# Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition

# Concepts et procédures

**Agilent Technologies** 

# Avertissements

© Agilent Technologies, Inc. 2010-2011, 2012

Conformément aux lois nationales et internationales relatives à la propriété intellectuelle, toute reproduction totale ou partielle de ce manuel sous quelque forme que ce soit, par quelque moyen que ce soit, voie électronique ou traduction, est interdite sans le consentement écrit préalable de la société Agilent Technologies, Inc.

#### Référence du manuel

M8301-93013

### **Edition**

04/2012

Imprimé en Allemagne

Agilent Technologies Hewlett-Packard-Strasse 8 76337 Waldbronn

Ce produit peut être utilisé en tant que composant d'un dispositif de diagnostic in vitro, si ce dernier est enregistré auprès des autorités compétentes et est conforme aux directives correspondantes. Faute de quoi, il est exclusivement réservé à un usage général en laboratoire.

#### Version du logiciel

Ce guide est valide pour la version C.01.04 de Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition.

Microsoft® est une marque déposée de Microsoft Corporation aux États-Unis.

### Garantie

Les informations contenues dans ce document sont fournies "en l'état" et pourront faire l'objet de modifications sans préavis dans les éditions ultérieures. Dans les limites de la législation en vigueur, Agilent exclut en outre toute garantie, expresse ou implicite, quant à ce manuel et aux informations contenues dans ce dernier, notamment, mais sans s'y restreindre, toute garantie marchande et aptitude à un but particulier. En aucun cas, Agilent ne peut être tenu responsable des éventuelles erreurs contenues dans ce document, ni des dommages directs ou indirects pouvant découler des informations contenues dans ce document, de la fourniture, de l'usage ou de la qualité de ce document. Si Agilent et l'utilisateur ont souscrit un contrat écrit distinct dont les conditions de garantie relatives au produit couvert par ce document entrent en conflit avec les présentes conditions, les conditions de garantie du contrat distinct se substituent aux conditions stipulées dans le présent document.

### **Licences technologiques**

Le matériel et le logiciel décrits dans ce document sont protégés par un accord de licence et leur utilisation ou reproduction sont soumises aux termes et conditions de ladite licence.

#### Mentions de sécurité

### ATTENTION

Une mention **ATTENTION** signale un danger. Si la procédure, le procédé ou les consignes ne sont pas exécutés correctement, le produit risque d'être endommagé ou les données d'être perdues. En présence d'une mention **ATTENTION**, vous devez continuer votre opération uniquement si vous avez totalement assimilé et respecté les conditions mentionnées.

### AVERTISSEMENT

Une mention AVERTISSEMENT signale un danger. Si la procédure, le procédé ou les consignes ne sont pas exécutés correctement, les personnes risquent de s'exposer à des lésions graves. En présence d'une mention AVERTISSEMENT, vous devez continuer votre opération uniquement si vous avez totalement assimilé et respecté les conditions mentionnées.

### Dans ce guide...

Ce guide décrit les concepts de Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition. Dans le document suivant, le terme ChemStation fait toujours référence à Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition.

Ce manuel décrit l'utilisation de l'acquisition de données, les analyses et des fonctions de rapportOpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.04 afin d'améliorer la productivité du laboratoire.

#### 1 Concepts basiques de OpenLAB CDS ChemStation Edition

Ce chapitre décrit les principes d'utilisation de ChemStation, y compris la commande à distance, l'interface graphique et les vues ChemStation.

#### 2 Travailler avec des méthodes

La méthode est une partie vitale de ChemStation ; ce chapitre décrit les concepts en détails.

#### 3 Acquisition de données

Ce chapitre contient une présentation du processus d'acquisition de données.

#### 4 Automatisation/Séquences

Ce chapitre présente les principes de l'automatisation. Il décrit l'utilisation de séquences dans la ChemStation, le processus d'analyse d'une séquence et la personnalisation des séquences.

#### 6 Principes d'analyse et de révision des données

Ce chapitre décrit les options disponibles pour l'analyse et la révision des données, Dans OpenLAB CDS ChemStation Edition, ces options sont disponibles dans deux vues distinctes.

### 7 Étalonnage

Ce chapitre présente les principes de l'étalonnage.

### 8 Création de rapports

Ce chapitre décrit les principes de la création intelligente de rapports et classique.

### 9 Principes et fonctions propres à l'EC

Ce chapitre ne vous concerne que si vous utilisez le logiciel ChemStation pour contrôler des instruments EC.

### Sommaire

### 1 Concepts basiques de OpenLAB CDS ChemStation Edition 7

Termes et abréviations 8 Introduction 9 Contrôle de l'instrument à distance 10 À propos du logiciel ChemStation 13 Structure des données de ChemStation 33

### 2 Travailler avec des méthodes 37

Qu'est-ce qu'une méthode ?39Parties d'une méthode 4040Types de méthodes 435Création de méthodes 4546Administration des méthodes 5050Pendant l'exécution d'une méthode 54

### 3 Acquisition de données 61

Qu'est-ce que l'acquisition des données ? 62 Moniteurs en temps réel 64 Journal 65 Informations sur l'état 66

### 4 Automatisation/Séquences 69

Qu'est-ce que l'automatisation ? 71 Que sont les séquences et les modèles de séquence ? 72 Paramètres de séquence 73 Table de séquence 74 Création de séquences(séquences et modèles de séquence) 75 Séquence simple 77 Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence) 82 Fichier journal de séquence 93 Procédure d'analyse de séquence 94

#### Sommaire

Structure d'un fichier de données de séquence96Fonctionnement post-séquence105Réétalonnage automatique107Spécification de réétalonnages108Types de séquence111

#### 5 File d'attente et planificateur 125

Flux de travail supportés126Utilisation de la file d'attente128Utilisation du planificateur131

### 6 Principes d'analyse et de révision des données 133

Analyse de données 134 Révision 148

### 7 Étalonnage 151

Terminologie152Types d'étalonnage153Table d'étalonnage160Sommation des pics161Échantillons inconnus162Réétalonnage163

#### 8 Création de rapports 167

Qu'est-ce qu'un rapport ?168Création de rapports classique et intelligente169Création intelligente de rapports170Création de rapports classique179

#### 9 Principes et fonctions propres à l'EC 191

Fonctions propres à l'EC ChemStation Agilent dans la vue Méthode et Contrôle de méthode et d'analyse 192 Type de sommet de pic 195 Types d'étalonnages 196 EC-DDM 199 Sous-répertoires de méthode pour différents modes EC 200



# **Concepts basiques de OpenLAB CDS ChemStation Edition**

Termes et abréviations 8 Introduction 9 Contrôle de l'instrument à distance 10 À propos du logiciel ChemStation 13 Système d'exploitation 13 Stockage centralisé des données 13 Méthodes et séquences 13 Configuration du système 14 Options de téléchargement disponibles 14 Modèle de données 15 Conventions de noms de fichiers 16 Interface utilisateur du logiciel 19 Acquisition des données 22 Analyse de données 23 Création de rapports 26 Utilitaires et compatibilité 27 Personnalisation 27 Automatisation 27 Liste d'attente et planificateur 29 Bonnes pratiques de laboratoire (BPL) 30 Structure des données de ChemStation 33 Structure des données de ChemStation 33

Ce chapitre décrit les principes d'utilisation de ChemStation, y compris la commande à distance, l'interface graphique et les vues ChemStation.



1 Concepts basiques de OpenLAB CDS ChemStation Edition Termes et abréviations

# Termes et abréviations

Terme	Description
ChemStation	Edition OpenLAB CDS ChemStation
EZChrom	Edition OpenLAB CDS EZChrom
Stockage des données	Stockage des données OpenLAB
ECM	Gestionnaire OpenLAB Enterprise
RC .Net	RapidControl .Net Interface

Tableau 1 Termes et abréviations utilisés dans ce document

# Introduction

Agilent OpenLABest un portefeuille de logiciels de laboratoires, qui fournit une architecture ouverte réutilisable et des interfaces standardisée. Il existe différentes solutions OpenLAB pour chaque étape du cycle de vie de données scientifiques :

• Système de données chromatographiques (CDS)

OpenLAB CDS est disponible en tant que EZChrom Edition ou en tant que ChemStation Edition. Ce manuel décrit ChemStation Edition.

- Gestion documentaire d'entreprises (ECM)
- Carnet électronique de laboratoire (ELN)

OpenLAB CDS apporte le contrôle d'instrument complet de l'instrumentation LC, GC, CE, CE-MS et LC-MSD d'Agilent. Il offre des outils pour l'acquisition, l'analyse et l'interprétation de résultats à l'aide du contrôle d'instruments utilisant plusieurs techniques et issus de plusieurs fournisseurs. Vous démarrez le logiciel de chromatographie depuis la console de commande OpenLAB, où vous accédez à toutes les fonctions proposées par les Services partagés Open-LAB.

# Contrôle de l'instrument à distance

Dans une configuration avec un système distribué, vous pouvez configurer et démarrer vos instruments ChemStation à partir de n'importe quel panneau de configuration d'OpenLAB connecté au serveur des Services partagés Open-LAB.

### Démarrer des instruments

Pour configurer et démarrer vos instruments, vous pouvez utiliser les boutons *Configurer l'instrument, Lancer en ligne* et *Lancer hors ligne* dans le panneau de configuration d'OpenLAB. Comme dans les configurations de station de travail ou de station de travail en réseau, la boîte de dialogue de configuration des instruments s'exécute sur le PC local. Cependant, avec une configuration avec un système distribué, l'application ChemStation elle-même s'exécute sur une machine AIC (Agilent Instrument Control), et vous accédez à l'application via une connexion du Bureau à distance à la machine AIC.

Les fenêtres ChemStation distantes sont montrées indépendamment du panneau de configuration OpenLAB ; vous pouvez démarrer un instrument, fermer le panneau de configuration, et continuer d'utiliser l'instrument. De plus, vous pouvez exécuter plusieurs instances du panneau de configuration Open-LAB sur le même client en utilisant des informations d'identification différentes. Les différentes informations d'identification se propageront sur les instruments que vous démarrez à partir du panneau de configuration Open-LAB correspondant.

Vous pouvez identifier les instruments exécutés sur une machine AIC distante par le titre de la fenêtre, qui contient à la fois le nom de l'instrument et le nom AIC.

### Déconnexion de la session

Les instruments exécutés sur une machine AIC sont indépendants du client à partir duquel vous avez ouvert la connexion Bureau à distance. Si le client se déconnecte, par exemple, du fait d'une panne du réseau, une séquence exécutée sur l'instrument se poursuit sans en être affectée. Pour reprendre le contrôle de l'instrument après la reprise du réseau, il suffit de cliquer de nouveau sur les boutons *Lancer en ligne* ou *Lancer hors ligne*. Pour vous déconnecter intentionnellement, cliquez sur le bouton **Close** ou sélectionnez **File > Exit**. La boîte de dialogue **Close** offre un bouton **Disconnect** supplémentaire. En vous déconnectant, vous coupez la connexion Bureau à distance tout en laissant l'instrument fonctionner.

### REMARQUE

REMARQUE

Vous pouvez déconnecter la connexion Bureau à distance lorsqu'une séquence fonctionne.

Pour vous reconnecter à cet instrument, il suffit de cliquer de nouveau sur les boutons *Lancer en ligne* ou *Lancer hors ligne* dans le panneau de configuration d'OpenLAB. Vous pouvez vous reconnecter à partir de n'importe quel panneau de configuration d'OpenLAB connecté au serveur des Services partagés OpenLAB.

Si vous cliquez sur *Lancer hors ligne* pour vous reconnecter à un instrument en ligne, ou vice versa, vous voyez deux fenêtres d'instrument, une pour l'instrument en ligne, l'autre pour l'instrument hors ligne.

### Prise de contrôle de session

Vous prenez le contrôle à distance de la session en cliquant sur les touches Lancement en ligne ou Lancement hors ligne de la consolde de commandes OpenLAB sur un autre PC.

• Si vous avez lancé un outil depuis la console de commandes OpenLAB sur le PC 1, connectez-vous à une console de commandes OpenLAB sur le PC 2 avec les mêmes identifiants et lancez le même instrument, pour prendre en mains la session et continuer sur le PC 2 ce que vous avez commencé sur le PC 1.

Aucun avertissement n'est affiché si le nouvel utilisateur et l'ancien ont les mêmes informations d'identification.

 Si un autre utilisateur a lancé l'instrument depuis la console de commandes OpenLAB sur un PC différent, et que vous avez l'autorisation de Take over ChemStation Remote Session, vous pouvez également prendre en main cette session. Dans ce cas, l'autre utilisateur reçoit un message indiquant que vous allez prendre le contrôle de la session. Dès que l'autre utilisateur a accusé réception de ce message, la fenêtre de l'instrument est fermée sur le PC de cet utilisateur et ouverte sur votre PC. L'autre utilisateur reçoit un message indiquant quel utilisateur a pris le contrôle de la session.

Les instruments en ligne et hors ligne sont inclus dans la même session et sont donc toujours transférés ensemble. Si un instrument en ligne et un instrument hors ligne sont toujours démarrés dans une session, la prise de contrôle transfère le contrôle des deux instruments, que vous ayez cliqué sur le bouton *Lancer en ligne* ou sur le bouton *Lancer hors ligne*. Si vous cliquez sur *Lancer hors ligne* et si la session ne comporte qu'un seul instrument en ligne, ou vice versa, vous voyez deux fenêtres d'instrument, une pour l'instrument en ligne, l'autre pour l'instrument hors ligne.

# À propos du logiciel ChemStation

### Système d'exploitation

Le logiciel C.01.04ChemStation requiert le système d'exploitation Microsoft Windows XP Professionnel SP3, Windows Vista Business SP2 ou Windows 7.

La fonction tableur du logiciel ChemStation requiert Microsoft Excel.

### Stockage centralisé des données

Un système de stockage centralisé des données gère toutes les données électroniques indépendants aux formats propriétaires. Les données brutes de ChemStation (ainsi que les autres documents lisibles par les hommes, tels que les Workbook), sont stockés ensemble avec les*métadonnées*; ce qui permet de faciliter la recherche des documents. Les méthode ChemStation, les modèles de séquence, les modèles de rapport, et les fichiers de données (séquences et lectures seules) peuvent être chargés sur la bibliothèque centrale, puis téléchargés de nouveau sur ChemStation au besoin.

Agilent offre deux systèmes de stockage de données centralisés:

- *Le stockage de données OpenLAB* est une installation tout-en-un disponible sur OpenLAB CDS. Conçu pour les petits laboratoires contenant un maximum de 15 instruments.
- *OpenLAB ECM*, disponible en système indépendant. Conçu pour les laboratoire contenant plus de 15 instruments.

Pour plus d'informations à propos dees concepts de ChemStation à stockage de données centralisé, consultez l'édition *Agilent OpenLAB CDS ChemStation avec guide d'aide au stockage de données centralisé*.

### Méthodes et séquences

La méthode d'analyse décrit de manière détaillée la procédure d'une séparation spécifique. Elle comporte tous les paramètres associés aux activités de À propos du logiciel ChemStation

contrôle d'instrument, d'acquisition et d'évaluation des données, notamment l'intégration, la quantification et la création de rapports. Le système peut être programmé pour l'acquisition de données d'une série d'échantillons avec différentes méthodes. Le fichier de commande pour ce type d'opération est appelé "séquence". Une séquence comprend les informations de chaque échantillon, les références aux méthodes appropriées et les spécifications de réétalonnage automatique. Pour plus d'informations sur les méthodes et les séquences, voir la section « Automatisation/Séquences », page 69 et à l'aide en ligne.

### Configuration du système

Le système d'instruments est configuré à l'aide du panneau de configuration d'OpenLAB qui lance le programme d'édition de configuration. Vous permet de définir vos instruments, leurs adresses GPIB et LAN, les répertoires de vos données, les séquences et les méthodes ainsi que les dimensions de l'écran initial du logiciel ChemStation. De plus, vous pouvez activer ou désactiver la fonction de rapport intelligente et l'évaluation spectrale en 3D, ainsi que définir les options de téléchargements à utiliser.

### Options de téléchargement disponibles

Les options de téléchargement diponibles sur ChemStation, si la dernière méthode de la session précédente diffère des réglages de l'instrument en cours d'utilisation. Vous pouvez choisir entre différentes options:

· Download method to instrument

La dernière méthode sélectionnée est téléchargée vers l'instrument. Les réglages de l'instrument sont écrasés. Le comportement correspond aux révisions C.01.03 ou inférieures du logiciel ChemStation.

Upload method from instrument

Les réglages de l'instrument sont chargés sur la dernière méthode sélectionnée. La méthode est marquée comme modifiée.

#### New method from instrument

Les réglages de l'instrument sont chargés vers une nouvelle méthode ChemStation.

#### Always ask user to choose an option

Au démarrage de ChemStation, une fenêtre de dialogie s'affiche depuis laquelle vous pouvez choisir les options décrites ci-dessus. Depuis cette fenêtre, vous pouvez aussi comparer les réglages de l'instrument pour chaque module doté des réglages de la dernière méthode sélectionnée.

Lorsque vous comparez les dfférences, vous pouvez soit accéder à la liste complète de réglages, soit n'afficher que les différences.

REMARQUE

La fenêtre de dialogue évalue les réglages des instruments à pilotes RC.Net uniquement. Elle n'évalue pas les réglages des instruments à pilotes basiques.

### Modèle de données

Le logiciel ChemStation est conçu sur un modèle de données reposant sur une structure de mémoire appelée registre. Les registres sont des structures polyvalentes capables de contenir des informations et des données d'analyse à la fois pour les valeurs en deux dimensions (par exemple, temps/intensité) et en trois dimensions (par exemple, temps/intensité/longueur d'onde).

Le logiciel ChemStation fournit des commandes et des fonctions visant à construire, à développer, à extraire les registres et, à condition de ne pas affecter les données principales, à modifier ces registres. Pour plus d'informations, reportez-vous à la référence en ligne dans ChemStation sous **Help > Commands**.

### Conventions de noms de fichiers

### Noms de fichier et jetons

La plupart des fenêtres de dialogue de ChemStation vous demandent d'indiquer un nom de fichier ou un chemin d'accès, ou vous pouvez utiliser les jetons pour générer des noms dynamiquement. En fonction du nom de fichier ou du chemin d'accès, différents jetons sont disponibles. Sur les écrans suivants, plusieurs jetons sont utilisés comme exemples.

Les noms de fichiers ont l'aspect suivant:

	Choose token	
	Delete content	
< <u>SampleName&gt; <date> <time></time></date></u>		× ►

Tokens are display in blue color and with an underline

Les chemins d'ccès ont l'aspect suivant:

Choose token	
Browse for location	
Delete content	
/ <u><computer>/<instname></instname></computer></u> /	× … >

Tokens are displayed in blue color and with an underline

Dans chaque fenêtre de dialogue correspondant, le nom de fichier et le chemin d'accès sont affichés séparément.

Vous disposez des options suivantes pour travailler avec ce type de champs:

- Ajouter du texte statique
- Ciquez sur la flèche ( 🕨 ) pour choisir un jeton depuis la liste.

Appuyez sur la Flèche du bas pour choisir un jeton de la liste.

- Faites un double-clic droit sur les jetons déjà utilisés pour les remplacer par d'autres jetons de la liste.
- Cliquez sur la touche X pour supprimer le contenu du champ.

• Cliquez sur la touche à trois points (····) pour parcourir le chemin d'accès requis.

### **Conventions de noms**

Les règles ci-dessous permettent à ChemStation de créer et de traiter des noms valides de fichiers et de répertoires :

Les caractères suivants ne sont pas autorisés dans les noms de fichiers ou de répertoires :

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

Les noms de fichiers ou de répertoires comportant l'un de ces caractères peuvent poser problème au moment du chargement des fichiers dans la ChemStation. Par ailleurs, si le dossier d'installation contient ces caractères, la copie de retraitement n'est pas lancée. Si le caractère % est utilisé dans le dossier d'installation, certains raccourcis de ChemStation peuvent mal fonctionner.

Autres règles appliquées :

Tableau Z Garacteres restremts	Tableau 2	Caractères	restreints
--------------------------------	-----------	------------	------------

Paramètre ChemStation	Character
Nom des fichiers de méthode:	% et . (point décimal) ne sont pas autorisés
Sous-répertoire de données et sous-directoire de séquences:	[] + = ; , . (point décimal) et les espaces ne sont pas autorisés
Noms de fichiers de données en séquences	les espaces ne sont pas autorisés

Les noms de périphériques suivants sont réservés et ne peuvent pas être utilisés comme noms de fichiers :

- CON, PRN, AUX, NUL
- COMx (x représentant un chiffre compris entre 1 et 9)
- LPT1x (x représentant un chiffre compris entre 1 et 9)

Évitez aussi d'utiliser ces noms suivis d'une extension (par exemple Nul.txt).

#### **1** Concepts basiques de OpenLAB CDS ChemStation Edition

À propos du logiciel ChemStation

#### REMARQUE

Des systèmes d'exploitation en anglais, japonais et chinois ont été utilisés pour tester les conventions de noms. Agilent ne peut fournir aucune garantie quant à la prise en charge de systèmes d'exploitation dans d'autres langues que l'anglais et de leurs caractères spéciaux.

### Longueur maximale des noms de fichiers et de sous-répertoires ChemStation

Les spécifications de noms de fichiers et de sous-répertoires utilisées dans Agilent ChemStation sont :

 Tableau 3
 Longueur maximale des noms de fichiers et de sous-répertoires ChemStation

Fichier/sous-répertoire/chemin	Longueur de saisie maximale	Ajout auto- matique	Exemple
Nom de fichier de données de l'échan- tillon simple	60	.D	Demodad.d
Nom du fichier de données en séquen- ce, utilisant un préfixe/compteur	15	.D	longname000001.d
Méthode Séquence Hyperséquence Bibliothèques Modèles de rapports personnalisés	40	. M . S . HYP . UVL . FRP	def_lc.m def_lc.s def_lc.hyp demodad.uvl areapct.frp
Sous-répertoire de fichiers de données	40		démo (dans les informa- tions d'échantillons)
Sous-répertoire de séquence de don- nées	40		démo (dans les paramè- tres de séquence)

Fichier/sous-répertoire/chemin	Longueur de saisie maximale	Ajout auto- matique	Exemple
Nom du jeu de résultats	40		test_date_heure (créa- tion à l'aide des préféren- ces de séquence)
Chemin de données Chemin de méthode Chemin de séquence Chemin d'hyperséquence Chemin de bibliothèque Chemin de modèle de rapport person- nalisé	100	100	c:\chem32\1\data c:\chem32\1\methods c:\chem32\1\sequence c:\chem32\1\hyper c:\chem32\speclib c:\chem32\repstyle

Tableau 3 Longueur maximale des noms de fichiers et de sous-répertoires ChemStation

Tous les journaux ChemStation affichent les messages système sous leur forme développée et les chaînes d'informations sont imprimées sur plusieurs lignes. Certains rapports, par exemple les rapports de séquences, peuvent tronquer les noms de fichiers, de manière à faire tenir toutes les informations nécessaires sur le modèle de rapport.

### Interface utilisateur du logiciel

L'interface utilisateur du logiciel ChemStation est composée de vues qui regroupent des fonctionnalités selon les tâches d'analyse classiques. Les vues standard suivantes sont incluses dans toutes les configurations du logiciel :

- la vue Contrôle de méthode et d'analyse, pour le contrôle et l'acquisition des données provenant de l'instrument,
- la vue Analyse de données, pour la révision et la réévaluation des données acquises,
- la vue Révision pour faire une revue des données à l'aide de modèles de rapport spécifiques
- · la vue Mise en page de rapport, pour la conception de rapports spécifiques.

D'autres vues sont disponibles si des modules d'évaluation de données en option ont été installés ou pour certaines configurations d'instrument prenant en charge des procédures de vérification et de diagnostic. La vue ChemStation Companion permet aux opérateurs d'analyser des échantillons à partir d'un tableau préconfiguré convivial.

Le volet Navigation contient le bouton Navigation qui permet de basculer rapidement entre les vues ChemStation et l'Explorateur Chemstation à base d'arborescence. Le contenu de l'explorateur ChemStation dépend de la vue affichée et permet d'accéder aux différentes entités ChemStation.

Chaque vue est constituée d'un ensemble d'éléments standard d'interface utilisateur tels que des menus et des barres d'outils. La barre d'outils standard permet d'accéder rapidement aux informations communes de spécification du système telles que les méthodes et les séquences. La vue Contrôle de méthode et d'analyse comporte une barre d'état système, une zone d'informations d'échantillon (qui peut être configurée pour des analyses individuelles ou automatisées) et un diagramme de l'interface d'instrument pour les configurations CPG, EC et CPL. Le diagramme d'interface d'instrument comprend des zones dynamiques permettant d'accéder rapidement aux paramètres des instruments, ainsi qu'une présentation graphique animée de l'état de chaque analyse en cours. Il est possible de désactiver le diagramme d'instrument s'il n'est pas nécessaire, afin d'économiser de la mémoire et d'autres ressources Windows.

La vue Analyse de données ajoute à la barre d'outils standard des modes d'analyse de données spécifiques (recalcul, retraitement, intégration, étalonnage, création de rapports, annotations, comparaison de signaux, etc.) ainsi que des modes spécialisés si les modules correspondants sont installés. Chacun de ces modes d'analyse est associé à des outils spécifiques.

La vue Révision est disponible si la création intelligente de rapports est sélectionné pour l'instrument. Cette vue vous permet de réviser les données de manière très souple. Vous pouvez sélectionner toute combinaison de fichiers de données comme base pour la révision et appliquer tout modèle de rapport aux données sélectionnées. Le modèle de rapport sélectionné détermine la manière avec laquelle des données seront affichées et quel type d'information sera inclus dans le rapport ainsi créé. La barre d'outils comporte des fonctions pour imprimer et exporter les rapports créés.

La vue de Mise en page de rapport vous permet de définir la mise en page d'un modèle ou d'un style de rapport spécifique. Elle utilise également un ensemble de barres d'outils spécifiques pour cette tâche. Le type d'éditeur de modèle de rapport affiché dans cette vue dépend du type de création de rapport configuré pour l'instrument. Vous pouvez utiliser la création de rapport classique ou la création intelligente de rapports (reportez-vous à « Création de rapports », page 167).

### Panneau de navigation

Un panneau de navigation, qui se trouve à gauche de toutes les vues ChemStation, permet d'accélérer l'accès à de nombreux éléments ChemStation et de passer rapidement d'une vue à une autre. Ce panneau contient l'explorateur ChemStation (sous forme d'arborescence) et une zone de boutons configurables. Il comporte également une fonction de masquage automatique qui permet d'optimiser l'espace de travail du logiciel ChemStation et propose des fonctions standard (redimensionnement et réorganisation de la zone de boutons de navigation, par exemple).

### **Boutons de navigation**

Les boutons de navigation vous permettent de passer d'une vue du logiciel ChemStation à une autre. Pour ce faire, il vous suffit de cliquer sur le bouton de navigation concerné. Vous pouvez réduire, agrandir et réorganiser la section Navigation Button (Bouton de navigation).

### **Explorateur ChemStation**

Le contenu du panneau de navigation dépend de la vue. Pour les vues Contrôle de méthode et d'analyse, Analyse de données et Mise en page de rapports, l'explorateur ChemStation vous permet d'accéder aux différents éléments de la ChemStation. Pour les données, les méthodes et les séquences, ces éléments reposent par défaut sur les paramètres de l'éditeur de configuration. De nouveaux nœuds pour les méthodes, les séquences et l'emplacement des données peuvent être spécifiés à l'aide de l'option "Préférences" du menu de visualisation.

Boutons de navigation	Options de l'explorateur ChemStation	
Contrôle de méthode et d'analyse	Modèles de séquence/Méthodes de référence, métho- des du jeu de résultats	
Analyse de données	Méthodes de données/référence, méthodes du jeu de résultats	

Iduledu 4 Options uu paimeau ue navigati
--

### **1** Concepts basiques de OpenLAB CDS ChemStation Edition

À propos du logiciel ChemStation

Boutons de navigation	Options de l'explorateur ChemStation	
Révision	Modèles données/rapports	
Mise en page de rapport	Création de rapports classique : Méthodes de référence Création intelligente de rapports : Modèles de rapport	
Vérification (CPL et CPL/SM)	Raccourcis propres à la vue de vérification	
Diagnostique (CPL et CPL/SM)	Raccourcis propres à la vue de diagnostique	
Réglage (CPL/SM)	Raccourcis propres à la vue de réglage	

Tableau 4	Options du	panneau de	navigation

### Acquisition des données

Que le logiciel soit en cours d'exécution dans une fenêtre active ou réduit sous forme d'icône, l'écran indique le temps d'analyse écoulé, ainsi que l'état de l'instrument, qui fait l'objet d'un contrôle et d'une mise à jour permanents. Les transactions qui se produisent pendant l'analyse, y compris les erreurs et les paramètres de l'instrument au démarrage et à la fin de l'analyse, sont enregistrées dans l'historique du système, dont un extrait est stocké dans chaque fichier de données.

Les conditions de l'instrument (débit, température, pression, composition des solvants pour chromatographes en phase liquide, etc.) peuvent être enregistrées et stockées avec chaque fichier de données. Il est possible d'afficher et de représenter graphiquement ces paramètres afin de confirmer la qualité de chaque analyse. La nature exacte des paramètres enregistrés dépend à la fois de la technique et des capacités de l'instrument configuré.

Toutes les acquisitions de données standard (échantillons simples et lancements en séuence) sont ajoutés à la file d'attente puis activées depuis cet emplacement. Pour plus d' informations, voir « Flux de travail supportés », page 126.

Au moins une fenêtre d'affichage permet de surveiller en temps réel les données acquises par l'instrument. Ces données s'affichent en unités de mesure réelles (par exemple, en mUA, en volts, en degrés ou en bars). Chaque fenêtre affiche des signaux de chromatographie/électrophorèse superposés ou des paramètres d'instrument, par exemple la pression. Le système offre la possibilité de régler et d'enregistrer les paramètres d'affichage par défaut, permettant ainsi aux utilisateurs de configurer les paramètres voulus comme paramètres par défaut de l'instrument. La fenêtre est dotée d'une fonction de zoom et le curseur peut être utilisé pour afficher un signal de réponse spécifique à n'importe quel moment.

Au cours d'une analyse, toutes les fonctionnalités du logiciel ChemStation peuvent être utilisées via la copie hors ligne. Lorsque l'acquisition est en cours, la fonction de traitement des données est inaccessible depuis la session en ligne d'un instrument. Les données doivent donc être révisées dans la copie hors ligne.

Les utilisateurs qui souhaitent démarrer le traitement des données avant la fin de l'analyse doivent utiliser la fonction de capture d'écran. La capture, immédiatement disponible pour révision, doit s'effectuer dans la copie hors ligne des sessions de l'instrument.

La présentation des fenêtres affichant les informations d'état ou les signaux, y compris le schéma de l'interface d'un instrument, est enregistrée automatiquement.

Pour plus d'informations sur l'acquisition des données, reportez-vous à la section « Acquisition de données », page 61 et au système d'aide en ligne.

### Analyse de données

### Analyse de données — Affichage

La vue Analyse de données ajoute à la barre d'outils standard des fonctions d'analyse des données regroupées par tâches, notamment des boîtes à outils pour le recalcul, le retraitement, l'intégration, l'étalonnage, la création de rapports, les annotations et la comparaison de signaux. Voici les principales opérations graphiques possibles :

- sélection de l'affichage (à un ou plusieurs signaux) lors du chargement du chromatogramme/de l'électrophérogramme,
- superpositions du chromatogramme/de l'électrophérogramme à partir de différents échantillons,
- · soustraction de deux chromatogrammes/électrophérogrammes,
- alignement graphique vertical ou horizontal des signaux pour une meilleure comparaison visuelle,

#### **1** Concepts basiques de OpenLAB CDS ChemStation Edition

À propos du logiciel ChemStation

- projection en miroir ou inversion du signal pour une meilleure comparaison visuelle,
- affiche les caractéristiques des pics de performance pour certains pics intégrés spécifiques,
- · fonctions graphiques de défilement et de zoom,
- réglage des attributs d'affichage, y compris la sélection de graduations, de lignes de base, d'axes, de temps de rétention/migration et de noms de composés (vous pouvez aussi sélectionner la police des étiquettes de composés et de TR, régler la taille et l'orientation de l'affichage, choisir un affichage en mode séparé ou superposé et sélectionner des échelles),
- l'affichage du chromatogramme/de l'électrophérogramme peut inclure des superpositions graphiques des paramètres de l'instrument en fonction des capacités de l'instrument configuré,
- l'utilisateur peut ajouter de façon interactive des annotations personnalisées, mais aussi sélectionner la police, la taille, l'orientation et la couleur du texte (une fois définies, les annotations peuvent être graphiquement déplacées, modifiées ou supprimées),
- copie de l'écran dans le Presse-papiers Windows aux formats bitmap et métafichier,
- une fonction *mode de saisie* sert à afficher les valeurs des points de données dans les unités des détecteurs et
- à exporter des points numérisés de temps/d'intensité vers le Presse-papiers Windows.

### Analyse de données — Intégration

L'algorithme d'intégration ChemStation est la deuxième version d'une nouvelle génération qui vise à plus de robustesse, de fiabilité et de simplicité d'utilisation.

### Analyse de données - Quantification

Le mode d'étalonnage de la ChemStation de la vue de traitement de données permet l'affichage simultané des éléments suivants :

- le ou les signaux en cours d'étalonnage avec fenêtre des temps de rétention/migration du composé en cours,
- la table d'étalonnage dont l'affichage peut être configuré à partir d'une sélection complète de paramètres d'étalonnage et

· la courbe du composé en cours d'étalonnage.

Toutes les fenêtres du mode d'étalonnage sont liées de sorte que toute modification apportée à l'une d'elles s'applique automatiquement aux autres. Ce mode permet de modifier et de sélectionner les données d'étalonnage sur le graphique.

La quantification repose sur différents calculs (%, % normalisé, étalon externe, % d'étalon externe, étalon interne et % d'étalon interne) visant l'aire ou la hauteur du pic. Les étalonnages peuvent être multiniveaux et inclure plusieurs définitions d'étalon interne. L'historique des étalonnages est enregistré automatiquement et peut servir à pondérer les calculs de réétalonnage.

Pour plus d'informations sur l'étalonnage et la quantification, reportez-vous à « Étalonnage », page 151.

### Analyse de données - Révision par lot

Les deux boîtes à outils supplémentaires suivantes sont disponibles dans la vue Analyse de données :

- Table de navigation
- · Révision par lot

La table de navigation permet de réaliser d'importantes opérations graphiques :

- Fonctionnalités standard de configuration de la table (tri, options de glisser-déposer, sélection de colonne, regroupement d'éléments, etc.) permettant de définir sa propre configuration de table de navigation,
- Fonctions accessibles via le bouton droit de la souris : chargement ou superposition d'un signal, exportation de données, impression de rapports,
- Révision des détails du signal en développant une ligne dans la table de navigation
- révision des signaux et création de rapports ChemStation à l'aide d'une méthode spécifique

Les principales opérations graphiques suivantes sont disponibles dans le cadre de la révision par lot :

- Définition de la révision et du retraitement automatiques ou manuels des fichiers de données (étalonnées)
- Réétalonnage de la table d'étalonnage

#### 1 Concepts basiques de OpenLAB CDS ChemStation Edition À propos du logiciel ChemStation

· Révision des tables de composés des méthodes étalonnées

· Création de rapports de lot spécifiques

### Analyse de données - Recalcul

Les fonctions du mode de recalcul vous permettent de créer rapidement des résultats ou des rapports pour tout sous-ensemble de données affiché dans le tableau de navigation. Vous pouvez générer facilement des résultats pour des jeux de données auto-assemblées, indépendants des séquences avec lesquelles les échantillons ont été analysés à l'origine. Vous pouvez utiliser toute méthode pour le recalcul. La méthode utilisée sera copiée dans des fichiers de données simples (DA.M). Aucun étalonnage n'est effectué pendant le recalcul.

### Analyse de données - Retraitement

Les fonctions du mode de retraitement vous permettent de retraiter une séquence entière, à l'aide des méthodes définies dans la table de séquence et des résultats des échantillons étalons pour recalculer les résultats de l'échantillon.

### Création de rapports

Si la création intelligente de rapports a été activée pour un instrument, la vue **Review** est activée et l'éditeur de modèle de rapport pour la création intelligente de rapports est affiché dans la vue **Report Layout**.

Avec la création intelligente de rapports activée, vous pouvez utiliser à la fois les modèles de rapport intelligents et les modèles de rapport classiques pour créer des rapports d'injection simple et des rapports récapitulatifs de séquence. Si vous avez les privilèges requis, vous pouvez créer des modèles de rapport pour la Création intelligente de rapports.

Avec la création intelligente de rapports désactivée, vous ne pouvez utiliser que des modèles de rapport classiques pour créer des rapports d'injection simple et des rapports récapitulatifs de séquence. Si vous avez les privilèges requis, vous pouvez créer des modèles de rapport pour la Création de rapports classique.

