

# OpenLAB CDS ChemStation Edition

Concepts et procédures de travail



**Agilent Technologies**

# Avertissements

© Agilent Technologies, Inc. 2010-2016

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

## Référence du manuel

M8301-93018

## Edition

10/2016

Imprimé en Allemagne

Agilent Technologies  
Hewlett-Packard-Strasse 8  
76337 Waldbronn

### Mise à jour du logiciel

Ce guide concerne la mise à jour C.01.07  
SR3 du logiciel OpenLAB CDS ChemStation  
Edition.

## Garantie

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

## Licences technologiques

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

## Mentions de sécurité

### ATTENTION

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

### AVERTISSEMENT

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

## Contenu de ce manuel...

Ce guide décrit les concepts du logiciel OpenLAB CDS ChemStation d'Agilent. Dans le présent document, le terme ChemStation désigne toujours Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition.

Ce manuel décrit l'utilisation efficace des fonctions d'acquisition des données, d'analyse et de reporting du logiciel OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.07 SR3 afin d'améliorer la productivité de votre laboratoire.

**Tableau 1** Termes et abréviations employés dans ce document

Terme	Description
CDS	Système de données chromatographiques
ChemStation	OpenLAB CDS ChemStation Edition
Secure Workstation	Station de travail sécurisée pour OpenLAB CDS ChemStation Edition
Data Store	OpenLAB Data Store ; depuis la version 2.1, le nom du produit est OpenLAB Server
Serveur OpenLAB	Nouveau nom du produit, anciennement OpenLAB Data Store.
Gestion de contenu	Composante de stockage des données faisant partie du produit OpenLAB Server
ECM	OpenLAB Enterprise Content Manager
AIC	Contrôleur d'instrument Agilent
OpenLAB Control Panel	Panneau de commande d'OpenLAB
Panneau de configuration de Microsoft	Fait partie du système d'exploitation de Microsoft Windows

**Tableau 1** Termes et abréviations employés dans ce document

Terme	Description
Services partagés	Ensemble des composants et services concernant entre autres la gestion de la licence, les utilisateurs et les rôles, la configuration de l'instrument et la politique de sécurité. Installé sur tous les ordinateurs ; accès via le panneau de commande d'OpenLAB.
Serveur OpenLAB CDS Shared Services	Serveur exécutant les services partagés. Anciennement connu sous le nom de serveur OpenLAB Shared Services.

## 1 Concepts basiques d'OpenLAB CDS ChemStation Edition

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

## 2 Utilisation de méthodes

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

## 3 Acquisition des données

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

## 4 Automatisation/Séquences

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

## 5 File d'attente et planificateur

Ce chapitre explique les concepts de file d'attente et planificateur. Il explique comment ajouter des échantillons simples, des séquences ou des pauses à la file d'attente.

## **6 Principes de traitement et de révision des données**

Vous pouvez analyser et examiner vos données avec OpenLAB CDS ChemStation Edition. Ce chapitre décrit les options disponibles pour l'analyse et la revue des données avec ChemStation.

## **7 Étalonnage**

Ce chapitre présente les principes de l'étalonnage.

## **8 Création de rapports**

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

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

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

# Sommaire

<b>1 Concepts basiques d'OpenLAB CDS ChemStation Edition</b>	<b>9</b>
Introduction	11
Contrôle de l'instrument à distance	12
À propos du logiciel ChemStation	15
Structure des données de ChemStation	37
<b>2 Utilisation de méthodes</b>	<b>43</b>
Qu'est-ce qu'une méthode ?	45
Parties d'une méthode	46
Types de méthodes	49
Création de méthodes	51
Modification des méthodes	52
Administration des méthodes	56
Pendant l'exécution d'une méthode	64
<b>3 Acquisition des données</b>	<b>71</b>
Qu'est-ce que l'acquisition des données ?	72
Moniteurs en temps réel	75
Journal	76
Informations sur l'état	77
Règles et alertes	79
<b>4 Automatisation/Séquences</b>	<b>81</b>
Qu'est-ce que l'automatisation ?	83
Que sont les séquences et les modèles de séquence ?	84
Paramètres de séquence	85
Saisie graphique des échantillons	86
Table de séquence	89
Séquence simple	94
Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)	99
Fichier journal de séquence	112
Procédure d'analyse de séquence	113

Structure d'un fichier de données de séquence	115
Fonctionnement post-séquence	126
Rééchantillonnage automatique	127
Spécification de rééchantillonnages	128
Types de séquences	131
<b>5 File d'attente et planificateur</b>	<b>145</b>
Flux de travail supportés	146
Utilisation de la file d'attente	148
Utilisation du planificateur	150
<b>6 Principes de traitement et de révision des données</b>	<b>151</b>
Data Analysis	152
Révision	167
<b>7 Échantillonnage</b>	<b>171</b>
Terminologie	172
Types d'échantillonnage	173
Table d'échantillonnage	180
Sommation des pics	181
Échantillons inconnus	182
Rééchantillonnage	183
<b>8 Création de rapports</b>	<b>187</b>
Qu'est-ce qu'un rapport ?	188
Création de rapports classiques et Intelligent Reporting	189
Création intelligente de rapports	190
Création de rapports classique	198
<b>9 Principes et fonctions propres à l'EC</b>	<b>211</b>
Fonctions propres à l'EC ChemStation Agilent dans la vue Méthode et Contrôle de méthode et d'analyse	212
Type de sommet de pic	215
Types d'échantillonnages	216
CE-MS	219
Sous-répertoires de méthode pour différents modes EC	220







# 1

## Concepts basiques d'OpenLAB CDS ChemStation Edition

Introduction	11
Contrôle de l'instrument à distance	12
À propos du logiciel ChemStation	15
Intégrité des données	15
Stockage centralisé des données	15
Méthodes et séquences	16
Configuration du système	16
Visionneuse de méthode d'acquisition	17
Options de téléchargement disponibles	17
Modèle de données	18
Conventions de noms de fichiers	18
Interface utilisateur du logiciel	22
Acquisition des données	24
Calage des temps de rétention	25
Data Analysis	26
Création de rapports	29
Utilitaires et compatibilité	30
Personnalisation	30
Automatisation	31
Liste d'attente et planificateur	32
Étalonnage du délai du collecte des fractions	33
Bonnes pratiques de laboratoire (BPL)	33
Structure des données de ChemStation	37
Sans création de dossiers uniques	37
Avec création de dossiers uniques	38
Activation ou désactivation de la création de dossiers uniques	40
Secure Workstation	41



## **1 Concepts basiques d'OpenLAB CDS ChemStation Edition**

Contenu de ce manuel...

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

## Introduction

OpenLAB CDS ChemStation Edition apporte le pilotage de l'instrument complet de l'instrumentation LC, GC, CE, CE-MS et LC-MS d'Agilent. Il offre des outils pour l'acquisition, l'analyse et l'interprétation de résultats à l'aide du pilotage de l'instrument utilisant plusieurs techniques et issu de plusieurs fournisseurs. Démarrez le logiciel de chromatographie depuis le panneau de commande d'OpenLAB, où vous accédez à toutes les fonctions proposées par OpenLAB Shared Services.

## Contrôle de l'instrument à distance

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

### Démarrer des instruments

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

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

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

### Déconnexion de la session

Les instruments exécutés sur une machine AIC sont indépendants du client à partir duquel vous avez ouvert la connexion Bureau à distance. Si le client se déconnecte, par exemple, du fait d'une panne du réseau, une séquence exécutée sur l'instrument se poursuit sans en être affectée. Pour reprendre le contrôle de la session de l'instrument après la reprise du réseau, il suffit de cliquer de nouveau sur les boutons *Lancer en ligne* ou *Lancer hors ligne*.

Pour vous déconnecter intentionnellement, cliquez sur le bouton **Close** ou sélectionnez **File > Exit**. La boîte de dialogue **Close** offre un bouton **Disconnect** supplémentaire. En vous déconnectant, vous coupez la connexion Bureau à distance tout en laissant l'instrument fonctionner.

REMARQUE

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

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

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

### Prise de contrôle de session

Vous prenez le contrôle à distance de la session en cliquant sur les boutons *Lancement en ligne* ou *Lancement hors ligne* du panneau de commande d'OpenLAB sur un autre PC.

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

REMARQUE

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

- Si un autre utilisateur a démarré l'instrument à partir du panneau de commande d'OpenLAB sur un autre PC et que vous disposez des privilèges nécessaires, vous pouvez également prendre le contrôle de cette session. Vous devez disposer du privilège **Take over ChemStation Remote Session** et si l'autre utilisateur a verrouillé la ChemStation en mode privé, vous devez aussi disposer du droit de **Break Session Lock**.

Si vous prenez le contrôle de la session, l'autre utilisateur reçoit un message indiquant quel utilisateur a pris le contrôle de la session.

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

### **Forçage de la fermeture**

Pour fermer les instruments non réactifs qui ne peuvent plus être utilisés, vous pouvez cliquer avec le bouton droit de la souris sur l'instrument dans le panneau de commande d'OpenLAB, puis sélectionnez **Force Shutdown**.

Pour pouvoir utiliser cette fonction, vous devez disposer du privilège **Instrument Administration**.

