \frac{\sum(x \times y \times wt)}{\sum(x^2 \times wt)}$$

原点を含めるか、原点を強制する場合、必要なキャリブレーションポイントは 1 つだけです。

二次近似および三次近似

二次および三次の曲線近似の計算式は次のとおりです。

二次近似

$$y = a + bx + cx^2$$

三次近似

$$y = a + bx + cx^2 + dx^3$$

ここで、各係数は次の連立一次方程式から得られます。

二次近似

$$\sum(wt) \times a + \sum(x \times wt) \times b + \sum(x^2 \times wt) \times c = \sum(y \times wt)$$

2 キャリブレーション

キャリブレーション計算式

$$\sum (x \times wt) \times a + \sum (x^2 \times wt) \times b + \sum (x^3 \times wt) \times c = \sum (x \times y \times wt)$$

$$\sum (x^2 \times wt) \times a + \sum (x^3 \times wt) \times b + \sum (x^4 \times wt) \times c = \sum (x^2 \times y \times wt)$$

三次近似

$$\begin{aligned} \sum (wt) \times a + \sum (x \times wt) \times b + \sum (x^2 \times wt) \times c + \sum (x^3 \times wt) \times d \\ = \sum (y \times wt) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sum (x \times wt) \times a + \sum (x^2 \times wt) \times b + \sum (x^3 \times wt) \times c + \sum (x^4 \times wt) \times d \\ = \sum (x \times y \times wt) \end{aligned}$$

$$wt) \times a + \sum (x^3 \times wt) \times b + \sum (x^4 \times wt) \times c + \sum (x^5 \times wt) \times d = \sum (x^2 \times$$

$$wt) \times a + \sum (x^4 \times wt) \times b + \sum (x^5 \times wt) \times c + \sum (x^6 \times wt) \times d = \sum (x^2 \times$$

二次近似には少なくとも 3 つ、三次近似には少なくとも 4 つのキャリブレーションポイントが必要です。

原点を含める

原点を含めると、点 (0, 0) が追加され、それ以外の点の重みの平均値で重み付けされます。つまり、 $S(wt)$ の項が、他の点の重みの平均値分だけ増加します。

原点を強制する

原点を強制する場合、連立一次方程式を解く際に、オフセット項 a が 0 とみなされます。

原点を含めるか、原点を強制する場合、二次曲線近似には 2 つ、三次曲線近似には 3 つのキャリブレーションポイントが必要です。

対数近似、指数近似、べき乗近似

対数、指数、および、べき乗の曲線近似の計算式は次のとおりです。

対数

$$y = a + b \times \ln(x)$$

指数

$$y = a \times \exp(b \times x)$$

べき乗

$$y = a \times x^b$$

対数近似、指数近似、および、べき乗近似を計算する際には、アマウントやレスポンスのスケールが $\ln()$ 関数を使って変換されます。変換されたデータに直線近似と加重係数が適用され、曲線は変換されたデータに基づいて計算されます。極度に非線形の曲線以外は、近似は最小二乗法で行われます。

変換計算式を次に示します。

対数

アマウントスケールが変換されます。

$$x' = \ln(x), y' = y$$

指数

レスポンススケールが変換されます。

$$x' = x, y' = \ln(y)$$

べき乗

アマウントスケールとレスポンススケールが変換されます。

$$x' = \ln(x), y' = \ln(y)$$

原点の処理

$\ln()$ 関数は原点が特異点になっているので、原点を含めるオプションと原点を強制するオプションは無効です。べき乗曲線は、選択されたオプションにかかわらず常に原点を通ります。

折れ線近似 (固定アマウントのみ)

折れ線近似では、キャリブレーションポイントが線分で結ばれます。このアルゴリズムは、キャリブレーションポイントから、測定ポイントの上下にある最も近いレスポンスのポイントを探索します。折れ線近似を使うと、任意のキャリブレーションポイント集合を通過する検量線を作成することができます。

すべてのレベルより上の線分は、2 つの最高レベル間の線分から外挿されます。

最小区間の線分をどのように作成するかは、原点の処理方法の選択によって異なります。

原点を無視する

下から 2 番目までのキャリブレーションポイントを外挿したものが、最小区間の線分になります。計算式は次のとおりです。

$$y = a + bx$$

原点を含める、原点を強制する、原点と接続する

原点とレスポンス最小のキャリブレーションポイントを結んだものが、最小区間の線分になります。計算式は次のとおりです。

$$y = bx$$

測定されたレスポンスが不明なので、リキャリブレーション中に折れ線は計算できません。線分の検索と計算は、定量プロセスの間に行われます。

平均レスポンスファクタ近似

全キャリブレーションポイントのレスポンスファクタ（レスポンス / アマウント）の加重平均が計算されます。この曲線の式は次のとおりです。

$$y = bx$$

変数は以下の式で求めます。

$$b = \frac{\sum((y/x) \times wt)}{\sum(wt)}$$

原点の設定は無視されます。

キャリブレーションポイントの重み付け

曲線の生成に使われるさまざまなキャリブレーションポイントには、キャリブレーションアマウントの違いによるレスポンスの変動を補正するための、相対的な重み（つまり重要度）を指定することができます。重み付けでは、以下のオプションを選択することができます。

- 均等** すべてのキャリブレーションポイントの重みを等しくします。
- # キャリブレーション** キャリブレーションポイントのリキャリブレーション回数に応じた重み付けを行います。リキャリブレーションの回数による加重は、固定アマウントキャリブレーションでのみ利用できません。
- 直線 (x)** キャリブレーションポイントは、 $1 / \text{アマウント}$ を係数として重み付けされます。ただし、このアマウントは最小アマウントにノーマライズされているので、重みの最大値は常に 1 になります。原点が含まれる場合、原点には、それ以外のキャリブレーションポイントの重みの平均値が割り当てられます。
- 直線 (y)** キャリブレーションポイントは、 $1 / \text{レスポンス}$ を係数として重み付けされます。ただし、このレスポンスは最小レスポンスにノーマライズされているので、重みの最大値は常に 1 になります。原点が含まれる場合、原点には、それ以外のキャリブレーションポイントの重みの平均値が割り当てられます。

2 キャリブレーション

キャリブレーション計算式

二次式 (x) キャリブレーションポイントは、 $1 / \text{アマウント}^2$ を係数として重み付けされます。ただし、このアマウントは最小アマウントにノーマライズされているので、重みの最大値は常に 1 になります。二次式によるキャリブレーションポイントの重み付けは、たとえば、分散したキャリブレーションポイントの調整に使います。これにより、原点に近いキャリブレーションポイント（通常、より正確に測定される）には、原点から遠くて分散したキャリブレーションポイントより大きな加重値が与えられます。

二次式 (y) キャリブレーションポイントは、 $1 / \text{レスポンス}^2$ を係数として重み付けされます。ただし、このレスポンスは最小レスポンスにノーマライズされているので、重みの最大値は常に 1 になります。二次式によるキャリブレーションポイントの重み付けは、たとえば、分散したキャリブレーションポイントの調整に使います。これにより、原点に近いキャリブレーションポイント（通常、より正確に測定される）には、原点から遠くて分散したキャリブレーションポイントより大きな加重値が与えられます。

Log (x) キャリブレーションポイントは、 $1 / \log_{10}(\text{アマウント})$ を係数として重み付けされます。

Log (y) キャリブレーションポイントは、 $1 / \log_{10}(\text{レスポンス})$ を係数として重み付けされます。

Ln (x) キャリブレーションポイントは、 $1 / \log_e(\text{アマウント})$ を係数として重み付けされます。

Ln (y) キャリブレーションポイントは、 $1 / \log_e(\text{レスポンス})$ を係数として重み付けされます。

ユーザー定義 重みをユーザーが設定することができます。これは再計算されません。

キャリブレーションポイントの加重に使用される式は次のとおりです。

均等 $wt = 1$

キャリブレーション $wt = \frac{\text{Min. Update Count}}{\text{UpdateCounter}}$

$$\text{直線 (x)} \quad wt = \frac{\text{Min. Amount}}{\text{Amount}}$$

$$\text{直線 (y)} \quad wt = \frac{\text{Min. Response}}{\text{Response}}$$

$$\text{二次式 (x)} \quad wt = \frac{\text{Min. (Response)}^2}{(\text{Amount})^2}$$

$$\text{二次式 (y)} \quad wt = \frac{\text{Min. (Response)}^2}{(\text{Response})^2}$$

$$\text{Log (x)} \quad wt = \frac{\text{Min. (log(Amount))}}{\log(\text{Amount})}$$

$$\text{Log (y)} \quad wt = \frac{\text{Min. (log(Response))}}{\log(\text{Response})}$$

$$\text{Ln (x)} \quad wt = \frac{\text{Min. (ln(Amount))}}{\ln(\text{Amount})}$$

$$\text{Ln (y)} \quad wt = \frac{\text{Min. (ln(Response))}}{\ln(\text{Response})}$$

Min. は、それぞれ、検量線上のすべてのポイントの最小値です。

どのキャリブレーションポイントの重み付けを使用するかは、メソッドの要件に応じて決めてください。

検量線を評価する

検量線のキャリブレーションポイントに対する近似の質や、異常値（曲線から遠く離れた測定値）の存在は、統計的な計算を使って評価することができます。検量線に対しては、各曲線の相関係数や相対標準偏差、および、各キャリブレーションポイントの相対残差値の計算機能が用意されています。

相関係数

相関係数は、検量線のデータポイント間の近似度を示す尺度になります。次の式を使って計算されます。

$$relation\ coefficient = \frac{\sum((y_i - y) \times (Y_i - Y) \times wt_i)}{\sqrt{\sum((y_i - y)^2 \times wt_i) \times \sum((Y_i - Y)^2 \times wt_i)}}$$

各変数の意味は次のとおりです。

y_i = レスポンス（面積または高さ）の測定値。

Y_i = レスポンスの予測値（検量線の値を使用）

wt_i = データポイントの重み

y および Y は、それぞれ、レスポンスの測定値と予測値の平均値で、次の式で計算されます。

$$y = \frac{\sum(y_i \times wt_i)}{\sum(wt_i)} \quad \text{および} \quad Y = \frac{\sum(Y_i \times wt_i)}{\sum(wt_i)}$$

曲線に原点を強制した場合、点の中心は原点にあると想定され（第 3 象限に反射される）、平均値は 0 に設定されます。

近似が完全な場合、もしくは、点が曲線の周りに対称に分布している場合には、相関係数は 1 になります。キャリブレーションポイントの分布が非対称的になればなるほど、相関係数は小

さくなります。相関係数の一般的な値は 0.99 ～ 1 です。相関係数は、曲線の近似の質を測る尺度としては、それほど感度はよくありません。

残差標準偏差

残差標準偏差（RSD、平均二乗誤差とも呼ばれる）は、次の式を使って計算されます。

$$RSD = \sqrt{\frac{\sum (y_i - Y_i)^2}{(degrees\ of\ freedom)}}$$

各変数の意味は次のとおりです。

y_i = レスポンス（面積または高さ）の測定値。

Y_i = レスポンスの予測値（検量線の値を使用）

自由度は、次のとおりです。

($n-2$) : 直線

($n-3$) : 二次曲線

($n-4$) : 三次曲線

原点を含めるか、原点を強制する検量線タイプの場合は、原点 (0, 0) が RSD 計算のポイントに含まれます。y 値は加重されません。

RSD は、相関係数より曲線の品質を敏感に反映する尺度です。完全な近似の場合、RSD は 0 です。キャリブレーションポイントが曲線から離れるにつれ、値は増加します。

相対残差

各キャリブレーションポイントの相対残差は、次の式を使って計算されます。

$$Relative\ residual = (y_i - y) / y$$

2 キャリブレーション 検量線を評価する

各変数の意味は次のとおりです。

y_i = レスポンス（面積または高さ）の測定値。

y = 次の式で計算される、レスポンス測定値の平均値

$$y = \frac{\sum (y_i \times wt_i)}{\sum (wt_i)}$$

範囲曲線

範囲曲線は検量線の上にプロットされ、異常値のリミット値をビジュアルに示したり、統計的なリミット値に照らして測定データを評価するために使用できます。測定データの変動は、キャリブレーションテストの変動と同じであると想定されます。限界（残差）曲線で利用できるオプションは次のとおりです。

StdDev	範囲曲線は、検量線の上下の標準偏差の位置にプロットされます。
2* StdDev	範囲曲線は、検量線の上下の標準偏差の 2 倍の位置にプロットされます。
3* StdDev	範囲曲線は、検量線の上下の標準偏差の 3 倍の位置にプロットされます。

加重係数がない直線の場合のみ

80% t 検定	測定値の 80% がこのリミット値内に入ります。
90% t 検定	測定値の 90% がこのリミット値内に入ります。
95% t 検定	測定値の 95% がこのリミット値内に入ります。
99% t 検定	測定値の 99% がこのリミット値内に入ります。

t 検定値は、43 ページの表 2 に示されています。この値は、検量線の自由度に依存します。t 検定値は、曲線の実際の自由度に基づいて、表 2（出典：Albert H. Bowker & Gerald J. Lieberman, *Engineering Statistics*, p. 603）の値の間が補間されます。

表 2 t 検定リミット値テーブル

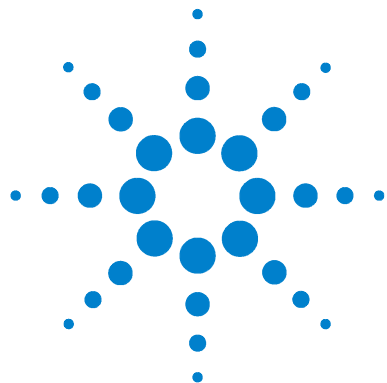
t 検定値				
80%	90%	95%	99%	自由度
3. 078	6. 314	12. 706	63. 657	1
1. 886	2. 920	4. 303	9. 925	2
1. 638	2. 353	3. 182	5. 841	3
1. 533	2. 132	2. 776	4. 604	4
1. 476	2. 015	2. 571	4. 032	5
1. 440	1. 943	2. 447	3. 707	6
1. 415	1. 895	2. 365	3. 499	7
1. 397	1. 860	2. 306	3. 355	8
1. 383	1. 833	2. 262	3. 250	9
1. 372	1. 812	2. 228	3. 169	10
1. 363	1. 796	2. 201	3. 106	11
1. 356	1. 782	2. 179	3. 055	12
1. 350	1. 771	2. 160	3. 012	13
1. 345	1. 761	2. 145	2. 977	14
1. 341	1. 753	2. 131	2. 947	15
1. 337	1. 746	2. 120	2. 921	16
1. 333	1. 740	2. 110	2. 898	17
1. 330	1. 734	2. 101	2. 878	18
1. 328	1. 729	2. 093	2. 861	19
1. 325	1. 725	2. 086	2. 845	20
1. 323	1. 721	2. 080	2. 831	21
1. 321	1. 717	2. 074	2. 819	22
1. 319	1. 714	2. 069	2. 807	23
1. 318	1. 711	2. 064	2. 797	24