### Utilitaires et compatibilité

Le logiciel ChemStation permet d'importer et d'exporter des fichiers de données au format de chromatographie ANDI (ANalytical Data Interchange) publié par l'AIA (Analytical Instrument Association), version 1.0, copyright 1992. L'importation de données est prise en charge au niveau de conformité 1 (informations d'échantillon et données de signaux) et l'exportation de données au niveau de conformité 2 (informations d'échantillon, données de signaux et résultats d'intégration).

Le logiciel ChemStation comporte des commandes et des fonctions prenant en charge la norme DDE (échange dynamique de données) de la plate-forme Microsoft Windows, à la fois en tant que client DDE et en tant que serveur DDE. Cet ensemble de commandes permet d'établir et d'interrompre des connexions, de transférer des informations dans les deux sens et d'exécuter des fonctions à distance.

### Personnalisation

Des commandes puissantes permettent de personnaliser ChemStation. Ces commandes peuvent être groupées de manière à exécuter automatiquement une fonction spécifique (le groupe ainsi constitué s'appelle une « macro »). Les utilisateurs qui créent des macros peuvent définir leurs propres variables, intégrer des constructions conditionnelles ou itératives, effectuer des E/S physiques (gestion de fichiers et interaction de l'utilisateur), imbriquer leurs macros et programmer et échanger des données avec d'autres applications MS-DOS ou Microsoft Windows.

Pour plus d'informations sur la personnalisation, reportez-vous à la référence en ligne dans ChemStation sous **Help > Commands**.

### Automatisation

ChemStation peut programmer et exécuter à la fois des échantillons simples et des séquences multi-méthodiques.

Il est possible de définir le jeu de paramètres de séquence, de manière à utiliser des fichiers générés automatiquement ou des fichiers numérotés séquentiellement avec un préfixe de quinze caractères maximum défini par l'utilisateur. Vous pouvez non seulement choisir d'exécuter des analyses complètes ou des séquences de retraitement des données uniquement, mais également sélectionner une série de commandes d'arrêt propres à une technique ou une macro d'arrêt définie par l'utilisateur qui s'exécute à la fin de la séquence (à la suite d'une erreur ou une fois toutes les analyses terminées).

Le tableau de séquences, ou la liste des analyses, est une feuille de calculs intégrée qui permet aux utilisateurs de spécifier des noms, nombres et types d'échantillons, des méthodes d'analyse, des paramètres de calculs et des mesures d'échantillonnage, les facteurs de calibrage et de dilution, les paramètres d'échange de données LIMSID et le nombre d'injections programmées. En fonction des instruments configurés et des modules, plusieurs champs sont accessibles si Agilent 1100/1200 LC inclue un système de collecte, le système **Fract. Start** s'affiche dans le tableau de séquence. La présentation de la table de séquence est modifiable par l'utilisateur. Vous pouvez passer d'une cellule à une autre dans la table et copier, couper ou coller des cellules, des lignes entières ou une série de lignes de manière à créer des séquences efficacement et rapidement.

Les échantillons peuvent être identifiés en séquences comme inconnus, calibrés, vides, ou échantillons. Le type d'échantillon détermine le traitement spécifique de l'échantillon au niveau de l'évaluation des données :

- Les échantillons inconnus sont évalué puis reportés selon les paramètres de méthode.
- Les échantillons calibrés sont utilisés pour recalibrer les composants de quantification de la méthode décrite à la suite.
- Les échantillons vides sont utilisés pour évaluer le signal de référence pour les pics spécifiques, tels que définis par la pharmacopie européenne. Vous pouvez imprimer le taux bruit/signal pour des rapports personnalisés. Consultez le guide de référence pour des détails à propos des calculs et des champs de données obligatoires.
- Les échantillons de contrôle sont comparés aux limitations de chaque composants pour la méthode choisie. Si les résultats obtenus dépassent la plage de paramètres spécifiée, l'analyse de la séquence est interrompue.

Les échantillons d'étalonnage peuvent être simples, cycliques ou encadrants. Les réétalonnages simples indiquent qu'un réétalonnage se produit à chaque définition d'un échantillon d'étalonnage dans la séquence. Les réétalonnages cycliques se produisent à des intervalles définis lors de l'analyse d'une série d'échantillons inconnus. Lors de l'encadrement d'une série d'échantillons inconnus, deux jeux d'étalonnage sont analysés. Les rapports quantitatifs des échantillons inconnus sont ensuite calculés à l'aide de la table d'étalonnage échelonnée entre les deux jeux d'étalonnage.

La fonctionnalité de séquence partielle vous permet non seulement de visualiser l'ordre d'analyse de la séquence, mais aussi de sélectionner des entrées d'échantillons à réanalyser ou à réévaluer. Dans le cadre de la réévaluation de données déjà acquises, vous pouvez indiquer si le retraitement s'effectue sur la base des données de quantification de l'échantillon d'origine ou sur la base des nouvelles données saisies dans la table de séquence de l'échantillon.

Vous pouvez interrompre momentanément des séquences pour que des échantillons prioritaires d'injection simple puissent être analysés par une autre méthode ; vous pouvez ensuite relancer les séquences sans perturber l'automatisation. Vous pouvez ajouter des échantillons à la table de séquence pendant l'exécution de la séquence.

Vous pouvez imprimer la table de séquence et la table de séquence partielle.

Pour plus d'informations sur les séquences, reportez-vous à la section « Automatisation/Séquences », page 69et au système d'aide en ligne.

### Liste d'attente et planificateur

La liste d'attente vous pemet de lancer automatiquement plusieurs échantillons ou séquences l'un après l'autre. Le premier élément ajouté à la liste démarre lorsque le système de données est prêt, à moins d'être placé sur pause. Vous pouvez ajouter des échantillons uniques, des séquences basées sur des modèles Easy Sequence, des séquences classique ChemStation ou mettre la liste sur pause. Chaque **Run Method** ou **Run Sequence** ajoute automatiquement un élément à la liste d'attente, et active cet élément dans la liste.

Au moyen du planifocateur, vous pouvez préparer une série de plusieurs échantillons ou séquences et sauvegarder l'ordre de la liste dans le système. Pour lancer ces échantillons et ces séquences planifiés, ouvrez simplement la file et ajoutez-la à la liste d'attente. Cette fonction vous permet de démarrer des tâches longues, éventuellement pendant la nuit ou pendant le week-end.

Pour plus d'informations, voir « Flux de travail supportés », page 126.

### Bonnes pratiques de laboratoire (BPL)

ChemStation a été développé conformément aux normes de conception et de développement internationales et comporte un ensemble de fonctionnalisés spécifiques pour aider les utilisateurs travaillant dans un environnement réglementé. Ces fonctions concernent la spécification complète des méthodes et la vérification de leur conformité à l'utilisation prévue, le contrôle du fonctionnement du système et la traçabilité, l'originalité et la qualité des données.

### Processus de développement

Le certificat de validation fourni avec chaque progiciel documente les étapes de développement et de test conduites dans le cadre du cycle de développement. Le processus de développement est conforme à la norme ISO 9001.

### Spécification et utilisation des méthodes

- Méthodes globales : la spécification complète des instruments et de l'analyse des données est stockée à un emplacement unique. Ces méthodes comportent des spécifications de plages pour des composés individuels afin de garantir que les résultats de quantification ne sont pas appliqués à l'extérieur de la plage d'étalonnage.
- Je journal d'historique de modification des méthodes permet d'enregistrer automatiquement les modifications apportées à une méthode validée, ainsi que la date de ces modifications. Il est également possible d'ajouter en commentaire la justification de la modification dans le journal d'historique. L'historique des modifications est automatiquement enregistré au format binaire comme faisant partie intégrante de la méthode. Afin d'éviter tout accès non autorisé aux enregistrements, cet historique est protégé par le schéma d'accès des utilisateurs décrit ci-dessous. L'historique des modifications peut être affiché et imprimé.
- Dans chaque méthode, il est possible de définir des limites, pour chaque composé, pour un certain nombre de paramètres chromatographiques/électrophorétiques et de paramètres de performances système, comme décrit dans la section relative à la quantification des résultats. Les résultats hors de ces plages permettent de contrôler l'exécution des séquences automatisées comme décrit dans la section relative à l'automatisation. Ils sont identifiés dans le rapport d'analyse correspondant.

• Les rapports de performances ou de conformité du système (reportez-vous à la section relative à la génération de rapports ci-dessus) présentent une analyse détaillée de la qualité de séparation.

Vous pouvez définir différents rôles et privilèges dans les Service partagés d'OpenLAB. Les rôles préconfigurés **ChemStation Administrator**, **ChemStation Lab Manager**, **ChemStation Analyst** et **ChemStation Operator** constituent une base de rôles dans votre environnement.

### Robustesse des méthodes

Les rapports récapitulatifs de séquence (reportez-vous à « Création de rapports classique et intelligente », page 169) permettent de tester la robustesse des méthodes. Avec la création intelligente de rapports, les rapports détaillés pour des critères définis par l'utilisateur se présentent sous forme de tableaux de tendance et peuvent être utilisés pour déterminer des limites opératoires réalistes. Et vous pouvez aussi créer vos propres modèles de rapports récapitulatifs de séquence incluant des tableaux de tendance avec les limites opératoires. Ces limites peuvent ensuite être intégrées à la méthode afin de vérifier qu'elle respecte les limites spécifiées par analyse d'échantillons étalons.

### Fonctionnement du système

Le kit de vérification ChemStation, qui fait partie du logiciel standard, vérifie automatiquement l'installation et le fonctionnement corrects des composants d'évaluation des données du logiciel en comparant les résultats générés lors de l'exécution du test à des valeurs connues préenregistrées. Ce kit de vérification permet à l'utilisateur de définir ses propres fichiers de données et méthodes qui serviront de base au test.

### Traçabilité, originalité et qualité des données

Le journal d'exécution consigne les transactions de l'ensemble du système. Il enregistre également tous les événements inhabituels (tels que : erreurs, modifications de paramètres en cours d'analyse), ainsi que l'état de l'instrument avant et après chaque analyse. Une copie de l'extrait de journal correspondant est enregistrée avec chaque fichier de données.

Les conditions de fonctionnement réelles de l'instrument (pression, débit et température, par exemple) relevées au cours de chaque analyse sont également enregistrées si l'instrument analytique configuré prend en charge cette fonctionnalité. Ces données peuvent par la suite être présentées sous forme graphique avec le chromatogramme/électrophorégramme, de manière à présenter les conditions de fonctionnement réelles de l'instrument au cours d'une analyse donnée. Elles peuvent également être intégrées au rapport.

Les méthodes enregistrées dans le fichier de données reflètent la méthode réelle au moment de l'analyse et permettent de procéder ultérieurement à la reconstruction totale des données faisant l'objet d'un rapport. La méthode est enregistrée après toutes les étapes analytiques.

Par défaut, tous les rapports sont horodatés et leurs pages sont numérotées (pagination de type page x sur y). L'utilisateur peut sélectionner le niveau de détail de chaque rapport, de rapports résumés simples à des rapports détaillant l'ensemble du système.

Les fichiers de registre BPL spécifiés dans le cadre de la configuration des méthodes consignent toutes les données brutes, comprenant les informations d'échantillon, la méthode d'analyse des données, les signaux chromatographiques/électrophorétiques, les conditions opératoires de l'instrument, les résultats d'intégration et de quantification, les résultats finaux et le journal d'exécution, dans un seul fichier binaire protégé par somme de contrôle. Ce format binaire non modifiable garantit l'originalité des résultats. Le fichier comporte un schéma de révision qui indique si les données ont été retraitées.

Vous pouvez définir les types d'échantillons étalons dans la table de séquence et les utiliser pour contrôler automatiquement les performances de l'instrument à partir des résultats des échantillons de contrôle qualité lorsque l'instrument fonctionne sans surveillance. Les résultats hors de la plage acceptable définie par l'utilisateur provoquent l'arrêt du fonctionnement automatique de l'instrument.

# Structure des données de ChemStation

### Sans création de dossiers uniques

Cette structure des données correspond à celle utilisée dans les versions de la ChemStation B.01.03 et antérieures. Les séquences, les méthodes et les fichiers de données générés ainsi que les résultats sont conservés à des emplacements fixes, spécifiés et séparés. Par exemple, les méthodes sont référencées par nom dans une séquence et l'utilisateur est responsable de la maintenance de la totalité des méthodes, des séquences et des fichiers de données. L'archivage de données à long terme et la reproduction de résultats constituent, pour cela, une tâche fastidieuse. Les utilisateurs doivent consigner le chromatogramme, les résultats et la méthode associée, qu'il s'agisse de laboratoires réglementés ou de certains domaines de laboratoires non réglementés (par exemple, des laboratoires environnementaux). Sans création de jeu de résultats, cela peut être obtenue seulement en imprimant tout dans un rapport.

Cependant, dans certaines situations, les utilisateurs peuvent être amenés à enregistrer leurs données comme dans la version B.01.03 de ChemStation ou antérieure et à travailler en fonction des procédures correspondantes :

- Pendant le développement d'une méthode, il peut être plus approprié de n'utiliser qu'une seule méthode à la fois pour l'acquisition et le traitement des données, afin que les modifications soient automatiquement disponibles pour l'acquisition et le retraitement ultérieurs des données déjà acquises.
- Des solutions de macros personnalisées d'un système de ChemStation, qui ont été conçues pour des versions antérieures, peuvent exiger que les données, méthodes ou séquences soient enregistrées suivant l'ancien schéma d'organisation des données.
- Lorsque ChemStation C.01.04 fonctionne dans un laboratoire où un autre système fonctionne toujours sur des versions B.01.03 ou antérieures de ChemStation, il peut être plus approprié d'utiliser le même mode d'organisation de données sur tous les systèmes.

### 1 Concepts basiques de OpenLAB CDS ChemStation Edition Structure des données de ChemStation

### Avec création de dossiers uniques

Afin d'améliorer l'association entre les fichiers de données et les méthodes, l'usage de jeux de résultats a été mis en place avec la version B.02.01 de la ChemStation (jeux de résultats ayant été ensuite appelés conteneurs de séquences). Si vous utilisez un système de stockage de données centralisé (*OpenLAB ECM* ou *OpenLAB Data Store*), e résultat final (séquence/méthode/Fichiers de données/modèles de rapports) sera transféré vers la bibliothèque centrale sous la forme d'un seul élément.



Figure 1 Acquisition de séquence avec la création de dossiers uniques activée

Les méthodes du dossier Chem32\1\methods servent de méthode de référence. Pendant l'acquisition et le traitement des données, elles demeurent inchangées.

De façon similaire, les séquences du dossier Chem32\1\sequence servent de modèles de séquence que l'on peut utiliser pour reprendre (mais pas retraiter) plusieurs fois une séquence.

Les modèles de rapport contenus dans le dossier Chem32\repstyle servent de point de départ pour développer vos propres modèles de rapports.

Le schéma d'enregistrement des données varie selon que l'on acquiert des données d'analyse unique ou des données de séquence :

- Lorsque l'on exécute une séquence, un nouveau dossier est automatiquement créé (result set) avec un nom unique dans le sous-répertoire spécifié. Lorsque l'on exécute un échantillon unique, le fichier de données (\*.d) est placé dans le sous-répertoire spécifié.
- 2 Pour les données de séquence, le modèle de séquence exécuté (\*.s) et toutes les méthodes (\*.m) concernées sont copiés dans le jeu de résultats. Les copies des méthodes prennent le nom de **sequence methods** afin de les distinguer des méthodes de référence originales. Si vous utilisez la Création intelligente de rapports, tous les modèles de rapport (\*.rdl) sont également copiés dans le jeu de résultats.

Toutes les tâches relatives à une séquence (par exemple, acquisition et traitement des données) sont effectuées sur les copies de la séquence et des méthodes. Par conséquent, le modèle de séquence et les méthodes de référence demeurent inchangés pour une exécution ultérieure de la séquence.

Toutes les modifications apportées à la séquence durant l'acquisition de séquence, par exemple, l'ajout de lignes à la table de séquence, sont effectuées sur la copie du fichier de séquence dans le jeu de résultats. Le modèle de séquence reste inchangé.

De manière similaire, toute modification de la méthode, telle que des mises à jour de la table d'étalonnage dans le cas d'exécutions d'étalonnage, est répercutée sur les méthodes de séquence, mais pas sur les méthodes de référence.

Pendant l'exécution de la séquence, tous les fichiers de données générés (\*.d) sont enregistrés dans le dossier des données de séquence, avec le fichier batch (\*.b) et le fichier journal de séquence (\*.log) correspondants.

- **3** Chaque fichier de données contient une copie de la méthode utilisée pour créer l'analyse. Les informations de méthode suivantes sont stockées :
  - Les paramètres d'acquisition sont enregistrés dans le fichier ACQ.TXT pour assurer la préservation des paramètres de la méthode d'origine pour chaque fichier de données spécifique. Ils peuvent être visionnés et imprimés à l'aide de la commande Help > Commands.

### **1** Concepts basiques de OpenLAB CDS ChemStation Edition

Structure des données de ChemStation

• La méthode complète, y compris les paramètres de traitement des données, est sauvegardée sous forme de DA.M lorsque la partie analyse des données est terminée.

Travailler avec des jeux de résultats offre un certain nombre d'avantages :

- Les données de séquence ne sont pas écrasées. Chaque acquisition de séquence enregistre les fichiers de données obtenus dans son propre jeu de résultats avec un nom unique.
- Avec le concept de jeu de résultats, les données sont enregistrées avec toutes les informations nécessaires au traitement des données : copies du fichier de séquence, de toutes les méthodes et, dans le cas de la création intelligente de rapports, des modèles de rapport employés avec la séquence. Les méthodes de séquence peuvent être modifiées par des entrées spécifiques à la séquence et n'influencent pas la méthode de référence d'origine. Le concept de jeu de résultats renforce donc le fait qu'une séquence est un ensemble de fichiers de données et de méthodes appartenant tous deux à la création du résultat.
- Le recalcul et le retraitement des données sont l'un et l'autre disponibles en mode **Data Analysis** via la table de navigation.
- Le résultat final détermine les conditions préliminaires à l'échange de données avec un système de stockage de données centralisé.

### Activation ou désactivation de la création de dossiers uniques

Afin de pouvoir travailler avec un concept d'enregistrement des données comme dans les versions de ChemStation antérieures à B.02.01, l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue **Preferences** contient une section **Data Storage**. Vous avez alors le choix entre l'option **Unique Folder Creation ON** et l'option **Unique Folder Creation OFF** (reportez-vous à « Boîte de dialogue Préférences -Onglet Séquence », page 96). Par défaut, l'option **Unique Folder Creation ON** est sélectionnée. L'option **Unique Folder Creation ON** active le concept de stockage des données tel que décrit dans le chapitre précédent.


# Travailler avec des méthodes

Qu'est-ce qu'une méthode ? 39 Parties d'une méthode 40 Types de méthodes 43 Méthodes de référence 43 Méthodes de séguence 43 Méthodes de fichiers de données 44 Création de méthodes 45 Modification des méthodes 46 Éléments modifiables d'une méthode 47 Modification des méthodes 46 Modification de méthodes en mode en ligne 48 Modification de méthodes en mode hors ligne 49 Administration des méthodes 50 Arborescence des méthodes dans l'explorateur de la ChemStation 50 Mise à jour de la méthode de référence 51 Mise à jour de méthodes 51 Pendant l'exécution d'une méthode 54 Récapitulatif de l'exécution d'une méthode 55 Commande ou macro de pré-analyse(liste de vérification de l'exécution) 57 Acquisition de données (Liste de vérification de l'exécution) 57 Traitement des données (Liste de vérification de l'exécution) 57 Traitement des données personnalisée 59 Enregistrement des données de BPL 59 Commande ou macro de post-analyse 59 Enregistrement d'une copie de la méthode avec les données 60



#### 2 Travailler avec des méthodes

Structure des données de ChemStation

Enregistrement d'une copie de la méthode (DA.M) avec les données (paramètre par défaut de la ChemStation) 60

La méthode est une partie vitale de ChemStation ; ce chapitre décrit les concepts en détails.

## Qu'est-ce qu'une méthode ?

Une méthode inclut tous les paramètres d'acquisition et d'analyse de données, ainsi que les tâches pré et post-analyse pour un échantillon donné, le cas échéant.

Les fichiers de méthodes disponibles (\*.m) sont affichés dans l'Explorateur ChemStation. Afin de faciliter la navigation, il est possible d'ajouter des emplacements de méthodes supplémentaires dans l'arborescence de sélection de l'Explorateur ChemStation à l'aide de l'onglet **Paths** de la boîte de dialogue **Preferences**. 2 Travailler avec des méthodes Parties d'une méthode

## Parties d'une méthode

Une méthode est identifiée par un nom comportant jusqu'à quarante caractères alphanumériques. Le nom de fichier porte toujours l'extension .M, qui l'identifie en tant que méthode. Les méthodes sont stockées dans des répertoires qui comprennent les fichiers correspondants à chaque composant des méthodes.

Chaque méthode comporte quatre composants :

- informations sur la méthode,
- commande des instruments,
- · traitement des données,
- liste de vérification de l'exécution.

#### Informations sur les méthodes

Cette section fournit des informations descriptives sur les méthodes.

#### **Contrôle de l'instrument**

Configure les paramètres qui commandent l'instrument ou ses composants. Avec un instrument de CPL, certains paramètres (composition de la phase mobile, débit, volume d'injection, longueur d'onde du détecteur, etc.) commandent la pompe, l'injecteur et le détecteur. Avec un instrument de CPG, des paramètres tels que la température de l'injecteur ou la pression d'injecteur et le débit de colonne remplie commandent l'instrument.

#### Traitement des données

Cette fonctionnalité permet de définir les paramètres qui régissent le traitement des données.

• Détails des signaux

Définit les signaux et leurs propriétés utilisées pour l'évaluation des données.

• Événements d'intégration

Configure les événements programmés qui interviennent à des temps de rétention/migration spécifiques d'un chromatogramme/électrophorégramme. Ces événements programmés permettent de modifier le mode d'intégration du signal.

• Identification des pics

Configure les paramètres de traitement des données associés à l'identification des pics dans le chromatogramme/l'électrophorégramme.

• Quantification des pics

Configure les paramètres de traitement des données qui influent sur les calculs de quantification déterminant la quantité ou la concentration des composants d'échantillon correspondant à chaque pic.

• Étalonnage et réétalonnage

Configure les paramètres de traitement des données relatifs à l'étalonnage, ainsi que la fréquence de l'étalonnage.

Champs personnalisés

Définit les propriétés des champs personnalisés disponibles pour la méthode, qui sont associés aux échantillons ou aux composés. Les champs personnalisés permettent d'ajouter des informations spécifiques à un échantillon ou un composé dans un échantillon.

• Rapport

Avec création de rapports classique : définit le format du rapport devant s'imprimer au terme d'une analyse.

Avec création intelligente de rapports : définit le modèle de rapport utilisé pour créer le rapport au terme d'une analyse.

#### Liste de vérification de l'exécution

Définit les parties d'une méthode qui sont exécutées lorsque la méthode est appliquée.

La liste de vérification de l'exécution peut être utilisée pour :

- l'acquisition, l'enregistrement et le traitement des données pour générer un rapport,
- · l'exécution d'une partie de la méthode uniquement,
- · l'acquisition et le stockage des données sans les analyser,
- · l'exécution d'une nouvelle analyse de fichiers de données existants,
- l'utilisation de vos propres macros pour l'analyse des données et le traitement pré-analyse et post-analyse,
- l'enregistrement des résultats d'analyse dans un registre dans le cadre des BPL.

### Types de méthodes

Il existe différents types de méthodes. Selon l'endroit de stockage, les méthodes sont utilisées comme méthodes de référence, comme référence dans un jeu de résultats d'une séquence ou comme un enregistrement réel des paramètres utilisés lors d'une acquisition de données.

### Méthodes de référence

Ces méthodes sont enregistrées sur le disque de l'ordinateur. Les méthodes enregistrées portent un nom de quarante caractères alphanumériques au maximum suivi par l'extension \*.M. Les répertoires des méthodes de référence sont configurés dans les Préférences (reportez-vous à « Sélection du chemin d'accès », page 62).

La méthode de référence est enregistrée dans un sous-répertoire de méthodes, dans un nœud Méthodes de l'Explorateur ChemStation ; elle n'est pas directement associée à un jeu de résultats.

### Méthodes de séquence

Lorsqu'une séquence est exécutée (à l'aide de l'option **Unique Folder Creation ON**, reportez-vous à « Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence », page 96), des copies de toutes les méthodes de référence utilisées dans la séquence sont enregistrées dans le jeu de résultats conjointement aux fichiers de données de la séquence. Ces méthodes sont directement associées à la séquence et sont également utilisées lors du retraitement de la séquence. Par défaut, les modifications apportées à ces méthodes ne sont pas répercutées automatiquement dans les méthodes de référence. Les modifications sont prises en compte dès que l'exécution de la séquence démarre ou se poursuit après une pause. Ces modifications sont également répercutées dans les méthodes de fichier de données (DA.M) lors du retraitement de la séquence et lors de la génération des rapports.

### Méthodes de fichiers de données

Une copie de la méthode de traitement des données - la méthode de fichier de données DA.M - est enregistrée avec les fichiers de données.

La méthode de fichiers de données DA.M est mise à jour automatiquement après chaque génération de résultats (acquisition des données, recalcul ou création de rapport). Elle est également chargée par ChemStation lorsque vous recalculer des résultats dans le mode Dernier résultat (reportez-vous à « Recalcul dans le mode Dernier résultat », page 138).

La méthode peut être enregistrée avec les fichiers de résultats (run.m). Dans ce cas, le répertoire de méthode est enregistré en tant que sous-répertoire du répertoire de fichiers de données à l'aide de l'option **Save method with Data** de la liste de vérification de l'exécution.

Dans l'Explorateur de la ChemStation, pour charger une méthode de référence ou une méthode de séquence, il suffit de double-cliquer sur le nom de la méthode.

## Création de méthodes

La création d'une nouvelle méthode passe systématiquement par la modification d'une méthode de référence ou d'une méthode de séquence et par l'enregistrement des modifications Vous pouvez écraser une méthode existante ou sauvegarder une méthode comme une nouvelle méthode de référence. Attention : lorsque vous modifiez une méthode, la version qui figure sur le disque demeure inchangée tant que vous n'avez pas enregistré vos modifications.

Vous pouvez créer une méthode de plusieurs manières. Soit pour procéder à une analyse partielle, soit pour procéder à une analyse complète. Par exemple, vous pouvez créer une méthode pour n'effectuer que l'acquisition de données. Lorsque vous êtes prêt à analyser les données et à générer un rapport, vous pouvez modifier la méthode pour effectuer ces tâches de traitement de données.

#### REMARQUE

Ne supprimez pas la méthode par défaut (DEF\_LC.M, DEF\_CE.M ou DEF\_GC.M). Ces fichiers de méthode servent de modèle pour créer des méthodes.

# Modification des méthodes

Vous pouvez modifier une méthode existante à l'aide de l'option Modifier l'intégralité de la méthode dans le menu Méthode. Le processus est guidé par des boîtes de dialogue et la méthode peut finalement être enregistrée. Ce processus est décrit ci-dessous :



### Éléments modifiables d'une méthode

Chaque méthode comporte quatre composants qui peuvent être modifiés séparément.

Certains des paragraphes ci-dessous font référence à des boîtes de dialogue spécifiques, tandis que d'autres sont des descriptions générales.

- Les Informations sur la méthode comportent :
  - un texte de description de la méthode.
- *Commande des instruments* dépend de la configuration et peut comporter, par exemple :
  - · les paramètres de four,
  - · les paramètres d'injecteur et
  - · les paramètres de détecteur.
- Le traitement des données comporte :
  - · les détails de signal,
  - · les paramètres d'intégration,
  - · les paramètres de quantification,
  - · les paramètres d'étalonnage,
  - · les paramètres de configuration de champ personnalisé et
  - · les paramètres de génération de rapports.
- La Liste de vérification de l'exécution comprend :
  - · les parties de la méthode à exécuter.

#### **Dossiers**

Une méthode comporte un groupe de fichiers stockés dans le répertoire correspondant.(\*.M).

Par défaut, les méthodes de référence sont stockées sous Chem32\1\METHODS. Il est possible d'ajouter des chemins d'accès supplémentaires pour les méthodes de référence à l'aide des paramètres de préférence. Les méthodes de séquence sont enregistrées dans le jeu de résultats et les méthodes de fichiers de données sont enregistrées comme des fichiers DA.M dans le sous-répertoire de fichiers de données.

#### **Fichiers**

Les fichiers de méthodes portant l'extension .MTH contiennent un ensemble de paramètres et sont au format UNICODE. Le fichier INFO.MTH contient les paramètres de commande de la méthode.

Les fichiers de méthode contenant les paramètres relatifs aux instruments portent le nom du module analytique associé. Par exemple :

HPCE1.MTH	Contient la méthode d'acquisition pour l'électrophorèse capillaire.	
ADC1.MTH	Contient la méthode d'acquisition pour le système Agilent 35900. Si deux instruments identiques sont configurés, les fichiers de méthodes sont appelés ADC1.MTH et ADC2.MTH.	
DAMETHOD.REG	Pour l'évaluation des données.	
LALS1.REG	Contient les paramètres de l'échantillonneur automatique Agilent série 1100/1200, lorsqu'un système CPL modulaire classique est configuré. Les fichiers de méthodes des autres modules Agilent série 1100/1200 suivent les mêmes conventions lxxx1.reg (où xxx correspond à l'acronyme du module).	
AgilentSamplerDriver1.Rapid- Control.xxx.xml	Contient les paramètres de l'échantillonneur automatique Agilent série 1100/1200, lorsqu'un système CPL modulaire est configuré. Il existe des fichiers .xml différents pour chaque élément des para- mètres (indiqué par l'élément xxx dans le nom de fichier). Des fichiers .xml semblables sont disponibles pour les autres modules.	

Tableau 5 Exemples de fichiers de méthode

### Modification de méthodes en mode en ligne

Lorsqu'une ChemStation en ligne est inactive, vous pouvez éditer toutes les parties d'une méthode de séquence. Lorsqu'une séquence est en cours d'exécution, vous pouvez éditer tous les paramètres d'acquisition et certains des paramètres de traitement des données, tels que les paramètres sous Définir un rapport.

Les modifications sont sauvegardées et prises en compte immédiatement pour l'analyse en cours et dans toutes les lignes suivantes de la séquence qui comprend la même méthode. Cela signifie que vous pouvez aussi modifier la méthode pendant une pause de la séquence ou une séquence partielle.

### Modification de méthodes en mode hors ligne

Vous pouvez modifier une méthode de séquence sur une ChemStation hors ligne, pendant que la même méthode est utilisée pour une analyse sur une ChemStation en ligne. Dans ce scénario, vous pouvez modifier la partie Traitement des données dans la session hors ligne. Dès que vous sauvegardez les modifications de la session hors ligne, les paramètres modifiés de le traitement des données seront utilisé pour le traitement des données suivante de l'exécution de la séquence en cours dans la session en ligne.

Les modifications de la méthode concernant l'étalonnage ne sont pas prises en compte. Les entrées de l'historique ne sont pas fusionnées, c'est-à-dire que si une méthode est en cours d'exécution dans une session en ligne et que vous la modifiez à la fois sur les sessions en ligne et hors ligne, le journal d'audit de la méthode ne contiendra que les modifications apportées dans la ChemStation hors ligne.

#### REMARQUE

Si la même méthode est chargée dans la ChemStation en ligne et hors ligne, vous ne pouvez éditer la méthode qu'hors ligne lors de l'analyse de la séquence. L'édition de méthode dans la ChemStation hors ligne n'est pas possible si la ChemStation en ligne est inactive.

# Administration des méthodes

### Arborescence des méthodes dans l'explorateur de la ChemStation

L'arborescence des méthodes dans l'explorateur de la ChemStation se divise en deux parties. La partie supérieure présente les méthodes contenues dans le jeu de résultats actuellement chargé. La partie inférieure présente les méthodes contenues dans les répertoires de méthodes de référence, que vous configurez dans la boîte de dialogue **Preferences**.



Figure 3 Arborescence de navigation des méthodes

La méthode actuellement chargée est toujours présentée en caractères gras.

Au moyen d'un tirer-lâcher, vous pouvez facilement copier des méthodes de référence vers des méthodes de séquence. La méthode entière (paramètres d'analyse de données et d'acquisition) sera copiée dans le jeu de résultats.

### Mise à jour de la méthode de référence

L'option **Update Master Method** est disponible dans le menu **Method** et dans le menu contextuel de la méthode de séquence de l'explorateur de la ChemStation. Avec cette fonction, vous pouvez mettre à jour la méthode à laquelle vous vous référez lors de la création de la séquence. La condition préalable est que la méthode de référence existe encore dans le répertoire des méthodes de référence (la méthode de référence doit porter le même nom que la méthode de séquence).

#### REMARQUE

Il est important de noter que cette fonction ne met à jour les paramètres de traitement des données *que*de la méthode cible et qu'elle écrase *tous* les paramètres de traitement des données. En plus des paramètres de traitement des données, le journal d'audit de la méthode cible est également écrasé par le journal d'audit de la méthode source.

Vous pouvez également configurer les paramètres de séquence afin d'exécuter cette fonction automatiquement lors de chaque acquisition ou retraitement de séquence. Pour plus d'informations, reportez-vous à « Mise à jour automatique de méthodes de référence », page 84.

### Mise à jour de méthodes

Avec la boîte de dialogue **Update Methods** (reportez-vous à la figure ci-dessous), vous pouvez copier des méthodes depuis le répertoire des méthodes de référence vers le jeu de résultats et inversement. Si vous copiez une méthode de référence vers le jeu de résultats, la méthode entière (paramètres d'analyse de données et d'acquisition) est copiée. Si vous mettez à jour une méthode de référence en copiant une méthode de séquence vers le répertoire des méthodes de référence, seuls les paramètres d'analyse de données de la méthode de référence seront mis à jour.

Vous pouvez ouvrir la boîte de dialogue depuis le menu **Method > Update Methods** ou à partir du menu contextuel de la méthode de séquence dans l'explorateur de la ChemStation.

#### 2 Travailler avec des méthodes

Administration des méthodes

Update Methods			_	
Master Methods	Б		Sequence Methods	$\bigcirc$
Method	Last saved		Method	Last saved
= @L:\Lhem32\1\METHUD	1 <u>5</u>			
BAICH	4/6/2004 6:10:00 PM			8/3/2010 11:11:50 AM
	1/1/19/0 1:00:00 AM		6	
DEMOCAL1	4/6/2004 6:11:09 PM			
DEMOCAL2	4/6/2004 6:11:19 PM (3)			
INFINITY-CHECKOUT	8/31/2009 1:33:10 PM			
ISOCRA	2/2//2006 5:29:26 PM			
ISOPLOT	4/6/2004 6:18:18 PM			
	4/6/2004 6:18:31 PM			
	4/6/2004 6:18:42 PM			
	4/6/2004 6:18:49 PM			
RL1	8/18/2010 1:33:42 PM 6	$\rightarrow$		
SYSPERF	4/6/2004 6:18:57 PM		7	
SYSSUIT	4/6/2004 6:19:11 PM		9	
- DEMO				
	10/28/2005 2:31:55 PM			
	11/2/2005 4:06:33 PM			
DEMOFLD	10/28/2005 2:34:05 PM			
DEMOVWD	10/28/2005 2:34:37 PM			
💓 ESTD	10/13/2005 4:28:57 PM			
🚺 ISTD	10/17/2005 3:55:03 PM			
SPEC80HZ	10/28/2005 2:34:50 PM			
	(4)			
	$\mathbf{U}$			
C:\Chem32\1\M	IETHODS\DEMO			
	Show	only comm	on methods	Close Help

Figure 4 Boîte de dialogue Update Methods

- 1 Sur la gauche apparaissent toutes les méthodes de tous les répertoires de méthodes de référence (tel que configuré dans les Préférences).
- 2 Sur le côté droit, vous voyez les méthodes du jeu de résultats actuellement chargé.
- 3 Pour chaque méthode, vous voyez la date de son dernier enregistrement. L'info-bulle de la date affiche la dernière entrée de la méthode.
- 4 Les méthodes peuvent également être stockées dans des sous-dossiers du répertoire de méthode de référence.
- 5 Les méthodes en lecture seule disposent d'un préfixe [R]. La méthode de séquence actuellement chargée est toujours présentée en italiques.

- 6 Les méthodes communes au jeu de résultats de la séquence et au pool de méthode de référence s'affichent en gras. Les méthodes ne correspondent que par leur nom ; si un nom de méthode existe dans plusieurs pools, chacune des instances est considérée comme commune.
- 7 Vous pouvez copier des méthodes entre un pool de méthode de référence et le jeu de résultats de la séquence par un tirer-lâcher ou à l'aide des boutons < et > Vous ne pouvez pas écraser des méthodes en lecture seule.

# Pendant l'exécution d'une méthode

Les parties de la méthode à exécuter au démarrage d'une analyse sont indiqués dans la boîte de dialogue **Run Time Checklist**.

La liste de contrôle d'analyse comporte huit éléments :

- · commande ou macro pré-analyse,
- acquisition de données,
- · analyse de données standard,
- méthode d'analyse du second signal (GC uniquement),
- · analyse de données personnalisée,
- · enregistrement des données BPL,
- · commande ou macro post-analyse,
- enregistrement d'une copie de la méthode avec les données (RUN.M).