Le forçage d'une fermeture ne mettra pas immédiatement à jour l'état de l'instrument, ce qui entraînera l'affichage d'un état incohérent temporaire jusqu'à ce que l'état soit automatiquement réinitialisé à « non démarré ». Il est recommandé de patienter deux minutes minimum avant de lancer une nouvelle session ChemStation.

## À propos du logiciel ChemStation

### Intégrité des données

Les fichiers ChemStation comme les données, les méthodes ou les séquences sont stockées dans différents dossiers locaux. Pour garantir l'intégrité des données, ChemStation propose la fonctionnalité *Fichier E/S sécurisé*. Si vous activez cette fonction, tous les dossiers seront protégés contre toute modification extérieure à ChemStation ou dans les boîtes de dialogue **Open** ou **Save As**.

Pour plus d'informations, reportez-vous au chapitre *Protection des dossiers avec la fonctionnalité Fichier E/S sécurisé* du *Guide d'OpenLAB CDS ChemStation Edition destiné aux administrateurs*.

### Stockage centralisé des données

Un système de stockage centralisé des données gère toutes les données électroniques indépendamment des formats de données exclusifs. Les données brutes de ChemStation (ainsi que les autres documents lisibles par les hommes, tels que les Workbook), sont stockées ensemble avec les *métadonnées* ; ce qui permet de faciliter la recherche des documents. Les méthodes ChemStation, les modèles de séquence, les modèles de rapport, et les fichiers de données (séquences et analyses simples) peuvent être envoyés vers l'espace de stockage central, puis téléchargés de nouveau vers ChemStation au besoin.

Agilent propose deux systèmes de stockage centralisé des données :

- *OpenLAB Data Store* est une solution à serveur unique qui permet de centraliser la gestion des données pour des laboratoires de petite à moyenne envergure comprenant au maximum 30 instruments. Ce logiciel offre les fonctions de sécurité nécessaires pour une conformité réglementaire. Pour plus d'informations, consultez la documentation relative au serveur OpenLAB.

- *OpenLAB ECM* est disponible soit sous forme d'une solution à serveur unique, soit sous forme d'une solution distribuée à serveurs multiples pour une gestion globale des données pour des laboratoires comprenant jusqu'à plusieurs centaines d'instruments. Ce logiciel offre aussi les fonctions de sécurité nécessaires pour une conformité réglementaire. Pour plus d'informations, consultez la documentation relative à OpenLAB ECM.

Pour plus d'informations à propos des concepts de ChemStation avec stockage centralisé des données, consultez le *guide d'utilisation Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition avec stockage centralisé des données*.

Avec Secure Workstation for OpenLAB CDS ChemStation Edition, ChemStation et Data Store sont installés ensemble sur une seule station de travail. Pour en savoir plus sur Secure Workstation, reportez-vous au *guide d'utilisation Secure Workstation pour OpenLAB CDS ChemStation Edition*.

## Méthodes et séquences

La méthode d'analyse décrit de manière détaillée la procédure d'une séparation spécifique. Elle comporte tous les paramètres associés aux activités de contrôle d'instrument, d'acquisition et d'évaluation des données, notamment l'intégration, la quantification et la création de rapports. Le système peut être programmé pour l'acquisition de données d'une série d'échantillons avec différentes méthodes. Le fichier de commande pour ce type d'opération est appelé "séquence". Une séquence comprend les informations de chaque échantillon, les références aux méthodes appropriées et les spécifications de réétalonnage automatique. Pour plus d'informations sur les méthodes et les séquences, voir la section « [Automatisation/Séquences](#) », page 81 et à l'aide en ligne.

## Configuration du système

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



## Visionneuse de méthode d'acquisition

La visionneuse de méthode d'acquisition vous permet de contrôler les paramètres d'acquisition stockés dans une méthode, indépendamment de la configuration actuelle de l'instrument. Vous pouvez choisir d'appliquer cette méthode à l'instrument dans sa version originale ou de résoudre cette méthode avec la configuration d'instrument actuelle.

## Options de téléchargement disponibles

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

- **Download method to instrument**

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

- **Upload method from instrument**

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

- **New method from instrument**

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

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

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

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

### REMARQUE

La fenêtre de dialogue évalue les réglages des instruments à pilotes RC.Net uniquement. Elle n'évalue pas les paramètres de l'instrument avec des pilotes classiques<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> les pilotes classiques ne sont utilisés que si vous les avez activés lors de la configuration de l'instrument dans le panneau de commande d'OpenLAB.

## Modèle de données

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

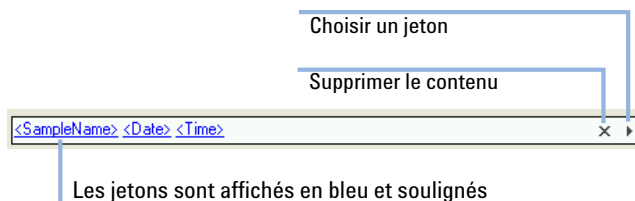
Le logiciel ChemStation fournit des commandes et des fonctions visant à construire, à développer, à extraire les registres et, à condition de ne pas affecter les données principales, à modifier ces registres. Pour plus d'informations, reportez-vous à la référence en ligne dans ChemStation sous **Help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

## Conventions de noms de fichiers

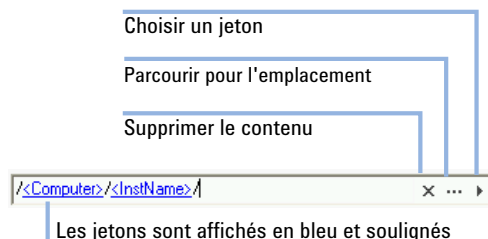
### Noms de fichier et jetons

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

Les noms de fichiers ont l'aspect suivant:



Les chemins d'accès ont l'aspect suivant:



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

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

- Ajouter du texte statique
- Cliquez sur la flèche ( ▸ ) pour choisir un jeton depuis la liste.  
Appuyez sur la **Flèche du bas** pour choisir un jeton de la liste.
- Faites un double-clic droit sur les jetons déjà utilisés pour les remplacer par d'autres jetons de la liste.
- Cliquez sur la touche X pour supprimer le contenu du champ.
- Cliquez sur la touche à trois points ( ... ) pour parcourir le chemin d'accès requis.

## Conventions de noms

Assurez-vous de n'utiliser que les caractères suivants pour les éléments de ChemStation tels que les noms de fichier et de répertoire, les noms de modèles de séquence ou les noms de méthodes ChemStation :

---

A-Z, a-z, 0-9, \_ (tiret du bas), - (tiret)

---

Vérifiez qu'il n'y a pas d'espaces devant ou derrière le nom. On peut facilement ne pas les voir, or ils ne sont pas autorisés.

### REMARQUE

Si vous utilisez des jetons, les noms de fichier ou de répertoire sont automatiquement créés en fonction des informations telles que le nom de l'instrument, de l'opérateur ou de l'échantillon. Assurez-vous que ces noms suivent les mêmes conventions de dénomination.

**REMARQUE**

Les noms de fichiers créés automatiquement peuvent inclure des caractères spécifiques pour l'emplacement des injecteurs avant et arrière. Ces caractères peuvent être localisés. Ils sont valides même s'ils ne font pas partie des caractères énumérés ci-dessus.

Les noms de périphériques suivants sont réservés et ne peuvent pas être utilisés comme noms de fichiers. Évitez aussi d'utiliser ces noms suivis d'une extension (par exemple Nul.txt) :

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

**REMARQUE**

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

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

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

**Tableau 2** Longueur maximale des noms de fichiers et de sous-répertoires ChemStation

Fichier/sous-répertoire/chemin	Longueur de saisie maximale	Ajout automatique	Exemple
Nom de fichier de données de l'échantillon simple	60	.D	Demodad.d
Nom du fichier de données en séquence, utilisant un préfixe/compteur	15	.D	longname000001.d
Nom du fichier de données en séquence, utilisant un modèle de nom	40	.D	05-1-sampleA.d

**Tableau 2** Longueur maximale des noms de fichiers et de sous-répertoires ChemStation

Fichier/sous-répertoire/chemin	Longueur de saisie maximale	Ajout automatique	Exemple
Méthode Séquence Hyperséquence Bibliothèques Modèles de rapports personnalisés	40	. M . S . HYP . UVL . FRP	def_lc.m def_lc.s def_lc.hyp demodad.uvl areapct.frp
Sous-répertoire de fichiers de données	40		démo (dans les informations d'échantillons)
Sous-répertoire de séquence de données	40		démo (dans les paramètres de séquence)
Nom du jeu de résultats	40		test_date_heure (création à l'aide des préférences de séquence)
Chemin de données Chemin de méthode Chemin de séquence Chemin d'hyperséquence Chemin de bibliothèque Chemin de modèle de rapport personnalisé	100	100	c:\chem32\1\data c:\chem32\1\methods c:\chem32\1\sequence c:\chem32\1\hyper c:\chem32\speclib c:\chem32\repstyle

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

Tous les chemins sont limités à 260 caractères par le système d'exploitation Windows. Certains caractères sont utilisés de manière invisible par le système d'exploitation. Par conséquent, vous devrez peut-être utiliser des noms plus courts, même si toutes les spécifications énumérées ci-dessus sont satisfaites.

## Interface utilisateur du logiciel

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

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

D'autres vues sont disponibles si des modules d'évaluation de données en option ont été installés ou pour certaines configurations d'instrument prenant en charge des procédures de vérification et de diagnostic.