2 キャリブレーション

検量線を評価する

表 2 t 検定リミット値テーブル (続き)

t 検定値				
80%	90%	95%	99%	自由度
1.316	1.708	2.060	2.787	25
1.315	1.706	2.056	2.779	26
1.314	1.703	2.052	2.771	27
1.313	1.701	2.048	2.763	28
1.311	1.699	2.045	2.756	29
1.310	1.697	2.042	2.750	30
1.303	1.684	2.021	2.704	40
1.296	1.671	2.000	2.660	60
1.289	1.658	1.980	2.617	120
1.282	1.645	1.960	2.576	無限



3 定量

定量の計算	46
キャリブレーションを含まない計算方法	48
レスポンスファクタ	49
補正ファクタ	50
キャリブレーションを含む計算方法	52
キャリブレーションされていない化合物と同定されていない ピークの定量	58
化合物グループの定量	60
ピークグループの定量	60
マルチシグナルの定量	60

この章では、ピークを定量する方法、および定量に使う計算について説明します。



定量の計算

定量の計算では、ピークレスポンスの測定値を化合物アマウントに変換します。混合物中の各成分の物質量を求める計算方法としては、以下のようなものが利用できます。

- 面積または高さのパーセント（面積％、または高さ％）
- ノーマライズ（補正％）
- 外部標準（ESTD）
- ESTD %
- 内部標準（ISTD）
- STD %

未知サンプル中の化合物の物質量の決定には、定量タイプによって異なる計算方法が使われます。この計算には、ピーク面積もしくはピーク高さのどちらかが使われ、それぞれ異なるタイプのレポートが生成されます。計算とレポートは互いに独立しています。

ESTD のキャリブレーションおよび定量の計算は、ピークの面積もしくは高さの測定値に基づいて行われます。ISTD のキャリブレーションおよび定量の計算は、相対レスポンスと相対アマウントに基づいて行われます（49 ページの [図 1](#) を参照）。面積％、高さ％、ESTD（もしくは ISTD）、ESTD％（もしくは ISTD％）は、それぞれ並行して計算されます。

注

同一のキャリブレーションデータから ESTD と ISTD を計算することはできません。

補正％の結果は、メソッド（キャリブレーション）タイプによって、ESTD または ISTD のどちらかの結果から求められます。

化合物の定量には、以下の 3 つのメソッドが利用できます。

- 化合物固有のキャリブレーションデータを使用する。

- 各ピークに固定レスポンスファクタを適用する（マニュアルキャリブレーション）。
- 間接的に別の化合物のレスポンスファクタを使用する。

特定の化合物に対してだけ、定量計算を行わないように指定することも可能です。この場合、指定された化合物のアマウントは 0 として扱われます。

キャリブレーションを含まない計算方法

キャリブレーションを含まない計算方法では、キャリブレーションテーブルは不要です。

レスポンス %

レスポンス %（面積 % と高さ %）は、各ピークのレスポンス（面積または高さ）の、分析中の全ピークのレスポンス合計に対する割合（%）として計算されます。レスポンス % の計算は、事前のキャリブレーションを必要とせず、注入されたサンプルのアマウントに依存しません（検出器のリミット値内で）。また、この計算にはレスポンスファクタは使用されません。全成分が等しく溶出し、検出器に対するレスポンスも等しい場合であれば、このレスポンス % の計算によって、成分の相対量の十分な近似値を得ることができます。

レスポンス % の計算は、定性的な結果だけが必要な場合や、他のキャリブレーション手順に必要なキャリブレーションテーブルを作成するための情報を生成する場合に使用されます。

レスポンスファクタ

レスポンスファクタは、注入されたアmountに対する成分のレスポンスの比として定義されます。

$$RF = Response / Amount$$

ここで、「レスポンス」はピークの面積または高さです。

この定義をグラフで表現すると、アmountを独立変数（x）とし、レスポンスを従属変数（y）とする検量線になります。

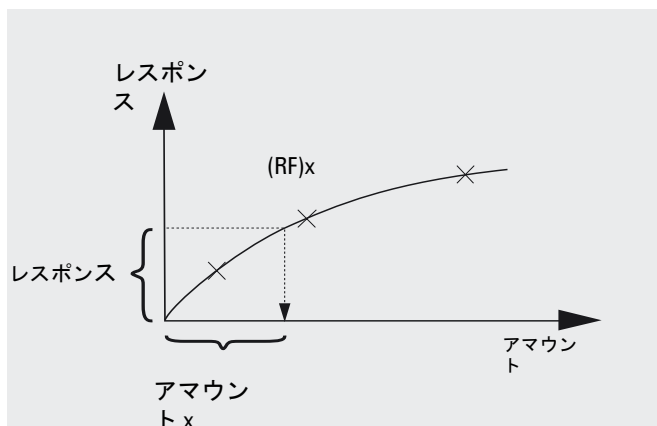


図1 レスポンスファクタ

レスポンスファクタというのは、原点から点（アmount、レスポンス）までの曲線の傾きを表します。この値は、**キャリブレーションファクタ**と呼ばれることもあります。

補正ファクタ

定量計算では、**乗数**と**サンプルアmount**という、2 種類の補正ファクタが使用されます。これらのファクタは、キャリブレーション手順の中で、物質質量やサンプル希釈率、サンプルアmountなどの変動を補正したり、単位を変換したりするために使用されます。

乗数

乗数は、各計算式中で、各成分の結果に対する乗数として使われます。また、乗数は、アmountを表す単位の変換に利用することも可能です。

乗数は、**アmount乗数**、最大 5 つの**サンプル乗数**、**希釈率ファクタ**、および、最大 5 つの**サンプル除数**の関数です。

既知の化合物に対して使用される乗数は、次のとおりです。

$$\text{Multiplier} = \text{Amount Multiplier} \times \text{Sample Multiplier} \times \text{Dilution} / \text{Sample Divisor}$$

未知化合物の場合は、上の式の「アmount乗数」の代わりに「未知ピーク乗数」を使います。

アmount乗数

アmount乗数は、各計算式中で、各成分の結果の乗数として使われます。

サンプル乗数

サンプル乗数は、利用可能なあらゆるユーザー定義乗数の組み合わせです。

$$\text{Sample Multiplier} = \text{Sample Multiplier 1} \times \text{Sample Multiplier 2} \times \dots$$

サンプル乗数は、乗算ファクタとして定数を使う必要がある場合に、目的を問わず利用することができます。

希釈率ファクタ

希釈率ファクタは、レポートの出力前にすべての計算結果に乘算される数値です。希釈率ファクタは、結果のスケールを変更したり、分析前の準備中に生じたサンプルの組成の変化を補正したりするために利用することができます。

サンプル除数

サンプル除数は、利用可能なあらゆるユーザー定義除数の組み合わせです。

$$\text{Sample Divisor} = \text{Sample Divisor 1} \times \text{Sample Divisor 2} \times \dots$$

サンプル除数は、除算ファクタとして定数を使用する必要がある場合に、目的を問わず利用することができます。

サンプルアマウント

計算方法として ESTD% もしくは ISTD% を選択した場合には、ESTD レポートや ISTD レポートには、絶対値ではなく相対値が表示されます。つまり、各成分のアマウントは、サンプルアマウントに対する割合 (%) として表されます。ESTD% や ISTD% の計算では、サンプルアマウントは、分析された成分の絶対アマウントを除算して、相対値に変換するための量として使われます。

キャリブレーションを含む計算方法

外部標準 (ESTD)、補正 (補正 %)、および、内部標準 (ISTD) の計算には、レスポンスファクタが必要なので、キャリブレーションテーブルが使用されます。キャリブレーションテーブルというのは、選択した計算方法で使われる単位にレスポンスを変換するための、変換規則を表しています。

ESTD の計算

ESTD の方法は、定量の基本であり、キャリブレーションサンプルと未知サンプルの両方が同じ条件で分析されます。そして、未知サンプルの結果がキャリブレーション標準の結果と比較され、未知サンプルに含まれる各成分の量が計算されます。

ESTD の方法では、ISTD の方法とは異なり (60 ページの「化合物グループの定量」も参照)、絶対レスポンスファクタが使われます。レスポンスファクタは、キャリブレーションから取得され、保存されます。後続のサンプル分析では、このレスポンスファクタをサンプルアマウントの測定値に適用することにより、成分アマウントが計算されます。この計算方法では、サンプルの中に、試料調製や注入量の変動を補正するための基準が存在しないので、サンプルの前処理やサンプル注入量が分析のたびに変わらないように注意する必要があります。

ESTD レポートの場合、未知サンプル中の特定の化合物のアマウントは、2 ステップで計算されます。

- 1 指定された検量線近似により、キャリブレーションポイントを通る曲線の式が計算されます。
- 2 下の式を使って、未知サンプル中の化合物のアマウントが計算されます。このアマウントは、レポートに表示したり、乗数、希釈率ファクタ、サンプルアマウントなどの値を求めるための追加計算に使用したりすることができます。

成分 x のアマウントは、次の式によって計算されます。

$$Amount_x = (Response_x / RF_x) \times Multiplier$$

各用語の意味は次のとおりです。

レスポンス_x = 成分 x のレスポンス（面積または高さ）。

RF_x = 次のように計算される、成分 x のレスポンスファクタ。

シングルレベルキャリブレーションの場合、

$RF_x = \text{レスポンス}_x / \text{アマウント}_{x_0}$ マルチレベルキャリブ

レーションの場合は、レスポンスファクタは、検量線に基づいて評価されます。

乗数 = アマウント乗数、サンプル乗数、希釈率ファクタ、および、サンプル除数の組み合わせ（50 ページの「乗数」を参照）。

ISTD の計算

ISTD の方法では、量のわかっている成分をいくつか追加して、ノーマライズファクタとして利用することにより、ESTD メソッドの欠点を解消しています。この成分（**内部標準**）は、キャリブレーションサンプルと未知サンプルの両方に同量ずつ追加されます。

レスポンスファクタとしては、以前に行ったキャリブレーションで取得され、メソッドに保存されているレスポンスファクタの中から、適当なものを使います。そして、分析から得られたピークの面積または高さ、内部標準サンプルの物質質量を使用して、成分の物質質量を計算します。

内部標準として使用する化合物は、キャリブレーション対象の化合物と、化学的特性やリテンションタイムに大きな相違がなく、なおかつ、クロマトグラフ上で識別可能である必要があります。

表 3 ISDS の方法

利点	欠点
サンプルサイズの変動による影響を受けにくい。	すべてのサンプルに内部標準を追加する必要がある。

表 3 ISDS の方法

利点	欠点
内部標準によって装置ドリフトが補正される。	
ISTD と未知サンプルの化学的特性が似ている場合には、試料調製の影響を最小限に抑えることができる。	

ISTD の方法を非線形のキャリブレーションに対して使用する場合は、計算方法から生ずる誤差が、系統誤差を引き起こさないように注意する必要があります。化合物の検量線が非線形である場合、マルチレベルキャリブレーションでは、ISTD 化合物のアマウントを一定（つまり、すべてのレベルで同量）に保つ必要があります。さらに、検量線にオフセットがあってはなりません。

内部標準分析では、対象となる化合物の量と、対応する内部標準化合物の量とが、2 つのピークのレスポンス比によって関連付けられます。

2 回分析の ISTD キャリブレーションの場合、未知サンプル中の特定の化合物の補正アマウント比は、以下のように計算されます。

分析 1: キャリブレーション

- 1 キャリブレーションテーブル中の特定ピークの、各レベルにおける相対アマウント (Rel. Amount_x) と相対レスポンス (Rel. Response_x) を計算することにより、キャリブレーションポイントを作成します。

$$\text{Rel. Response} = \frac{\text{Response}_x}{\text{Response}_{ISTD}}$$

ここで、Response_x および Response_{ISTD} は、サンプル、および、内部標準のレスポンス（面積または高さ）です。

$$\text{Rel. Amount} = \frac{\text{Amount}_x}{\text{Amount}_{ISTD}}$$

指定された検量線近似により、キャリブレーションポイントを通る曲線の式を計算します。

シングルレベルキャリブレーションの場合の相対レスポンスファクタ (RRF_x) は、以下のようにして評価することができます。

$$RRF_x = \frac{\text{Rel. Response}_x}{\text{Rel. Amount}_x} = \frac{\text{Response}_x / \text{Response}_{ISTD}}{\text{Amount}_x / \text{Amount}_{ISTD}}$$

マルチレベルキャリブレーションの場合の相対レスポンスファクタは、レスポンス比の関数であり、検量線から評価されます。

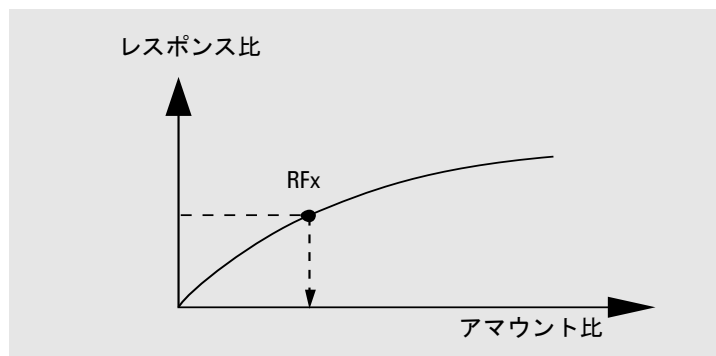


図2 アマウント比

分析 2: 未知サンプル

- 1 未知サンプル中の化合物のレスポンスを、未知サンプル内の対応する内部標準のレスポンスで割ることによって、未知化合物の相対レスポンスを求めます。
- 2 未知サンプルの相対アマウントは、上のステップ 2 で求めた近似曲線の式と、サンプル中の ISTD の実測量とを使って計算されます。

