

D=

R 0% R 59981

\$2.1E has

Système de données en réseau Agilent Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique



Les idées directrices



Agilent Technologies

Avertissements

© Agilent Technologies, Inc. 2003

Aucune partie de ce manuel ne peut être reproduite sous quelque forme et par quelque moyen que ce soit (y compris enregistrement et archivage électroniques ou traduction dans une autre langue) sans l'accord préalable et écrit de Agilent Technologies, Inc. conformément aux lois nationales et internationales relatives à la propriété intellectuelle.

Numéro de référence du manuel

G4000-93023

Edition

5/2003

Imprimé en Allemagne

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

Microsoft [®] est une marque déposée aux Etats-Unis de Microsoft Corporation.

Révision du logiciel

Ce guide correspond aux révisions A.02.xx du logiciel Système de données en réseau Agilent Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique, où xx désigne les révisions mineures du logiciel sans influence sur l'exactitude technique de ce guide.

Garantie

Toutes les informations de ce document sont fournies "en l'état", et peuvent être modifiées sans préavis dans des éditions à venir. Dans toute la limite permise par la législation applicable, Agilent réfute toute garantie explicite ou implicite concernant ce manuel et les informations qu'il contient, en particulier mais sans limitation les garanties implicites de qualité marchande et d'adaptation à une utilisation particulière. 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 ou logiciel décrit dans ce document est fourni sous couvert d'un accord d'une licence et ne peut être utilisé ou copié que conformément aux termes de cette licence.

Avertissements de sécurité

ATTENTION

Une mention **ATTENTION** signale un danger. Elle attire l'attention sur une procédure, une méthode ou autre dont l'exécution incorrecte ou le non-respect peut endommager le produit ou faire perdre des données importantes. Ne poursuivez pas au-delà d'une mention **ATTENTION** sans avoir bien compris et vérifié les conditions indiquées.

AVERTISSEMENT

Une mention AVERTISSEMENT signale un danger. Elle attire l'attention sur une procédure, une méthode ou autre dont l'exécution incorrecte ou le non-respect peut causer des blessures ou la mort. Ne poursuivez pas au-delà d'une mention AVERTISSEMENT sans avoir bien compris et vérifié les conditions indiquées.

Contenu de ce manuel

Le guide des concepts présente les "idées directrices" ayant donné naissance au système de données en réseau (Networked Data System ou NDS) Cerity pour l'AQ/CQ pharmaceutique afin de vous aider à :

- Comprendre à utiliser les composants NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique.
- Gagner du temps avec l'aide en ligne.

1 Présentation générale de votre NDS Cerity pour l'AQ/CQ pharmaceutique

Apprenez comment les composants de NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique fonctionnent ensemble et se conforment aux normes.

2 Notions de base de l'application Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Apprenez à utiliser les outils d'analyse des échantillons, de configuration des méthodes et d'élaboration des rapports.

3 Analyse des échantillons

Apprenez les concepts qui vous aideront à saisir, analyser et à consulter les résultats des échantillons et des séquences.

4 Configuration de la méthode

Apprenez les concepts qui vous aideront à configurer les méthodes.

5 Applications d'aministration et de maintenance

Apprenez à utiliser les outils de gestion, de configuration et de maintenance du Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique.

Sommaire

1	Présentation générale de votre NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique	7
	De quel système disposez-vous ? 8	
	Comment les composants NDS Cerity fonctionnent-t-ils ensemble ? 11	
	Comment NDS Cerity facilite-t-il la conformité aux exigences légales ? 17	

2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique 21

Les 4 vues — dans lesquelles vous allez principalement travailler Outils de base vous permettant de travailler 26 Assistance en ligne 28 Analyse de l'échantillon 30 Recherche dans la base de données 36 Edition de méthodes 38 Sauvegarder dans la base de données 39 Configuration de la méthode 43

3 Analyse des échantillons 47

Entrée des échantillons et des séquences 49 Préparation de l'analyse 52 Programmer les analyses et le suivi 53 Consultation des résultats 56 Approbation/Rejet des résultats 62 Retraitement des méthodes étalonnées 65 22

Sommaire

Versions de résultats et de table d'étalonnage 70 Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences 75

4 Configuration de la méthode 91

Concepts des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique93Sections des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique98Etalonnage104Calculs personnalisés110Mise en page de la consultation de données127Rapports130

5 Applications d'aministration et de maintenance 141

Configuration post-installation 142 Aministration et maintenance du système NDS Cerity 148



Système de données en réseau Agilent Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique **Guide des concepts**

Présentation générale de votre NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

De quel système disposez-vous? 8

1

Comment les composants NDS Cerity fonctionnent-t-ils ensemble ? 11 Comment NDS Cerity facilite-t-il la conformité aux exigences légales ? 17

Ce chapitre donne un aperçu de tous les composants système de données en réseau (NDS) Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique et de la manière dont ils fonctionnent ensemble pour vous aider à effectuer un travail et à vous conformer aux exigences légales.

Vous apprendrez comment les trois composants principaux – le database server (serveur de bases de données), le acquisition controller (contrôleur d'acquisition) et review client fonctionnent ensemble pour répondre aux besoins de votre laboratoire.



1 Présentation générale de votre NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique De quel système disposez-vous ?

De quel système disposez-vous ?

Votre NDS Cerity est soit le système Professional, soit le système Client/Server.

Système Professional (Agilent G4000AA)

Le système Professional NDS Cerity fonctionne sur une station de travail Windows.

Bien que le système soit livré avec 5 licences utilisateur nominales Oracle, le système NDS Cerity est accessible à seul utilisateur à la fois.





Système Client/Server (Agilent G4001AA)

Les composants de votre système NDS Cerity Client/Server s'installent et fonctionnent sur des stations de travail Windows de Microsoft[®]. La grappe informatique comprend tous les éléments du réseau configurés pour le système NDS Cerity Client/Server comme les instruments, les imprimantes et les clients.

Vous pouvez configurer autant d'utilisateurs licenciés que nécessaire sur une grappe NDS. Les utilisateurs NDS Cerity et le contrôle possèdent des licences séparées. Pour chaque utilisateur nommé du système, une licence Oracle est nécessaire. Cinq licences Oracle nominatives et spécifiques de l'application sont incluses dans le système Cerity Client/Server.

1 Présentation générale de votre NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

De quel système disposez-vous ?



Figure 2 Système NDS Cerity Client/Server

Comment les composants NDS Cerity fonctionnent-t-ils ensemble ?

Les composants NDS constituent un cadre commun pour l'acquisition, le traitement, le retraitement et l'enregistrement des données :

- Review client pour l'analyse de l'échantillon, la définition des méthodes et des rapports, l'administration et la maintenance.
- Contrôleur d'acquisition pour l'acquisition, le traitement, le retraitement des données.
- Serveurs de retraitement, pour retraiter les données.
- Serveur de données pour l'enregistrement des données.

Le système NDS Cerity Professional gère le serveur de bases de données NDS Cerity, le contrôleur d'acquisition, le Review Client et la base de données relationnelle Oracle sur une station de travail Windows de Microsoft unique.

Le système NDS Cerity Client/Server distribue les composants NDS Cerity aux serveurs ou stations de travail désignés. Les composants NDS Cerity effectuent les mêmes opérations sur les deux systèmes.

Le système est totalement paramétrable.

Analyse des échantillons, configuration des méthodes et des rapports

Pour plus d'informations sur les notions de base de l'application AQ/CQ pharmaceutique, cf. Chapitre 2, "Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique". Le programme *review client* fournit l'interface utilisateur de votre NDS Cerity.

Cette application permet aux utilisateurs d'analyser des échantillons et de définir des méthodes et des rapports.

La base de données NDS Cerity enregistre toutes les données brutes, et les métadonnées de l'application Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique.

1

1 Présentation générale de votre NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Comment les composants NDS Cerity fonctionnent-t-ils ensemble ?

🚹 Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC	Administrator - Cerity for Pharm	a QA-QC		
<u>File Edit View Tools Actions Help</u>				
Method 🗸 🗅 🗸 📮 🕞 🔊				
> 2 時間 2 評品 野工 + 構成 問!	<u>2</u> own ▼			
AllMasterMethods 🔹 🗊 🞰	Method Name		h	nstrument Name
AllMasterMethods	ADC - System Suitability Test		V	'DT - 35900E
🙀 📄 🍞 ADC - System Suitability Test				
1 Instrument Setup	Method Description			
🚎 🔤 Sample Variables	You can add your own comments!			
Sequence Template	C. W	11 D		
🔁 🔲 Data Analysis	Title of the new Method will be '	ia Panei: 'ADC - Susterr	Suitability Tes	r"
Parating	"Sequence" was selected			
Did Bevisions	Catting and a suble "Instance at	Denel		
ADC - 01032002 - Demo	This instrument was selected: "	VDT - 35900E		
ADC - 01032002 - Test Sequence				
⊞ - I ADC 01032002	Settings made on the "Data Analy:	sis'' Panel:		
	1			
	Description	ltem	Commen	t E-Sig
	Method revised, new			
	revision: 2			None
	Method created by			
	operator:			
	NDSDOMAIN\Administrator		5772.)	None
AllMasterMethods\ADC	-System Suitability Test			
, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,				

Figure 3 Application Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Analyse d'échantillons Avec Cerity NDS pour AQ/CQ pharmaceutique, les demandeurs d'analyse peuvent entrer des échantillons, les analyser individuellement ou en séquence à l'aide de méthodes et consulter les résultats. Les analystes peuvent consulter les données de leurs collègues, retraiter des résultats tandis que le les administrateurs peuvent valider électroniquement les résultats.

Configuration de la méthode Utilisez Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique pour définir des méthodes incluant les paramètres de l'instrument, de traitement des données, les spécifications de mise en page des résultats et la sélection du type de rapport. Les méthodes peuvent également inclure des variables d'échantillons personnalisés, des modèles de séquence des formules de calculs personnalisés et des spécifications de limites.

Une méthode Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique contient les paramètres, la mise en page et les calculs calqués sur vos monographies d'analyse ou vos modes opératoires normalisés (MON). Elles sont généralement configurées une fois pour toutes. Les analystes, les demandeurs d'analyse et les techniciens travaillent avec ces méthodes prédéfinies.

Pour de plus amples informations sur l'analyse des échantillons, cf. Chapitre 3, "Analyse des échantillons".

Vous trouverez des les informations générales sur la définition des méthodes et des rapports au Chapitre 4, "Configuration de la méthode". **Rapports** Lorsque vous définissez une méthode ou entrez un échantillon, vous sélectionnez les types de rapport que vous voulez imprimer au cours du traitement. Lorsque vous analysez un échantillon ou une séquence, le système élabore un rapport sur la base du modèle de rapport sélectionné pour chaque type de rapport.

Le *report template (modèle de rapport)* fournit le cadre renfermant les formats des champs et des tableaux de vos rapports. Les modèles de rapport accèdent aux résultats des échantillons individuels, multiples ou des séquences dans la base de données.

Vous pouvez utiliser le modèle de rapport par défaut déjà attribué aux types de rapport ou encore, vous pouvez sélectionner des modèles de rapport fournis avec le système. Les utilisateurs autorisés peuvent également créer et éditer des modèles de rapport au moyen du *Report Template Editor (Editeur de modèles de rapport)*.

Les utilisateurs peuvent examiner et imprimer les rapports au moyen du *Cerity Report Viewer (programme de visualisation des rapports Cerity).*



Figure 4 Editeur de modèles de rapports

1

1 **Présentation générale de votre NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique** Comment les composants NDS Cerity fonctionnent-t-ils ensemble ?

Aministration et Maintenance

Le programme *review client* Cerity fournit l'interface permettant à l'administrateur NDS de gérer le système.

Cerity NDS Software Administration (Administration du logiciel NDS Cerity) Cette application permet à l'administrateur NDS d'attribuer les licences, les instruments, les permissions d'ouverture de session, les rôles, les droits d'accès des utilisateurs, de gérer les audits et les formats de l'ensemble du système.

Compliance (Conformité) Cette application permet à l'administrateur ou au responsable du laboratoire de vérifier l'installation de NDS Cerity et d'exécuter les tests de qualification du système de données et des instruments raccordés. L'application Compliance (Conformité) dispose d'une licence séparée.

Archive and Restore (Archivage et Restauration) Ce programme utilitaire permet aux administrateurs autorisés d'archiver, de restaurer ou de supprimer des données de la base de données.

Password changes (Changements de mots de passe) Les administrateurs utilisent ces deux outils pour changer les mots de passe (bases de données et comptes de service) du système.

Database Resolve (Util. de résolution de bases de données) Cet utilitaire contrôle les doublons de la base de données lorsque des données ont été restaurées depuis une autre base.

Présentation générale de votre NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique 1

Comment les composants NDS Cerity fonctionnent-t-ils ensemble ?

Pour des informations complémentaires sur les applications d'administration et de maintenance, cf. Chapitre 5, "Applications d'aministration et de maintenance".

Console Root\Cerity Software Admin	istration\Cerity for Phar	ma QA-QC\Users\agilent\drasmuss 📃 🗖
Action ⊻iew 🛛 🗢 🔿 💽 🚺	3	
Console Root Certy Software Administration General Value Certy for Pharma QA-QC General License Module General Instruments	User	agilent\drasmuss
	Full Name	RASMUSSEN, DOUG
⊕-ङ्ग Administrator ⊕-ङ्गि Chemist ⊕-ङ्गि Guest	Current Role	Chemist
⊕-፼ Lab-Manager ⊕-፼ Lab-Technician ⊡-∰ Users	Review Rights	20 - Peer Review
	Default Printer	VPRNTSRV17UVADSLJ14 Vetwork
El 📻 oyotom wide detailige	Information	
1		

Figure 5 Application Cerity NDS Software Administration

Acquisition et traitement des données

Le Cerity acquisition controller (contrôleur d'acquisition Cerity) acquiert les données et contrôles des instruments à partir d'une station de travail Windows NT. L'acquisition des données commence lorsque le contrôleur d'acquisition a extrait les paramètres de l'instrument via le database server (serveur de base de données).

Le programme *review client* fournit l'interface utilisateur pour la saisie des paramètres de la méthode que le contrôleur d'acquisition utilise pour piloter l'instrument. Le contrôleur d'acquisition peut également effectuer le traitement et le retraitement de données.

1 Présentation générale de votre NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Comment les composants NDS Cerity fonctionnent-t-ils ensemble ?

Retraitement

Pour plus d'informations sur la manière de configurer un serveur de retraitement, consultez le Guide d'installation.

NDS Cerity utilise un algorithme aléatoire pour attribuer à une machine du réseau le rôle de "serveur de retraitement" pour un client. La sélection aléatoire permet d'égaliser la charge de travail à travers le système dans l'hypothèse où tous les clients produisent une charge de travail équivalente. La redistribution de cette charge de travail aide à prévenir les ralentissements non nécessaires dans le cas où de nombreux utilisateurs effectuent des retraitement simultanément.

Les contrôleurs d'acquisition fonctionnent également en serveurs de retraitement. Il est également possible d'attribuer un serveur de retraitement spécifique à un client donné. Agilent recommande de définir un serveur de retraitement spécifique pour dix utilisateurs de retraitement simultanés.

Stockage des données

Le *database server* NDS Cerity enregistre les méthodes et les données acquises. Une fois que le traitement des données est terminé, les résultats sont enregistrés dans la base de données. Vous pouvez extraire ces données pour les consulter à l'aide des outils de requête Cerity.

L'espace de stockage de données dépend :

- Du nombre d'utilisateurs simultanés.
- Du nombre d'instruments simultanés.
- De la quantité de données accessibles en ligne dans la base de données.
- Du nombre d'échantillons traités.
- Du nombre de cycles de retraitement (les informations de versions, et du processus d'audit vient augmenter le volume des données à chaque cycle).

Comment NDS Cerity facilite-t-il la conformité aux exigences légales ?

Pour plus d'informations sur la conformité, cf. le Technical Reference Guide (Guide technique de référence). Cette section donne des informations générales sur la manière dont le système de données en réseau (NDS) Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique permet la conformité légale pour les laboratoires AQ/CQ pharmaceutique.

Accès autorisé

Le système NDS Cerity utilise le système d'exploitation de Windows ainsi que les rôles et leurs droits d'accès associés pour limiter l'accès des utilisateurs aux applications NDS Cerity et aux composants système.

- Cerity Software Administration (Administration du logiciel Cerity).
- Cerity for Pharmaceutical QA/QC (Cerity for Pharmaceutical QA/QC).
- Cerity Compliance (Conformité Cerity).
- Cerity Archive and Restore (Utilitaire d'archivage et de restauration Cerity).
- Cerity Reports and Report Template Editor (Editeur de rapport et de modèles de rapports Cerity).

Contrôles d'autorisation

NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique est conforme à la directive FDA 21 CFR Part 11 pour les autorisations d'accès aux tâches utilisateur. Le contrôle d'autorisation fondée sur les rôles et les droits d'accès qui s'y rattachent garantit que seules les personnes autorisées peuvent utiliser le système. L'administrateur NDS Cerity sélectionne les tâches attribuées aux utilisateurs sur la base de leur rôle dans le laboratoire et des droits d'accès associés.

1

Des données dignes de confiance et fiables

Le système NDS Cerity garantit la fiabilité des données et donc la confiance que l'on peut avoir envers elles :

- Il fournit la qualification opérationnelle et la validation des performance du matériel et des applications Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique spécifiques du laboratoire.
- Il s'assure que le système archive et extrait les données brutes, les métadonnées (champs et paramètres) et les résultats.
- Il prévient la détérioration des données des objets en contrôlant les incohérences de données.
- Il protège l'intégrité des données partagées et des entrées manuelles de données grâce aux contrôles de dispositifs.

Utilitaire Compliance Check (Contrôle de conformité)

L'utilitaire Compliance Check (Contrôle de conformité) comprend les utilitaires de Qualification de l'installation (IQ) et de Qualification Opérationnelle/Vérification de Performance (OQ/PV) pour les matériels et logiciels pris en charge.

Les utilitaires IQ et OQ/PV sont disponibles en tant que produit sous licence et sous forme de service par Agilent Technologies. La gamme des services et produits de validation pour NDS Cerity comprend les systèmes CPL Agilent 1100, CPG Agilent 6890, convertisseur A/N Agilent 35900E et la qualification logiciels.

Les Professionnels de Service Certifiés Agilent Technologies (ATCSP), ingénieurs de service et partenaires, ainsi que des consultants indépendants et les équipes de services internes effectuent les tests IQ et OQ/PV.

Authentification des utilisateurs

Le NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique s'assure que les utilisateurs sont responsables des modifications des données :

- Les signature électroniques sont liées de manière vérifiable aux enregistrements qu'ils effectuent afin de garantir que ces enregistrements ne puissent être effacés, copiés, ni transférés et ne peuvent par conséquent pas être falsifiés.
- Les signatures électroniques NDS Cerity sont authentifiées et horodatées.
- Le NDS Cerity demande toujours aux utilisateurs de taper leur nom et leur mot de passe pour ouvrir une session sur l'application AQ/CQ pharmaceutique.

Traçabilité des données

La directive FDA 21 CFR part 11.10e exige un processus d'audit pour les "actions qui créent, modifient ou suppriment des enregistrements électroniques". Le processus d'audit du système de données en réseau de Cerity fournit :

- La preuve de qui fait quoi et quand aux enregistrements.
- Une trace de toutes les modifications apportées aux données sans toucher aux données originales.
- Un contrôle strict de version conservant les versions précédentes des données dans le support de stockage.

1 Présentation générale de votre NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Comment NDS Cerity facilite-t-il la conformité aux exigences légales ?



2

Système de données en réseau Agilent Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Guide des concepts

Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Les 4 vues — dans lesquelles vous allez principalement travailler 22 Outils de base vous permettant de travailler 26 Assistance en ligne 28 Analyse de l'échantillon 30 Recherche dans la base de données 36 Edition de méthodes 38 Sauvegarder dans la base de données 39 Configuration de la méthode 43

Ce chapitre présente les fonctionnalités et les concepts principaux de l'application NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique. Vous y apprendrez les notions de base vous permettant de conduire un échantillon de son entrée jusqu'au rapport. Lisez les chapitres 4 et 5 pour en savoir plus à propos de la configuration des méthodes et de l'analyse des échantillons. Servez-vous de ce chapitre comme d'une aide pour réaliser les exercices des *Getting Started Cards (Cartes de mise en route)*.



Les 4 vues — dans lesquelles vous allez principalement travailler

Le système NDS Cerity enregistre des "données" dans une base de données. Ces "données" sont constitués de données brutes et de résultats calculés accompagnés de toutes les métadonnées comme les paramètres, les champs, les formules et les configurations pour 4 objets de la base de données échantillons et séquences entrés, instruments, résultats d'échantillons et de séquences, et enfin méthodes.

Vue Sample (Echantillons)

La vue Sample (Echantillons) procure un espace de travail pour entrer les échantillons et définir les séquences. Vous accédez à la vue Sample à partir de l'option **Sample** de la liste de la vue en cours.

] ≹ ⊘ ॥ ⇒ :	X						1			
AllMySamples	<u> </u>		NAME	METHOD	INSTRUMENT	TYPE	POS.	AMOUNT	# INJ.	PRIO.
AllMySample	es F	2	exchrsampee	exchrmethee	vatee	Sample	1	0	1	MEDIUM
N2 Sample	Lntry de Samples		ssuncalsampee3	ssuncalmethee	votee	Sample	1	0	1	MEDIUM
	uncalee1	4								
😨 🗄 🗋 vdtee										
1										
*		Sa	mple Entry Sample I	oabook)						
<u>.</u>		Sa	ample Name:	logbook	Bun	Amountal	dontificati	n I Description	n Panat	Destination]
- 2			ssuncalsampee3			Amounts [1	Genuncau	ou l' pescupuo	n nepoli	Desunation
		M	ethod		Runw	th				
			ssuncalmethee	•	Priori	ty:	Sched	ule:		
				_	<u> </u>	edium 💌	Sche	dulable		
		Sa	ample Type:		Taskís) to perform				
			Sample			Armin	-			
		In	strument:		× 1	Acquire	1	Quantity		
			vdtee		<u> </u>	Integrate	E.	Report		
			Valoc							
		Vi	al Number Injectio	ns Volume [μl]					
			1 1	as met	hod					



Vue Instrument

La vue Instrument apporte un espace de travail pour examiner l'état d'un instrument. Vous pouvez analyser des échantillons et des séquences et suivre leur évolution depuis la vue Instrument. Vous accédez à la vue **Instrument** à partir de l'option Instrument de la liste de la vue en cours.



Figure 7 Vue Instrument

2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Les 4 vues — dans lesquelles vous allez principalement travailler

Vue Result (Résultats)

La vue Result (Résultats) procure un espace de travail pour consulter et retraiter les échantillons et les séquences. Vous accédez à la vue Result (Résultats) à partir de l'option **Result** de la liste de la vue en cours.



Figure 8 Vue Result (Résultats)

Vue Method (Méthode)

La vue Method (Méthode) procure un espace de travail pour configurer les méthodes et les rapports. Vous accédez à la vue Method (Méthode) à partir de l'option **Method** de la liste de la vue en cours.



Figure 9 Vue Method (Méthode)

2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Outils de base vous permettant de travailler

Outils de base vous permettant de travailler

Vous trouverez les outils vous permettant de travailler dans la barre de menu et les barres d'outils de la vue en cours. Cliquez avec le bouton droit de la souris sur un tableau ou un graphique pour accéder aux outils contextuels supplémentaires.



Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique 2

Outils de base vous permettant de travailler

	- SCHEIDERER,RO	BIN - Administrator -	Cerity for Pharma (QA-QC	
	- 				
Outils ou barre d'outils - Permet de modifier une	s Geven ▼ Fill <u>D</u> own ▼				
table ou d'effectuer une tâche dans l'espace de	Compound Optio	ons			
travail.		: : 0 1101 : :	VWD: Ab	sorbance +1	
		nthalat	bhenyt	rpheny	
Espace de travail -			10 10	······································	
d'outils et les					
commandes pour afficher ou modifier les	P				
tableaux, graphiques,				·····	
listes.					
	8				
Menu contextuel - un					
clic droit dans la	•	┉╜╿╲╌╌	/\		<u> </u>
cellule du tableau affiche un menu	o i	1	2	3	
contextuel permettant de modifier le tableau.			De als Cianal	Time Reference	Use
	Compound Name	Expected Time		геак	
	dimethylphthalate diethylphthalate	Q Zoom <u>D</u> ut	WD1 A		
	biphenyl oterphenyl	Zoom Peak	WD1 A	· ·	
Liste déroulante - Sélectionne une cellule		Сору Сору			
du tableau pour accéder à		🖴 Paste			
une liste.					
		∃~ Add a new Compound ∃* Remove Compound			
	A 1164 A 64 A 11 A 11		12		

2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Assistance en ligne

Assistance en ligne

Vous trouverez l'assistance pour chacune des vues dans les zones suivantes :

- Barre d'outils d'aide.
- Menu d'aide.
- Info-bulles.

Barre d'outils d'aide

Consultez la description des icônes de la barre d'outils ci-après.

Sommaire - Ce bouton vous permet d'accéder au système d'aide en ligne. Utilisez la table des matières, l'index, le glossaire ou les outils de recherche pour trouver les rubriques "Comment faire pour" concernant la vue, la boîte de dialogue ou l'assistant en cours. 拍 Recherche - L'outil recherche vous aide à trouver la rubrique qui vous ? intéresse. Qu'est-ce que c'est ? - Lorsque le pointeur se transforme en point T, d'interrogation, cliquez à l'intérieur de la vue, de la boîte de dialogue ou de l'assistant pour obtenir l'aide concernant cette interface utilisateur. Cette aide s'appelle "User Interface Help" dans l'arbre de sélection du Sommaire de l'aide en ligne. $\boldsymbol{\lambda}$ Manuels en ligne - Vous pouvez accéder à la documentation Cerity enregistrée sous forme de fichiers PDF (Acrobat Portable Document È Format). Autres ressources - Ce bouton renvoie sur le site Web d'Agilent où vous trouverez les fournitures, les consommables et le support technique. MON - Si votre administrateur l'a configuré, ce bouton vous permet d'accéder aux Modes Opératoires Normalisés de votre laboratoire ou à une autre adresse de votre intranet.

Menu d'aide

Vous pouvez accéder à l'aide depuis la barre d'outils d'aide ou le menu d'aide.

for Pharmace	eutical QA/QC - AGILENT\Musk
<u>T</u> ools <u>A</u> ctions	<u>H</u> elp
ነ - 🔚 🗙	尾 🎒 🛛 🖉 🖪

Info-bulles des barres d'outils

Déplacez le pointeur sur le bouton de la barre d'outils et le nom du bouton s'affiche après un bref instant.



2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Analyse de l'échantillon

Analyse de l'échantillon

Pour de plus amples informations sur l'analyse des échantillons, cf. Chapitre 3, "Analyse des échantillons". Avec les vues Sample (Echantillons), Instruments et Result (Résultats) de NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique, vous entrez les échantillons, vous définissez les séquences et analysez les échantillons individuels ou les séquences ou consultez et retraitez les données.

Entrée d'un échantillon individuel

Vous pouvez entrer les échantillons un par un dans la vue Sample (Echantillons). Utilisez des échantillons individuels si votre analyse ne nécessite aucun réétalonnage lié à une séquence ou un calcul du groupe.



Figure 10 Ecran de saisie des échantillons individuels

Configuration d'une séquence

Commencer par créer une nouvelle séquence et attribuez ensuite cette séquence à un instrument et une méthode. Après avoir créé une nouvelle séquence, elle apparaît dans la vue Sample (Echantillons).

Pour des informations plus détaillées sur les modèles de séquences dans la méthode, cf. Chapitre 4, "Configuration de la méthode". Le modèle de séquence défini dans la méthode utilisée pour la séquence apparaît également. Vous pouvez changer les noms des échantillons, les ID LIMS, les quantités, les poids ou concentrations dans les modèles de séquences.