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

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

La vue Traitement des données ajoute à la barre d'outils standard des modes de traitement des données spécifiques (recalcul, retraitement, intégration, étalonnage, reporting, annotations, comparaison de signaux, etc.) ainsi que des modes spécialisés si les modules correspondants sont installés. Chacun de ces modes de traitement des données est pris en charge par un ensemble d'outils spécifique au mode.

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

La vue de Mise en page de rapport vous permet de définir la mise en page d'un modèle ou d'un genre de rapports spécifique. Elle utilise également un ensemble de barres d'outils spécifiques pour cette tâche. Le type d'éditeur de modèle de rapports affiché dans cette vue dépend du type de reporting configuré pour l'instrument. Vous pouvez utiliser le reporting classique ou le reporting intelligent (reportez-vous à « [Création de rapports](#) », page 187).

## Panneau de navigation

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

## Boutons de navigation

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

## Explorateur ChemStation

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

**Tableau 3** Options du panneau de navigation

Boutons de navigation	Options de l'explorateur ChemStation
Contrôle de méthode et d'analyse	Modèles de séquence/Méthodes de référence, méthodes du jeu de résultats
Analyse de données	Méthodes de données/référence, méthodes du jeu de résultats
Révision	Modèles données/rapports
Mise en page de rapport	Création de rapports classique : Méthodes de référence Création intelligente de rapports : Modèles de rapport
Vérification (CPL et CPL/SM)	Raccourcis propres à la vue de vérification
Diagnostic (CPL et CPL/SM)	Raccourcis propres à la vue de diagnostique
Réglage (CPL/SM)	Raccourcis propres à la vue de réglage

## Acquisition des données

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

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

Toutes les acquisitions de données standard (échantillons simples et lancements en séquence) sont ajoutés à la file d'attente puis activées depuis cet emplacement. Pour plus d'informations, voir « [Flux de travail supportés](#) », page 146.



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

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

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

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

Pour plus d'informations sur l'acquisition des données, reportez-vous à la section « [Acquisition des données](#) », page 71 et au système d'aide en ligne.

## Calage des temps de rétention

Le calage des temps de rétention (RTL) est utilisé pour faire en sorte que les temps de rétention d'un même composé analysé sur différents systèmes de GC restent les mêmes.

Un échantillon de table de temps de rétention est inclus dans le logiciel de RTL. Le nom de fichier est `exemple.rtt`. Cette table peut être utilisée comme modèle pour créer votre propre table de temps de rétention.

## Data Analysis

### Data Analysis — Options

Data Analysis "Classic" est une fonctionnalité de ChemStation. Les pages suivantes en présentent un aperçu. Pour plus d'informations, voir « [Data Analysis](#) », page 152.

### Data Analysis — Affichage

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

- sélection de l'affichage (à un ou plusieurs signaux) lors du chargement du chromatogramme/de l'électrophérogramme,
- superpositions du chromatogramme/de l'électrophérogramme à partir de différents échantillons,
- soustraction de deux chromatogrammes/électrophérogrammes,
- alignement graphique vertical ou horizontal des signaux pour une meilleure comparaison visuelle,
- projection en miroir ou inversion du signal pour une meilleure comparaison visuelle,
- affiche les caractéristiques des pics de performance pour certains pics intégrés spécifiques,
- fonctions graphiques de défilement et de zoom,
- réglage des attributs d'affichage, y compris la sélection de graduations, de lignes de base, d'axes, de temps de rétention/migration et de noms de composés (vous pouvez aussi sélectionner la police des étiquettes de composés et de temps de rétention (TR), régler la taille et l'orientation de l'affichage, choisir un affichage en mode séparé ou superposé et sélectionner des échelles),
- l'affichage du chromatogramme/de l'électrophérogramme peut inclure des superpositions graphiques des paramètres de l'instrument en fonction des capacités de l'instrument configuré,

- l'utilisateur peut ajouter de façon interactive des annotations personnalisées, mais aussi sélectionner la police, la taille, l'orientation et la couleur du texte (une fois définies, les annotations peuvent être graphiquement déplacées, modifiées ou supprimées),
- copie de l'écran dans le Presse-papiers Windows aux formats bitmap et métafichier,
- une fonction *mode de saisie* sert à afficher les valeurs des points de données dans les unités des détecteurs et
- exportation des points numérisés de temps/d'intensité vers le Presse-papiers Windows.

## Analyse de données — Intégration

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

## Traitement des données — Quantification

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

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

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

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

Pour plus d'informations sur l'étalonnage et la quantification, reportez-vous à « [Étalonnage](#) », page 171.

## **Traitement des données — Révision par lot**

La révision par lot permet les principales opérations graphiques suivantes :

- définition de la révision et du retraitement automatiques ou manuels des fichiers de données (étalonnées)
- réétalonnage de la table d'étalonnage
- révision des tables de composés des méthodes étalonnées
- création de rapports de lot spécifiques

Le rapport de révision par lot fournit des résultats pour chaque composé et pour chaque échantillon.

Les deux boîtes à outils supplémentaires suivantes sont disponibles dans la vue Traitement des données :

- Table de navigation (voir [Figure 33](#), page 152)
- Révision par lot

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

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

La révision par lot permet de sauvegarder les événements d'intégration manuels par analyse. Il est possible de sauvegarder les événements manuels avec le fichier de données en dehors de la révision par lot. Afin d'éviter les conflits entre deux ensembles d'intégration manuelle, les événements manuels sauvegardés avec le fichier de données ne seront pas appliqués dans la révision par lot.

Si vous utilisez ChemStation avec ECM, la révision par lot est désactivée par défaut.

## Traitement des données — Recalcul

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

## Traitement des données — Retraitement

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

## Traitement des données — Derniers résultats

Dans ce mode, la méthode du fichier de données (DA.M) pour chaque analyse est chargée. DA.M est une copie exacte de la méthode utilisée pour la dernière analyse de données (pendant l'acquisition, le retraitement ou le recalcul). Le mode Dernier résultat vous permet de reproduire les résultats du dernier traitement des données, même si la méthode de séquence a été modifiée entre temps.

# Création de rapports

Avec Agilent OpenLAB CDS, vous pouvez choisir le type de création de rapports que vous souhaitez utiliser pour chaque instrument :

- Le *reporting ChemStation classique*, qui reste inchangé par rapport à la création de rapports ChemStation B. Pour plus d'informations, reportez-vous à « [Création de rapports classique](#) », page 198.
- *Reporting intelligent* : Avec la création intelligente de rapports, vous pouvez :
  - créer des modèles de rapport avec la fonction glisser-déplacer (modèle « Ce que vous voyez est ce que vous obtenez »)
  - générer des rapports dans la nouvelle vue **Review** en choisissant simplement les données et le modèle de rapport ;

- utiliser des rapports interactifs pour la revue des données, définir les critères de recherche pour sélectionner les informations d'intérêt ;
- générer des rapports de séquence croisés.

Pour plus d'informations, voir « [Création intelligente de rapports](#) », page 190.

## Utilitaires et compatibilité

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

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

## Personnalisation

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

Pour plus d'informations sur la personnalisation, voir le *Guide de programmation des macros* (MacroProgrammingGuideRCNet.pdf).

## Automatisation

ChemStation peut programmer et exécuter à la fois des échantillons simples et des séquences à plusieurs méthodes.

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

La table de séquence, ou la liste des analyses à exécuter, est une feuille de calculs intégrée qui permet aux utilisateurs de préciser les noms, le nombre et les types de flacons, les méthodes d'analyse, les paramètres de quantification de l'échantillon, dont les spécifications d'étalonnage, les facteurs de multiplication et de dilution, les paramètres d'échange de données LIMSID et le nombre de réplicats des injections. En fonction des instruments configurés et des modules, des champs supplémentaires sont accessibles, par exemple si un système Agilent 1100/1200 LC comprend un collecteur de fraction, la colonne **Fract. Start** apparaît dans la table de séquence. La mise en page de la table de séquence est modifiable par l'utilisateur. Vous pouvez passer d'une cellule à une autre dans la table et copier, couper ou coller des cellules individuelles, des lignes entières ou une série de lignes de manière à créer des séquences efficacement et rapidement.

Les types d'échantillons peuvent être identifiés dans la table de séquence comme inconnus, étalons, blancs ou échantillons. Le type d'échantillon détermine le traitement spécifique des données de l'échantillon :

- Les échantillons Inconnus sont évalués puis rapportés selon les paramètres de méthode.
- Les étalons sont utilisés pour réétalonner les composants de quantification de la méthode comme décrit ci-dessous.
- Les échantillons Blancs sont utilisés pour évaluer le signal de référence pour des pics spécifiques, tels que définis dans la Pharmacopée européenne. Vous pouvez imprimer le rapport signal sur bruit pour des rapports personnalisés. Consultez le guide de référence pour des détails à propos des calculs et des champs de données obligatoires.

- Les échantillons de contrôle sont comparés aux limites définies pour chaque composant pour la méthode choisie. Si les résultats obtenus sont en dehors de la plage spécifiée pour le paramètre, l'analyse de la séquence est interrompue.