Lors de l'exécution d'une méthode, les parties de la méthode spécifiées dans la boîte de dialogue Liste de vérification de l'exécution sont exécutées.

### Récapitulatif de l'exécution d'une méthode

Le fonctionnement d'une méthode est décomposé sur la liste ci-dessous (cas où tous les éléments de la liste de vérification de l'exécution sont sélectionnés).

- 1 *Commande ou macro de pré-analyse* Effectue une tâche avant le début de l'analyse.
- **2** Acquisition des données

Lance le programme d'injection.

Injecte l'échantillon.

Acquiert des données brutes.

Stocke les données.

- **3** Enregistrement d'une copie de la méthode avec les données (RUN.M) action facultative de la liste de vérification de l'exécution
- 4 Traitement des données (traitement des données)

Charge le fichier de données.

Intègre le fichier de données.

Identifie et quantifie les pics.

Effectue une recherche dans la bibliothèque spectrale, le cas échéant.

Vérifie la pureté des pics, le cas échéant.

Enregistre une copie de la méthode (DA.M) et imprime le rapport.

5 Traitement des données personnalisée

Exécute vos macros.

6 Enregistrement des données de BPL

Enregistre le fichier de registre binaire GLPSave.Reg.

7 Commande ou macro de post-analyse

Effectue une tâche une fois l'analyse terminée (génération d'un rapport personnalisé, par exemple).

#### 2 Travailler avec des méthodes

Pendant l'exécution d'une méthode





Le schéma ci-dessous représente l'état du logiciel ChemStation lors de l'exécution d'une méthode, tous les éléments de la liste de contrôle d'analyse étant sélectionnés.

#### REMARQUE

Dans le cas du mode "Création de dossiers uniques désactivée", aucun fichier DA.M n'est généré. Pour plus d'informations, reportez-vous à « Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence », page 96.

# Commande ou macro de pré-analyse(liste de vérification de l'exécution)

Lorsque vous spécifiez une commande ou une macro de pré-analyse, celle-ci est exécutée avant le début de l'analyse. En règle générale, cet élément est utilisé dans le cadre de la personnalisation du système en association avec d'autres progiciels.

### Acquisition de données (Liste de vérification de l'exécution)

- Tous les paramètres sont configurés conformément aux conditions initiales spécifiées dans la méthode active.
- Si vous l'avez désigné, le programme d'injection est exécuté et une injection est effectuée à partir du flacon défini.
- L'affichage du moniteur montre la progression de l'analyse, y compris les informations relatives à la chromatographie/à l'électrophorèse et les données spectrales éventuelles.
- Les données sont acquises et stockées dans un fichier de données.
- Une fois les données acquises, les paramètres d'acquisition de la méthode en cours d'exécution sont enregistrés dans un fichier ACQ.txt pour le fichier de données par défaut.

### Traitement des données (Liste de vérification de l'exécution)

Une fois le temps d'arrêt écoulé, l'analyse prend fin et toutes les données brutes sont stockées sur le disque dur de l'ordinateur. Le module de traitement des données du logiciel démarre lorsque toutes les données brutes sont stockées.

#### Intégration

• Les objets chromatogrammes/électrophorégrammes acquis sont intégrés conformément aux paramètres de la boîte de dialogue Événements d'intégration.

#### 2 Travailler avec des méthodes

Pendant l'exécution d'une méthode

- Pour chaque pic, le début, le sommet, le temps de rétention/de migration et la fin sont déterminés.
- Des lignes de base sont définies pour chaque pic, afin de déterminer l'aire et la hauteur du pic final.
- Les résultats d'intégration sont générés sous la forme d'une liste de résultats d'intégration.

#### Identification et quantification des pics

- En utilisant les temps de rétention/migration et les qualificateurs de pic facultatifs, le logiciel identifie les pics en les associant aux composants connus définis dans la table d'étalonnage.
- Le logiciel utilise la hauteur ou l'aire des pics pour calculer la quantité de chacun des composants détectés à l'aide des paramètres d'étalonnage spécifiés dans la table d'étalonnage.

#### Recherche de bibliothèque spectrale (ChemStation pour les systèmes CPL 3D, EC, EC/SM et CPL/SM uniquement, disponible avec la création de rapports classique ).

Pour tous les pics dotés de spectres UV-visible, une recherche est automatiquement effectuée dans la bibliothèque spectrale prédéfinie afin d'identifier les composants de l'échantillon sur la base des spectres UV-visible. Pour plus d'informations, reportez-vous à *Comprendre votre module spectral*.

# Contrôle de la pureté des pics (logiciels ChemStation pour les systèmes CPL 3D, EC, EC/SM et CPL/SM uniquement)

Vous pouvez calculer le facteur de pureté d'un pic doté de spectres UV-visible et consigner cette valeur dans un registre. Pour que la pureté des pics soit automatiquement calculée à la fin de chaque analyse comme partie intégrante de la méthode, cochez la case Vérifier la pureté lorsque vous désignez une bibliothèque pour la recherche automatique ou lorsque vous sélectionnez un style de rapport approprié. Pour plus d'informations, reportez-vous à *Comprendre votre module spectral*.

#### Impression d'un rapport

Un rapport indiquant le nom et la quantité des composants détectés au cours de l'analyse est généré.

### Traitement des données personnalisée

Vous permet d'exécuter vos propres macros personnalisées pour évaluer les données d'analyse.

### Enregistrement des données de BPL

Enregistre le registre binaire GLPSave.Reg avec la méthode de traitement des données dans le sous-répertoire de fichier de données par défaut. Cette fonction permet de garantir l'origine des données et la qualité de chacune des analyses.

Le fichier binaire GLPSave.Reg est un fichier de registre non modifiable et protégé qui comporte les informations suivantes :

- les principaux points de consigne des instruments (qui peuvent être consultés sous une forme graphique),
- · les acquisitions de chromatographie ou d'électrophorèse,
- les résultats d'intégration,
- · les résultats de quantification,
- · la méthode de traitement des données,
- le journal.

Ces données ne sont enregistrées que si vous avez activé la fonction Enregistrer les données de BPL en cochant la case correspondante sur la liste de vérification de l'exécution. Vous pouvez consulter les données de BPL à partir du menu Traitement des données du logiciel ChemStation, mais vous ne pouvez pas les modifier.

### Commande ou macro de post-analyse

Si vous avez défini une commande ou une macro de post-analyse, elle est exécutée après l'évaluation des données (copie de données sur un disque pour les sauvegarder, par exemple).

### Enregistrement d'une copie de la méthode avec les données

Cet enregistrement s'effectue une fois l'acquisition des données terminée et uniquement si l'**Save method with Data** est activée dans la Liste de vérification de l'exécution. La méthode active est alors copiée dans le répertoire de données appelé RUN.M. RUN.M contient les paramètres d'analyse et d'acquisition des données. Il est en lecture seule et constitue un moyen de reconstruire l'analyse dans le futur même si la méthode change entre-temps. Vous pouvez savoir comment les modifications de la méthode ou des paramètres sélectionnés ont eu des répercutions sur votre analyse, ce qui peut vous aider à l'optimiser.

# Enregistrement d'une copie de la méthode (DA.M) avec les données (paramètre par défaut de la ChemStation)

Indépendamment des éléments marqués dans la liste de vérification de l'exécution, une copie de la méthode en cours d'exécution est enregistrée sous le nom DA.M avec le rapport dans le fichier de données. Ceci s'effectue à la fin de la partie *Traitement des données standard*, ainsi que lorsque vous créez un rapport dans la vue de traitement des données. La DA.M n'est créée que si vous avez indiqué au moins une destination du rapport dans les paramètres du rapport.



# Acquisition de données

3

Qu'est-ce que l'acquisition des données ? 62 Moniteurs en temps réel 64 Moniteur de signaux en temps réel 64 Moniteur de spectres en temps réel 64 Journal 65 Informations sur l'état 66 Etat de la ChemStation 66 Barre d'état 66 Diagramme du système 67

Ce chapitre contient une présentation du processus d'acquisition de données.



## Qu'est-ce que l'acquisition des données ?

### Qu'est-ce que l'acquisition de données ?

Lors de l'acquisition de données, tous les signaux analogiques acquis par l'instrument d'analyse sont convertis en signaux numériques dans le détecteur. Le signal numérique est ensuite transmis électroniquement au logiciel ChemStation, puis est stocké dans le fichier de données de signaux.

### Sélection du chemin d'accès

Grâce à la version ChemStation B.02.01, un enregistrement plus souple des données des analyses uniques et des séquences vous permet de spécifier divers emplacements d'enregistrement sans reconfiguration. L'onglet **Paths** de la boîte de dialogue **Preferences** du menu **View** vous donne la possibilité d'ajouter plusieurs chemins d'accès, en plus du chemin d'accès par défaut C:\chem32\ x\DATA (où x est le numéro d'instrument). Avec les boutons **Add** et **Remove**, il est possible de supprimer facilement des chemins d'accès existants ou de se rendre à un emplacement choisi et d'ajouter le chemin d'accès vers ce nouvel emplacement dans **Preferences**. Il n'est pas possible de supprimer le chemin d'accès par défaut de la liste, mais on peut le modifier dans **Configuration Editor**.

#### Acquisition de données **3**

Qu'est-ce que l'acquisition des données ?

Preferences	×
Paths Sequence Signal/Review options Audit Trail	
C Sequence templates	
C:\Chem32\1\SEQUENCE\	
<u>Remove</u>	
Data	
C:\Chem32\1\DATA\	
<u>R</u> emove	
Master methods	
C:\Chem32\1\METHODS\	
<u>R</u> emove	
OK Cancel Help	

Figure 6 Onglet Paths dans la boîte de dialogue Preferences

Vous pouvez alors sélectionner tous les nouveaux chemins d'accès de données spécifiés dans les boîtes de dialogue **Sample Info** /**Sequence Parameters** lors des analyses.

Sequence Parameters: 1290 LC	X
Sequence parameters Sequence output	
Data file	Operator Name
C:\Chem32\1\DATA\	
Subdirectory:	aumin
Auto Prefix Counter	ChemStore
Prefix/Counter     SIG1     000001	Transfer Settings
Part of method to run	Shutdown
According to Runtime Checklist	Post-Sequence command/macro
Use sequence table information	
Wait 0.00 🗢 minutes after loading a new method.	Not ready timeout: 0.00 🗢 minutes.
Bar code reader	Fraction information
Use in sequence Inject anyway On a bar code mismatch Inject anyway	Fraction start location:
Update master method (data analysis parameters) Sequence comment:	
	OK Cancel Help

Figure 7 Sélection du chemin d'accès aux données dans la boîte de dialogue Sequence Parameters

## Moniteurs en temps réel

Il existe deux types de moniteurs en temps réel : le moniteur de signaux et le moniteur de spectres.

### Moniteur de signaux en temps réel

Le moniteur de signaux en temps réel permet de contrôler plusieurs signaux et, s'ils sont pris en charge par l'instrument associé, les tracés de performances de l'instrument, dans la même fenêtre. Vous pouvez sélectionner, à votre convenance, les signaux à visualiser, et régler l'heure et l'axe d'absorbance. Les détecteurs qui prennent en charge cette fonction sont dotés d'un bouton de stabilisation.

Affichez la réponse de signal absolu dans la ligne du message en déplaçant le curseur en forme de croix sur l'écran.

### Moniteur de spectres en temps réel

The online spectra monitor shows absorbance as a function of the wavelength. Vous pouvez régler à la fois la plage de longueurs d'onde et l'échelle d'absorbance à l'écran.

## Journal

Le journal affiche les messages générés par le système d'analyse. Il s'agit des messages d'erreur, des messages système ou des messages d'événement provenant d'un module. Le journal enregistre ces événements, qu'ils soient affichés ou pas. Pour plus d'informations sur un événement du journal, double-cliquez sur la ligne correspondante pour afficher un texte d'aide descriptif.

# Informations sur l'état

### **Etat de la ChemStation**

La fenêtre d'état de la ChemStation affiche un récapitulatif de l'état du logiciel ChemStation.

Lorsqu'une analyse individuelle est en cours :

- la première ligne de la fenêtre d'état de la ChemStation affiche l'évolution de l'analyse en cours,
- · la deuxième ligne de la fenêtre d'état affiche l'état de la méthode en cours et
- le nom du fichier de données brutes apparaît sur la troisième ligne, avec le temps d'analyse réel exprimé en minutes (pour un instrument CPG, les fichiers correspondant aux injecteurs avant et arrière apparaissent également).

Les fenêtres d'état d'instrument fournissent des informations sur l'état des détecteurs et des modules d'instrument. Elles affichent l'état des différents composés et, le cas échéant, les conditions en cours, par exemple, les données relatives à la pression, au gradient et au débit.

### Barre d'état

L'interface utilisateur graphique du système ChemStation se compose de barres d'outils et d'une barre d'état dans la vue Contrôle de méthode et d'analyse. La barre d'état comprend un champ d'état du système et des informations sur la séquence et la méthode chargées. En cas de modification après leur chargement, elles sont identifiées par une icône représentant un engrenage jaune. Sur les modules Agilent série 1100/1200 pour CPL, un symbole jaune EMF (avertissement de maintenance prédictive) signale à l'utilisateur que les limites d'utilisation définies pour les consommables (par exemple, la lampe) sont dépassées.

### Diagramme du système

Si cette option est prise en charge par les instruments d'analyse configurés (par exemple, les modules Agilent série 1200 Infinity pour CPL ou CPG Agilent série 6890), vous pouvez afficher un schéma graphique de votre système ChemStation. Un simple coup d'œil suffit alors à vérifier l'état du système. Sélectionnez l'option System Diagram (Diagramme de système) dans le menu View (Affichage) de la vue Method and Run Control (Contrôle de méthode et d'analyse) pour activer le diagramme. Il s'agit d'une représentation graphique de votre système ChemStation. Chaque composant est représenté par une icône. L'état actif est illustré selon le codage des couleurs décrit ci-après.

Couleur	Status
gris foncé	hors ligne
gris clair	Veuille (par exemple lampes éteintes)
jaune	non prêt
vert	prêt
violet	pré-exécution, post-exécution
bleu	exécution
rouge	erreur

**Tableau 6** Couleurs utilisées pour indiquer l'état du module ou de l'instrument

Il est également possible d'afficher des listes des paramètres en cours. Outre une présentation de l'état général, ce diagramme offre un accès rapide aux boîtes de dialogue permettant de configurer les paramètres de chaque composant du système.

Pour plus d'informations sur le diagramme du système, reportez-vous à la section de l'aide en ligne consacrée aux instruments.

### **3** Acquisition de données

Informations sur l'état



# Automatisation/Séquences

Qu'est-ce que l'automatisation ? 71 Que sont les séquences et les modèles de séquence ? 72 Paramètres de séquence 73 Table de séquence74 Création de séguences(séguences et modèles de séguence) 75 Utilisation de l'éditeur de table de séguence 75 Utilisation du bouton Insert Vial Range (Insérer une plage de flacons) 75 Utilisation du bouton Append Line (Ajouter une ligne) 76 Utilisation du bouton Champs personnalisés 76 Séquence simple 77 Présentation 77 Utilisation de l'onglet Easy Sequence (Séquence) 78 Utilisation de l'onglet Easy Sequence Setup (Modèle) 80 Utilisation de séguences (séguences et modèles de séguence) 82 Acquisition des données dans une séquence 82 Acquisition de données d'analyses uniques 84 Mise à jour automatique de méthodes de référence 84 Échantillons prioritaires 86 Séquençage avec des échantillons de contrôle 86 Séguenciation avec échantillons de référence vierges 86 Interruption d'une séquence 87 Arrêt d'une séquence 88 Abandon d'une séguence 88 Exécution d'une séquence partielle 88 Création d'un jeu de résultats auto-assemblés 91 Fichier journal de séquence 93



#### 4 Automatisation/Séquences

Informations sur l'état

Procédure d'analyse de séguence 94 Structure d'un fichier de données de séguence 96 Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence 96 Structure d'un fichier de données avec le mode Création de dossiers uniques activé 100 Attribution d'un nom à des fichiers de données dans une séquence 101 Attribution automatique d'un nom à des fichiers de données dans une séquence 101 Saisie manuelle des noms de fichier de données 102 Migration des jeux de résultats 103 Fonctionnement post-séguence 105 Not Ready Timeout (Temporisation non prêt) (CPL et EC seulement) 105 Wait Time (Temps d'attente) (CPL et EC seulement) 106 Réétalonnage automatique 107 Spécification de réétalonnages 108 Paramètres de réétalonnage de la table de séguence 108 Types de séguence 111 Séquences d'étalonnage explicite 111 Séquences d'étalonnage cyclique à un niveau 111 Séquences d'étalonnage cyclique à plusieurs niveaux 112 Utilisation simultanée d'étalonnages explicites et cycliques 115 Séquences d'étalonnage cyclique avec encadrement 116 Séquences de réétalonnage cyclique utilisant plusieurs flacons qui contiennent la même dilution d'étalon 121

Ce chapitre présente les principes de l'automatisation. Il décrit l'utilisation de séquences dans la ChemStation, le processus d'analyse d'une séquence et la personnalisation des séquences.

# Qu'est-ce que l'automatisation ?

L'automatisation désigne l'analyse sans surveillance de plusieurs injections.

Le composant séquentiel du logiciel ChemStation permet d'automatiser l'acquisition, l'évaluation des données et la génération des rapports.

#### 4 Automatisation/Séquences

Que sont les séquences et les modèles de séquence ?

### Que sont les séquences et les modèles de séquence ?

Une séquence est une série d'instructions permettant d'automatiser l'analyse d'échantillons. Ceci permet d'injecter automatiquement chaque échantillon, puis d'acquérir et d'analyser les données conformément à la méthode spécifiée pour l'échantillon en question. Chaque flacon d'échantillon utilisé dans une séquence peut être analysé avec une méthode analytique différente et donc utiliser différentes combinaisons de conditions de chromatographie/d'électrophorèse et différents paramètres d'évaluation.

La ChemStation propose deux modes de stockage des données pour vous permettre de choisir le modèle adapté à votre processus de traitement. Ces modes ont une influence sur l'utilisation de la séquence :

- Mode Unique Folder Creation activé
- Mode Unique Folder Creation désactivé

Pour des raisons de cohérence des données d'échantillons, le mode **Unique Folder Creation** activé utilise les séquences comme des "modèles de séquence" qui permettent de répéter l'acquisition ; ces modèles ne sont toutefois pas utilisés lors d'un retraitement dans le **Data Analysis**. Un jeu de résultats comportant tous les fichiers correspondants est créé lors de l'exécution d'un modèle de séquence. Un nouveau jeu de résultats est créé à chaque réutilisation d'un modèle de séquence.

Le mode **Unique Folder Creation** désactivé permet de stocker toutes les données dans un même répertoire. Étant donné que les fichiers \*.s de séquences ne sont pas utilisés comme modèles de séquences, la réexécution d'une séquence risque d'écraser les données actuelles si le répertoire de données n'est pas modifié par l'utilisateur.

Les séquences/modèles de séquences disponibles (\*.s) sont affichés dans l'Explorateur ChemStation. Afin de faciliter la navigation, il est possible d'ajouter des emplacements supplémentaires de séquences ou de modèles de séquence dans l'arborescence de sélection de l'Explorateur ChemStation à l'aide de l'onglet **Paths** de la boîte de dialogue **Preferences**.
# Paramètres de séquence

La boîte de dialogue **Sequence Parameters** comporte des informations communes à tous les flacons d'échantillons d'une séquence. Vous pouvez utiliser cette boîte de dialogue pour :

- sélectionnez le répertoire de données au moyen de la fenêtre Path, et
- indiquer le mode de traitement de la séquence en choisissant des paramètres de méthode et d'analyse spécifiques.

Par exemple, vous pouvez :

- · exécuter la liste de vérification de l'exécution,
- effectuer uniquement l'acquisition,
- procéder uniquement au retraitement (pour les données acquises à l'aide de la version B.01.03 ou avec l'option **Unique Folder Creation OFF**).

#### REMARQUE

Les données de séquences acquises via la ChemStation version B.01.03 (ou version antérieure) ou avec l'option **Unique folder Creation OFF** doivent être retraitées via l'option **reprocess** de la vue **Method and Run Control**.

Les données de séquences acquises avec la version B.02.01 ou ultérieure de la ChemStation doivent être retraitées à l'aide de l'option **reprocess** proposée dans la **Data Analysis Navigation table**.

Lorsque vous sélectionnez l'option **reprocess**, deux avez deux possibilités : soit utiliser les données d'échantillons définies lors de l'analyse initiale de l'échantillon, soit utiliser les données d'échantillons actualisées en cochant la case **Use Sequence Table information**, puis en entrant les nouvelles données dans cette table :

- Indiquez les actions à effectuer en fin de séquence à l'aide des paramètres de **shutdown**,
- Spécifiez l'utilisation ou non de codes-barres dans la séquence, ainsi que le traitement d'une non-concordance de codes-barres, en partant du principe qu'un lecteur de codes-barres est installé sur le système.

4 Automatisation/Séquences Table de séquence

# Table de séquence

La table de séquence détermine les méthodes utilisées pour analyser les flacons d'échantillon, ainsi que l'ordre d'analyse des flacons. Cette table comporte également des informations sur chaque échantillon, parmi lesquelles le nom, les paramètres de quantification et les paramètres de réétalonnage.

Les instruments qui prennent en charge le double échantillonnage (CPG) sont répertoriés dans la zone de groupe Injecteur. Sélectionnez **Front** ou **Back** pour afficher les lignes de la table de séquence, ainsi que l'état d'exécution en cours de l'injecteur concerné.

Pour obtenir la description des colonnes figurant dans cette table et connaître leur mode d'interaction avec les informations stockées dans la méthode, reportez-vous à l'aide en ligne.

# Création de séquences (séquences et modèles de séquence)

Utilisez la table de séquence pour indiquer les échantillons, les méthodes et les flacons à analyser dans la séquence. La table de séquence répertorie chaque échantillon de la séquence dans l'ordre d'analyse. En outre, elle contient les informations relatives au flacon, à la méthode et à l'étalonnage nécessaires à chaque échantillon.

### Utilisation de l'éditeur de table de séquence

Pour modifier l'apparence et le contenu de la table de séquence, cliquez sur **Configure Table** en bas à droite de la table de séquence pour ouvrir l'éditeur. L'éditeur de table de séquence s'ouvre et permet de spécifier l'affichage ou non de certaines colonnes dans la table. De plus, vous pouvez modifier les largeurs de colonnes pour chaque colonne de la table. Selon les parties du logiciel installées, des champs de colonnes supplémentaires peuvent être ajoutés ; par exemple, champ the **Target Mass** si CPL/SM est installé.

# Utilisation du bouton Insert Vial Range (Insérer une plage de flacons)

Si plusieurs échantillons utilisent la même méthode, vous pouvez les saisir rapidement dans la table de séquence via la fonction Insert Vial Range (Insérer une plage de flacons). Cette fonction copie le nom de la méthode, la plage de flacons et le nombre d'injections par flacon, et si vous les spécifiez, la quantité de l'échantillon, la quantité ISTD, le multiplicateur et la dilution. Le système entre ensuite ces informations pour chaque flacon de la plage dans la table de séquence.

4

Création de séquences (séquences et modèles de séquence)

# Utilisation du bouton Append Line (Ajouter une ligne)

Pour ajouter une nouvelle ligne vide à la fin de la table de séquence, cliquez sur le bouton Append Line (Ajouter une ligne).

# Utilisation du bouton Champs personnalisés

Si des champs personnalités ont été définis dans la/les méthode(s) utilisée(s) dans la table de séquence, le bouton Champs personnalisés permet de modifier les valeurs des champs personnalisés pour chaque échantillon (champs personnalisés d'échantillon) ou pour chaque composé dans la méthode d'un échantillon (champs personnalisés de composé).

# Séquence simple

# **Présentation**

**Easy Sequence** est une interface utilisateur destinée à configurer rapidement et facilement des séquences à partir des modèles. Le modèle définit les paramètres qui devront être visionnés ou modifiés par l'utilisateur. La configuration d'étalonnage présente une interface de type tirer-lâcher facile à utiliser pour définir les types d'étalonnage et les positions d'échantillons et affiche une présentation de la séquence. Avec **Easy Sequence**, plusieurs séquences peuvent être ajoutées à la file d'attente du système de données.

Easy Sequence Setup 🎥 Sequence 🎥	
East Services Selver, C/Chem 22/2) SEOUENCE\ Test Sea est	
Easy Sequence Serup: L:\Lnem32\Z\SEQUENLE\Test Seq.est	
Method Information	
Method: DEF_LC.M Data Location: C:\Chem32\2\DATA\	
Estimated Cycle Time: 10 min Data File Name: Datafile_ <c></c>	→ ×
♥ Reset Data File Name this sequence is run	counter to 1 every time
- Sample Information	
Starting Vial Location: 1	
Number of Samples: 6	
Injection Volume: Use Method	
Sample Name: Sample_ <c> × ×</c>	
Import Samples 🐌 👻 Fill Samples	Clear Sample List
Sample List	
Vial Sample Name Ini Volume Sample Info	1
> 1 Sample_0001 Use Method	
2 Sample_0002 Use Method	
3 Sample_0003 Use Method	
4 Sample_0004 Use Method	
5 Sample_0005 Use Method	
6 Sample_0006 Use Method	
Preview/Print Sequence  Save and Add to Queue	Clear All

Figure 8 Onglet Easy Sequence

# Utilisation de l'onglet Easy Sequence (Séquence)

L'onglet **Easy Sequence** est utilisé pour créer une séquence à partir du modèle créé dans la configuration de **Easy Sequence**. Des échantillons sauvegardés au format CSV peuvent également être importés.

### Pour définir une séquence

- 1 Dans l'onglet **Easy Sequence**, pour ouvrir un modèle, cliquez sur l'icône Ouvrir une configuration de séquence simple.
- **2** Faites les mises à jour nécessaires. Celles-ci peuvent inclure les emplacements des flacons d'échantillons, des flacons d'étalons, des données ou de la séquence. Les paramètres disponibles pour les modifications dépendent de la configuration du modèle.
- **3** Si les échantillons préremplis ne correspondent pas aux emplacements des nouveaux échantillons, cliquez sur **Fill Samples** pour remplir de nouveau la table.
- 4 Cliquez sur Preview/Print Sequence... pour prévisualiser la séquence
- **5** Enregistrez la séquence.

La séquence est modifiable tant que son état est **Pending** dans la file.

6 Cliquez sur Save and Add to Queue pour introduire la séquence dans la file.

### Pour importer des données d'échantillon

Des jeux de données d'échantillon peuvent être importés dans la **Easy Sequence**. Avant d'importer des échantillons, le fichier CSV doit être configuré et formaté correctement. Reportez-vous à l'aide en ligne pour savoir comment créer un fichier de données d'échantillon CSV.

- 1 Dans l'onglet **Easy Sequence**, pour ouvrir un modèle, cliquez sur le bouton **Open Easy Sequence Setup**.
- 2 Cliquez sur Import Samples....
- **3** Sélectionnez le fichier CSV que vous souhaitez importer.

Tous les champs valides sont importés.

# **REMARQUE** Pour importer des données d'échantillon vers la **Back Sample List**, veillez à ce que la **Back Sample List** soit sélectionnée et affichée avant d'appuyer sur le bouton **Import Samples**.

4 Vérifiez les champs en révisant la liste des échantillons.

# Utilisation de l'onglet Easy Sequence Setup (Modèle)

La fonction **Easy Sequence Setup** est utilisée pour créer des modèles constituant le point de départ pour créer des séquences. Elle comporte deux panneaux : Échantillons et Étalonnage. Le panneau **Samples** définit les informations de méthode, d'échantillon, de données et de séquence. Le modèle est aussi utilisé pour définir les paramètres qui seront masqués ou en lecture seule. Le panneau **Calibration** présente une interface graphique pour configurer et afficher les analyses d'étalonnage. Il présente une interface de type tirer-lâcher facile à utiliser pour définir les types d'étalonnage, cycliques ou encadrants, mais aussi les positions des échantillons.

### Création d'un modèles Easy Sequence :

- 1 Dans l'onglet **Easy Sequence Setup**, sélectionnez le panneau **Samples**. Ouvrez un modèle existant ou créez un nouveau modèle.
- 2 Sélectionnez la **Method**. Les options d'injection double seront présentées si la source d'injection de la méthode est double. Une méthode d'analyse arrière peut être spécifiée pour le signal arrière. La méthode est le seul paramètre requis pour un modèle.
- **3** Si vous le souhaitez, entrez la durée estimée (en minutes) d'analyse d'un échantillon. C'est le temps mesuré depuis le démarrage d'un échantillon jusqu'au démarrage de l'échantillon suivant. Ce paramètre est utilisé pour estimer la durée totale prévue de votre séquence. Laissez ce champ vide si vous ne voulez pas utiliser la fonction de temps de cycle estimé.
- 4 Spécifiez la Starting Vial Location, le Number of Samples et le Sample Name.
- 5 Sélectionnez l'Data Location
- 6 Sélectionnez l'Sequence Location et indiquez le Sequence Name.
- 7 Saisissez tous les commentaires pour le modèle.
- 8 Définissez les paramètres qui seront masqués ou en lecture seule. Saisissez une valeur par défaut pour injections/vial, sample amount, ISTD amount, injection volume, etc. Cela permet de réduire le risque d'erreur lors de la création d'une séquence dans l'onglet Easy Sequence.
- **9** Enregistrez le modèle.

### Pour définir des étalonnages :

La méthode utilisée dans le modèle doit avoir été étalonnée aux niveaux nécessaires.

- 1 Dans l'onglet Easy Sequence Setup, sélectionnez le panneau Calibration.
- 2 Sélectionnez Cyclic, Bracketing ou Simple Calibration dans la liste déroulante du Calibration Mode.
- 3 Le Sequence Diagram comporte les sections suivantes :
  - Sequence Start
  - Bracketing/Cyclic
  - Samples/Injections
  - Sequence End
- **4** Dans la zone **Samples** pour la Séquence, indiquez l'**Calibration Interval** fondé sur le nombre d'échantillons ou le nombre d'injections.
- 5 Configurez le Sample type, Blank, Calibrant ou QC Sample en tirant l'icône de la zone Sample Type vers la section Sequence Diagram.
- **6** Configurez les paramètres pour chaque type d'échantillon et indiquez s'ils doivent être **Hide** ou en **Read-Only**.
- 7 Vérifiez le mode d'étalonnage dans la présentation de la **Easy Sequence**.
- 8 Enregistrez le modèle.

Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

# Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

Le menu Sequence (Séquence) permet de créer et d'accéder à des séquences et modèles de séquence. Vous pouvez créer et enregistrer des séquences de la même façon que les méthodes. Lorsque vous enregistrez une séquence, un fichier .S est créé. Pour modifier ou réutiliser la séquence, celle-ci est accessible par exemple à l'aide de l'option Load Sequence (Charger la séquence) du menu Sequence (Séquence).

### Acquisition des données dans une séquence

Pour exécuter une séquence, il faut que les méthodes prédéfinies appropriées soient disponibles. Il s'agit des méthodes de référence décrites précédemment. Habituellement, le travail s'effectue en mode **Method and Run Control** sur ChemStation. Pour cette raison, en mode **Method and Run Control**, l'explorateur de ChemStation propose un accès aux méthodes de référence et aux modèles de séquence.

Le modèle de séquence référence ces méthodes dans la table de séquence.

Comme expliqué précédemment, lorsque l'on exécute une séquence en utilisant un modèle de séquence <nom\_séquence>.S et la méthode de référence <nom\_méthode>.M, un nouveau dossier contenant tous les fichiers issus de l'analyse de séquence ("jeu de résultats") est créé.

L'emplacement de ce dossier est déterminé par les paramètres de la boîte de dialogue **Sequence Parameters** ; l'attribution du nom de ce dossier est déterminée par l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue **Preferences**. Par défaut, l'intitulé est <SeqName> <Date> <Time>, mais il peut être configuré par des jetons, ou manuellement par enregistrement du nom. Pour plus d' informations à propos de l'utilisation des jetons, voir « Noms de fichier et jetons », page 16. Vous pouvez utiliser les jetons suivants:

- Current date
- Current time
- User name
- Instrument name

Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

- Sequence name
- Counter
- Computer name

Si le **Name Pattern** ne donne pas des noms uniques pour les jeux de résultats, ChemStation ajoutera un compteur pour garantir le caractère unique.

Preferences	×
Paths Sequence Signal/Review options Audit Trail	
Data storage	
Unique folder creation ON	
Creates a unique data folder for each sequence run. See Help for more details.	
O Unique folder creation OFF	
Stores data as in ChemStation B.01.03 or earlier. This mode does not take advantage of the latest data review and reprocessing functionality in ChemStation.	
Name pattern	
<seqn> <date> <time></time></date></seqn>	
SIM07 2010-10-03 13-59-39	
OK Cancel Help	

Figure 9 Boîte de dialogue Preferences/Onglet Sequence

Au début d'une séquence d'acquisition, la méthode spécifiée dans la table de séquence est copiée du dossier des méthodes de référence vers le jeu de résultats. De plus, une copie de la séquence est créée et placée avec le journal de séquence et le fichier batch (\*.b) dans le jeu de résultats. Toutes les mises à jour de la méthode (par exemple, les mises à jour de la table d'étalonnage) sont inscrites dans cette méthode de séquence se trouvant dans le jeu de résultats. Si vous utilisez la création intelligente de rapports, les modèles de rapports sélectionnés dans les Paramètres de séquence ou dans les Propriétés de la méthode sont également copiés dans le jeu de résultats. Tous les fichiers nécessaires sont à présent disponibles pour une révision et un retraitement ultérieurs des données, sans les modifications qui ont été appliquées à la méthode de référence ou au modèle de séquence pour d'autres analyses de séquence. Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

Durant l'acquisition, les fichiers de données sont stockés dans le jeu de résultats. Dans chaque fichier de données (\*.D), une copie de la méthode de séquence est enregistrée pour cette analyse spécifique. Le fichier ACQ.txt contient les paramètres d'acquisition de la méthode de séquence, conservant ainsi l'état initial de la méthode lors de l'acquisition du fichier de données spécifique. Le dossier DA.M contient une copie des paramètres de traitement des données utilisés dans la méthode de séquence.

Grâce à ces fichiers enregistrés dans le dossier de séquence, il est possible d'effectuer toutes les activités de révision et de retraitement des données, sans modifier la méthode de référence ou le modèle de séquence. Le cas échéant, il est également possible d'enregistrer à nouveau des modifications de méthode dans la méthode de référence.

### REMARQUE

Le jeu de résultats doit toujours contenir le jeu complet de tous les fichiers de données (\*.D). Si vous supprimez une partie des fichiers de données, charger le résultat dans le système central de données pourrait provoquer des problèmes. Si vous devez raccourcir une séquence, créez un jeu de résultats auto-assemblés depuis le jeu réduit de lignes de séquence (reportez-vous à « Création d'un jeu de résultats auto-assemblés auto-assemblés », page 91).

## Acquisition de données d'analyses uniques

Pour des analyses uniques, le fichier de données est directement sauvegardé dans le sous-répertoire correspondant. Étant donné que l'on n'emploie qu'une seule méthode pour une analyse unique, il n'est pas nécessaire de copier cette méthode dans le sous-répertoire ; toutes les actions sont effectuées directement avec la méthode de référence. Une fois la partie acquisition de la méthode erminée, une copie des paramètres d'acquisition est enregistrée dans le fichier ACQ.txt. Une copie des paramètres d'analyse de données est enregistrée dans le répertoire des fichiers de données (DA.M) après l'achèvement de la partie analyse de données de la méthode de référence.

### Mise à jour automatique de méthodes de référence

Avec cette fonction, la ChemStation met à jour automatiquement les paramètres d'analyse de données copiés dans votre jeu de résultats. Par exemple, vous pouvez utiliser cette fonction pour mettre à jour les tables d'étalonnage des méthodes de référence après avoir retraité une séquence avec des réétalonnages.

Vous pouvez activer cette fonction dans la boîte de dialogue **Sequence Parameters** (reportez-vous à la figure ci-dessous). Pendant l'acquisition, la ChemStation met à jour les paramètres d'analyse de données des méthodes de référence pour toutes les méthodes de séquence contenues dans le jeu de résultats.

Les paramètres d'analyse de données des méthodes de référence sont également mises à jour après retraitement de la séquence. La condition préalable est que la méthode de référence existe encore dans le répertoire des méthodes de référence (la méthode de référence doit porter le même nom que la méthode de séquence).

	se output		
Data file		Operator Name	
Path: C:\Chem32\1\	DATA\ 🗸		
Subdirectory:	~	ladmin	
<ul> <li>Auto</li> </ul>	Prefix Counter	ChemStore	
O Prefix/Counter	SIG1 000001		
		Transfer Settings	
Part of method to run		Shutdown	
According to Runtime Check	list 🗸	Post-Sequence command/macro	
Use sequence table inform	nation		
Wait 0.00 📚 min	utes after loading a new method.	Not ready timeout: 0.00 🗢 minutes.	
Bar code reader		Fraction information	
Use in sequence	Inject anyway	Fraction start location:	
On a bar	code mismatch		
Update master method (o	lata analysis parameters)		
equence comment.			