<u>• 6 6 560</u>	uence Table Sequen	ce Options									
	Sample Name	Sample Type	Cal. Level	Custom Sample Group	Vi	al Injection	s Injection Volume [µl]	Sample Amount	Multiplier	Dilution	Purity
ples	Calb. Sample 01	Calbration	1		1	1	as method	0	1.	1	1
20	Calib, Sample 02	Calibration	1		2	1	as method	0	1	1	1
3	Sample 01	Sample			4	1	as method	0	1	1	1
	Sample 02	Sample			5	1	as method	0	1	1	1
	Sample 03	Sample			6	1	as method	0	1	1	1
6	Sample 04	Sample			7	1	as method	0	1	1	1
7	Sample 05	Sample			8	1	as method	0	1	1	1
	Control Sample	QC Sample			3	1	as method	0	1	1	1
	Calib: Sample 01	Calibration	1		1	1	as method	0	1	1	1
1	Calib. Sample 02	Calibration	1		2	1	as method:	0	1	1	1
1	Sample 06	Sample			9	1	as method	0	1	1	1
1	2 Sample 07	Sample			10	1	as method	0	1	1	1
1	Sample 00	Sample			11	1	as method	0	1	1	1
1	Sample 09	Sample			12	1	as method	0	1	1	1
1	5 Sample 10	Sample			13	1	as method	0	1	1	1
1	Control Sample	QC Sample			3	1	as method	0	1	1	1
	Colis Correls Of	Colleastion	4		4	1	as motional	ō	4	4	(a) (
sa sa f cu f	radio Sample Name Calib. Sample 01 Instite Type: Calibration Standard stom Sample Group:	× New	Ru	Amounts Identil Calibration Mo Calibration Mo Calibration Le [1 Response Up [Average	ication D ode: Single vel date.	update					

Figure 11 Table de séquences de la vue Sample (Echantillons)

2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Analyse de l'échantillon

Préparation de l'instrument

La vue Instrument vous permet de suivre l'état de l'instrument et ses paramètres, tels la température ou la pression, vous pouvez y exécuter des diagnostics et laisser le système se stabiliser, purger la pompe ou allumer la lampe UV-Visible d'un détecteur.



Figure 12 Vue Instrument

Analyses d'échantillons et de séquences

Vous pouvez analyser des échantillons et des séquences soit dans la vue Sample (Echantillons) soit dans la vue Instrument. Quand vous cliquez sur le bouton **Run** le système envoie la tâche d'analyse au programme de lancement de tâches Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique.

Allnstruments 💌 🖸	🗗 🖏 📗	NAME	METHOD	INSTRUMENT	TYPE	POS.	AMOUN	T # INJ.	PF
Allinstruments	1	exchrsampee	exchrmethee	vdtee	Sample	1	0	1	MEC
10 E-E vdee	_2	ssuncalsampeet	ssuncalmethee	vatee	Sample	1	0	1	MED
Single Samples	3	ssuncalsampee	ssuncalmethee	vatee	Sample	1	0	1	MEG
seguncalee1	4	ssuncalsampee	ssuncalmethee	votee	Sample	1	0	1	ME
	5	_			_				_
×	Sam	ple Entry Sample	Logbook						
	C	unia Mamai		Der	· ·				
	2.8	npre realite.		Hun	Amounts	Identificati	ion Descripti	on Beport	t Deshi
3	5.8	suncalsampee1		Hun	Amounts	Identificati	ion Descripti	on Report	t Desti
3	5-8 [5 [8]	suncalsampee1		- Run v	Amounts ith	Identificati	ion Descripti	on Report	t Desti
3	Sar Fe Mei	suncalsampee1 thad: suncalmethee	-	Bun v Prior	Amounts ith ity:	Scheo	ion Descripti Jule:	on Report	t Dest
3	Sar Is Mei	suncalsampee1 thad: suncalmethee	-	Run v Prior	Amounts ith ity: edium 💌	Scheo Scheo	ion Descripti Jule: edulable	on Report	t Desh
3	5.8 [5 [5 [5	suncalsampee1 thod: suncalmethee	•	Run v Prio	Amounts ith ity: edium 💌	Identificati Scheo Scheo	ion Descripti Jule: edulable	on Report	t Desti
2 15 Active Calls NDS for Observation 0.04	ACC - ACH ENTAR	suncalsampee1 thod: suncalmethee	Ene - Carita A (l	Run v Prio	Amounts ith ity: edium 💌	Identificati Sched	ion Descripti Jule: edulable	on Report	t Desti
3 Aplent Ceity NDS for Pharmaceutical QAA Eta Edit Varia Go. Tool: define Hab	JOC - AGILENTA	suncalsampee1 thod: suncalmethee lohn - Administra	tor - Cerity A.O	Hun Run y Pho M	Amounts ith ity: edium <u>v</u>	Identificat Scheo Sch	ion Descripti Jule: edulable	on Report	t Dest
Aplant Certy NDS for Pharmaceutical DAA Ele Ede Yew Eo Tools Anton Heb	ADC - AGILENTLO	ohn - Administra	tor - Cerity A.O	Hun Run v Phio 1 DB	Amounts ith ity: edium 💌	Identificat Scheo Sche	ion Descripti Jule: edulable	on Report	t Dest
3 15 Agitent Cerity NDS for Pharmaceutical OAN 16 E div Yew So Tools doton: Heb Sample - D + Let X (A) (B)	70C - AGILENTA)	ohn - Administra	tor - Cerity A.O	Hun Run v Phio Phio Phio Phio Phio Phio Phio Phio	Amounts ith ity: ecium 💌	Identificat Sched	ion Descripti Jule: edulable	on Report	t Desti
3 If Aplent Celly NDS for Pharmaceudical OA/ Bit Edit Yew So Tooli Action Heb South ~ D ~ I So X (Q, G) If © II → ×	70C - AGILENTA)	Intervalle. suncalsampee1 thod: suncalmethee Iohn - Administra Iohn - Administra	■ _ tor - Cerity A. 0 2	Hun Phon	Amounts ith ity: ecisum ¥	Identificati Scheo Sche	ion Descripti Jule: edulable	on Report	t Desti
3 If Aplant Certy NDS for Pharmaceutical DAA Ele Ede Yeau Eo Loois Actions Helo Sample ► □ + Ial × IQ @B QC Ial × I QL Adhysamples ▼ E	ADC - AGILENTS	Intervance suncalampee1 thod suncalmethee Iohn - Administra Iohn - Administra Iohn - Administra		Run v Pico Pico Pico Pico Pico Pico Pico Pico	Amounts ith ity: edum • n•	Identificat Schec Sch	ion Descripti Jule: edulable	en Report	PR
3 IS Assent Centry NDS for Pharmaceutical OA De Edt Mew Go Tools Actions Heb Sample Sample D + Id Address Actions Heb R On Address Actions M Id Id </td <td>70C - AGILENT \3 47 × 1 47 × 1 47 × 1 1</td> <td>Indervative suncationmpeel hold suncatinethee Iohn - Administra Iohn - Administra Iohn - Administra Iohn - Administra Iohn - Administra</td> <td>tor - Cerity A.0</td> <td>I DB INSTRUMENT value</td> <td>Amounts ith ity: edum ¥ n ¥ TYPE Sample</td> <td>Identificat Schec Sche Schi</td> <td>ion Descripti sule: edulable AMOUNT 0</td> <td># INJ.</td> <td>PR MEDI</td>	70C - AGILENT \3 47 × 1 47 × 1 47 × 1 1	Indervative suncationmpeel hold suncatinethee Iohn - Administra Iohn - Administra Iohn - Administra Iohn - Administra Iohn - Administra	tor - Cerity A.0	I DB INSTRUMENT value	Amounts ith ity: edum ¥ n ¥ TYPE Sample	Identificat Schec Sche Schi	ion Descripti sule: edulable AMOUNT 0	# INJ.	PR MEDI
3 10 Aplent Celly NOS for Pharmaceutical DAA 10 Ed. Yew So Tool: Action Heb Sample	70C - AGILENTA 	Indervation suncationspeet thad suncatinethee ohn = Administra- ohn = Administra- ohn = Administra- NAME exchr samper sequecident	tor - Cerity A. 0	I DB	Amounts ith ky. edum ¥ n ¥ TYPE Sample	Identificat Schec Sche Schi	ion Descripti sule: edulable AMOUNT 0	# INJ.	PR MEDA
3 If Addent Centy NDS for Pharmaceutical OAA De Edit Mew Eos Tools Actions Heb Sample Image: Imag	AC - AGILENTS AC - AGILENTS -7	Intervence suncativemport thad suncativethee Iohn - Administree Iohn - Administree Iohn - Administree NAME exchramport seguncativet suncativeteel suncativeneet	tor - Cerky A. 0 to - Cerky A	I DB INSTRUMENT valee valee	Amounts ith ith ith ith ith ith ith ith	POS.	AMOUNT 0	# INJ, 1	PR MEDA MEDA
Aglent Ceily NDS for Pharmaceutical GAA Be Edit Yew Ep Tools doton Lith Sample	70C - AGILENT() 407 × 1 41 41 41 41 41 41 41 41 41 4	Indervative suncalisampee1 thad suncalimethee Inhine Administration Inhine Administration Inhibit Administration I	ter - Cerity A. 0 ter - Cerity A. 0 ter - Cerity A. 0 ter + + METHOD exclamative sequencementee sequencee	I DB INSTRUMENT values values values	Amounts ith ith ity: edum Sample Sample Sample	POS. 1	on Description bute: edulable 0 0	# INJ. 1	PR MEDIA MEDIA
3 If Address Cesting NDS for Pharmaceutical OAA De Edit Mew Spin Tools Actions Heb Sample		Indervative suncalisarpoet thad suncalisarpoet thad suncalisarpoet suncalisarpoet suncalisarpoet suncalisarpoet	tor - Cerky A.0 to -	I DB	Amounts ith ity: edum ¥ TYPE Sample Sample Sample	POS. 1 1 1 1	AMOUNT 0 0 0	# INJ, 1 1	PR MEDIA MEDIA MEDIA

Figure 13 Barre d'outils d'analyse

Etat des échantillons et des séquences

Une fois que vous avez démarré l'analyse, l'application retire l'analyse des échantillons individuels et des séquences des deux vues Instrument et Sample. L'analyse apparaît maintenant sur la worklist et les injections terminées apparaissent dans la vue Result (Résultats).

Dans la **Worklist** de la Vue Instrument, vous pouvez examiner l'état d'un échantillon individuel, d'un groupe d'échantillons individuels d'une séquence et d'une série de séquences.

Pour une séquence, une série de séquences et un groupe d'échantillons de la **Worklist** vous pouvez effectuer les opérations suivantes : abandonner, arrêter temporairement, reprendre.

Lorsque vous arrêtez temporairement, le système finit l'analyse de l'échantillon en cours pour que vous puissiez redémarrer les analyses à l'échantillon suivant de la séquence.

I. Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - Cerity Adminis	strator - Administrator - Cerity for	Pharma QA-QC			_ 🗆 ×
<u>File Edit View Tools Actions Help</u>					
Instrument 👻 🗋 🖌 🗐 🍂 🎜 🌮					
え⊗ → ※ 辺 拍 拍 い ※ 時 尾 / 計 見	▶ ↑ ↓ 關 邂 Fill <u>D</u> own ▼				
Allostruments	Instrument Panel Worklist				
	Namo Status	Tuno Mothod E	riority# Vial#	Injections # Descrip	tion
H LC1100-VWD	1 Sample 04 Running(1) Sa	ample ADC - Test Method 1	100 1	1	
1 GC6890	2 Sample 02 Queued Sa	ample ADC - Test Method 5	00 1	1	
📻 🗄 🗂 GC6850					
🕲 🗈 🗂 Virtual 6890					
😤 🖳 🛄 LC1100-DAD	Online Plot Logbook				
	Descrip Hide Column	em Comment	E-Sig Tir	nestamp	
	Data ac Show All Columns	DC	None 03/	07/2002, 15:07:59	
	Run cor Columns	DC	None 03/	07/2002, 15:07:58	
	Collectir Column Width	DC	None 03/	07/2002, 15:06:28	
	Run sta		None 03/	07/2002, 15:06:18	
	Data ac Sort by Event	NDC	None 03/	07/2002, 15:06:12	
	Run cor 200	NDC	None U3/	07/2002, 15:06:12	
	Due ata		None U3/	07/2002, 15:04:58	
	Run sta Event Information		None 03/	07/2002, 15:04:40	
	Pup cor		None 03/	07/2002, 14:57:14	
	Collective use		None 03/	07/2002, 14:55:44	
	Run started	ADC	None 03/	07/2002 14:55:33	
	Data acquisition completed	ADC	None 03/	07/2002, 14:54:08	
	Run completed	ADC	None 03/	07/2002, 14:54:08	
	Collecting data	ADC	None 03/	07/2002, 14:52:38	
			90 - Al-		
AllInstrumentsW	intual ADC) NUM	1

Figure 14 Worklist (Liste des tâches) de l'échantillon ou de la séquence

Consultation des résultats

Sélectionnez les résultats que vous avez besoin de consulter dans l'arbre de sélection de la vue **Result**. Vous avez besoin de savoir comment les résultats sont organisés dans l'arbre de sélection. Si vous ne voyez pas le résultat, vous aurez éventuellement besoin de faire une requête "Search Result" sur la liste placée au-dessus de l'arbre de sélection ou dans la base de données.



Figure 15 Vue Result (Résultats)

Dans la vue **Result**, vous pouvez aussi effectuer des changements et retraiter les données. Vous pouvez également après avoir changé la méthode, retraiter les données avec la version de méthode la plus récente. Vous pouvez également retraiter les données avec une méthode différente.

Dans la vue **Result**, vous pouvez également accepter ou refuser des résultats dans la mesure des droits d'accès que votre administrateur vous a donné. 2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Recherche dans la base de données

Recherche dans la base de données

Pour consulter ou retraiter des résultats, vous devez tout d'abord trouver les résultats qui vous intéressent.

Requêtes de résultats

Pour consulter les résultats de la base de données vous interrogez le système. Le NDS Cerity est livré avec des requêtes par défaut pour vous aider à démarrer.

- Sélectionnez une requête sur la **Query List** située au-dessus de l'arbre de sélection et consultez les résultats déjà créés par le **Query Wizard**.
- Vous pouvez également définir vos requêtes personnelles à l'aide du **Query Wizard** si vous êtes un utilisateur expérimenté. Vous élaborez les requêtes lorsque vous définissez les critères de recherche dans la base de données pour trouver les résultats que vous avez besoin de consulter.





Requêtes de méthodes

Vous sélectionnez également une requête pour trouver les méthodes que vous voulez éditer.
Autres requêtes

Vous pouvez également chercher un lot déterminé d'échantillons non encore analysés, des séquences ou des instruments non configurés, ces requêtes sont toutefois plus rares.

Query Wizard (Assistant de requêtes)

Le **Query Wizard** vous aide à chercher les informations dont vous avez besoin. Le NDS Cerity met à votre disposition un **Query Wizard** dans chaque vue.

Query Wizard	X
Query Wizard	New Query Copy From Browse Edit Query AllSamplesRunLastMonth Browse Remove Query Browse
< <u>B</u> ack	Next > Emish Cancel

Figure 17 Query Wizard (Assistant de requêtes)

2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Edition de méthodes

Edition de méthodes

Une fois que les méthodes sont définies par votre MON ou votre monographie, vous pouvez facilement effectuer les modifications grâce à la vue Method (Méthode).

La vue Method (Méthode) vous permet d'effectuer les modifications suivantes dans une méthode :

- Editer les paramètres instrument.
- Editer les variables échantillon.
- Editer un modèle de séquences (normalement réservé aux utilisateurs expérimentés).
- Editer les paramètres de traitement des données.
- Editer la mise en page pour consulter les résultats.
- Sélectionner un autre type de rapport avant de produire un rapport.

Vous pouvez également éditer toute méthode présente dans la vue Method (Méthode).

Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - AGILE	NTV	ohn - Administrator	- Cerity A	A.01 DB	
Lie Lat View Lo Loois Actions Help Method • • • • • • • • • •		k n % E	h R 4	7 3+ 3 ₊	<u></u> ⊪ ↑ ↓
AllMasterMethods 💽 🔂 🕸 🖏		NAME	REV.	ACTIVE	MOD
AllMasterMethods	1	exchrmethee	3	-1	AGILENTW
* exchrmethee	2	segmicalovermethee	1	-1	AGILENTW
K?	3	seqsicalbrmethee	1	-1	AGILENTW
	4	seqsicalmethee	1	-1	AGILENTW
③ ± □ seqsicalmethee	5	sequncalmethee	1	-1	AGILENTW
😤 🕀 🗋 sequncalmethee	6	sssicalmethee	1	-1	AGILENTW
	7	ssuncalmethee	1	-1	AGILENTW
Ssuncalmethee					
Application unlocked	8				

Figure 18 Vue Method (Méthode)

Sauvegarder dans la base de données

Un administrateur NDS Cerity peut configurer le comportement du processus d'audit pour des tâches spécifiques effectuées par NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique. NDS Cerity fournit un formulaire pour introduire les commentaires d'audit et enregistre un journal des entrées d'audit lorsque vous sauvegardez des données dans la base de données.

Entrées d'audit

Lorsque vous sauvegardez des modifications d'une méthode, la saisie d'un échantillon, d'une séquence, des résultats ou lorsque vous passez d'une méthode à une autre ou d'un échantillon à un autre, la boîte de dialogue **Save Changes to the Database (Enregistrer modifications dans la base de données)** s'ouvre. Il s'agit du formulaire que NDS Cerity utilise pour saisir les commentaires d'audit.

Vous pourriez avoir besoin de consulter les modifications et de sélectionner un motif de modification. Une signature électronique incluant votre nom d'utilisateur est votre mot de passe peut être nécessaire pour enregistrer les modifications.

NDS Cerity laisse l'administrateur du système configurer les tâches qui nécessitent des commentaires d'audit et une validation par signature électronique.

2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Sauvegarder dans la base de données

Add the 'ADC1 A' to	14-11D5-9455-000103146987}:1:32 as Example Chrom ▲ the 'Signal' for the Calibration.
Set the 'Peak Signa Change the 'Expecti	I' to 'ADC1 A' for the 'New Compound' in the Calibration. ed Time' from '0' to '0.249834188388524' for the 'New Co
Added Compound N Change the 'Expect	lew Compound with Expected Time 0.24983418838852 ed Time' from '0' to '0.749834439591716' for the 'New Co
Added Compound N	lew Compound1 with Expected Time 0.7498344395917
Unange the Expect	ea Line from 0 to 1.24363124334073 for the New Lon
•	
 ✓ Ieason for changes 	
leason for changes Changing lab proces	dure
Reason for changes Changing lab procee Electronic Signatur	dure
Reason for changes Changing lab procee Electronic Signatur User name:	dure

Figure 19 Boîte de dialogue Save Changes To The Database

Journaux d'audit

	NDS Cerity maintient un strict contrôle de version et des procédures d'audit indépendantes de l'utilisateur pour les enregistrements dont il a reçu la charge. Les différentes vues portent la trace de ces procédures d'audit sous la forme des journaux d'audit.
Méthodes	Le Method Logbook apparaît dans l'espace de description des méthodes lorsque vous sélectionnez une méthode sur l'arbre de sélection de la vue Method (Méthode).
Echantillons individuels	Vous pouvez consulter le processus d'audit pour les échantillons entrés, mais non encore analysés, dans le Sample Logbook . Le Sample Logbook apparaît dans l'espace des échantillons individuels soit dans la vue Sample (Echantillons), soit dans la vue Instrument.
	Après l'analyse des échantillons individuels, il est possible d'afficher le journal de chaque échantillon dans la vue Résultats en cliquant sur le bouton Sample Details de la barre d'outils.

Séquences	Vous pouvez consulter le processus d'audit pour les séquences entrées, mais non encore analysées, dans le Sequence Logbook soit dans la vue Sample (Echantillons), soit dans la vue Instrument.
	Une fois la séquence analysée, vous trouvez le Sequence Logbook dans la vue Result (Résultats) lorsque vous sélectionnez la séquence dans l'arbre de sélection.
Analyses d'échantillons et de séquences	Vous pouvez consulter le processus d'audit pour l'analyse d'un échantillon ou d'une séquence dans le journal accessible sur l'espace de travail instrument de la vue Instrument.
	Les colonnes des journaux dont le rôle ne va pas de soi sont expliquées dans le Tableau 1 et la Figure 20 donne un exemple de journal.

Tableau 1 Explication du contenu d'un journal

Libellé de colonne	Exemple de contenu affiché	Rôle
E-Sig	Signed (Signé) Aucun	ldentifie les actions pour lesquelles une signature électronique (E-Sig) est configurée et applicable au niveau du logiciel d'administration de Cerity NDS.
Source	cerity_test\sspencer Automation (Automatisation) UserStamp	Lorsque la signature E-sig est configurée, il s'agit du nom d'utilisateur du signataire. Lorsque la signature E-Sig n'est pas configurée, il s'agit soit du UserStamp (validation utilisateur) associé à cette action, soit de "Automation" dans le cas d'une action automatisée.
Туре	Audit Information	Précise si les indications sont destinées à l'audit ou constituent une information de portée générale.
Comment (Commentaire)	Changing lab procedure (Changement de procédure du laboratoire) Method released (Méthode publiée)	Affiche le journal de méthodes avec toutes ses colonnes (voir Figure 20) lorsque des motifs d'audit sont configurés au niveau du Cerity for Pharmaceutical QA/QC Software Administration (Logiciel d'administration de Cerity for Pharmaceutical QA/QC)

2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Sauvegarder dans la base de données

Description	Item	Comment	E-Sig	Timestamp	Source	Туре	Host
Change the 'To' from '1000' to '180' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Change the 'From' from D' to '-20' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Change the External State (Remote Bus Mode)' from 'ACTIVE' to 'OFF' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Change the 'Stop Time (min)' from '1' to '1.4' for the 35900SetPoints, Channel A.	35900SetPoints, Channel A	Updated	None	06/11/2002, 08:22:37	wadic001\demo	Audit	WADLC001
Method revised, new revision: 2	-	_	None	06/11/2002, 08:22:18	wadlc001\demo	Information	WADLC001
Created.	Method	Initial configuration	Signed	06/11/2002, 08:22:05	wadlc001\demo	Audit	WADLC001
Method created by operator: Demo User			-				

Figure 20 Method Logbook (Journal des méthodes) montrant toutes les colonnes

Configuration de la méthode

Une méthode Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique est la version électronique de votre procédure d'analyse, monographie ou MON. C'est pourquoi les administrateurs système et les analystes définissent une méthode une fois pour toutes et y reviennent rarement.

Une méthode se configure en deux parties. Vous commencez par créer un modèle de méthode à l'aide du **Method Wizard**. Le *method template (modèle de méthode)* fournit un format vous permettant de saisir uniquement les paramètres jouant un rôle pour cette analyse. Vous entrez ensuite les paramètres dans le modèle pour créer une *méthode* dans la vue Method (Méthode).

Création du modèle de méthode

Avant de pouvoir saisir des paramètres instruments ou définir une table d'étalonnage, vous aurez besoin de créer le cadre de l'analyse. Le **Method Wizard** vous permet de choisir les options dont vous avez besoin pour créer un modèle de méthode.

Voici quelques-uns des choix que vous pouvez faire en parcourant le **Method Wizard** :

- Sélectionner un nom de méthode pour des échantillons individuels ou des séquences.
- Attribuer la méthode à un instrument.
- Sélectionner des options pour définir le traitement des données.
- Sélectionner des options pour définir l'identification des composés.
- Sélectionner des options pour définir l'étalonnage.
- Sélectionner des options pour définir la quantification.

Pour plus d'informations sur la définition des méthodes, cf. "Concepts des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique", page 93.

2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Configuration de la méthode



Figure 21 Method Wizard (Assistant Méthode)

Saisie des paramètres

Une fois que vous avez fini de créer un nouveau modèle de méthode, la vue Method (Méthode) affiche la nouvelle méthode dans l'arbre de sélection. Vous continuez à entrer les paramètres initiaux dans la vue Method (Méthode).

Rapports

Le NDS Cerity peut élaborer des rapports à la fin du traitement de données. Vous devez cependant d'abord sélectionner le type de rapport et le modèle dans la méthode. Le modèle de rapport spécifie les données qui doivent figurer dans le rapport ainsi que la mise en page des champs destiné à afficher ces valeurs. Le système NDS Cerity accède aux données spécifiées dans le modèle de rapport pour produire le rapport.

Sélection du type de rapport Cerity pour AQ/CQ

pharmaceutique fournit un jeu de types de rapports par défaut. Lorsque vous configurez une méthode, si vous cliquez sur **Reporting** dans l'arbre de sélection, les types de rapports par défaut apparaissent sur l'espace de travail.

Configuration de la méthode



Figure 22 Types de rapports dans la vue Method (Méthode) pour les échantillons individuels

Vous pouvez aussi choisir d'imprimer ou de produire un type de rapport dans la vue Sample (Echantillons) pour l'échantillon ou la séquence d'échantillons déjà entrés.

lun	Amounts	Identification Descripti	on Report Destination
Repo	rt(s) to print		
E P	vinter 🔽	DDNTCDV/17UVADCL1	14 T
1000		VENNTSHV170 MDSLJ	14 <u> </u>
E P	'ath:		
	D		
	Print	Report Types	Report Template
_	Print	Report Types Single Injection	Report Template
	Print	Report Types Single Injection	Report Template
	Print IZ	Report Types Single Injection Standard Injection	Report Template Inj_short.htm Sin_short.htm



Sélection d'un modèle de rapport Chaque type de rapport par défaut utilise un modèle de rapport par défaut. Vous ne pouvez pas modifier un type de rapport mais vous pouvez sélectionner un modèle de rapport différent pour le type de rapport. Cette opération est effectuée sur l'espace de travail des rapports.

Edition d'un modèle de rapport Les administrateurs système ou les utilisateurs pourvus des droit d'accès suffisants peuvent aussi éditer des modèles de rapport, en créer de nouveaux à l'aide du Report Template Editor (Editeur de modèles de rapport). Le Cerity Report Template Editor ('Editeur de modèles de rapports Cerity) vous permet de créer un nouveau modèle de rapport ou de modifier un modèle existant. Vous

2 Notions de base sur NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Configuration de la méthode

pouvez sélectionner parmi des sections prédéfinies et parmi plus de 2000 champs pour créer un modèle de rapport selon vos spécifications.

Vous pouvez accéder au Cerity Report Template Editor (Editeur de modèles de rapports Cerity) depuis l'espace de travail des rapports lorsque vous définissez une méthode.







3

Système de données en réseau Agilent Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Guide des concepts

Analyse des échantillons

Entrée des échantillons et des séquences 49 Préparation de l'analyse 52 Programmer les analyses et le suivi 53 Consultation des résultats 56 Approbation/Rejet des résultats 62 Retraitement des méthodes étalonnées 65 Versions de résultats et de table d'étalonnage 70 Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences 75

Apprenez les concepts qui vous permettront de comprendre l'analyse des échantillons dans NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique. Servez-vous de ce chapitre comme d'une aide pour réaliser les exercices de la section Analyse d'un groupe d'échantillons de routine des *Getting Started Card (Cartes de mise en route)*.



3 Analyse des échantillons

Le diagramme ci-dessous montre les étapes de l'analyse d'échantillons de routine. Démarrez à la case **GO!** Chaque case représente une série de tâches à effectuer dans le laboratoire.

Entre échan indivi O	r des tillons duels U	Créer une nouvelle séquence	Entrer les données de l <u>a</u> séquence	Préparer et vérifier l'instrument
Ouvert ses:	ture de sion	Analyser les de ro DEMAF	échantillons outine IRER ICI	♦ Analyser les échantillons & séquences
G	0!	Retraiter les _ résultats ◀	Consulter et approuver ou ▶rejeter les résultats	♥ Suivre les –échantillons & séquences

Chaque rubrique de ce chapitre comporte une information en arrière-plan vous permettant de suivre les différentes étapes du cheminement.

Entrée des échantillons et des séquences

Entrée d'un échantillon individuel

Un échantillon individuel ou une séquence Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique contiennent toute l'information concernant la méthode, l'échantillon et la séquence nécessaire pour acquérir et traiter les données. Cette information est ajoutée à toutes les informations de l'analyse, et aux données brutes et traitées pour produire le *résultat* Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique pour l'échantillon individuel ou la séquence.