3 定量 キャリブレーションを含む計算方法

$$\text{Amount}_x = \frac{\text{Rel. Response}_x}{RRF_x} \times \text{Multiplier}$$

各用語の意味は次のとおりです。

Rel. Response_x = 成分 *x* の内部標準に対する相対レスポンス（面積または高さ）。

RRF_x = 成分 *x* の相対レスポンスファクタ。

乗数 = アマウント乗数、サンプル乗数、希釈率ファクタ、およびサンプル除数の組み合わせ（50 ページの「乗数」を参照）。

内部標準のレスポンスは、対象ピークと同じシグナルから取得されます。同じシグナルに内部標準のピークがない場合は、内部標準のメインピークが使用されます。

キャリブレーションされていない化合物に対しては、ISTD リファレンス化合物、もしくは、固定 ISTD レスポンスを指定することもできます。キャリブレーションされていない化合物の ISTD も、キャリブレーションされた化合物と同じように使われます（53 ページの「ISTD の計算」を参照）。

キャリブレーションされた化合物の一部が ISTD リファレンスなしで定量される場合は、混合 ISTD/ESTD メソッドとして、通常の ESTD 結果が計算されます。

ESTD% および ISTD%

ESTD% と ISTD% の計算は同じです。成分 *x* の相対アマウント (%) は、サンプルアマウントが 0 でなければ、次のように計算されます。

$$\text{Amount\%} = \frac{\text{Compound Amount}}{\text{Sample Amount}} \times 100$$

各用語の意味は次のとおりです。

化合物アマウント = ESTD メソッドもしくは ISTD メソッドによって計算されたアマウント。

サンプルアマウント = 指定されたサンプルのアマウント。サンプルアマウントが 0 の場合は、ESTD または ISTD が計算されます。

補正 % の計算

補正 % レポートの計算方法は、ESTD レポートのものとはほとんど変わりませんが、化合物の絶対アmountの代わりに相対アmountを計算するステップが追加されます。

補正 % の結果には、面積 % や高さ % の結果と同じ欠点があります (48 ページの「レスポンス %」を参照)。それは、ピーク面積の合計に影響を及ぼすような変化があると、各ピークの物質量の計算にも影響があるということです。ノーマライズレポートは、対象成分のすべてが溶出し積分されている場合にのみ使用してください。選択したピークをノーマライズレポートから削除すると、サンプルのレポート結果が変化します。

成分 x の補正 % の計算には、次の式が使用されます。

$$\text{Norm\%} = \frac{\text{Amount}_x}{\sum \text{Amounts}} \times 100$$

アmountの合計は、全化合物の合計、および、シグナル単位
の合計の両方が計算されます。

成分 x の全化合物に対する補正 % は、その化合物のメインピークが現れたシグナルとは無関係に、次のように計算されます。

$$\text{Norm\%}_{All} = \frac{\text{Amount}_x}{\sum \text{Amount}_{All}} \times 100$$

成分 x の特定のシグナル上での補正 % は、次のように、結果の合計をシグナル単位で 100% にノーマライズすることにより計算されます。

$$\text{Norm\%}_{Signal} = \frac{\text{Amount}_x}{\sum \text{Amount}_{Signal}} \times 100$$

アmountは、ESTD もしくは ISTD のいずれかの方法を使って計算されます。分析結果には、ESTD (または ISTD) の結果と補正 % の結果の両方が保存されます。

3 定量

キャリブレーションされていない化合物と同定されていないピークの定量

キャリブレーションされていない化合物と同定されていないピークの定量

キャリブレーションされていない化合物や同定されていないピークは、固定レスポンスファクタ、もしくは、キャリブレーション済み化合物いずれかのキャリブレーションデータを使って、キャリブレーションされます。あるいは、定量しないでおくこともできます。固定レスポンスファクタ、もしくは、キャリブレーションされた化合物データを使った定量は、シグナルごとに行います。後者において、キャリブレーション済み化合物を定量したのが ISTD メソッドであった場合、その ISTD は、同定されていないピークに対しても、キャリブレーション済み化合物と同じように使用されます。

固定レスポンスファクタを使用する定量

ESTD の計算

固定レスポンスファクタを使った定量のための ESTD の計算は、次の式で行われます。

$$Amount_{Unk} = Response_{Unk} \times Multiplier / RF_{Unk}$$

各用語の意味は次のとおりです。

レスポンス_{Unk} = 同定されていないピークの高さまたは面積。

乗数 = 50 ページの「乗数」で説明されている乗数。

RF_{Unk} = 同定されていないピークを含むシグナルの固定レスポンスファクタ。

マルチシグナル分析の場合、固定レスポンスファクタ RF_{Unk} は、シグナルごとに別々に設定することができます。

キャリブレーションされていない化合物と同定されていないピークの定量

ISTD の計算

この計算では、未知ピークに対する ISTD リファレンスとして、内部標準を 1 つ同定することができます。この場合、レスポンス比は、その内部標準を参照することにより計算されます。そして、このレスポンス比を、固定レスポンスファクタを使って補正することにより、アマウント比が求められます。このアマウント比は、さらに、ISTD アマウントを使ってスケージングされます。

$$Amount_{Unk} = Response\ Ratio_{Unk} \times Amount_{ISTD} \times Multiplier / RF_{Unk}$$

各用語の意味は次のとおりです。

レスポンス比_{Unk} = 同定されていないピークの高さまたは面積の、内部標準に対する相対値。

乗数 = 50 ページの「乗数」で説明されている乗数。

RF_{Unk} = 同定されていないピークを含むシグナルの固定レスポンスファクタ。

キャリブレーションされた化合物を使用する間接定量

シグナル中の同定されていないピークの定量に、キャリブレーション済み化合物のキャリブレーションデータを使う場合、キャリブレーション済み化合物は、キャリブレーションユーザーインターフェイスで同定されます。ここで指定された化合物は、シグナル中の同定されていないピークのすべてに対して使用されます。計算は、キャリブレーション済み化合物と同ように行われます (52 ページの「ESTD の計算」および 53 ページの「ISTD の計算」を参照)。

リファレンスピークがない場合には、同定されていないピークのアマウントは 0 になります。

未知ピークに対して計算されたアマウントは、キャリブレーション済み化合物と同じ方法で、キャリブレーションされていない化合物のアマウントに転送されます。同定されていないピークの場合は、常にメインピークのアマウントが使用されます。

化合物グループの定量

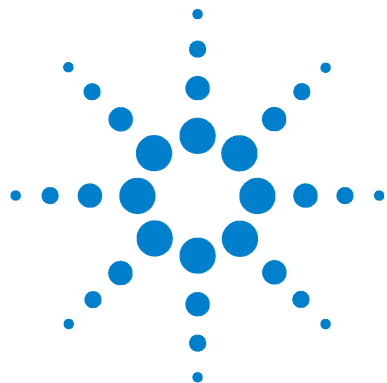
ESTD と ISTD は、各化合物のキャリブレーションデータに基づいて計算されます。グループの面積、高さ、アマウントは、それぞれ、各化合物の面積、高さ、アマウントの合計として計算されます。

ピークグループの定量

ピークグループ（『コンセプトガイド』の 167 ページの「ピークのグループ化」を参照）の定量は、キャリブレーション済み化合物と同じ方法で処理されます。ピークグループは検量線を持つことができ、ピークグループアマウントは化合物アマウントと同じ方法で計算されます。

マルチシグナルの定量

この場合、定量の計算は、化合物のメインピーク（メインシグナル）のアマウントに基づいて行われます。



4

カスタム計算の演算子と関数

算術演算子	62
一般関数	63
統計関数	72
三角関数	74
論理演算子	76
定数関数	78

この章では、Certy カスタム計算で利用することのできる、算術演算子と関数の概要を説明します。

詳しい情報については、Certy のオンラインヘルプを参照してください。



算術演算子

- + 加算です。たとえば、`=3+4` は 7 を返し、`=a3+b6` はセル a3 とセル b6 の和を返します。
- 減算です。たとえば、`=7-4` は 3 を返し、`=a3-b6` はセル a3 からセル b6 を引いた差を返します。
- * 乗算です。たとえば、`=3*4` は 12 を返し、`=a3*b6` はセル a3 とセル b6 の積を返します。
- / 除算です。たとえば、`=12/4` は 3 を返し、`=a3/b6` はセル a3 をセル b6 で割った商を返します。
- ^ べき乗です。たとえば、`=5^2` は 25 (5^2) を返し、`=b6^3` はセル b6 の 3 乗を返します。

一般関数

一般関数の使用法や構文の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。

Absolute 数値の絶対値を返します。数値の絶対値というのは、数値から符号を取ったものです。

ABS (数値)

ADDRESS セルのアドレスを表すテキストを生成します。

ADDRESS (行, 列, リファレンスタイプ [, a1] [, シート])

この関数の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。

Call Procedure ダイナミックリンクライブラリ (DLL) 内のプロシージャを呼び出します。この関数には 2 つの構文があります。構文 1 のように、REGISTER. ID を指定して CALL を呼び出した場合、読み込まれた DLL は、プログラムが終了するまでメモリに常駐します。構文 2 のように、REGISTER. ID を指定せずに CALL を呼び出した場合、読み込まれた DLL は、関数が呼び出された後に解放されます。

注意

この関数は上級ユーザー向けです。CALL 関数の使用法を誤ると、エラーが発生して、コンピュータの再起動が必要になる可能性があります。

構文 1: REGISTER. ID を指定

CALL (レジスタ ID, 引数 1, ...)

構文 2: REGISTER. ID の指定なし

CALL (モジュールテキスト, プロシージャ, タイプテキスト, 引数, ...)

この関数の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。

4 カスタム計算の演算子と関数

一般関数

Ceiling	指定された精度まで数値を切り上げます。 CEILING (数値, 精度)
Character	指定された ASCII コードに対応する文字を返します。 CHAR (数値)
Choose	数値リストから、指定されたインデックス値に対応する値を返します。 CHOOSE (インデックス, 項目リスト) この関数の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。
Clean	指定されたテキストから、印刷できない文字をすべて削除します。 CLEAN (テキスト)
Code	指定された文字列の最初の文字を表す数値コードを返します。 CODE (テキスト)
Column	指定されたリファレンスの列番号を返します。 COLUMN (リファレンス)
Columns	範囲リファレンス内の列数を返します。 COLUMNS (範囲)
Concatenate	複数のテキスト文字列を連結して 1 つの文字列にします。 CONCATENATE (テキスト 1, テキスト 2,)
Count	指定されたリスト内の値の数を返します。 COUNT (値リスト)
Count If	範囲内にある、指定された基準を満たすセルの数を返します。 COUNTIF (範囲, 基準) この関数の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。
Count A	指定されたリスト内の空白でない値の数を返します。 COUNTA (式リスト)

Date	指定された日付のシリアル値を返します。 DATE (年, 月, 日)
Date Value	テキスト文字列で指定された日付のシリアル値を返します。 DATEVALUE (テキスト)
Day	指定された数値で表される日付に対応する日を返します。 DAY (シリアル値)
Days 360	1 年を 360 日 (30 日 × 12 ヶ月) とした場合の、2 つの日付の間の日数を返します。この関数は、経理システムが 30 日 × 12 ヶ月方式に基づいている場合の、支払の計算に便利です。 DAYS360 (開始日, 終了日, [方式])
Error Type	エラーのエラー番号を返します。 ERROR.TYPE (エラーリファレンス) この関数の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。
Even	指定された数値を偶数に切り上げます。 EVEN (数値)
Exact	2 つの式が同じかどうかを、大文字と小文字を区別しながら比較します。式が同じ場合は True、そうでない場合は False を返します。 EXACT (式 1, 式 2)
Exponent	e を指定した数だけべき乗したものを返します。定数 e は、2.71828182845904 (自然対数の底) です。 EXP (数値)
Factorial	指定した数の階乗を返します。 FACT (数値)
Find	指定されたテキスト文字列を別のテキスト文字列内で検索し、最初に見つかった検索文字列の文字位置を返します。 FIND (検索テキスト, テキスト [, 開始位置]) この関数の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。

4 カスタム計算の演算子と関数

一般関数

Find Byte	指定されたテキスト文字列を別のテキスト文字列内で検索し、最初に見つかった検索文字列のバイト位置を返します。 FINDB (検索テキスト, テキスト [, 開始位置]) この関数の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。
Fixed	数値を指定された桁数で四捨五入して、それを小数形式で表したものを、テキストとして返します。 FIXED (数値 [, 桁数] [, no_commas])
Floor	数値を指定された精度で切り捨てます。 FLOOR (数値, 精度)
Hour	指定された時刻の時の部分を、24 時間制で表したものを返します。 HOUR (シリアル値)
Index	指定された範囲の特定のセルの内容を返します。 INDEX (リファレンス [, 行] [, 列] [, 範囲番号])
Indirect	指定されたセルが参照しているセルの内容を返します。 INDIRECT (リファレンステキスト [, a1])
Int	指定された数値を切り捨てて整数にします。 INT (数値)
Left	指定されたテキスト文字列の左端から、指定された文字数の文字を返します。 LEFT (テキスト [, 文字数])
Left Byte	指定されたテキスト文字列の左端から、指定されたバイト数の文字を返します。 LEFTB (テキスト [, バイト数])
Length	指定されたテキスト文字列の文字数を返します。 LEN (テキスト)
Length (Bytes)	指定されたテキスト文字列のバイト数を返します。 LENB (テキスト)

Logarithm	指定された数を底とする数値の対数を返します。 LOG (数値 [, 底])
Logarithm Base Ten	10 を底とする数値の対数を返します。 LOG10 (数値)
Lookup	ある範囲から値を検索して、2 番目の範囲の対応する位置にある内容を返します。 LOOKUP (検索値, 検索範囲, 結果範囲) この関数の詳細については、Certy オンラインヘルプを参照してください。
Lookup Column	テーブルの最初の列から値を検索し、検索された値の位置に対応する、そのテーブル内のセルの内容を返します。 VLOOKUP (検索項目, 検索範囲, 列インデックス) この関数の詳細については、Certy オンラインヘルプを参照してください。
Lookup Row	テーブルの最初の行から値を検索し、検索された値の位置に対応する、そのテーブル内のセルの内容を返します。 HLOOKUP (検索項目, 検索範囲, 行インデックス) この関数の詳細については、Certy オンラインヘルプを参照してください。
Lower	指定された文字列内の文字を小文字に変換します。文字列内の数字は変更されません。 LOWER (テキスト)
Match	指定された値を検索範囲内の値と比較します。検索範囲内で一致した値の位置が返されます。 MATCH (検索値, 検索範囲, 比較方法) この関数の詳細については、Certy オンラインヘルプを参照してください。
Maximum	指定された数値リスト内の最大値を返します。 MAX (数値リスト)