Figure 10 Option de Update master methods dans la boîte de dialogue Sequence Parameters

#### REMARQUE

Comme cette fonction consomme des performances, il n'est pas conseillé de l'utiliser si vous avez des séquences contenant des centaines de méthodes.

Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

## Échantillons prioritaires

Une séquence en cours d'analyse peut être interrompue une fois la méthode en cours terminée. La séquence peut être interrompue pour permettre l'analyse d'un échantillon prioritaire via la même méthode ou une méthode différente. La séquence peut alors être reprise à l'endroit où elle a été interrompue, avec l'échantillon concerné.

### Séquençage avec des échantillons de contrôle

Vous pouvez spécifier des échantillons de contrôle dans le champ Sample Type (Type d'échantillon) de la table de séquence. La méthode utilisée pour analyser l'échantillon de contrôle doit contenir une table d'étalonnage où sont indiquées les limites d'échantillon de contrôle pour l'un des composés. En cas de dépassement des limites d'échantillon de contrôle spécifiées, la séquence est arrêtée et un message est consigné dans le journal. Si vous utilisez l'un des styles de rapport ChemStation, les limites d'échantillon de contrôle sont également imprimées sur les rapports générés pour ces analyses. Pour plus d'informations sur le mode de définition d'une séquence avec des échantillons de contrôle, reportez-vous à la section How To (Comment faire) de l'aide en ligne.

## Séquenciation avec échantillons de référence vierges

Les sgnaux de référence sont nécessaires pour évaluer le taux signal/bruit tel qu'il est définit par la Pharmacopie européenne. Vous pouvz préciser le fichier de données de référence dans la tableau de séquences en choisissant le type d'échantillon **Blank** pour les échantillons correspondant.

Si vous utilisez plusieurs fichiers de rééfrence, l'ordre des fichiers est déterminant. ChemStation utilise un fichier de référence pour tous les lancements successifs, jusu'au nouveau de fichier de référence du tableau de séquence. Le fichier de référence d'un échantillon vierge sert comme sa propre référence. Consultez la vue d'ensemble de la séquence contenant eux échantillons vierges:

Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

	Échantillon	Fichier de données	Fichier de référence
1	Echantillon 1	DF01.D	
2	Vierge1	DF02.D	DF02.D
3	Echantillon2	DF03.D	DF02.D
4	Echantillon 3	DF04.D	DF02.D
5	Vierge2	DF05.D	DF05.D
6	Echantillon4	DF06.D	DF05.D
7	Echantillon5	DF07.D	DF05.D

Tableau 7 Exemple de séquence avec échantillons vierges.

Consultez le guide de référence pour plus de détails à propos du calcul du taux signal/bruit.

### Interruption d'une séquence

L'analyse active prend fin avant que la séquence s'interrompt.

Lors de l'interruption d'une séquence, vous ne pouvez modifier ni le nom du fichier de la table de séquence ni celui du fichier de données. Dans la table de séquence, vous pouvez uniquement modifier les lignes de séquence qui n'ont pas encore été exécutées ou le numéro de flacon figurant sur la ligne de séquence en cours. Vous pouvez ajouter, supprimer ou modifier des lignes de séquence des analyses ultérieures.

Par exemple, il peut s'avérer nécessaire de modifier une séquence active pour y ajouter un nouveau lot d'échantillons. Vous modifiez donc la séquence afin que ces flacons constituent l'échantillon suivant que ChemStation traitera après les échantillons sur la ligne de séquence en cours d'analyse.

Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

## Arrêt d'une séquence

L'analyse active prend fin immédiatement. En revanche, l'analyse de données sera toujours exécutée pour cette analyse. Une séquence arrêtée ne peut absolument pas être reprise.

Si vous souhaitez mettre fin à l'analyse en cours avant d'arrêter la séquence, interrompez la séquence, attendez que l'analyse soit terminée et arrêtez ensuite la séquence.

## Abandon d'une séquence

La fonction Abandonner met immédiatement fin à une séquence active. Aucune analyse de données n'est exécutée.

### Exécution d'une séquence partielle

### Sélection d'un jeu de résultats pour une acquisition partielle

Si vous utilisez le Mode de création de dossier unique activé (reportez-vous à « Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence », page 96), vous pouvez choisir les options suivantes pour l'acquisition de séquence partielle :

 acquisition de la séquence partielle dans un nouveau conteneur de séquence ;

ou

• acquisition de la séquence partielle dans un conteneur de séquence existant.

L'acquisition des fichiers de données à partir d'une exécution de séquence partielle dans un jeu de résultats existant peut être utile dans les scénarios suivants :

 un fichier de données unique ou plusieurs fichiers de données doivent être écrasés, par exemple parce qu'un flacon incorrect a été utilisé en premier lieu;

- seule la première partie de la séquence a été exécutée en premier lieu et les échantillons manquants doivent être ajoutés en exécutant une séquence partielle. Cela peut se produire en cas de panne d'un instrument durant l'acquisition de séquence.
- Des lignes additionnelles doivent être ajoutées au modèle de séquence après l'acquisition des lignes existantes. Les analyses additionnelles doivent être ajoutées aux données existantes.

Par conséquent, lorsque vous sélectionnez **Partial Sequence** dans le menu **Sequence**, une boîte de dialogue apparaît, permettant de sélectionner un jeu de résultats existant dans une liste ou d'en créer un nouveau.

Partial Sequence		X
Choose a result set for partial acquisition. Choose 'New' to create a ne	w result set.	
Directory	Date	Number of data files
C:\CHEM32\1\DATA\2_RL1 C:\CHEM32\1\DATA\1_RL1 C:\CHEM32\1\DATA\RL1_2	8/24/2010 9:15:14 AM 8/24/2010 9:11:33 AM 8/6/2010 2:41:03 PM	5 4 1
	New	Cancel Help

Figure 11 Boîte de dialogue Partial Sequence

Cependant, afin de maintenir la cohérence du jeu de résultats (et pour qu'il puisse être complètement retraité dans le module **Data Analysis**), seuls les jeux de résultats remplissant certaines conditions peuvent subir une acquisition partielle, à savoir :

- le nom du modèle de séquence (séquence source) et le nom du fichier de séquence .S dans le jeu de résultats (séquence cible) sont identiques ;
- le chemin d'accès des données et le sous-répertoire doivent être identiques pour les fichiers de séquence ;
- le nombre de lignes de séquence dans la séquence source doit être supérieur ou égal au nombre de lignes de séquence dans la séquence cible ;

4

Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

- pour chaque ligne dans la séquence cible, le type d'échantillon et le nombre d'injections doivent être identiques aux valeurs dans les lignes correspondantes de la séquence source ;
- le schéma d'attribution de nom de fichier de données doit être identique pour les deux fichiers de séquence.

Après avoir cliqué sur **Ok** (pour sélectionner un des jeux de résultats existants) ou sur **New** (pour créer un nouveau jeu de résultats) et quitté cette boîte de dialogue, vous pouvez sélectionner les lignes de séquence à exécuter durant une séquence partielle.

### Sélection de lignes de séquence pour l'acquisition d'une séquence partielle

Le système affiche la boîte de dialogue **Partial Sequence** dans laquelle figure une table vous permettant de sélectionner les échantillons à analyser. Cette boîte de dialogue s'ouvre indépendamment du paramètre de Création de dossiers uniques.

Une analyse simple est présentée sur chaque ligne de la boîte de dialogue **Partial Sequence**. Le flacon, la méthode, le fichier de données ainsi que le nom de l'échantillon sont spécifiés pour chaque analyse. En outre, les informations relatives à la table de séquence et aux étalons sont fournies sous forme codée dans les colonnes Tbl séq et Étal:FR:TR. Reportez-vous à l'aide en ligne pour une description de ces codes.

Pour obtenir une version papier de la séquence partielle, cliquez sur le bouton **Print**.

Avec l'option **Automatic update for selected runs**, vous pouvez mettre à jour toutes les méthodes de séquences utilisées dans les analyses sélectionnées avec leurs méthodes de référence correspondantes.

Avec la **Manual update** ..., vous ouvrez la boîte de dialogue **Update Methods**, qui vous permet de synchroniser manuellement les méthodes de référence et les méthodes utilisées dans le modèle de séquence.

Par exemple, la boîte de dialogue **Partial Sequence** peut ressembler à la suivante. Vous pouvez marquer des échantillons spécifiques pour traitement.

Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

/ethod	update before start						
Manu	ial update Automa	tic update for selected runs					
Exists	Sample name	Data file	Run	Location	Method	Seq tbl	Calib:RF:RT
	sample1	NV-0101	1		BL1	01:01	
	sample2	NV0201	2		BL1	02:01	
	sample3	NV0301	3		RL1	03:01	
	sample4	NV0401	4		RL1	04:01	
	sample5	NV0501	5		RL2	05:01	

Figure 12 Boîte de dialogue Partial Sequence

### Création d'un jeu de résultats auto-assemblés

A l'aide de la commande **Sequence > Create New Result Set** dans la vue **Data Analysis**, vous pouvez créer un nouveau jeu de résultats auto-assemblés à partir des données affichées dans la Table de navigation. Les jeux de résultats auto-assemblés sont utiles, par exemple, dans les cas suivants :

- Vous souhaitez associer des échantillons simples, des séquences ou une combinaison des deux afin de les retraiter avec une méthode spécifique.
- Vous souhaitez raccourcir une séquence.

### Pour assembler un nouveau jeu de résultat

- 1 Ajoutez les fichiers de données nécessaires dans la table de navigation.
- **2** Dans la table de navigation, sélectionnez tous les fichiers de données que vous souhaitez inclure dans votre nouveau jeu de résultats.
- 3 Sélectionnez Sequence > Create New Result Set pour ouvrir la boîte de dialogue Create New Result Set.

Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

- 4 Sélectionnez une méthode à associer au nouveau jeu de résultats.
- 5 Spécifiez un dossier pour le nouveau jeu de résultats.
- **6** Triez les échantillons.

Les noms des fichiers de données sont mis à jour automatiquement. Si besoin, vous pouve restorer l'ordre initial des échantillons en utilisant la touche 🖻 (**Restore initial order**).

Notez que la position d'un fichier vierge est important pour évaluer le taux signal/bruit tel qu'il est définit par le pharmacopie européenne. Voir aussi « Séquenciation avec échantillons de référence vierges », page 86.

7 Confirmez les paramètres pour assembler la liste des fichiers de données dans un jeu de résultats dans le dossier spécifié.

# Fichier journal de séquence

Un fichier journal indiquant tous les événements qui se sont produits lors de la séquence est généré. Il est utile pour identifier notamment le moment où des erreurs surviennent si la séquence est analysée sans surveillance ou pendant la nuit. Le nom du fichier journal porte toujours l'extension .log. Le fichier journal est stocké dans le répertoire où sont stockées les données de la séquence.

# Procédure d'analyse de séquence

### Lancement d'une séquence en Unique Folder Creation activé

Le système crée un jeu de résultats à partir de la définition de chemin définie dans les paramètres et les préférences de la séquence. Les modèles de séquence \*.s, toutes les méthodes définies dans la table de séquence appartenant à cette séquence spécifique sont copiées dans le jeu de résultats. Si vous utilisez la création intelligente de rapports, tous les modèles de rapports \*.rdl définis dans la méthode ou dans le modèle de séquence sont également copiés dans le jeu de résultats. Le système continue d'utiliser ces fichiers au cours de l'acquisition. Au début de la séquence, la méthode de la ligne de séquence correspondante est chargée dans la ChemStation à partir du jeu de résultats.

### Lancement d'une séquence en Unique Folder Creation désactivé

Au début d'une séquence, le système charge le fichier \*.s de cette séquence puis, en fonction de l'entrée dans la table de séquence, charge la méthode correspondante dans ChemStation. Contrairement au mode de stockage en **Unique Folder Creation** activé, aucun jeu de résultats n'est créé. Les séquences et méthodes restent dans leur répertoire maître.

### Autres opérations effectuées lors de l'exécution d'une séquence :

Les étapes suivantes sont répétées pour chaque ligne de séquence exécutée :

- S'il est équipé d'un injecteur automatique, le logiciel ChemStation repère d'abord l'échantillon sur cet instrument à l'aide du numéro saisi dans la colonne Vial (Flacon).
- L'instrument est chargé avec les paramètres de méthode.
- La macro de pré-analyse est exécutée.
- L'échantillon est ensuite injecté dans l'instrument (manuellement ou automatiquement).
- Les données sont acquises.

- L'évaluation des données de méthode est effectuée, c'est-à-dire l'intégration, la quantification et la génération de rapport, ainsi que toute macro éventuelle spécifiée par l'utilisateur. Si le **Unique Folder Creation** activé est utilisé, le système enregistre une méthode supplémentaire DA.M pendant l'analyse.
- · La macro post-analyse est exécutée.
- Pendant tout le processus, ChemStation suit la progression de la séquence en temps réel et génère un fichier journal de séquence.



#### **Etat du logiciel ChemStation**

Figure 13 État de la séquence

# Structure d'un fichier de données de séquence

# Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence

Dans l'onglet **Sequence** des sessions en ligne, l'utilisateur a le choix entre deux modèles de stockage des données. Ces modes définissent le stockage des données de séquence dans ChemStation.

Preferences	×
Paths Sequence Signal/Review options Audit Trail	
<ul> <li>Data storage</li> </ul>	
<ul> <li>Unique folder creation ON</li> </ul>	
Creates a unique data folder for each sequence run. See Help for more details.	
O Unique folder creation DFF	
Stores data as in ChemStation B.01.03 or earlier. This mode does not take advantage of the latest data review and reprocessing functionality in ChemStation.	
Name pattern	
<seqn> <date> <time></time></date></seqn>	
SIM07 2010-10-03 13-59-39	
OK Cancel Help	

Figure 14 Boîte de dialogue Preferences / Onglet Sequence

# **REMARQUE** L'activation ou la désactivation de la création de dossier unique affecte uniquement les acquisitions futures, mais ne modifie pas l'organisation des données déjà acquises.

**REMARQUE** Nous vous recommandons instamment de choisir un des deux modes au début de votre travail et de ne pas alterner entre ceux-ci.

Désactiver la créer d'un dossier unique n'est pas possible si ChemStation est connecté à un système centralisée de données.

### Mode Création de dossiers uniques activé

Ce mode de stockage des données établit un lien solide et permanent entre les données brutes et la méthode. Chaque fichier de données, qu'il soit acquis dans une séquence ou comme une analyse simple, est lié à la méthode utilisée pour l'analyse de données.

Les données de séquence sont enregistrées dans un jeu de résultats portant un nom unique. Il est possible de spécifier des conventions de noms (modèles de noms) pour ces jeux de résultats dans l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue **Preferences**. Si aucun modèle de nom n'est spécifié, la définition de nom de séquence par défaut est utilisée. L'onglet **Sequence** est utilisé exclusivement pour l'acquisition de données et n'est donc présent que pour les systèmes en ligne.

Le modèle de nom de séquence peut comporter plusieurs sections. Le système attribue automatiquement un nom au jeu de résultats déterminé par le modèle de nom de séquence que vous avez sélectionné. Les fichiers de données, les méthodes, le journal de séquence, les fichiers <nom\_séquence>.s et <nom\_séquence>.b de cette séquence précise sont enregistrés dans le jeu de résultats. Le jeu de résultats est créé au démarrage de la séquence.

Les fichiers de séquence (\*.s) servent de modèles de séquence. Ce concept vous permet d'exécuter les fichiers de séquences à plusieurs reprises sans écraser les données existantes ni modifier les paramètres de séquence. Si aucun chiffre ni délai n'est utilisé dans le modèle de nom de séquence, le système introduit automatiquement un compteur de manière à éviter d'écraser les données. Lorsque qu'un même modèle de séquence est utilisé pour la deuxième séquence, la troisième séquence et les séquences suivantes, un compteur est ajouté au nom du jeu de résultats.

### Mode Création de dossiers uniques désactivé

Dans ce mode de stockage des données, le nom de la méthode représente le seul lien entre le fichier de données et la méthode utilisée pour l'acquisition et le traitement de ces données. Aucune copie de la méthode n'est enregistrée avec la séquence ou avec le fichier de données. Ainsi, si la méthode est modifiée ou si une nouvelle méthode est créée avec ce nom, la séquence ne peut pas être exactement reproduite. Les fichiers de données de la séquence sont enregistrés selon les paramètres indiqués dans le groupe Fichier de données de la boîte de dialogue **Sequence Parameters**. La fonction d'attribution d'un nom à la séquence de l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue **Preferences** est désactivée dans ce mode. Ce mode de stockage des données étant identique à celui du

Structure d'un fichier de données de séquence

logiciel ChemStation version B.02.01 (ou antérieure), il ne bénéficie pas des nouvelles fonctionnalités de révision/retraitement des données dans la vue **Data Analysis** de ChemStation.

### REMARQUE

Les données de séquence acquises avec l'option **Unique folder Creation** désactivé doivent être retraitées à l'aide de l'option correspondante de la vue **Method and Run Control**.

### REMARQUE

Si vous utilisez ChemStation avec un système de stockage central de données, le mode de préférence**Unique Folder Creation** doit être ACTIVE. Avec un système de stockage centralisé des données, l' option **Unique Folder Creation** est DESACTIVEE.

Si vous avez choisi l'option **Unique Folder Creation Off**, voici ce qui va se produire au niveau du stockage des données :

- Les données de séquence ne sont pas acquises dans un jeu de résultats, mais directement dans le sous-répertoire spécifié dans les Paramètres de séquence (reportez-vous à « Paramètres de séquence », page 73). Par conséquent, le modèle de nom de séquence est en grisé dans l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue Préférences.
- Cela signifie que pour deux séquences d'acquisition ou plus, les données peuvent être acquises dans le même sous-répertoire.
- Aucune méthode de séquence (.M) ou copie du fichier de séquence (.S) n'est stockée avec les données ; seuls le fichier journal de séquence et le fichier batch (.B) le sont. Cela signifie que seules les méthodes et les séquences se trouvant dans les chemins d'accès spécifiés dans la boîte de dialogue **Preferences** (reportez-vous à « Sélection du chemin d'accès », page 62) sont disponibles. Elles doivent être utilisées pour l'acquisition ainsi que pour la révision et le retraitement des données. Des modifications de méthode spécifiques à une séquence ou à un fichier de données ne peuvent être enregistrées qu'en enregistrant la méthode sous un autre nom. Dans le cas contraire, ces modifications seront également appliquées à la méthode d'acquisition.
- Lorsqu'une séquence acquise avec le Mode création de dossiers uniques désactivé est chargé dans la table de navigation Table, le mode de retraitement de la vue Data Analysis n'est pas disponible (reportez-vous à Figure 15, page 99). Ces séquences ne peuvent être retraitées qu'en mode Method and Run Control à l'aide de l'option Reprocessing only dans les Sequence Parameters (Figure 16, page 99).

Structure d'un fichier de données de séquence

🕌 wadi1165 (offline): Data Analysis													- • •
<u>File Method</u> Sequence Recalc	ulate	<u>G</u> ra	aphics	Integratio	on <u>C</u> alibr	ration <u>R</u> e	port <u>S</u> p	ectra <u>V</u> iew	User ECM Abo	rt <u>H</u> elp			
Signals 🕅 🔯 Methods 🏹	Signals 🌇 🐚 Methods 🗞 🖶 🎧 🕕 DEF_LC.M												
Data Analysis 🛛 🖗	Se	quence	e: BATC	н									4
1								R	ecalculate Mode	1	0		
E C:\CHEM32\1\DATA		Ov	/er	ECM	Туре	Line	Inj	Vial	Sample Name	Sample Type	Man	Cal Level	Sample Info
- 📚 BATCH	•	+		-	÷.	1	1	5	Isocratic Std. 1	Calibration	-	1	
- C_DEMO1		+		-	2	2	1	5	Isocratic Std. 1	Calibration	-	1	
- 🧧 Single Runs		+		-	2	3	1	5	Isocratic Std. 1	Control Sample	-		
ESTD_DAD		+		-	2	4	1	6	Isocratic Std. 2	Sample	-		
FRACTION_COLLEC		+		-		5	1	7	Isocratic Std. 3	Sample	-		
ISTD_DAD													



equence Parameters: Lo	cal LC		
Sequence parameters Sequer	nce output		
Data file		Operator Name	
Path: U:\Uhem32\2 Subdirectory:		admin	
<ul> <li>Auto</li> </ul>	Prefix Counter	ChemStore	
O Prefix/Counter	SIG1 000001	Transfer Settings	
Part of method to run	klist 💌	Shutdown	
According to Runtime Chec Acquisition Only	klist		~
Vait 0.00 🗢 mi	nutes after loading a new method.	Not ready timeout: 0.00 📚 minutes.	
Bar code reader	r code mismatch	Fraction information Fraction start location:	
Update master method   Sequence comment:	(data analysis parameters)		
		OK Cancel	Help

Figure 16 Retraitement de données de séquence acquises avec le mode Unique Folder Creation désactivé

Structure d'un fichier de données de séquence

# Structure d'un fichier de données avec le mode Création de dossiers uniques activé

Il existe un lien solide entre les données brutes et la méthode, comme le montre la figure ci-dessous.

<u>F</u> ile <u>E</u> dit <u>V</u> iew <u>T</u> ools <u>H</u> elp			
Organize 👻 Include in library 👻	Share w	ith 🔻 »	
<ul> <li>Chem32</li> <li>1</li> <li>DATA</li> <li>Demo</li> <li>LC_DEMO2</li> </ul>		ame NV0101.D NV0201.D NV0301.D	
<ul> <li>IM07 2010-10-05</li> <li>IM07 2010-10-05</li> <li>NV0101.D</li> <li>DA14</li> </ul>	-	NV0501.D NV0601.D	Jeu de résultats
▶ DA.M ▶ ▶ NV0201.D ▶ ▶ NV0301.D		NV0701.D M	éthode d'analyse des données
▷ 🌇 NV0401.D		NV0901.D Mét	node utilisée dans la séquence
▷ 🅌 NV0501.D ▷ 퉬 NV0601.D		sequence.acaml =	Fichier ACAML pour Intelligent Reporting
▷ 퉬 NV0701.D ▷ 🐌 NV0801.D		SIM07.macaml	Fichier de lot
▷ 🍑 NV0901.D 🍑 SIM07.M		Short_Area.rdl	Modèle de rapport pour Intelligent Reporting
<ul> <li>gci</li> <li>METHODS</li> <li>SEQUENCE</li> </ul>		SIM07.S SIM07.LOG	Modèle de séquence
TEMP			Journal de séquence



#### REMARQUE

Le jeu de résultats doit toujours contenir le jeu complet de tous les fichiers de données (\*.D). si vous suppimez une partie des fichiers de données, télécharger les résultats vers le système de stockage central peut causer des problèmes. ISi vous avez besoin de racourcir une séquence, créez un résultat auto-assemblé à partir d'une ligne de séquence prédéfinit (voir « Création d'un jeu de résultats auto-assemblés », page 91).

# Attribution d'un nom à des fichiers de données dans une séquence

Il existe plusieurs méthodes pour attribuer un nom aux fichiers de données d'une séquence :

- automatique,
- manuelle ou
- à l'aide d'un préfixe/compteur.

# Attribution automatique d'un nom à des fichiers de données dans une séquence

### Flacons d'échantillon

Par exemple, 017-0103.D.

où :

- Les trois premiers chiffres représentent le numéro du flacon (017).
- Le quatrième chiffre en chromatographie liquide et en électrophorèse capillaire est un tiret de séparation (-). En chromatographie gazeuse (CPG), il s'agit du caractère (F), qui désigne l'avant, ou du caractère (B), qui désigne l'arrière.
- Les cinquième et sixième chiffres constituent la ligne de séquence définissant la méthode utilisée (par exemple, 01 pour la première ligne de séquence).
- Les septième et huitième chiffres représentent le numéro d'injection de ce flacon par la méthode (par exemple, 03 pour la troisième injection).

### Analyses de blanc

Par exemple, NV--0499.D.

où :

- NV (no vial) désigne l'absence de flacon.
- - est un tiret de séparation.
- 0499 est la 99<sup>e</sup> analyse de blanc de la ligne de séquence 4.

# Saisie manuelle des noms de fichier de données

L'une des colonnes de la table de séquence s'intitule **Datafile**. Lorsqu'il n'existe aucune centrée, le fichier de données spécifié pour les paramètres de séquence (automatique ou compteur à préfixe) est utilisé pour créer le nom du fichier de données. Si du texte est saisi dans la colonne **Datafile**, ChemStation l'utilise comme nom de fichier de données pour l'analyse.

Si plusieurs injections par flacon sont spécifiées sur une ligne dont le nom de fichier de données a été saisi manuellement, ChemStation remplace automatiquement les caractères à la fin du nom entré par l'utilisateur par le numéro d'injection. Cela empêche la réutilisation du même nom de fichier de données pour différentes injections.

### Utilisation d'un préfixe/compteur pour nommer des fichiers de données

Si vous utilisez le préfixe/compteur pour nommer des fichiers de données, ChemStation crée un nom pour chaque analyse. Dans le cas d'un instrument prenant en charge l'analyse à signal double, comme le CPG, ChemStation crée un nom pour chaque signal.

La configuration de séquence autorise les noms de fichiers longs pour le préfixe/compteur. Le nom de fichier de données défini par le préfixe/compteur peut avoir jusqu'à quinze caractères plus l'extension .d, soit dix-sept caractères au total.

Les règles ci-dessous s'appliquent au champ préfixe/compteur :

- le compteur lui-même peut avoir au maximum 6 caractères
- si un préfixe fournit moins de neuf caractères pour le préfixe, le compteur est étendu automatiquement à 6 chiffres
- le nom donné dans le compteur est le numéro de départ de l'incrémentation

Tableau 8	Noms de fichier
-----------	-----------------

Préfixe	Compteur	Résultats dans le nom de fichier
long	000001	long000001
nomlong	000001	longname000001
testwithalongna	1	testwithalongna1

# Migration des jeux de résultats

ChemStation fournit un outil de migration des données n'appartenant pas au jeu de résultats vers un format de jeu de résultats. Cette opération n'aboutit que si le fichier de séquence d'origine est encore disponible. Ce fichier doit contenir toutes les lignes de séquence nécessaires et respecter la convention de nommage des fichiers de données originaux pour retraiter tous les fichiers de données de la séquence. De plus, toutes les méthodes figurant dans la colonne Méthode de la table de séquence doivent être disponibles.

Pour effectuer la migration :

Démarrez la Result Set Migration depuis le menu Sequence du mode Data Analysis.

😤 Result Set Migration	×
To migrate data to a result set, select sequence template, method path, data source and destination directories.	
Select Method Path	
Select Source	
Select Destination	
Messages and warnings:	* *
Start Close Help	

**Figure 18** Migration des jeux de résultats

Renseignez les champs obligatoires suivants :

**Select Sequence Template** : sélectionnez le fichier de séquence (\*.S) qui contient la table de séquence correspondant à l'ensemble de données à migrer.

**Select Method Path** : sélectionnez le répertoire où se trouvent les méthodes référencées dans la table de séquence ;

**Select Source** : sélectionnez le répertoire contenant les fichiers de données à migrer ;

Structure d'un fichier de données de séquence

**Select Destination** : spécifiez le chemin et le nom du jeu de résultats à créer. Vous pouvez sélectionner un dossier existant ou en créer un nouveau.

Lorsque tous les champs sont remplis, la migration peut être lancée.

Les opérations suivantes sont réalisées :

- Le répertoire du jeu de résultats est créé.
- Le modèle de séquence est copié vers le jeu de résultats. Il est également converti de manière à pouvoir retraiter les fichiers de données dans la vue **Data Analysis** ;
- Les méthodes référencées dans la table de séquence sont copiées depuis le chemin de méthode spécifié vers le dossier du jeu de résultats.
- les fichiers de données, le journal de séquence et le fichier batch sont copiés depuis le répertoire d'origine des données vers le répertoire de destination ;
- selon les informations présentes dans la table de séquence, une copie de la méthode correspondante est copiée vers chaque fichier de données au format DA.M.

Une fois la migration du jeu de résultats terminée, un message signalant sa réussite s'affiche dans le champ **Messages and warnings**. Sinon, un message d'avertissement signale tout problème survenu au cours de la migration. Vous pouvez obtenir des détails sur l'avertissement en cliquant sur le message.

# Fonctionnement post-séquence

Vous pouvez indiquer ce qui doit se passer au terme d'une séquence d'exécution normale ou si ChemStation détecte une erreur durant la séquence. En chromatographie en phase liquide (CPL), vous cochez pour cela la case post-sequence Cmd/Macro (Cmd/macro post-séquence) des paramètres de séquence, où vous avez le choix entre :

- Mettre le système en état STANDBY, auquel cas la pompe est arrêtée et la lampe éteinte,
- Mettre le système en état LAMPOFF avec toutes les lampes inactives (off) (CPL et EC seulement),
- Mettre le système en état PUMPOFF avec toutes les pompes inactives (off) (CPL et EC seulement) ou
- Utiliser une macro SHUTDOWN par défaut ou modifier SHUTDOWN.MAC pour déterminer une opération spécifique.

Par exemple, vous pouvez arrêter le système au terme de la séquence. La macro d'arrêt peut également servir à paramétrer le débit sur zéro ou à le réduire légèrement.

Dans les paramètres de séquence, vous pouvez indiquer la macro personnalisée à exécuter en incluant son nom dans le champ Post-Sequence Cmd/Macro (Cmd/macro post-séquence), puis en cochant la case.

## Not Ready Timeout (Temporisation non prêt) (CPL et EC seulement)

La valeur Not Ready Timeout (Temporisation non prêt) des paramètres de séquence représente le temps d'attente nécessaire du système avant que l'instrument soit prêt. Une fois ce laps de temps écoulé, le système s'arrête.

# Wait Time (Temps d'attente) (CPL et EC seulement)

Les paramètres de séquence vous permettent d'indiquer un temps d'attente qui est exécuté une fois la méthode chargée et avant l'injection à l'aide de cette méthode. Cela permet de rééquilibrer les colonnes/les capillaires lorsque de nouvelles conditions d'analyse sont utilisées.

# Réétalonnage automatique

En général, l'étalonnage s'effectue après toute modification des conditions de fonctionnement (par exemple, changement de colonne ou de capillaire). Le réétalonnage automatique a lieu habituellement au début d'une séquence d'analyses ou à intervalles réguliers, durant une séquence d'un programme, pour compenser les facteurs ayant un impact sur les performances d'analyse.

Il existe deux méthodes pour spécifier le réétalonnage de séquence automatique :

- · les séquences d'étalonnage explicite ou
- les séquences d'étalonnage cyclique.

# Réétalonnage en mode de préférence Unique Folder Creation ON (Mode Création de dossiers uniques activé)

Pendant une opération de réétalonnage, la table d'étalonnage de la méthode utilisée est mise à jour en fonction des paramètres définis pour cette méthode. En mode de stockage "Création de dossiers uniques activé", les méthodes réétalonnées sont disponibles dans le jeu de résultats. La table d'étalonnage de la méthode de séquence est mise à jour pendant ce processus. En outre, la méthode DA.M de chaque fichier de données contient l'étalonnage mis à jour utilisé pour la création des résultats.

# Réétalonnage en mode de préférence Unique Folder Creation OFF (Mode Création de dossiers uniques désactivé)

Pendant une opération de réétalonnage, la table d'étalonnage de la méthode utilisée est mise à jour en fonction des paramètres définis pour cette méthode. En mode de stockage Unique Folder Creation OFF (Mode Création de dossiers uniques désactivé), la table d'étalonnage de la méthode maîtresse est mise à jour pendant le réétalonnage.

# Spécification de réétalonnages

Les paramètres de réétalonnage de la séquence sont saisis directement dans la table de séquence. Ces paramètres définissent le mode de réétalonnage de la méthode durant une séquence.

## Paramètres de réétalonnage de la table de séquence

Le facteur de réponse et les temps de rétention/migration peuvent être mis à jour de plusieurs manières. Le niveau d'étalonnage, la mise à jour du facteur de réponse et la mise à jour des temps de rétention/migration sont des instructions utilisées dans l'analyse de données lors du réétalonnage de la table d'étalonnage.

Lorsque l'étalonnage est spécifié dans la colonne SampleType (Type d'échantillon) de la table d'échantillons, les colonnes suivantes sont actives et modifiables :

- Cal Level (Niveau d'étalonnage)
- Update RT (Mettre à jour le temps de rétention)
- Update RF (Mettre à jour le facteur de réponse)
- Interval (Intervalle)

Les valeurs que vous pouvez saisir dans chacune de ces colonnes sont répertoriées dans le tableau suivant.

CAL Level (Niveau d'étalonnage)	Update RT (Mettre à jour le temps de rétention)	Update RF (Mettre à jour le facteur de réponse)	Interval (Intervalle)
Calibration table level # (1-999) (Niveau de table d'étalonnage - 1-999)	No update (Aucune mise à jour)	No update (Aucune mise à jour)	Cyclic recalibration interval # (1-999) (Intervalle de réétalonnage cyclique - 1-999)
	Moyenne	Moyenne	Blank (Blanc)

 Tableau 9
 Paramètres de réétalonnage de la table de séquence
CAL Level (Niveau d'étalonnage)	Update RT (Mettre à jour le temps de rétention)	Update RF (Mettre à jour le facteur de réponse)	Interval (Intervalle)
Remplacement		Remplacement	
		Bracket (Encadre- ment)	
		Delta% (% delta)	

 Tableau 9
 Paramètres de réétalonnage de la table de séquence

Ce tableau indique les colonnes de la table de séquence contenant les paramètres de réétalonnage et les valeurs que vous pouvez entrer.

# No Update (Aucune mise à jour)

Ne change pas le facteur de réponse ou le temps de rétention/migration.

### Remplacement

Remplace les temps de rétention/migration précédents et la réponse (aires ou hauteurs) par ceux de l'analyse en cours seulement. La réponse n'est pas modifiée pour les pics introuvables dans cette analyse d'étalonnage.

### Moyenne

Etablit les temps de rétention/migration précédents et les réponses (aires ou hauteurs) pour chaque pic, en se basant sur l'analyse d'étalonnage originale et tous les réétalonnages depuis lors. S'il manque un pic dans l'un des réétalonnages, la réponse moyenne correspondante n'est pas affectée.

# **Bracket (Encadrement)**

Les échantillons sont encadrés par des étalonnages pré-échantillon et post-échantillon. L'évaluation a lieu après l'analyse du dernier étalon de l'encadrement. Les données d'étalonnage existantes sont remplacées par les résultats de l'analyse d'étalonnage du début de l'encadrement. La moyenne des étalonnages de fin de l'encadrement est établie sur celle de la table d'étalonnage.

# Interval (Intervalle)

L'intervalle détermine la fréquence d'un étalonnage lors d'une séquence. Cette fréquence correspond au nombre d'injections d'échantillon effectuées avant les injections d'étalons suivantes. Au début de l'analyse, un étalonnage est exécuté et les résultats (facteurs de réponse) sont saisis dans la table d'étalonnage. Ces résultats sont ensuite utilisés dans les calculs quantitatifs ultérieurs. Une fois le nombre d'injections spécifié effectué, un autre étalonnage est exécuté et les résultats sont saisis dans la table d'étalonnage est exécuté et les résultats sont saisis dans la table d'étalonnage, écrasant ainsi les résultats de l'analyse d'étalonnage précédente.

# Delta% (% delta)

Le calcul de la valeur delta% (% delta) permet de comparer les facteurs de réponse d'une analyse à ceux entrés manuellement dans une table d'étalonnage. La valeur delta% est ensuite appliquée à tous les pics étalonnés de la table. Vous pouvez identifier plusieurs étalons internes. Les facteurs de réponse mesurés correspondants servent à calculer de nouveaux facteurs de réponse pour les autres pics. Vous identifiez l'étalon interne à utiliser pour le calcul de la valeur delta% pour chaque pic dans la table d'étalonnage.

# Types de séquence

Les types de séquence sont les suivants :

- séquences d'étalonnage explicite,
- séquences d'étalonnage explicite à un niveau,
- · séquences d'étalonnage cyclique à plusieurs niveaux,
- étalonnages explicites et cycliques utilisés simultanément dans une séquence, et
- · séquences d'étalonnage cyclique avec étalonnages encadrants.

# Séquences d'étalonnage explicite

Ce type de séquence effectue le réétalonnage aux intervalles spécifiés par vos soins dans la table de séquence.

Pour les séquences d'étalonnage explicite, les étalons sont entrés dans la séquence sans qu'aucune entrée d'intervalle ne soit fournie dans la table de séquence. Le réétalonnage a lieu une fois pour chaque entrée d'étalon de la table de séquence.

# Séquences d'étalonnage cyclique à un niveau

Ce type de séquence utilise le même flacon (l'étalon) à intervalles réguliers dans la séquence.

L'entrée d'intervalle de la table de séquence détermine le mode d'exécution du réétalonnage. Par exemple, la valeur d'intervalle 2 effectue le réétalonnage tous les deux flacons d'échantillon de la séquence.

# Séquences d'étalonnage cyclique à plusieurs niveaux

Ce type de séquence utilise différents étalons pour réétalonner une méthode étalonnée à plusieurs niveaux.