Vous pouvez entrer des échantillons individuels en trois endroits différents :

- Vue Sample (Echantillons) espace de travail des échantillons individuels sous le dossier Sample Entry (Entrée des échantillons).
- Vue Sample (Echantillons) espace de travail des échantillons individuels sous le dossier instrument.
- Vue Instrument espace de travail des échantillons individuels sous le dossier instrument.

De plus, dans chacun de ces endroits, le panneau **Sample Entry** vous permet d'entrer les mêmes informations d'échantillons. Vous devez cliquer sur le bouton **Apply** pour valider la saisie des informations.

Tâches à effectuer sur l'analyse - vous devez cocher Quantify pour identifier les composés. Mise à jour d'étalonnage - Vous pouvez choisir le niveau et le type	Sample Entry Sample Logbook Sample Name: eeftuorcal1 Method: ee_121001_i20_25_tst_1 Sample Type: Calitration Standard	Run Amounts Identification Description Hun with Priority: Schedule: Medium Unknown Task(s) to perform Acquire Quantify	Report Destination
de mise à jour pour vos échantillons d'étalonnage.	Instrumeer EELC3 Vial Number Injections Volume [µ] I I Apply	Analyst SCHEIDERER,ROBIN	Retention Time Update:

3 Analyse des échantillons

Entrée des échantillons et des séquences

Sample variables - Vous entrez la quantité d'échantillons et les valeurs pour tout multiplicateur ou diviseur désignés comme variable d'échantillons dans la méthode.

Compound amounts - Si vous avez spécifié d'utiliser des quantités variables de composés dans la méthode étalonnée, vous devez également modifier ces quantités.

Report Destination - Consultez le Chapitre 4, "Configuration de la méthode", vous y trouverez des informations vous permettant de configurer, produire et imprimer des rapports.

eefluorcal1 Method:	Sample variables	Compound amounts
ree_121001_120_c5_t8C1 Sample Type: Calibration Standard Instrument: EELC3	Sample Amount: 0 Sample Amount: U mg/ml Multiplier: 1 Dilution: 1	Use Name Amound Image: New Compound2 10 Image: New Compound5 5 Image: New Compound3 0
Vial Number Injections Volume [µ]	Purity: 1 Divisor: 1	New Compound6: 0

Sauvegarde de l'entrée échantillon Cliquez sur le bouton **Apply** dans l'espace de travail Sample Entry (Entrée des échantillons) pour transférer l'information d'échantillons dans la table d'échantillons et le bouton **Save** pour sauvegarder les entrées et les modifications dans la base de données.

Sample Logbook (Journal des échantillons) Lorsque vous sauvegardez votre échantillon dans la base de données NDS Cerity, le processus d'audit NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique peut vous demander d'entrér un motif et de fournir une signature électronique avant que vous ne puissiez effectuer l'analyse. Une description de toutes les modifications est écrite dans le **Sample Logbook (Journal des échantillons)**.

Saisie des séquences



Nouvelles séquences Vous utilisez également le bouton **New** pour créer de nouvelles séquences.

Après avoir créé une séquence, vous pouvez entrer l'information la concernant en trois endroits différents :

- Vue Sample (Echantillons) sous la saisie de l'échantillon.
- Vue Sample (Echantillons) sous le dossier Instrument.
- Vue Instrument sous le dossier Instrument.

Options des séquences Vous pouvez entrer l'information d'échantillon dans le même panneau **Sample Entry** (Entrée des échantillons) que pour les échantillons individuels, mais vous trouverez les **Tasks to perform** (Tâches d'analyse à exécuter) et la **Report Destination** (Destination du rapport) dans les options des séquences.

	Sequence Identification Description Report Destination	1
Sequence Name: eefluorseq1	Run with	Task(s) to perform
Instrument: EELC3 Sequence Template	Priority: Schedule: Medium Ready for Analysis Calibration Mode: Bracketing Calibration	Acquire Quantify Image P Quantify Alow Online Editing
Annlu	Sequence Created by	

Sauvegarde de l'entrée séquence Cliquez sur le bouton **Apply** dans l'espace de travail Sample Entry (Entrée des échantillons) pour transférer l'information d'échantillons dans la table d'échantillons et le bouton **Save** pour sauvegarder les entrées et les modifications dans la base de données.

Lorsqu'un échantillon individuel ou une séquence est entré(e), leur numéro de version est positionné à 1. Le numéro de version est incrémenté lorsque l'échantillon individuel ou la séquence est modifié(e).

Sequence Logbook (Journal des séquences) Lorsque vous sauvegardez votre séquence dans la base de données NDS Cerity, le processus d'audit NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique peut vous demander d'entrer un motif et de fournir une signature électronique avant que vous ne puissiez lancer la séquence. Une description de toutes les modifications est écrite dans le **Sequence Logbook (Journal des séquences)**.

Tasks to perform - Ce sont les mêmes que pour les échantillons individuels, mais la case à cocher Allow Online Editing ne concerne que les séquences.

Report Destination - Vous saisissez ici la destination du rapport pour toute la séquence et non pas dans le----panneau d'entrée des échantillons.

Préparation de l'analyse

Laissez l'instrument et la colonne se stabiliser

Lorsqu'un instrument est créé, son numéro de version est positionné à 1. Le numéro de version est incrémenté lorsque la configuration de l'instrument est modifiée interactivement.

Vous pouvez laisser l'instrument et la colonne se stabiliser à partir du panneau Instrument de la vue Instrument.

Le panneau Instrument affiche une représentation graphique des modules instrument que vous pouvez configurer. Pointez et cliquez sur un module pour accéder aux rubriques de menu permettant d'entrer les paramètres de l'instrument. Par exemple, vous pouvez démarrer et arrêter une pompe.

Entrez vos paramètres de stabilisation dans la boîte de dialogue **Set Pump**. Vous pouvez démarrer la pompe et suivre la ligne de base qui apparaît en temps réel.

Valeurs en cours

Vous pouvez observer en temps réel les valeurs de consigne et les valeurs instantanées des paramètres instrument pour l'instrument sélectionné en choisissant **Device Actuals** dans le menu View.

Pour entrer ces "valeurs en cours" dans la fenêtre **Device Actuals**, vous devez sélectionner la rubrique **Setup Actuals Window** du menu View. Vous pouvez ajouter ou supprimer des paramètres.

Tracé en temps réel

Avant d'effectuer l'analyse d'un échantillon d'une séquence, vous définissez les axes et l'apparence du tracé en temps réel en cliquant sur le bouton **Change**.

Programmer les analyses et le suivi

Programmer des échantillons ou des séquences

Vous analysez des échantillons individuels ou des séquences à partir des emplacements suivants :

- Dossier Sample Entry pour la vue Sample.
- Dossier Instruments pour la vue Sample.
- Dossier Instruments pour la vue Instrument.

Sélectionnez un échantillon individuel ou un groupe d'échantillons à analyser dans la table d'échantillons. Démarrez une analyse d'échantillons ou de séquences avec le bouton Run une fois que vous avez sélectionné le ou les échantillons individuels ou la ou les séquences que vous voulez analyser.

Pour programmer les analyses, utilisez les règles suivantes :

- Quand vous démarrez l'analyse d'un groupe ou d'échantillons individuels ou de séquences, l'analyse du premier échantillon ou de la première séquence que vous sélectionnez démarre. Le reste des échantillons ou des séquences est placé dans une file d'attente d'analyses.
- L'ordre dans lequel vous lancez l'analyse d'un échantillon ou d'une séquence détermine sa position dans la file d'attente.
- Si vous avez besoin d'interrompre une séquence pour un échantillon prioritaire, vous devez d'abord abandonner la séquence. Vous placez ensuite l'échantillon sur la première ligne de la Worklist (Liste des tâches) et vous lancez l'analyse. Pour plus d'informations sur la Worklist, reportez-vous à la section "Suivi des analyses", page 54.
- Vous pouvez définir l'ordre d'analyse en fonction des priorités des échantillons. De la plus élevée à la plus faible, les priorités sont les suivantes : High, Medium et Low.

Il n'est pas nécessaire d'établir un calendrier des analyses pour mettre un échantillon ou une séquence dans la file d'attente.



3 Analyse des échantillons

Programmer les analyses et le suivi

Suivi des analyses

Liste des tâches

La Worklist (Liste des tâches) d'un instrument vous permet de suivre l'état d'avancement des échantillons et des séquences placés dans la file d'attente. Si vous avez besoin de retirer un échantillon ou une séquence de la **Worklist**, vous devez d'abord terminer ou abandonner l'analyse.



Pour l'instrument sélectionné, choisissez un échantillon ou une séquence de la Worklist, et activez les boutons **Abort**, **Pause**, **Resume** et **Remove**.

Que pouvez-vous faire dans la liste des tâches ?

Quand vous suivez les échantillons ou les séquences dans la **Worklist**, vous pouvez effectuer des opérations suivantes :

- Voir l'état d'avancement des échantillons ou des séquences pour tous les instruments du groupe sélectionné.
- Voir l'état d'avancement des échantillons ou des séquences pour un instrument donné.
- Abandonner l'analyse d'un échantillon ou d'une séquence.
- Faire une pause dans l'analyse d'un échantillon d'une séquence.
- Reprendre l'analyse d'un échantillon ou d'une séquence.
- Arrêter une séquence avec le bouton **Edit Sequence** pour mettre la séquence en mode édition.

Edition d'une séquence pendant une analyse

Si la case **Allow Online Editing** a été coché au cours de la définition de la séquence, vous pouvez cliquer sur le bouton **Edit Sequence** de la Worklist tandis que la séquence est en cours d'exécution afin de la modifier. Le système termine tout d'abord le traitement de l'échantillon en cours puis effectue une pause pour vous permettre d'éditer la séquence ou ajouter de

Si vous cliquez sur le bouton **Edit Sequence** dans la Worklist et que rien ne se passe, cela signifie que la case Allow Online Editing n'était pas cochée dans la méthode. nouveaux échantillons. Pendant que la séquence est en cours d'exécution, vous ne pouvez pas lancer l'analyse d'autres séquences ni d'autres échantillons individuels sur l'instrument.

Lorsque vous reprenez la séquence, l'injection ou la séquence suivante est lancée. NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique recalcule automatiquement toutes les actions liées (par exemple les réétalonnages, les récapitulatifs de groupe d'échantillons) pour tenir compte des injections ajoutées.

Journal de l'instrument

Tous les événements sont enregistrés sur le **Instrument Logbook** (Journal de l'instrument) en cours de l'analyse.

Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique enregistre dans le **Instrument Logbook** les événements suivants :

- Evénements d'analyse.
- Erreurs.
- Pause et abandon de l'instrument.

Consultation des résultats

Que sont devenus les résultats ?

Un *Résultat* Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique renferme des données brutes et traitées, des calculs, des paramètres de méthode et d'échantillons ainsi que des données de séquence.

Quand vous avez besoin de consulter un résultat, assurez-vous que vous examinez les données correctes dans la fenêtre Result. Pour accéder à un résultat que vous ne pouvez pas voir dans l'arbre de sélection vous pouvez :

- Choisir une requête différente dans la Query List (Liste de requêtes).
- Editer une requête existante.
- Cliquer sur le bouton **Redo Query** pour rafraîchir la sélection.
- Modifier la section de mise en page de la consultation des données pour inclure le résultat que vous recherchez puis retraiter les données.

Pour des informations plus détaillées sur la mise en page de la consultation de données, cf. "Mise en page de la consultation de données", page 127.



Organisation des résultats dans l'arbre de sélection

Figure 25 Arbre de sélection des résultats

REMARQUE

Notez que le nom de la méthode utilisée pour les échantillons individuels ou pour la séquence apparaît dans le dossier des résultats récapitulatifs d'étalonnage. **Consultation des résultats**

Affichage des dossiers d'étalonnage dans la vue des résultats

La Figure 25 montre que dans le contexte de résultats, la vue de l'arborescence contient différents dossiers d'étalonnage. Chaque dossier contient des éléments d'information différents :

Libellé	Emplacement	Rôle
Dossier des mélanges étalons en cours	Placé juste au-dessous de la branche des résultats de séquences	Vous permet de parcourir la version la plus récente des étalons analysés et utilisés pour la séquence.
Branche des tables d'étalonnage	Se reconnaît à son icône figurant une "balance"	Vous permet de parcourir la ou les tables d'étalonnages créées et utilisées au cours de la séquence. Les tables d'étalonnages qui ne sont pas utilisées pour les calculs ne sont pas accessibles.
Mélanges étalons de la table d'étalonnage	Au-dessous de la branche des tables d'étalonnage	Vous permet de naviguer parmi les différentes versions des étalons utilisés pour créer les tables d'étalonnage de la branche des tables d'étalonnage.

À la suite de de l'analyse initiale (ou du retraitement) d'une séquence, les versions du dossier des mélanges étalons et des mélanges étalons des tables d'étalonnage sont identiques. Toutefois, à la suite d'une modification d'une analyse d'étalons, et avant retraitement, les versions des mélanges étalons des deux dossiers d'étalonnage sont différents, par exemple, le mélange d'étalonnage peut être la version 4 dans le dossier des mélanges étalon en cours (la version la plus récente du mélange d'étalonnage), mais dans le dossier des mélanges étalons des tables d'étalonnage, il peut s'agir de la version 3 (celle utilisée pour établir la table). Voir également "Versions de résultats et de table d'étalonnage", page 70.

Consultation des informations d'échantillons et de séquences

Echantillons individuels Parce que les données de méthodes et d'échantillons sont liées aux résultats qu'elles ont produits, il est facile de trouver l'information d'échantillons pour une analyse d'une seule injection. Lorsque vous cliquez sur l'icône **Sample Details** (données d'échantillon), le panneau **Sample Entry** (Entrée des échantillons) s'ouvre sur les injections individuelles de cet échantillon individuel.



Consultation des résultats

Séquences Vous pouvez aussi trouver facilement les données concernant l'échantillon et la séquence pour les séquences apparaissant dans la vue des résultats. Quand vous sélectionnez le résultat de la séquence, la table de séquence et le panneau d'entrée d'échantillon s'ouvrent.

CO	AllResultsRestored 🔄 🗈 🎰	Seque	nce Table	Sequence Options	1				
**	■ AllResultsRestored ■ -1 ¹ Calibration - wf[121001_i20_2S_t ■ 1001 - 1001_i20_1S_ss_br_va_31		Sar	nple Name	Sample Type	Cal. Level	Bracketing	Custom Sample Group	Vial #
129		1	wfj_17100	01_i20_1FA_cl_1.1	Calibration	1	Open	1FA_cl_1	1
		2	wfj_17100	01_i20_1FA_cl_2.1	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
1		3	wfj_17100	01_i20_1FA_cl_3.1	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1
*		4	wfj_17100	01_i20_1FA_sa_1.1	Sample			1FA_sa_1	1
		5	wfj_17100	01_i20_1FA_sa_2.1	Sample			1FA_sa_2	1
3		6	wfj_17100	01_i20_1FA_sa_3.1	Sample			1FA_sa_3	1
		7	wfj_17100	01_i20_1FA_cl_1.2	Calibration	1	None	1FA_cl_1	1
		8	wfj_17100	01_i20_1FA_cl_2.2	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
		9	wfj_17100	01_i20_1FA_cl_3.2	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1
				04.00.450 4.0	Causala			450 4	<u> </u>
		Sample	e Entry Se	quence Logbook					
		Samp wfi_	le Name: _171001_i2i	D_1FA_cl_1.1	Run	Amounts	Identification Des ation	scription]	
		Cal	le Type: ibration Star	ndard	•	Calit	oration Mode: Bracket oration Level:	ing	

Lorsque vous sélectionnez le résultat d'une injection individuelle de la séquence et que vous cliquez sur l'icône Sample Details, le Sample Logbook s'ouvre.



Que pouvez-vous faire avec les résultats Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique ?

Quand vous consultez, retraitez et approuvez les résultats, vous pouvez effectuer les tâches suivantes :

- Consulter les résultats pour l'ensemble des autres jeux de résultats.
- Réintégrer.
- Modifier les données échantillons et séquences.
- Supprimer des points d'étalonnage.
- Refaire les calculs avec la méthode liée aux résultats à l'origine.
- Retraiter avec la version en cours de la méthode.
- Saisir des valeurs pour les variables des composés et des échantillons ajoutées à la méthode.
- Retraiter avec une méthode différente.
- Importer et retraiter un fichier ChemStation Agilent ou ANDI.
- Accepter ou rejeter un résultat.
- Marquer un résultat nécessitant un retraitement.

Approbation/Rejet des résultats

Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique vous permet d'approuver, de rejeter et d'envoyer au retraitement des résultats selon les procédures en vigueur dans votre entreprise. Vous confirmez la consultation de chaque résultat grâce à la boîte de dialogue **Accept/Reject Results**.

	e		(
Sample Result	Review Status	Analyst Review	Peer Review
Demodad - Reprocessed #1	Not Done	Accepted	Not Done
		1900	
Accent Besults	X Reject Result	a Needs	Rewrik
✓ Accept Results	X Reject Result	Needs	Bework.

Figure 26 Boîte de dialogue Accept/Reject Results

La consultation s'applique à tous les résultats d'un échantillon c'est-à-dire que les injections individuelles sont consultées individuellement et que le résultat récapitulatif est attribué à l'échantillon ou à la séquence.

Niveaux d'acceptation des échantillons

Pour tous les résultats, Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique comporte trois niveaux d'acceptation :

- 1 Consultation de l'analyste (Niveau1) nécessaire (effectuée par les utilisateurs de droits d'accès de niveau 1, 2, ou 3).
- **2** Consultation d'un collègue (Niveau 2) nécessaire (effectuée par les utilisateurs de droits d'accès de niveau 2, ou 3).
- **3** Consultation d'un responsable (Niveau 3) nécessaire (effectuée par les utilisateurs de droits d'accès de niveau 3).

Droits de consultation des utilisateurs

L'application d'administration de NDS Cerity permet à l'administrateur d'attribuer l'un des quatre droits de consultation à chaque utilisateur. Ces droits permettent aux utilisateurs d'accepter ou de rejeter les résultats à des niveaux d'acceptation différents.

- 0 Consultation non autorisée
- 10 L'analyste peut consulter ses propres résultats (niveau 1).
- 20 L'analyste peut consulter ses résultats et ceux de ses collègues (niveau 2).
- 30 Consultation par un responsable de laboratoire, incluant les deux niveaux précédents (niveau 3).

Modes de consultation

Au moment de l'installation, l'administrateur système définit le mode de consultation comme strict ou non.

ConsultationLa consultation stricte obéit à des règles définies par le système
pour lesquelles le laboratoire peut choisir seulement le nombre
de niveaux d'approbation. Le mode de consultation stricte obéit
aux règles suivantes :

- Tous les niveaux d'acceptation pour un résultat donné doivent valoir *Accepted* pour que l'ensemble de l'acceptation du résultat vaille *Accepted*.
- Chaque niveau doit être jugé avant que le niveau suivant puisse être jugé à son tour (c'est-à-dire que l'acceptation de niveau 1 doit être effectuée pour que l'on puisse effectuer l'acceptation de niveau 2, etc.).
- Le niveau d'approbation le plus élevé ayant été appliqué à un résultat peut à tout moment faire passer l'état du résultat de *Accepted* à *Needs Rework*.

3 Analyse des échantillons

Approbation/Rejet des résultats

Consultation	La consultation non stricte obéit à des règles définies par le
non stricte	laboratoire. Le mode de consultation non stricte obéit aux règles suivantes :
	 Il n'est pas nécessaire que tous les niveaux d'acceptation soient jugés : un niveau supérieur peut permettre

- solent juges ; un niveau superieur peut permettre l'acceptation de niveau inférieur ou prévaloir sur celui-ci.
 Les niveaux d'acceptation peuvent être effectués dans un
- ordre quelconque.
 Tous les consultants peuvent faire passer l'état d'acceptation de *Accepted* à *Needs Rework*, mais seul le niveau supérieur peut faire revenir l'état global d'acceptation à *Needs Rework*.

Retraitement des méthodes étalonnées

Le *retraitement* est l'action de recalculer les résultats d'une analyse après modification des paramètres de traitement. On peut retraiter uniquement un échantillon individuel ou une séquence. Il n'est pas possible de retraiter des injections individuelles ni des échantillons individuels à l'intérieur d'une séquence.

Si un échantillon ou une séquence nécessite un retraitement, vous pouvez modifier les résultats ou la méthode puis retraiter le résultat.

Options de retraitement disponibles

Tous les paramètres de la méthode et toute l'information d'échantillon utilisés pour produire un résultat sont joints à ce résultat. Cette conception détermine les options de retraitement possibles.

ample	Demodad		
		Rev	rision 2
	Iptions		
Use the	method revision that is now attached	to the result	
C Use the	most current revision of the method that is attac	ched to the result	
Π U	se integration settings in the method		
E B	eplace Response Factors in the Method		
			10 - 10 - 100 - 100

Sélection des options de retraitement

Les options de retraitement que vous sélectionnez dépendent des motifs de retraitement. Lorsque vous retraitez des méthodes étalonnées, il est nécessaire de soigneusement prendre en compte le but à atteindre. Utilisez également les règles suivantes pour déterminer votre choix :

3 Analyse des échantillons

Retraitement des méthodes étalonnées

Pour les mélanges d'étalonnage utilisant des méthodes d'étalonnage spécifiques de l'instrument :

Lorsque vous retraitez un mélange d'étalonnage d'échantillon individuel, ou spécifique d'une séquence d'instruments contenant des mélanges étalons, et que vous souhaitez que vos modification aient une influence sur les quantifications ultérieures, validez l'option **Use the most current revision of the method that is attached to the result** (Utiliser la version la plus récente de la méthode attachée aux résultats) ainsi que (important) **Replace Response Factors in the Method** (Remplacer les facteurs de réponse dans la méthode).

Si votre réétalonnage ne doit pas mettre à jour la méthode, ne cochez pas **Replace Response Factors in the Method**, validez au contraire l'option **Use the method revision that is now attached to the result** (Utiliser la version de méthode actuellement attachée aux résultats). cela écartera de la méthode les effets du réétalonnage. Vous DEVEZ sélectionner **Use the most current revision of the method that is attached to the result** uniquement dans le cas où les modifications de la quantification de l'échantillon ou de la séquence doivent être pris en compte dans la méthode.

Pour les échantillons individuels "non mélanges d'étalonnage" et les séquences utilisant des méthodes spécifiques d'étalonnage :

Lors du retraitement de blancs d'échantillons individuels, d'échantillons ou de contrôle CQ, de séquences spécifiques de l'instrument sans réétalonnage ou de séquences avec réétalonnage spécifique, sélectionnez l'option **Use the method revision that is now attached to the result**.

Sélectionnez **Use the most current revision of the method that is attached to the result** uniquement dans le cas où vous souhaitez changer des paramètres d'étalonnage ou d'autres paramètres de la méthode.

Retraitement des anciennes données sans aucune modification :

L'option **Use the method revision that is now attached to the result** (Utiliser la version de méthode actuellement attachée aux résultats) peut aussi être utilisée pour effectuer à nouveau exactement les mêmes calculs que précédemment. C'est utile pour s'assurer de l'historique de résultats calculés plusieurs années auparavant. Cela permet également de prouver que rien n'a été modifié depuis.

Utilisez le Tableau 2 pour trouver les options de retraitement dont vous avez besoin dans des cas plus spécifiques.

Si le motif pour lequel vous	Alors faites ceci :	Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique fera cela :		
retraitez est :				
 Modifier certain paramètres d'intégration pour des injections individuelles ou, Saisir de nouvelles valeurs pour les champs d'entrée de l'échantillon ou, Retirer des échantillons d'étalonnage des données d'étalonnage ou, Retraiter un échantillon ou une séquence acquise sans traitement ou avec un traitement partiel. 	 Après avoir effectué les modifications, sélectionnez l'option de retraitement Use the method revision that is now attached to the result. 	 a Initialise la table d'étalonnage avec les données de la table d'étalonnage initiale de l'échantillon ou de la séquence. b Pour les méthodes spécifiques de l'instrument, si la table d'étalonnage est à jour, met à jour la méthode à partir des paramètres et échantillons d'étalonnage. Dans tous les autres cas, crée un nouveau nœud d'étalonnage séparé de la méthode. Les étalons invalidés dans l'espace de travail de l'étalonnage NE SONT PAS utilisés. c Effectue la quantification, les calculs personnalisés et les limites. 		
 Utiliser de nouveaux paramètres d'intégration avec la version la plus récente de la méthode pour toutes les injections ou, Retraiter les données de l'ancienne séquence en utilisant une nouvelle table d'étalonnage avec la version la plus récente de la méthode. 	 Sélectionnez l'option de retraitement Use the most current revision of the method that is attached to the result. 	 a Initialise la table d'étalonnage avec la version la plus récente de la table d'étalonnage de la méthode. b Si les données à retraiter proviennent d'une révision d'étalonnage précédente ou si la méthode est spécifique de la séquence, pour mettre à jour la méthode, cochez la case Replace the response factors in the method. Dans tous les autres cas, la méthode est mise à jour automatiquement. Les étalons invalidés dans l'espace d'étalonnage NE sont PAS utilisés. c Quantifie les échantillons d'étalonnage avec la version la plus récente de la table d'étalonnage. d Effectue la quantification, les calculs personnalisés et les limites avec les nouveaux paramètres de méthode. 		

Tableau 2 Aidez-vous de ce tableau pour sélectionner les options de retraitement

3 Analyse des échantillons

Retraitement des méthodes étalonnées

Si le motif pour lequel vous	Alors faites ceci :	Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique fera cela :		
retraitez est :				
 Retraiter les données avec une version mise à jour de la méthode incluant de nouvelles variables échantillon (aucun impact sur l'étalonnage). 	 Après avoir effectué vos modifications sur la méthode, définissez le retraitement pour les nouveaux champs d'entrée échantillon. Entrez les valeurs pour les nouvelles variables échantillon et sélectionnez l'option Use the most current revision of the method that is attached to the result. 	 Effectue les mêmes étapes ci-dessus. Tout autre modification est également prise en compte dans ce cas et le cas précédent. Etant donné que Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique joint la version la plus récente de la méthode aux résultats lorsque vous définissez le traitement des nouveaux champs d'entrée échantillon, vous sélectionnez "Use the method revision that is now attached to the result". 		
 Retraiter les données avec une version mise à jour de la méthode incluant de nouveaux composés (modifie l'étalonnage). 	 Après avoir effectué vos modifications sur la méthode, définissez le retraitement pour les nouveaux champs d'entrée échantillon. Entrez les valeurs pour les nouvelles variables échantillon et sélectionnez l'option Use the most current revision of the method that is attached to the result. 	 a Réintègre les injections individuelles avec les paramètres de la méthode. b Met à jour la table d'étalonnage selon les paramètres de la méthode et les échantillons d'étalonnage de la séquence. Les étalons invalidés dans l'espace de travail de l'étalonnage sont utilisés. c Effectue la quantification, les calculs personnalisés et les limites avec les nouveaux paramètres de méthode. Tout autre modification est également prise en compte. 		
 Retraiter avec une méthode différente. 	 Configurez le traitement pour qu'il utilise une méthode différente. Entrez les valeurs pour les nouvelles variables échantillon ou quantités des composés dans la nouvelle méthode et sélectionnez l'option Use the method revision that is now attached to the result. 	 a Réintègre les injections individuelles avec les paramètres de la méthode. b Met à jour la table d'étalonnage selon les paramètres de la méthode et les échantillons d'étalonnage de la séquence. Les étalons invalidés dans l'espace de travail de l'étalonnage sont utilisés. c Effectue la quantification, les calculs personnalisés et les limites avec les nouveaux paramètres de méthode. Tout autre modification est également prise en compte. 		

Tableau 2 Aidez-vous de ce tableau pour sélectionner les options de retraitement (suite)

ATTENTION

Lorsque vous retraitez avec une méthode différente, une branche supplémentaire d'étalonnage ayant le même nom est insérée sur l'arbre de sélection.