Les étalons peuvent être simples, cycliques ou encadrants. Un réétalonnage simple signifie qu'un réétalonnage a lieu chaque fois qu'un étalon est défini dans la séquence. Les réétalonnages cycliques se produisent à des intervalles définis lors de l'analyse d'une série d'échantillons inconnus. Lors de l'encadrement d'une série d'échantillons inconnus, deux jeux d'étalonnage sont analysés. Les rapports quantitatifs des échantillons inconnus sont ensuite calculés à l'aide de la table d'étalonnage échelonnée entre les deux jeux d'étalonnage.

La fonction Aperçu de la séquence vous permet de voir l'ordre d'exécution de la séquence. Dès qu'une séquence est mise en file d'attente, les échantillons sont également présentés analyse par analyse dans la table de séquence. Vous pouvez sélectionner des échantillons individuels à réanalyser ou réévaluer. Dans le cadre de la réévaluation de données déjà acquises, vous pouvez indiquer si le retraitement s'effectue sur la base des données de quantification initiales de l'échantillon ou sur la base des nouvelles données saisies dans la table d'échantillons de la séquence.

Vous pouvez interrompre momentanément des séquences pour analyser des échantillons prioritaires à injection unique à l'aide d'une autre méthode ; vous pouvez ensuite relancer les séquences sans perturber l'automatisation. Vous pouvez ajouter des échantillons à la table de séquence pendant l'exécution de la séquence.

Vous pouvez imprimer la table de séquence en entier ou partiellement.

Pour plus d'informations sur les séquences, consultez  
« [Automatisation/Séquences](#) », page 81 et l'aide en ligne.

## Liste d'attente et planificateur

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



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

Pour plus d'informations, voir « [Flux de travail supportés](#) », page 146.

## Étalonnage du délai du collecte des fractions

On appelle délai de collecte le temps que prend un composé pour aller du point de détection dans le détecteur au point de collecte dans le collecteur de fractions. Il peut être établi en effectuant un étalonnage du délai de collecte.

L'assistant d'étalonnage du délai de collecte vous guide pour effectuer et évaluer l'étalonnage du délai de collecte de fraction. L'assistant est accessible dans le menu **Instrument** de la fenêtre **Method and Run Control**.

Tout d'abord, mettre en place et effectuer l'étalonnage du délai de collecte à partir de **Perform Delay Calibration Run**. Puis évaluer les résultats de l'étalonnage du délai de collecte à partir de **Evaluate Delay Calibration Data**. L'étalonnage du délai de collecte est résumé dans le rapport **Delay Calibration Summary**.

L'évaluation des données permet de connaître le délai de collecte entre les modules de détection des pics et de collecte des fractions. Les délais de collecte sont établis sur la base des signaux du détecteur et du capteur du collecteur de fractions d'un fichier de données d'analyse de l'étalonnage. Les volumes de délai de collecte sont calculés en fonction des informations de débit.

Pour plus d'informations, reportez-vous à l'assistance en ligne concernant ChemStation.

## Bonnes pratiques de laboratoire (BPL)

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

## Processus de développement

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

## Spécification et utilisation des méthodes

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

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

## Robustesse des méthodes

Les rapports récapitulatifs de séquence (reportez-vous à « [Création de rapports classiques et Intelligent Reporting](#) », page 189) permettent de tester la robustesse des méthodes. Avec la création intelligente de rapports, les rapports détaillés pour des critères définis par l'utilisateur se présentent sous forme de tableaux de tendance et peuvent être utilisés pour déterminer des limites opératoires réalistes. Et vous pouvez aussi créer vos propres modèles de rapports récapitulatifs de séquence incluant des tableaux de tendance avec les limites opératoires. Ces limites peuvent ensuite être intégrées à la méthode afin de vérifier qu'elle respecte les limites spécifiées par analyse d'échantillons étalons.

## Fonctionnement du système

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

## Traçabilité, originalité et qualité des données

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

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

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

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

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

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

## Structure des données de ChemStation

### Sans création de dossiers uniques

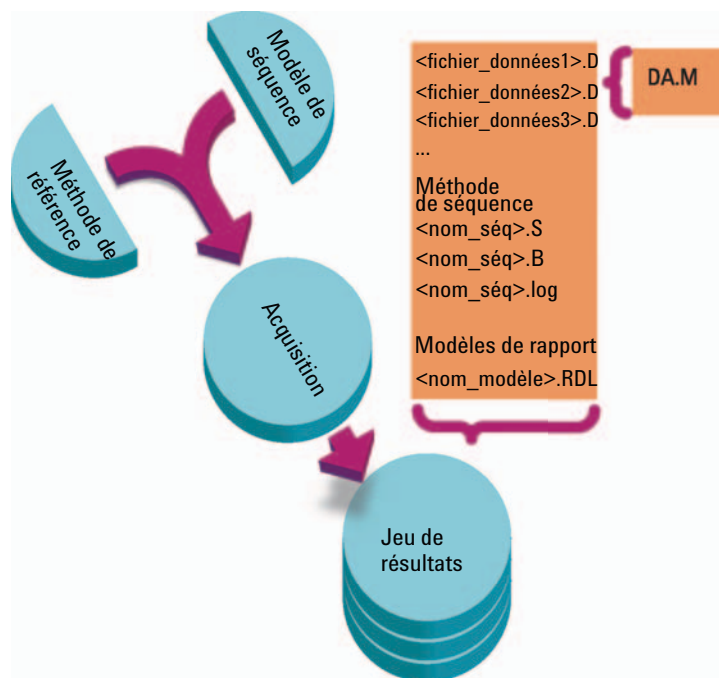
Cette structure des données correspond à celle utilisée dans les versions de la ChemStation B.01.03 et antérieures. Les séquences, les méthodes et les fichiers de données générés ainsi que les résultats sont conservés à des emplacements fixes, spécifiés et séparés. Par exemple, les méthodes sont référencées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

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

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

## Avec création de dossiers uniques

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

- 3 Chaque fichier de données contient une copie de la méthode utilisée pour créer l'analyse. Les informations de méthode suivantes sont stockées :
  - Pour voir les paramètres d'origine de la méthode pour chaque fichier spécifique de données, faites un clic droit sur la ligne concernée dans le tableau de navigation, puis sélectionnez **View ACQ Method**.

- ChemStation offre la possibilité de sauvegarder une copie de la méthode complète (RUN.M) après chaque analyse (voir « [Enregistrement d'une copie de la méthode avec les données](#) », page 70).
- Une copie des paramètres de traitement des données (DA.M) est toujours sauvegardée (voir « [Enregistrement d'une copie de la méthode \(DA.M\) avec les données \(paramètre par défaut de la ChemStation\)](#) », page 70).

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

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

## Activation ou désactivation de la création de dossiers uniques

Afin de pouvoir travailler avec un concept d'enregistrement des données comme dans les versions de ChemStation antérieures à B.02.01, l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue **Preferences** contient une section **Data Storage**. Vous avez alors le choix entre l'option **Unique Folder Creation ON** et l'option **Unique Folder Creation OFF** (reportez-vous à « [Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence](#) », page 115). Par défaut, l'option **Unique Folder Creation ON** est sélectionnée. L'option **Unique Folder Creation ON** active le concept de stockage des données tel que décrit dans le chapitre précédent.



## Secure Workstation

ChemStation Edition est disponible en version conforme : Secure Workstation for OpenLAB CDS ChemStation Edition associe ChemStation Workstation et Data Store sur un seul ordinateur.

Pour une mise en conformité avec la réglementation 21 CFR Partie 11, Secure Workstation offre un stockage de données sécurisé et divers journaux et journaux d'audit, tels que :

- le journal d'audit de méthode ;
- le journal d'audit de résultats ;
- le journal d'audit de séquence.

Pour en savoir plus sur Secure Workstation for OpenLAB CDS ChemStation Edition, reportez-vous au *guide d'utilisation Secure Workstation for OpenLAB CDS ChemStation Edition*.

## **1 Concepts basiques d'OpenLAB CDS ChemStation Edition**

### **Structure des données de ChemStation**



## 2 Utilisation de méthodes

Qu'est-ce qu'une méthode ?	45
Parties d'une méthode	46
Types de méthodes	49
Méthodes de référence	49
Méthodes de séquence	49
Méthodes de fichiers de données	50
Création de méthodes	51
Modification des méthodes	52
Éléments modifiables d'une méthode	52
Structure du répertoire des méthodes	53
Modification de méthodes en mode en ligne	54
Modification de méthodes en mode hors ligne	55
Administration des méthodes	56
Arborescence des méthodes dans l'explorateur de la ChemStation	56
Visualiser la méthode d'acquisition	57
Mise à jour des paramètres de traitement des données dans la méthode de référence	59
Mise à jour de méthodes	61
Enregistrer une méthode comme nouvelle méthode de référence	62
Pendant l'exécution d'une méthode	64
Récapitulatif de l'exécution d'une méthode	64
Commande ou macro de pré-analyse (liste de vérification de l'exécution)	67
Acquisition de données (Liste de vérification de l'exécution)	67
Traitement des données (Liste de vérification de l'exécution)	67
Traitement des données personnalisée	69
Enregistrement des données de BPL	69



## 2 Utilisation de méthodes

### Structure des données de ChemStation

Commande ou macro de post-analyse 69

Enregistrement d'une copie de la méthode avec les données 70

Enregistrement d'une copie de la méthode (DA.M) avec les données  
(paramètre par défaut de la ChemStation) 70

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

## Qu'est-ce qu'une méthode ?

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

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

## Parties d'une méthode

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

Chaque méthode comporte quatre composants :

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

### Informations sur les méthodes

Cette section fournit des informations descriptives sur les méthodes.