L'exemple suivant décrit une séquence à deux méthodes (A et B) destinée à analyser deux groupes d'échantillons. A et B sont des méthodes d'étalonnage à plusieurs niveaux qui se réétalonnent automatiquement à intervalles définis.

Pour chaque méthode, la table de séquence inclut trois entrées :

- Deux niveaux d'étalonnage :
  - Lignes de séquence 1 et 2 dans la méthode A.
  - · Lignes de séquence 8 et 9 dans la méthode B.
- · Cinq entrées pour les échantillons :
  - Ligne de séquence 3 à 7 dans la méthode A.
  - Ligne de séquence 10 à 14 dans la méthode B.

Les étalonnages sont spécifiés à intervalles réguliers par l'entrée d'intervalle de réétalonnage dans la table de réétalonnage de séquence.

- La méthode A se réétalonne tous les deux échantillons.
- · La méthode B se réétalonne tous les trois échantillons.

La table de séquence ci-dessous a été abrégée pour simplifier l'exemple.

Ligne	Flacon	Nom de méthode	lnjec- tion/flac on	Type d'échantillon	Niveau d'étalon- nage	Mise à jour FR	Mise à jour TR	Intervalle
1	1	Méthode A	1	Étalonnage	1	Moyenne	Aucune mise à jour	2
2	2	Méthode A	1	Étalonnage	2	Moyenne	Aucune mise à jour	2
3	10	Méthode A	1					
4	11	Méthode A	1					
5	12	Méthode A	1					
6	13	Méthode A	1					

Tableau 10 Table de séquence des méthodes A et B

Ligne	Flacon	Nom de méthode	lnjec- tion/flac on	Type d'échantillon	Niveau d'étalon- nage	Mise à jour FR	Mise à jour TR	Intervalle
7	14	Méthode A	1					
8	3	Méthode B	1	Étalonnage	1	Moyenne	Aucune mise à jour	3
9	5	Méthode B	2	Étalonnage	2	Moyenne	Aucune mise à jour	3
10	20	Méthode B	1					
11	21	Méthode B	1					
12	22	Méthode B	1					
13	23	Méthode B	1					
14	24	Méthode B	1					

Tableau 10 Table de séquence des méthodes A et B

# Ordre d'analyse de la méthode A

La méthode A est la première partie de la séquence à deux méthodes.

N° d'injection	Méthode	Flacon	Utilisation
1	Méthode A	1	Niveau d'étalonnage 1 et rapport
2	Méthode A	2	Niveau d'étalonnage 2 et rapport
3	Méthode A	10	Analyse d'échantillon et rapport
4	Méthode A	11	Analyse d'échantillon et rapport
5	Méthode A	1	Niveau d'étalonnage 1 et rapport
6	Méthode A	2	Niveau d'étalonnage 2 et rapport
7	Méthode A	12	Analyse d'échantillon et rapport
8	Méthode A	13	Analyse d'échantillon et rapport
9	Méthode A	1	Niveau d'étalonnage 1 et rapport

Tableau 11 Ordre d'analyse de la méthode A

### 4 Automatisation/Séquences

Types de séquence

N° d'injection	Méthode	Flacon	Utilisation
10	Méthode A	2	Niveau d'étalonnage 2 et rapport
11	Méthode A	14	Analyse d'échantillon et rapport

Tableau 11 Ordre d'analyse de la méthode A

### Ordre d'analyse de la méthode B

La méthode B est la deuxième partie de la séquence à deux méthodes. La méthode B est différente de la méthode A du fait qu'il y a deux injections par flacon pour le niveau d'étalonnage 2. L'entrée d'intervalle est paramétrée sur 3.

Tableau 12 Ordre d'analyse de la méthode B

N° d'injection	Méthode	Flacon	Utilisation
12	Méthode B	3	Niveau d'étalonnage 1 et rapport
13	Méthode B	5	Niveau d'étalonnage 2 et rapport
14	Méthode B	5	Niveau d'étalonnage 2 et rapport
15	Méthode B	20	Analyse d'échantillon et rapport
16	Méthode B	21	Analyse d'échantillon et rapport
17	Méthode B	22	Analyse d'échantillon et rapport
18	Méthode B	3	Niveau d'étalonnage 1 et rapport
19	Méthode B	5	Niveau d'étalonnage 2 et rapport
20	Méthode B	5	Niveau d'étalonnage 2 et rapport
21	Méthode B	23	Analyse d'échantillon et rapport
22	Méthode B	24	Analyse d'échantillon et rapport

Notez que les résultats répertoriés dans le Tableau 11, page 113 et dans le Tableau 12, page 114 peuvent être obtenues au moyen d'une séquence partielle, de façon à avoir un aperçu de l'ordre d'analyse une fois la table de séquence configurée.

# Utilisation simultanée d'étalonnages explicites et cycliques

Ce type de séquence comprend à la fois des étalonnages explicites et cycliques.

Cette fonction permet de réétalonner complètement la méthode en début de séquence (*réétalonnage explicite*), puis de mettre à jour l'étalonnage (*réétalonnage cyclique*) au cours de la séquence.

- Deux lignes d'étalonnage pour chaque niveau d'étalonnage dans la table de séquence doivent être spécifiées. Une ligne d'étalonnage est réservée à l'entrée de réétalonnage explicite et l'autre à l'entrée de réétalonnage cyclique.
- La table de séquence *doit* contenir des entrées pour chaque ligne d'étalonnage. De plus, tous les flacons de réétalonnage cyclique *doivent* apparaître avant les entrées de réétalonnage explicite et les entrées d'échantillon.

# Exemple

La table de séquence ci-dessous illustre une méthode étalonnée à un niveau, Simplon. Elle a été abrégée pour simplifier l'exemple.

Ligne	Flacon	Nom de méthode	lnjec- tion/flac on	Type d'échantillon	Niveau d'éta- Ionnage	Mise à jour FR	Mise à jour TR	Intervalle
1	1	SimpReg	1	Étalonnage	1	Moyenne	Moyenne	3
2	1	SimpReg	1	Étalonnage	1	Remplacement	Remplacement	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

Tableau 13 Table de séquence de SIMPREG

Il existe deux entrées pour le niveau d'étalonnage simple.

• La première ligne d'étalonnage est destinée au même niveau, mais elle calcule la moyenne des paramètres d'étalonnage. L'entrée d'intervalle spécifie que le réétalonnage est effectué tous les trois échantillons. Types de séquence

• La seconde entrée remplace tous les paramètres de réétalonnage. En d'autres termes, un réétalonnage complet est effectué. Elle n'inclut *aucun* intervalle de réétalonnage.

Table deLa table de séquence comprend sept lignes. La première ligne spécifie l'échan-séquencetillon de réétalonnage cyclique. La deuxième ligne indique le réétalonnage<br/>explicite effectué une seule fois, en début de séquence. De la troisième à la sep-<br/>tième ligne sont spécifiés les échantillons à analyser.

L'ordre des entrées dans la table de séquence est très important. Toutes les entrées des flacons de réétalonnage cyclique indiquant un étalonnage cyclique *doivent* apparaître *avant* les entrées d'échantillon ou les entrées de réétalonnage explicite de la méthode.

# Ordre d'analyse de SimpReg

Le tableau ci-dessous décrit l'ordre d'analyse de la méthode SimpReg.

Ligne de séquence	N° d'injec- tion	Méthode	Flacon	Utilisation
2	1	SimpReg	1	Étalonnage simple
1	2	SimpReg	1	Étalonnage régulier
3	3	SimpReg	2	Analyse d'échantillon
3	4	SimpReg	3	Analyse d'échantillon
4	5	SimpReg	4	Analyse d'échantillon
5	6	SimpReg	1	Étalonnage régulier
6	7	SimpReg	5	Analyse d'échantillon
7	8	SimpReg	6	Analyse d'échantillon

Tableau 14 Ordre d'analyse de SimpReg

# Séquences d'étalonnage cyclique avec encadrement

Dans une séquence d'étalonnage cyclique avec encadrement, la table d'étalonnage utilisée pour calculer les résultats quantitatifs inconnus est générée en établissant la moyenne des résultats de l'étalonnage en cours avec ceux de l'étalonnage précédent. Cette nouvelle table d'étalonnage donne une représentation plus précise de la réponse de l'instrument au moment de l'analyse de l'échantillon.

### Exemple

Considérons la situation suivante :

- La réponse de l'instrument a dérivé.
- · Trois injections d'un mélange identique de deux composés sont spécifiées.
- Deux injections sont spécifiées en tant qu'étalons et une injection en tant qu'échantillon.
- Les première et troisième injections sont des étalons.
- La deuxième injection est un échantillon.

Afin d'obtenir un résultat quantitatif précis pour l'injection 2 (l'échantillon), vous devez interpoler les deux étalons (voir la figure). Ce processus est appelé « encadrement ».



Figure 19 Encadrement

Types de séquence

# Fonctionnement d'une séquence encadrante

- · Les premiers flacons d'étalonnage sont analysés.
- · Les flacons d'échantillon sont analysés.
- · Les flacons d'étalonnage suivants sont analysés.
- La table d'étalonnage est créée en remplaçant les facteurs de réponse existants par de nouveaux facteurs de réponse et en calculant la moyenne des analyses d'étalonnage suivantes dans une nouvelle table d'étalonnage.
- Les fichiers de données des flacons d'échantillon sont évalués et des rapports générés.
- La séquence revient à l'étape 2 si d'autres flacons d'échantillon doivent être analysés.

# Exemple

Cette section décrit un exemple d'encadrement de séquence incluant une méthode, Brack.M. Il s'agit d'une méthode d'étalon interne à deux niveaux qui a recours à l'étalonnage cyclique.

Table deLa table de séquence de Brack.M (page suivante) est abrégé pour simplifierséquencel'exemple. Elle comprend sept lignes. Les deux premières lignes définissent les<br/>conditions de réétalonnage pour chaque niveau. Les autres lignes désignent<br/>les échantillons à analyser.

Plus particulièrement, la table de séquence de la méthode Brack.M contient les entrées suivantes :

- Une entrée Encadrement dans la colonne Mettre à jour le facteur de réponse, qui spécifie l'encadrement d'échantillons avec des étalons.
- Une entrée Remplacer dans la colonne Mettre à jour les temps de rétention/migration qui spécifie le remplacement des temps de rétention/migration.
- La valeur 3 dans la colonne Intervalle de réétalonnage qui spécifie un réétalonnage effectué tous les trois échantillons.

Ligne	Flacon	Nom de méthode	Injec- tion/fla con	Type d'échan- tillon	Niveau d'éta- Ionnage	Mise à jour FR	Mise à jour TR	Intervalle
1	1	BRACK.M	2	Étalonnage	1	Encadrement	Remplacement	3
2	2	BRACK.M	2	Étalonnage	2	Encadrement	Remplacement	3
3	10	BRACK.M	1					
4	11	BRACK.M	1					
5	12	BRACK.M	1					
6	13	BRACK.M	1					
7	14	BRACK.M	1					

# Tableau 15 Table de séquence de BRACK.M

# 4 Automatisation/Séquences

Types de séquence

Run	Method	Vial	Inj	DataFile	Lvl	Upd	Upd	Operation
No.	Name	No.	No.	Name	No.	RF	Ret	
	Brack M	1		c1-03001 d	1	· D		Pepart for Calibration Pun No 1
2	Brack M	1	2	c1-03002 d	1	Δ	R	Report for Calibration Run No.1
2	Brack M	2	1	c2-03001 d	2	R	R	Report for Calibration Run No.3
4	Brack M	2	2	c2-03002 d	2	2	R	Report for Calibration Run No.4
-	brack.m	2	2	62-05002.u	2	A	IC IC	Print Calibration Table
5	Brack.M	10	1	010-0301.d				Sample Analysis, no report
6	Brack.M	11	1	011-0301.d				Sample Analysis, no report
7	Brack.M	12	1	012-0301.d				Sample Analysis, no report
8	Brack.M	1	1	c1-03003.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
9	Brack.M	1	2	c1-03004.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
10	Brack.M	2	1	c2-03003.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
11	Brack.M	2	2	c2-03004.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
								Print Calibration Table
				010-0301.d				Report for Sample Run No.5
				011-0301.d				Report for Sample Run No.6
				012-0301.d				Report for Sample Run No.7
				c1-03003.d	1	R		Report for Calibration Run No.8
				c1-03004.d	1	A		Report for Calibration Run No.9
				c2-03003.d	2	R		Report for Calibration Run No.10
				c2-03004.d	2	A		Report for Calibration Run No.11
12	Brack.M	13	1	013-0301.d				Sample Analysis, no report
13	Brack.M	14	1	014-0301.d				Sample Analysis, no report
14	Brack.M	1	1	c1-03005.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
15	Brack.M	1	2	c1-03006.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
16	Brack.M	2	1	c2-03005.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
17	Brack.M	2	2	c2-03006.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
								Print Calibration Table
				013-0301.d				Report for Sample Run No.12
				014-0301.d				Report for Sample Run No.13
				c1-03005.d	1	R		Report for Calibration Run No.14
				c1-03006.d	1	A		Report for Calibration Run No.15
				c2-03005.d	2	R		Report for Calibration Run No.16
				c2-03006.d	2	A		Report for Calibration Run No.17
						wnei	re A =	average
							K =	replace



# Séquences de réétalonnage cyclique utilisant plusieurs flacons qui contiennent la même dilution d'étalon

# Séquence de réétalonnage cyclique utilisant des flacons d'étalonnage « à la ronde »

Lorsque vous analysez une séquence volumineuse exécutant des réétalonnages cycliques (réétalonnage automatique effectué après un certain nombre d'injections d'échantillon), le volume du flacon d'équilibrage risque de se vider durant la séquence. La table de séquence ChemStation permet d'utiliser une série de flacons contenant la même dilution d'étalon à utiliser en mode « *à la ronde* ».

Grâce à cette fonction, des séquences volumineuses peuvent être définies avec des réétalonnages automatiques à intervalles fixes et plusieurs flacons d'étalonnage pour chaque niveau. En outre, chaque flacon d'étalonnage est consommé de la même manière.

En définissant un nombre approprié de flacons d'étalonnage, il est même possible de garantir l'utilisation unique de chaque flacon d'étalonnage. C'est là une condition primordiale si un flacon d'étalonnage récent est requis pour chaque réétalonnage, par exemple parce que l'analyte s'évapore une fois le septum perforé ou qu'il commence à se dégrader après avoir été en contact avec l'aiguille métallique. La section suivante explique comment la table de séquence ChemStation doit être configurée pour remplir ces conditions.

Déterminez le nombre total de flacons d'étalonnage pour chaque niveau à partir de l'estimation de l'utilisation des étalons tout au long de la séquence.

Définissez une autre ligne de réétalonnage cyclique pour chaque flacon d'étalonnage. Les lignes définies pour le même niveau d'étalonnage doivent se trouver sur des lignes de séquence adjacentes. Les positions de flacon définies doivent également être adjacentes. Choisissez le même intervalle de réétalonnage pour toutes les lignes. Si, par exemple, votre séquence doit se réétalonner toutes les 6 injections d'échantillon, paramétrez l'intervalle sur 6.

### 4 Automatisation/Séquences

Types de séquence

Numé- ro de flacon	Nom d'échan- tillon	Sample Type (Type d'échan- tillon)	Nom de méthode	Nombre d'injections	Niveau	Upd RT (Mettre à jour le temps de rétention)	Upd RF (Mettre à jour le facteur de répon- se)	interval (intervalle)
1	Eta1a	Etalonnage	Méthode A	1	1	Moyenne	Moyenne	6
2	Eta1b	Etalonnage	Méthode A	1	1	Moyenne	Moyenne	6
3	Eta1c	Etalonnage	Méthode A	1	1	Moyenne	Moyenne	6
5	Eta2a	Etalonnage	Méthode A	1	2	Moyenne	Moyenne	6
6	Eta2b	Etalonnage	Méthode A	1	2	Moyenne	Moyenne	6
7	Eta2c	Etalonnage	Méthode A	1	2	Moyenne	Moyenne	6
10	Echantillon10	Echantillon	Méthode A	6				
11	Echantillon11	Echantillon	Méthode A	6				
12	Echantillon12	Echantillon	Méthode A	6				
13	Echantillon13	Echantillon	Méthode A	6				
14	Echantillon14	Echantillon	Méthode A	6				

Tableau 16	Séquence	de réétalonnage	cyclique	utilisant 3 flacons	définis por	ur chaque niveau
Iupiouu io	ooquonoo	ao rootaionnago	oyonque	a uniounit o nuoono	uomino pou	in onlagao mitoaa

L'ordre d'exécution est le suivant :

- Vial 1 (Cal1a) (Flacon 1 Eta1a)
- Vial 5 (Cal2a) (Flacon 5 Eta2a)
- 6 injections à partir du flacon 10 (Sample10 Echantillon10)
- Vial 2 (Cal1b) (Flacon 2 Eta1b)
- Via 6 (Cal2b) (Flacon 6 Eta2b)
- 6 injections à partir du flacon 11 (Sample11 Echantillon11)
- Vial 3 (Cal1c) (Flacon 3- Eta1c)
- Vial 7 (Cal2c) (Flacon 7 Eta2c)
- 6 injections à partir du flacon 12 (Sample12 Echantillon12)
- Vial 1 (Cal1a) (Flacon 1 Eta1a)

- Vial 5 (Cal2a) (Flacon 5 Eta2a)
- 6 injections à partir du flacon 13 (Sample13 Echantillon13)
- Vial 2 (Cal1b) (Flacon 2 Eta1b)
- Vial 6 (Cal2b) (Flacon 6 Eta2b)
- etc.

# Réétalonnages cycliques avec utilisation d'un flacon différent pour chaque étalonnage

Pour garantir l'injection unique de chaque flacon d'échantillon, la séquence doit définir un nombre suffisant de flacons d'échantillon différents, afin que l'ordre « *à la ronde* », décrit dans l'exemple précédent, ne soit pas appliqué. Par exemple, si la séquence traite 80 flacons d'échantillon avec des réétalonnages requis tous les 10 échantillons, la table de séquence doit contenir 80/10 + 1 = 9 lignes d'étalonnage pour chaque niveau.

Comme dans l'exemple précédent, les lignes d'étalonnage doivent être des lignes de séquence adjacentes faisant référence à des positions de flacon adjacentes.

## Séquence encadrante utilisant des flacons différents pour les encadrements ouvrant et fermant

La même fonction est disponible pour les séquences encadrantes. En définissant la plage appropriée de flacons d'étalonnage, vous pouvez définir une séquence encadrante afin que des flacons d'étalonnage différents puissent servir aux encadrements ouvrant et fermant. Là encore, les lignes d'étalonnage de la séquence doivent être adjacentes, tout comme les positions des flacons d'étalonnage.

L'utilisation éventuelle des flacons d'étalonnage encadrants « à la ronde » ou pour une seule injection dépend simplement du nombre total de flacons d'étalonnage de chaque niveau et du nombre de réétalonnages que requiert la séquence.

L'exemple suivant définit 3 injections d'échantillon encadrées par des étalonnages. Les encadrements ouvrant et fermant utilisent des flacons d'étalonnage différents. Des réétalonnages sont requis après chaque injection d'échantillon. L'intervalle de réétalonnage doit donc être de 1. Le nombre de lignes d'étalonnage par niveau est égal au nombre d'échantillons plus un.

### 4 Automatisation/Séquences

Types de séquence

Numéro de flacon	Nom d'échan- tillon	Sample Type (Type d'échantillon)	Nom de méthode	Nombre d'injections	Niveau	Upd RT (Mettre à jour le temps de rétention)	Upd RF (Mettre à jour le facteur de réponse)	interval (Intervalle)
1	Eta1a	Etalonnage	Méthode A	1	1	Encadr.	Encadr.	1
2	Eta1b	Etalonnage	Méthode A	1	1	Encadr.	Encadr.	1
3	Eta1c	Etalonnage	Méthode A	1	1	Encadr.	Encadr.	1
4	Eta1d	Etalonnage	Méthode A	1	1	Encadr.	Encadr.	1
10	Echantillon10	Echantillon	Méthode A	1				
11	Echantillon11	Echantillon	Méthode A	1				
12	Echantillon12	Echantillon	Méthode A	1				

Tableau 17	Flacons	différents	utilisés i	nour les	encadr	ements	ouvrant et	fermant
Iubiouu II	11000110	annoronico	utilio000 j	pour 100	onouur	onnonico	ouviunt ot	Tormanic

L'ordre d'exécution de la séquence est le suivant :

- Flacon 1 (Eta1a), encadrement ouvrant 1
- Flacon 10 (Echantillon10)
- Flacon 2 (Eta1b), encadrement fermant 1 et encadrement ouvrant 2
- Flacon 11 (Echantillon11)
- Flacon 3 (Eta1c), encadrement fermant 2 et encadrement ouvrant 3
- Flacon 12 (Echantillon12)
- Flacon 4 (Eta1d), encadrement fermant 3



# File d'attente et planificateur

Flux de travail supportés 126 Utilisation de la file d'attente 128 Echantillons uniques de la file d'attente 129 Séquences de la liste d'attente 129 Pauses de la liste d'attente 130 Utilisation du planificateur 131



# Flux de travail supportés

La file d'attente contrôle tous les lancements de ChemStation:

- Que vous utilisez la méthode RunControl > Run Method ou RunControl > Run Sequence pour lancer une méthode ou une séquence, l'élément ajouté la file d'attente est automatiquement activé. Si la liste d'attente est sur pause, les éléments seront ajoutés à l'avant de la liste, suivis par une pause listable. De cette façon, l'instrument retourne sur pause lorsque le lancement est terminé.
- La fule d'attente vous permet de programmer une srie d'échntillons et de séquences ainsi que des paramètres additionnels. Vous pouvez ajouter des échantillons ou des séquences à la liste avec la commande RunControl > Queue Method... ou la commande RunControl > Queue Sequence... Avec la liste d'ttente, vous pouvez automatiser des opérations plus longues telles que des opérations sur la nuit ou pendant le week end. En plus de ces échantillons et de ces séquences, vous pouvez ajouter des pauses programmées. Pendant ces interruptions, ChemStation présente un message personnalisable et attend une confirmation de l'utilisateur.

Avec le planificateur de tâches, vous pouvez préparer des programmes d'avance et els ajouter à la liste à n'importe quel moment.

Les procédures suivantes sont prises en charge :

- · Lancer un échantillon unique
- · Lancer un échantillon unique
- · Lister un échantillon unique
- Mise en file d'une séquence simple
  - **a** Sélection d'un modèle de séquence classique ChemStation ou de séquence simple
  - **b** Edition ou révision de la table de séquence
  - c Edition ou révision des paramètres de séquence
  - d Enregistrements des paramètres
  - e Ajout de la séquence à la file
- Modifier la file d'attente
- Préparation d'un plan de file

- Ajouter un ensemble prédéfini à la liste d'attente.
  - a Sélection d'un plan de file
  - **b** Ajouter le programme à la liste d'attente.

Dans l'historique de la file, vérifiez toujours les lancements qui ont été exécutés avec l'instrument en cours.

La liste d'attente et le planificateur ne sont disponible qu'en ligne sur les sessions de ChemStation dans la fenêtre  ${\it Method}$  and  ${\it Run}$  Control .

# Utilisation de la file d'attente

La file d'attente est présente sous l'onglet **Instrument Control** ou sous l'onglet **Run Queue**. Sous l'onglet contrôle de l'instrument, vous pouvez afficher ou masquer la file d'attente avec la commnde **View > Run Queue**.

📅 Run Queue				
Active Queue: Data S	ystem Accepting Sequenc	es		1
Sequences in the Activ	ve Queue: 7 🜔 🙆 🤇	) 🗙 🖪 🚳 🚳 [	2 🕰 🛛 👬 🔇	
Name	Time entered into Queue	Estimated Completion Ti	Status	1
Pause the queue	3/20/2012 8:49:50 PM		Pending	
sample1	3/20/2012 8:49:59 PM		Pending	
sample2	3/20/2012 8:53:03 PM		Pending	
sample3	3/20/2012 8:55:31 PM		Pending	
Pause the queue	3/20/2012 8:52:39 PM		Pending	
sample4	3/20/2012 8:55:40 PM		Pending	
sample5	3/20/2012 8:55:58 PM		Pending	

Figure 21 Run Queue Liste d'attente

Vous pouvez ajouter un élément à l'avant ou à l'aarrière de la file. Dès que le statut des éléments de la file est en attente, vous pouvez modifier l'ordre d'éxécution et les propriétés de l'élément. En fonction des options actives de la file, le premier élément de la queue démarre lorsque le système de données est prêt ou que la file est redéfinie.

La liste d'attente supporte des échantillons uniques, des modèles Easy Sequence et des séquences classiques ChemStation. Les seuls éléments qui ne peuvent pas être ajoutés à la liste sont les séquences partielles, les échantillons prioritaires et les lancements activés depuis l'instrument.

Pour de plus amples informations concernant les séquences simples, reportez-vous au système d'aide en ligne. Des didacticiels sur la **Easy Sequence Setup** sont disponibles dans l'aide en ligne.

# Echantillons uniques de la file d'attente

Pour ajouter un échantillon à la liste, utilisez le menu **RunControl > Queue Method....** Vous pouvez modifier tous les paramètres depuis la fenêtre de dialogue **Queue Method**.

# Séquences de la liste d'attente

Pour ajouter une séquence à la file, utilisez le menu **RunControl > Queue Sequence...**. Vous pouvez modifier la table et les paramètres de la séquence sans modifier la séquence actuellement chargée. Avant de mettre enfin la séquence dans la file, une boîte de dialogue vous permet d'ajouter la séquence à la file ou de l'enregistrer comme un nouveau modèle de séquence.

La boîte de dialogue **Finish Queue Sequence** contient aussi la case à cocher **Delete temporary Sequence Template after completion**. ChemStation conserve toujours une copie du modèle de séquence de la file dans un répertoire temporaire. Ce modèle de séquence temporaire sera utilisé pour exécuter la séquence de la file. Comme la même séquence peut être mise en file plusieurs fois à l'aide de paramètres différents, ChemStation a besoin d'une copie distincte de chaque élément de la file.

Selon l'état de la case à cocher, ce modèle de séquence temporaire sera conservé ou supprimé lorsque la file continue avec l'élément suivant. La case à cocher doit être sélectionnée ou assignée par défaut, en fonction des réglges du **Unique Folder Creation** (voir « Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence », page 96):

• Avec Unique Folder Creation OFF :

La case **Delete temporary Sequence Template after completion** est décochée par défaut.

Si vous souhaitez retraiter les données, vous aurez besoin du modèle de séquence, et par conséquent nous vous recommandons de conserver une copie de ce fichier. Par défaut, il est sauvegardé sous Chem32\<instrument>\SEQUENCE.

• Avec Unique Folder Creation ON :

La case **Delete temporary Sequence Template after completion** est cochée par défaut.

Toutes les informations nécessaires pour retraiter sont déjà disponibles dans le jeu de résultats. Par conséquent, il n'est pas nécessaire de conserver une copie du modèle de séquence temporaire. Toutefois, si vous cochez la case, une copie est sauvegardée par défaut sous **Chem32**\**sinstrument**>\ **TEMP\AESEQ**.

# Pauses de la liste d'attente

Pour programmer une pause pour la file, cliquez sur **Add Pause to Queue** depuis la barre d'outils de lancement de la liste. Pendant ces interruptions, ChemStation présente un message personnalisable et attend une confirmation de l'utilisateur.

# Utilisation du planificateur

Avec le planificateur, vous pouvez préparer un ensemble de séquence prédéfini (modèle Easy Sequence \*. ou modèle classique ChemStation \*.s), ou pauses. La liste complète peut être ajoutée à l'avant ou à l'arrière de la file.

Le plan de file est sauvegardé sous la forme d'un fichier \*.l. Vous ouvrez le Planificateur de file dans la vue **Method and Run Control** via le menu **RunControl > Queue Planner...**.

8	Qu	eue Pl	lanr	er: GC7890, C:\Ch	em 32\1\se que no	ce\plan	1.qpl						K
				Action	Details	Delete	Data Directory	From Sequence	Remote Data Path	From Sequence		📑 Insert 🗸	
	•	1		Run Classic Sequence	def_gc.s	<b>~</b>	C:\Chem32\1\DATA\	~	use preferences			Annend -	
		2		Run Classic Sequence	LOADTEST.S	<b>V</b>	C:\Chem32\1\DATA\		use preferences			Append	
		3		Pause	Confirm to continue		n/a		n/a			X Delete	
		4		Run Classic Sequence	LOADTEST.S	<b>V</b>	C:\Chem32\1\DATA\		use preferences				
												🚫 Up	
												🕑 Down	
1	_	_	_			_		_		_			
	<b>.</b>	Op	en	New 🖣	Save	👆 Sa	ave As 🚱 🛛 Add	to back of q	ueue 💽 Add to	front of queue	e Cancel	Help	

Figure 22 Planificateur de file

Comme dans la liste d'attente, lorsque vous ajoutez une pause, vous pouvez indiquer un message spécifique dans la colonne **Details** . Lorsque la File de séquences atteint l'interruption, ChemStation s'arrête et affiche ledit message. L'utilisateur doit confirmer le message avant que la file puisse continuer.

Pour de plus amples informations concernant l'interface utilisateur, reportez-vous au système d'aide en ligne.

# 5 File d'attente et planificateur

Utilisation du planificateur



# Principes d'analyse et de révision des données

Analyse de données 134 Mode de recalcul 136 Mode de retraitement 138 Mise à jour de méthodes 143 Visionneuse de rapports pour traitement de données 144 Révision 148 Conditions pour la création intelligente de rapports 148 Sélection de fichiers de données 149 Sélection de modèles de rapports 150 Présentation de rapport 150 Procédures de révision possibles 150

Ce chapitre décrit les options disponibles pour l'analyse et la révision des données, Dans OpenLAB CDS ChemStation Edition, ces options sont disponibles dans deux vues distinctes.



#### 6 Principes d'analyse et de révision des données Analyse de données

# Analyse de données

Une fois que les données ont été acquises, elles peuvent être analysées en mode ChemStation Data Analysis. Sélectionnez l'onglet Data de l'explorateur de ChemStation pour charger toutes les analyses d'une séquence ou toutes les analyses uniques dans un dossier spécifique et double-cliquez sur le symbole correspondant. Le jeu de données correspondant est ensuite disponible dans la table de navigation.

🕌 Local LC (offline): Data Anal	ysis									
<u>File M</u> ethod <u>S</u> equence Recalculate	Gra	phics	Integ	ration <u>⊂</u> al	libration <u>R</u>	eport <u>S</u>	pectra <u>V</u> iew	Data Store Abort H	elp	
Signals 🖳 🔯 Methods 🔄	4 <	<u>a</u> (	🗊 LC	_DEMO.M	(sequence)			- 🔳 🕗 🛛 🎭	🗞 🍓 🥪 🔂   F	Path: - <b>\-\-</b>
Data Analysis 🛛 🗘 Sequence: LC_DEMO1										
		1		₩₩	₩ 🗿		) 冷 🕒	0 Rea	ady/Reprocess Data M	ode 🥏
		Ov	erlay	Туре	Line	Inj	Vial	Sample Name	Sequence Method	Sample Type
	►	+		<b>R</b>	1	1	P1-F-01	isocratic sample	LC_DEMO.M	Calibration
- 📚 LC_DEMO1		+		- <b>C</b>	2	1	P1-F-02	isocratic sample STD	LC_DEMO.M	Calibration
🧧 Single Runs		+			3	1	P1-F-03	isocratic sample STD	LC_DEMO.M	Calibration
🖶 🖾 ESTD_DAD		+			4	:	P1-F-04	isocratic sample 1	LC_DEMO.M	Sample
FRACTION_COLLEC		+		<b>R</b>	5	:	P1-F-05	isocratic sample CS	LC_DEMO.M	Sample
🗈 🖾 ISTD_DAD		+			6	1	P1-F-06	isocratic sample 2	LC_DEMO.M	Sample
OTHER_LC_DETECT		+			7	1	P1-F-05	isocratic sample CS	LC_DEMO.M	Sample
		+		- <b>C</b>	8	1	P1-F-07	isocratic sample 3	LC_DEMO.M	Sample
	<									
	L	Inte	egratio	on 🔥 C	alibration	M s	gnal 🛄 P	urify 💩 Spectrum		

Figure 23 Chargement d'une séquence de l'explorateur de la ChemStation dans la table de navigation

La partie principale de la table de navigation est constituée d'une liste de toutes les analyses du jeu. Pour charger l'analyse dans la mémoire de ChemStation, double-cliquez sur la ligne appropriée de la Table de navigation. En outre, un clic droit offre plusieurs options, par exemple le chargement ou la superposition des signaux spécifiques à partir du fichier, l'exportation des données ou l'affichage des paramètres de la méthode d'acquisition.

Les analyses de séquence sont toujours charger avec la méthode de séquence avant été utilisée pendant l'acquisition ou le retraitement. Les analyses simples sont chargées avec la dernière méthode de référence chargée dans la ChemStation.

La ChemStation vous permet de spécifier des actions par défaut effectuées automatiquement lorsqu'un fichier de données est chargé à partir de la table de navigation. Ces actions incluent des tâches de traitement de données, telles que l'intégration du chromatogramme directement après chargement, ainsi que l'impression d'un rapport pour chaque injection simple. Reportez-vous à la figure ci-dessous.

Preferences
Paths Signal/Review options Audit Trail
Load signal
Load using signal details
✓ Integrate after load
Integrate and print report after load
Auto step interval 10 sec
Load result set
◯ Stay in current mode after load
Switch to reprocess mode after load
OK Cancel Help

Figure 24 Onglet Signal/Review options de la boîte de dialogue Preferences

Les fonctions sous Load Signal Options de l'onglet Signal/Review Options de la boîte de dialogue Preferences ne sont appliquées que lors du chargement d'un fichier de données depuis la Table de navigation. Lorsque vous utilisez l'option Load Signal depuis le menu File ou l'icône correspondante dans la barre d'outils principale, les paramètres ne sont pas appliqués (par exemple, aucune méthode n'est chargée).

Vous pouvez choisir l'un des deux modes d'analyse de données : le mode de recalcul ou le mode de retraitement. Ces modes sont accessibles via le menu **View (View > Recalculate Mode, View > Reprocess Mode**) ou via la boîte à outils (reportez-vous à la figure ci-dessous).



Figure 25 Sélection du mode de recalcul et du mode de retraitement

REMARQUE

Pour chacun des deux modes, la boîte à outils contient des fonctions spécifiques. Les deux modes et leurs fonctions respectives sont décrits dans les sections suivantes. Dans l'onglet **Signal/Review Options** de la boîte de dialogue **Preferences**, vous pouvez choisir le mode qui sera actif par défaut lorsque vous charger un jeu de résultats.

# Mode de recalcul

Une fois l'analyse chargée, vous pouvez la réviser, c'est-à-dire ajuster les paramètres d'analyse de données, intégrer les signaux et finalement imprimer un rapport. Dans ce cas, vous traitez l'analyse comme une analyse unique, sans avoir à tenir compte du contexte de séquence ou à utiliser les fonctions de la table de séquence. La Table de navigation de ce type d'analyse de données présente la boîte à outils illustrée par la figure ci-dessous.

📕 💩 🕨 b k k k 🖇 🖬

Figure 26 Boîte à outils de recalcul de la Table de navigation

Grâce à cette barre d'outils, vous pouvez faire défiler la table de navigation de haut en bas, passer à l'analyse précédente ou suivante, parcourir automatiquement les analyses et arrêter la progression automatique, recalculer une analyse utilisant une méthode spécifique ou effacer la Table de navigation.

Le recalcul signifie un traitement analyse par analyse. Seules les analyses affichées dans la Table de navigation sont traitées. Si vous appliquez un filtre à la Table de navigation, seules les analyses réellement affichées sont recalculées. Le tri de la table de navigation est également pris en compte.

Vous pouvez le recalcul, par exemple, dans les procédures suivantes :

- Vous souhaitez réviser les fichiers de données d'un jeu de résultats avec une méthode différente qui n'est pas actuellement dans cet ensemble, par exemple, une méthode de référence non utilisée pour l'acquisition parce que votre procédure utilise des méthodes d'acquisition et de traitement des données distinctes.
- Vous avez modifiez une méthode de séquence et vous souhaitez réviser seulement des analyses spécifiques à l'aide de cette méthode afin de vérifier comment ces paramètres s'appliquent bien aux différentes analyses.

### Recalcul avec une méthode spécifique

Par défaut, le recalcul utilise toujours la méthode qui a été chargée conjointement au fichier de données. Pour les analyses de séquence, il s'agit de la méthode de séquence. Pour des analyses simples, il s'agit de la dernière méthode de référence qui a été chargée.

Avec cette fonction, vous pouvez recalculer les analyses affichées dans la Table de navigation en utilisant une méthode de référence spécifique. Vous spécifiez la méthode principale requise pour la méthode de la fenêtre de dialogue **Recalculate With Method** (voir schéma ci-dessous). Si la méthode de référence sélectionnée utilise la Création intelligente de rapports (reportez-vous à « Création de rapports », page 167), vous pouvez également indiquer le modèle de rapport qui sera utilisé pour les rapports d'injection simple.