Réintégration

L'AQ/CQ pharmaceutique comporte des outils permettant la réintégration. Vous pouvez réintégrer les données avec des événements initiaux ou chronoprogrammés modifiés ou utiliser l'intégration automatique pour laisser le système choisir les paramètres d'intégration. Vous pouvez également intégrer manuellement chaque pic en choisissant vous-même la ligne de base. Vous enregistrez les nouveaux paramètres et résultats dans la base de données. Vous devez cependant encore retraiter ces résultats pour effectuer le réétalonnage et quantifier à nouveau. Versions de résultats et de table d'étalonnage

Versions de résultats et de table d'étalonnage

Pour suivre le retraitement des résultats, il est nécessaire de comprendre le système de numérotation des versions de résultats et de table d'étalonnage.

Versions des résultats

Lorsqu'un échantillon individuel ou une séquence sont créés, leur numéro de version est positionné à 1. Le numéro de version est incrémenté lorsque l'échantillon individuel ou la séquence sont sauvegardés dans la base de données. Analyser l'échantillon individuel ou la séquence incrémente le numéro de version d'une unité.

Le résultat produit a le même numéro de version que l'échantillon individuel ou la séquence analysés. Cela vient du fait que le résultat contient la révision de tout l'échantillon, la séquence et l'information de méthode contenus dans l'échantillon individuel ou la séquence qui ont été analysés. Le numéro de version du résultat est incrémenté d'une unité si un ou plusieurs paramètres sont modifiés dans le résultat.

Changement de version dans le cadre des Résultats

Séquence individuelle de mise à jour (sans encadrement)

Tableau 3 Modification de Version pour une sequence individuene de mise a jou	Tableau 3	Modification	de version p	pour une séc	quence individ	duelle de	mise à jo	our
--	-----------	--------------	--------------	--------------	----------------	-----------	-----------	-----

Étape	Action - en utilisant toujours Save to database	Vue	Numéro de version		
	(Enregistrer dans la base de données)		Séquence	Échantillon	Injection (Chromato- gramme)
1	Créer une séquence	Échantillon	1	N/A	N/A
2	Ajouter un échantillon à la table de séquence	Échantillon	2	N/A	N/A
3	Modifier la quantité d'un composé pour un échantillon de la table de séquence	Échantillon	3	N/A	N/A
4	Exécuter l'acquisition de la séquence sur l'instrument		4	1	1
5	Changer la quantité d'une entrée échantillon	Résultat	5	1	1
6	Intégrer manuellement le chromatogramme d'une injection	Résultat	6	2	2
7	Retraiter une séquence	Résultat	8*	3	3
8	Changer la quantité d'une entrée échantillon	Résultat	9	3	3
9	Intégrer manuellement le chromatogramme d'une injection	Résultat	10	4	4
10	Retraiter une séquence	Résultat	12 [*]	5	5

* L'action du retraitement augmente le numéro de révision de 2 unités en raison de processus internes.

Séquence encadrée

Pour une séquence avec encadrement, le numérotage des versions diffère de la manière suivante :

Numérotage des versions de mélanges d'étalonnage :

- Les mélanges étalons de **début** d'encadrement ont un numéro de version d'échantillon et de chromatogramme augmentés d'une unité.
- Les échantillons utilisés pour un **début** et une **fin** d'encadrement ont le numéro de version d'échantillons et de chromatogramme augmentés de 2 unités.

3 Analyse des échantillons

Versions de résultats et de table d'étalonnage

Révision des inconnus calculés (y compris les échantillons CQ et les blancs) :

• Le numéro de version est augmenté d'une unité lorsque le résultat est calculé.

Séquence encadrée globale

Numérotage des versions de mélanges d'étalonnage :

• Après l'acquisition, les étalons possèdent le numéro de version 1.

Révision des inconnus calculés (y compris les échantillons CQ et les blancs) :

• Le numéro de version est incrémenté d'une unité lorsque les résultats sont calculés, par exemple numéro de version 2 après la première révision de l'acquisition initiale.

Versions d'une table d'étalonnage

Lorsqu'une table d'étalonnage est créée, son numéro de version est positionné à 1. Le numéro de version est incrémenté lorsque la table d'étalonnage est mise à jour. L'exemple suivant illustre le contrôle de version de la table d'étalonnage. Dans tous les cas, par hypothèse on effectue une seule injection par étalon. Le numéro de version de la table d'étalonnage est agrémentée d'une unité à chaque fois qu'un échantillon d'étalonnage est analysé. Pour un étalonnage spécifique d'une séquence, n vaut toujours 1.

Tableau 4 Etalonnage à mise à jour simple

Ordre de la	Nom d'échantillon	Version de la	Version de la table d'étalonnage		
séquence		Utilisée	Produite		
1	Etalon 1, analyse 1	n	n+1		
2	Etalon 2, analyse 1	n+1	n+2		
3	Echantillon 1a	n+2			
Versions de résultats et de table d'étalonnage

Ordre de la	Nom d'échantillon	Version de la t	Version de la table d'étalonnage			
séquence		Utilisée	Produite			
4	Echantillon 1b	n+2				
5	Etalon 1, analyse 2	n+2	n+3			
6	Etalon 2, analyse 2	n+3	n+4			
7	Echantillon 2a	n+4				
8	Echantillon 2b	n+4				
9	Etalon 1, analyse 3	n+4	n+5			
10	Etalon 2, analyse 3	n+5	n+6			

Tableau 4 Etalonnage	à mise	à jour	simple	(suite)
------------------------------	--------	--------	--------	---------

Tableau 5 Etalonnage encadrant

Ordre de la	Nom d'échantillon	Version de d'étalonna	e la table age	Crochet d'encadrement
séquence		Utilisée	Produite	
1	Etalon 1, analyse 1	n	n+1	1 ouvrant
2	Echantillon 1a	n+2		1
3	Echantillon 1b	n+2		1
4	Etalon 1, analyse 2	n+1	n+2/n+3 [*]	1 fermant, 2 ouvrant
5	Echantillon 2a	n+4		2
6	Echantillon 2b	n+4		2
7	Etalon 1, analyse 3	n+3	n+4	2 fermant

* Version n+2 à la fermeture du crochet d'encadrement 1, Version n+3 à l'ouverture du projet d'encadrement 2.

Le numéro de version de la table d'étalonnage est changé à chaque modification. Pour l'encadrement, des versions intermédiaires de la table d'étalonnage sont produites, elles ne sont pas directement utilisées pour l'étalonnage des échantillons (par exemple, la version 3 dans le Tableau 5).

Versions de résultats et de table d'étalonnage

Ordre de la	Nom d'échantillon	Version de la table d'étalonnage				
séquence		Utilisée	Produite			
1	Etalon 1, analyse 1	n	n+1			
2	Echantillon 1a	n+3				
3	Echantillon 1b	n+3				
4	Etalon 1, analyse 2	n+1	n+2			
5	Echantillon 2a	n+3				
6	Echantillon 2b	n+3				
7	Etalon 1, analyse 3	n+2	n+3			

 Tableau 6
 Etalonnage avec encadrement global

Dans l'encadrement global, les échantillons ne sont pas quantifiés tant que tous les étalons n'ont pas été analysés. Cela signifie que la table d'étalonnage est initialisée au début de la séquence puis mise à jour deux fois (lignes 4 et 7) pour produire des numéros de version 2 et 3. Les échantillons sont quantifiés en utilisant la version 3 qui représente la moyenne de tous les points d'étalonnage.

Pour la traçabilité de la régularité des performances chromatographiques, les échantillons d'étalonnage doivent être distribués régulièrement au long de la séquence. Un problème de précision d'étalonnage peut être détecté moyennant l'utilisation de statistiques adéquates ou de facteurs de réponse.

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences

Dans Cerity NDS, toutes les données sont conservées et organisées sous forme d'injections uniques ou de séquences. Chaque fois qu'un élément d'une séquence est modifié, cette modification est documentée comme révision de séquence. Mais la révision de séquence ne documente pas les modifications des analyses individuelles incluses dans cette séquence : ces modifications sont documentées dans les journaux des analyses individuelles modifiées. Il n'y a donc pas de liaison directe entre la révision de séquence et la modification dans cette séquence.

Les actions de séquence sont documentées dans un journal de séquence. Chaque séquence comporte un journal de séquence unique où sont enregistrées et affichées toutes les modifications et révisions au niveau de la séquence. Ce journal affiche toujours toutes les entrées de données. Les anciennes révisions de séquence présentent donc toutes les entrées, y compris celles correspondant aux révisions les plus récentes. Ceci peut rendre difficile le suivi des modifications de séquence.

Les anciennes révisions de séquence sont documentées et affichées sous le nœud de séquence en cours. Les anciennes révisions de séquence ne présentent pas les analyses et modifications d'analyses associées ; ces informations ne sont accessibles que dans les journaux d'échantillons individuels.

La gestion des révisions de séquence crée aussi plus de révisions que prévu. Ces révisions sont créées pour deux catégories de modifications :

- Modifications externes : modifications des résultats effectuées par l'utilisateur, par exemple réintégration d'un chromatogramme d'échantillon.
- Modifications internes : modifications de l'état de la séquence, par exemple modification de l'état de révision d'un résultat de séquence en "ready for reprocessing (prêt pour retraitement)".

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences

Les deux catégories de modifications créent des révisions de séquence. Les révisions de séquence provenant de modifications externes sont le plus souvent faciles à suivre et à comprendre. Mais les révisions de séquence internes sont le plus souvent invisibles pour l'utilisateur et produisent une révision de séquence difficile à suivre et à comprendre.

Cette section précise comment suivre et expliquer toutes les révisions d'une séquence, à l'aide de données d'exemple. Elle vous guide pas à pas dans l'utilisation des outils Cerity NDS pour tracer et faire correspondre un historique complet de la séquence.

Règles pas à pas de traçabilité des révisions de séquence

Etape 1 Identification des révisions de séquence internes ne modifiant pas la séquence

L'affichage de séquence dans Cerity NDS est organisé comme suit. Le nom de séquence est le niveau supérieur de la hiérarchie de l'historique de séquence. La sélection et l'ouverture du nœud de séquence affiche tous les sous-éléments de la séquence. Ces sous-éléments sont des tests ou résultats exécutés pour la révision en cours, en plus des révisions de séquence plus anciennes. Pour ouvrir simultanément tous les sous-dossiers d'un nœud de séquence, sélectionnez la séquence voulue pour la mettre en évidence et appuyez sur la touche étoile (*) du clavier. Tous les résultats correspondant à la révision de séquence actuelle apparaissent (dans cet exemple rev 15 de la séquence Demosequence1ac-TestCase) sous le nœud de la révision de séquence actuelle, rev 15 (voir Figure 28, page 78). Ceci inclut en particulier tous les résultats d'échantillons avec leurs numéros de révision actuels. Il est donc facile de suivre et d'expliquer le résultat actuel. La Figure 27, page 77 présente une vue générale de la séquence avec tous les sous-dossiers dans sa révision la plus récente.

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences





La Figure 28, page 78 affiche toutes les versions précédentes de la séquence. Elles sont enregistrées dans le sous-dossier "Old Revisions". La séquence d'exemple comporte quatorze révisions anciennes. Nous devons maintenant identifier les raisons et actions à l'origine de ces révisions.

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences

🚺 Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - Horst, Michael, Uli, Wolfga	ing - Ao	lmin	istrat	or - DE	002_Cerit	y A_01	04003 for Pharn	na QA-QC			_ 8 ×
<u>Eile Edit View Tools Actions Help</u>											
Result 🔻 🗋 🖌 🗐 🚺 😓											
ッš昏扈⊘計見計↑↓關幾 FillDown▼											
AllResultsRestored	<u> </u>	3	₽	Sequer	ice Table S	equence	e Options				
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 15] Calibrations Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 15] Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 15] Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 15]					Sample I	Name	Sample Type	Cal. Level	Custom Sample Group	Vial #	Injection #
P Calibration - Demosequence1aa-TestCase Calib Rev 13 [Rev 13]				1	Blank-1		Blank Run			1	1
N≊i ⊡- <mark>⊂u</mark> Blanks				2	Standard 1		Calibration	1		2	5
Blank-I [Hev b]				3	Standard 2		QC Sample			3	1
Calibratione				4	Blank-2		Blank Run			4	1
				5	Sample-V1		Sample			5	1
E Standard 1 [Rev 6]				6	Sample-V2		Sample			6	1
□ 🗘 Calibration - Demosequence1aa TestCase Calib Rev 18 [Rev 18]				7	Sample-V3		Sample			7	1
🗄 🛅 Blanks				8	Sample-V4		Sample			8	1
🕀 🧰 Calibrations				9	Sample-V5		Sample			9	1
🕀 🧰 QC Samples			HE	40	Causala MC		Casala			40	
🗄 🛅 Samples			ΠΓ	Sample	Entry Sea	uence Lo	oabook				
Group Results				Sampl	e Name:			Bun	American Lidentifier	in I Day	uintinu I
🖻 🔂 Old Revisions				Blar				man		ation Desi	cription (
Demosequence1 ac-TestCase [Rev 1]				- Poide	IIX 1						
Demosequence1 ac-1 estUase [Rev 2]					_						
Demosequence lac-lestLase [nev 3]				Sampl	e lype:						
Demosequence1ac-TestCase - Reprocessed [Rev 5]				Blar	nk Run		•				
Demosequence1ac-TestCase - Reprocessed [Rev 6]											
Demosequence1ac-TestCase - Reprocessed (Rev 7)				Custor	n Sample Gro	oup:					
Demosequence1ac-TestCase - Reprocessed (Rev 8)							•				
Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 9]											
Demosequence1ac TestCase Reprocessed [Rev 10]											
Demosequence1ac-TestCase - Reprocessed (Rev 11)				Vial N	umber Inj	jections	Volume [µl]				
				1	1		as method				
- 🖓 Demosequence1ac-TestCase - Reprocessed [Rev 13]											
- A Demosequence1ac-TestCase - Reprocessed [Rev 14]											
DataPakSeq11 · Reprocessed [Rev 4]											
🕀 🎬 DataPakSeq10 - Reprocessed [Rev 4]											
DataPakSeq9 - Reprocessed [Rev 4]											
DataPakSeq8 - Reprocessed [Rev 4]											
Hand DataPakSeq7 - Reprocessed [Rev 4]											
Here DatamakSeqb - Reprocessed [Rev 4]			,								
Till T. H6 In arai ar 26d2 - Uchinessen (Uch 4)											

Figure 28 Anciennes révisions de la séquence

Pour identifier les raisons de la révision, il faut faire appel à un ensemble d'entrées de journal de séquence, de journaux d'échantillons et de numéros de révision. La première étape pour tracer ces révisions consiste à identifier les révisions "internes". Celles-ci sont créées par Cerity NDS lors de modifications d'organisation (par exemple envoi pour exécution) qui ne changent aucun enregistrement de la séquence. C'est le logiciel Cerity, dans le cadre de ses fonctions générales, qui exécute ces modifications de séquence.

Un exemple de création de révision "interne" est "par exemple" la programmation et l'analyse d'une séquence pour acquisition de données. Après achèvement de l'entrée de données correspondant à la séquence et envoi de la séquence au système d'acquisition, Cerity NDS applique sa modification d'état interne à la séquence (de "data entry (entrée de données)" à "ready for acquisition (prêt pour acquisition)"). La modification d'état suivante sera de "ready for acquisition (prêt pour acquisition)" à "acquisition started (acquisition démarrée)" sur un instrument sélectionné. Pour l'utilisateur, il s'agit d'une seule et même action "démarrage de la séquence". Mais Cerity NDS y voit deux actions, et documente donc deux révisions de séquence. Cette création de révision interne est applicable pour chaque exécution de séquence, qu'il s'agisse d'une exécution pour acquisition ou pour retraitement de données (voir aussi "Changement de version dans le cadre des Résultats", page 71). La façon la plus rapide d'identifier une révision de séquence interne est par l'horodatage de révision de séquence au-dessus du journal de séquence, présenté sur la Figure 29, page 80. L'horodatage de création de révision est la première opération de la révision de séquence actuelle. Cette information de niveau supérieur affiche l'état de la séquence actuelle, l'opérateur qui a soumis la séquence et l'horodatage de la modification dans la base de données (voir Figure 29, page 80). L'horodatage de révision initiale mentionne aussi l'utilisateur et son nom de connexion pour faciliter la traçabilité.

3

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences

6		r Pharma QA-QC	0104003 for	ninistrator - 1 <mark>)</mark> 8002_Cerity A_	Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - Horst, Michael, Uli, Wolfgang - Adi
					<u>Ele</u> Edit <u>Y</u> iew <u>T</u> ools <u>A</u> ctions <u>H</u> elp
					Result 🔻 🗋 🖌 🔚 🗟 🖨 🛔 😓
					いるha C P+ L P+ ↑ ↓ 陽 M Fil Down ▼
he printed	sing cannot	eeds renrocessi	nalvsis ne	Bevision 1 Beady for A	AllBesultsRestored
be plinted.	ing, carnot	20401001000000	Taiyoto , no	i totololi i ji totologi loi i t	Demonstrations TestCore Represented (Rev 15)
		3	02 18:36:13	Created by User1at 09/11/	
		-			Calibrations
Timestamp	E-Sig	Comment	ltem	Description	Calibration Democracy and the TestCase Calib Rev 12 (Rev 12)
09/18/02.19:55:42	None			Sequence completed.	🖓 🗠 🖓 Calibration - Demosequence i aa-restuase Calib Nev 13 (Nev 13)
09/18/02.19:55:36	None			Sample completed.	
09/18/02.19:55:27	None			Sample started.	Blank-I [Hev b]
09/18/02, 19:55:24	None			Sample completed	🔉 🖳 🖉 Blank-1 #1 [Rev 6]
09/18/02, 19:55:14	None			Sample started.	🗋 🔄 🔄 Calibrations
09/18/02, 19:55:11	None			Sample completed.	🔥 📄 🔓 Standard 1 [Rev 5]
09/18/02, 19:55:01	None			Sample started.	📥 🗄 🗄 Standard 1 [Rev 6]
09/18/02, 19:54:58	None			Sample completed.	E-TA Calibration - Demosequence1aa TestCase Calib Rev 18 [Rev 18]
09/18/02, 19:54:47	None			Sample started.	Blanks
09/18/02, 19:54:45	None			Sample completed.	
09/18/02, 19:54:34	None			Sample started.	
09/18/02, 19:54:31	None			Sample completed.	
09/18/02, 19:54:21	None			Sample started.	E Samples
09/18/02, 19:54:18	None			Sample completed.	🕀 🔂 Group Results
09/18/02, 19:54:05	None			Sample started.	🖻 🚖 Old Revisions
09/18/02, 19:54:01	None			Sample completed.	Demosequence1ac-TestCase [Rev 1]
09/18/02, 19:53:47	None			Sample started.	Demosequence1 ac-TestCase [Rev 2]
09/18/02, 19:53:44	None			Sample completed.	Democequence1 ac.TextCace_[Rev 3]
09/18/02, 19:53:35	None			Sample started.	Demosciquence1 ac TestCase Represented (Rey 4)
09/18/02, 19:53:32	None			Sample completed.	
09/18/02, 19:53:22	None			Sample started.	Demosequence I ac-LestCase - Reprocessed [Rev 5]
09/18/02, 19:53:19	None			Sample completed.	Demosequence1 ac-1 estCase - Reprocessed [Rev 6]
09/18/02, 19:52:26	None			Sample started.	- A Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 7]
09/18/02, 19:52:24	None			Sample completed.	🖓 Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 8]
09/18/02, 19:52:14	None			Sample started.	📲 Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 9]
09/18/02, 19:52:13	None			Lest started by user 'user 3'	A Demosequence1 ac-TestCase - Reprocessed [Rev 10]
09/18/02, 19:52:12	None			Sequence started.	Demosequence1 ac-TestCase - Benrocessed (Bey 11)
09/18/02, 19:52:12	None			Sequence queued.	Democrany and a Test Case . Reprocessed [Rev 12]
00/10/02 10:52:11	Mana			sequence validated for correct	Demonsequence1 as TestCase Represented [Paul 12]
03/10/02, 13:32:11	none			Soguenes 'Demotoguenes1	
				ac-TestCase -Benrocessed'	Demosequence ac- estLase - Reprocessed [Rev 14]
				reprocessing with method	DataPakSeq11 - Heprocessed [Hev 4]
				currently attached to the	E - 🍄 DataPakSeq10 - Reprocessed [Rev 4]
09/18/02, 19:51:27	Signed	Updated		results, revision · 2	🕀 🆓 DataPakSeq9 - Reprocessed [Rev 4]
09/18/02, 19:49:44	None			Sequence completed.	🗄 👫 DataPakSeq8 - Reprocessed [Rev 4]
09/18/02, 19:49:36	None			Sample completed.	T A DataPakSeg7 - Reprocessed [Rev 4]
09/18/02, 19:49:26	None			Sample started.	DataPakSen6 - Benrocessed (Bey 4)
09/18/02, 19:49:22	None			Sample completed.	
	Signed None None None None	Updated 	 	reprocessing with method currently attached to the results, revision - 2 Sequence completed. Sample completed. Sample started. Sample completed.	

Horodatage de révision initiale de séquence

esultsRestored\Demosequence1ac-TestCase

Figure 29 Horodatage de révision initiale de séquence

Toutes les révisions internes de séquence sont identifiées par une combinaison de l'état, qui est toujours "needs reprocessing, cannot be printed (nécessite un retraitement, ne peut pas être imprimée)" et de l'horodatage. L'horodatage d'une révision de séquence interne est toujours identique à celui de la révision de séquence suivante. La révision de séquence suivante a toujours l'état "reprocessing complete, use print report to see details (retraitement achevé, utiliser l'impression de rapport pour afficher les détails)". L'association de ces entrées d'horodatage identique désigne la première révision de séquence comme une révision interne associée à la révision suivante, voir Figure 30, page 81. La Figure 30 montre que la révision de séquence 1 est une révision "interne" alors que la révision de séquence 2 est le premier résultat de la séquence qui est aussi imprimable.

Revision 1, Ready for Analysis, needs reprocessing, cannot be printed.

Created by User1 at 09/11/02, 18:36:13

Revision 2, Completed all ACQs, use "Print Report..." to see details.

Created by User1 at 09/11/02, 18:36:13

Figure 30 Superposition de deux horodatages de révision de séquence identiques

En résumé, vous pouvez facilement identifier toutes les révisions de séquence créées par l'exécution ou le retraitement de séquence. La sélection de chaque révision de séquence pour comparaison avec l'entrée de révision et l'horodatage ainsi que le commentaire permet d'identifier les révisions de séquence internes supplémentaires. Les révisions de séquence dont l'horodatage et l'identification d'utilisateur sont identiques sont associées et sont dues à un retraitement de séquence. Un simple clic sur chaque révision ancienne affiche ces données et permet de suivre et de documenter toutes les révisions de séquence créées par l'exécution/retraitement de séquence.

REMARQUE

Les révisions de séquence créées par acquisition et retraitement de données n'ont pas d'autres modifications qu'un nouveau résultat pour tous les calculs associés à la séquence, par exemple résultats de quantification. Ces résultats peuvent être facilement imprimés pour documentation complète des modifications. Les modifications d'analyse individuelles ou de paramètres de traitement de données sont documentées dans les journaux d'échantillons associés et créent en plus des révisions de séquence séparées, voir aussi l'étape 2.

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences

Etape 2 Suivre toutes les modifications de séquence créées par des modifications d'analyse individuelles, par exemple réintégration manuelle d'étalons ou modification de méthode

D'après l'identification des révisions de séquence de retraitement, les révisions de séquence 3 et 8-9 ont été causées par des modifications dans l'intégration ou l'étalonnage des échantillons de la séguence. L'identification des modifications du résultat nécessite le plus souvent la création de révisions de résultats des échantillons individuels et de l'horodatage de la révision de séquence. Vous pouvez identifier les échantillons comportant une étape de réanalyse individuelle supplémentaire parce que toutes les révisions de résultat d'échantillons sont augmentées de 1 dès la modification ou l'exécution du retraitement. Dans les données d'exemple de la Figure 31, page 83, le numéro de révision d'étalon pour tous les résultats d'injection est de six (révision 1 au moment de l'acquisition de données plus cing événements de retraitement). Il est essentiel de bien comprendre que toutes les révisions de résultats doivent avoir le même numéro de révision si les révisions de séquence résultent d'un retraitement sans application de modification individuelle.

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences

<mark> </mark>], P	Agilent Cerity NDS for Pharmaceutical QA/QC - Horst, Michael, Uli, Wolfgang	- Adn
Eile	<u>E</u> dit <u>V</u> iew <u>T</u> ools <u>A</u> ctions <u>H</u> elp	
Re	sult 🔹 🗋 🖌 🗐 🔒 🔒 🗛 🔍 👰 🤧 🛝 🛽	🗉 Lay
K.) X 🖻 🖻 🖉 3= 1. => ↑ ↓ 📓 🎘 Fill Down ▼	
		a i
Ø	All resolution resolution and the solution of	-
² #4	Standard 1 #2 [Rev 4]	
?	✓ Standard 1 #2 [rick 4] ✓ Standard 1 #3 [Rev 4]	
	🚽 🖉 Standard 1 #4 [Rev 4]	
2	🚽 🖉 Standard 1 #5 [Rev 4]	
😤	⊟ – 📮 Standard 1 (Rev 6)	
*	Standard 1 #1 [Hev 6]	
	Standard 1 #2 [Nev 5]	
3	🖉 Standard 1 #4 [Rev 5]	
	Standard 1 #5 [Bey 5]	
	🖻 📲 🔓 Standard 1 (Rev 7)	
	Standard 1 #1 [Rev 7]	
	Standard #2 [Hev 6]	
	Standard 1 #3 [nev 6]	
	🖉 🖉 Standard 1 #5 [Rev 6]	
	📮 🤤 🔤 Samples	
	⊡… 🔓 Standard 2 [Rev 6]	
	Standard 2 #1 [Hev 6]	
	Standard1Check #1 [Rev 6]	
	🚊 🖞 Sample-V1 [Rev 6]	
	🖉 🖉 Sample-V1 #1 [Rev 6]	
	⊟ <mark>[]</mark> Sample-V2 [Rev 7]	
	Sample-V2 #1 [Rev 7]	
	⊡ ⊔ sample v s [nev 6]	
	⊡ D Sample-V4 [Rev 6]	
	🖉 🖉 Sample V4 #1 [Rev 6]	
	📄 📮 Sample-V5 [Rev 6]	
	∲ Sample-V5 #1 [Rev 6]	
	□ Gample-V6 [Rev 6]	
	User Defined Samole Group Result	-

Figure 31Identification des résultats d'échantillons avec modification
individuelle pour Sample V2 et Standard 1

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences

Dès la modification d'un seul résultat, le numéro de révision de l'échantillon modifié est supérieur à celui des autres révisions. Dans cet exemple, deux révisions d'échantillons, **V2** et **standard 1**, sont non conformes à l'exigence "Tous identiques" des résultats, comme le montre la Figure 31, page 83. Les deux ont le numéro de révision 7, ce qui indique que ces échantillons comportent une étape de retraitement individuel supplémentaire. Les journaux de ces échantillons affichent maintenant les modifications actuelles pour les échantillons individuels. La Figure 32 présent un extrait du journal de l'échantillon V2.