4 カスタム計算の演算子と関数

一般関数

Mid	テキスト文字列内の指定された位置から、指定された文字数分の文字列を返します。 MID (テキスト, 開始位置, 文字数)
Mid Byte	テキスト文字列内の指定された位置から、指定されたバイト数分の文字列を返します。 MIDB (テキスト, 開始位置, バイト数)
MIN	指定された数値リスト内の最小値を返します。 MIN (数値リスト)
Minute	指定された日付に対応する分を返します。 MINUTE (シリアル値)
Modulus	数値を指定された除数で割った余りを返します。 MOD (数値, 除数)
Month	指定された日付に対応する月を返します。 MONTH (シリアル値)
Natural Logarithm	数値の自然対数 (定数 e を底とする) を返します。 LN (数値)
Not Available Marker	エラー値 #N/A を返します。この値は、そのセルを使用できないことを表します。 NA ()
Now	現在の日付および時刻を表すシリアル値を返します。 NOW ()
Number	指定された値が数値かどうかを調べ、数値であればその値を返します。 N (値)
Odd	指定された数値を奇数に切り上げます。 ODD (数値)
Offset	スプレッドシート内の特定の位置を基準にして指定された範囲の内容を返します。 OFFSET (リファレンス, 行, 列 [, 高さ] [, 幅])

この関数の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。

Product リスト内の数値を乗算した結果を返します。

PRODUCT (数値リスト)

Proper 指定された文字列内の各単語の先頭文字を大文字、その他の文字を小文字にして返します。

PROPER (テキスト)

Random 一様に分布する 0 以上 1 未満の数値からランダムに選択された数値を返します。

RAND ()

Register Id 指定された登録済みのダイナミックリンクライブラリ (DLL) のレジスタ ID を返します。指定された DLL が登録されていない場合、REGISTER. ID 関数は、その DLL を登録してからレジスタ ID を返します。

REGISTER. ID (モジュールテキスト, プロシージャ, タイプテキスト)

この関数の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。

Replace テキスト文字列の一部を別のテキスト文字列で置き換えます。

REPLACE (元のテキスト, 開始位置, 文字数, 置換テキスト)

Replace Byte テキスト文字列の一部を別のテキスト文字列で置き換えます。

REPLACEB (元のテキスト, 開始位置, バイト数, 置換テキスト)

Repeats テキスト文字列を指定された回数だけ繰り返します。

REPT (テキスト, 回数)

Right 指定されたテキスト文字列の右端から、指定された文字数分の文字を返します。

RIGHT (テキスト [, 文字数])

Right Byte 指定されたテキスト文字列の右端から、指定されたバイト数分の文字を返します。

4 カスタム計算の演算子と関数

一般関数

	RIGHTB (テキスト [, バイト数])
Round	指定された数値を指定された桁で四捨五入します。 ROUND (数値, 桁数)
Round Down	数値を切り捨てます。 ROUNDDOWN (数値, 桁数)
Round Up	指定された数値を指定された桁で切り上げます。 ROUNDUP (数値, 桁数)
Row	指定されたリファレンスの行番号を返します。 ROW (リファレンス)
Rows	範囲リファレンス内の行数を返します。 ROWS (範囲)
Search	指定されたテキスト文字列を別のテキスト文字列から検索し、その最初の文字の文字位置を返します。 SEARCH (検索テキスト, テキスト [, 開始位置])
Search Byte	指定されたテキスト文字列を別のテキスト文字列から検索し、その最初の文字のバイト位置を返します。 SEARCHB (検索テキスト, テキスト [, 開始位置])
Second	指定された日付に対応する秒を返します。 SECOND (シリアル値)
Sign	指定された数値の符号を判定します。 SIGN (数値)
Square Root	指定された数値の平方根を返します。 SQRT (数値)
Substitute	テキスト文字列の指定された部分を別のテキスト文字列で置き換えます。 SUBSTITUTE (テキスト, 旧テキスト, 新テキスト [, 例])
Text	指定された書式を使用して、指定された数値をテキストとして返します。

	TEXT (数値, 書式)
Time	指定された時刻のシリアル値を返します。 TIME (時, 分, 秒)
Time Value	指定されたテキストが表す時刻のシリアル値を返します。 TIMEVALUE (テキスト)
Today	現在の日付を表すシリアル値を返します。 TODAY ()
Trim	テキストから、単語間の単独スペースを除くスペースをすべて削除します。 TRIM (テキスト)
Truncate	指定された数値の小数部を切り捨てて整数にします。 TRUNC (数値 [, 桁数])
Type	指定された式の引数タイプを返します。 TYPE (式)
	この関数の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。
Upper	指定された文字列内の文字を大文字に変換します。 UPPER (テキスト)
Value	指定されたテキストを数値として返します。 VALUE (テキスト)
Weekday	指定された日付に対応する曜日を返します。 WEEKDAY (シリアル値)
Year	指定された日付に対応する年を返します。 YEAR (シリアル値)

統計関数

統計関数の使用法や構文の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。

Average 指定された数値の平均を返します。AVERAGE の結果は、算術平均とも呼ばれます。

AVERAGE (数値リスト)

Rel. Std. Dev. 相対標準偏差を返します。

STDEV () / AVERAGE () * 100

Standard Deviation 指定された値のサンプルに基いた、母集団の標準偏差を返します。母集団の標準偏差は、リスト中の値の母集団平均からの偏差の平均を表します。

STDEV (数値リスト)

STDEV は、次の式から求められます。

$$\text{standard deviation} = \sqrt{\frac{n \sum x^2 - (\sum x)^2}{n(n-1)}}$$

Std. Dev. of Population 指定された値の母集団全体に基づいて、母集団の標準偏差を返します。母集団の標準偏差は、リスト中の値の母集団平均からの偏差の平均を表します。

STDEVP (数値リスト)

STDEVP は、次の式から求められます。

$$\text{standard deviation} = \sqrt{\frac{n \sum x^2 - (\sum x)^2}{n^2}}$$

Sum 指定された数値の合計を返します。

SUM (数値リスト)

Sum If 指定された条件に基づいて指定されたセルの合計を返します。

SUMIF (範囲, 条件, 合計範囲)

Sum of Squares 指定された数値のそれぞれを 2 乗したものの合計を返します。

SUMSQ (数値リスト)

Variance 値のサンプルに基づく母集団の分散を返します。

VAR (数値リスト)

VAR は、次の式から求められます。

$$Variance = \frac{n \sum x^2 - (\sum x)^2}{n(n-1)}$$

Variance of Population 値の母集団全体に基づく母集団の分散を返します。

VARP (数値リスト)

VARP は、次の式から求められます。

$$Variance = \frac{n \sum x^2 - (\sum x)^2}{n^2}$$

三角関数

三角関数の使用法や構文の詳細については、Cerity オンラインヘルプを参照してください。

Cosine 指定された角度のコサイン（余弦）を返します。

COS（数値）

Hyperbolic Cosine 数値のハイパーボリックコサイン（双曲線余弦）を返します。

COSH（数値）

ACOS 数値のアークコサイン（逆余弦）を返します。

ACOS（数値）

Hyperbolic Arc Cosine 数値の逆ハイパーボリックコサイン（逆双曲線余弦）を返します。

ACOSH（数値）

Sine 指定された角度のサイン（正弦）を返します。

SIN（数値）

Hyperbolic Sine 指定された数値のハイパーボリックサイン（双曲線正弦）を返します。

SINH（数値）

Arcsine 数値のアークサイン（逆正弦）を返します。

ASIN（数値）

Hyperbolic Arcsine 数値の逆ハイパーボリックサイン（逆双曲線正弦）を返します。

ASINH（数値）

Tangent 指定された角度のタンジェント（正接）を返します。

TAN（数値）

Hyperbolic Tangent 数値のハイパーボリックタンジェント（双曲線正接）を返します。

TANH（数値）

Arctangent	数値のアークタンジェント（逆正接）を返します。 ATAN（数値）
Arctan (Coord.)	指定された座標のアークタンジェント（逆正接）を返します。 ATAN2（ x , y ）
Hyperbolic Arctangent	数値の逆ハイパーボリックタンジェント（逆双曲線正接）を返します。 ATANH（数値）

論理演算子

論理演算子の使用法や構文の詳細については、Certy オンラインヘルプを参照してください。

And 引数がすべて True である場合は True を返し、少なくとも 1 つの引数が False である場合は False を返します。

AND (論理式リスト)

Get Text 指定された値がテキストであるかどうかを調べ、テキストであればその値を返します。

T (値)

If 条件をテストし、指定された値を返します。

IF (条件, true の値, false の値)

Is Blank 指定されたセルが空白かどうかを判定します。

ISBLANK (リファレンス)

Is Error 指定された式がエラー値を返すかどうかを判定します。

ISERR (式)

Is Error 2 指定された式がエラー値を返すかどうかを判定します。

ISERROR (式)

Is Logical 指定された式が論理値を返すかどうかを判定します。

ISLOGICAL (式)

Is Not Avail 指定された式が、値を使用できないことを示すエラーを返すかどうかを判定します。

ISNA (式)

Is Not Text 指定された式がテキストでないかどうかを判定します。

ISNONTEXT (式)

Is Number 指定された式が数値かどうかを判定します。

ISNUMBER (式)

Is Reference 指定された式が範囲リファレンスかどうかを判定します。

ISREF (式)

Is Text 指定された式がテキストかどうかを判定します。

ISTEXT (式)

Not 論理値の逆を返します。

NOT (論理式)

Or 引数の中に論理値が True のものが 1 つでもあれば、True を返します。

OR (論理式リスト)

定数関数

False 論理値の False を返します。この関数は、後ろに () を付ける必要があります。

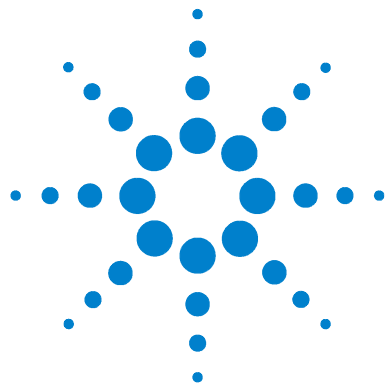
FALSE()

Pi 円周率 π の値を返します。有効桁数を 15 桁で計算した π の値は 3.14159265358979 です。

PI()

True 論理値の True を返します。この関数は、後ろに () を付ける必要があります。

TRUE()



5

品質管理

はじめに	80
薬局方およびその他の規制文書	81
システムスータビリティ	82
ピークのパラメータ	82
品質チェック	93
リミット値チェックの設定	93
リミット値チェック	96

この章では、Cerity システムがその本来の機能通りに動作しているかどうかを確認するためのメカニズムについて説明します。

確認のメカニズムには、次の 2 つがあります。

- システムスータビリティテスト
- 品質管理サンプルの分析による品質チェック



はじめに

分析メソッドの開発目標は、できるだけ正確な結果を得ることです。それに対して、バリデーションの最終目標は、システム全体によって、目的とする作業が正確かつ確実に実行されることを保証することです。

バリデーションというのは、分析装置や分析メソッドを評価して、それらが製品仕様やメソッドの要件に準拠しているかどうかを確認するプロセスのことです。バリデーションの要求を満たすには、以下の条件が必要です。

- 装置（ハードウェアとファームウェア）が正しく機能し、十分な文書化が行われていること。
- コンピュータ（ハードウェアとソフトウェア）が正しく機能し、十分な文書化が行われていること。
- 分析メソッドが検証されていること。

選択した装置および特定メソッドに対するバリデーションが済むと、その装置とメソッドに対し、サンプルの分析前や分析と分析の間に、システムスータビリティテストが行われます。分析システムのシステムスータビリティのテストは、システムの使用前や使用中に定期的に行う必要があります。

カラムやキャピラリー内の分離媒体の特性は時間とともに変化するため、分離技術にはさらに十分な注意が必要です。

次の 2 つの状況で、システムスータビリティテストが要求されます。

- 新たな分析メソッドおよびそのための装置を、初めて使用する前
- 新しいメーカーから調達した分離カラムや分離物質を、初めて使用する際

化合物分析のシステムスータビリティテストに必要な条件についての詳しい情報は、各種薬局方に記載されています。

薬局方およびその他の規制文書

薬局方などの規制文書は、医療行為に使われる薬品やその調合に関する正式な標準と仕様を提供します。

現在、システムスータビリティテストは次の規制文書に基づいています。

- USP** • USP (United States Pharmacopeia: 米国薬局方) とその補足資料は、米国での規制に関する文書です。
- JP** • JP (Japanese Pharmacopeia: 日本薬局方) とその補足資料は、日本での規制に関する文書です。
- EP** • EP (European Pharmacopoeia: ヨーロッパ薬局方) とその補足資料は、ヨーロッパでの規制に関する文書です。
- BP** • BP (British Pharmacopoeia: 英国薬局方) とその補足資料は、英国での規制に関する文書です。
- DAB** • DAB (Deutsches Arzneimittelbuch: ドイツ薬局方) とその補足資料は、ドイツでの規制に関する文書です。ヨーロッパに関する部分では、オーストリアとスイスでの規制についても記載されています。

システムスータビリティ

システムスータビリティテストは、液体クロマトグラフィやガスクロマトグラフィのメソッドにとって、欠かすことのできないものです。システムスータビリティテストは、クロマトグラフィックシステムの分離能や再現性が、実行しようとしている分析にふさわしいかどうかを確認するために使われます。

ピークのパラメータ

化合物のピークは、その化合物の特性を反映しています。ピークのパラメータは、ピークの形状から求められます。以下のセクションでは、ピークのパラメータのうちで、システムスータビリティに関係するものについて説明します。