Recalculate with Me	thod		X
Method:		Browse	]
Report template:		Browse	)
Auto step interval:	10     sec       Destination       Image: Operation of the sec		
Use reference:		Browse	]
	OK Cancel	Help	]

Figure 27 Recalculate With Method Méthode

Les boîtes de dialogue **Browse for methods in master paths** et **Browse for templates in master paths** proposent tous les emplacements de fichiers que vous avez indiqués dans les Préférences.

### REMARQUE

Dans les versions précédentes de la ChemStation, vous pouviez recalculer avec une méthode spécifique en choisissant **Use current method**, **Use method from data file** ou **Use sequence method** de la barre d'outils.

Si vous sélectionnez la fenêtre de dialogue **Use reference**, vous pouvez sélectionner un fichier de données contenant un signal de référence. ChemStation utilise ce signal pour calculer le rapport taux/signal tel que défini par la Pharmcopie européenne. La liste déroulante propose les fichiers de données utilisés pendant la session actuelle. Avec le bouton **Browse**, vous pouvez sléectionner n'importe quel fichier de données également présent dans le Tableau de Navigation. Si vous souhaitez utiliser un autre fichier de référence, vous devez d'abord l'ajouter au Tableau de Navigation.

La nouvelle référence est écrite par-dessus l'ancienne depuis les calculs signal/bruit du rapport. Si vous sélectionnez la fenêtre de dialogue **Use reference** mais ne sélectionnez aucun fichier, les références sont supprimer pour recalculer les fichiers de données, et aucune valeur signal/Bruit ne sera calculée.

### **Recalcul dans le mode Dernier résultat**

Dans ce mode, la méthode du fichier de données (DA.M) pour chaque analyse est chargée plutôt que la méthode de séquence. Cette méthode est celle utilisée pour le dernier traitement des données (pendant l'acquisition, le retraitement ou le recalcul). Donc, même si la méthode de séquence a été modifiée entre-temps, vous pouvez reproduire le dernier résultat avec la méthode utilisée à l'origine.

Le nom de la méthode affiche DA.M dans la barre d'outils, ce qui signifie que la méthode du fichier de données a été chargée. Lorsque vous déplacez le curseur sur ce champ, une infobulle affiche en outre le chemin d'accès complet et le nom de la méthode.

### REMARQUE

Le fichier est normalement en lecture seule. Vous ne pouvez pas le charger manuellement. Il est chargé seulement par ChemStation en mode Dernier résultat pour recalcul. Vous pouvez l'éditer, mais pas le sauvegarder manuellement. Si vous créez un rapport, le système devra d'abord enregistrer la méthode. Dans ce cas, vous êtes averti que vous allez créer de nouveaux résultats. Si vous confirmez, ChemStation met à jour automatiquement DA.M avec les paramètres en cours.

# Mode de retraitement

Une façon différente de traiter vos données consiste à **Reprocess** une séquence complète. Contrairement au recalcul, toutes les analyses sont retraitées dans le contexte de la séquence, c'est-à-dire que les tables d'étalonnage des méthodes de la séquence sont mises à jour dans le cas d'analyse d'étalonnage, des multiplicateurs, des quantités, etc. peuvent être modifiés dans la table de la séquence Le jeu de résultats contient tous les fichiers nécessaires au retraitement : les fichiers de données, une copie du fichier de séquence et toutes les méthodes de séquence initialement employées avec l'acquisition. Ainsi, pour retraiter une séquence, il vous suffit donc de la charger dans la table de navigation et de sélectionner la boîte à outil de retraitement.

S'il devient nécessaire de propager des modifications de la méthode de séquence vers la méthode de référence correspondante en tant qu'entrée pour toutes les analyses d'acquisition futures, vous pouvez réaliser cela très commodément en utilisant la fonctionnalité **Update Master Method** (reportez-vous à « Mise à jour de la méthode de référence », page 51).

Le fichier DA.M est mis à jour automatiquement à chaque fois que vous retraitez un fichier de données.

Pour le retraitement, la table de navigation intègre la barre d'outils suivante :

🖩 🙆 🎚 🖶 🖶 🖪 🖶 🍅 🔘

#### Figure 28 Barre d'outils de retraitement de séquence de la Table de navigation

Avec cet outilo, vous pouvez éditer le tableau de séquences, éditer les paramètres de séquence, sauvegarder la séquence en cours, imprimer la séquence en cours, afficher ou masquer l'historique de la séquence, afficher les séquences sauvegardées, lancer le traitement des séquences, arrêter la séquence ou mettre la séquence sur pause.

Notez que les icônes de retraitement de la table de navigation ne sont disponibles que pour les jeux de résultats créés avec une version ChemStation B.02.01 ou ultérieure. Le retraitement n'est pas accessible dans le module de **Data Analysis** pour des données d'Analyse simple, pour les données créées avant la version B.02.01 et pour des données acquises lorsque le mode **Unique Folder Creation** est désactivé (reportez-vous à « Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence », page 96). Ces séquences doivent être retraitées dans **Method and Run Control**, en définissant le paramètre de séquence **Part of method to run** sur **Reprocess Only**. Pour des séquences créées avec ChemStation version B.02.01 et ultérieure, l'option de retraitement de **Method and Run Control** a été supprimée et la table de navigation propose le retraitement en tant que **Data Analysis Task**.

Une autre alternative est d'ajouter de tels échantillons ou de telles séquences à un nouveau jeu de résultats auto-assemblés. À partir de ce moment, vous pouvez également attribuer des méthodes de séquence et vous pouvez ensuite retraiter la séquence complète (reportez-vous à « Jeu de résultats auto-assemblés », page 143).

Analyse de données

Notez les règles suivantes concernant le retraitement :

- Lorsqu'un jeu de résultats est chargé dans la Table de navigation, la ChemStation charge automatiquement le fichier de séquence .S situé dans cet ensemble. Ce fichier de séquence contient toutes les lignes de séquence qui sont liées à tout fichier de données appartenant à ce jeu de résultats.
- Toutes les actions sont effectuées sur les méthodes de séquence. Si vous devez appliquer des paramètres de traitement modifiés, vous devez modifier les méthodes de séquence.
- Durant le retraitement, le fichier Batch (\*.b), le journal de séquence/analyse simple (\*.log) et la Table de navigation sont mis à jour. La méthode individuelle de traitement de données (DA.M) de chaque fichier de données traité est écrasée par la méthode de séquence.
- Si vous souhaitez ajouter de nouvelles méthodes à partir de l'un des répertoires de méthode de référence à la Table de séquence, utilisez d'abord l'Explorateur de la ChemStation pour copier la méthode de référence dans le jeu de résultats. Vous pouvez ensuite sélectionner la nouvelle méthode de séquence dans la table de séquence. Dans la Table de séquence, il n'est pas possible d'ajouter ou de supprimer des lignes.
- Dans la fenêtre de dialogue Paramètre de la séquence, seul le commentaire relatif à la séquence et l'utilsiation des informations du tableau peuvent être modifiés. Tous les autres champs doivent être définis pendant l'acquisition des données et ne s'appliquent pas au retraitement.

Data file       Operator Name         Path:       CVChem32V2/DATA/         Subdirectory:       Image: Comment of the second	
Part of method to run         Reprocessing Only         Image: Shutdown         Image:	
Bar code reader Use in sequence On a bar code mismatch O Don't inject Uddate master method (data analysis parameters)	~
Update master method (data analysis parameters)	
Sequence comment: Aqc. of isocratic standard samples	

**Figure 29** Paramètres de séquence en Analyse de données

### Traitement d'événements manuels d'intégration

Les événements manuels d'intégration, comme par exemple, une ligne de base dessinée manuellement, sont encore plus spécifiques aux fichiers de données que les événements d'intégration programmés. Dans le cas de chromatogrammes complexes, il est particulièrement souhaitable de pouvoir utiliser ces événements pour le retraitement.

Par conséquent, dans ChemStation version B.04.01 et ultérieure, des événements manuels d'intégration peuvent être enregistrés directement dans le fichier de données plutôt que dans la méthode. Chaque fois que le fichier de données est révisé ou retraité, les événements manuels dans le fichier de données sont automatiquement appliqués. Une analyse contenant des événements d'intégration manuels est marquée dans la table de navigation dans la colonne correspondante. Outre les outils utilisés pour dessiner une ligne de base et effacer un pic manuellement, trois autres outils sont disponibles dans l'interface utilisateur afin :

- d'enregistrer les événements manuels des chromatogrammes actuellement affichés dans le fichier de données ;
- · d'effacer tous les événements des chromatogrammes actuellement affichés ;
- d'annuler les derniers événements manuels d'intégration (fonction disponible jusqu'à ce que l'événement soit enregistré).

Lorsque vous passez au fichier de données suivant pendant la révision dans la table de navigation, ChemStation vérifie les événements manuels d'intégration non enregistrés et demande à l'utilisateur s'il souhaite les enregistrer.

Les événements manuels enregistrés dans le fichier de données pendant la révision dans la Table de navigation n'interfèrent pas avec les événements manuels d'intégration enregistrés pendant la révision dans le mode **Batch**. Ces deux modes de révision sont totalement séparés des événements manuels d'un fichier de données.

Dans les versions de la ChemStation antérieures à la version B.04.01, les événements manuels d'intégration ne pouvaient être enregistrés que dans la méthode. Dans la version B.04.01, cette procédure peut toujours être utilisée. Le menu **Integration** de la vue **Data Analysis** fournit les points suivants qui permettent de gérer les événements manuels d'intégration avec la méthode :

**Update Manual Events of Method** : enregistre les nouveaux événements manuels extraits dans la méthode.

**Apply Manual Events from Method** : applique les événements manuels actuellement enregistrés dans la méthode au fichier de données actuellement chargé.

**Remove Manual Events from Method** : efface les événements manuels de la méthode.

Afin de convertir les événements manuels enregistrés dans une méthode pour les stocker dans le fichier de données, il convient d'appliquer les événements de la méthode et d'enregistrer les résultats dans le fichier de données. Si nécessaire, vous pouvez éliminer les événements de la méthode. Si la case **Manual Events** de la **Integration Events Table** d'une méthode est cochée, les événements manuels de la méthode sont toujours appliqués lors du chargement d'un fichier de données utilisant cette méthode. Si le fichier de données contient des événements manuels supplémentaires, on utilise les événements dans le fichier de données. Quand la case **Manual Events** est cochée, l'utilisateur n'est jamais invité à enregistrer les événements dans le fichier de données.

### Jeu de résultats auto-assemblés

Dans la vue **Data Analysis**, la Table de navigation affiche le contenu d'une analyse simple ou dune séquence chargée. Vous pouvez charger, décharger ou ajouter des fichiers à la Table de navigation. Au moyen de la commande**Sequence > Create New Result Set** vous pouvez créer un nouvel ensemble de résultats depuis le tableau de navigation (voir « Pour assembler un nouveau jeu de résultat », page 91). Les jeux de résultats auto-assemblés peuvent être retraités de la même manière que ceux créés automatiquement.

### Déchargement d'ensembles de données actives

A l'aide de la commande **Unload Current Dataset** du menu contextuel de la Table de navigation, vous pouvez vider la Table de navigation pour la remettre dans l'état où elle était après le lancement de ChemStation. S'il existe des données non enregistrées, vous serez invité à le faire.

### Suppression d'un fichier de données sélectionné

A l'aide de la commande **Remove selected Data Files** du menu contextuel de la Table de navigation, vous pouvez supprimer les lignes sélectionnées de la Table. Cela ne supprime que la référence dans la Table de navigation mais ne supprime pas le fichier de données physique du jeu de résultats chargé ou de l'analyse simple du système de fichiers. Il n'est seulement possible que de supprimer les références aux fichiers ajoutés ou remplacés.

# Mise à jour de méthodes

Dans la vue **Data Analysis**, vous disposez de plusieurs options pour copier des méthodes entre les répertoires de méthodes de référence et les jeux de résultats. Pour plus d'informations, reportez-vous à « Administration des méthodes », page 50.

# Visionneuse de rapports pour traitement de données

Selon la configuration, ChemStation enregistre automatiquement des rapports d'injection simples et des rapports récapitulatifs de séquence dans le système de fichiers à certains moments. Avec la visionneuse de rapports, vous pouvez facilement examiner les fichiers de rapports enregistrés afin de vérifier les résultats d'acquisitions de données, de retraitement ou de recalcule.



Figure 30 Visionneuse de rapports

L'utilisation de la visionneuse de rapports présente les avantages suivants :

- Vous pouvez ouvrir directement les fichiers de rapports depuis ChemStation. Il n'est pas nécessaire de chercher les fichiers dans le système de fichiers.
- Chaque rapport ouvre une fenêtre flottante distincte. Par conséquent, vous pouvez facilement comparer des rapports différents en plaçant les fenêtres côte à côte.
- Vous pouvez utiliser l'affichage en plein écran pour examiner le fichier de rapport.
- Vous pouvez utiliser les fonctionnalités d'Adobe Reader pour examiner les rapports au format .pdf.
- Vous pouvez chercher du texte spécifique dans des rapports au format .txt aussi bien que dans des rapports au format .pdf.
• Lorsque vous retraitez une séquence, vous ne devrez pas attendre la fin du retraitement de la séquence complète. Vous pouvez ouvrir les fichiers de rapports enregistrés pour les échantillons de la séquence déjà terminés.

#### Démarrage de la visionneuse de rapports

Vous pouvez ouvrir la visionneuse de rapports via le menu, les icônes de la barre d'outils ou via le menu contextuel de la table de navigation. Il existe différents éléments pour les rapports récapitulatifs de séquence et pour les rapports d'injection simple.

Pour voir des rapports d'injection simple :

- Sélectionnez le menu **Report > View Report File** pour examiner le ou les fichier(s) de rapport du signal chargé.
- Sélectionnez la commande **View Saved Report File(s)** dans le menu contextuel de l'échantillon spécifique dans la table de navigation. Avec cette commande, vous pouvez charger le(s) fichier(s) de rapport de tout signal même non chargé actuellement.
- Cliquez sur l'icône **View saved Report File(s)** de la barre d'outils de l'espace de travail pour examiner le ou les fichier(s) de rapport du signal chargé.



Pour voir les rapports récapitulatifs de séquence :

- Sélectionnez le menu Sequence > View Summary Report File.
- Cliquez sur l'icône View Saved Sequence Summary Report File(s) de la barre d'outils de navigation (en mode de retraitement).



#### Configuration des fenêtres de la visionneuse de rapports

Vous pouvez configurer plusieurs aspects du comportement de la visionneuse de rapports. Tous ces paramètres sont accessibles à partir du bouton **Options** de la fenêtre Visionneuse de rapports.

Vous pouvez définir le nombre maximal de fenêtres de la visionneuse de rapports qui seront ouvertes en parallèle. Les fenêtres sont réutilisables de manière cyclique. Lorsque vous examinez plus de fichiers de rapports que le

#### **6 Principes d'analyse et de révision des données**

Analyse de données

nombre maximal de fenêtres de la visionneuse de rapports, la première fenêtre ouverte sera celle dont le contenu sera changé en premier lieu.

#### REMARQUE

Si vous n'avez pas à comparer plusieurs rapports, nous vous recommandons de limiter le nombre de fenêtres de la visionneuse de rapports à 1 fenêtre.

Pour comparer plusieurs rapports, il peut aussi être utile de modifier la barre de titre des fenêtres de la visionneuse de rapports. Divers symboles sont disponibles pour les fenêtres de la visionneuse de rapports affichant des rapports récapitulatifs de séquences, des rapports d'injection simple pour des échantillons de séquence, ou des rapports d'injection simple pour des analyses uniques. Ces symboles vous aideront à distinguer les fenêtres simples de la visionneuse de rapports.

Les fenêtres de la visionneuse de rapports sont toujours affichées en haut de l'application ChemStation. Afin de travailler avec l'application ChemStation et avec la visionneuse de rapports en même temps, vous pouvez redimensionner et positionner toutes les fenêtres de manière à les voir toutes. Lorsque vous fermez l'application ChemStation, la taille et les positions des fenêtres sont sauvegardées. La prochaine fois que vous relancerez l'application ChemStation, la même configuration sera réutilisée.

#### Travail avec la visionneuse de rapports

Vous pouvez utiliser la visionneuse de rapports, par exemple, dans les procédures suivantes :

- Vous configurez la méthode et la séquence pour enregistrer des rapports au format PDF dans le système de fichiers. Après avoir terminé l'exécution de la séquence, vous ouvrez les fichiers de rapports (rapport récapitulatif de séquence ou rapports d'injection simple) directement depuis l'application ChemStation dans la visionneuse de rapports. Utilisez les fonctionnalités d'Adobe Raeder comme l'agrandissement ou la recherche pour examiner le rapport en détails.
- Vous téléchargez une séquence qui contient déjà des fichiers de rapport du système de stockage central.
  - Pour voir le résultat final, vous sélectionnez l'échantillon convenable dans la table de navigation, et vous ouvrez le fichier de rapport directement dans la visionneuse de rapports de l'application ChemStation.

 Si nécessaire, vous pouvez modifier la méthode et retraiter la séquence. Pendant le retraitement en cours, vous commencez à visionner les rapports des échantillons déjà terminés.

Dans la visionneuse de rapports, vous pouvez sélectionner l'ancien et le nouveau rapport dans la liste située dans le coin supérieur gauche. Vous pouvez distinguer les rapports par leur date de création, qui fait partie des informations de la liste. En fonction des réglages du transfert, les données - y compris les nouveaux fichiers de rapports- peuvent être automatiquement chargés vers le système de stockage central une fois le traitement achevé.

- Vous exécutez une séquence qui contient uniquement des fichiers de rapports au format TXT. Vous pouvez vérifier ces fichiers de rapports aussi bien dans la visionneuse de rapports.
- Vous révisez des rapports différents sur les mêmes échantillons de séquence, établis d'après des styles ou des modèles de rapport différents.

Tout d'abord, vous créez une séquence avec un rapport de performances complet. Vous exécutez ou retraitez la séquence pour obtenir le fichier de rapport. Si vous êtes satisfait des résultats affichés dans ce rapport, vous modifiez la méthode de la séquence pour créer un rapport plus court (par exemple, sélectionnez un modèle de rapport différent ou le style de rapport classique **Short**). Ensuite vous retraitez la séquence pour obtenir des rapports plus courts. Lorsque vous observez un rapport avec la visionneuse de rapports, vous pouvez voir alternativement deux rapports différents en les sélectionnant dans la liste située dans coin supérieur gauche. La date de création de chaque fichier est affichée comme partie des informations de la liste. 6 Principes d'analyse et de révision des données Révision

# Révision

Il existe dans Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition une nouvelle vue qui décrit les procédures pures de révision des données pour leur analyse. Dans cette vue **Review**, vous pouvez générer des rapports pour une séquence complète, un sous-ensemble d'une séquence ou pour toute sélection de fichiers de données issus de séquences différentes ou d'échantillons simples.

Dans la vue **Review**, vous ne charger aucune méthode et vous ne créez aucun jeu de résultats comme dans un recalcul ou un retraitement. Les rapports que vous générez dans la vue **Review** n'affichent que les résultats qui ont déjà été calculés.

Vous pouvez sélectionner un modèle de rapport et l'appliquer à une sélection spécifique de fichiers de données. La combinaison d'un modèle et d'une sélection de fichiers de données détermine l'aspect du rapport ainsi créé.

REMARQUE

La vue **Review** n'est disponible que si vous avez activé la Création intelligente de rapports dans la Configuration d'instrument du panneau de configuration OpenLAB.

# Conditions pour la création intelligente de rapports

ChemStation C.01.04 génère des résultats dans un format spécifique (\*.ACAML) utilisé pour la création intelligente de rapports. Si vous souhaitez créer des rapports avec ChemStation version A ou B, vous devez d'abord régénérer des résultats à l'aide de ChemStation C.01.04 (par exemple, recalculer les données ou générer des rapports d'injection simple dans la vue Analyse de données). Si les résultats ne sont pas disponibles dans le format requis, les rapports créés dans la vue Révision ne contiendront aucune donnée.

# Sélection de fichiers de données

Vous pouvez sélectionner des fichiers de données requis en chargeant les séquences ou les analyses simples depuis l'arborescence de navigation de l'explorateur de la ChemStation. Tous les fichiers de données disponibles sont alors présentés dans la Table de navigation. Dans la Table de navigation, vous sélectionnez les fichiers de données spécifiques pour lesquels vous souhaitez afficher les résultats dans le rapport.

#### Chargement de fichiers de données

Vous pouvez charger tous les fichiers de données issus d'un dossier de séquence entière ou d'analyses simples. Dans l'onglet **Data** de l'explorateur de la ChemStation, double-cliquez sur la séquence ou utiliser la commande **Load** du menu contextuel pour charger tous les fichiers de données inclus.

Lorsque vous chargez les fichiers de données, la Table de navigation est effacée automatiquement avant que de nouvelles données puissent être affichées. Vous pouvez par conséquent préparer les données pour un *Rapport d'échantillon simple* ou pour un *Rapport récapitulatif de séquence*.

#### Ajout de fichiers de données

Si vous souhaitez comparer les résultats de séquences différentes, vous pouvez d'abord charger une séquence, puis ajouter les fichiers de données requis de l'autre séquence. Dans l'onglet **Data** de l'explorateur de la ChemStation, utilisez la commande **Add Data Files...** du menu contextuel pour ajouter seulement des fichiers de données spécifiques à la sélection déjà chargée. Une boîte de dialogue s'ouvre dans laquelle vous pouvez sélectionner les fichiers de données requis.

Lorsque vous ajoutez des fichiers de données, la Table de navigation joint ces fichiers à la liste de ceux déjà chargés. Vous pouvez par conséquent préparer les données pour des *Rapports de séquences croisées* par exemple.

#### Sélection de fichiers de données pour la création de rapports

La Table de navigation affiche tous les fichiers de données de la séquence ou d'un recueil d'échantillons simples sur lesquels vous avez double-cliqué dans l'explorateur de la ChemStation. Dans cette table, vous sélectionnez les fichiers de données pour lesquels vous souhaitez créer le rapport. Seuls les fichiers sélectionnés seront inclus dans le rapport ainsi créé.

# Sélection de modèles de rapports

Vous pouvez sélectionner les modèles de rapports désirés depuis l'onglet **Report Templates** de l'explorateur de la ChemStation. L'arborescence de navigation présente tous les modèles de rapports dans le répertoire chem32/repstyle.

### Présentation de rapport

Le rapport résultant est toujours déterminé à la fois par la sélection des données et par le modèle de rapport. Par conséquent, la ChemStation produit le rapport correspondant et en affiche une présentation dès que vous avez sélectionné un ou plusieurs fichiers de données et chargé un modèle de rapport.

Vous pouvez envoyer le rapport vers une imprimante ou le sauvegarder comme fichier (PDF, XLS, DOC, ou TXT). Si vous utilisez un système de stockage c entral, vous pouvez aussi charger le rapport directement vers le répertoire central.

# Procédures de révision possibles

Vous pouvez la vue Review, par exemple, dans les procédures suivantes :

- Vous chargez une séquence et sélectionnez tous les fichiers de données de la séquence. Vous chargez un modèle de rapport et créez un *rapport récapitu- latif de séquence*.
- Après avoir créé un rapport récapitulatif de séquence, vous chargez un modèle de rapport différent. Vous révisez les mêmes données avec une *mise en page différente du rapport*.
- Vous chargez une séquence et sélectionnez seulement un sous-ensemble des fichiers de données. Vous chargez un modèle de rapport et créez un rapport récapitulatif pour *une partie seulement de la séquence*.
- Après avoir chargé un sous-ensemble de fichiers de données, vous ajoutez d'autres fichiers de données (issus d'une séquence ou d'un recueil d'échantillons simples). Vous chargez un modèle de rapport et créez un *rapport d'échantillon croisé ou de séquence croisée*.



# Étalonnage

7

Terminologie 152 Types d'étalonnage 153 Étalonnage simple 153 Étalonnage multiniveau 154 Plages d'étalonnage 156 Ajustement de la courbe d'étalonnage 156 Traitement de l'origine 157 Table d'étalonnage 160 Sommation des pics 161 Échantillons inconnus 162 Réétalonnage 163 Qu'est-ce que le réétalonnage ? 163 Pourquoi réétalonner? 163 Réétalonnage manuel 164 Réétalonnage avec sommation des pics 164 Modes de réétalonnage 165 Réétalonnage des pics non identifiés 165

Ce chapitre présente les principes de l'étalonnage.



Agilent Technologies

#### 7 Étalonnage Terminologie

# Terminologie

Étalonnage	L'étalonnage est le processus consistant à déterminer les facteurs de réponse utilisés pour calculer les concentrations absolues de composé en injectant des échantillons étalons préparés spécialement à cet effet. La table d'étalonnage est également utilisée pour l'identification.					
Composé	Un composé chimique peut comporter plusieurs pics, dans un étalonnage mul- tisignal, en général un par signal. Dans un étalonnage monosignal, un composé fait référence à un seul pic.					
Niveau d'étalonnage	Un niveau d'étalonnage comprend les points d'étalonnage pour une concentra- tion donnée d'un étalon. Dans un étalonnage multisignal, les points d'étalon- nage peuvent être distribués sur plusieurs signaux.					
Point d'étalonnage	Un point d'étalonnage désigne le rapport quantité/réponse d'un pic sur la courbe d'étalonnage.					
Échantillon étalon	Un échantillon étalon, également appelé étalon, est un échantillon contenant une quantité connue du composé à quantifier. Dans le logiciel, l'échantillon étalon désigne une injection depuis le flacon d'échantillon étalon.					
	Des étalons sont disponibles auprès de fournisseurs de substances chimiques ou ils peuvent être préparés en utilisant une quantité mesurée exactement du composé pur. La quantité du composé dans l'échantillon d'étalonnage est géné- ralement exprimée sous forme de concentration, généralement en ng/ $\mu$ l.					

# Types d'étalonnage

Le logiciel ChemStation propose deux types d'étalonnage : l'étalonnage à un seul niveau et l'étalonnage à plusieurs niveaux.

# Étalonnage simple

La courbe d'étalonnage présentée dans Figure 31, page 153 comporte un seul point, c'est-à-dire un niveau. Avec une courbe d'étalonnage simple, la réponse du détecteur est censée être linéaire sur la plage de mesure des concentrations pour les échantillons concernés. Le facteur de réponse d'un pic de composant donné correspond à l'inverse de la pente de la courbe d'étalonnage passant par ce point et l'origine. L'étalonnage simple présente un inconvénient : la réponse du détecteur en fonction de la concentration d'un échantillon est censée être linéaire et passer par l'origine sur un tracé de la concentration en fonction de la réponse. Ce n'est pas toujours le cas et des résultats inexacts peuvent être générés.



Figure 31 courbe d'étalonnage simple

Pour obtenir des résultats quantitatifs exacts, une courbe d'étalonnage doit comporter au moins deux niveaux. Ces niveaux doivent encadrer les quantités recherchées dans les échantillons inconnus.



Figure 32 Courbe d'étalonnage à deux niveaux

Par exemple, si vous souhaitez quantifier un composé et que la concentration des échantillons inconnus devrait être comprise entre 1 et 10 ng/ $\mu$ l, la courbe d'étalonnage doit alors comporter au moins deux niveaux (voir Figure 32, page 154).

#### **Limites quantitatives**

ChemStation permet de définir des plages de quantification valides en termes de quantité absolue de chaque composant.

# Étalonnage multiniveau

L'étalonnage à plusieurs niveaux peut être utilisé en cas de doute sur la linéarité de la réponse d'un composant ou pour confirmer la linéarité de la plage d'étalonnage. Chaque niveau d'étalonnage correspond à un échantillon étalon ayant une concentration donnée de composants. Les échantillons étalons doivent être préparés de sorte que la concentration de chaque composant varie dans la plage de concentrations attendue dans les échantillons inconnus. Il est ainsi possible de prévoir la variation de la réponse du détecteur en fonction de la concentration et calculer les facteurs de réponse en conséquence.

La courbe d'étalonnage multiniveau représentée comporte trois niveaux et illustre un ajustement linéaire passant par l'origine. La méthode d'ajustement linéaire passant par l'origine s'apparente à la méthode d'étalonnage simple. Il est supposé que la réponse du détecteur en fonction de la concentration est linéaire. La différence entre ces deux types d'étalonnage est la suivante : dans le cadre d'un ajustement linéaire, la pente de la réponse du détecteur peut être déterminée par un ajustement passant par plusieurs points (un pour chaque niveau).



Figure 33 Courbe d'étalonnage multiniveau avec trois niveaux

La table d'étalonnage correspondante, qui présente sous forme de tableau les informations utilisées pour générer cette courbe, est semblable à celle présentée dans Tableau 18, page 155.

Quantité (ng∕µl)	Réponse (calcul de l'aire)	
1	100	
5	500	
10	1000	
	<b>Quantité (ng∕µl)</b> 1 5 10	Quantité (ng/μl)         Réponse (calcul de l'aire)           1         100           5         500           10         1000

Dans cet exemple, les échantillons étalons utilisés pour générer les trois niveaux sont numérotés 1, 2 et 3.

# Plages d'étalonnage

Chaque étalonnage à plusieurs niveaux est valable dans la plage de concentrations utilisée dans les échantillons d'étalonnage. L'extrapolation d'une courbe d'étalonnage, notamment en cas de non-linéarité, est dans le meilleur des cas une approximation. Vous pouvez définir la plage d'étalonnage valable pour chaque composé dans la boîte de dialogue **Compound Details**. Pour chaque composé, vous pouvez indiquer une limite inférieure ou supérieure. Tout dépassement de ces limites fait l'objet d'une annotation dans le rapport.

# Ajustement de la courbe d'étalonnage

Dans le cadre d'un étalonnage à plusieurs niveaux, vous pouvez calculer l'ajustement de la courbe selon différentes méthodes :

- Segment de droite linéaire
- Linéaire
- Logarithmique
- Puissance
- Exposant
- Quadratique
- Cubique
- Moyenne (réponse/quantité)

#### Ajustement non linéaire

Dans certains cas, la réponse du détecteur aux variations de concentration d'un échantillon n'est pas linéaire. Une méthode d'étalonnage par régression linéaire ne convient pas pour ces types d'analyse et un calcul d'étalonnage à plusieurs niveaux doit alors être envisagé.

# Traitement de l'origine

Vous pouvez traiter l'origine de quatre façons différentes lors du tracé de la courbe de réponse :

- ignorer l'origine,
- intégrer l'origine,
- forcer l'origine, ou
- relier l'origine.

Pour forcer l'intégration de l'origine dans la courbe d'étalonnage, les points d'étalonnage sont mis en correspondance par rapport à l'origine, depuis le premier quadrant dans le troisième quadrant. L'utilisation de tous les points pour le calcul de régression assure que la courbe d'étalonnage passe par l'origine Ceci est également décrit dans Figure 34, page 157.



Figure 34 Forcer l'intégration de l'origine

Pour plus d'informations sur l'ajustement de la courbe d'étalonnage et le traitement de l'origine, voir l'*aide en ligne*.

#### Pondération des points d'étalonnage

Lorsque vous définissez la courbe d'étalonnage par défaut, il est possible de spécifier la pondération (ou importance) relative des différents points d'étalonnage utilisés pour générer la courbe.

Les options de pondération suivantes peuvent être sélectionnées :

Pondération	Description					
Uniforme	Tous les points d'étalonnage ont la même importance dans la courbe.					
Linéaire (quantité)	Un point d'étalonnage pour la quantité x possède un facteur de pondération 1/x, normalisé par rapport à la plus petite quantité, de telle sorte que le facteur de pondération le plus élevé soit 1. La normalisation est effectuée en multi- pliant la pondération par la plus petite quantité. Par exemple, la pondération d'un point d'étalonnage de quantité x est (1/x), où a désigne la plus petite quantité de composé étalon préparée dans les étalons. Si l'origine est intégrée, il lui est attribué la moyenne des pondérations des autres points d'étalonnage.					
Linéaire (réponse)	Un point d'étalonnage de réponse y possède un facteur de pondération de 1/y, normalisé par rapport à la plus faible réponse, de sorte que le facteur de pondé- ration le plus élevé soit 1. La normalisation est effectuée en multipliant la pon- dération par la plus faible réponse. Par exemple, la pondération d'un point d'étalonnage de quantité y est (1/y), où b désigne la réponse correspondant à la plus faible quantité de composé étalon préparée dans les étalons. Si l'origine est intégrée, il lui est attribué la moyenne des pondérations des autres points d'étalonnage.					
Quadratique (quantité)	Un point d'étalonnage de quantité x possède un facteur de pondération de $1/x^2$ , normalisé par rapport à la plus faible quantité, de sorte que le facteur de pondération le plus élevé soit 1. La normalisation est effectuée en multipliant la pondération par la plus faible quantité. Par exemple, la pondération d'un point d'étalonnage avec la quantité x est $(1/x^2) \times a^2$ , où a désigne la plus faible quantité du composé étalon préparée dans les étalons.					

Pondération	Description				
Pondération Quadratique (réponse) Nombre d'étalonnages	Un point d'étalonnage de réponse y possède un facteur de pondération de 1/y <sup>2</sup> , normalisé par rapport à la plus faible réponse, de telle sorte que le fac- teur de pondération le plus élevé soit 1. La normalisation est effectuée en mul- tipliant la pondération par la plus faible réponse. Par exemple, la pondération d'un point d'étalonnage de quantité y est (1/y <sup>2</sup> ) × b <sup>2</sup> , où b désigne la réponse correspondant à la plus faible quantité de composé étalon préparée dans les étalons.				
Nombre d'étalonnages	Un point d'étalonnage est pondéré en fonction de son nombre de réétalonna- ges. Aucune normalisation n'est effectuée.				

Des pondérations de points d'étalonnage quadratique peuvent, par exemple, être utilisées pour ajuster la dispersion des points d'étalonnage. Les points d'étalonnage les plus proches de l'origine, qui sont généralement mesurés avec une plus grande précision, sont ainsi assurés d'obtenir une pondération plus élevée que les points d'étalonnage qui sont plus éloignés de l'origine et peuvent être dispersés.

La décision concernant le type de pondération des points d'étalonnage doit être basée sur les spécifications de votre méthode. 7 Étalonnage Table d'étalonnage

# Table d'étalonnage

La table d'étalonnage spécifie les conversions des aires ou hauteurs de pics en unités de votre choix, suivant la procédure de calcul sélectionnée. La table d'étalonnage contient une liste des temps de rétention/migration provenant d'une analyse d'étalonnage. Ces temps de rétention/migration sont comparés à ceux des pics produits par l'analyse d'un échantillon. S'il y a correspondance, le pic de l'échantillon est supposé représenter le même composé que celui qui figure dans la table d'étalonnage. Au cours d'une analyse ou pendant la génération d'un rapport, les quantités entrées pour chaque pic sont utilisées pour calculer les quantités destinées au calcul sélectionné pour ce rapport. Le type et la quantité d'informations requises pour la création d'une table d'étalonnage varient en fonction du type de procédure de calcul souhaité.

Les informations suivantes sont nécessaires pour créer une table d'étalonnage :

- le temps de rétention/migration de chaque pic de composant d'un mélange étalon,
- la quantité de chaque composant utilisée dans l'élaboration du mélange étalon, exprimée en unités homogènes.

# Sommation des pics

REMARQUE

La table de sommation des pics est proposée pour certaines applications de l'industrie pétrochimique et de l'industrie pharmaceutique qui peuvent être améliorées à l'aide des fonctions suivantes :

- · Somme des aires des pics qui rentrent dans la plage définie par l'utilisateur
- Somme des aires d'une plage de pics et calculs à l'aide d'un seul multiplicateur
- · Somme des aires de tous les pics portant le même nom

La table de sommation des pics s'apparente à la table d'étalonnage standard, avec néanmoins quelques différences. Tout comme la table d'étalonnage, elle est associée à la méthode active.

Vous devez créer la table d'étalonnage d'une analyse avant de créer la table de sommation des pics.

# Échantillons inconnus

Un échantillon inconnu est un échantillon contenant une quantité inconnue du composé à quantifier.

Pour déterminer la quantité du composé dans un échantillon inconnu, il est nécessaire de :

- générer une courbe d'étalonnage du composé,
- injecter une aliquote de l'échantillon inconnu et lancer l'analyse dans des conditions exactement identiques à l'échantillon étalon,
- déterminer la réponse à partir du signal, c'est-à-dire l'aire ou la hauteur du pic par rapport à la quantité inconnue du composé, et
- utiliser la courbe d'étalonnage pour calculer la quantité du composé dans l'échantillon inconnu.

Par exemple, si l'aire de pic d'un échantillon inconnu est égale à 500, il est possible de déterminer que la quantité du composé correspondant dans l'échantillon inconnu est de 5 ng/ $\mu$ l, en utilisant la courbe d'étalonnage de la Figure 35, page 162.



Figure 35 Signal d'un échantillon inconnu et courbe d'étalonnage

# Réétalonnage

## Qu'est-ce que le réétalonnage ?

Le processus de réétalonnage consiste à actualiser un niveau sur une courbe d'étalonnage. Lorsque vous procédez à un réétalonnage, vous analysez un autre échantillon qui contient les mêmes composés étalon que l'original, mais surtout la même quantité de ces composés. Lorsque vous analysez l'échantillon d'étalonnage, vous obtenez des facteurs de réponse et des temps de rétention/migration mis à jour. Vous pouvez également choisir de faire la moyenne des facteurs de réponse de plusieurs analyses d'étalonnage, de manière à pondérer les facteurs de réponse à parts égales.