6	Agilent Cerity ND5 for Pharm	aceutical QA/Q0	: - Horst, Micha	el, Uli, Wolfg	ang - Administ	trator ·	- DB002_Ceril	ty A_0104	003 for Phar	ma QA-QC		_ 8 ×
Eile	<u>Edit View Tools Actions</u>	Help										
R	esult 🔻 🗋 👻 🔙	🗟 🖨 🚦 🛛	Ð, Q, 🦅 🛙	Layout 💌								
K) X & 8 / J = 1, 1	• ↑ ↓ 🐘	🆄 Fill <u>D</u> own 🔻									
Ø	AlResultsRestored			-	1 4				Res	ults Table		
<u>.</u>	🥟 🖉 Standar	d1 #5 [Rev 5]										
*** ₩?	🖻 🖞 Standard 1	[Rev 7] d 1 #1 [Rev 7]				Compou	und Name	Injectio	n#	RT	Peak Area	MeanArea
	🚽 🖉 Standar	d 1 #2 [Rev 6]				ludroch	lorothiazide					1711 84603
(🚽 🖉 Standar	d 1 #3 [Rev 6]				iyaroon.		1		8.69	1711.85	
6 5	l l l a cum	un ex inclué				Liei	popril					2328.21367
-												
×	oabook)											
		1										
	Description	ltem	Comment	E-Sig	Timestam	p	Source		Туре	Host	_	
	DAS8: Failed to calculate the	CIM-IL-I		Maria	00/10/00 11	07.57	DAG		E	CEDITVAD 00		
	results for all peaks.	SIMethod		None	09/12/02,11	1:37:57	DAS		Error	CERITYAQ-03	-	
	A date of a second intermetion			N ODE		137157	outomation		Darotto Billoto	FBI TOLLIS	-	
	Added a manual integration											
	2 9394790349460E an signal											
	VM/D1 A injection #1	Silvlethod	Undated	Signed	09/12/02 18	07/20	lab1\Lleor2		Audit	CHEM22		
	Added a manual integration	SIMECIOU	opualeu	Jigheu	03/12/02, 10	5.57.55	IdD1103612		Adult	UTEMZZ	-	
	event Solit Peak at											
	4 10276142739179 on signal											
	VWD1 A, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 16	5:37:39	lab1\User2		Audit	CHEM22		
	Added a manual integration											
	event Draw Peak Baseline from											
	3.00904262908954 to											
	3.07694477141992 on signal											
	VWD1 A, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 16	5:37:39	lab1\User2		Audit	CHEM22		
	Added a manual integration											
	event Draw Peak Baseline from											
	13.3754363581931 to											
	16.9742499017028 on signal	014-0	11-4-1-4	Circuit .	00/10/00 10		L-L-11 Lanex2		A	CUEWOO		
	VWDTA, Injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 16	537:33	labi voserz		Audit	CHEMZZ		
	Added a manual integration											
	0 20E4007200E0E to											
	9 7992568621268 on signal											
	W/D1 A injection #1	SIMethod	Undated	Signed	09/12/02 16	37-39	lab1\User2		Audit	CHEM22		
	Sample started.			Inone	09/12/02	37.92	Automation		Information	LEBITAGE		
	Sample completed.			None	09/12/02 11	1:08:15	Automation		Information	CERITYAQ-03		
	Sample completed			None	09/12/02 11	1:08:12	Automation		Information	CERITYAQ-03		
	DAU40: Not all results have been	1			,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,							
	calculated correctly	SIMethod		None	09/12/02, 11	1:08:11	DAU		Error	CERITYAQ-03		
	Sample started.			None	09/12/02, 11	1:08:06	Automation		Information	CERITYAO 03		
	Sample completed.			None	09/12/02, 14	4:30:09	Automation		Information	CERITYDB-01		

Figure 32 Extrait du journal d'échantillon V2

Le journal d'échantillons montre que l'utilisateur User2 a appliqué des événements d'intégration manuelle à cet échantillon.

REMARQUE

Les événements apparaissent tous avec le même horodatage parce que le journal d'échantillon enregistre l'heure de l'action "enregistrement dans la base de données" plutôt que les entrées individuelles au clavier.

Le journal de l'échantillon "standard 1" affiche les modifications de résultats manuelles pour cet échantillon comme indqiué sur la Figure 33.

Description	ltem	Comment	E-Sig	Timestamp	Source	Туре	Host
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Event Time' from 0.2' to '0' for the Event Baseline at Valleys, Event Value On, Event Table VWD, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Change the 'Event' from 'Area Reject' to 'Baseline at Valleys' for the Event Time 0.2, Event Value Dn, Event Table VWD, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Added new Timed Event Area Reject at time 0.2 with value 0 on VWD, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Deleted timed event Area Reject at time 0.2 from VWD, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Added new Timed Event Area Reject at time 0.2 with value 0 on VWD, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, injection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the ntegration parameters set, niection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02. 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the integration parameters set, niection #1	SIMethod	Updated	Signed	09/12/02, 14:08:35	lab1\User2	Audit	CHEM22
Signal re-integrated using the	ennoundd	opadiod	orgridd	00, 12, 02, 14,00,00	1351 100012	r isseet	0.121122

Figure 33 Extrait du journal d'échantillons pour Standard 1

Le journal de la Figure 33, page 85 ne présente qu'un extrait des modifications sur standard 1. Le journal affiche des modifications essentiellement associées aux événements et paramètres d'intégration individuels.

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences

En résumé, le contrôle des numéros de révisions de l'analyse du résultat (étalonnages, échantillons et échantillons CQ) dans la dernière révision de séquence documente tous les échantillons réanalysés individuellement (où individuellement signifie "en dehors du traitement complet de la séquence"). Si le nombre d'événements de retraitement de séquence est connu, le numéro de révision de résultat par défaut est aussi connu (nombre d'événements de retraitement plus 1 pour l'acquisition initiale). Chaque échantillon dont le numéro de révision est supérieur au numéro par défaut doit comporter des événements de réanalyse individuels. Dans la séquence d'exemple, ce sont deux échantillons, standard 1 et V2. Les journaux affichent les modifications actuelles et permettent une traçabilité complète des modifications de réanalyse.

Etape 3 : Correspondance entre les modifications d'échantillons et les révisions de séquence

La correspondance des modifications de résultats avec les révisions de séquence utilise les horodatages de création et de modification de séquence. Standard 1 a été réanalysé le 09/12/02 à 14:08:35 (heure d'enregistrement des modifications). L'action suivante d'enregistrement de séquence est documentée à 14:53:15. Donc les modifications des paramètres d'intégration pour standard 1 sont les modifications de la révision de séquence 2 à la révision 3. La documentation de modification pour la révision 3 est constituée des actions suivantes : modification du paramètre d'intégration pour standard 1 et intégration automatique pour cet étalon. L'application de ces paramètres a créé une révision de séquence 4 (interne) et une révision de séquence 5 (retraitement terminé).

La réintégration manuelle de V2 a été enregistrée à 16:37:39.

REMARQUE

La correspondance des événements réels pour cet exemple spécifique est très difficile parce que les ordinateurs de cette grappe n'ont pas d'horodatage synchronisé. Ceci apparaît sur le journal en affichant les colonnes "host" pour vérifier les heures locales des trois ordinateurs CHEM22, PCERITYAQ et CERITYDB. Les deux étapes de réanalyse expliquent maintenant deux des trois révisions de séquence restantes. Il faut donc documenter les informations sur la dernière révision de séquence dans le journal de séquence.

REMARQUE L'enregistrement des modifications d'échantillons individuelles est indépendant de l'enregistrement de la séquence. Ceci explique la différence entre les heures de modification du résultat et de la révision de séquence suivante.

Etape 4 : Consultation du journal de séquence pour y rechercher des modifications d'étalonnage

Le journal de séquence enregistre tous les événements associés à la séquence. Ces événements sont essentiellement l'exécution, la création, la modification de séquence ou le retraitement d'événements, mais ils peuvent aussi inclure des modifications d'entrée d'échantillons. Dans l'exemple présenté, le journal de séquence donne toutes les modifications de la quantité d'échantillon pour les lignes d'échantillon 2, 3 et 11. Ces modifications ont été enregistrées le 09/12/02 à 16:29:48 comme le montre la Figure 34, page 88.

3

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences

Earc									
sult	▼ 🖸 ▼ 🖬 🗟, 😂 _								
*	≞∎⊿≱₽₽↑↓	🖏 🆄 Fill <u>D</u> own ▼							
AlRe	sultsRestored 🔹 🔹 🗗	Revision 10, Ready for	Reprocessi	nq , needs re	processing	, cannot be printed.			
	⊟- δ Sample V6 [Rev 6 ▲]		-	-	-				
	∲ Sample-V6 #1	Created by User2 at 09/1	2/02, 17:37:52						
L E	- 🕞 Group Results								
	- Thuser Defined Sample G	Description	ltem	Comment	E-Sig	Timestamp	Source	Туре	Host
	D Calibration	Sample started.			None	09/12/02, 11:37:38	Automation	Information	CERITYAQ {
	ID OC Samples	Sample completed.			None	09/12/02, 11:37:36	Automation	Information	CERITYAQ
	TO Camples	Sample started.			None	09/12/02, 11:37:26	Automation	Information	CERITYAQ
		Sample completed.			None	09/12/02, 11:37:24	Automation	Information	CERITYAQ
-		Sample started.			None	09/12/02, 11:37:13	Automation	Information	CERITYAQ
	Demosequence1ac-Tes	Sample completed.			None	09/12/02, 11:37:10	Automation	Information	CERITYAQ
	- 🌇 Demosequence1 ac-Te:	Sample started.			None	09/12/02, 11:36:24	Automation	Information	CERITYAQ
	📲 Demosequence1 ac-Te	Sample completed.			None	09/12/02, 11:36:21	Automation	Information	CERITYAQ
	- A Demosequence1 ac-Tes	Sample started.			None	09/12/02, 11:36:11	Automation	Information	CERITYAQ
	Demosequence1ac-Tex	Test started by user 'User2'			None	09/12/02, 11:36:10	UserStamp	Information	CERITYAQ
	R Democeration Tex	Sequence started.			None	09/12/02, 11:36:09	Automation	Information	CERITYAQ
		Sequence queued.			None	09/12/02, 11:36:09	Automation	Information	CERITYAQ
	Demosequence lac-les	Sequence validated for correct							
	Demosequence1 ac-Te:	input.			None	09/12/02, 11:36:08	Automation	Information	CERITYAQ
	- 🎒 Demosequence1 ac-Te:	Sequence 'Demosequence1							
	- 🐴 Demosequence1 ac-Te:	ac-TestCase -Reprocessed							
	- A Demosequence1 ac-Tes	reprocessing with method							
	Demosequence1 ac-Tes	currently attached to the			e: 1	00 110 100 10 00 10		A 15	CUEMOO
	Benesequence1 ac Tec	results, revision - 2		Updated	Signed	09/12/02, 16:38:43	lab1\User2	Audit	CHEM22
	Demosequence ac-res	Lhange the Sample Amount	C			00 110 100 10 00 40		A D	CUEMOO
	Bemosequence1ac-1et	from 28.3 to 43.76000.	Sample line 3	Updated	None	09/12/02, 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
0.4	DataPakSeq11 · Reprocessed	Lunange the Sample Amount	Concela Sec. 11	I la data d	Nama	00/10/00 10:00:40	L-1-1-1-1-1-1	66a	CUEMOO
Ð 🗗	DataPakSeq10 - Reprocessed	Change the 'Sample Amount'	sample line i i	opoateo	None	03/12/02, 16:23:40	Iab1 \ User2	Audic	
- A	DataPakSeg9 · Reprocessed	from '1' to ' 29 20000'	Sample line 2	Updated	None	00/10/00 16:00:40	lab1\Ulaar2	Audit	CUEM22
- Z	DataPakSeg8 - Reprocessed	Change the 'Amount' from '0' to	Sample line S	opualeu	NUNE	03/12/02, 10:23:40	IdD1 (USEI2	Audit	CHEMZZ
. ,	DataPakSeg7, Beprocessed		Sample line 2	Undated	None	09/12/02 16:29/48	lab1\User2	Audit	CHEM22
	Data DatsCarC Depresented	Change the 'Amount' from '0' to	Sample line 2	opuacea	NONG	00/12/02, 10.20.40	10011103612	Audic	CHEMZZ
1	a Datarakseyo nepiocesseu	10 02189'	Sample line 2	Undated	None	09/12/02 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
ŧ	DataPakSeq5 · Heprocessed	Change the 'Use' from '0' to '1'	Sample line 2	Undated	None	09/12/02 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
Ð 🗗	DataPakSeq4 · Reprocessed	Change the 'Use' from '0' to '1'	Sample line 2	Undated	None	09/12/02 16:29:48	lab1\User2	Audit	CHEM22
- A	DataPakSeq3 · Reprocessed	Sequence completed			None	09/12/02 11:09:50	Automation	Information	CEBITYAO
÷.7	DataPakSeg2 · Reprocessed	Sample, completed			None	09/12/02 11:09:44	Automation	Information	CEBITYAO
- 3	DataPakSeg1 Reprocessed	Sample started			None	09/12/02 11:09:32	Automation	Information	CERITYAO
- -	DataPakSeq0 Beprocessed	Sample completed			None	09/12/02 14:31:29	Automation	Information	CEBITYAO
т <mark>В</mark>	B para avaedo . Liebioressen	Sample started			None	09/12/02 14:31:20	Automation	Information	CEBITYAO
		a oumpio stattou.	-		NONG	55/12/02, 14:51:20	Automation	nionnauon	- actini rag

Figure 34 Extrait du journal d'échantillons présentant les modifications de quantification

Avec ces modifications de quantités d'échantillon, la documentation des modifications de toutes les révisions de séquence est terminée. Il reste à faire correspondre ceux-ci avec les révisions de séquences restantes 3, 8 et 9.

REMARQUE

Si tous les ordinateurs de la grappe ont été synchronisés, une correspondance directe à partir des horodatages est possible. Sans synchronisation de ces horodatages, nous devons nous fier aux entrées de données dans les journaux de séquence en supposant que l'ordre d'arrivée est "premier arrivé, premier servi". Donc les entrées dans le journal de séquence ne sont pas triées par horodatage, mais par ordre d'arrivée.

Le Tableau 7 présente toutes les révisions de séquence avec leur historique et motifs de modification.

No. rév.	Date	Horodatage (non synchronisé)	Statut donné	Action identifiée	Motif de révision	Explication
1	11-Sep	18:36:15	Prêt pour analyse, nécessite un retraitement	Acq terminée	interne	Révision interne pour envoi de séquence
2		18:36:15	Acq terminée, prêt pour impression	Acq terminée, traitement de données effectué	Premier résultat	Acquisition de données terminée
3	12-Sep	14:53:15	Prêt pour analyse, nécessite un retraitement	Un échantillon modifié individuellement	Modification d'un résultat dans la séquence	Modification de l'échantillon appelé Standard 1
4	12-Sep	15:25:36	Non terminé, nécessite un retraitement	Envoi pour retraitement	interne	Associé à la rév. 5 pour retraitement
5	12-Sep	15:25:36	Prêt pour impression	Retraitement exécuté	Retraitement	Premier retraitement exécuté
6	12-Sep	17:07:54	Non terminé, nécessite un retraitement	Envoi pour retraitement	interne	Interne à cause du retraitement
7	12-Sep	17:07:54	Prêt pour impression	Retraitement exécuté	Résultat de séquence mis à jour	Deuxième retraitement exécuté

Tableau 7 Documentation des révisions de séquence, avec les éléments de modification

Gestion des révisions et traçabilité dans les séquences

No. rév.	Date	Horodatage (non synchronisé)	Statut donné	Action identifiée	Motif de révision	Explication
8	12-Sep	17:28:07	Non terminé, nécessite un retraitement	Modification des données de quantification	Modification des résultats d'échantillon	Quantité d'échantillon modifiée
9	12-Sep	17:33:01	Non terminé, nécessite un retraitement	Réintégration de l'échantillon V2	Modification des résultats d'échantillon	Application d'intégration manuelle pour l'échantillon V2
10	12-Sep	17:37:52	Non terminé, nécessite un retraitement	Envoi pour retraitement	interne	interne à cause du retraitement
11	12-Sep	17:37:52	Prêt pour impression	Retraitement exécuté	Retraitement	Troisième retraitement exécuté
12	12-Sep	20:44:16	Non terminé, nécessite un retraitement	Envoi pour retraitement	interne	Quatrième retraitement exécuté
13	12-Sep	20:44:16	Prêt pour impression	Retraitement exécuté	Retraitement	
14	18-Sep		Non terminé, nécessite un retraitement	Envoi pour retraitement	interne	Cinquième retraitement exécuté
15	18-Sep		Révision actuelle, prêt pour impression	Aucune, révision actuelle	Aucune	Aucune

Tableau 7 Documentation des révisions de séquence, avec les éléments de modification (suite)



4

Système de données en réseau Agilent Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Guide des concepts

Configuration de la méthode

Concepts des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique 93 Sections des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique 98 Etalonnage 104 Calculs personnalisés 110 Mise en page de la consultation de données 127 Rapports 130

Apprenez les concepts qui vous aideront à configurer les méthodes. Servez-vous de ce chapitre comme d'une aide pour réaliser les exercices de la section de configuration des méthodes du *Guide de mise en route*.



Le diagramme ci-dessous montre aux utilisateurs expérimentés et aux administrateurs les étapes de la configuration d'une méthode. Démarrez à la case **GO!**.



Chaque thème abordé dans ce chapitre vous apportera les informations de base vous permettant de parcourir le diagramme de progression.

Concepts des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Vous commencez par créer une méthode maître lorsque vous sélectionnez **Method** dans la liste **New** de la barre d'outils standards.

Méthode maître

Une *méthode maître* est une méthode attribuée à un nombre limité d'utilisateurs qui seuls peuvent l'éditer. Tous les utilisateurs peuvent utiliser une méthode maître.

Lorsque vous êtes prêt à laisser les autres utilisateurs modifier la *méthode maître*, vous pouvez publier la version en cours. Si votre administrateur a activé l'audit de la tâche "Release a method" vous devrez éventuellement entrer votre nom d'utilisateur et votre mot de passe pour publier la méthode.

Après avoir publié la méthode maître, toute personne possédant les droits d'édition des méthodes peut éditer la version publiée. Si vous modifiez la méthode maître, la nouvelle version n'est pas publiée tant que vous ne le faites pas explicitement.

Méthode instrument

Une *méthode instrument* est une méthode maître publiée ayant été attribuée à un nouvel instrument. Tout utilisateur peut éditer et utiliser une méthode instrument.

Après avoir publié une méthode maître, vous pouvez l'attribuer à un autre instrument à l'aide du **Method Wizard**. Pour attribuer la méthode vous devez créer une *méthode instrument* ayant pour modèle la méthode publiée. Les utilisateurs peuvent alors éditer les paramètres originaux dans la vue Method (Méthode) dès lors qu'ils en possèdent le droit attribué par l'administrateur Cerity.

4

4 Configuration de la méthode

Concepts des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Si l'instrument auxquel vous attribuez la méthode est configuré différemment de la méthode originale, assurez-vous de modifier les paramètres instruments dans la vue Method (Méthode).

Vous pouvez commençer à créer une méthode instrument en sélectionnant **Instrument Method** dans la liste **New** de la barre d'outils standards.

Pour plus d'informations sur le Method Wizard (Assistant méthode) et la vue Method (Méthode), cf. "Vue Method (Méthode)", page 25, et "Configuration de la méthode", page 43.

Méthode d'échantillons individuels ou de séquences

Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique vous permet de créer des méthodes pour analyser des échantillons individuels ou en séquence. En conséquence, la même méthode est utilisée pour tous les échantillons à l'intérieur d'une séquence.

Il y a plusieurs différences entre les méthodes d'échantillons individuels et les méthodes de séquences :

- Une méthode de séquence renferme un tableau dans lequel vous définissez une séquence que vous utilisez fréquemment.
- Une méthode de séquence regroupe les échantillons et les étalons pour des calculs spécifiques et les rapports, par exemple groupe d'échantillons CQ, groupe d'échantillons d'étalonnage, groupe d'échantillons et groupe d'échantillons personnalisés.
- Il est possible d'inclure un calcul de bruit pour les séquences, ce n'est pas le cas pour une méthode d'échantillons individuels.
- Les séquences permettent également de choisir l'ordre d'étalonnage et les procédures d'étalonnage.

Méthodes associées aux entrées et aux résultats

Lorsque vous entrez un échantillon individuel ou que vous créez une nouvelle séquence, sélectionnez la méthode à utiliser respectivement avec l'échantillon et la séquence. Les informations et instructions incluses dans la méthode restent associées à l'échantillon ou à la séquence pendant toute l'analyse et dans les résultats.

Cela signifie que si vous modifiez la valeur d'une entrée échantillon ou d'un paramètre d'intégration puis retraitez l'analyse, les calculs sont effectués à nouveau avec la version de méthode associée à l'origine aux résultats. Si vous modifiez une méthode ou si vous voulez utiliser une méthode différente pour retraiter les résultats, vous devez d'abord respectivement associer aux résultats la version en cours ou la nouvelle méthode.

Entrées et modifications d'une méthode

Les entrées et les modifications d'une méthode sont illustrées figure ci-dessous.



4

4 Configuration de la méthode

Concepts des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Versions de méthode

Lorsque vous créez et sauvegardez un modèle de méthode avec l'assistant, la méthode reçoit le numéro de version 1. Chaque fois que vous modifiez et sauvegardez la méthode au-delà de la version1, une nouvelle version est créée. Une nouvelle version est également créée par l'opération de publication d'une méthode maître.

Si vous sélectionnez une ancienne version dans le dossier Old Revisions du dossier de la méthode sélectionnée, la **Method Description** et le **Method Logbook** de cette version apparaissent dans le cadre actif.

Que pouvez-vous faire avec les méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique ?

Grâce aux méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique, vous pouvez :

- Attribuer une méthode à un instrument en vue de son contrôle.
- Utiliser vos propres multiplicateurs et diviseurs pour calculer la concentration de chaque échantillon.
- Utiliser vos propres variables échantillon personnalisées pour des calculs spécifiques et l'élaboration des rapports.
- Utiliser une table de séquence comme modèle pour les séquences similaires ou identiques.
- Utiliser un chromatogramme-exemple pour vous aider à intégrer et à identifier les pics.
- Effectuer la somme des aires de tout le chromatogramme.
- Entrer les quantités variables des composés pour chaque étalonnage mono ou multiniveau.
- Quantifier les échantillons dans les séquences en utilisant un étalonnage avant les échantillons, un étalonnage avant et après les échantillons ou tous les étalonnages de la séquence.

- Analyser des échantillons avec une méthode contenant déjà des facteurs de réponse ou analyser des séquences dont la quantification des échantillons est mise à jour avec les échantillons d'étalonnage de la séquence.
- Quantifier les composés non étalonnés et les pics non identifiés en utilisant les facteurs de réponse des composés étalonnés.
- Utiliser vos propres variables et formules personnalisées pour calculer les statistiques d'un groupe de résultats ainsi que d'autres calculs dont votre laboratoire aurait besoin.
- Observer les annotations réussite/échec et les avertissements émis lorsque le résultat des calculs ne tombe pas dans une fourchette prédéfinie.
- Consulter tous les champs, toutes les variables et tous les calculs présents dans le tableau de résultats et dans le rapport.
- Utiliser les variables d'aptitude du système déjà présentes pour tester ses performances.
- Utiliser des types de rapport prédéfinis associés à des modèles que vous changez ou créez pour élaborer les rapports dont vous avez besoin.

4 Configuration de la méthode

Sections des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Sections des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Une méthode Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique comprend tous les paramètres permettant de contrôler l'instrument, l'acquisition, le traitement et l'évaluation des données. En outre, la méthode contient les variables échantillon que vous avez définies et des modèles pour les séquences (sequence template), la consultation des résultats (data review layout) et les rapports (report template).

Utilisez le **Method Wizard** pour sélectionner les sections et options que vous avez besoin de faire apparaître dans le modèle de la méthode et dans la vue de la méthode. Toutes les sections qui peuvent apparaître dans une vue Method (Méthode) sont décrites dans les paragraphes ci-après.

Configuration de l'instrument

Cette section vous permet d'entrer les paramètres pour les instruments configurés.

Une *méthode de stabilisation* est une méthode configurée avec des paramètres instrumentaux uniquement dans le but de laisser la colonne atteindre sa température d'équilibre pour stabiliser la ligne de base.

Vous pouvez utiliser une méthode de stabilisation pour stabiliser l'instrument et la colonne avant une analyse ou à la fin d'une séquence pour préparer la colonne à la séquence suivante. Prenez soin d'indiquer un volume d'injection nul pour l'échantillonneur automatique.

Variables échantillon

Les variables échantillon sont des facteurs et des variables utilisés pour la quantification, les calculs personnalisés et les rapports.

Variables échantillon système

L'application AQ/CQ pharmaceutique fournit un multiplicateur et un diviseur comme variables de quantification. En leur attribuant un nom d'en-tête, ces variables sont activées.

Quand vous attribuez une méthode qui utilise ces variables à un échantillon ou une séquence, les variables avec leurs valeurs par défaut apparaissant sur l'onglet **Amounts** du cadre **Sample Entry** (Entrée des échantillons). Vous pouvez modifier les valeurs de ces variables pour chaque échantillon avant l'analyse.

	Variable ID	Display Name	Default Value	
1	Multiplier_1	Multiplier	1	
2	Multiplier_2	Dilution	1	
3	Multiplier_3	Purity	1	
4	Multiplier_4		1	
5	Multiplier_5		1	
6	Divider_1	Divisor	1	
7	Divider_2		1	
8	Divider_3		1	
9	Divider_4		1	

Variables échantillon personnalisées

Vous pouvez définir votre propre groupe de variables comme des multiplicateurs ou des diviseurs utilisées dans des calculs personnalisés et les rapports. Vous pouvez entrer des noms d'en-tête, des valeurs par défaut et des commentaires qui apparaissent dans les tableaux de rapport des échantillons.

Modèle de séquence

Un *modèle de séquence* vous permet d'indiquer l'ordre et le nombre des échantillons d'étalonnage et des échantillons inconnus dans la table de séquence.

4 Configuration de la méthode

Sections des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Le modèle de séquence apparaît comme la table de séquence dans la vue Echantillon une fois que vous avez créé une séquence pour la méthode utilisant ce modèle. Vous pouvez programmer l'analyse de la séquence sans effectuer de changement dans la table basée sur le modèle.

Si vous avez besoin de saisir des échantillons d'étalonnage dans le modèle de séquence, vous devez commencer par configurer l'étalonnage dans le traitement des données.

	Sample Name	Sample Type	Cal. Level	Bracketing	Custom Sample Group	Vial #
1	wfj_171001_i20_1FA_cl_1.1	Calibration	1	Open	1FA_cl_1	1
2	wfj_171001_i20_1FA_cl_2.1	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1
3	wfj_171001_i20_1FA_cl_3.1	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1 :
4	wfj_171001_i20_1FA_sa_1.1	Sample			1FA_sa_1	1 :
5	wfj_171001_i20_1FA_sa_2.1	Sample		1	1FA_sa_2	1 :
6	wfj_171001_i20_1FA_sa_3.1	Sample			1FA_sa_3	1 :
7	wfj_171001_i20_1FA_cl_1.2	Calibration	1	None	1FA_cl_1	1 :
8	wfj_171001_i20_1FA_cl_2.2	Calibration	2	None	1FA_cl_2	1 :
9	wfj_171001_i20_1FA_cl_3.2	Calibration	3	None	1FA_cl_3	1 :
10	wfj_171001_i20_1FA_sa_1.2	Sample			1FA_sa_1	1 :
11	wfj_171001_i20_1FA_sa_2.2	Sample		8	1FA_sa_2	1 :

Chromatogramme-exemple

Tout chromatogramme acquis au cours d'une injection individuelle et que vous choisissez pour définir les paramètres d'intégration et d'identification constitue un *chromatogrammeexemple*.

Vous pouvez commencer par créer un *chromatogrammeexemple* avant de définir les paramètres de traitement des données de la méthode. Le chromatogramme-exemple vous permet de tester vos paramètres d'intégration et les événements d'intégration ainsi que l'identification des composés. Vous pouvez également utiliser ce chromatogramme pour comparer les résultats à d'autres échantillons.

Consultez l'aide en ligne "Produce an example chromatogram" pour savoir comment initialement produire un chromatogrammeexemple pour une méthode. Sélectionnez un chromatogramme dans la base de données ou analysez un échantillon pour obtenir le chromatogrammeexemple. Il suffit d'une méthode de base (paramètres instruments seulement) pour produire un tel chromatogramme. Il n'est pas nécessaire de sélectionner un chromatogrammeexemple pour configurer le traitement des données.

Intégration

Evénements initiaux et programmés

Vous pouvez définir les événements initiaux et chronoprogrammés pour un signal donné ou pour tous les signaux d'un détecteur.

Outils d'intégration d'un chromatogramme

Si les paramètres d'intégration du chromatogramme-exemple ne vous conviennent pas, vous pouvez modifier les paramètres d'intégration dans cette section de la méthode.