リテンションタイム

リテンションタイム (t_R) というのは、溶質の注入から溶出までの時間のことを言います。

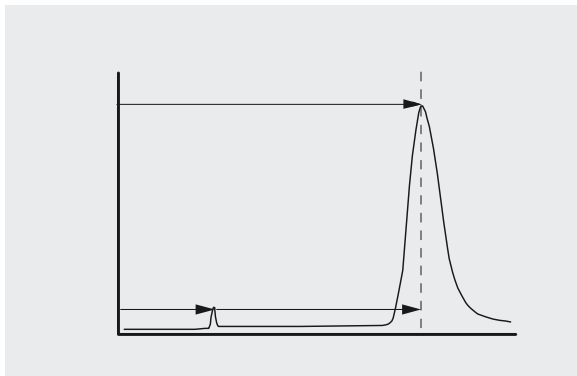


図3 GCのリテンションタイム

クロマトグラフィでは、グロスリテンションタイム t_R （通常これがリテンションタイムと呼ばれる）と、ネットリテンションタイム t が区別されます。ネットリテンションタイムというのは、溶質が固定相に留まっている時間のことです（図 3 参照）。溶質が移動相に移ってから溶出するまでにかかる時間は、空隙時間、もしくは、デッドタイム (t_0) と呼ばれます。ネットリテンションタイムは、溶質と固定相との相互作用を反映しています。実際に測定される（グロス）リテンションタイム (t_R) は、このネットリテンションタイムと空隙時間の合計 ($t + t_0$) になります。

空隙時間を直接特定できるのは、特定のタイプのクロマトグラフィ（GC など）でだけです（図 3 を参照）。それ以外（HPLC など）のクロマトグラフィ技術では、空隙時間を直接測定できないので、カラムに保持されないサンプルを使って t_0 を決める必要があります。カラムの特性がわかっている場合には、空隙時間を流量から計算することも可能です。

相対リテンションタイム

クロマトグラフィのリテンションタイムには、その化合物の特性が表されてはいますが、それは、唯一絶対の値ではありません。このため、異なる化合物のリテンションタイムを比較するときには、通常、相対リテンションタイムが使われます。相対リテンションタイムというのは、化合物のリテンションタイムと、リファレンス物質のリテンションタイムの相対値をとることにより決定されます。

容量ファクタ

$$k' = \frac{t_R - t_0}{t_0}$$

容量ファクタ、容量比、もしくは、分配比 (k) は、溶質が保持される度合を表す尺度です。したがって、 k の計算では、リテンションタイムの測定値から、空隙時間が差し引かれます ($t_R - t_0$)。

容量ファクタがリテンションタイムより有利な点は、流量に影響されないことです。

ピーク幅

ピーク幅というのは、カラム中の溶質バンドの幅で、溶質がカラム中に留まる時間が長くなるほど大きくなります。ピーク幅を、ピークのどの高さで測定するかについては、さまざまな方法があります（[図 4](#)を参照）。

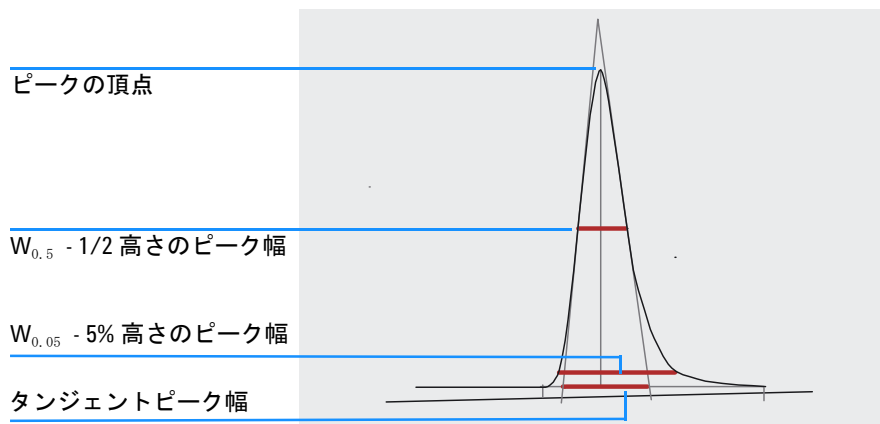


図 4 ピーク幅

タンジェントピーク幅は、ピーク両側の相対的に直線的な部分（変曲点における接線）をベースラインまで外挿することによって測定されるピーク幅として定義されます。

ピーク幅 $W_{0.05}$ は、ベースラインから 5% の高さで測定されます。

インテグレータで使われるピーク幅の定義については、『コンセプトガイド』の 123 ページの「ピーク認識」を参照してください。

シンメトリファクタとテーリングファクタ

ピークの対称性を表すのには、さまざまな方法があります。EP、BP、JP、および、DAB では、シンメトリファクタと呼ばれる式を提案しています。一方、USP では、同じものをテーリングファクタ

タ (T) と呼んでいます。また、シンメトリファクタは、そのピークの分離能が 1.0 より大きい場合にのみ意味があるとされています。

$$T = \frac{W_{0.05}}{2f}$$

ファクタ f は、ピークの最高点からリーディングエッジまでの距離で、ベースラインから 5% の高さで測定されます。

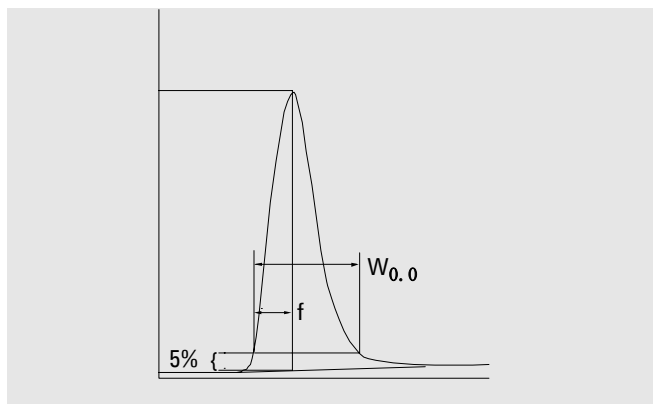


図 5 ピークのシンメトリ

理論段

カラムの理論段数、および、理論段相当高さ (HETP) は、分析カラムの分離効率の尺度になります。段の高さは、分離ステップが起こった場所で、カラムを輪切りにしたものの厚さと考えることができます。特定の段の高さは、有名な *Van Deemter* の公式を使うと、いくつかのパラメータから求めることができます。また、段の高さは、リテンションタイムやピーク幅などのピークパラメータから計算することも可能です。

理論段高さ (H) と理論段数 (N) の関係は、カラムの長さ (L) の関数です。

$$H = \frac{L}{N}$$

論理段数を計算するための方法としては、どのピーク幅を使用するかによって、さまざまな公式が提唱されています。ここでは 4 つの公式を取り上げます。

USP に基づく論理段数

$$N = 16 \left(\frac{t_R}{W} \right)^2$$

ここで、ピーク幅 W はタンジェントピーク幅です (84 ページのピーク幅を参照)。タンジェントピーク幅というのは、ピークの両側の比較的まっすぐな部分を外挿したものが、ベースラインと交差する部分の長さです。

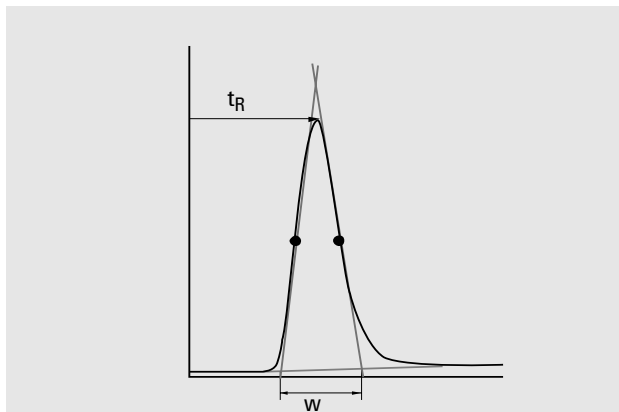


図 6 USP に基づく論理段数

これ以外の 3 つの公式では、ピーク幅 $W_{0.5}$ が使用されます。この $W_{0.5}$ というのは、ピークの半分の高さで測った幅のことです (87 ページの図 7 を参照)。

EP および DAB に基づく理論段数

$$N = 5.54 \left(\frac{t_R}{W_{0.5}} \right)^2$$

JP に基づく論理段数

$$N = 5.55 \left(\frac{t_R}{W_{0.5}} \right)^2$$

BP に基づく論理段数

$$N = 5.545 \left(\frac{t_R}{W_{0.5}} \right)^2$$

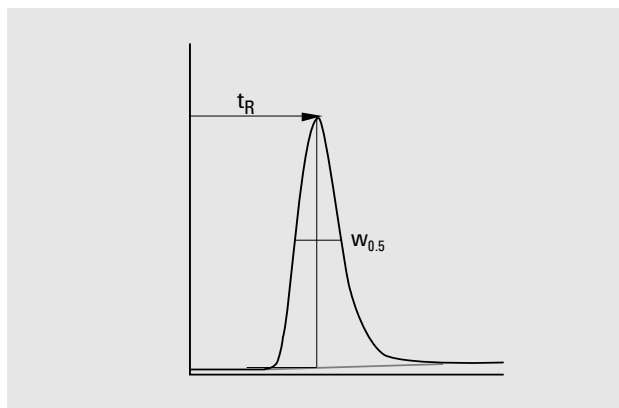


図 7 EP、BP、JP、DAB に基づく理論段数

分離能

分離能は分離品質の尺度で、2 つの化合物が互いにどの程度分離しているかを表します。分離能は、クロマトグラフのカラムの分離性能だけでなく、注入口内での希釈や、検出器内のピーク分散、モジュール間の配管や取り付けなど、カラム以外の影響も受けます。

ピーク分離能は、デフォルトでは、同一シグナル中の対象ピークの直前のピークに対して計算されます。しかし、必ずしも隣り合っていない任意の 2 ピークの名前（化合物）をシグナルと無関係に指定して、その間の分解能を計算することもできるようになっています。これにより、ある化合物の分解能リファレンスとして、特定の化合物を指定することも可能になります。

規制の対象となる環境においては、その規制がどのリファレンスに基づいているかによって、通常、次の公式のどちらかが使われます。USP の公式では、タンジェントピーク幅とファクタ 2.00 が使用されます。一方、EP、BP、JP、DAB の公式では、1/2 高さのピーク幅とファクタ 1.18 が使用されます。

USP に基づく分離能

$$R = \frac{2(t_2 - t_1)}{W_1 + W_2}$$

この場合、2 つの化合物のピーク幅 W_1 と W_2 の分離度は、ピークの両側の比較的まっすぐな部分をベースラインまで外挿することによって得られる、タンジェントピーク幅の関数です。

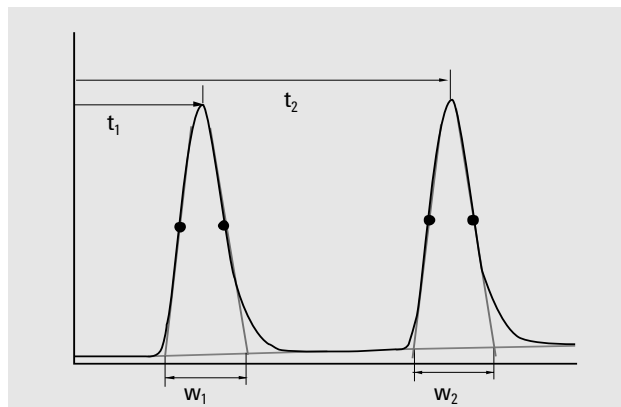


図 8 USP に基づく分離能

EP、BP、DAB に基づく分離能

$$R = \frac{1.18(t_2 - t_1)}{W_1 + W_2}$$

この場合、2 つの化合物のピーク幅 W_1 と W_2 の分離度は、ピーク高さの半分の位置で測定されたピーク幅の関数です。

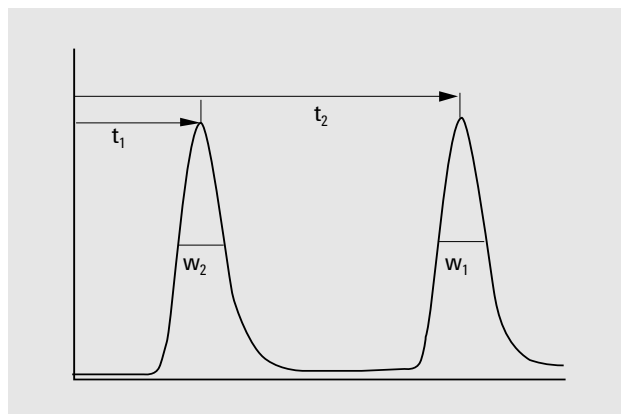


図 9 EP、BP、JP に基づく分離能

選択性

$$\alpha = \frac{t_2 - t_0}{t_1 - t_0} = \frac{k'_2}{k'_1}$$

選択性 (α) は、2 つの化合物のネットリテンションタイム (t_2 および t_1) の比として計算されます。これは、両化合物の容量ファクタ k'_2 および k'_1 の比に等しくなります。

$$k'_1 = \frac{t_1 - t_0}{t_0} \quad \text{および} \quad k'_2 = \frac{t_2 - t_0}{t_0}$$

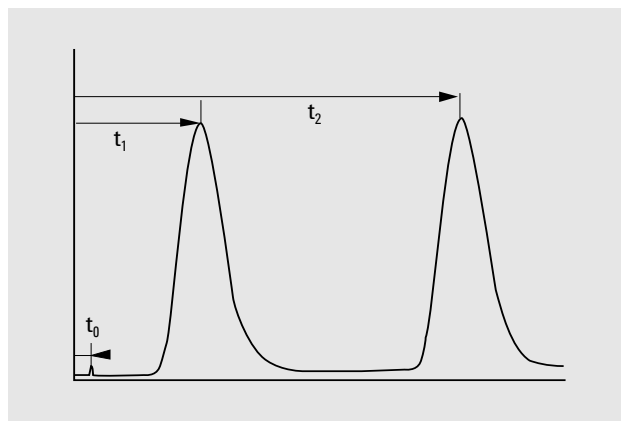


図 10 選択性

S/N 比

$$S/N = \frac{2H}{h_n}$$

シグナルーノイズ比 (S/N) は、左の式から計算されます。各文字の意味は次のとおりです。

H = 所定のリファレンス溶液を使って取得した、クロマトグラム中の対象成分に対応するピークの高さ。

h_n = ブランクの注入後に取得されたクロマトグラムにおいて、所定のリファレンス溶液から取得されたクロマトグラム中のピークの検出位置を中心に、そのピークの 1/2 高さの幅の 20 倍以上の期間にわたって均等に観察された、ベースラインからの最も大きな変動ノイズの絶対値です。