### Contrôle de l'instrument

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

### Traitement des données

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

- *Détails des signaux*  
Définit les signaux et leurs propriétés utilisées pour l'évaluation des données.
- *Événements d'intégration*

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

- *Identification des pics*

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

- *Quantification des pics*

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

- *Étalonnage et réétalonnage*

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

- *Champs personnalisés*

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

- *Rapport*

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

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

## Liste de vérification de l'exécution

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

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

- l'acquisition, l'enregistrement et le traitement des données pour générer un rapport ;
- l'exécution d'une partie de la méthode uniquement ;
- l'acquisition et l'enregistrement de données sans les analyser ;
- l'exécution d'une nouvelle analyse de fichiers de données existants ;

## 2 Utilisation de méthodes

### Parties d'une méthode

- l'utilisation de vos propres macros pour l'analyse des données et le traitement pré- et post-analyse ;
- l'enregistrement des résultats d'analyse dans un registre dans le cadre des BPL et
- l'enregistrement de votre méthode avec les données.



## Types de méthodes

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

### Méthodes de référence

Ces méthodes sont enregistrées sur le disque de l'ordinateur. Les méthodes enregistrées portent un nom de quarante caractères alphanumériques au maximum suivi par l'extension \*.M. Les répertoires des méthodes de référence sont configurés dans les Préférences (reportez-vous à « [Sélection du chemin d'accès](#) », page 72).

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

### Méthodes de séquence

Lorsqu'une séquence est exécutée (à l'aide de l'option **Unique Folder Creation ON**, reportez-vous à « [Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence](#) », page 115), des copies de toutes les méthodes de référence utilisées dans la séquence sont enregistrées dans le jeu de résultats conjointement aux fichiers de données de la séquence. Ces méthodes sont directement associées à la séquence et sont également utilisées lors du retraitement de la séquence. Par défaut, les modifications apportées à ces méthodes ne sont pas répercutées automatiquement dans les méthodes de référence. Les modifications sont prises en compte dès que l'exécution de la séquence démarre ou se poursuit après une pause. Ces modifications sont également répercutées dans les méthodes de fichier de données (D.A.M) lors du retraitement de la séquence et lors de la génération des rapports.

## Méthodes de fichiers de données

Une copie des paramètres de traitement des données est enregistrée comme la méthode de fichier de données DA.M avec les fichiers de données. La méthode de fichiers de données DA.M est mise à jour automatiquement après chaque génération de résultats (acquisition des données, recalcul ou création de rapport). Elle est également chargée par ChemStation lorsque vous recalculez des résultats dans le mode Dernier résultat (reportez-vous à « [Mode Dernier résultat](#) », page 157).

Si vous utilisez l'option **Save method with Data** dans la liste de vérification de l'exécution, la méthode est aussi enregistrée comme run.m dans le fichier de données.

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

## Création de méthodes

La création d'une nouvelle méthode passe systématiquement par la modification d'une méthode de référence ou d'une méthode de séquence et par l'enregistrement des modifications. Vous pouvez écraser une méthode existante ou sauvegarder une méthode comme une nouvelle méthode de référence.

Attention : lorsque vous modifiez une méthode, la version qui figure sur le disque demeure inchangée tant que vous n'avez pas enregistré vos modifications.

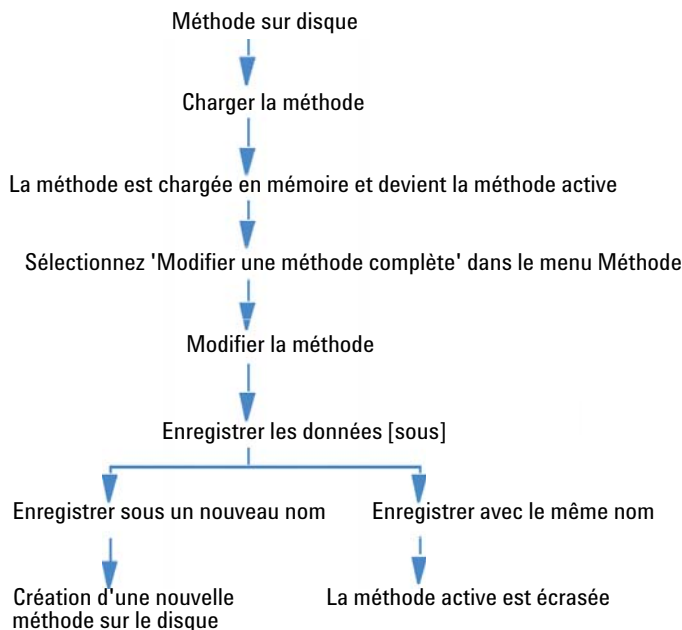
Vous pouvez créer une méthode de plusieurs manières. Soit pour procéder à une analyse partielle, soit pour procéder à une analyse complète. Par exemple, vous pouvez créer une méthode pour n'effectuer que l'acquisition de données. Lorsque vous êtes prêt à analyser les données et à générer un rapport,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

### REMARQUE

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

## Modification des méthodes

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



**Figure 2** Modification des méthodes

## Éléments modifiables d'une méthode

Chaque méthode comporte quatre composants qui peuvent être modifiés séparément.

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

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

## Structure du répertoire des méthodes

### Dossiers

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

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

## Fichiers

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

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

**Tableau 4** Exemples de fichiers de méthode

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

## Modification de méthodes en mode en ligne

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

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

## Modification de méthodes en mode hors ligne

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

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

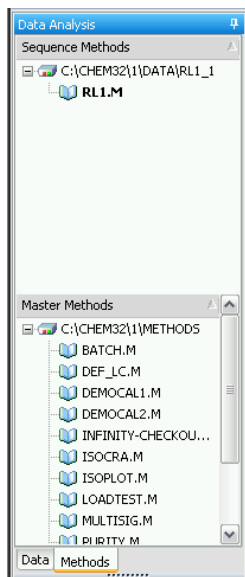
### REMARQUE

Si la même méthode de référence est chargée dans la ChemStation en ligne et hors ligne du même instrument, vous ne pouvez modifier la méthode que dans la ChemStation en ligne.

## Administration des méthodes

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

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



**Figure 3** Arborescence de navigation des méthodes

La méthode actuellement chargée est toujours présentée en caractères gras.

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



## Visualiser la méthode d'acquisition

Vous pouvez accéder à la visionneuse de méthode d'acquisition dans le menu **Instrument > Acquisition Method Viewer...** dans la vue **Method and Run Control**. La visionneuse de méthode d'acquisition est disponible pour les sessions de ChemStation en ligne et hors ligne.

La visionneuse de méthode d'acquisition vous permet de contrôler les paramètres d'acquisition stockés dans une méthode, indépendamment de la configuration actuelle de l'instrument. La boîte de dialogue affiche la configuration de l'instrument au moment où la méthode a été enregistrée dans ChemStation. Les paramètres de traitement des données ne sont pas affichés dans cette visionneuse. La visionneuse de méthode d'acquisition ne permet pas à l'utilisateur de modifier la méthode ChemStation chargée.

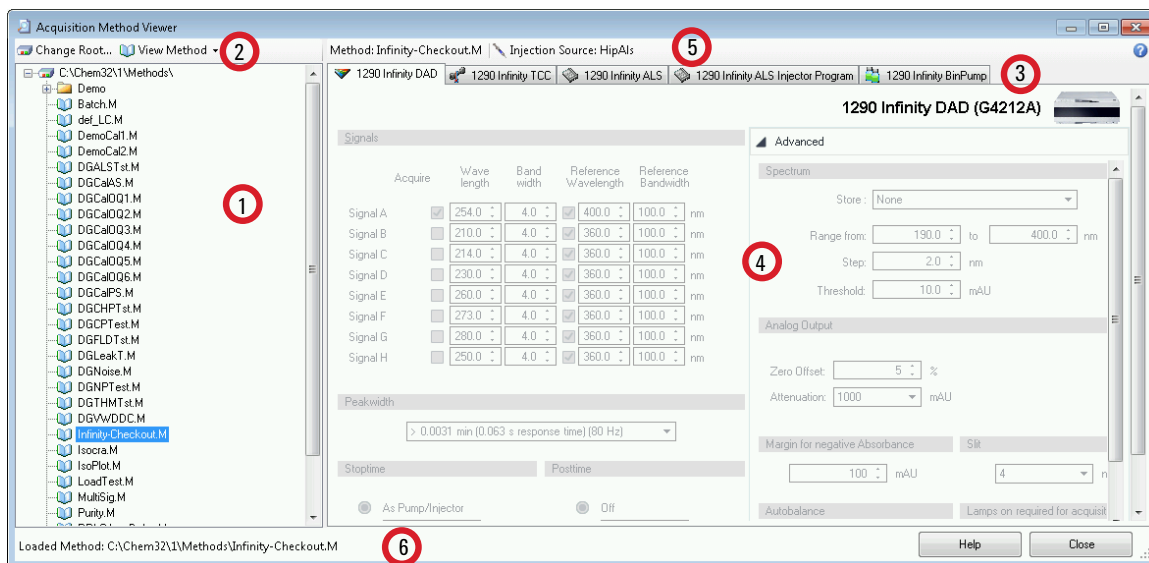
La visionneuse de méthode d'acquisition affiche les paramètres de méthode en mode lecture seule. Elle ne fournit pas de fonctionnalité pour modifier et enregistrer les méthodes.