- Intégrer Le bouton d'intégration vous permet d'intégrer le chromatogramme-exemple une fois que vous avez modifié les événements.
- Intégrer automatiquement Cette fonction calcule les paramètres par défaut du chromatogramme.

Identification des composés

Possibilité d'ajouter ou de supprimer des critères d'identification



Vous pouvez utiliser la barre d'outils ou le menu contextuel, à la fois dans le chromatogramme et la table des composés pour ajouter ou supprimer des identifications. Si vous souhaitez identifier tous les pics comme des composés, la meilleure façon est d'utiliser la fonction d'ajout Add Times du bouton du signal.

Pour voir en détail les algorithmes d'intégration et les processus utilisés par Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique pour identifier les composés, consultez le Technical Reference Guide (Guide de référence technique).

Somme de pics

Pour pouvoir configurer la somme de pics il faut préalablement sélectionner l'option **Peak Summing** du **Method Wizard**. Vous pouvez ensuite interactivement délimiter la zone d'action sur le chromatogramme.

4

4 Configuration de la méthode

Sections des méthodes Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

Etalonnage

L'application AQ/CQ pharmaceutique apporte de nombreux choix pour configurer l'étalonnage. Deux points éminents permettent de distinguer l'étalonnage de Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique des autres programmes :

• Vous pouvez entrer des quantités d'échantillons-étalons pour chaque échantillon.

Pour plus d'information, cf. "Etalonnage", page 104.

• Vous pouvez définir des étalonnages dont les facteurs de réponse sont enregistrés dans la méthode et utiliser des échantillons d'étalonnage pour confirmer de temps en temps l'étalonnage. Vous pouvez aussi définir un étalonnage comportant un réétalonnage fréquent avec des échantillons d'étalonnage disséminés au long de la séquence.

Quantification

Un *groupe de composés* est un groupe de composés étalonnés ou non pour lequel vous pouvez définir des calculs personnalisés et des limites.

Les composés identifiés que vous avez supprimés de la table d'étalonnage apparaissent comme composés non étalonnés dans le cadre de quantification. Pour les composés non étalonnés et les pics non identifiés, vous pouvez spécifier un facteur de réponse basé sur le facteur de réponse d'un composé étalonné. Vous pouvez également définir des *groupes de composés* pour les composés étalonnés et non étalonnés.

Calculs personnalisés

Pour plus d'information, cf. "Calculs personnalisés", page 110. L'application AQ/CQ pharmaceutique vous permet d'inclure des calculs additionnels et des conditions agissant sur les données issues de la quantification. Ces calculs personnalisés peuvent être utilisés dans des calculs ultérieurs et peuvent être affichés dans la vue des résultats et dans les rapports imprimés. Ils sont enregistrés dans la base de données avec les résultats produits automatiquement par le logiciel.

Limites

Vous pouvez définir des limites pour les types de résultats suivants :

- Injections simples.
- Récapitulatifs d'injections multiples.
- Groupes de type d'échantillons uniquement avec les séquences.

Les variables et les calculs disponibles sont ceux qui étaient disponibles ou que vous avez défini pour les différents types de résultats dans le cadre des calculs personnalisés. A l'intérieur de chaque type de résultats, vous pouvez définir les limites pour différents groupes d'échantillons et appliquer ces limites à tous les composés ou aux groupes de composés que vous définissez dans la quantification.

Tous les résultats de comparaison aux différentes limites établies pour un même élément sont regroupés en un seul résultat.

REMARQUE

Vous pouvez par exemple définir des limites pour les phthalates qui apparaissent dans votre injection individuelle pour l'échantillon d'étalonnage. Pour cela, dans la quantification, vous définissez un groupe de composés appelé phthalates et vous lui attribuez à la fois les phthalates étalonnés et non étalonnés du groupe.

Mise en page de la consultation de données

Pour plus d'informations, cf. "Mise en page de la consultation de données", page 127. La table des résultats et les éléments récapitulatifs apparaissant dans la vue des résultats dépendent de vos choix dans *Data Review Layout (Mise en page de la consultation de données).*

Rapports

Pour plus d'informations, cf. "Rapports", page 130.

Configuration des rapports dans la méthode. Vous pouvez ensuite changer certains des paramètres de la méthode pour chaque échantillon individuel ou pour une séquence. Les rapports sont automatiquement produits lorsque l'échantillon ou la séquence sont analysés et peuvent être produits de nouveau lors d'un retraitement.

4

4 Configuration de la méthode Etalonnage

Etalonnage

Choix possibles pour l'étalonnage dans Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique

L'*Etalonnage* détermine les facteurs de réponse par l'utilisation d'échantillons d'étalonnage permettant de calculer les concentrations absolues dans les échantillons.

Un *échantillon d'étalonnage* est un échantillon contenant une quantité connue du composé à quantifier.

Un *facteur de réponse* est la valeur soit du rapport réponse/ quantité de chaque pic, soit du rapport quantité/réponse. Il peut également être calculé par une régression.

Un *étalonnage mononiveau* utilise une seule concentration d'étalon pour construire la courbe d'étalonnage. La courbe d'étalonnage se réduit à la droite passant par les deux points constitués par l'origine et le rapport concentration/réponse de l'étalon.

Un *étalonnage multiniveau* utilise différentes concentrations pour les échantillons d'étalonnage, permettant ainsi de sélectionner le meilleur type de courbe pour l'ajustement des données.

Pour l'étalonnage Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique, vous pouvez effectuer la plupart des choix avec le **Method Wizard**. Une fois que vous avez terminé avec l'assistant et que vous avez enregistré vos choix d'étalonnage, vous ne pouvez plus les modifier. Vous devez créer une nouvelle méthode avec de nouveaux paramètres.

Table d'étalonnage des composés

Vous pouvez définir une nouvelle table d'étalonnage, garder l'ancienne table d'étalonnage d'une méthode que vous copiez, ou définir un étalonnage manuel.

Modes d'étalonnage

Pour les échantillons individuels comme pour les séquences, vous pouvez définir l'étalonnage avec le Method Wizard (Assistant méthode) avec les options suivantes :

- Une quantité fixe ou variable pour un étalonnage mononiveau.
- Une quantité fixe ou variable pour un étalonnage multiniveau.
- Etalonnage manuel.

Si vous avez sélectionné **Variable Amounts** dans le **Method Wizard**, vous pourrez entrer une nouvelle quantité quand vous saisissez un échantillon ou une séquence dans la vue des échantillons. Si vous avez sélectionné **Fixed Amounts** dans le **Method Wizard**, vous devez entrer la quantité de chaque composé dans la rubrique Calibration (Etalonnage) de la vue Method (Méthode). Il n'est alors pas possible d'entrer une nouvelle quantité lorsque vous entrez un échantillon dans la vue des échantillons.

Réétalonnage et ordre de quantification

Pour les séquences, vous pouvez sélectionner le type de réétalonnage et l'ordre de quantification des échantillons avec les échantillons d'étalonnage :

- Etalonnage à mise à jour simple Un groupe d'échantillons est quantifié sur la base de l'échantillon d'étalonnage ou la moyenne des échantillons d'étalonnage qui précèdent le groupe d'échantillons.
- Etalonnage global Les échantillons d'étalonnage sont analysés et leur moyenne calculée avant que les échantillons ne soient quantifiés (appelé également encadrement par la "grande moyenne").
- **Encadrement** Un groupe d'échantillons est quantifié sur la base de la moyenne d'échantillons-étalons analysés avant et après l'échantillon à quantifier.



Etalonnage à mise à jour simple

Dans l'étalonnage à mise à jour simple, la table d'étalonnage est mise à jour après chaque analyse d'un échantillon d'étalonnage. La table d'étalonnage mise à jour est utilisée pour quantifier les échantillons suivants jusqu'au prochain échantillon d'étalonnage. La séquence des événements apparaît à la Figure 35.

La table d'étalonnage peut être initialisée avec des temps de rétention et des facteurs de réponse en utilisant la fonction de substitution **Replace** pour l'étalonnage. Ce mode est particulièrement utilisé au début d'une séquence d'analyses en CLHP.

Pour produire une moyenne mobile des temps de rétention ou des facteurs de réponse des échantillons d'étalonnage, l'option **Average** doit être utilisée pour l'étalonnage. Ce mode est utilisé en particulier après le remplacement des données d'étalonnage.



Figure 35 Déroulement du réétalonnage à mise à jour simple

Encadrement

Dans l'étalonnage avec encadrement, la table d'étalonnage est mise à jour au moyen de 2 groupes d'échantillons d'étalonnage placés avant et après le groupe d'échantillons à analyser. Les échantillons ne sont pas quantifiés jusqu'à ce que le second groupe d'échantillons d'étalonnage soit analysé. La séquence des événements apparaît à la Figure 36.

Les facteurs de réponse sont remplacés au début de l'encadrement, puis la moyenne avec les facteurs de réponse obtenus à la fin de l'encadrement est effectuée. Les temps de rétention sont traités de la même manière que dans l'étalonnage à mise à jour simple.

Pour l'évaluation des analyses d'aptitude du système, le système permet un étalonnage à mise à jour simple initial à insérer au tout début de la séquence, avant l'étalonnage encadrant.



Figure 36 Déroulement d'un réétalonnage encadrant

4 Configuration de la méthode Etalonnage

Encadrement global

Dans l'étalonnage avec encadrement global, la table d'étalonnage est initialisée au démarrage de la séquence. Les résultats du premier groupe d'échantillons d'étalonnage de la séquence remplacent l'étalonnage existant. Tous les mélanges d'étalonnage de la séquence sont ensuite utilisés pour produire une table d'étalonnage à la fin de la séquence. Cette table est ensuite utilisée pour tous les échantillons. La séquence des événements apparaît à la Figure 37.

Les facteurs de réponse sont remplacés au début de la séquence par les valeurs du premier échantillon d'étalonnage puis la moyenne avec l'ensemble des échantillons d'étalonnage de la séquence est effectuée. Les temps de rétention sont traités de la même manière que dans l'étalonnage à mise à jour simple.



Figure 37 Déroulement d'un réétalonnage encadrant global
Procédures d'étalonnage

Pour les séquences, vous pouvez choisir entre deux procédures d'étalonnage :

- Etalonnage spécifique de l'instrument.
- Etalonnage spécifique de la séquence.

Etalonnage spécifique de l'instrument Ce type de procédure d'étalonnage permet d'étalonner un instrument pour une analyse donnée. Utilisez cette procédure lorsque l'étalonnage est stable pendant une longue période. Lorsque vous analysez les échantillons d'étalonnage avec la méthode, les facteurs de réponse et les courbes d'étalonnage sont enregistrés avec la méthode. Tous les échantillons utilisant cette méthode sont ensuite quantifiés avec les facteurs de réponse de la méthode. Vous pouvez choisir de mettre à jour l'étalonnage avec de nouveaux échantillons d'étalonnage. Utilisez cette procédure principalement avec les analyses en CPG. Vous analyserez les échantillons individuels avec ce type de procédure.

Etalonnage spécifique de la séquence Ce type de procédure d'étalonnage permet d'étalonner un instrument pour la séquence en cours uniquement. Utilisez cette procédure lorsque l'étalonnage est stable pendant une courte période seulement. Les facteurs de réponse ne sont pas enregistrés avec la méthode. Ils sont mis à jour à chaque fois que vous analysez la séquence avec des échantillons-étalons pour une méthode donnée. Utilisez cette procédure principalement avec les analyses en CPL.

4 Configuration de la méthode Calculs personnalisés

Calculs personnalisés

Vous pouvez accéder aux calculs personnalisés de Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique via une interface du type tableur, similaire à Excel de Microsoft[®]. Le nombre et le type des feuilles de travail pour lesquelles vous pouvez définir des calculs dépend du type de la méthode – échantillons individuels ou séquence – et du type de résultats. Les variables de la base de données disponibles dépendent également du type de résultats.

Types de résultats disponibles pour les calculs personnalisés

Un *type de résultats* représente le type de résultats relativement à une injection, un groupe d'échantillons ou d'étalons ou une séquence.

Pour les échantillons individuels, les calculs personnalisés peuvent être définis pour les résultats d'injections individuelles ou pour les récapitulatifs d'injections multiples. Vous utilisez les variables de la méthode, y compris les variables échantillon personnalisées définies dans la méthode, ainsi que les résultats de quantification des composés et des pics pour définir les calculs.

Un groupe de type d'échantillon est un groupe de résultats d'une séquence, rangés ensemble en fonction du type d'échantillon, à savoir : échantillons d'étalonnage, échantillons CQ, ou groupes d'échantillons. Vous avez la possibilité de définir vous-même des groupes d'échantillons personnalisés.

Pour les séquences, les calculs personnalisés peuvent être définis pour les résultats d'injections individuelles ou pour les récapitulatifs d'injections multiples et les *groupes de type d'échantillon*.

Procédure de définition des calculs personnalisés

Au cours de la définition des calculs personnalisés, vous ajoutez des colonnes à la feuille de tableur pour y entrer des champs, des variables et des résultats déjà présents dans la base de données, vous ajoutez ensuite de nouvelles colonnes pour accueillir les formules de calcul des nouvelles variables que vous définissez.

Un grand nombre d'opérateurs mathématiques et d'instructions conditionnelles sont disponibles pour agir sur les variables. La syntaxe de combinaison des variables avec ces fonctions est essentiellement la même que celle d'Excel de Microsoft[®]. Consultez l'aide en ligne, onglet référence, pour trouver la description de toutes les variables et fonctions disponibles.

Remarquez que si vous ajoutez ultérieurement des composés à la méthode, vous devez reprendre les feuilles de calculs personnalisés pour faire calculer les résultats des composés supplémentaires.

Elaboration des calculs personnalisés

Pour vous aider à comprendre la procédure, regardez comment un calcul personnalisé est élaboré. En examinant cette figure, notez que le système utilise des résultats de calculs personnalisés d'injections individuelles pour calculer les résultats récapitulatifs des injections multiples. Ces résultats à leur tour peuvent être utilisés pour calculer des résultats relatifs à un type ou un groupe d'échantillons. Tous les résultats sont enregistrés dans la base de données et toutes les données en proviennent.

4 Configuration de la méthode

Calculs personnalisés



Figure 38 Hiérarchie des calculs effectués

Exemple de calculs

Calculs par groupe d'échantillons (ETR = écart type relatif (Qté échantillon A, Qté échantillon B))	Groupe d'écha	antillons 1	Groupe d'échantillons 2		
Calculs par échantillon (Qté moyenne = moyenne(Qté Inj1 + Qté Inj2)	Echantillon A	Echantillon B	Echantillon C	Echantillon D	
Calculs par injection (Quantité% = quantité impureté / quantité composé principal *100)	Inj 1 Inj 2	Inj 1 Inj 2	Inj 1 Inj 2	Inj 1 Inj 2	
Ecart type des quantités	0,14		0,08		
Quantité moyenne	1,86	2,06	3,56	3,44	
Quantité (résultat existant)	1,8 1,92	2,01 2,11	3,51 3,60	3,49 3,40	
Quantité% (calculs par injection)	0,15 0,16	0,17 0,18	0,29 0,30	0,29 0,28	

Configuration de la feuille de calcul

Vous pouvez accéder aux calculs personnalisés via une interface du type tableur, similaire à Microsoft Excel. Ces feuilles de calcul vous permettent de définir et d'effectuer des calculs sur les différents types de résultats à chaque étape du processus de calcul.

- La feuille de calcul d'injection individuelle mise en oeuvre après la quantification vous permet de définir un calcul d'injection simple pour tous les types d'échantillon. (Figure 40)
- La feuille de calcul de récapitulatif des injections multiples vous permet de définir des calculs relatifs aux injections multiples d'un même échantillon (un type de calcul valable pour tous les types d'échantillon) (Figure 41).
- La feuille de calcul de groupe de type d'échantillon vous permet de définir des calculs relatifs à un groupe d'un même type d'échantillon ou à un groupe personnalisé d'échantillons. (Figure 42)

Calculs personnalisés

Ajout de résultats/variables existants

Dans les feuilles de calcul, vous commencez par ajouter une colonne qui contient une variable ou un résultat existant avant de pouvoir définir une nouvelle formule ou un nouveau calcul utilisant cette variable ou ce résultat. Les variables ou résultats existants disponibles dépendent du type du résultat.

Add a new C	Custom Calculation Column Existing Column
Existing Items	Multiple Inj. Results
Information	
Initial Value(s)	Start Value 1 Precision [%] 2



- Variables de méthodes et d'échantillons.
- Intégration des composés et résultats de quantification.
- Intégration des pics et résultats de quantification.
- Variables échantillon personnalisées (définies dans la section Variables échantillon de la méthode).

Variables et résultats d'injection simple

Variables et résultats de récapitulatifs d'injections multiples

Variables ou résultats d'un groupe de type d'échantillon

- Variables méthode.
- Intégration des composés et résultats de quantification.
- Intégration des pics et résultats de quantification.
- Variables ou résultats définis par l'utilisateur ce sont les résultats des calculs personnalisés produits par la formule définie dans la feuille de calcul des injections simples.

Seuls les résultats des calculs personnalisés définis par l'utilisateur dans la feuille de calcul récapitulative d'injections multiples sont disponibles en tant que variables pour établir un calcul au niveau du groupe de type d'échantillon.

L'interface utilisateur de l'éditeur de modèles de rapport Cerity et le glossaire de l'aide en ligne contiennent la description de toutes les variables et résultats disponibles pour les calculs personnalisés.

Définir un nouveau calcul personnalisé Vous ajoutez également une colonne à la feuille de calcul pour définir une formule pour un calcul personnalisé dont le résultat peut être utilisé comme variable pour les autres calculs. Vous entrez le nom d'affichage et l'identificateur système pour le calcul que vous voulez définir.

ld a new Cu	stom Calculation Column	Existing Column
Variable ID:		
Display Name:	~ K	
Level:	Multiple Inj. Variables	•
	Multiple Inj. Variables	
	Compound	
Description	Single Inj. Compound #1#n	
Precision	Not Identified Peaks Variables Not Identified Peaks Summary Single	lni. #1#n
Number (of Decimals (020) :	2
O Number (of Significant digits (120) :	4
Irmation		×

Calculs personnalisés

Un *level (niveau)* est une ligne de la feuille de calcul contenant la formule ou le résultat du nouveau calcul.

Vous sélectionnez également un *level (niveau)* pour le calcul. Les niveaux de calcul de la feuille de calcul dépendent du type de résultat. Examinez les exemples de feuilles de calcul ci-dessous ainsi que sur la page suivante pour voir le niveau que vous choisissez pour les calculs.

Niveaux pour la feuille de calcul d'injection simple

La figure ci-dessous décrit les niveaux pour une injection simple.

Niveeu des veriebles d'iniestion	2. 3	A B	C 1	D	E	F	G	H
Niveau des variables d'injection	1	a desta a				New	New	New
simple — Cette ligne contient la formule pour obtenir un résultat récapitulatif pour l'injection simple.				Amount	Peak Area	Perc. of Nicotin	Sum Metabolites	AreaSum notident. Peaks
Niveau récapitulatif des composés	2					%	maka	
identifiés ou des pics non identifiés —	2	- Single Ini De	oulto			/0 	ng/kg	
Ces lignes contiennent les formules pour	4	Single Inj. Ke Single Ini. '	suns Variables				2.996	
obtenir les résultats récapitulatifs pour	6	r-Identified C	ompound	s				
tous les composés identifiés et tous les	7	Nicot. M	etabolit I	0.9993	1.0097	24.885		
pics non identifiés.	8	Nicot. M	etabolit II	1.9968	1.9896	49.724		
	9	PCH		3.0126	2.9811			
Niveaux 1 à n des composés identifiés	10	Nicotin		4.0158	3.9833			
ou pics non identifiés — Ces lignes	11	- Not Identifi	ed Peaks					18.005
contiennent des formules pour le calcul	12	Unknow	n 1		5.0455			
des composés individuels ou des pics.	13				6.0103			
	14	Unknow	n		6.9492			

Figure 40 Feuille de calcul d'injection simple

Niveaux pour la feuille de calcul de récapitulatif d'injection multiple

La figure ci-dessous décrit les niveaux pour un récapitulatif d'injection multiple.

Niveau des variables d'inj. multiple —	1	A B	C	D	Е	F	G	H	I
Cette ligne contient la formule pour	1					New	New		New
obtenir un résultat récapitulatif de toutes	3	1		Amount	Sum	Mean Amount	RSD of Sum	Area Sum not	Mean of
les injections simples.	2				iverabolites		Metabolites	ident. reaks	ident. Peaks
Niveaux 1 à n des variables d'inj. multiple						-			
— Ces lignes contiennent les formules pour	3	-			mg/kg	mg/kg	¥.		
les calculs sur les résultats des injections	4	Multipl	e Inj. Results			1	12.59		
simples obtonus par la calcul avea la	5	- Mull	ipie irij. Variable ingle ini #1		2.996				
	7	Ŭ	nigio nij. wi		3.182				
variable d'injection simple definie dans la	8	ŝ	ingle Inj. #n		3.978				
feuille de calcul des injections simples.	9	- Nico	ot. Metabolit I			1.777			
Niveau récanitulatif des composés	10	- S	ingle Inj. #1	0.9993					
Niveau recapitulatil des composes	11			1.9496					
identifies ou des pics non identifies —	12	S	ingle Inj. #n	2.3811					
Ces lignes contiennent les formules pour	13	- Nico	ot. Metabolit II	1.0000		3.018			
obtenir les résultats récapitulatifs pour	14	8	ingle inj. #1	3.0455					
toutes les injections simples pour un	15	e	inalo Ini #n	4.0103					
composé identifié ou un nic non identifié	17	+ PCH	lingie inj. #n I			7.975			
	21	- Nico	otin			5.347			
Niveaux 1 à n des composés identifiés	22	S	ingle Inj. #1	4.0158					
ou nics non identifiés — Ces lignes	23			5.9183					
contiennent des formules pour le calcul	24	S	ingle Inj. #n	6.1065					
des initiations simples individualles neur	25	- Not	Identified						18.78
aes injections simples individuelles pour	26	S	ingle Inj. #1					18.005	
chaque composé ou pic.	27							17.346	
	28	S	ingle inj. #n	in the interval		<u>Recences</u>		20.899	

Figure 41 Récapitulatif d'injection multiple

Calculs personnalisés

Niveaux pour la feuille de calcul d'un groupe de type d'échantillon

La Figure 42 présente les niveaux des groupes de types d'échantillon.

Niveau des variables de groupe de type d'échantillon— Cette ligne contient la formule pour obtenir un résultat récapitulatif pour chaque groupe d'échantillons de la feuille.

Niveaux 1 à n des variables (échantillon) de récapitulatif

d'injections multiples — Ces lignes contiennent les formules pour les calculs sur les résultats des injections simples obtenus par le calcul avec la variable d'injection multiple définie dans la feuille de calcul récapitulative des injections multiples.

Niveau récapitulatif des composés identifiés ou des pics non identifiés — Ces lignes contiennent les formules pour obtenir les résultats récapitulatifs pour tous les échantillons du groupe pour un composé ou un pic.

Niveaux 1 à n des composés identifiés ou pics non identifiés — Ces lignes contiennent des formules pour le calcul des échantillons des groupes individuels pour chaque composé ou pic.

Consultez l'aide en ligne, onglet Reference, pour trouver la définition de toutes les fonctions et de toutes les instructions conditionnelles disponibles.



D G A E H I New New New Mean of RSD Mean Amount Mean Amount RSD of Sum Mean of Mean per Lot Amount Metabolites AreaSum not AreaSum per Metabolites ident. Peaks Lot 3 mg/kg mg/kg Å 2 4 User Sample Groups - Sample Group Variable 12.59 5 6 12.58 Sample Inj. #1 7 12.02 8 12.97 Sample Inj. #n 2 002 9 - Nicot. Metabolit I 10 1.777 Sample Inj. #1 11 1.996 3.002 12 Sample Inj. #n 4,995 13 - Nicot. Metabolit II 3.018 Sample Inj. #1 15 4.988 5.982 16 Sample Inj. #n 8.003 17 + PCH 10.933 21 - Nicotin 5.347 22 Sample Inj. #1 10.980 23 11.883 -24 Sample Inj. #n 25 - Not Identified 22 295 26 Sample Inj. #1 1878 27 22.02 Sample Ini, #n 22.97 28

Figure 42 Feuille de calcul du groupe de type d'échantillon

Fonctions et instructions conditionnelles

Pour définir une formule, entrez dans une cellule une fonction mathématique ou une instruction conditionnelle et la ligne opérande. Un calcul doit commencer par le signe égal (=). Par exemple, l'entrée pour calculer la moyenne de la quantité du métabolite I de la nicotine d'un lot dont il est question à la figure ci-dessus, ressemblerait à : =AVERAGE(D10:D12).

Vous pouvez accéder à la liste complète des fonctions mathématiques du tableur des calculs personnalisés en cliquant sur le bouton **Function** de la barre d'outils.

Valeurs affichées pendant la phase de définition

Pendant la phase de définition des calculs, le système Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique produit des nombres aléatoires pour remplir les cellules puisque que les résultats ne peuvent pas toujours être disponibles.

Exemple Moyenne de la somme des aires des pics non identifiés de chaque lot Pour illustrer la manière d'utiliser les concepts mis en oeuvre dans les calculs personnalisés, cette section vous donne un exemple que vous pourrez utiliser dans votre laboratoire.

Vous pouvez définir un calcul personnalisé permettant d'obtenir la moyenne de la somme des aires des pics des impuretés non identifiées de chaque lot d'échantillons. Il n'est pas nécessaire d'identifier les composés pour définir ce calcul de sorte que vous pouvez vous exercer sur les instructions ci-dessous avec une méthode vide.

4 Configuration de la méthode Calculs personnalisés

Tâche 1Définissez les instructions pour calculer la somme des aires des pics non identifiés d'une
injection simple.



La feuille contient maintenant une colonne avec les aires des pics non identifiés.

Tâche 1Définissez les instructions pour calculer la somme des aires des pics non identifiés d'une
injection simple. (suite)

Etapes

Résultat

2 Ajoutez une colonne destinée à recevoir le nouveau calcul de la somme des aires des pics non identifiés. (Info : niveau Not Identified Peaks Summary)



La feuille contient maintenant une colonne pour la nouvelle variable "Area Sum Not Ident Peaks".

3 Entrez la formule de calcul de la somme des aires des pics non identifiés. (Conseil : utilisez la syntaxe =SUM(D8:D10))

	A	в	С	D	E
1					New
2				Peak Area	Area Sum Not Ident. Peaks
3	-				-
4	S	ing	le Injection		
5		Si	ngle Inj. Variables		
6	-	Ide	entified Compounds		
7	-	No	ot Identified Peaks		6.01
8			Unknown 1	0.9993	
9			••• · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	1.9968	
10			Unknown n	3.0126	

4 Configuration de la méthode

Calculs personnalisés

Tâche 2Définissez les instructions de calcul de la moyenne des sommes des aires des pics non identifiés
pour toutes les injections d'un échantillon

Etapes

Résultat

 Sur la feuille de calcul récapitulative ajoutez une colonne destinée à recevoir la variable définie dans la feuille de calcul de l'injection simple, la somme des aires des pics non identifiés.

 Add Column
 X

 Add a new Custom Calculation Column
 Existing Column

 Existing Items
 Multiple Ini, Results # Method Settings # Compounds # Peaks = User Defined _Area Sum Not Ident Peaks

La feuille contient maintenant une colonne avec la somme des aires des pics non identifiés.

2 Ajoutez une colonne destinée à recevoir le nouveau calcul de la moyenne des sommes des aires des pics non identifiés de toutes les injections. (Info : niveau Not Identified Peaks Variables)

 Ajoutez la formule de la moyenne des sommes des aires des pics non identifiés de toutes les injections. (Conseil : utilisez la syntaxe =AVERAGE(D10:D12))

dd a new Custom Calculation Colu	mn Existing Column
Variable ID: MeanAreaSumNotIdentPeaks	
Display Name: Mean Area Sum Not Ident Pe	aks

La feuille contient maintenant une colonne pour la nouvelle variable "Mean Area Sum Not Ident Peaks".