ノイズの測定

ノイズは、選択した時間範囲のシグナルに含まれる、データポイントの値から決めることができます。ノイズの大きさを測定する方法には、以下の 3 つがあります。

- 1 ドリフトの線形回帰の標準偏差 (SD) の 6 倍
- 2 最大振幅 (ドリフトの補正後)
- 3 ASTM 法 (ASTM E 685-93) による測定

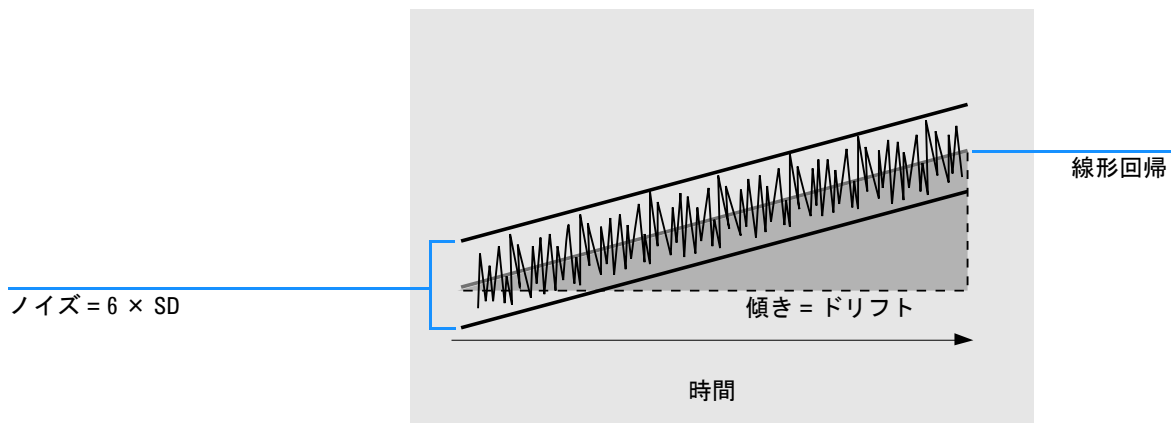


図 11 標準偏差の 6 倍のノイズ

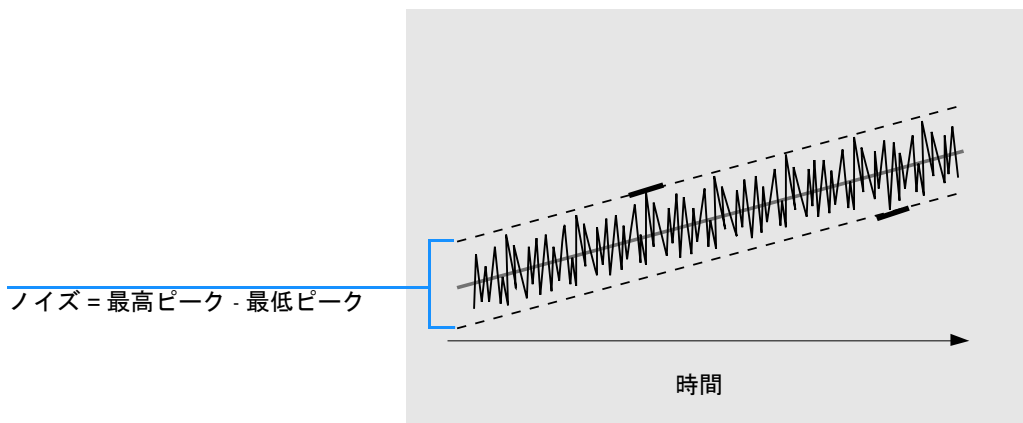


図 12 最高ピークと最低ピークの差のノイズ

ドリフトは、回帰直線の傾きとして与えられます。変動は、ASTM ノイズサイクル内の中間データ値の最大振幅ノイズとして測定されます。

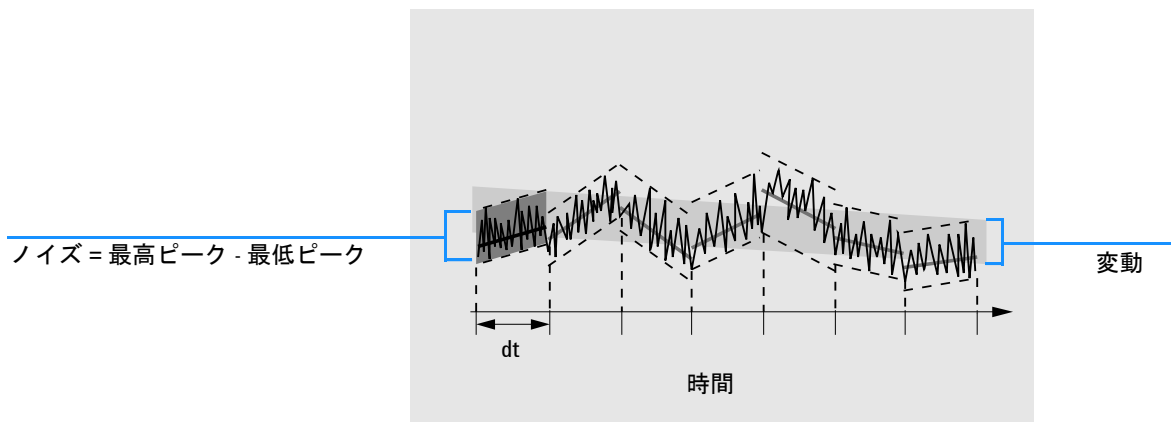


図 13 ASTM 法によって測定されるノイズ

ASTM ノイズ測定 (ASTM E 685-93) は、液体クロマトグラフィに使用される可変波長光度検出器をテストするための規格に基づいており、ASTM (American Society for Testing and Materials: 米国材料試験協会) によって定義されています。ノイズは、時間範囲の広さによって、3 種類に分けることができます。ノイズの測定は、この定義された時間範囲内の最大振幅に基づいて行われます。

- 1 長期ノイズ - 毎時 6 ～ 60 サイクルの周波数の検出器シグナルに含まれるすべての不規則変動の最大強度。長期ノイズは、1 時間を超える時間範囲を選択した場合に測定されます。各サイクルの時間範囲 (dt) は 10 分に設定されるので、選択した時間範囲内には、最低でも 6 サイクルが存在することになります。
- 2 短期ノイズ - 毎分 1 サイクル以上の周波数の検出器シグナルに含まれるすべての不規則変動の最大強度。短期ノイズは、10 ～ 60 分の時間範囲を選択した場合に測定されます。各サイクルの時間範囲 (dt) は 1 分に設定されるので、選択した時間範囲内には、最低でも 10 サイクルが存在することになります。

5 品質管理

システムスータビリティ

選択した時間範囲が 1 分未満の場合、ASTM ノイズ測定は実行されません。選択した時間範囲が 1 分以上の場合には、その範囲に応じて、上で説明した ASTM 法のどれかを使ってノイズが測定されます。ノイズの計算には、1 サイクル当たり、少なくとも 7 つのデータポイントが使用されます。Cerity は、常に 30 秒のサイクルで短期ノイズを計算します。

注

ノイズ計算が行われるのはブランクランのときですが、結果レポートはシングル注入時に行われます。

品質チェック

結果を生成しながら品質チェックを行う方法として推奨されているのが、品質管理サンプルの分析です。品質管理サンプルの分析結果を利用すると、以下のような原因による誤差の可能性のある値にマーキングを行うことができます。

- 試薬が汚染されている。
- GC キャリアガスに不純物が含まれている。
- HPLC の移動相が汚染されている。
- 時間の経過に伴い装置の特性が変化した。

フラグ付けは、レポート内のピークパラメータに注釈をつけることによって行われます。この注釈は、異なるレベルのものを使い分けることができます。**警告** は、ピークパラメータの値が指定された 警告リミット値を超えたことを表します。**不合格** は、ピークパラメータの値が許容範囲を超えていることを表します。

リミット値チェックの設定

このユーザーインターフェイスを利用すると、さまざまなピークパラメータにリミット値を設定することができます。リミット値チェックを行うには、選択したピークパラメータとそのリミット値、チェックに使用する条件（表 4 を参照）、および、チェックを適用する結果の種類の指定をリストアップした表を作成します。

表 4 使用できる条件

条件	意味
>	より大きい
>=	以上
<	より小さい
<=	以下
=	等しい
<>	等しくない

リミット値チェックを単一の結果に対して行う場合には、そのピークパラメータがどのカテゴリに属するかによって、いくつかの仮定を行う必要があります。ピークパラメータには 4 つのカテゴリがあります。

ピーク このカテゴリのパラメータは、ピーク関連のパラメータです。このカテゴリのパラメータは、複数のシグナルが定義されている場合には、1 成分に対して複数存在します。ピークカテゴリのパラメータには、*リテンションタイム*、*面積*、*高さ*などがあります。

化合物 このカテゴリのパラメータは、化合物関連のパラメータです。このカテゴリのパラメータは、複数のシグナルが定義されている場合であっても、1 成分につき 1 つしか存在しません。化合物カテゴリのパラメータには、*アmount*などがあります。

化合物グループ 化合物は、化合物グループと呼ばれるグループに、グループ化することができます。化合物グループカテゴリのパラメータには、*面積和*、*高さ*などがあります。

単一値 1 レポートにつき 1 つしか存在しないパラメータもあります。単一値カテゴリのパラメータには、*すべての化合物の面積和*などがあります。

表 5 単一の結果について、リミット値チェックを適用できるグループ

仕様	注意
すべて	使用するピークパラメータがピークカテゴリに属する場合に、複数のシグナルを使用すると、メインピークだけが評価されます。メインピークがない場合は、何もチェックされません。
すべての化合物	使用するピークパラメータは、 化合物カテゴリ 、もしくは、 ピークカテゴリ に属している必要があります。ピークパラメータがピークカテゴリに属する場合、関連するピークは、有効な化合物に属する必要があります。化合物には名前が必要です。名前のない化合物はチェックされません。
すべての化合物グループ	使用するピークパラメータは、 化合物グループ 、 化合物 、もしくは、 ピークカテゴリ に属している必要があります。ピークパラメータがピークカテゴリに属している場合、関連するピークは有効な化合物に属し、その化合物は化合物グループに属している必要があります。ピークパラメータが 化合物カテゴリ に属している場合、関連する化合物は、化合物グループに属している必要があります。
同定されない	同定されないピークとは、見つかったが、メソッド内で名前を割り当てられていないピークのことです。使用するピークパラメータは、 ピークカテゴリ 、もしくは、 化合物カテゴリ に属している必要があります。パラメータがピークカテゴリに属している場合、同定できなかったピークはすべてチェックされます。パラメータが 化合物カテゴリ に属している場合、名前がない化合物はすべてチェックされます。
特定の化合物の名前	このピークパラメータがこの特定の名前の化合物に属する限り、すべてがチェックされます。

サマリ結果に対してリミット値チェックを実行する場合、[表 5](#)と同じ指定を行います。何も仮定は行われません。リミット値チェックを適用したグループに対して、常にリミット値がチェックされます。

リミット値チェック

リミット値チェックテーブルを設定し、メソッドに組み込むと、テストが評価されるたびにこのテーブルが使用されます。リミット値チェックは、ピークの同定と定量が終わった後に行います。

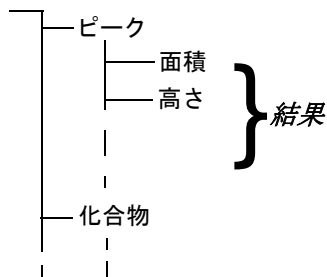
リミット値チェックルーチンによって使用されるリミット値テーブルには、ピークパラメータとともにそのリミット値、条件、およびリミット値チェックを適用する結果タイプの指定が含まれます。

リミット値チェックが単一の結果に適用される場合、リミット値チェックルーチンは、ピーク、化合物、化合物グループの各カテゴリでピークパラメータを検索します。これらのカテゴリのパラメータ間の関係は、表 5 の注意に従うものと見なされます。

リミット値チェックがサマリ結果に適用される場合、パラメータのカテゴリ間には何も仮定が行われません。リミット値チェックは常に実行されます。

リミット値チェック自体はリミット値テーブルの上から下に向かって 1 行ずつ実行され、各ピークパラメータのリミット値が、指定された条件に従ってチェックされます。このチェックの結果は、選択項目に対応する結果リストに保存されます。

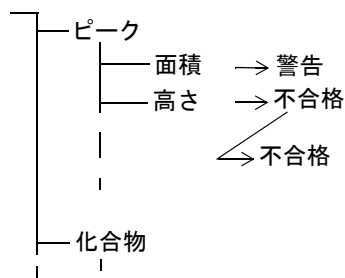
選択:



例

面積や高さなど、ピークカテゴリに含まれるピークパラメータを選択した場合、その結果は、ピークカテゴリの結果に保存されます。同じカテゴリに属する複数のピークパラメータをチェックする場合は、すべてのチェックの結果が 1 つの最終結果に結合されます。たとえば、1 つのピークの高さと面積がチェックする場合は、面積チェックの結果と高さチェックの結果が結合されて、このピークの結果は 1 つだけになります。

選択：



結合の方法

得られた結果には優先度が指定され、通知なしの結果は最低の優先度に、**不合格**の結果は最高の優先度になります（下のリストを参照）。チェックの結果が既存の結果に結合される場合は、最高の優先度が採用されて保存されます。

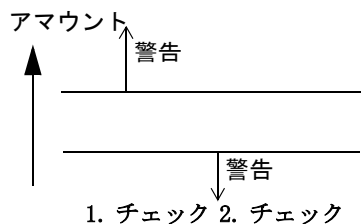
たとえば、あるピークの面積チェックの結果が**警告**になり、同じピークの高さチェックの結果が**不合格**になった場合、**警告**は**不合格**に置き換えられます。