### REMARQUE

Cette boîte de dialogue affiche les paramètres de méthode pour les instruments et modules avec pilotes RC.Net uniquement. Elle n'affiche pas les paramètres de méthode obtenus avec les pilotes classiques.

## 2 Utilisation de méthodes

### Administration des méthodes



**Figure 4** Boîte de dialogue Acquisition Method Viewer

- |   |   |
|---|---|
| 1 | Explorateur de méthode  |
| 2 | Barre d'outils  |
| 3 | Onglets Module (affiche les paramètres de méthode, les paramètres de prétraitement dans un contrôle d'onglet pour tous les modules trouvés dans la configuration de l'instrument utilisé) |
| 4 | Zone de la visionneuse de méthode   |
| 5 | Nom de méthode, informations de la source d'injection   |
| 6 | Barre d'état  |

Dans l'explorateur de méthode (1), le chemin de la méthode préférée s'affiche par défaut. Cliquez sur **Change Root...** dans la barre d'outils pour sélectionner un autre répertoire.

La barre d'outils (2) propose les options suivantes pour **View Method** :

- **View with Original Configuration...** : Chargez les paramètres enregistrés dans la méthode vers l'instrument.

- **View with Instrument Configuration...** : Appliquez la méthode enregistrée à la configuration actuelle de l'instrument. Cette option est uniquement disponible pour les instruments en ligne. La méthode enregistrée peut ne pas correspondre aux paramètres actuels de l'instrument ; si possible, les paramètres sont ensuite automatiquement adaptés, sinon vous pouvez vérifier les informations dans la boîte de dialogue **Method Resolution Info**. Cette boîte de dialogue affiche la liste des incohérences et les différences entre la méthode non résolue et résolue.

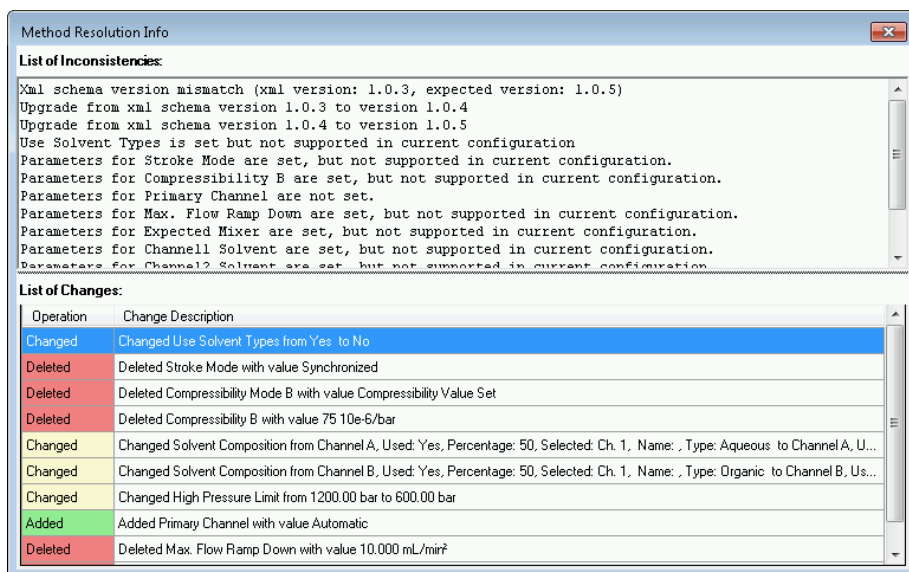


Figure 5 Boîte de dialogue **Method Resolution Info**

## Mise à jour des paramètres de traitement des données dans la méthode de référence

L'option **Update Master Method** est disponible dans le menu **Method** et dans le menu contextuel de la méthode de séquence de l'explorateur de la ChemStation. La disponibilité et le comportement exact de cette fonctionnalité dépendent du mode en cours. Dans tous les cas, cette fonctionnalité met à jour les paramètres de l'analyse des données de la méthode cible.

#### REMARQUE

Il est important de noter que cette fonction ne met à jour les paramètres d'analyse des données *que* de la méthode cible et qu'elle écrase *tous* les paramètres d'analyse des données.

### Mise à jour d'une méthode de référence en mode Retraitement ou Recalcul

Dans ce mode, la commande **Update Master Method** est uniquement active pour les méthodes de séquence d'un jeu de résultats. Vous pouvez mettre à jour la méthode à laquelle vous vous référez lors de la création de la séquence. La condition préalable est que la méthode de référence existe encore dans le répertoire des méthodes de référence (la méthode de référence doit porter le même nom que la méthode de séquence).

Vous pouvez également configurer les paramètres de séquence afin d'exécuter cette fonction automatiquement lors de chaque acquisition ou retraitement de séquence. Pour plus d'informations, reportez-vous à « [Administration des méthodes](#) », page 56.

### Mise à jour d'une méthode de référence en mode Dernier résultat

Dans ce mode, la commande **Update Master Method** est active à la fois pour les séquences et les échantillons simples. Vous pouvez transférer les paramètres actuels du traitement des données à la dernière méthode de référence utilisée pour le traitement des données. Cette méthode est affichée dans la colonne **Analysis Method** de la table de navigation.

La commande est disponible dans les conditions suivantes :

- Le fichier de méthode existe dans l'emplacement donné (le nom et le chemin entier doivent correspondre).
- Pour les séquences : L'analyse de séquence a été traitée manuellement avec une méthode de référence (pas avec la méthode de séquence).

### Mise à jour d'une méthode de référence en mode Dernier résultat

En mode Dernier résultat, vous pouvez transférer les paramètres de traitement des données à toute méthode de référence, indépendamment de la méthode de référence liée à la séquence actuelle ou l'analyse unique. Pour mettre à jour toute méthode de référence, sélectionnez **Menu > Update any Master Method ...** et sélectionnez une méthode dans la boîte de dialogue **Choose Master Method to update**. Les paramètres de traitement des données seront ensuite copiés vers la méthode de référence sélectionnée.

## Mise à jour de méthodes

Avec la boîte de dialogue **Update Methods** (reportez-vous à la figure ci-dessous), vous pouvez copier des méthodes depuis le répertoire des méthodes de référence vers le jeu de résultats et inversement. Dans les deux cas, l'ensemble de la méthode est copiée (paramètres de traitement des données et d'acquisition).

Vous pouvez ouvrir la boîte de dialogue depuis le menu **Method > Update Methods...** ou à partir du menu contextuel de la méthode de séquence dans l'explorateur de la ChemStation. La fonctionnalité est disponible pour les jeux de résultats en mode Recalculer et Retraiter.

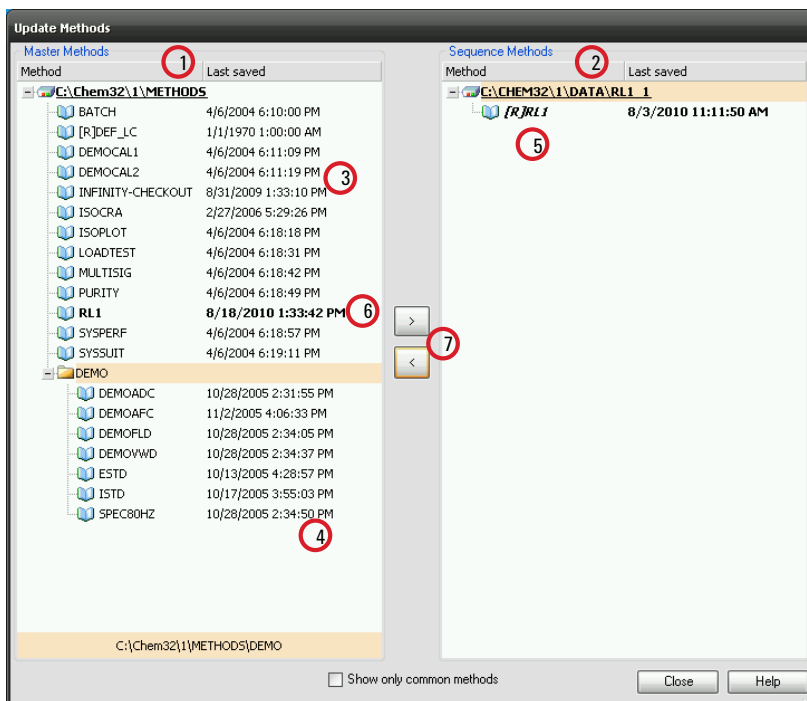
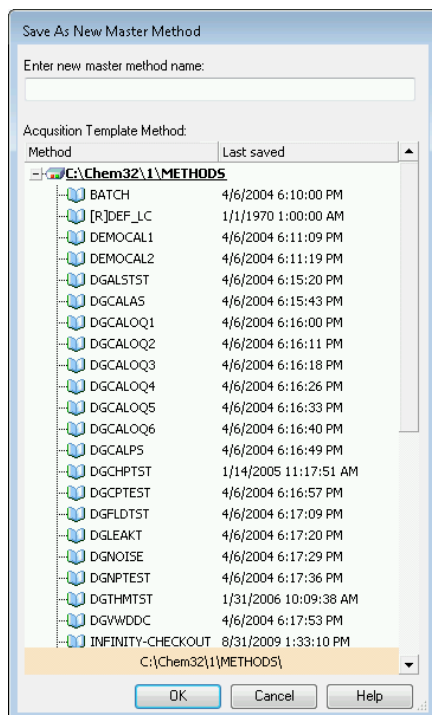