	A	в	с	D	E
1		2053 -			New
2				Area Sum Not Ident. Peaks	Mean Area Sum Not Ident. Peaks
3	-				
4	M	ulti-Ir	jection Summary		
5	-	Mult	iple Inj. Variable		
6		Si	ngle Inj. #1		
7					
8		Si	ngle Inj. #n		
9	-	Not	Identified Peaks		2.00
10		Si	ngle Inj. #1	0.99	
11				2.02	
12		Si	ngle Inj. #n	2.98	

Tâche 3 Définissez les instructions pour calculer la moyenne de la somme pour tous les échantillons du groupe d'échantillons

Etapes Résultat 1 Sur la feuille de calcul du groupe 裬 Add Column d'échantillons ajoutez une colonne х destinée à recevoir la variable Add a new Custom Calculation Column Existing Column définie dans la feuille de calcul de Existing Items Sample Group Results

Mean Area Sum Not Ident. Peaks

B-User Defined

identifiés.

2 Ajoutez une colonne destinée à recevoir le nouveau calcul de la moyenne des sommes des aires des pics non identifiés du lot d'échantillons. (Info : niveau Not Identified Peaks Variables)

l'injection multiples, la moyenne de

la somme des aires des pics non

identifiés de toutes les injections.

Add a new Cu	stom Calculation Column Existing Column
Variable ID	MeanAreaSumLot
Display Name	Mean Area Sum Lot
level	Not Identified Parks Visiobles

La feuille contient maintenant une colonne pour la nouvelle variable "Mean Area Sum Per Lot".

La feuille contient maintenant une colonne avec la somme des aires des pics non

3 Entrez la formule de calcul de la movenne des sommes des aires du lot. (Conseil : utilisez la syntaxe =AVERAGE(D10:D12))

	A	В	C	D	E
1		0000		Î	New
2				Mean Area Sum Not Ident, Peaks	Mean Area Sum per Lot
3	-				
4	S	am	ples		
5	-	S	ample Group Variab	e	
6		10.0	Sample #1		
7	1				
8	1		Sample #n		
9	-	N	ot Identified Peaks		2.01
10			Sample #1	1.00	
11				2.02	
12	1		Sample #n	3.01	

4 Configuration de la méthode Calculs personnalisés

Autres exemples de calculs personnalisés

Consultez l'exercice du manuel de mise en route, "Définir une méthode pour identifier les impuretés", pour vous exercer à définir un calcul personnalisé. Vous pouvez trouver des instructions dans l'aide en ligne (HowTos/Setting Up Methods/Set up custom calculations) pour définir les calculs personnalisés suivants :

- Statistiques d'aires de pics pour des injections multiples.
- Pourcentage d'une impureté connue.
- Pourcentage total des impuretés connues.
- Pourcentage d'une impureté inconnue.
- Pourcentage total des impuretés inconnues.
- Facteur de réponse moyen pour des injections multiples.
- Facteur de réponse moyen de chaque composé du groupe d'échantillons d'étalonnage.
- Ecart type du facteur de réponse moyen de chaque composé des étalons.
- Ecart type relatif du facteur de réponse moyen de chaque composé des étalons.
- Facteur de réponse relative entre pics.
- Précision des étalons de vérification comparée aux étalons d'étalonnage.
- Concentration et quantité réelle d'un échantillon.
- Quantité corrigée pour des composés individuels.

Relations entre feuilles de calcul

Les feuilles de calculs sont liées entre elles comme indiqué dans l'exemple ci-dessus et Figure 43 et Figure 44. Les résultats des feuilles de calcul d'injection simple sont utilisés dans la feuille de calcul récapitulatif des injections multiples. Ces résultats sont alors tous utilisés dans la feuille de calcul du groupe de type échantillons.

FEUILLE DE CALCUL D'INJECTION

SIMPLE	2.	A B	C	-	D	0	म	12	म	G	. н
	1	n D					-		New	New	New
	-					unt	Peak A	'ea	Perc of	Sum	AreaSum
					HIV	or n	1 Cak A	Cu	Nicotin	Metabolites	not ident.
Valour norconnalicóo	2	-						-			- Peaks
calculee	2000000							_	19125		
	3	-							%	mg/kg	
	4	Single I	nj. Results					Som	me		
	5	Singl	e Inj. Variable	s				(Sur	n)	2.996	
	6	- Ident	ified Compour	nds	-	<				/	
	7	Nic	ot. Metabolit	1	0.99	93	/1.009	7	24.885	/	
Résultats de quantification	8	Nie	ot. Metabolit	11	1.99	168	1.989	6	49.724		
(Quantitation results)	9	PC	Ή		3.01	26	2.981	1	/		
(autoritation roouto)	10	Nic	otin		4.01	58	3.983	3	e		
	11	- Not l	dontified Deal	10							18 005
	10	- 1401 1	Jennineu riear	10			5.045	5	12	outh)	
Résultats de l'intégration	12	Un	KTILIWTI				0.043	2	1		
/Integration Booulto)	15	1	2				0.010		/		
(integration nesults)	14	Un	known n			::::::	6.949	/_			
	-										
		A B	С		D		E	F	G	н	I
RECAPITULATIF D'INJECTION	1				Amount	S	um Me	new an Amou	nt RSD of :	Sum Area Sum no	Mean of
MULTIPLE						Metal	bolites		Arnour	nt ident. Peaks	Area Sum not
	2								Metaboli	tes	ident. Peaks
	3	-				m	g/kg	mg/kg	x		
	4	Multiple I	nj. Results			/	Eca	rt type	relatif		
		- Multipi	e inj. Variable			12	996 <mark>-</mark> (R	SD)	12.00		
Emplacement des injections	7	onig	jie iiij. #∙i			3.	182				
multiples	8	Sing	ile Inj. #n			3.	978				
	9	- Nicot. I	vletabolit I					1.777			
	10	Sing	ile Inj. #1		0.9993						
	11		al an los in allos		1.9495						
	12	- Nicot I	jie irij. #ri Motobolit II	11	2.0011			3.018			
	14	Sinc	ile Ini. #1		1.9968		lovonno				
	15				3.0455		luyenne				
	16	Sing	jle Inj. #n		4.0103	0	viean)				
Certains champs peuvent	17	+ PCH						7.975			
être cachés nour améliorer	21	- Nicotin	do loi #1	199	4 0 1 5 8		فاستعقب	0.347			
unu uaunes pour annenorer Le le stume	22	Sing	,ie iiij. #1		5.9183	١	Aoyenne				
ia iecture	24	Sinc	ile Inj. #n		6.1065 🖕	(Mean)				
	25	- Not Ide	entified	- 66							18.78
	26	Sing	jle Inj. #1							18.005	Moyenne
	27									17.345	(Mean)
	28	Sind	lie inj. #n	1.1		111111		11111111		20.999	

Figure 43 Relations entre la feuille de calcul d'injection simple et la feuille récapitulative multi-injection

4 Configuration de la méthode

Calculs personnalisés

FEUILLE DE CALCUL DE RÉCAPITULATIF D'INJECTION MULTIPLE





FEUILLE DE CALCUL DU GROUPE DE TYPE D'ÉCHANTILLON

Emplacement des échantillons dans le groupe de type d'échantillon

Mise en page de la consultation de données

Types de mise en page

Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique affiche des résultats dans la vue des résultats pour les ensembles suivants de résultats :

• Injection unique, récapitulatif injections multiples, et étalonnage.

Pour les séquences, l'application affiche des résultats pour les groupes suivants de type d'échantillon :

- Groupe d'échantillons CQ.
- Groupe d'échantillons.
- Groupe d'échantillons d'étalonnage.
- Groupe personnalisé d'échantillons.

Choix sur l'affichage

Dans la section mise en page de la consultation de données de la méthode, vous pouvez choisir d'afficher les résultats et les tables récapitulatives, les titres d'information ainsi que les lignes d'état de chaque groupe de résultats dans la vue des résultats, avec les différences suivantes :

- Vous pouvez choisir d'afficher le signal, uniquement pour la vue de résultats de l'injection simple.
- Vous pouvez choisir d'afficher la table et la courbe d'étalonnage ainsi que le tracé des résidus, uniquement dans la vue de résultats d'étalonnage.

4 Configuration de la méthode

Mise en page de la consultation de données

Choix des résultats pour la table de résultats

Pour chacune des tables que vous choisissez d'afficher, vous pouvez choisir les champs et les variables qui apparaîtront soit en en-tête de colonne, soit comme élément d'une table.

Les champs et les variables qui apparaissent pour chacun des résultats sont ceux que le système fournit ou que vous définissez comme variable personnalisée ou variable de calcul personnalisé. Seules les variables que vous définissez pour chaque groupe de type d'échantillon dans les calculs personnalisés apparaissent ici pour ce groupe de type d'échantillon.

Prévisualisation des choix

Quand vous faites ou modifiez un choix, la modification pourra être observée dans la section aperçu de la fenêtre de mise en page de la consultation de données. Les changements apparaissent lorsque vous cliquez sur le bouton **Apply**.



Aptitude du système

Vous pouvez produire les valeurs d'aptitude du système dans la vue des résultats à condition d'effectuer deux actions dans Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique:

- Cocher la case aptitude du système avec le Method Wizard.
- Sélectionner les calculs d'aptitude du système dont vous voulez que le système calcule les valeurs dans l'élément pour les injections simples de la mise en page de la consultation de données.



Les résultats d'aptitude du système apparaissent ensuite dans la table des résultats des injections simples.

4 Configuration de la méthode Rapports

Rapports

Pour plus de détails sur la manière dont le système Cerity for Pharmaceutical QA/QC élabore les rapports, consultez le Technical Reference Guide (Guide de référence technique).

Si vous avez besoin de créer ou d'éditer un modèle de rapport pour utiliser avec votre méthode, démarrez ici. NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique permet d'élaborer facilement des rapports. Les rapports peuvent comprendre :

- Des chromatogrammes et des images.
- Des résultats et des tables récapitulatives.
- Des calculs standard et personnalisés.
- Des informations d'en-tête et de pied de page.

Les rapports sont élaborés une fois que la quantification d'un échantillon est terminée. Pour chaque type de rapport, l'élaboration organise et présente les champs et les résultats au moyen de modèles prédéfinis. L'élaboration du rapport n'exécute aucun calcul. Vous sélectionnez le type de rapport et le modèle dans la méthode. Vous examinez ou imprimez les rapports à partir du programme d'affichage des rapports de Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique.

Le diagramme ci-dessous montre aux analystes et aux utilisateurs expérimentés les étapes de la configuration, de l'élaboration et de l'affichage d'un rapport. Démarrez à la case **GO!**

Créer un nouveau modèle de— rapport ♠		Entrer un Ajouter les ▶ texte éléments personnalisé du modèle		Sauvegarder, afficher ▶l'aperçu ou imprimer le modèle
Déma l'édite modèle rapp	orrer ur de es de ort	Configuration Pour utiliser ur rapports exista méthode, com	des rapports n modèle de nt pour votre mencez ici.	Sélectionner les modèles de rapport pour les types de rapport
GO)!	Effectuer l'analyse et examiner les rapports obtenus	Sélectionner la destination du rapport p. les éch. et les séquences	Sélectionner — le type de rapport à imprimer

Chaque sous-rubrique de chaque rubrique comporte une information en arrière-plan vous permettant de suivre les différentes étapes du cheminement.

Types de rapport

A chaque type de résultat correspond un type de rapport. La première fois que vous définissez une méthode, vous sélectionnez les Report Type (types de rapport) que vous voulez imprimer lorsqu'une analyse ou une séquence est effectuée avec la méthode. Les types de rapport disponibles pour la méthode apparaissent dans la zone de travail des rapports. Il n'est pas possible d'ajouter de nouveaux types de rapport à la liste.

0°h	AllMasterMethods 🗾 🔂 📑	Print	Report Type	Report Template
-	■ AllMasterMethods ● cetestVW/DDAD	Yes	Sample single injection	Inj_short.htm
N (22)	æ-◆ fluoranthss_br_va_3l_1 æ-◆ mancalib1	Yes	Standard single injection Multi-Injection Summary Group	Sin_short.htm
1 🛠 🚯	B ● singsamped ● singsamped ● singletest B ● wif_120901;20,5;ss_tu_va_2_DAD+VWD ● wif_121001;20,25;tst_1 ■ ↓ wif_171001;20,15;ss_br_va_3L1 B ↓ Instrument Setup ■ B Sequence Template ■ B Sequence Template B Sequence Template	Yes No	QC Sample Group	Cal_short.htm QC_short.htm
		No No	Sample Group Custom Sample Groups	SuS_short.htm Sum_short.htm
		Yes No	Sequence Customer Report 1	Seq_short.htm Composite_1.xml
		No No	Customer Report 2 Customer Report 3	Composite_2.xml Composite_3.xml
	Old Araysis Old Revisions		emplate Edit Template	

Figure 45 Zone de travail des rapports de la vue Method (Méthode)

Types de rapport pour les échantillons individuels

Pour définir une méthode pour des échantillons individuels, vous pouvez utiliser les types de rapport correspondant aux trois types de résultats suivants :

- Injection individuelle d'un échantillon.
- Injection individuelle d'un étalon.
- Récapitulatif d'injection multiple.

Types de rapport pour les séquences

Pour définir une méthode de séquences, vous disposez de onze types de rapport :

- Injection individuelle d'un échantillon.
- Injection individuelle d'un étalon.
- Récapitulatif d'injection multiple.
- Groupe d'échantillons d'étalonnage.
- Groupe d'échantillons CQ.
- Groupe d'échantillons.

Guide des concepts NDS Cerity

4 Configuration de la méthode

Rapports

- Groupes personnalisés d'échantillons.
- Séquence.
- Rapports clients 1, 2 ou 3.

Destination du rapport

Vous pouvez modifier les types de rapport déjà préparés dans la vue Method (Méthode) pour qu'ils s'impriment quand vous entrez un échantillon individuel ou que vous définissez une séquence. Pour cela, utilisez l'onglet **Report Destination** du cadre **Sample Entry** de la vue échantillon.

Sequence Identifie	cation Description Report Des	stination
Report(s) to print		
Printer:	PRNTSRV17U\ADSLJ14	•
Path:		
-		
	Standard Injection	Sin_short.htm
<u> </u>	Sample Report	Smp_short.ht
<u> </u>	Calibration Summary	Cal_short.htm
	QC Summary	QC_short.htm
	Sample Summary	SuS_short.ht
	Summary Groups	Sum_short.ht



Vous devez ajouter le nom de l'échantillon ou de la séquence au chemin pour retrouver rapidement le rapport de l'échantillon ou de la séquence.

L'administrateur NDS Cerity définit les chemins et les imprimantes permettant de sauvegarder et d'imprimer vos rapports. Vous pouvez modifier l'imprimante de destination des rapports ou le répertoire de destination des sauvegardes de rapport sous l'onglet **Report Destination** dans le cadre d'entrée de l'échantillon.

Modèles de rapport

Un *modèle de rapport* est un cadre qui conserve la mise en page des champs, des tracés, des images et des tableaux que vous voulez voir figurer dans le rapport.

Chaque type de rapport est lié à un modèle par défaut de rapport produisant un rapport du type sélectionné. Lorsqu'un échantillon ou une séquence sont analysés, le modèle de rapport donne les instructions à la base de données pour remplir les champs avec les valeurs des champs et variables définis dans la mise en page contenue dans le modèle.

Pour sélectionner un modèle de rapport, vous pouvez faire l'un des trois choix suivants :

- Utiliser le modèle par défaut déjà lié au type de rapport.
- Sélectionner un modèle par défaut différent pour ce type de rapport.
- Créer un nouveau modèle de rapport ou éditer un modèle existant avant de le sélectionner comme modèle pour ce type de rapport.

Si vous choisissez d'éditer un modèle pour un type de rapport donné, seuls les modèles correspondant à ce type apparaissent dans l'éditeur de modèles de rapport Cerity.

Editeur de modèles de rapport

L'éditeur de modèles de rapport NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique vous permet de créer et de modifier des modèles de rapport. Utilisez l'éditeur de modèles de rapport Cerity pour personnaliser et formater des rapports Cerity correspondant aux besoins de votre laboratoire.

4 Configuration de la méthode Rapports



ou une variable à insérer dans le modèle à partir de cet onglet.

Nouveaux modèles de rapport

Vous pouvez à créer un nouveau modèle de rapport en cliquant sur le bouton **New** de l'éditeur de modèles de rapport Cerity.

L'éditeur de modèles de rapport Cerity est doté de deux types de modèles : les modèles de rapport individuels et les modèles de rapport composites.

Modèles de rapport individuels

Utilisez les modèles de rapport individuels pour insérer des éléments simples comme des tableaux, des chromatogrammes, des images ou des champs.

Les modèles de rapport individuels comprennent :

- Les rapports d'injection simple.
- Les rapports de méthode.

- Les rapports de conformité.
- Les rapports de dispositifs.

Après avoir sélectionné "new.htm" pour créer un nouveau modèle de rapport individuel, un modèle de rapport apparaît dans l'espace de travail avec l'en-tête "Report Title". Vous devez nommer et sauvegarder le nouveau modèle de rapport pour q'un titre de modèle apparaisse dans le dossier des modèles de rapport individuels.

Modèles de rapport composites

Le Composite Report Templates (Modèles de rapport composites) vous permet d'insérer plusieurs modèles individuels de rapports existants dans le modèle de rapport final.

Les modèles de rapport composites comprennent :

- Les rapports d'injections multiples.
- Les rapports de séquences.

Vous pouvez créer des *modèles multi-injection* à partir de modèles individuels en utilisant les composants de rapport suivants :

- Page de couverture.
- Instrument.
- Récapitulatif d'injection multiple.
- Injections simples.
- Injections d'étalons.

Le modèle de rapport sauvegardé apparaît comme un fichier XML dans le répertoire des modèles de rapport composites.

Vous pouvez créer des *modèles de rapport* à partir de modèles individuels en utilisant les composants de rapport suivants :

- Page de couverture.
- Séquence.
- Instrument.
- Groupe personnalisé d'échantillons.

4 Configuration de la méthode

Rapports

- Groupe d'échantillons.
- Groupe d'échantillons CQ.
- Groupe d'échantillons d'étalonnage.
- Récapitulatif d'injection multiple.
- Injections simples.
- Injections d'étalons.

Le modèle de rapport sauvegardé apparaît comme un fichier XML dans le répertoire des modèles de rapport composites.

Titres des modèles

Le titre du modèle apparaît dans les emplacements suivants une fois que vous avez sauvegardé le fichier :

- Une description du nom du fichier du modèle ou d'une section.
- Sur la barre de titre d'Internet Explorer de Microsoft quand vous affichez l'aperçu du rapport.
- Le nom du fichier lorsque vous enregistrez le modèle pour la première fois.

Le titre du modèle et l'en-tête du rapport qui apparaissent dans le nouveau modèle ne sont pas identiques. Vous pouvez modifier l'en-tête du rapport comme bon vous semble pour la sortie du rapport.

Nouveaux modèles à partir de modèles existants

Vous pouvez créer de nouveaux modèles de rapport à partir des rapports par défaut de NDS Cerity ou en concevoir de totalement nouveaux. Tous les modèles sont accessibles sous l'onglet **Templates**. Après avoir sélectionné et modifié un modèle de rapport existant, il suffit de le sauvegarder sous un nouveau nom de fichier. Le nouveau modèle de rapport apparaît dans le dossier des modèles de rapport individuels ou composites.

Editeur de texte

L'éditeur de texte de l'éditeur de modèles de rapport Cerity utilise des outils courants que vous trouverez dans la plupart des programmes de traitement de texte. Commencez à éditer votre nouveau modèle de rapport avec le curseur prêt à éditer l'en-tête du rapport. Si vous avez besoin d'insérer un élément dans le rapport, le curseur doit être placé au-dessous de l'en-tête du rapport.

En entrant votre propre texte dans le rapport, vous pouvez effectuer des opérations suivantes :

- Entrer le nom la description des champs.
- Changer la police et la taille du texte.
- Changer la position du texte.
- Changer la mise en valeur du texte.
- Créer une liste avec des numéros ou des puces.
- Définir les propriétés de l'arrière-plan.
- Modifier l'alignement du texte.
- Changer le style des paragraphes.
- Changer la couleur du texte.
- Restaurer le formatage normal.
- Créer ou éditer les en-têtes et les pieds de page.

Eléments des modèles de rapport

L'éditeur de modèles de rapport Cerity comporte des sections et des champs permettant d'insérer des éléments dans le modèle. Vous pouvez insérer des modèles de rapport individuels sauvegardés précédemment en tant que sections. Ces sections sont accessibles sous l'onglet **Sections** de l'éditeur de modèles de rapport Cerity.

L'onglet **Fields** permet d'accéder à tous les champs disponibles dans les vues Echantillon, Méthode, Instrument et Résultats.

Vous pouvez insérer des champs, tableaux, images, acquisitions et tracés ainsi que d'autres éléments de rapport dans un modèle de rapport. 4 Configuration de la méthode

Rapports



Format des éléments de rapport

Vous pouvez définir des formats dans les boîtes de dialogue **Picture/Image**, **Signal Plot** et **Table**. Utilisez chacune des boîtes de dialogue pour sélectionner les options de format. Vous ne pouvez pas définir de format pour les sections ni les champs individuels.

Aperçu et impression des modèles de rapport

Dans l'espace de travail de l'éditeur de modèles de rapport, vous pouvez seulement imprimer le modèle de rapport qui y apparaît. Quand vous sélectionnez la rubrique *Preview template* du menu **File**, vous pouvez vous assurer que le modèle de rapport est complet et prêt à être imprimé. Vous pouvez imprimer le modèle à partir du programme Internet Explorer de Microsoft.

Sauvegarder un modèle de rapport

Plusieurs options sont disponibles pour sauvegarder un modèle de rapport :

• Enregistrer le modèle de rapport sous le même nom après avoir édité le rapport.

Les modèles par défaut fournis par NDS Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique sont en lecture seule. Vous ne pouvez pas éditer ces rapports, à moins que l'administrateur NDS Cerity ne modifie le droit d'accès des modèles en mettant les fichiers en lecture/écriture.

- Enregistrer le modèle de rapport sous le nouveau nom après avoir édité le rapport. Utilisez la commande **Save As** du menu **File**.
- Enregistrer le modèle de rapport en tant que section.

Il est nécessaire de changer le titre du modèle de rapport avant de changer le nom du fichier sous lequel il est enregistré. Le nouveau modèle apparaît sous l'onglet **Sections** et dans le dossier Sections de l'onglet **Templates**. Vous pourrez ensuite ajouter cette nouvelle section à un autre modèle.

Cerity Report Viewer (Programme de visualisation des rapports Cerity)

L'administrateur NDS Cerity définit le chemin vers le répertoire d'enregistrement de vos rapports. Le Cerity Report Viewer (Programme de visualisation des rapports Cerity) ouvre le répertoire d'enregistrement de vos rapports d'échantillons et de séquences. Vous ne pouvez imprimer le rapport qu'à partir du Cerity Report Viewer.

Vous pouvez imprimer les rapports de méthode depuis le menu File de la vue Method (Méthode). La base de données sert à remplir les champs du modèle de méthode et envoie le rapport à l'afficheur de rapports Cerity. Vous pouvez imprimer le rapport depuis le Report Viewer (Programme de visualisation).

4 Configuration de la méthode Rapports



5

Système de données en réseau Agilent Cerity pour AQ/CQ pharmaceutique Guide des concepts

Applications d'aministration et de maintenance

Configuration post-installation 142 Aministration et maintenance du système NDS Cerity 148

Les applications d'administration et de maintenance de NDS Cerity pour l'AQ/CQ pharmaceutique permettent aux administrateurs de définir et de gérer leur NDS Cerity (NDS = Networked Data System = système de données en réseau). Ce chapitre aborde des concepts permettant aux administrateurs de remplir leur mission (appelée rôle dans le cadre du logiciel) au sein du laboratoire.



5 Applications d'aministration et de maintenance Configuration post-installation

Configuration post-installation

Après avoir installé le logiciel NDS Cerity pour l'AQ/CQ pharmaceutique, l'administrateur système doit configurer les utilisateurs NDS Cerity pour l'utilisation de l'application AQ/CQ pharmaceutique.

L'administrateur NDS Cerity est responsable des tâches suivantes :

- Démarrer l'application d'administration du NDS Cerity.
- Connecter la base de données.
- Définir la configuration *bootp* seulement dans le cas où le laboratoire n'utilise pas DHCP pour ses instruments.
- Ajouter des licences.
- Vérifier la réussite de l'installation.
- Définir une imprimante par défaut pour l'utilisateur du service NDS Cerity.
- Synchroniser le système d'horodatage des différentes machines NDS Cerity.
- Ajouter des utilisateurs.
- Ajouter des contrôleurs d'acquisition.
- Ajouter des instruments.
- Ajouter des appareils/dispositifs.
- Sauvegarder les modifications de la base de données.

Les concepts abordés dans cette section aident l'administrateur à effectuer ces tâches.

L'aide en ligne de l'administration du système donne toutes les instructions sur les procédures de réalisation de ces tâches.

Application Cerity NDS Administration (Administration du NDS Cerity)

Utilisez les outils de configuration Cerity NDS Administration pour administrer le système. Sélectionnez l'élément de menu **Cerity Software Administration (Administration du logiciel Cerity)** depuis le menu **Démarrer** pour accéder à la fenêtre de configuration.









Connexion à une base de données

Il est nécessaire d'ajouter la base de données que les outils de configuration Cerity Software Administration utilisent. Un clic droit sur le dossier Cerity Software Administration de la fenêtre principale vous permet d'ajouter une base de données. Une fois la base de données ajoutée, ouvrez le dossier de la base afin d'accéder à ses propriétés et à sa configuration.









S'il s'agit d'une installation autonome (Cerity NDS Professional), utilisez le nom du PC autonome.
Licences NDS Cerity

Au cours de l'installation, le système autorise un jeu de licences de "démonstration" pour vos instruments et les modules NDS Cerity. Ce type de licence est temporaire. Il n'est pas possible d'utiliser une licence de démonstration pendant plus de 30 jours. Vous devrez acheter une licence "originale" auprès d'Agilent Technologies avant l'expiration de la licence de démonstration. Après l'achat d'une licence, vous devez autoriser l'utilisation de cette nouvelle licence en approuvant l'accord de licence.

Le dossier License Module vous permet de :

- Voir l'utilisation de la licence à travers tous les modules installés.
- Autoriser l'utilisation d'une licence.
- Mettre à jour ou ajouter une licence NDS Cerity.



Figure 51 Rubrique Licence

5 Applications d'aministration et de maintenance Configuration post-installation

Ajout d'utilisateur

Le dossier Users vous permet de définir les utilisateurs de votre NDS Cerity.

Vous pouvez :

- Ajouter des utilisateurs NDS Cerity.
- Activer et désactiver les utilisateurs.
- Attribuer les rôles aux utilisateurs.
- Attribuer les droits de consultation aux utilisateurs.
- Attribuer une imprimante par défaut à chaque utilisateur.
- Copier les utilisateurs d'une base dans une autre.

	3] 🖨 🖪 🗐	
Console Root		
	User	agilent\jclay
essentions	Full Name	CLAY, JILL
- @ agilentVclay	Current Role	Administrator
Additing	Review Capability	0 - No Review
	Default Printer	(None) Network
	Information	

Figure 52 Dossier Users (Utilisateurs)

Ajout d'un instrument

Utilisez le dossier Instruments pour ajouter des contrôleurs d'acquisition, des instruments logiques et des appareils ou dispositifs. Vous devrez entrer des paramètres pour les instruments et les dispositifs dans les applications AQ/CQ de l'industrie pharmaceutique.

Vous pouvez :

- Ajouter ou supprimer des contrôleurs d'acquisition.
- Ajouter ou supprimer des instruments logiques.
- Ajouter ou supprimer des dispositifs.
- Modifier les propriétés de connexion des dispositifs, instruments et serveurs d'acquisition.
- Déplacer un instrument logique et ses dispositifs associés vers un contrôleur d'acquisition différent.
- Arrêter un instrument.