通知の優先度

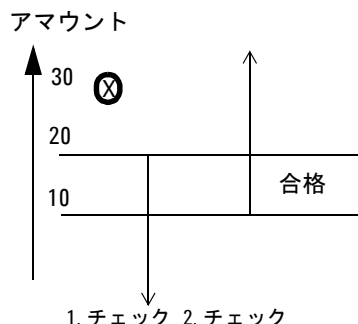
優先度が最高の結果がその後の計算に使用されます。

- 1 不合格
- 2 警告
- 3 合格
- 4 通知なし

限界範囲内のチェック

**注**

上限と下限のどちらを超えたのかチェックすることで範囲を通知できますが、範囲の内部と外部の両方を定義しない限り、値が特定の上限と下限の間にあるかどうかをチェックすることはできません。

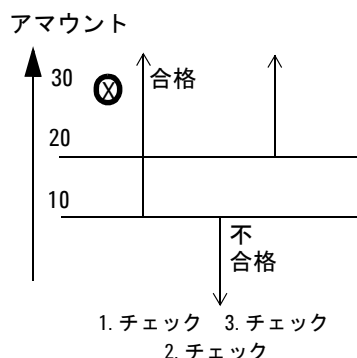


限界範囲内であることを通知することの問題

たとえば、アマウントの値が 10 ～ 20 の場合に **合格** を通知するとし、2 つのリミット値チェックを設定します。最初は、アマウントの条件を **<**、リミット値を 20、通知を **合格** にします。2 番目は、条件を **>**、リミット値を 10、通知を同じ **合格** にします。

- 1 アマウント < 20 通知 = 合格
- 2 アマウント > 10 通知 = 合格

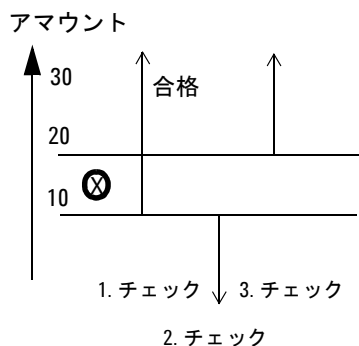
ここで、アマウントが 30 の場合にどうなるかを考えます。最初のチェックは条件を満たさないため、結果は生成されません。2 番目のチェックは条件を満たしているため、**合格** の結果が生成されて保存されます。このように、最初のチェックで不合格であるにもかかわらず、このアマウントは **合格** としてレポートされます。



リミット値チェックテーブルの修正 必要な結果を得ることができるように、次のようにエントリを追加して、リミット値チェックテーブルを修正する必要があります。

- 1 アマウント > 10 通知 = 合格
- 2 アマウント < 10 通知 = 不合格
- 3 アマウント > 20 通知 = 不合格

これで、アマウントが 30 の場合、最初のチェックは **合格** の結果を返します。**不合格** の方が優先度が高いため、2 番目のチェックによって結果が **不合格** に変更されます。3 番目のチェックの条件は満たされないため、結果は変わりません。指定した場合は、レポートに **不合格** と表示されます。同様に、アマウントが下限より小さい場合は、レポートに **不合格** と表示されます。

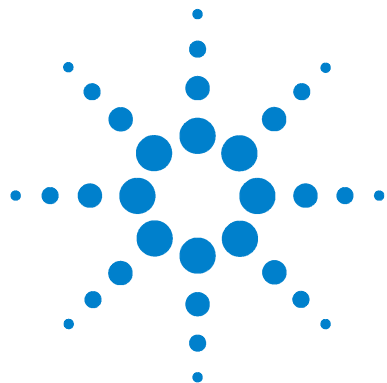


値が範囲内にある場合の動作 アマウントが範囲内にある場合は、最初の条件が満たされ、結果は **合格** になります。2 番目と 3 番目の条件は満たされず、結果は変わりません。レポートは **合格** を通知します。

2 行の条件テーブルでも、アマウントが範囲内であれば **合格** が通知されます。しかし、3 行の条件テーブルは、すべての結果に対して通知（**不合格** または **合格**）を行います。すべての結果が通知されるため、特定の結果を強調表示する意味はなくなります。

5 品質管理

品質チェック



6

システムリファレンス

データ書式 102

数値書式の規則 108

サンプルまたはシーケンスのインポート 110

この章では、システム全体の書式に関する情報を提供すると同時に、XML ファイルによるサンプルやシーケンスのインポートについて詳しく説明します。



データ書式

Cerity システムのデフォルトのフィールドタイプで使われる、デフォルトの書式にアクセスするには、Cerity ソフトウェア管理コンソールを使います。デフォルトの書式タイプのフィールドの **[精度]**、**[範囲]**、および、**[表示書式]** は、**[数値書式]** のダイアログボックスで設定できます。これ以外のフィールドタイプに対して書式は設定できませんが、カスタム計算の場合は、フィールド書式を設定することができます。

システムの精度と有効桁数

計算の精度もしくは正確さは、結果を表現する有効桁の数によって決まります。有効桁数というのは、小数点以上の 0 でない桁の数と、小数点以下の全桁数を合計したものです。小数点以上に 0 の桁しかない場合には、小数点以下で最上位にある 0 以外の桁から、右端の桁までが有効桁数になります。入力されたすべてのデータは、レポートされる結果の精度と表示方法に合わせて正しく書式化される必要があります。

以下はすべて、有効桁数 4 桁の数の例です。

3517

3. 517

0. 0003517

表示方法では、どの結果でも小数点位置が変わらないように指定することができます。デフォルトの書式タイプでは、小数点以下 4 桁までが表示されます。

上の例にデフォルトの表示方法を適用すると、以下のようになります。

3517. 0000

0003. 5170

0000. 0003

Cerity システムでデフォルトの書式タイプが適用されるフィールドは、以下の通りです。

- **【アマウント】**－ 小数点以下 4 桁まで表示されます。数値がフィールド幅より大きい場合は、デフォルトで指数表記になります。
- **【面積】**－ 小数点以下 4 桁まで表示されます。数値がフィールド幅より大きい場合は、デフォルトで指数表記になります。
- **【高さ】**－ 小数点以下 4 桁まで表示します。数値がフィールド幅より大きい場合は、デフォルトで指数表記になります。
- **【ピーク幅】**－ 小数点以下 4 桁まで表示されます。数値がフィールド幅より大きい場合は、デフォルトで指数表記になります。
- **【レスポンスファクタ】**－ 小数点以下 4 桁まで表示されます。数値がフィールド幅より大きい場合は、デフォルトで指数表記になります。
- **【レスポンスファクタ標準偏差】**－ 小数点以下 4 桁まで表示されます。数値がフィールド幅より大きい場合は、デフォルトで指数表記になります。
- **【リテンションタイム】**－ 小数点以下 2 桁まで表示されます。数値がフィールド幅より大きい場合は、デフォルトで指数表記になります。
- **【サンプルアマウント】**－ 小数点以下 4 桁まで表示されます。数値がフィールド幅より大きい場合は、デフォルトで指数表記になります。
- **【日付】**－ 「dd/MM/yyyy」と表示されます。ここで、dd= 日、MM= 月、yyyy= 年です。
- **【時刻】**－ 「HH:mm:ss」と表示します。ここで、HH= 時、mm= 分、ss= 秒です。
- **【日時】**－ 「dd/MM/yyyy、HH:mm:ss」と表示されます。

Cerity 管理者は、Cerity ソフトウェア管理コンソールを使って、結果の**【精度】**、**【範囲】**、および、**【例の表示】**を、各数値書式ごとに選択することができます。

6 システムリファレンス

データ書式

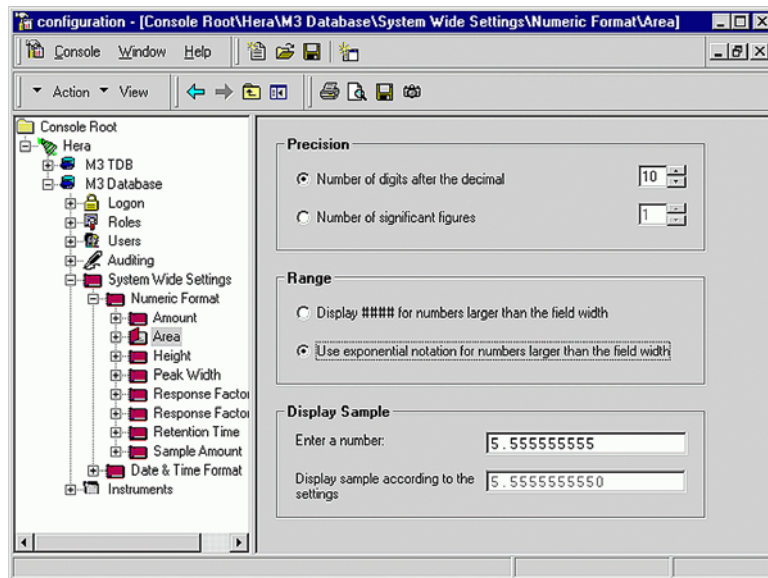


図 14 数値書式

日付や時刻のスタイルは、[日付と時刻の設定] パネル（105 ページの図 15 を参照）を使って選択することができます。

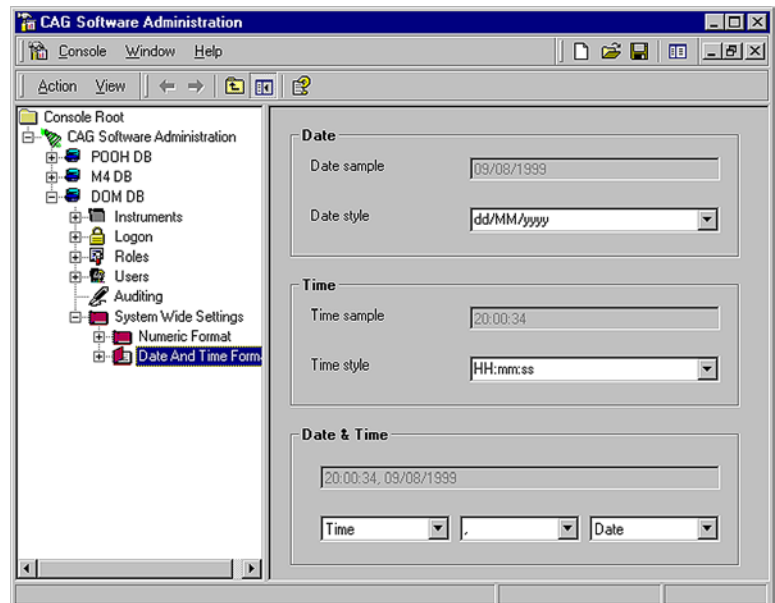


図 15 日付と時刻の書式

Cerity には、他にも以下のような数値書式文字列があります。

小数点以下 4 桁まで表示されます。数値がフィールド幅に収まらない場合は、デフォルトで指数表示になります。

有効桁数 4 桁まで表示されます。数値がフィールド幅に収まらない場合は、デフォルトで "####" になります。

有効桁数 4 桁まで表示されます。数値がフィールド幅に収まらない場合は、デフォルトで指数表示になります。

フィールド幅は 10 文字です。小数点以下 4 桁まで表示されます。数値がフィールド幅に収まらない場合は、デフォルトで "####" になります。

フィールド幅は 10 文字です。有効桁数 4 桁まで表示します。数値がフィールド幅に収まらない場合は、デフォルトで "####" になります。

精度と正確さに対するシステムの影響

永続的データの精度は、有効桁数 14 桁です。誤差伝播の評価によると、永続的データの誤差は最高でも 3 桁までしか増えず、最低でも 10 桁の精度が確保されることがわかっています。クロマトグラフの測定誤差は、これよりはるかに大きいので、数値計算上の誤差は無視できると考えられます。また、結果の正確さに影響するような系統誤差は見つかっていません。

注

Cerity の計算は、常に倍精度で行われます。この計算の精度は、[精度]、[範囲]、[例の表示] などの設定とは無関係です。

したがって、Cerity に表示される結果と、同じ計算を Microsoft Excel などのスプレッドシートや電卓を使って行った場合とでは、結果が微妙に異なることがあります。このような場合には、デフォルトの設定を変更して、値の表示精度を上げてみることをお勧めします (103 ページ参照)。

カスタム計算の精度と有効桁数

Cerity システムの標準の数値フィールド、有効桁数、フィールド幅、精度などは、内部的に定義されています。カスタム計算の結果フィールドについては、ユーザーが有効桁数、フィールド幅、および精度を定義することができます。

また、カスタム計算の表示も制御することが可能です。

カスタム計算結果の桁数は、以下の要件を満たすように指定されます。

- 先頭の '0' は空白に置き換える。小数点の前には必ず '0' を 1 つ置く。
- '0' が入力されるのは、有効桁の値が 0 であるときだけ。

1234. 123 という数を有効桁数 5 桁で表示すると、1234. 100 ではなく、1234. 1 になります。

1234. 123 という数を有効桁数 3 桁で表示すると、1230. 000 ではなく、1230 になります。

- フィールド幅に収まらない数値は、指数形式で入力してください。さもないと、その数値は“####”というふうに表示されます。
- 数値を指数形式で表示する場合、仮数部の桁数が桁数指定を超えてはなりません。
- 数値をテーブルに表示する場合には、列ごとに小数点位置を揃える必要があります。
- 表示文字数の指定には、符号や小数点などの数字以外の文字も含まれます。

数値書式の規則

ラボが公定の必要条件またはテストの必要条件に準拠しているかどうかは、ラボで観察された分析結果を規定のリミットと比較することにより判定されます。ラボで観察もしくは計算された値は、通常、規定のリミット値より多くの有効桁数を含んでいます。規制対象となっているラボは、仕様書に規定されている精度で結果をレポートする必要があります。たとえば、仕様書の規定が、微量不純物のレベルは 0.1% を超えてはならないとなっている場合、仕様書と比較する前に、最終結果を小数点以下 1 桁に四捨五入しておく必要があります。

丸め規則

データを精度のガイドラインにしたがって表示するには、数値結果を丸めなければならないことがあります。Cerity システムでは、丸め規則として最も一般的に使われている、会計計算用の四捨五入の規則が使われます。丸め規則というのは、正しい有効桁数の数値を生成するための、最終桁の丸め方の規則のことです。