Figure 6 Boîte de dialogue **Update Methods**

- 1 Sur la gauche apparaissent toutes les méthodes de tous les répertoires de méthodes de référence (tel que configuré dans les Préférences).
- 2 Sur le côté droit, vous voyez les méthodes du jeu de résultats actuellement chargé.
- 3 Pour chaque méthode, vous voyez la date de son dernier enregistrement. L'info-bulle de la date affiche la dernière entrée de la méthode.
- 4 Les méthodes peuvent également être stockées dans des sous-dossiers du répertoire de méthode de référence.
- 5 Les méthodes en lecture seule disposent d'un préfixe [R]. La méthode de séquence actuellement chargée est toujours présentée en italiques.
- 6 Les méthodes communes au jeu de résultats de la séquence et au pool de méthode de référence s'affichent en gras. Les méthodes ne correspondent que par leur nom ; si un nom de méthode existe dans plusieurs pools, chacune des instances est considérée comme commune.
- 7 Vous pouvez copier des méthodes entre un pool de méthode de référence et le jeu de résultats de la séquence par un tirer-lâcher ou à l'aide des boutons < et >. Vous ne pouvez pas écraser des méthodes en lecture seule.

## Enregistrer une méthode comme nouvelle méthode de référence

Vous pouvez enregistrer les paramètres de traitement des données de DA.M comme nouvelle méthode de référence. Cependant, le DA.M ne contient pas les paramètres d'acquisition. Pour fournir un jeu valide de paramètres d'acquisition pour la nouvelle méthode de référence, vous devez donc sélectionner une autre méthode comme modèle pour les paramètres d'acquisition (voir figure ci-dessous). La nouvelle méthode de référence contiendra ensuite vos paramètres de traitement des données actuels du DA.M et les paramètres d'acquisition de la méthode de modèle sélectionnée. La nouvelle méthode sera créée dans le dossier où se trouve la méthode de modèle d'acquisition.



**Figure 7** Boîte de dialogue **Save as New Master Method**

## Pendant l'exécution d'une méthode

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

La liste de contrôle d'analyse comporte huit éléments :

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

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

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

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

**1**    *Commande ou macro de pré-analyse*

Effectue une tâche avant le début de l'analyse.

**2**    *Acquisition des données*

Lance le programme d'injection.

Injecte l'échantillon.

Acquiert des données brutes.

Stocke les données.

**3**    Enregistre les paramètres d'acquisition dans le fichier ACQ.TXT.



Facultatif, comme indiqué dans la liste de vérification de l'exécution : *enregistrer une copie de la méthode avec les données* en tant que RUN.M.

**4** *Analyse des données (traitement des données)*

Charge le fichier de données.

Intègre le fichier de données.

Identifie et quantifie les pics.

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

Vérifie la pureté des pics, le cas échéant.

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

**5** *Analyse des données personnalisée*

Exécute vos macros.

**6** *Enregistrement des données de BPL*

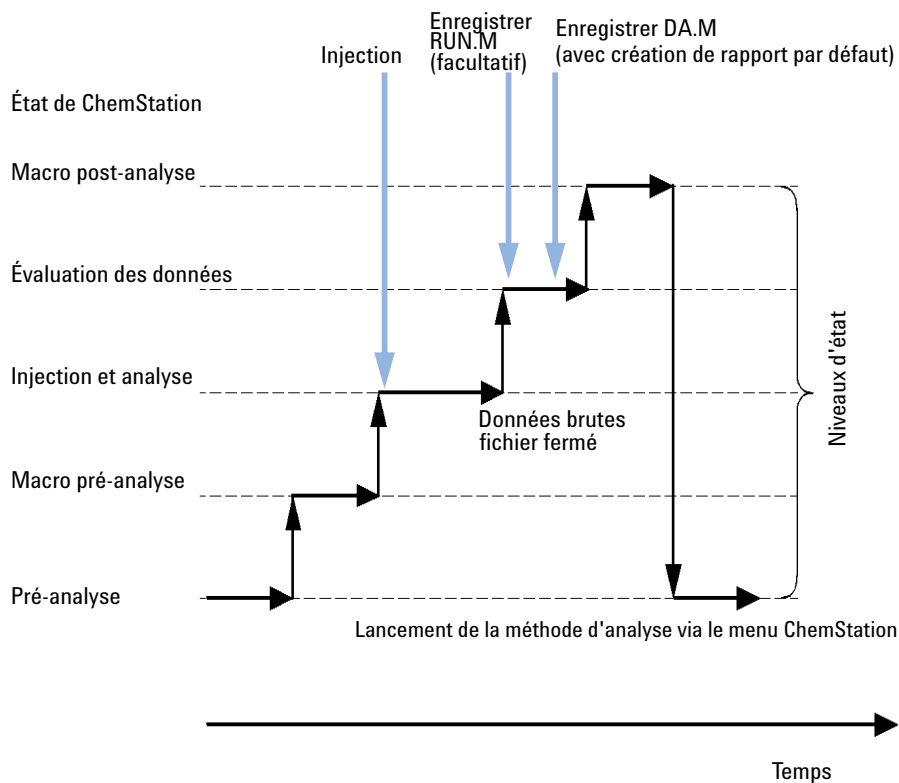
Enregistre le fichier de registre binaire GLPSave.Reg.

**7** *Commande ou macro de post-analyse*

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

## 2 Utilisation de méthodes

### Pendant l'exécution d'une méthode



**Figure 8** Exécution de méthode

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

#### REMARQUE

Dans le cas du mode "Création de dossiers uniques désactivée", aucun fichier DA.M n'est généré. Pour plus d'informations, reportez-vous à « [Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence](#) », page 115.

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

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

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

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

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

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

### Intégration

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

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

### **Identification et quantification des pics**

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

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

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

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

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

### **Impression d'un rapport**

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

## Traitement des données personnalisée

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

## Enregistrement des données de BPL

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

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

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

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

## Commande ou macro de post-analyse

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

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

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

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

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



### 3

## Acquisition des données

Qu'est-ce que l'acquisition des données ? 72

Moniteurs en temps réel 75

Contrôle du signal en temps réel 75

Moniteur de spectres en temps réel 75

Journal 76

Informations sur l'état 77

Etat de la ChemStation 77

Barre d'état 77

Diagramme du système 78

Règles et alertes 79

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



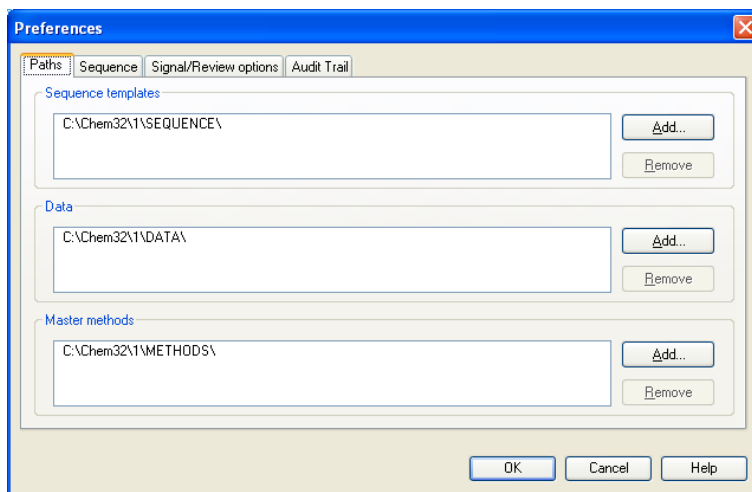
## Qu'est-ce que l'acquisition des données ?