### Pourquoi réétalonner ?

La plupart des étalonnages ont une durée de vie limitée, en raison des variations de méthode chromatographique. Le réétalonnage s'avère nécessaire pour garantir l'exactitude de l'analyse. Considérons, par exemple, que vous avez créé une table d'étalonnage pour le composé caféine et que vous l'utilisez à chaque quantification d'échantillons contenant de la caféine. A un moment donné, vous devrez remplacer la colonne/le capillaire. Même si la colonne/le capillaire est remplacé par exactement un autre du même type, il ne se comportera pas exactement comme le précédent lorsque vous avez créé la table d'étalonnage pour la caféine. Par conséquent, pour préserver la cohérence, vous devez réétalonner les points dans la table d'étalonnage avant d'utiliser la nouvelle colonne/le nouveau capillaire, pour analyser des échantillons contenant des quantités inconnues de caféine. Vous procédez ainsi à la quantification d'échantillons analysés dans des conditions système identiques.



### Réétalonnage manuel

Vous pouvez saisir manuellement des informations sur l'étalonnage des pics et normaliser la table d'étalonnage en sélectionnant le bouton d'option Manual Setup (Configuration manuelle) dans la boîte de dialogue New Calibration Table (Nouvelle table d'étalonnage). Pour créer une méthode d'étalonnage, il convient généralement d'analyser un mélange étalon, de créer une table d'étalonnage et de saisir la quantité de tous les pics étalonnés pour obtenir les facteurs de réponse. Cette procédure s'avère toutefois inefficace dans le cas de certaines applications, notamment dans l'industrie pétrochimique, où les mêmes composés sont analysés depuis des années et où les facteurs de réponse des différents composés et détecteurs sont connus depuis longtemps.

Pour créer manuellement la table d'étalonnage, saisissez les pics et leurs facteurs de réponse dans la table d'étalonnage, réétalonnez la méthode à l'aide d'un étalon qui contient au moins un pic de référence et mettez à jour le % delta.

Pour référencer un pic spécifique pour le calcul de la rétention des rapports horires, vous pouvez configurer ce pic comme taux horaire de rétention. Tous les pics dont la référence de taux RT sont similaires sont référencés en rapport à ce pic.

### Réétalonnage avec sommation des pics

Lorsque vous effectuez un réétalonnage, les intervalles de temps de rétention/migration qui figurent dans la table de sommation des pics de la méthode sont actualisés préalablement au réétalonnage effectif. Le réétalonnage des sommations des pics est effectué sur ce modèle, de telle sorte que le delta soit intégré aux calculs des temps.

## Modes de réétalonnage

Le logiciel ChemStation propose deux modes de réétalonnage. Vous pouvez procéder à un réétalonnage interactif ou à un réétalonnage automatique pendant une séquence d'analyses automatisée. Le réétalonnage interactif consiste à suivre directement les étapes du processus de réétalonnage à l'aide du logiciel ChemStation après avoir injecté un ou plusieurs échantillons étalons. Le réétalonnage séquentiel consiste à spécifier à quel moment le réétalonnage est effectué, mais le réétalonnage est ensuite effectué automatiquement par le logiciel. Pour plus d'informations, voir la section « Réétalonnage automatique », page 107.

Pour plus d'informations sur la procédure de réétalonnage à l'aide du logiciel, voir la procédure correspondante dans l'aide en ligne.

### Réétalonnage des pics non identifiés

Vous pouvez réétalonner les pics non identifiés de trois façons.

#### **No Recalibration**

Lorsqu'un pic figurant dans la table d'étalonnage n'est pas identifiable dans les résultats d'intégration, l'étalonnage est abandonné. Dans le cadre d'une séquence, la séquence est également abandonnée.

#### **Partial Recalibration**

Cette fonction assure uniquement le réétalonnage des pics identifiés. Les pics manquants n'entraînent pas l'abandon du réétalonnage, mais ils font l'objet d'une annotation dans le rapport.

#### **Recalibration of all Retention/Migration Times**

Cette fonction permet le réétalonnage du temps de rétention/migration de tous les pics identifiés et non identifiés. Cette opération est effectuée sur la base des temps de rétention/migration des pics identifiés. Les facteurs de réponse des pics non identifiés ne sont pas actualisés.





Concepts et procédures de la ChemStation

# **Création de rapports**

8

Qu'est-ce qu'un rapport ? 168 Création de rapports classique et intelligente 169 Création intelligente de rapports 170 Avantages de la création intelligente de rapports 170 Éditeur de modèles de rapports (RTE, Report Template Editor) pour la création intelligente 171 Enregistrement des modèles de rapports 175 Enregistrement des rapports créés 177 Modèles de rapport du système de stockage central de données 178 Création de rapports classique 179 Édition des résultats 179 Résultats quantitatifs 180 Valeurs de champ personnalisé de génération de rapport 181 Styles de rapports 182 Autres paramètres de style de rapport 184 Rapport récapitulatif de séquence 185 Formats des fichiers de rapport 189

Ce chapitre décrit les principes de la création intelligente de rapports et classique.



# Qu'est-ce qu'un rapport ?

Un rapport se compose d'informations quantitatives et qualitatives de l'échantillon que vous analysez. Il peut être imprimé sur papier, affiché à l'écran ou disponible sous forme de fichier électronique. Le rapport peut contenir des renseignements sur les pics détectés lors de l'analyse et les tracés des acquisitions.

#### **Rapports pour différents usages**

Vous pouvez précisez les différents usages des rapports pendant l'acquisition et la révision des données :

- Le *rapport récapitulatif de séquence* est défini dans l'onglet **Sequence Output** de la boîte de dialogue**Sequence Parameters**. Ce rapport est créé automatiquement par ChemStation après l'achèvement d'une acquisition ou d'un retraitement de séquence.
- Le *rapport d'injection simple* est défini dans la boîte de dialogue **Specify Report**. Ce rapport est créé pour chaque échantillon simple pendant l'acquisition ou le retraitement d'une séquence.

Avec la Création intelligente de rapports, vous pouvez créer des modèles pour différents types de rapports selon leur usage. Pour plus d'informations, reportez-vous à « Types de rapports », page 171.

#### **Destination du rapport**

Un rapport peut être envoyé aux destinations suivantes :

• Screen

Le rapport (texte et graphiques inclus) s'affiche à l'écran dans la fenêtre de présentation du rapport, à partir de laquelle vous pouvez l'imprimer.

• Printer

Le rapport (texte et graphiques inclus) est imprimé sur l'imprimante sélectionnée.

• File

Le rapport est enregistré dans un fichier, par exemple, un fichier Adobe PDF.

# Création de rapports classique et intelligente

# Création de rapports classique et intelligente

Avec OpenLAB CDS Agilent, vous pouvez choisir le type de création de rapports que vous souhaitez utiliser : *création de rapports classique*, utilisée sur les versions antérieures de la ChemStation ou *création intelligente de rapports* qui comporte un langage de définition de rapport puissant et standardisé et des fonctions de revue de données améliorées. Les sections suivantes décrivent les deux types de création de rapports.

# Conséquences de l'activation de la création intelligente de rapports

Si vous souhaitez utiliser la création intelligente de rapports, vous devez l'activer dans la Configuration d'instrument dans le panneau de configuration d'OpenLAB.

L'activation de la création intelligente de rapports a les conséquences suivantes pour ChemStation :

- La vue **Report Layout** affiche l'éditeur de modèle de rapport pour la création intelligente.
- La vue **Review** est disponible.
- Dans la boîte de dialogue **Sequence Parameters**, vous pouvez choisir la création de rapports classique ou intelligente.
- Dans la boîte de dialogue **Specify Report**, vous pouvez choisir la création de rapports classique ou intelligente.

# Création intelligente de rapports

# Avantages de la création intelligente de rapports

La création intelligente de rapports présente les avantages suivants :

- Vous pouvez utiliser la vue Review.
- La plupart des fonctionnalités disponibles dans les différents paramètres et dans plusieurs boîtes de dialogue de la création intelligente de rapports font maintenant partie des modèles de rapports. Vous pouvez créer ou modifier des modèles de rapports à l'aide de la vue **Report Layout**, contenant l'éditeur de nouveaux modèles de rapports pour la création intelligente. L'éditeur de modèles de rapports présente plusieurs fonctions puissantes :
  - Vous pouvez accéder à tous les résultats produits par ChemStation en sélectionnant le champ de données correspondant.
  - Vous pouvez créer vos propres expressions afin de faire des calculs avec les champs de données. Vous pouvez utiliser toute expression valide de Microsoft Visual Basic.
  - Vous pouvez créer des expressions où vous pourrez faire des calculs avec les Champs personnalisés de la ChemStation.
  - Mise en évidence de résultats : vous pouvez définir les expressions pour mettre en évidence des résultats spécifiques selon leur valeur.
  - Parcelles : l'éditeur de modèles de rapports comporte des éléments préconfigurés, appelés *parcelles*, que vous pouvez insérer dans votre modèle de rapport par un tirer-lâcher.
- Vous pouvez utiliset l'outil Documentation du modèle de rapport pour créer de descriptions de vos modèles de rapports.
- Vous pouve reporter les valeurs suivantes en référence à la Pharmacopie européenne (taux pic/vallée également disponible pour le rapport classique; pour les détails des champs obligatoires, consultez le *Guide de référence*):
  - Rapport signal/bruit
  - Rétention relative
  - Temps de rétention relatif

# Éditeur de modèles de rapports (RTE, Report Template Editor) pour la création intelligente

#### Types de rapports

Vous pouvez créer différents types de rapports. Selon le type de rapport, différents champs de données sont disponibles dans le modèle ; les éléments du rapport sont groupés différemment.

Les types de rapports suivants sont disponibles :

Single Injection

Le rapport créé montre les éléments du rapport issus du modèle séparés pour chaque injection dans la plage active des données. Vous pouvez afficher les données par injection, mais vous ne pouvez pas comparer les résultats entre les différentes injections dans un tableau ou une matrice.

#### • Single Sequence Summary

Le rapport créé montre les éléments du rapport issus du modèle séparés pour chacune des séquences dans la plage active des données. Vous pouvez comparer les résultats entre les différentes injections dans un tableau ou une matrice, mais pas les résultats entre les différentes séquences.

#### Cross-Sequence Summary

Avec ce type de rapport, les données ne sont *pas* groupées automatiquement. Par conséquent, vous devez prêter plus d'attention au groupage des éléments de votre rapport, mais en revanche vous pouvez créer des éléments de rapport qui comparent les données entre des séquences différentes.

#### Format de modèles

Tous les modèles de rapports sont basés sur le langage de définition de rapports (RDL), qui est un format XML standardisé fourni par Microsoft.

Pour créer des modèles de rapports, vous pouvez utiliser l'Éditeur de modèles de rapport (RTE, Report Template Editor) ou Microsoft SQL Server Business Intelligence Development Studio (BI Studio) :

• Le *RTE* constitue une interface facile à utiliser, vous aidant à créer des modèles de rapports en quelques étapes. Il prend en charge tous les types d'éléments de rapport et la plupart des options de configuration respectives.

Création intelligente de rapports

Avec RTE, vous ne pouvez pas modifier des modèles créés avec BI Studio. Si vous devez modifier de tels modèles dans RTE, contactez le Support clientèle Agilent.

• *BI Studio* comporte la gamme compète des fonctions. En revanche, travailler avec BI Studio exige d'avantage de connaissances concernant le développement de modèles. Pour plus d'informations, reportez-vous au *G4635-90007 Manual for Report Template Designers* (Manuel des concepteurs de modèles de rapports). Ce manuel est accompagné de OpenLAB ECM Intelligent Reporter. Contactez Agilent pour recevoir une copie de ce manuel. Ce manuel contient aussi des descriptions détaillées des modèles de rapport Agilent livrés avec OpenLAB ECM Intelligent Reporter. Ces modèles sont conçus spécifiquement pour un usage dans BI Studio et contiennent la plupart des fonctionnalités avancées non disponibles dans RTE.

Dans BI Studio, vous pouvez modifier tous les modèles de rapports, qu'ils aient été créés avec RTE ou avec BI Studio.

#### Champs de données

Vous pouvez accéder à tous les résultats générés par ChemStation pendant une acquisition. Pour chaque valeur, vous pouvez sélectionner le champ de données respectif dans lequel la valeur est enregistrée. Vous pouvez modifier la disposition des champs de données dans le modèle de rapport selon vos besoins. Les champs de données disponibles sont répartis dans les catégories suivantes :

- Séquence
- Échantillon
- Injection
- Signal
- Composé
- Pic
- Courbe d'étalonnage
- Instrument
- Fichier
- Projet

#### Éléments de rapport

Vous pouvez ajouter divers éléments à un modèle de rapport selon vos besoins. Pour chaque élément de rapport, vous pouvez configurer plusieurs propriétés telles le format des polices, la couleur du fond, les expressions, etc. Les éléments de rapport suivants sont disponibles :

- · Champs de texte
- · Champs de données
- Tableaux
- Matrices
- Groupes composites
- Images
- Chromatogrammes
- Courbes détalonnage
- Spectre
- Diagrammes
- Informations sur les méthodes

#### Parcelles

L'éditeur de modèles de rapports comporte des parcelles, éléments ou groupes d'éléments de rapport, que vous pouvez insérer dans votre modèle de rapport par un tirer-lâcher.

Ces parcelles sont, par exemple, des tableaux préconfigurés pour des résultats de composés ou de conformité du système, des chromatogrammes pour un tracé de signal simple ou multiple ou des graphiques de contrôle pour la précision d'étalonnage ou la stabilité du temps de rétention. Vous pouvez les utiliser comme point de départ et les ajuster selon vos besoins. Création intelligente de rapports

#### Calcul personnalisé

Dans l'Éditeur de modèles de rapports, vous pouvez afficher les valeurs des champs de données telles qu'elles sont produites par la ChemStation ou calculer de nouvelles valeurs pour des usages différents. Vous pouvez créer des expressions à l'aide des champs de données existants et aussi à l'aide des champs personnalisés.

Vous pouvez enregistrer les valeurs comme des variables et accéder à ces variables issues d'un élément de rapport ultérieur dans le modèle.

L'éditeur de modèles de rapports comporte un éditeur d'expressions pour vous aider à créer des expressions valides. Toutes les expressions sont basées sur Microsoft Visual Basic.

#### Formatage conditionnel

Vous pouvez configurer certaines propriétés d'un champ ou d'une cellule, selon les valeurs résultant de l'expression. Par exemple, si la quantité de composé est affichée, vous pouvez créer une condition pour qu'un fond rouge apparaisse si la quantité dépasse une certaine valeur.

#### Données de démonstration

Lorsque vous développer un nouveau modèle de rapport dans la vue Mise en page de rapport, la ChemStation fournit des données de démonstration affichées dans l'éditeur de modèles de rapports lorsque vous modifiez ou prévisualisez le modèle. Les données de démonstration correspondent à l'ensemble de données (séquence ou analyses simples) sélectionnées actuellement dans la Table de navigation de la vue **Data Analysis**. Si vous développez un modèle pour un rapport récapitulatif de séquence, vous devez charger une séquence dans la vue Analyse de données et sélectionnez un sous-ensemble d'échantillons. Si vous développez un modèle pour un rapport d'injection simple, il est suffisant de sélectionnez un seul échantillon dans la vue Analyse de données.

# Enregistrement des modèles de rapports

La ChemStation comporte un certain nombre de modèles de rapports prédéfinis. Ces modèles par défaut se situent dans le répertoire chem32\repstyle.

Pour les séquences, les modèles utilisés pour les rapports récapitulatifs et pour les rapports d'injection simple se situent dans le jeu de résultats au même niveau que les méthodes de séquence. Aucun modèle de rapport n'est enregistré au niveau du fichier de données d'une séquence.

Pour des échantillons simples, le modèle de rapport se situe dans le fichier de données.

#### Boîte de dialogue Rechercher des modèles

Si vous recherchez des modèles de rapports dans les boîtes de dialogue Sequence Parameters ou Specify Report, vous pouvez synchroniser les modèles dans le répertoire des modèles par défaut et dans l'ensemble des résultats.

#### 8 Création de rapports

Création intelligente de rapports

Aaster Templates	-				- Besult Se	t Templates			
emplate	<b>(1)</b>	Last saved		•	Template	2	Last save	ed	
- C:\Chem3	2\REPSTYLE		_				DEF LC 20	10-08-19 08-5	55-48
Calibra	tion	8/10/2010 10:49:00 AM				Short Area	8/10/2	010 10:49:08 A	M
Extend	ed Sequen	8/10/2010 10:48:58 AM				Short Amount	8/10/20	010 10:49:06 A	AM
GLP+S	hort	8/10/2010 10:48:42 AM				-	$\sim$		
- 📄 Sample	_Summary	8/10/2010 10:48:56 AM					5		
- Short		8/10/2010 10:48:46 AM	3						
- Short_/	Acquisition	8/10/2010 10:48:52 AM	<u> </u>						
- Short_	Acquisition	8/10/2010 10:49:02 AM							
- Short_/	Acquisition	8/10/2010 10:49:04 AM							
- Short_	Acquisition	8/10/2010 10:48:48 AM							
- Short	_Amount	8/10/2010 10:49:06	AM						
Short_	_Area	8/10/2010 10:49:08	AM						
-B Short	Quantification	8/10/2010 10:48:54 AM							
🚊 🧰 ja-JP					9				
📄 Cal	ibration	8/10/2010 7:37:16 PM							
📄 Ext	ended_Seq	8/10/2010 7:37:16 PM							
- 📄 GLF	P+Short	8/10/2010 7:37:18 PM							
- 📄 Sar	nple_Summ	8/10/2010 7:37:20 PM							
- 📄 Sho	ort	8/10/2010 7:37:20 PM	4)						
- 📄 Sho	ort_Acquisit	8/10/2010 7:37:22 PM	_						
- 📄 Sho	ort_Acquisit	8/10/2010 7:37:22 PM							
- 📄 Sho	ort_Acquisit	8/10/2010 7:37:24 PM							
- Sho	ort_Acquisit	8/10/2010 7:37:24 PM							
Shi	ort_Amou	8/10/2010 7:37:26 Pl	м						
Shi	ort_Area	8/10/2010 7:37:28 Pl	м						
Sho	ort_Quantifi	8/10/2010 7:37:28 PM							
	4GE								
zh-CHS		0/10/2010 7:47:07 2:1		•					
:1=1 ( Al	Intation	ATTO/20017347306 PM							

Figure 36 Boîte de dialogue Browse for Report Templates in Result Set

- 1 Sur le côté gauche, vous voyez les modèles du répertoire des modèles par défaut (chem32/repstyle).
- 2 Sur le côté droit, vous voyez les modèles du jeu de résultats actuellement chargé.
- 3 Pour chaque modèle, vous voyez la date de son dernier enregistrement. L'info-bulle de la date affiche la dernière entrée du modèle.
- 4 Les modèles peuvent également être stockés dans des sous-dossiers de chem32/repstyle.
- 5 Les modèles courants pour le jeu de résultats et le répertoire des méthodes par défaut sont affichés en caractères gras. Les modèles sont appariés seulement par nom.
- 6 Vous pouvez copier des modèles entre le répertoire des modèles par défaut et le jeu de résultats par un tirer-lâcher ou à l'aide du bouton >.

#### Gestion des fichiers de données avec la Création de dossiers uniques désactivée

Avec l'option Création de dossiers uniques désactivée, les modèles de rapports récapitulatifs de séquence et d'injection simple sont toujours référencés à partir du répertoire de modèles par défaut (chem32\repstyle).

# Enregistrement des rapports créés

#### Désignation des fichiers pour des rapports d'injection simple

Lorsque vous attribuez un nom de fichier à un rapport d'injection simple dans la boîte de dialogue **Specify Report**, vous pouvez utiliser les jetons suivants :

- <Date> date du jour
- <Heure> heure actuelle
- <SéqN> nom du fichier de séquence (sera "\_" pour un échantillon simple)
- <Cont> nom du jeu de résultats (sera "\_" pour un échantillon simple)
- <ÉchanN> nom d'échantillon
- <Lims> LimsID
- <InjD> date et heure de l'injection
- · <Fichier> nom du fichier de données
- · <Eemp> emplacement de l'échantillon

#### Désignation des fichiers pour les rapports récapitulatifs de séquence

Lorsque vous attribuez un nom de fichier à un rapport récapitulatif de séquence dans l'onglet **Sequence Output** de la boîte de dialogue **Sequence Parameters**, vous pouvez utiliser les jetons suivants :

- <Date> date du jour
- <Heure> heure actuelle
- <SéqN> nom du fichier de séquence
- <Cont> nom du jeu de résultats

# Modèles de rapport du système de stockage central de données

Si vous utilise un système de stockage central de données, les modèles de rapport sont traités comme type de document individuel. Vous pouvez charger des modèles vers le système de stockage central de données, télécharger des modèles depuis un système de stockage central de données, ou mettre à jour tous les modèles de rapports locaux au moyen de la dernière version du système de stockage central de données.

# Création de rapports classique

# Édition des résultats

Deux types de rapport sont disponibles :

- un rapport non étalonné qui ne corrige pas la réponse de détecteur et
- un rapport étalonné dont la différence de réponse de détecteur à plusieurs composés de l'échantillon est corrigée.

#### **Rapports non étalonnés**

Les rapports non étalonnés incluent les rapports **Area**% et **Height**%. Ces rapports sont principalement utilisés dans le cadre de la préparation des rapports étalonnés. Ils peuvent faire office de rapports finaux si les quantités nécessaires pour générer une réponse d'aire ou de hauteur d'unité pour les composés considérés sont similaires.

#### **Rapports étalonnés**

Les rapports étalonnés corrigent la différence de réponse de détecteur aux composés rapportés. Un ou plusieurs étalons contenant des quantités connues de composés rapportés doivent être analysés dans les mêmes conditions que l'échantillon inconnu. Les données d'intégration provenant de ces étalons permettent de préparer une table d'étalonnage. Il s'agit d'une liste des temps de rétention/migration, des quantités et des réponses, utilisée dans la génération du rapport. Les rapports étalonnés reposent sur deux procédures d'étalonnage appelées « étalon externe » et « étalon interne ».

#### Rapport d'étalon externe

Le rapport ESTD répertorie les résultats avec les unités de votre choix ou avec chaque composé comme pourcentage de tous les composés présents. La procédure d'étalon externe exige la connaissance précise du volume injecté relatif des étalons et des échantillons inconnus. La fiabilité du rapport d'étalon externe est limitée par la reproductibilité de l'injection et d'autres facteurs susceptibles de varier d'un échantillon à l'autre. Création de rapports classique

#### Rapport d'étalon interne

La procédure d'étalon interne permet de surmonter les limites de la procédure d'étalon externe. Une quantité connue précise (pas nécessairement la même) de l'étalon interne est ajoutée aux étalons et à l'échantillon inconnu. Le temps de réponse de chaque composé concerné est divisé par le temps de réponse nécessaire à l'étalon interne pour fournir un rapport de réponse. Les courbes d'étalonnage représentent un tracé de ce rapport de réponse et du rapport de quantité. Ces données sont utilisées dans le calcul des résultats rapportés. Ainsi, les erreurs de volume d'injection ou les légères modifications apportées au chromatographe/à l'électrophérogramme et affectant tous les composés de façon similaire sont annulées. Le rapport ISTD répertorie les résultats dans les unités de votre choix.

#### **Rapport de tableaux**

Le rapport de tableaux suit un résultat unique de plusieurs analyses pour un composé étalonné précis. La fonction **Control Chart** est installée une fois que ChemStation est opérationnel. Les méthodes utilisant cette fonction transmettent le résultat suivi à une feuille de calcul Microsoft Excel après chaque analyse. Le tableur Excel est ensuite utilisé pour imprimer le rapport.

# **Résultats quantitatifs**

Le type de rapport est identifié par le nom de la méthode de calcul utilisée pour le préparer (par exemple, un rapport ISTD). Chaque type est décrit brièvement ci-dessous. Les calculs effectués pour chaque rapport sont fournis dans « Résultats quantitatifs », page 180.

**Area%** fournit le rapport le plus concis et ne requiert aucune donnée d'étalonnage, car la différence de réponse de détecteur des composés d'échantillon n'est pas corrigée. Le rapport Area% (% aire) s'avère particulièrement utile pour développer une table d'étalonnage afin de l'utiliser avec les autres options de rapport. Ce rapport convient aux analyses dans lesquelles la différence de réponse de détecteur des composés n'est pas significative.

**Height%** fournit un rapport semblable au rapport Area% (% aire), à la différence près que c'est la hauteur et non l'aire du pic qui sert aux calculs.
**Norm%** fournit un rapport dans lequel chaque composé est rapporté comme pourcentage de tous les composés présents. La réponse du détecteur des pics est corrigée avant le calcul de chaque pourcentage.

**ESTD** génère un rapport de la quantité réelle de chaque substance dans les unités de votre choix. Les quantités sont calculées par le biais d'une table d'étalonnage créée précédemment. L'utilisation d'un étalon externe exige la connaissance du volume injecté du mélange étalon.

**ESTD%** génère un rapport de la quantité relative de chaque substance comme pourcentage de l'échantillon injecté. Les quantités sont calculées par le biais d'une table d'étalonnage créée précédemment. L'utilisation d'un étalon externe exige la connaissance du volume injecté du mélange étalon.

**ISTD** génère un rapport de la quantité réelle de chaque substance. Les quantités sont calculées au moyen d'une courbe d'étalonnage créée précédemment. Grâce à l'utilisation d'un étalon interne dans l'échantillon et le mélange étalon, l'utilisateur n'a pas besoin de connaître ni de contrôler le volume de l'échantillon injecté. Cela corrige également toute variation des performances de l'instrument entre les analyses.

**ISTD%** génère un rapport de la quantité relative de chaque substance comme pourcentage de l'échantillon injecté. Grâce à l'utilisation d'un étalon interne dans l'échantillon et le mélange étalon, l'utilisateur n'a pas besoin de connaître ni de contrôler le volume de l'échantillon injecté. Cela corrige également toute variation des performances de l'instrument entre les analyses.

## Valeurs de champ personnalisé de génération de rapport

Les valeurs des champs personnalisés associés à un échantillon particulier en fonction de sa méthode d'acquisition peuvent être ajoutées au rapport. Les champs personnalisés d'échantillon sont listés à la fin de l'en-tête de rapport qui contient les informations générales d'échantillon. Les champs personnalisés de composé apparaissent à la fin du rapport.

Création de rapports classique

## Styles de rapports

Pour ajouter un signal à l'un des styles de rapports, vous devez cocher la case correspondante dans la boîte de dialogue Spécifier le rapport.

Les styles de rapports suivants sont disponibles :

- **None** : aucun texte ne sera inclus dans le rapport. Le chromatogramme n'est inclus dans le rapport que si l'option Ajouter une sortie de chromatogramme est sélectionnée.
- **Short** : inclut les résultats quantitatifs textuels de toutes les acquisitions intégrées définies dans la boîte de dialogue Détails des acquisitions (CPL uniquement) ou Acquisition (CPG uniquement). La largeur de pic dans le rapport abrégé est calculée à l'aide de la formule la plus complexe utilisée par l'intégrateur : LP = 0,3 (point d'inflexion droit point d'inflexion gauche) + 0,7(aire/hauteur).
- **Detail** : inclut l'en-tête, les résultats quantitatifs et les courbes d'étalonnage. L'en-tête est stocké dans un fichier, RPTHEAD.TXT, situé dans le répertoire des méthodes. Vous pouvez modifier l'en-tête à l'aide d'un éditeur de texte si vous souhaitez ajouter un texte spécifique pour la méthode.
- **Header** + **Short** : inclut l'en-tête du fichier et les résultats quantitatifs. L'en-tête est stocké dans un fichier, RPTHEAD.TXT, situé dans le répertoire des méthodes. Vous pouvez modifier l'en-tête à l'aide d'un éditeur de texte si vous souhaitez ajouter un texte spécifique pour la méthode.
- **GLP** + **Short** : inclut l'en-tête, les informations sur l'échantillon, les conditions de l'instrument, le journal, l'acquisition et les résultats quantitatifs. L'en-tête est stocké dans un fichier, RPTHEAD.TXT, situé dans le répertoire des méthodes. Vous pouvez modifier l'en-tête à l'aide d'un éditeur de texte si vous souhaitez ajouter un texte spécifique pour la méthode.
- GLP + Detail : inclut l'en-tête, les informations sur l'échantillon, les conditions de l'instrument, le journal, l'acquisition, les résultats quantitatifs et les courbes d'étalonnage. L'en-tête est stocké dans un fichier, RPTHEAD.TXT, situé dans le répertoire des méthodes. Vous pouvez modifier l'en-tête à l'aide d'un éditeur de texte si vous souhaitez ajouter un texte spécifique pour la méthode.
- **Full** : inclut l'en-tête, les informations sur l'échantillon, les conditions de l'instrument, le journal, les acquisitions et les résultats quantitatifs. L'en-tête est stocké dans un fichier, RPTHEAD.TXT, situé dans le répertoire des méthodes. Vous pouvez modifier l'en-tête à l'aide d'un éditeur de texte si vous souhaitez ajouter un texte spécifique pour la méthode.

• **Performance** : génère un rapport en fonction des limites spécifiées dans la boîte de dialogue Modifier les limites de performances du menu Conformité du système.

Pour les méthodes non étalonnées, les paramètres du rapport incluent le numéro du pic, le temps de rétention/migration, l'aire et la hauteur du pic, la description du signal, la largeur vraie du pic à mi-hauteur (reportez-vous également à *Largeur de pic réelle Wx[min]* dans le Guide de référence, la symétrie, k', l'efficacité (plateaux) et la résolution pour chaque pic.

Pour les méthodes étalonnées, les paramètres du rapport incluent le numéro du pic, le temps de rétention/migration, le nom du composé, la quantité, la description de l'acquisition, la vraie largeur du pic à mi-hauteur, la symétrie, k', l'efficacité (plateaux) et la résolution pour chaque pic.

Le calcul du pic à mi-hauteur est différent de la formule de calcul de largeur de pic la plus complexe utilisée par l'intégrateur. Les valeurs d'efficacité et de résolution sont basées sur la largeur de pic calculée. L'en-tête du rapport reprend toutes les informations pertinentes pour la méthode, y compris l'instrument, la colonne/capillaire, l'échantillon et les paramètres d'acquisition. Le signal est également tracé.

- **Performance** + **Noise** : combine le style de rapport Performances avec les calculs des plages de bruits définies dans la boîte de dialogue Modifier une plage de bruits du menu Conformité du système. En outre, le bruit est calculé comme six fois l'écart-type, en tant que bruit pic à pic et bruit ASTM. La dérive et la déviation sont également déterminées.
- **Performance + Extended** : génère un rapport étendu reprenant l'ensemble des paramètres des calculs de performances de pic ainsi que les tracés de chaque pic. Ces tracés incluent la ligne de base, les tangentes, ainsi que les largeurs de pic aux hauteurs définies. Ce type de rapport n'inclut que les pics étalonnés.

En plus des paramètres imprimés pour le style de rapport Performances, d'autres paramètres de performances de pic sont déterminés : les temps de début et de fin de pic, l'asymétrie, l'excès, la largeur de pic, le facteur de traîne USP, l'intervalle de temps entre les points de données, le nombre de points de données, les moments statistiques, les plateaux, les plateaux par mètre, la sélectivité et la résolution de chaque pic sont imprimés. La largeur de pic, les plateaux, les plateaux par mètre, la sélectivité et la résolution sont calculés à l'aide des méthodes vraie à mi-hauteur, de tangente, de traînée et 5 sigma (pour plus d'informations, reportez-vous à *Définition des tests de performances*). Création de rapports classique

L'en-tête du rapport reprend toutes les informations pertinentes pour la méthode, notamment l'instrument, la colonne/le capillaire, l'échantillon et les paramètres d'acquisition, ainsi qu'un tracé du signal. Pour une liste complète des algorithmes des paramètres de performances des pics, reportez-vous aux *Définitions des tests de performances* dans le Guide de référence.

Les styles de rapport spectral (Short + Spectrum, Detail + Spectrum, Performance + Library Search) sont décrits dans le manuel *Comprendre votre module spectral*.

#### Ajout d'un rapport personnalisé aux styles de rapport

Vous pouvez ajouter à la liste des styles de rapport disponibles un modèle de rapport personnalisé, créé dans la vue Mise en page de rapport de ChemStation.

#### REMARQUE

Tous les rapports, à l'exception des rapports de performances, répertorient les largeurs de pic calculées à l'aide d'une formule plus complexe employée par l'intégrateur (pour plus d'informations sur les calculs de largeur de pic, reportez-vous à *Largeur de pic* dans le Guide de référence).

## Autres paramètres de style de rapport

#### Table de sommation des pics

La table de sommation des pics est proposée pour certaines applications de l'industrie pétrochimique et de l'industrie pharmaceutique qui peuvent être améliorées à l'aide des fonctions suivantes :

- · Somme des aires des pics qui rentrent dans la plage définie par l'utilisateur
- Somme des aires d'une plage de pics et calculs à l'aide d'un seul multiplicateur
- Somme des aires de tous les pics portant le même nom

Lorsque le rapport est généré, ChemStation utilise la table de sommation des pics pour créer un rapport de sommation des pics imprimé une fois les calculs de rapport standard effectués, à l'exception de Norm% (% norm) qui est remplacé par le rapport de sommation des pics.

#### Mise en page de rapport pour pics non étalonnés

Pour modifier la mise en page de rapport pour pics non étalonnés, choisissez l'une des options suivantes dans la boîte de dialogue Specify Report (Spécifier le rapport).

- Utilisez l'option Separately (Séparément) pour rapporter les pics non étalonnés dans une table distincte si le tri par temps de rétention/migration est sélectionné, ou dans des tables distinctes si le tri par signal est sélectionné.
- Utilisez l'option With Calibrated Peaks (Pics étalonnés) pour rapporter les pics non étalonnés et les pics étalonnés.
- Utilisez l'option Do Not Report (Ne pas rapporter) pour supprimer le rapport des pics non étalonnés.

## Rapport récapitulatif de séquence

#### Présentation

ChemStation peut imprimer toute une série de rapports standard pour les analyses d'échantillon individuelles. Le rapport récapitulatif de séquence est un autre moyen de générer un rapport. Il permet de calculer et d'inclure dans un rapport les paramètres de différentes analyses. Il s'avère particulièrement utile, par exemple pour tester la stabilité d'un instrument ou la fiabilité d'une nouvelle méthode.

Un rapport récapitulatif de séquence peut inclure les éléments suivants :

- une page de titre,
- la configuration de l'instrument, y compris ses numéros de version et les détails de la colonne d'analyse/du capillaire utilisés,
- les listes de la table de séquence décrivant la séquence automatisée des analyses qui doit être réalisée,
- les descriptions du journal expliquant les opérations effectuées par la séquence et détaillant les événements inattendus relevés au cours de cette séquence,
- · les listes de méthodes,
- · des rapports individuels pour chaque échantillon,

#### 8 Création de rapports

Création de rapports classique

- des statistiques sur les analyses, sur la base des critères sélectionnés, sachant que *les statistiques sont calculées pour les composés étalonnés uniquement* et
- une table des matières incluant les numéros de page afin d'accéder facilement aux différentes sections du rapport.

#### Configuration d'un rapport récapitulatif de séquence

Lors de la configuration d'un rapport récapitulatif de séquence, vous pouvez sélectionner n'importe quelle combinaison des neuf catégories décrites ci-après, en cochant les cases d'option correspondantes et, le cas échéant, en choisissant un style de rapport parmi les modèles proposés. Chaque modèle spécifie le contenu et la mise en page d'une section précise de l'ensemble du rapport récapitulatif de séquence.

Choisissez l'un des styles de rapports récapitulatifs de séquences suivants :

#### **One Page Header**

Le modèle GLP imprime GLP en majuscules sur la page de titre du rapport qui suit. Il inclut également la date et une zone réservée à la signature.

#### Configuration

Sélectionnez l'option **Configuration** pour inclure dans votre rapport la configuration de l'instrument ainsi que les caractéristiques techniques de la colonne d'analyse/du capillaire.

#### Sequence Table

Sélectionnez l'option **Sequence Table** pour inclure dans le rapport la liste des échantillons, des paramètres de quantification des échantillons et des noms de méthodes. Cette liste affiche les analyses que le système est censé effectuer.

#### Logbook

Sélectionnez l'option **Logbook** pour inclure dans le rapport la liste des analyses effectuées par le système, y compris les conditions des instruments ainsi que tout événement inhabituel susceptible d'être survenu au cours de l'analyse des échantillons.

#### Methods

Sélectionnez l'option **Methods** pour inclure la liste des méthodes d'analyse utilisées dans le cadre d'une série d'analyses automatisées.

#### **Analysis Reports**

Sélectionnez l'option **Analysis Reports** pour générer des rapports d'analyse individuels suivant le style de rapport défini pour la méthode.