リミット値の式を満たさなくてはならない計算結果の、入力値を丸めた後の各位の数は、次の規則に基づいて決めることができます。

- リミット値の式の最後の位の右の小数位にある 1 つの数だけを考えます。
- その数が 5 より小さい場合は、その数は削除し、その前の数はそのまま変更しません。
- その数が 5 より大きい場合は、その数を削除し、その前の数を 1 増やします。
- その数が 5 である場合は、その 5 を削除し、その前の数を 1 増やします。

例 次の表に、数値を必要条件と比較するために、検査する値がどのように四捨五入されるかを示します。

表 6 比較される数値の四捨五入

公定必要条件	四捨五入前の値	四捨五入の結果	合格
リミット値検査 $\geq 98.0\%$	98.03%	98.0%	はい
	97.92%	98.0%	はい
	97.92%	98.0%	はい
リミット値検査 $\leq 101.5\%$	101.55%	101.6%	いいえ
	101.46%	101.5%	はい
	101.45%	101.5%	はい
リミット値検査 $\leq 0.02\%$	0.025%	0.03%	いいえ
	0.015%	0.02%	はい
	0.023%	0.02%	はい
リミット値検査 $\leq 3\text{ppm}$	0.00035%	0.0004%	いいえ
	0.00025%	0.0003%	はい
	0.00028%	0.0003%	はい

サンプルまたはシーケンスのインポート

Cerity NDS には、サンプルまたはシーケンスをインポートするためのユーザーインターフェイスが用意されています。インポートコンポーネントには、データ転送形式のプロトコルを設定して、Cerity NDS にインポート可能な対象を定義する、XML ファイル、および、汎用 XML DTD (Document Type Definition: 文書型定義) が必要です。データ転送形式の設定が済んだら、[インポートするサンプル XML データ] ダイアログボックスに必要なデータを入力すれば、サンプルやシーケンスをインポートすることができます (オンラインヘルプを参照)。

注意

XML- ファイルを、直接編集することは避けてください。インポートする XML- ファイルに不正な値があると、エラーの原因になります。

インターフェイス DTD

```
<!-- ラボのデータ交換ファイル用サンプル DTD -->
<!ELEMENT limsData (limsSystemName, limsDBName,
creationTS, DTDVersion, CDSName, CDSMethod?,
CDSInstrument?, (sequence+|samples+), checkSum?)>
<!ELEMENT limsSystemName (#PCDATA)>
<!ELEMENT limsDBName (#PCDATA)>
<!ELEMENT creationTS (#PCDATA)>
<!ELEMENT DTDVersion (#PCDATA)>
<!ELEMENT CDSName (#PCDATA)>
<!ELEMENT CDSMethod (#PCDATA)>
<!ATTLIST CDSMethod
  ID CDATA #IMPLIED
  Rev CDATA #IMPLIED
  Library CDATA #IMPLIED
  Displayname CDATA #IMPLIED>
<!ELEMENT CDSInstrument (#PCDATA)>
<!ATTLIST CDSInstrument
```

```

    ID CDATA #IMPLIED
    Rev CDATA #IMPLIED>
<!ELEMENT sequence (Name, LIMSID?, CDSInstrument, Owner,
Priority?, samples+)>
<ATTLIST sequence
    ID CDATA #IMPLIED
    Rev CDATA #IMPLIED>
<!ELEMENT Name (#PCDATA)>
<!ELEMENT LIMSID (#PCDATA)>
<!ELEMENT Owner (#PCDATA)>
    OwnerID CDATA #IMPLIED>
<!ELEMENT Priority (#PCDATA)>
<!ELEMENT samples (sample+)>
<!ELEMENT sample (LIMSID?, Name, sampleType, productCode,
Description?,
    Submitter, sampleAmount?, CDSInstrument?, CDSMethod?,
analyekAs,
    calibration? numberOfInj, Multipliers?, Devisors?,
userDefVariables?,
    requiredResults, optionResults?)>
<!ATTLIST sample
    ID CDATA #REQUIRED
    Rev CDATA #IMPLIED
    status (underTest) | resultsExists | reviewed | peer
reviewed | Accepted)
    nderTest •
<!ELEMENT Description (#PCDATA)>
<!ELEMENT sampleType (#PCDATA)>
<!ELEMENT productCode (#PCDATA)>
<!ELEMENT Submitter (#PCDATA)>
<!ATTLIST Submitter
    IC CDATA #IMPLIED>
<!ELEMENT sampleAmount (#PCDATA)>
<!ATTLIST sampleAmount
    units CDATA #IMPLIED>
<!ELEMENT analyzeAs (#PCDATA)>
<!ELEMENT calibration (#PCDATA)>
<!ATTLIST calibration
    type (average |replace) "replace"
    level CDATA #REQUIRED>

```

6 システムリファレンス

サンプルまたはシーケンスのインポート

```
<!ELEMENT numberOfInj (#PCDATA)>
<!ELEMENT Multipliers (Multiplier+)>
<!ELEMENT Multiplier (#PCDATA)>>
<!ATTLIST Multiplier
  alias CDATA #IMPLIED
  units CDATA #IMPLIED>
<!ELEMENT alias (#PCDATA)>
<!ELEMENT units (#PCDATA)>
<!ELEMENT userDefVariables (userDefVariable+)>
<!ELEMENT userDefVariable (name, value)>
<!ATTLIST userDefVariable
  units CDATA #IMPLIED>
<!ELEMENT name (#PCDATA)>
<!ELEMENT value (#PCDATA)>
<!ELEMENT requiredResults ((result | result table)+)>
<!ELEMENT optionalResults ((result |resultTable)+)>
<!ELEMENT result (name, value, Description?, units,
requiredBy)>
<!ATTLIST result
  LIMSresultID CDATA #IMPLIED>
<!ELEMENT tableName (#PCDATA)>
<!ELEMENT columnDefinitions (columnDefinition+)>
<!ELEMENT columnDefinition (name, unit?)>
<!ELEMENT resultTableRows (resultTableRow+)>
<!ELEMENT resultTableRow (columns)>

<!ATTLIST resultTableRow
  resultRowID CDATA #IMPLIED>
<!ELEMENT columns (column+)>
<!ELEMENT column (value)>
<!ATTLIST column
  columnID CDATA #IMPLIED> <!ELEMENT checkSum (#PCDATA)>
```

DTD ファイルの使用法については、<http://www.w3.org> にあるマニュアルを参照してください。

サンプルシーケンス XML ファイル

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<!DOCTYPE limsData SYSTEM "CerityCDSdtd.dtd">
<limsData>
  <limsSystemName>limssys-xyz</limsSystemName>
  <limsDBName>DB1</limsDBName>
  <creationTS>Feb 15 2000 9:40:00</creationTS>
  <DTDVersion>1.7</DTDVersion>
  <CDSName>Atlas-1</CDSName>
  <CDSMethod ID="Has it to be a
number?" Rev="2">1c1seqmeth
  </CDSMethod>
  <CDSInstrument ID="1102" Rev="1"> 1c1 </CDSInstrument>
  <sequence>
    <Name> mySequence </Name>
    <CDSInstrument ID="1102" Rev="1">Mio20</CDSInstrument>
    <Owner OwnerID="1102"> subbu </Owner>
  </sequence>
  <samples>
    <sample ID="Has sampleID to be a number" Rev="1">
      <LIMSID>00-AA-00</LIMSID>
      <Name>GB NewSample0</Name>
      <sampleType>SMP</sampleType>
      <productCode>yyy1</productCode>
      <description>blah blah0</description>
      <Submitter ID="internalID">Gudrun</Submitter>
      <CDSInstrument ID="1102" Rev="1">Mio20</CDSInstrument>
      <CDSMethod ID="IN-01" Rev="1"> gb0215-ss-mio20
    </CDSMethod>
    <analyzeAs> Blank </analyzeAs>
    <numberOfInj>1</numberOfInj>
    <Multipliers>
      <Multiplier alias="Multiplier"
units="g">34.5</Multiplier>
      <Multiplier alias="dilution Factor"
units="g">12.3</Multiplier>
    </Multipliers>
    <Divisors>
```

6 システムリファレンス

サンプルまたはシーケンスのインポート

```
<Divisor alias="Purity" units="g">23.4</Divisor>
</Divisors>
</sample>
</samples>
</sequence>
<checksum/>
</limsData>
```

索引

A

ABS 63
ACOS 74
ACOSH 74
Address 63
AND 76
ASIN 74
ASINH 74
ASTM 法 90
ATAN 75
ATAN2 75
ATANH 75
AVERAGE 72

B

BP 81

C

CALL 63
CEILING 64
CHAR 64
CHOOSE 64
CLEAN 64
CODE 64
COLUMN 64
COLUMNS 64
CONCATENATE 64
COS 74
COSH 74
COUNT 64
COUNTA 64

COUNTIF 64

D

DAB 81
DATE 65
DATEVALUE 65
DAY 65
DAYS360 65

E

EP 81
ERROR.TYPE 65
ESTD 52
ESTD% 56
EVEN 65
EXACT 65
EXP 65

F

FACT 65
FALSE 78
FIND 65
FINDB 66
FIXED 66
FLOOR 66

H

HLOOKUP 67
HOUR 66

索引

I

IF 76
INDEX 66
INDIRECT 66
INT 66
ISBLANK 76
ISERR 76
ISERROR 76
ISLOGICAL 76
ISNA 76
ISNONTEXT 76
ISNUMBER 76
ISREF 77
ISTD 30, 53
ISTD% 56
ISTEXT 77

J

JP 81

L

LEFT 66
LEFTB 66
LEN 66
LENB 66
LN 68
LOG 67
LOG10 67
LOOKUP 67
LOWER 67

M

MATCH 67

MAX 67
MID 68
MIDB 68
MIN 68
MINUTE 68
MOD 68
MONTH 68

N

N 68
NA 68
NOT 77
NOW 68

O

ODD 68
OFFSET 68
OR 77

P

PI 78
PRODUCT 69
PROPER 69

R

RAND 69
REGISTER.ID 69
REPLACE 69
REPLACEB 69
REPT 69
RIGHT 69
RIGHTB 69
ROUND 70

ROUNDDOWN 70
ROUNDUP 70
ROW 70
ROWS 70

S

S/N 比 89
SEARCH 70
SEARCHB 70
SECOND 70
SIGN 70
SIN 74
SINH 74
SLN 70
SQRT 70
STDEV 72
STDEVP 72
SUBSTITUTE 70
SUM 72
SUMIF 72
SUMSQ 73

T

T 76
TAN 74
TANH 74
TEXT 70
TIME 71
TIMEVALUE 71
TODAY 71
TRIM 71
TRUE 78
TRUNC 71
TYPE 71
t 検定 43

U

UPPER 71
USP 81

V

VALUE 71
VAR 73
VARP 73
VLOOKUP 67

W

WEEKDAY 71

Y

YEAR 71

あ

アクセス
 管理 3
アクセス管理 3
アマウント乗数 50

え

英国薬局方 81
演算子 62

お

重み 37
折れ線近似 36

索引

か

外部標準 52
確認 18
化合物
 キャリブレーションされていない 58
化合物確認 18
化合物テーブル 60

き

希釈率ファクタ 51
却下レベル 20
キャリブレーション
 ファクタ 49
キャリブレーションされていない化合物 58
キャリブレーションポイントの重み付け 37
曲線近似
 折れ線 36
 三次 33
 指数 35
 対数 35
 直線 32
 二次 33
 べき乗 35
 レスポンスファクタの平均 37

く

空隙時間 83

け

警告レベル 20
原点 32, 36
検量
 曲線 31

さ

最小レスポンス範囲 14
残差
 相対 41
残差スペクトル 19
残差標準偏差 41
三次曲線近似 33
算術演算子 62
サンプルアmount 51
サンプル乗数 50
サンプル除数 51

し

指数曲線近似 35
システム適合性 82
純度 19
乗数 50
 サンプル 50
書式タイプ, 数値 103
シンメトリ
 ピーク 84

す

数値書式、規則 108
スペクトル抽出 11
スペクトル取込 10
スペクトル保存 11

せ

正確さ 102, 106
精度 102, 106
精度、カスタム計算 106
選択性 89

そ

相関係数 40
相対アマウント 54
相対残差 41
相対レスポンス 46, 54

た

対数曲線近似 35
高さ % 48
タンジェントピーク幅 84
段数 85
段の高さ 85

ち

抽出
 スペクトル 11
直線近似 32

て

テーリングファクタ 84
デッドタイム 83

と

ドイツ薬局方 81
統計計算 40
同定されていないピーク 58
取込
 スペクトル 10
ドリフト 91

な

内部標準 30, 53

に

二次曲線近似 33
日本薬局方 81

ね

ネットリテンションタイム 83

の

ノイズ 90
ノイズスレッショールド 17

は

波長範囲 11
バックグラウンド補正 15
範囲 103

ひ

ピーク
 同定されていない 58
ピークグループ 60
ピーク幅 84
標準偏差
 残差 41

ふ

フィールドタイプ, 数値 102
浮動平均 29
分割
 品質 87
分離能 87

索引

へ

平均レスポンスファクタ近似 [37](#)

米国薬局方 [81](#)

べき乗曲線近似 [35](#)

変動 [91](#)

ほ

補正 % [57](#)

補正ファクタ [50](#)

保存

 スペクトル [11](#)

め

面積 % [48](#)

や

薬局方 [81](#)

 英国 [81](#)

 日本 [81](#)

 米国 [81](#)

 ヨーロッパ [81](#)

よ

容量比 [83](#)

容量ファクタ [83](#), [89](#)

ヨーロッパ薬局方 [81](#)

り

リテンションタイム [82](#)

リミット値、ピークパラメータ [93](#)

リミット値チェック [96](#)

る

類似値 18

れ

レスポンス % 48

レスポンス範囲

最小 14

レスポンスファクタ 49

レベル 20

本書の内容

このガイドは、上級ユーザー、システム管理者、および Cerity Networked Data System for Pharmaceutical QA/QC のバリデーション担当者向けに書かれたものです。

このガイドには、Cerity で結果を算出するための計算の詳細が含まれています。

© Agilent Technologies Deutschland GmbH 2003

Printed in Germany
12/2003



G4000-96024



Agilent Technologies