Figure 53 Dossier Instruments

Aministration et maintenance du système NDS Cerity

Une fois que les administrateurs ont effectué les tâches de post-installation, ils doivent effectuer la maintenance du système et peuvent, si nécessaire, personnaliser NDS Cerity pour qu'il soit conforme aux besoins propres du laboratoire. Les administrateurs doivent comprendre comment gérer les fonctionnalités suivantes de NDS Cerity :

Sécurité et audits

Pour être certain que le système est sécurisé, les administrateurs peuvent :

- Définir ou modifier la sécurité de la procédure de connexion.
- Changer le mot de passe du compte NDS Cerity Network Server et du compte CAGDbAdmin.
- Restreindre l'accès à l'éditeur de la base de registre.
- Définir les droits d'accès aux répertoires NDS Cerity et Oracle.
- Définir le rôle des utilisateurs afin de restreindre leur accès aux fonctions NDS Cerity pour l'AQ/CQ pharmaceutique.
- Définir les audits de sorte que pour chaque changement, le système enregistre la nature, l'auteur, la date et le motif selon les procédures en vigueur dans votre société.

Formats système globaux

Les administrateurs peuvent définir ou modifier les formats numériques ou d'horodatage pour l'ensemble du système Cerity.

Maintenance de la base de données

Pour maintenir la base de données, les administrateurs recourent aux tâches suivantes :

- Archivage, restauration et suppression de données.
- Sauvegarde de la base de données (possibilité de sauvegarde automatique).
- Résolution des incohérences/incompatibilités après restauration des données.

Maintenance du système

Pour maintenir le système, les administrateurs recourent aux tâches suivantes :

- Impression des paramètres de la configuration d'administration du logiciel NDS Cerity.
- Affichage des informations sur l'hôte Cerity.
- Contrôler l'état des services NDS Cerity ; les démarrer et les arrêter.

Les concepts abordés dans cette section aident l'administrateur à effectuer ces tâches.

L'aide en ligne de l'administration du système donne toutes les instructions sur les procédures de réalisation de ces tâches.

Aministration et maintenance du système NDS Cerity

Sécurité et audits

Accès aux sessions

La rubrique d'accès aux sessions *Logon* de la fenêtre de configuration de Cerity NDS Software Administration (Administration du logiciel NDS Cerity) contrôle l'accès à votre serveur NDS Cerity ainsi qu'aux systèmes clients. Par exemple, vous pouvez contrôler le nombre d'utilisateurs qui peuvent ouvrir une session sur NDS Cerity depuis la même station de travail Windows.

Vous pouvez :

- Activer et désactiver la sécurité d'accès aux sessions.
- Autoriser un utilisateur par ordinateur.
- Autoriser plusieurs utilisateurs pour un ordinateur client donné.
- Définir une durée d'inactivité permettant de bloquer l'application d'une session utilisateur ouverte sur un ordinateur client partageant plusieurs sessions.
- Spécifier les applications NDS Cerity pouvant accéder à la base de données.





Changement de mots de passe

Vous pouvez changer les mots de passe pour le compte du serveur et pour la base de données à l'aide de la liste des outils Administration et Maintenance. Ces deux outils sont accessibles depuis le menu **Démarrer**. Lorsque vous sélectionnez la rubrique **Change Password** du menu, leurs boîtes de dialogue respectives s'ouvrent.





John		Load Host List	
		Remove	
		Logon to the database.	×
Cerity Network Server Account : Password :	agilent\muskservice	Username: CAGDbAdmin Password :	
Confirm Password :	E Bested Services	OK <u>C</u> ancel <u>H</u> elp	

Figure 56 Boîte de dialogue Change Password (Changement de mot de passe)

Aministration et maintenance du système NDS Cerity

Droits d'accès aux répertoires NDS Cerity et Oracle.

Le tableau ci-dessous donne un résumé des répertoires importants de NDS Cerity et d'Oracle et des droits d'accès recommandés.

Désignation du répertoire	Utilisateur ou groupe	Permissions recommandées
Entrée NDS Cerity du registre (HKeyLocalMachine\Agilent\Cerity)	Groupe Administrateurs ;	Permissions de partage et de fichiers : Contrôle total
	TOUT LE MONDE	Permissions de partage : Lire
Oracle\Ora81\Bin	SYSTEM	Permissions de répertoire : Contrôle total
	Groupe Administrateurs	Permissions de répertoire : Lire
Oracle\\Oradata	SYSTEM	Permissions de répertoire : Contrôle total
	Tous les autres utilisateurs	Permissions de répertoire : Aucun accès
Entrée Oracle du registre (HKeyLocalMachine\Agilent\Oracle)	SYSTEM	Permissions de répertoire : Contrôle total
	Tous les autres utilisateurs	Permissions de répertoire : Aucun accès
Répertoire temporaire du système (p. ex., C:\Temp), si certains services ne démarrent pas.	Tous les utilisateurs	Permissions de répertoire : Contrôle total
Cerity\Reports	TOUT LE MONDE	Permissions de partage : Lire
	 Tout utilisateur Windows pouvant utiliser NDS Cerity Tous les clients NDS Cerity Administrateur NDS Cerity 	Permissions de partage : Contrôle total
Cerity\Reports\PharmaQC\Templates	TOUT LE MONDE	Permissions de fichiers : Lire
	Tout utilisateur NDS Cerity ayant besoin d'éditer des modèles de rapport	Permissions de fichiers : Contrôle total
Cerity\Reports\PharmaQC\pharmaqc.dd (Le dictionnaire des données — contient tous les champs, variables et résultats dont l'utilisateur dispose)	Tous les utilisateurs et tous les groupes	Permissions de fichiers : Lire
Cerity\Reports\PharmaQC\Reports	TOUT LE MONDE	Permissions de fichiers : Lire
	Utilisateur Cerity NDS Service	Permissions de fichiers : Contrôle total

Tableau 8 Droits d'accès aux répertoires Windows

Attribution des rôles

Le Dossier Roles vous permet de définir des droits d'effectuer des tâches pour les rôles par défaut : Administrator, Chemist, Guest, Sample Submitter et Technician.

Par défaut, le rôle Guest n'a aucun droit d'utilisateur et reçoit donc une applicatin vide à l'ouverture de session. La configuration du rôle Guest est de la responsabilité de l'administrateur du système.

Vous pouvez :

REMARQUE

- Ajouter ou supprimer des rôles.
- Copier un rôle et les tâches qui lui sont associées d'une base de données à l'autre.
- Modifier les droits d'effectuer des tâches d'un rôle.





Aministration et maintenance du système NDS Cerity

Audit

NDS Cerity pour l'AQ/CQ pharmaceutique comporte un groupe de tâches d'audit des enregistrements électroniques conforme aux exigences des directives légales. La rubrique *Auditing* vous permet de configurer les exigences d'audit pour chacune des tâches.

Vous pouvez :

- Demander aux utilisateurs de motiver l'exécution d'une tâche.
- Contraindre les utilisateurs à se conformer aux motifs d'audit définis par l'administrateur NDS Cerity.
- Exiger une signature électronique pour accomplir la tâche.
- Créer une liste de motifs d'audit.
- Retirer des motifs de la liste des motifs d'audit.
- Affecter/désaffecter une exigence d'audit à une tâche donnée.

Aministration et maintenance du système NDS Cerity

	10 - 10		
	12 - 12 -		
	Audit Reason	Restrict Reasons	Electronic Signature
DS for pharma QA/QC			-
ustom calculations	•	•	v
an injection that is in an error state		•	•
ompound calibration	v	N	v
a new method	1	1	
calibration standard	1	1	•
e sample information of an existing			v
rite instrument setpoints	2	v	
strument setup	R	R	
nit checks	v	N	•
se a method	v	N	5
new instrument method	2		2
quence template	2	2	5
ss review	R	R	V
a running sequence	R	R	V
n instrument calibration	R	R	•
d Audit Reasons			<u></u>
nistake g lab procedure			Delete
ext:			Change
	DS for pharma UA/UC astom calculations an injection that is in an error state sompound calibration e a new method calibration standard icalibration standard is e ample information of an existing rite instrument setup int checks see a method enew instrument method aquence template as review a running sequence im instrument calibration d Audit Reasons mistake g lab procedure.	DS for pharma UA/UL astom calculations an injection that is in an error state sompound calibration calibration standard calibration standard calibration standard calibration standard calibration standard calibration standard calibration standard calibration standard calibration of an existing calibration standard calibration of an existing calibration	DS for pharma GA/QC astom calculations V V an injection that is in an error state V compound calibration V V is calibration standard V V is calibration standard V V is calibration of an existing V V estament setup V V strument setup V V is the checks V V es an enhold V V is new instrument method V V es new instrument method V V is a review V V V is a numing sequence V V is instrument calibration V V d Audit Reasons

Figure 58 Rubrique Auditing (Audit)

Formats système numérique et de date globaux

Utilisez le dossier des paramètres système globaux pour définir les réglages numériques et d'horodatage. Les paramètres système globaux concernent les saisies des champs sélectionnés et les valeurs des résultats comme la largeur de pic pour la totalité de la base de données NDS Cerity.

Sélectionnez le dossier des paramètres système globaux pour :

- Entrer la précision des champs numériques de la saisie et des valeurs de résultats apparaissant dans les tableaux et rapports.
- Choisir la notation de remplacement des nombres dont la taille dépasse celle de la cellule ou du champ.
- Sélectionner le format de la date et de l'heure des données.



Figure 59 Dossier des paramètres système globaux

Maintenance de la base de données

Archivage et restauration

Utilisez l'application Archive and Restore pour archiver, restaurer ou supprimer des données de la base. Sélectionnez la rubrique **Archive and Restore (Archivage et restauration)** du menu **Démarrer** pour accéder au premier écran de l'application d'archivage/restauration.



Figure 60 Element de menu Archive and Restore (Archivage et restauration)



Figure 61 Premier écran Data Archival Utility (Utilitaire d'archivage des données)

Aministration et maintenance du système NDS Cerity

Rechercher dans la base de données les "objets" à archiver ou supprimer L'utilitaire d'archivage des données NDS Cerity vous permet de sauvegarder les "objets" de la base de données comme les échantillons et les séquences enregistrées, les résultats d'échantillons et de séquences, les informations d'instruments et de méthode sur un support d'archivage (disque ou autre système d'enregistrement). L'utilitaire d'archivage est destiné aux sauvegardes à long terme. Cet outil est également utilisé pour déplacer des données d'une base de données à une autre. Une fois que les données ont été archivées, il est possible de retirer les données d'origine de la base. Il est nécessaire de réduire périodiquement la quantité de données de la base pour maintenir une bonne performance d'ensemble du système. Le NDS Cerity enregistre les objets archivés sur les répertoires du système de fichiers Windows.

L'utilitaire d'archivage des données utilise le même **Query Wizard** pour trouver les objets à archiver que l'application AQ/CQ pharmaceutique utilise pour trouver les objets à définir ou éditer.

Restauration des "objets" dans la base de données L'utilitaire d'archivage des données restaure les objets placés dans le système de fichiers Windows vers n'importe quel disque du réseau, dans une base de données quelconque du réseau (base d'origine ou autre base).

Lorsque l'utilitaire d'archivage des données restaure des objets archivés dans une base de données différente de la base d'origine, l'utilitaire Database Resolve démarre de lui-même pour résoudre les incohérences entre les bases de données. L'utilisateur doit décider des versions à utiliser en cas de doublons.

Sauvegarde de NDS Cerity

Le logiciel NDS Cerity comprend également un utilitaire de sauvegarde et d'importation de bases de données. Vous utilisez les utilitaires de sauvegarde et d'importation de bases de données NDS Cerity pour créer une sauvegarde cohérente de vos données. Les utilitaires enregistrent les objets de bases de données et les fichiers Oracle de façon synchronisée. En cas de

Pour en savoir plus sur l'assistant de requête, cf. "Query Wizard (Assistant de requêtes)", page 37. perte de données importantes, vous pouvez récupérer la totalité des données NDS Cerity que contenait la base de données au moment de la sauvegarde. L'utilitaire de sauvegarde NDS Cerity peut fonctionner tandis que la base est en activité. Il interrompt temporairement l'activité de la base sans que cela ait la moindre conséquence sur les données en cours d'acquisition. La sauvegarde peut être restaurée à l'aide de l'utilitaire d'importation NDS Cerity.

Agilent recommande d'utiliser d'autres programmes de sauvegarde/restauration comme par exemple ceux de Veritas Software, pour créer des tâches de sauvegarde et restauration des fichiers des objets de la base puis d'utiliser les utilitaires de sauvegarde et de restauration pour exécuter ces tâches. A cet effet, l'utilitaire Cerity peut fonctionner en mode ligne de commande. L'utilitaire Cerity s'occupe de la sauvegarde et de la restauration des fichiers Oracle et il les maintient en synchronisme avec les fichiers des objets Cerity. Cela vous permet d'utiliser les outils de sauvegarde et les modes opératoires normalisées (MON) en conformité avec la politique propre à votre entreprise.

Travaillez de concert avec votre agent Agilent NDS Cerity pour mettre au point les calendriers de sauvegarde, d'archivage et de suppression convenant à votre système.

Résolution des conflits de noms de bases de données

Vous pouvez résoudre les conflits de noms de bases de données à l'aide de l'utilitaire Database Resolve (Résolution de bases de données). Sélectionnez la rubrique **Database Resolve** dans le menu **Démarrer** pour lancer l'utilitaire.





5 Applications d'aministration et de maintenance Aministration et maintenance du système NDS Cerity

Après l'ouverture de session de l'utilisateur, le système lance l'utilitaire et affiche soit un message indiquant qu'il n'y a pas de conflit, soit un écran qui affiche les conflits de noms à résoudre. Si des doublons de noms sont trouvés, l'utilisateur peut résoudre le conflit de nom du rôle ou de l'utilisateur et choisir d'activer un instrument.

AgiDbResolve	-	. 🗆 ×
These tables contain duplicates. Resolve these duplicates	Lagical Instruments Roles Users	
	ei (<u>B</u> ack <u>N</u> ext) <u>H</u> e	elp



L'utilitaire Archive and Restore (Archivage et restauration) lance automatiquement Database Resolve (Résolution de bases de données) lorsqu'il tente de restaurer des données d'une base vers une base différente de la base d'origine.

Verrouillage d'objet

Quand une application accède à un object de la base de données, par exemple un échantillon ou une méthode, cet objet est verrouillé automatiquement. En cas de blocage du système, le verrou n'est pas libéré, et l'objet reste indisponible pour les autres ordinateurs du réseau. Le redémarrage de l'application sur l'ordinateur victime du blocage permet de restaurer l'accès à l'objet dans la plupart des cas. Mais dans le cas où l'objet n'est pas accessible après redémarrage de l'application, l'exécution d'une des commandes de la requête *lockedobjects.sql* permet de restaurer l'accès à cet objet.

A

accès autorisé, 17 acquisition controller, 15 acquisition des données, 11 administrateur, 14, 17, 153 administration du logiciel Cerity à propos de, 14 ajouter une base de données, 144 définition des paramètres, 149 outils de configuration, 143 ajouter des temps du signal, 101 analyse enregistrement des événements, 55 analyse d'échantillon, 12 analyser un échantillon, 33 analyser une séquence, 33 aptitude du système configuration, 129 injections, 107 résultats, 129 valeurs. 129 arbre de sélection, 26 archivage, 14, 149, 157 assistant de requête, 26 ATCSP, 18 attribution des rôles, 153 audit d'un changement, 148 exigences, 154 motif. 148, 154 pour une tâche, 154 sample logbook, 40 sélectionner des tâches. 39 sequence logbook, 40 signature électronique, 154 authentification. 19

B

barre d'outils action, 26 aide, 26, 28 éditer, 27 standard, 26 base de données ajouter, 144 outils de configuration, 144 base de données relationnelle, 11 bouton Abandonner, 54 bouton Nouveau, 26 bouton Pause, 54 bouton Reprendre, 54 bouton Supprimer, 54

C

calculateur de groupe d'échantillons, 118 calculateur personnalisé groupe d'échantillons, 118 calculs personnalisés ajouter des colonnes, 114 ajouter un calcul, 115 autres exemples, 124 configuration, 110, 119 élaborer, 111 exemple, 119 to 123 feuille de calcul, 113 nouvelle formule, 114 traitement des données, 102 type de résultats, 110, 114 variables existantes, 114 Cerity administrateur, 14, 17 base de données, 16 client review, 11, 14 composants, 11 contrôleur d'acquisition, 11 modèles, 152 outils de requête, 16 processus d'audit, 19 rapports, 152 sécurité. 17 serveur de bases de données, 11 utilisateurs, 142 champs, 46 changer le mot de passe, 151 chimiste, 153 chromatogramme-exemple créer, 100 traitement des données, 100 utilisation, 100 client review, 14 composants de rapport modèles d'injections multiples, 135 modèles de séguences, 135 configuration de la feuille de calcul, 113, 124 configuration de la méthode destination du rapport, 132 diagramme de progression, 92 options. 43 rapports, 13 configuration des utilisateurs, 150 conformité, 14, 17 consultation des résultats échantillons individuels. 59 séquence, 60 contrôle de version, 19

contrôles d'autorisation, 17 contrôles de dispositifs, 18 création de méthode échantillons individuels, 94 séquences, 94

D

défini par l'utilisateur résultats, 115 variables. 115 délimitation. 105 demandeur d'analyse, 12, 153 destination du rapport, 50, 51, 132 diagramme de progression analyser les échantillons de routine, 48 configuration des rapports, 130 paramètres de configuration de méthode. 92 dictionnaire des données, 152 différences de méthode. 94 dispositifs, 147 données archivage, 18 détérioration, 18 extraire. 16 incohérences. 18 objets, 18 suppression, 149, 157 traçabilité, 19 types, 22 données brutes. 11 droit d'effectuer des tâches, 153 droits. 152 droits d'accès à la consultation. 63 droits d'accès aux répertoires, 152 durée d'inactivité d'une session. 150

E

échantillon entrer, 25 exécution, 33 vue, 22 échantillons d'étalonnage facteurs de réponse, **104** moyenne, 106 échantillons de routine diagramme de progression, 48 exécution, 48 éditeur de modèles de rapport Cerity accès. 46 créer des modèles, 133 créer des modèles de rapport, 13 éditeur de texte. 137 modifier des modèles, 133 onglet Champs, 134 onglet Modèles, 134 onglet Sections, 134 outils. 133 en cours vue. 25 enregistrements électroniques, 154 entrée d'un échantillon individuel vue Echantillon, 49 vue Instrument. 49 entrée de l'échantillon destination du rapport, 132 dossier. 31 mettre l'information dans la table, 50 panneau, 31 sauvegarder l'information, 50 espace de travail, 27 étalonnage configuration, 102 échantillon, 104 encadrement, 73, 107 encadrement global, 74, 108 étalons, 102 facteurs de réponse, 102, 106, 107 mise à jour simple, 72, 106 point, 104 quantité fixe, 105 quantité variable, 105 table, 106 temps de rétention, 106 traitement des données, 102 étalonnage à mise à jour simple, 72, 105, 106

étalonnage avec encadrement global, 108 étalonnage encadrant, 73, 107 étalonnage encadrant global, 74 étalonnage global, 105 étalonnage mononiveau, 105 étalonnage multiniveau. 105 étalonnage spécifique de l'instrument, 109 étalonnage spécifique de la séguence, 109 étalons, 102 état de la consultation à revoir, 63 accepté, 63 événements chronoprogrammés, 101 événements initiaux. 101 exécution abandonner. 53, 54 arrêter l'analyse d'une séquence, 54 échantillons individuels, 53 édition de séguence, 54 file d'attente, 54 interrompre, 53 ordre. 53 pause, 54 règles de programmation, 53 reprendre, 54 séquence, 53 extraction des données, 16

F

facteurs de réponse, 102, 104, 106, 107 feuille de calcul, 113, 124 fichier ANDI, 61 fichier ChemStation Agilent, 61 fichier XML, 135 file d'attente, 54 fonctions, 118 fornats d'horodatage, 148 formats numériques, 148 formats système globaux horodatage, 148, 156 numérique, 148, 156

G

grappe, 9

identification des composés ajouter ou supprimer, 101 imprimante par défaut, 146 info-bulles, 28, 29 information d'échantillon individuel mettre dans la table, 51 ingénieurs de service, 18 instructions conditionnelles, 118 instrument colonne. 52 configuration, 98, 147 méthode, 93 vue. 33 instrument logique, 147 instruments logiques, 147 intégration changer le chromatogramme, 101 événements chronoprogrammés, 101 événements initiaux. 101 intégration des pics, 114 intégration, traitement des données, 101 interrompre l'analyse, 53 invité, 153 IQ. 18

J

journal de l'instrument, **55** journal des séquences, **41**, **51**

L

licence ajouter, 145 autorisation, 145 mettre à jour, 145 utilisation, 145 licence mise à jour, 145 licence utilisateur, 8 limites configuration, 103 traitement des données, 103 types de résultats, 103 liste des tâches suivre échantillons et séquences, 54 tâches, 54 logbook method, 40 sample, 60 Logbook (Journal) séquence, 51

Μ

maintenance de la base de données, 149 menu contextuel, 27 menu d'aide, 28 métadonnées, 11 method logbook, 40 parameters, 43 template, 43 Method Wizard, 43 méthode à propos de, 96 anciennes versions, 96 description, 95 entrées associées, 95 Logbook (Journal), 96 mise en page de la consultation de données, 127 rapports, 103 résultats associés, 95 versions, 96 mise à jour d'étalonnage, 49 mise en page de la consultation de données apercu. 128 table de résultats, 103 modèle rapport, 38 séquence, 38

modèle de rapport champs, 13 création, 46 créer. 134 créer à partir d'un modèle existant, 136 extraction des données, 13 insérer des éléments. 137 modifier. 45 nouveau. 45 options d'impression, 138 options de format, 138 options de sauvegarde, 138, 139 par défault. 45 tableaux, 13 modèle de rapport par défaut, 13 modèle de séguence, 38, 100 vue Echantillon. 31 modèles d'injections multiples, 135 modèles de rapport composites injection multiple, 135 séquence, 135 modèles de rapport individuels conformité, 134 dispositif, 134 injection simple, 134 méthode. 134 sauvegarder un nouveau rapport, 135 modèles de séguence, 135 modes d'étalonnage mononiveau. 105 multiniveau. 105 modes de consultation consultation non stricte, 63 consultation stricte, 63 mot de passe, 14, 148, 151

Ν

niveaux de calcul à propos de, 116 groupe de type d'échantillons, 118 injection simple, 116 récapitulatif d'injection multiple, 117

numéro de version incréments, 70 version de résultats, 70

0

objets, 22 objets verrouillés, 160 onglet Champs, 137 onglet Modèles, 134 onglet Sections, 137 OQ/PV, 18 outils d'intégration, 69 ouverture de session accès à la base de données, 150 configuration des utilisateurs, 150 durée d'inactivité d'une session, 150 sécurité, 150

Ρ

panneau Instrument entrer les paramètres, 52 modules, 52 parameters method, 43 paramètres instrument, 38 rapports, 44 traitement des données, 38 paramètres de stabilisation, 52 paramètres instrument valeurs de consigne, 52 valeurs en temps réel, 52 partenaires channel, 18 précision décimale, 156 procédures d'étalonnage étalonnage spécifique de l'instrument, 109 étalonnage spécifique de la séquence, 109 processus d'audit contrôle de version. 19 légal, 19

programme de visualisation des rapports Cerity imprimer, 13 rapports enregistrés, 139 visualiser, 13 programmer des analyses, 53 propriétés de connexion, 147

0

qualification de l'installation, 18
qualification opérationnelle, 18
qualification utilisateur, 19
quantification
composés non étalonnés, 102
pics non identifiés, 102
résultats, 114
traitement des données, 102
quantité d'échantillon
modifier, 50
quantité d'échantillon variable
diviseurs, 50
multiplicateurs, 50

R

rapports, 44 affichage ou impression, 130 configuration, 130 diagramme de progression, 130 élaborer, 130 format, 137 réétalonnage, 105 registre, 148 réintégrer événements chronoprogrammés, 69 evénements initiaux, 69 relations entre feuilles de calcul, 124 to 126 requête dans chaque vue, 37 données pour la consultation, 16 liste. 26 outils, 16 par défault, 36 résultats, 36 restauration, 14, 149, 157 résultats. 11 approuver, 62 approuver/rejeter, 61 champs, 128 comment afficher, 127 consultation. 35 consultations avancées, 12 consulter, 61 de rejet, 62 intégration automatique, 69 intégration des composés, 114 intégration des pics, 114 quantification, 114 requête, 56 retraiter. 61 trouver, 56 types de mise en page, 127 variables, 128 vue, 24, 35 retraitement action de, 65 motifs de, 65 to 68 options, 65 serveurs, 11 retraiter les résultats. 65 review client, 15 révision. 75 révisions anciennes, 75 rôles administrateur, 153 chimiste, 153 demandeur d'analyse, 153 invité, 153 technicien, 153

S

saisie des séquences vue Echantillon, 50 vue Instrument, 50 sample run. 34 status. 34 sample logbook, 60 sauvegarder les modifications de la base de données. 39 sécurité accès autorisé. 17 droits d'accès aux répertoires, 148 modifier le mot de passe, 148 ouverture de session, 148, 150 rôles. 148 sequence run, 34 status, 34 séquence attribuer. 31 configuration. 25 créer, 31 édition en cours d'analyse, 54 exécution. 33.53 pause, 34 reprendre, 34 STOP (arrêt), 34 sequence options report destination, 51 run tasks to perform, 51 serveur d'acquisition, 147 serveur de bases de données, 11 service de validation. 18 services NT, 149 signature électronique audit. 154 authentification, 19 exigences, 39 horodaté. 19 motif de modification, 39 qualifications, 19 somme de pics, 101

stabiliser colonne, **52** instrument, station de travail NT, **8**, suppression de données, système Client/Server Cerity, système Professional Cerity,

Т

table d'étalonnage des composés, 105 tâches à effectuer sur les analyses, 49 technicien. 153 temps de rétention, 106 tracabilité, 19, 75 tracé en temps réel. 52 traitement des données calculs personnalisés, 102 chromatogramme-exemple, 100 étalonnage, 102 identification, 101 intégration, 101 limites, 103 quantification, 102 types de rapport définition de la méthode, 131 élaborer, 44 imprimer. 44 par défault, 44 pour un échantillon individuel, 131 pour une séquence, 131 sélection, 44 types de rapport par défaut, 44

U

utilisateur ajouter, 146 attribuer un rôle, 146 droits d'accès à la consultation, 146 utilitaire d'archivage et de restauration Cerity, 157 utilitaire de contrôle de conformité, 18 utilitaire de résolution de bases de données, 14, 158

V

valeurs en cours dispositif, 52 valeurs en cours d'un dispositif, 52 validation de performances, 18 variables échantillon personnalisé, 114 groupe de type d'échantillons, 115 méthode, 114 SAMPLE, 114 variables de groupe de type d'échantillons. 115 variables échantillon, 38, 114 modifier, 99 personnalisé(e)(s), 99 system, 98 variables échantillon personnalisées, 99, 114 variables échantillon système, 98 variables existantes. 114 variables méthode, 115 verrouillage d'objet, 160 versions anciennes. 96 méthode. 96 versions d'une table d'étalonnage, 72 to 74 versions de résultats. 70 vue Echantillon, 22 en cours, 22, 25 Résultats, 24 vue en cours, 22, 26

W

worklist status of run, 34

www.agilent.com

Contenu de ce manuel

Le guide des concepts présente les "idées directrices" ayant donné naissance au système de données en réseau (Networked Data System ou NDS) Cerity pour l'AQ/CQ pharmaceutique afin de vous aider à :

- Comprendre comment utiliser les composants NDS Cerity
- Gagner du temps avec l'aide en ligne

Ce guide vous informera dans les domaines suivants :

- Présentation générale de votre NDS Cerity
- Notions de base de NDS Cerity pour l'AQ/CQ pharmaceutique
- Concepts d'analyse d'échantillons
- Concepts de configuration des méthodes
- Applications d'Aministration et de Maintenance

 ${}^{\scriptsize ext{C}}$ Agilent Technologies Deutschland GmbH 2003

Imprimé en Allemagne 5/2003