Vous pouvez imprimer un rapport individuel après chaque analyse, en fonction du style de rapport spécifié pour la méthode concernée, en plus des sections de rapport définies dans le **Sequence Summary Reporting**. Reportez-vous à la section Sortie de séquence ci-après.

### SUILabel Type = Application > Statistics for Calibrated and Sample Runs

Sélectionnez l'option Statistiques pour les analyses d'échantillon, pour obtenir une analyse statistique des tendances portant sur les échantillons d'étalonnage. Si vous sélectionnez l'option **Statistics**, vous obtenez une analyse statistique des tendances portant sur les échantillons inconnus. Ces deux options proposent deux styles de modèle : statistiques standard et statistiques étendues. L'option **Extended Statistics** permet d'imprimer la tendance statistique des analyses sous forme graphique, tandis que l'option **Standard Statistics** présente les résultats sous forme de texte seul. Les sélections effectuées dans la boîte de dialogue **Items and Limits for Extended Statistics** sont utilisées uniquement lorsque vous choisissez l'option (ou les options) **Extended Statistic** dans la boîte de dialogue **Sequence Summary Parameters**.

Si vous sélectionnez les options **Standard Statistic** dans la boîte de dialogue **Sequence Summary Parameters**, les statistiques incluses dans le rapport porteront sur les paramètres suivants :

- temps de rétention/migration,
- aire,
- hauteur,
- quantité,
- largeur de pic, en fonction du style de rapport (reportez-vous à « Styles de rapports », page 182),
- symétrie.

Création de rapports classique

Les calculs statistiques ne distinguent pas les différents niveaux d'étalonnage au sein d'une séquence faisant appel à des méthodes d'étalonnage multiniveaux. En d'autres termes, les paramètres tributaires du niveau de concentration, comme par exemple l'aire, la hauteur ou la quantité (voir la boîte de dialogue Options et limites des statistiques étendues), sont tous regroupés, quel que soit le niveau d'étalonnage. Les **Statistics for Calibration Runs** n'ont donc aucun intérêt pour les méthodes d'étalonnage multiniveaux dans les séquences.

#### Récapitulatif

L'option **Summary** permet d'imprimer une vue d'ensemble de la série d'échantillons analysés et des méthodes adoptées. Si l'option Récapitulatif est sélectionnée avec d'autres options de récapitulatif de séquence, les numéros de page faisant référence à d'autres sections du rapport récapitulatif de séquence seront inclus. Il existe deux styles de récapitulatifs :

Le style **Sample Summary** présente sous forme de tableau les informations relatives aux analyses d'échantillons effectuées dans la séquence, ainsi que certaines informations relatives à l'échantillon, comme par exemple le nom de l'échantillon, le nom du fichier de données, la méthode et le numéro de flacon.

Le style **Compound Summary** présente sous forme de tableau les analyses d'échantillon et les résultats de quantification de base pour chaque composé étalonné, ou pour chaque pic, en fonction du type de rapport spécifié dans la méthode.

#### Sortie de séquence

La boîte de dialogue **Sequence Output** permet de définir la sortie d'impression du rapport récapitulatif de séquence.

Si vous choisissez **Report to file** et que vous indiquez un nom de fichier, le rapport sera enregistré dans le fichier spécifié. Par défaut, les données sont enregistrées dans le fichier GLPrprt.txt. Sur les systèmes CPG équipés d'un dispositif à injection double, les données sont enregistrées dans les fichiers GLPrptF.txt et GLPrptB.txt pour l'injecteur avant et l'injecteur arrière, respectivement.

L'option **Report to PDF** permet d'enregistrer le rapport dans un document PDF. Le rapport est enregistré dans le dossier de séquence, sous le nom CLPrprt.PDF L'option **Report to HTM** permet d'imprimer le rapport au format HTML. Le rapport sera alors enregistré dans le répertoire HTM du répertoire de données spécifié au niveau des **Sequence Parameters**. Le rapport HTM se compose d'un fichier d'index (index.htm) et d'au moins deux autres fichiers : un fichier de contenu (contents.htm) et un fichier GIF (Graphics Interchange Format) pour chacune des pages du rapport (ex. : page1.gif). Pour afficher le rapport html, ouvrez le fichier d'index dans votre navigateur.

L'option **Report to printer** permet d'envoyer le rapport à l'imprimante système. L'impression des rapports propres à chaque analyse entraîne également l'impression des rapports d'échantillon après chaque analyse. Ces rapports sont imprimés en plus de ceux spécifiés pour le rapport récapitulatif de séquence, générés au terme de la séquence complète. Vous pouvez indiquer une nouvelle destination pour ces rapports dans la boîte de dialogue **Sequence Output** ou utiliser la destination spécifiée dans chaque méthode.

## Formats des fichiers de rapport

Il existe quatre formats d'enregistrement de rapports. Chaque format a une extension spécifique. Il est possible de sélectionner plusieurs formats pour un même rapport.

- .TXT Le texte du rapport est imprimé en tant que fichier texte UNICODE.
- **.EMF** Chaque graphique du rapport (courbe d'étalonnage ou signal) est enregistré dans un métafichier Microsoft Windows (WMF). Un même rapport peut parfaitement inclure plusieurs fichiers .WMF. Le format de fichier généré est conforme au format de métafichier standard de Microsoft, tel qu'il est défini dans la documentation de développement de logiciels Windows. Ces fichiers sont compatibles avec le format Aldus Placeable Metafile (APM) utilisé par de nombreux progiciels propriétaires.
- .DIF Les données de rapports sous forme de tableau sont enregistrées au format Data Interchange Format (DIF). Ce format est compatible avec les tableurs tels que Microsoft Windows EXCEL. Quel que soit le style de rapport sélectionné, seules les informations du style de rapport Court sont enregistrées.

#### 8 Création de rapports

Création de rapports classique

**.CSV** Dans les rapports avec l'extension CSV (Comma Separated Values), les valeurs sont séparées par une virgule. Ce format très simple permet de représenter des données tabulées et est accepté par la plupart des tableurs et bases de données. Quel que soit le style de rapport sélectionné, seules les informations du style de rapport Court sont enregistrées.

Un même rapport peut contenir plusieurs fichiers .DIF et .CSV. Pour chaque bloc de rapport, le premier fichier, par exemple, REPORT00.CSV, doit contenir les informations d'en-tête. Les fichiers suivants contiennent les résultats tabulés.

Si les résultats sont triés par temps de rétention/migration, un seul fichier est requis pour la table entière, par exemple REPORT01.CSV.

Si les résultats sont triés par signal, une table distincte est alors nécessaire pour chaque signal. Dans ce cas, les fichiers sont nommés Report01.CSV, puis RapportNN.CSV, NN correspondant au numéro du signal.

- **.XLS** Le rapport est exporté dans une feuille de calcul Microsoft Excel, au format XLS. Les données nécessitent généralement un traitement supplémentaire.
- .PDF Le rapport est enregistré dans un fichier .pdf. Lors de l'installation, la ChemStation installe une imprimante PDF appelée "PDF-XChange 4.0". Au redémarrage de l'ordinateur, cette imprimante disparaît du menu Démarrer/Paramètres/Imprimantes et télécopieurs. Lors du démarrage de la ChemStation, une autre imprimante temporaire, appelée "ChemStation PDF", est créée à partir de l'imprimante PDF-XChange. Tant qu'une session de la ChemStation est en cours, l'imprimante ChemStation PDF apparaît dans le menu Démarrer/Paramètres/Imprimantes et télécopieurs. L'option Unique pdf file name permet d'enregistrer les rapports .pdf indépendamment des rapports, sous le nom <nom\_conteneur\_séquence>\_<nom\_fichier\_données>.pdf



9

# Principes et fonctions propres à l'EC

Fonctions propres à l'EC ChemStation Agilent dans la vue Méthode et Contrôle de méthode et d'analyse 192

Table de flacons 192 Table de conflit de méthode 193 Table de conflit de séguence 194 Simulation de méthode 194 Type de sommet de pic 195 Types d'étalonnages 196 Étalonnages basés sur le temps de migration 197 Étalonnage à l'aide de la correction de mobilité 197 EC-DDM 199 Retrait du bruit de fond 199 Sous-répertoires de méthode pour différents modes EC 200

Ce chapitre ne vous concerne que si vous utilisez le logiciel ChemStation pour contrôler des instruments EC.



Fonctions propres à l'EC ChemStation Agilent dans la vue Méthode et Contrôle de méthode et d'analyse

## Fonctions propres à l'EC ChemStation Agilent dans la vue Méthode et Contrôle de méthode et d'analyse

## **Table de flacons**

#### REMARQUE

La fonctionnalité **Vial Table** n'est disponible que pour les sessions en ligne de la ChemStation.

La Vial Table est une table qui associe les flacons du plateau à des échantillons et surtout à des flacons destinés à des tâches précises, comme les tampons, le flacon de rinçage, le flacon de nettoyage et le flacon de récupération. La Vial Table est liée à la table de séquence. Lorsqu'une séquence est chargée, les informations de la table de séquence sont copiées dans la table de flacons. Toutefois, les entrées de la table de flacons ne sont pas répercutées dans la table de séquence. La boîte de dialogue Vial Table Advanced Settings apparaît lorsque vous cliquez sur le bouton Advanced dans la Vial Table. Elle vous permet d'activer des avertissements de conflits entre la Vial Table, la méthode ou la séquence et l'utilisation de noms symboliques. Vous devez sélectionner Enable vial table checks and warnings pour contrôler les conflits entre la Vial Table et la méthode ou la séquence.

Lorsqu'une méthode ou une séquence est chargée, un contrôle de cohérence est effectué entre les attributions de flacons dans la **Vial Table** et celles de la méthode ou de la séquence. Les éventuels conflits d'attribution de flacons se règlent facilement à l'aide des tables **Conflict**.

#### **REMARQUE** La position 49 du plateau de flacons est réservée au flacon de rinçage de l'aiguille et la position 50 est laissée libre pour permettre le retour du mécanisme de levage du flacon. Ces positions ne sont pas disponibles dans la **Vial Table**.

La colonne **Used in** de la Table de flacons permet de préciser l'utilisation du flacon. Il existe cinq entrées valides pour les champs **Used in** :

- Don't Care Aucun contrôle de cohérence n'est effectué
  - Method Le flacon est référencé dans la méthode

#### Principes et fonctions propres à l'EC 9

Fonctions propres à l'EC ChemStation Agilent dans la vue Méthode et Contrôle de méthode et d'analyse

**Sequence** Le flacon est référencé dans la table de séquence

**System** Il s'agit d'un flacon spécial appartenant à la configuration du système. Le **Name** doit être l'un des noms symboliques suivants :

- **@INLET** le flacon d'entrée
- **@OUTLET** le flacon de sortie
- **@FLUSH** le flacon de rinçage
- **@WASTE** le flacon de déchets
- Oclean tubes le flacon utilisé pour le nettoyage des tubes
- **@USER X** (où x peut être un nombre entre 1 et 10) l'emplacement de la séquence

Cette option permet d'indiquer les numéros de chaque flacon correspondant aux noms symboliques utilisés dans la méthode. L'utilisateur peut ainsi indiquer des flacons différents pour Référence d'entrée, Référence de sortie, Remplissage, Préconditionnement, Postconditionnement, etc. pour chaque ligne de la séquence.

Not Used II n'y a aucun flacon dans cette position

## Table de conflit de méthode

La **Method Conflict Table** apparaît lorsque vous chargez une méthode dont les flacons définis entrent en conflit avec les flacons définis dans la table de flacons. La **Method Conflict Table** est composée de deux parties : la partie gauche contient une image de la **Vial Table**, la partie droite représente les flacons en conflit.

Pour résoudre les conflits, vous pouvez choisir de remplacer (flèche simple) ou de déplacer le flacon de la méthode vers la position libre suivante dans la **Vial Table** (flèche double). Cette opération est possible pour chaque flacon en conflit dans la table.

Lorsque des flacons définis par l'utilisateur (avec des noms symboliques @User1, @User2, etc.) sont utilisés, le test de conflit ne peut pas être effectué sur ces flacons. En effet, en l'absence d'informations de séquence, il est impossible de savoir s'il existe un conflit.

#### **9** Principes et fonctions propres à l'EC

Fonctions propres à l'EC ChemStation Agilent dans la vue Méthode et Contrôle de méthode et d'analyse

## Table de conflit de séquence

La **Sequence Conflict Table** apparaît lorsque vous configurez ou chargez une séquence dont les flacons définis entrent en conflit avec les flacons définis dans la table de flacons. La **Sequence Conflict Table** est composée de deux parties : la partie gauche contient une image de la **Vial Table**, la partie droite représente les flacons en conflit.

Pour résoudre les conflits, vous pouvez choisir de remplacer les informations de la **Vial Table** par celles de la **Sequence Table**. Si le conflit est lié à une entrée système, elles ne peuvent pas être remplacées. Vous pouvez choisir de fermer la **Sequence Conflict Table** sans résoudre les conflits.

Lorsque des flacons définis par l'utilisateur (dans les colonnes User1, User2, etc.) sont utilisés, le test de conflit ne peut pas être effectué. En effet, en l'absence d'informations relatives à la méthode, il est impossible de savoir s'il existe un conflit.

## Simulation de méthode

Vous pouvez utiliser la fonction de simulation pour vérifier votre méthode. Au cours de la simulation, le diagramme reflète les actions qui seraient effectuées au cours de la méthode : les flacons spécifiés dans la méthode sont présentés et soulevés, la puissance et la tension appliquées apparaissent comme s'il s'agissait d'une analyse réelle. La simulation n'est pas aussi longue qu'une véritable analyse : chaque étape dure environ 3 secondes. Une étape est définie par une modification du diagramme EC.

Pour démarrer une simulation, chargez la méthode à simuler et sélectionnez **Simulation** dans le menu **Instrument**.

## Type de sommet de pic

Contrairement aux pics CPL, CPG ou SM, il est normal que les pics EC soient asymétriques. En raison de cela, il est très important de pouvoir sélectionner des paramètres d'intégration qui produiront le plus haut degré d'exactitude et de reproductibilité possible dans vos résultats de quantification.

Les types de sommet de pic suivants sont disponibles lorsque vous sélectionnez **Peak Top Type** dans le menu déroulant **Integration** :

#### Highest Point (Point le plus élevé)

- sélectionné lorsque le pic est de forme triangulaire, et
- lorsque vous travaillez avec différentes concentrations

#### Parabolic Interpolation (Interpolation parabolique)

• utilisée pour la traînée, pics non séparés

#### Center of Gravity (Centre de gravité)

- fournit des calculs plus précis, avec des pics de forme triangulaire
- · échantillons avec des concentrations similaires

#### Gauss Fit (Méthode gaussienne d'ajustement)

• utilisé pour des pics symétriques

9 Principes et fonctions propres à l'EC Types d'étalonnages

## Types d'étalonnages

L'étalonnage par étalon est basé sur l'aire de pic ou la hauteur du pic. Lorsque vous sélectionnez **Standard Calibration**, vous pouvez **Calculate Signals Separately** ou **Calculate with Corrected Areas**.

L'option Calculer des signaux séparément est sélectionnée lorsque vous souhaitez vous assurer que, dans le calcul des rapports %Norm, le pourcentage des signaux rapportés séparément atteint 100 % pour chaque signal. Lorsque l'option **Calculate signals separately** est désélectionnée, le pourcentage de tous les signaux cumulés s'élève à 100 %. L'option **Calculate signals separately** doit impérativement être sélectionnée si vous souhaitez trier la table d'étalonnage par signal.

Sélectionnez **Calculate with Corrected Areas** pour corriger l'aide de pic en fonction du temps de migration. Dans ce mode, la surface est divisée par le temps de migration, ce qui peut améliorer la reproductibilité dans l'analyse quantitative lorsque les temps de migration sont instables.

Outre l'étalonnage par étalon, trois étalonnages propres à l'électrophorèse capillaire représentent des signaux basés sur le temps de migration.

Les différents types d'étalonnage sont disponibles dans la liste déroulante de votre table d'étalonnage :

- Standard Calibration
- Protein Molecular Weight Calibration
- DNA Base-Pair Calibration
- Capillary Isoelectric Focusing Calibration

Pour de plus amples informations sur les étalonnages propres à l'électrophorèse capillaire, voir *OpenLAB CDS ChemStation Edition – Référence des principes de fonctionnement.* 

## Étalonnages basés sur le temps de migration

# Utilisation des étalonnages basés sur le temps de migration dans une séquence

Les étalonnages et réétalonnages basés sur le temps de migration peuvent être inclus dans une séquence, mais seuls les étalonnages explicites et les réétalonnages cycliques sont pris en charge. Le réétalonnage encadrant ne l'est pas. Il n'existe pas de rapport récapitulatif de séquence relatif aux étalonnages basés sur le temps de migration.

#### Styles de rapport pour les étalonnages basés sur le temps de migration

Les seuls styles de rapport disponibles pour les étalonnages basés sur le temps de migration sont **Short** (résultats quantitatifs au format texte) et **Full** (en-tête, informations d'échantillon, conditions d'instrument, journal, résultats quantitatifs et tracé de pureté du pic).

## Étalonnage à l'aide de la correction de mobilité

De légères modifications de composition du tampon, de viscosité ou de température d'analyse et d'adsorption au niveau de la paroi capillaire peuvent influencer le flux électro-osmotique (EOF) et le rendre instable. Les changements du flux électro-osmotique peuvent créer un écart type assez élevé des temps de migration. Les corrections de mobilité peuvent réduire considérablement l'effet des décalages de temps de migration d'une analyse à l'autre, en surveillant le temps de migration du pic de référence de mobilité, et augmenter ainsi considérablement la reproductibilité du temps de migration.

Le pic de référence de mobilité doit être choisi avec les priorités suivantes :

- Sélectionner le pic avec le signal le plus élevé.
- Sélectionner le pic le plus isolé.
- Le marqueur EOF ou étalon interne peut également faire office de pic de référence de mobilité.
- Agrandir la fenêtre de recherche pour être certain de trouver le pic de référence de mobilité.

#### 9 Principes et fonctions propres à l'EC

Types d'étalonnages

	<ul> <li>Si plusieurs pics se retrouvent dans la fenêtre de recherche, le pic avec le signal le plus élevé est automatiquement choisi comme pic de référence de mobilité.</li> </ul>
	Il existe deux types de correction de mobilité :
Correction de	La <b>Effective Mobility Correction</b> utilise les mobilités effectives de tous les pics. Les données de rampe de tension et de l'électrophorégramme doivent être disponibles. En outre, travailler avec une correction de mobilité effective permet de déterminer les mobilités effectives réelles de tous les composants d'échan-
mobilité effective	tillon.
Correction de	La <b>Relative Mobility Correction</b> peut s'effectuer en l'absence de données de ten-
mobilité relative	sion, ce qui suppose une tension constante pour toutes les mesures.

## **EC-DDM**

## Retrait du bruit de fond

Lorsque vous sélectionnez l'option de menu **Subtract Background (BSB)**, le dernier spectre de masse sélectionné est retiré de chaque point de l'électrophorégramme actuel. Les données obtenues sont enregistrées dans le même répertoire et sous le même nom que le fichier de données d'origine. Toutefois, l'extension du fichier devient .BSB.

Le nouveau fichier de données devient le fichier de données actuel et l'électrophorégramme dont a été retiré le bruit de fond apparaît. Un enregistrement du nombre des retraits de bruit de fond effectués est conservé dans la section Operator (Opérateur) de l'en-tête du fichier de données.

Si vous visualisez la liste tabulaire des données BSB, vous observerez certainement des différences dues à la précision de la représentation des données.

REMARQUI

Les fichiers texte d'AIDE du module CPL/DDM concernent les paramètres CPL uniquement, et non EC. Certaines fonctions disponibles dans le logiciel CPL/DDM ne le sont pas ou sont sans objet pour les applications EC/DDM, mais sont utilisées dans le module CPL. La fonction **peak matching** ne concerne pas les modules EC-SM et n'est donc pas active. En couplage EC-DDM, la détection UV et SM se produit à des longueurs effectives différentes du capillaire de séparation. En raison de la résolution différente à des longueurs effectives différentes, la correspondance des pics est impossible. Sous-répertoires de méthode pour différents modes EC

## Sous-répertoires de méthode pour différents modes EC

Dans les systèmes EC, les méthodes dépendent du mode EC sélectionné. Elles sont donc stockées dans des sous-répertoires différents du répertoire Method (Méthode) :

<b>CE</b> Stocke les méthodes du mode <b>E</b>	EC
--	----

- **CEC** Stocke les méthodes du mode CEC
- **CEp** Stocke les méthodes du mode EC sous pression
- **CEMS** Stocke les méthodes du mode EC-SM.
- **CEMSp** Stocke les méthodes du mode EC-SM sous pression.

#### Α

bbA Ajouter Add Data Files... Ajouter fichiers de données Add Pause to Queue Aiouter une Pause à la liste d'attente Advanced Avancé Always ask user to choose an option Demandez toujours à l'utilsiateur de choisir une option Analysis Reports Rapports d'analyse Apply Manual Events from Method Appliquer les événements manuels de la méthode Area% % aire Automatic update for selected runs Mise à jour automatique pour les analyses sélectionnées

### B

Back Arrière Back Sample List lite d'échantillons arrière Batch Par lots Blank Vide Bracketing Encadrant Bracketing/Cyclic Encadrant/Cyclique Browse Parcourir Browse for methods in master paths Rechercher des méthodes dans les chemins principaux Browse for Report Templates in Result Set Rechercher des modèles de rapports dans un jeu de résultats Browse for templates in master paths

Rechercher des modèles dans les chemins principaux

#### C

Calculate signals separately Calculer des signaux séparément Calculate Signals Separately calculer des signaux séparément Calculate with Corrected Areas les calculer avec des surfaces corriaées Calibrant Étalon Calibration Étalonnage **Calibration Interval** Intervalle d'étalonnage Calibration Mode Mode d'étalonnage Capillary Isoelectric Focusing Calibration Étalonnage de la focalisation isoélectrique capillaire Character Caractère

ChemStation Administrator Administrateur ChemStation **ChemStation Analyst** Analyste ChemStation ChemStation Data Analysis Analyse de données ChemStation ChemStation Lab Manager Gestionnaire ChemStation Lab ChemStation Operator Opérateur ChemStation **Compound Details** Détails sur les composés Compound Summarv Récapitulatif de composé Computer name Nom de l'ordinateur Configuration Editor Éditeur de configuration **Configure Table Configurer Table** Conflict Conflit Control Chart Tableau Counter Compteur Create New Result Set Créer un nouveau jeu de résultats **Cross-Sequence Summary** Récapitulatif de séquences croisées Current date Date actuelle Current time Heure actuelle

Cyclic Cyclique

#### D

Data Données Data Analysis Traitement des données Data Analysis Navigation table Table de navigation dans l'analyse de données Data Analysis Task Tâche de traitement de données Data Location Emplacement des données Data Storage Stockage des données Datafile Fichier de données Delete temporary Sequence Template after completion Supprimer le modèle de séquence temporaire après achèvement Detail Détail Details Détails Disconnect Déconnecter **DNA Base-Pair Calibration** Étalonnage de la paire de bases d'ADN Download method to instrument Méthode de téléchargement vers l'instrument

#### E

Easy Sequence Séquence simple Easy Sequence Setup Configuration de séquence simple Effective Mobility Correction Correction de mobilité effective Enable vial table checks and warnings Activer les contrôles et avertissements de la table de flacons ESTD% ESTD% (% ESTD) Extended Étendu Extended Statistic Statistiques étendues Extended Statistics Statistiques étendues

## F

File Fichier Fill Samples Remplir échantillons Finish Queue Sequence Terminer la séquence de la file Fract. Start Fract. Lancez Front Avant Full Complet

#### G

GLP GPL

#### Н

Header En-tête Height% % hauteur Hide Masqués

#### 

Import Samples Importer des échantillons Import Samples... Importer des échantillons injection volume volume d'injection injections/vial injections/flacon Instrument Control Contrôle de l'instrument Instrument name Nom de l'instrument Integration Intégration Integration Events Table Table des événements d'intégration ISTD amount quantité d'ISTD ISTD% ISTD% (% ISTD) Items and Limits for Extended Statistics Options et limites des statistiques étendues

## L

Library Search Recherche en bibliothèque Load Charger Load Signal Charger le signal Load Signal Options Charger les options de signal Logbook Journal

#### Μ

Manual Events Événements manuels Manual update ... mise à jour manuelle ... Messages and warnings Messages et avertissements Method Méthode Method and Run Control Contrôle de méthode et d'analyse Method Conflict Table table de conflit de méthode Methods Méthodes

#### Ν

Name Nom Name Pattern Modèle de nom New Nouveau New method from instrument Nouvelle méthode depuis l'instrument No Recalibration Absence de réétalonnage Noise Bruit None Aucun Norm% Norm% (% norm) Number of Samples Nombre d'échantillons

#### 0

One Page Header En-tête sur une page Open Easy Sequence Setup Ouvrir une configuration de séquence simple

## P

Part of method to run Partie de la méthode à exécuter Partial Recalibration Réétalonnage partiel Partial Sequence Séquence partielle Path Chemin d'accès Paths Chemins Peak Top Type Type de sommet de pic peak matching correspondance des pics Pendina En attente Performance Performances Preferences Préférences Preview/Print Sequence... Prévisualiser/Imprimer la séquence Print Imprimer Printer Imprimante Protein Molecular Weight Calibration Étalonnage du poids moléculaire des protéines

## 0

QC Sample Échantillon QC

#### R

Read-Only Lecture seule **Recalculate With Method** Recalculer avec la méthode Recalibration of all Retention/Migration Times Réétalonnage de tous les temps de rétention/migration **Relative Mobility Correction** Correction de mobilité relative Remove Supprimer Remove Manual Events from Method Supprimer les événements manuels de la méthode Remove selected Data Files Supprimer des fichiers de données sélectionnés Report Lavout Mise en page de rapport **Report Templates** Modèles de rapports Report to file Rapport vers fichier Report to HTM Rapport vers HTM Report to PDF Rapport vers PDF Report to printer Rapport vers imprimante reprocess Retraiter Reprocess Retraiter Reprocess Only Retraiter uniquement Reprocessing only Retraitement uniquement

Restore initial order **Bestorer** l'otrdre initial result set jeu de résultats **Result Set Migration** Migration des jeux de résultats Review Révision Run Method Méthode de lancement Run Oueue File d'attente **Run Sequence** Séquence de lancement **Run Time Checklist** Liste de vérification de l'exécution

### S

sample amount quantité d'échantillon Sample Info Informations sur l'échantillon Sample Name Nom d'échantillon Sample Summarv Récapitulatif d'échantillon Sample type Type d'échantillon Sample Type Type d'échantillon Samples Échantillons Samples/Injections Échantillons/Injections Save and Add to Queue Enregistrer et ajouter à la file Save method with Data Enregistrer la méthode avec les données

Screen Écran Select Destination Sélectionner la destination Select Method Path Chemin de méthode Select Sequence Template Sélectionner le modèle de séguence Select Source Sélectionner la source Sequence Séquence Sequence > Create New Result Set Séquence > Créer un nouvel ensemble de résultats Sequence Conflict Table table de conflit de séquence Sequence Diagram Diagramme de séguence Sequence End Fin de la séquence Sequence Location Emplacement de la séquence sequence methods méthodes de séquence Sequence name Nom de séquence Sequence Name Nom de la séguence Sequence Output Sortie de séquence Sequence Parameters Paramètres de séquence Sequence Start Lancement de la séquence Sequence Summary Parameters Paramètres récapitulatifs de séquence Sequence Summary Reporting Rapport récapitulatif de séquence

Sequence Table Table de séquence Short Court shutdown arrêt Signal/Review options Options de signal/Révision Signal/Review Options Options de signal/révision Simple Calibration Étalonnage simple Single Injection Injection simple Single Sequence Summary Récapitulatif de séguence simple Specify Report Spécifier le rapport Spectrum Spectre Standard Calibration Étalonnage par étalon Standard Statistic Statistiques standard Standard Statistics Statistiques standard Starting Vial Location Position du flacon initial Statistics Statistique pour les analyses d'échantillon Statistics for Calibration Buns Statistiques portant sur les analyses d'étalonnage Status État Subtract Background Retrait du bruit de fond

SUILabel Type = Application > Statistics for Calibrated and Sample Runs

SUILabel Type = Application> Statistiques pour les analyses étalonnées et Statistiques pour les analyses d'échantillons

#### Summary

Récapitulatif

#### T

Take over ChemStation Remote Session prendre en main la session ChemStation à distance Target Mass Masse cible

### U

Unique folder Creation Mode de création de dossiers uniques **Unique Folder Creation** Création de dossiers uniques Unique folder Creation OFF Mode Création de dossiers uniques désactivé Unique Folder Creation Off Mode Création de dossiers uniques désactivé Unique Folder Creation OFF Mode Création de dossiers uniques désactivé Unique Folder Creation ON Mode Création de dossiers uniques activé Unique pdf file name Nom de fichier pdf unique Unload Current Dataset Décharger un ensemble de données actives

Update Manual Events of Method mettre à jour les événements manuels de la méthode Update Master Method Mise à jour de la méthode de référenсе Update master methods Mise à jour de méthode de référence Update Methods Mettre à jour les méthodes Upload method from instrument Méthode de chargement depuis l'instrument Use current method Utiliser la méthode active Use method from data file Utiliser la méthode du fichier de données Use reference Utiliser comme référence Use sequence method Utiliser la méthode de séguence Use Sequence Table information Utiliser la table de séquence Used in Utilisation dans User name Nom d'utilisateur

#### V

Vial Table Table de flacons Vial Table Advanced Settings Paramètres avancés de la table de flacons View Affichage View saved Report File(s) Voir le(s) fichier(s) de rapport sauvegardé(s) View Saved Report File(s) Voir le(s) fichier(s) de rapport sauvegardé(s) View Saved Sequence Summary Report File(s) Voir le(s) fichier(s) de rapport récapitulatif sauvegardé(s)

## Index

## A

abandon séquence 88 ACAML 148 ACOTXT 35 acquisition de données 62 acquisition des données 22 ajustement courbe 157 analyse de données 134 quantification 24 recalcul 26 retraitement 26 révision par lot 25 analyse exactitude 165 arborescence des méthodes 50 arrêt automatique 105 macro 105 séquence 88 système 105 automatique arrêt 105 recherche de bibliothèque 58 réétalonnage 107 automatisation définition 71

## B

 BI Studio
 171

 bonnes pratiques de laboratoire
 30

 Business Intelligence Development
 30

 Studio
 171

#### C

calcul personnalisé 174 CDS 9 172 champ de données champs personnalisés 41, 170 chemin d'accès aux données 63 chemins d'accès 62 ChemStation explorateur 50 personnalisation 27 codage couleur 67 composé 152 configuration 14 connexion de bureau à distance 12 contrôle à distance 10 contrôle de l'instrument 40 courbe d'étalonnage ajustement 157, 157 multiniveau 154 pondération des points d'étalonnage 158 simple 153 types 153 zéro (origine) forcé 157 courbe ajustement 157 création de dossiers uniques activation/désactivation 96 création de rapports classique 26 création de rapports 26, 148 création intelligente de rapports activation 169 avantages 170 conditions 148

fichiers de données 149 présentation 150

#### D

Da.M 36, 60, 138 déconnexion de la session 10 déconnexion 10 des données 8 destination rapport 168 DOC 150 données de démonstration 174

## É

échantillon inconnu 162 échantillon vierge 86 échantillon étalonnage 152 inconnu 162

#### Ε

ECM 8, 13

## É

Éditeur de modèles de rapport 171 éléments de rapport 173

#### Ε

ELN 9 encadrement étalonnage cyclique 116 enregistrement avec les données copie de la méthode 60

#### Index

enregistrer les données de BPL 59

#### É

étalonnage cyclique encadrement 116 étalonnage multiniveau 154 étalonnage composé 152 cyclique à plusieurs niveaux 112 échantillon 152 multiniveau 154 niveau 152 156 plages point 152 état d'attente 105 état instrument 67

## E

exactitude analyse 165 expression 170, 174 extrapolation 156 EZChrom 8

### F

fichier de données de référence 86. 137 fichier de méthode paramètres d'instrument 48 fichier méthode 48 fonctionnement post-séquence 105 formatage conditionnel 174 formatage modèle de rapport 174 formats de fichier rapport de résultats 189

#### G

GLPSave.Reg enregistrer avec la méthode 59

#### 

informations de méthode 40 instrument état 67 intégration événements 41 table de résultats 57 interruption séquence 87

#### J

jeu de résultats auto-assemblés 143 jeu de résultats auto-assemblés 143 migration 103

#### L

limites quantitatives 154 liste de vérification de l'exécution acquisition de données 57 commande de post-analyse 59 enregistrer les données de BPL 59 enregistrer une copie de la méthode 60 macro de post-analyse 59 traitement des données 57

#### Μ

macro arrêt 105 méthode création 45 état 67 GLPSave.Reg 59 intégration 57

mise à jour automatique 90.84 mise à jour manuelle 51. 90. 51 mode en ligne 48 mode hors ligne 49 modification 45 modifier 46 parties 40 récapitulatif de l'exécution 55 recherche de bibliothèque 58 répertoire 48 utilisation spécifique 137 migration jeu de résultats 103 mise à jour méthode de référence 51 méthode 84. 51 mise en évidence de résultats 170 mode dernier résultat 138 modèle de nom 83 modèle de rapport calcul personnalisé 174 173 éléments de rapport enregistrement 175 format d'exportation 150 formatage conditionnel 174 format 171 par défaut 150 parcelles 170, 173 rechercher 175 modèle de séguence 72 multiniveau étalonnage 154

#### Ν

nom de fichier préfixe 102 rapport d'injection simple 177 rapport récapitulatif de séquence 177

#### Index

#### 0

origine connecter 157 forcer 157 ignorer 157 inclure 157 traitement 157

#### Ρ

paramètres d'acquisition 35 paramètres de séquence 63, 73, 140 parcelles 170, 173 PDF 150, 150 personnalisation 59 traitement des données Pharmacopie européenne 28, 92, 137, 170 Pharmocopie européenne 86 pic identification 41.58 quantification 41.58 pics non identifiés réétalonnage 165 plages étalonnage 156 plusieurs niveaux séquences cycliques 112 pondération linéaire 158 points d'étalonnage 158 quadratique 158 uniforme 158 post-analyse commande 59 59 macro préférences 62, 83, 96 préfixe 102 présentation de rapport 150 présentation du logiciel

configuration du système 14 méthodes et séquences 13 modèle de données 15 système d'exploitation 13 prise de contrôle de session à distance 11 prise de contrôle de session 11 procédures révision 150

#### R

rapport de séquence simple 171 rapport de séquences croisées 171 rapport d'injection simple 171 rapport récapitulatif de séquence caractéristiques de la sortie 188 configuration 186 en-tête 186 journal 186 méthodes 187 page récapitulative 188 rapports d'analyse 187 statistiques 187 table d'échantillons 186 table de séquence 186 rapport signal/bruit 137 rapport champs personnalisés 170 création classique ou intelligente ? 169 définition 168 destination 168 formats de fichier 189 injection simple 168 mise en évidence de résultats 170 nom de fichier 177 non étalonné 179 récapitulatif de séquence 168 style 182 RDL 171

recalcul dernier résultat 138 recherche de bibliothèque 58 reconnecter 11 réétalonnage partiel 165 réétalonnage automatique 107 complet 165 définition 165 justification 165 partiel 165 pics non identifiés 165 165 temps de rétention répertoire ieu de résultats 100 méthode 48 réponse détecteur 153 réponse détecteur 153 retraitement 26, 36, 98, 138 révision 148 RTE 171

#### S

séquence partielle lignes de séquence 90 sélection d'un jeu de résultats 88 séquence simple - 77 séquence abandon 88 acquisition 82 arrêt 88 charge 134 création 82 enregistrement 82 étalonnage cyclique 112 interruption 87 modifier 82 retraitement 138 table 74

séquences configuration 77 signal analogique 62 signal de référence 28 62 signal numérique signal détails 41 stockage centralisé des données 13 Stockage des données 13, 98 surveiller état de l'instrument 67 système 105 arrêt

## T

table de navigation déchargement d'ensembles de données 143 suppression d'un fichier de données 143 table de sommation des pics 184 table d'étalonnage définition 160 taux signal/bruit 86, 92 temps de rétention réétalonnage 165 traitement des données 41 personnalisée 59 TXT 150 type de rapport injection simple 171 séquence croisées 171 séquence simple 171 types de méthodes fichier de données 44 référence 43 séquence 43

### V

Visionneuse de rapports 144 Visual Basic 170, 174

## Х

XLS 150, 150

www.agilent.com

## Contenu de ce manuel

Ce guide décrit les différents concepts de Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition. Il a pour objectif de vous aider à mieux comprendre le fonctionnement du système. Il contient des informations concernant les thèmes suivants:

- Concepts basiques
- Acquisition des données
- Automatisation/Séquences
- File d'attente et planificateur
- Principes d'analyse et de révision des données
- Étalonnage
- Création de rapports
- Concepts spécifiques CE et fonctions

© Agilent Technologies 2010-2011, 2012

Printed in Germany 04/2012



M8301-93013