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

### Sélection du chemin d'accès

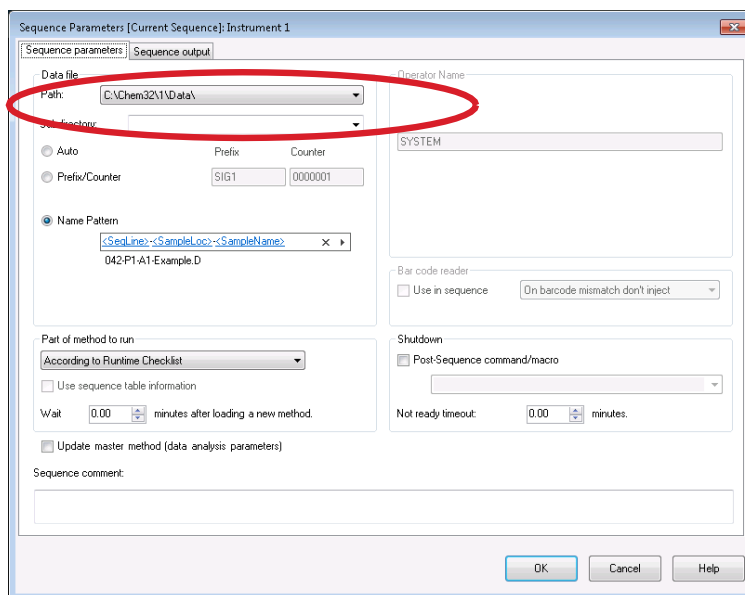
Grâce à la version ChemStation B.02.01, un enregistrement plus souple des données des analyses uniques et des séquences vous permet de spécifier divers emplacements d'enregistrement sans reconfiguration. L'onglet **Paths** de la boîte de dialogue **Preferences** du menu **View** vous donne la possibilité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





**Figure 9** Onglet **Paths** dans la boîte de dialogue **Preferences**

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



**Figure 10** Sélection du chemin d'accès aux données dans la boîte de dialogue **Sequence Parameters**

## Moniteurs en temps réel

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

### Contrôle du signal en temps réel

Le contrôle du signal en temps réel vous permet de surveiller dans la même fenêtre plusieurs signaux et, si cette fonction est prise en charge par l'instrument associé, les tracés des performances de l'instrument. Vous pouvez sélectionner les signaux que vous souhaitez afficher et régler les axes du temps et de la réponse. Pour les détecteurs prenant en charge cette fonction, un bouton de stabilisation est disponible.

Vous pouvez afficher la réponse absolue du signal sur la ligne de message en déplaçant le curseur en croix.

### Moniteur de spectres en temps réel

Le moniteur de spectres en temps réel montre une absorbance comme fonction de la longueur d'onde. Vous pouvez régler à la fois la plage de longueurs d'onde et l'échelle d'absorbance à l'écran.

## Journal

Le journal affiche les messages générés par le système analytique. Il peut s'agir de messages d'erreur, de messages système ou de messages d'événement provenant d'un module. Le journal enregistre ces événements, qu'ils soient affichés ou non.

## Informations sur l'état

### Etat de la ChemStation

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

Lorsqu'une analyse individuelle est en cours :

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

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

### Barre d'état

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

## Diagramme du système

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

**Tableau 5**    Couleurs utilisées pour indiquer l'état du module ou de l'instrument

Couleur	Status
gris foncé	hors ligne
bleu-vert	mode veille
jaune	non prêt
vert	prêt
violet	pré-analyse, post-analyse
bleu	analyse
rouge	erreur

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

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

## Règles et alertes

Pour les pilotes d'instrument prenant en charge cette fonctionnalité (p. ex. le CPG 7890A), vous pouvez aller à **Instrument > Manage Rules and Alerts...** pour définir comment ChemStation réagit à des événements spécifiques pendant l'acquisition.

Par exemple, l'absence d'un flacon ou d'un récipient est une erreur courante en chromatographie. Vous pouvez indiquer si ChemStation doit continuer, suspendre, arrêter ou abandonner l'exécution d'une séquence.

### REMARQUE

Les événements pris en charge et les comportements possibles dépendent du pilote de l'instrument.

---

### **3**   **Acquisition des données** Règles et alertes





## 4 Automatisation/Séquences

Qu'est-ce que l'automatisation ?	83
Que sont les séquences et les modèles de séquence ?	84
Paramètres de séquence	85
Saisie graphique des échantillons	86
Table de séquence	89
Création de séquences (séquences et modèles de séquence)	89
Séquence simple	94
Présentation	94
Utilisation de l'onglet Easy Sequence (Séquence)	95
Utilisation de l'onglet Easy Sequence Setup (Modèle)	97
Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)	99
Acquisition des données dans une séquence	99
Acquisition de données d'analyses uniques	101
Mise à jour automatique de méthodes de référence	101
Échantillons prioritaires	103
Séquençage avec des échantillons de contrôle	103
Séquenciation avec échantillons de référence vierges	103
Exécution d'une séquence	104
Interruption d'une séquence	106
Arrêt d'une séquence	106
Abandon d'une séquence	107
Exécution d'une séquence partielle	107
Création d'un jeu de résultats auto-assemblés	110
Fichier journal de séquence	112
Procédure d'analyse de séquence	113
Structure d'un fichier de données de séquence	115
Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence	115



Structure des fichiers de données avec le mode Création de dossiers uniques activé	119
Attribution d'un nom à des fichiers de données dans une séquence	120
Attribution automatique d'un nom à des fichiers de données dans une séquence	120
Saisie manuelle des noms de fichier de données	121
Utilisation d'un préfixe/compteur pour nommer des fichiers de données	122
Utilisation d'un modèle de nom pour nommer des fichiers de données	123
Migration des jeux de résultats	124
Fonctionnement post-séquence	126
Not Ready Timeout (Temporisation non prêt) (CPL et EC seulement)	126
Wait Time (Temps d'attente) (CPL et EC seulement)	126
Réétalonnage automatique	127
Spécification de réétalonnages	128
Paramètres de réétalonnage de la table de séquence	128
Types de séquences	131
Séquences d'étalement explicite	131
Séquences d'étalement cyclique à un niveau	131
Séquences d'étalement cyclique à plusieurs niveaux	132
Utilisation simultanée d'étalement explicites et cycliques	135
Séquences d'étalement cyclique avec encadrement	137
Séquences de réétalement cyclique utilisant plusieurs flacons qui contiennent la même dilution d'étalon	141

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

## Qu'est-ce que l'automatisation ?

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## Paramètres de séquence

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

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

Par exemple, vous pouvez :

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

### REMARQUE

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

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

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

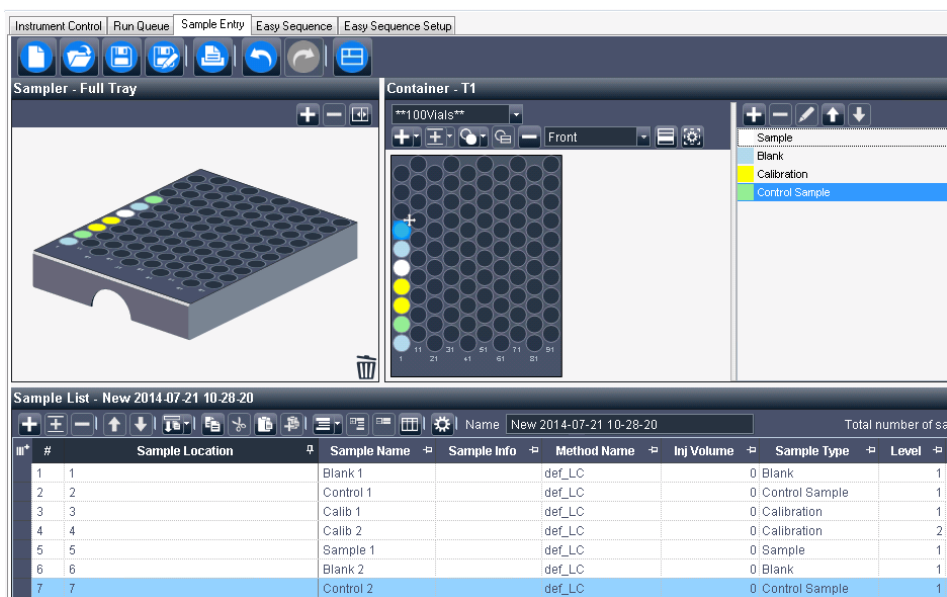
- Indiquez les actions à effectuer en fin de séquence à l'aide des paramètres d'**shutdown**,
- Spécifiez l'utilisation ou non de codes-barres dans la séquence, ainsi que le traitement d'une non-concordance de codes-barres, en partant du principe qu'un lecteur de codes-barres est installé sur le système.

## Saisie graphique des échantillons

À partir du modèle ChemStation C.01.07, un système intuitif de saisie graphique des échantillons est disponible, basé sur l'affichage à l'écran d'une représentation du récipient à échantillons et des échantillons qui y sont chargés.

Les *récipients à échantillons* sont les plateaux ou les plaques utilisés par les instruments dans lesquels les échantillons ou les flacons sont chargés. Les dimensions des récipients à échantillons et leur capacité en ce qui concerne la taille des flacons pouvant être chargés diffèrent d'un instrument à l'autre. Les types de récipient à échantillons décrivent les propriétés physiques d'un plateau ou d'une plaque spécifique au format XML. Les types de récipient à échantillons personnalisés peuvent être sauvegardés de manière centralisée et rendus accessibles dans l'ensemble du laboratoire en important un fichier XML contenant la définition du type de récipient à échantillons. Pour importer des types de récipient à échantillons personnalisés, utilisez le bouton **Import Sample Container Type** dans le panneau de commande d'OpenLAB.

Vous pouvez sélectionner un récipient à échantillons dans l'onglet **Sample Entry**. Pour créer de nouvelles saisies d'échantillon dans l'interface utilisateur graphique, il suffit de cliquer sur la représentation du support à échantillons. Les emplacements des échantillons sont codés par couleur selon le type d'échantillon.



**Figure 11** Onglet **Sample entry**

Pour tous les passeurs automatiques d'échantillons permettant de réarranger physiquement les plaques, il est possible de déplacer des plaques entières vers d'autres emplacements ou d'autres tiroirs en les faisant simplement glisser. Les emplacements des flacons sont automatiquement adaptés dans la liste des échantillons. La configuration du support peut être enregistrée avec le modèle de séquence ou exportée au format PDF.

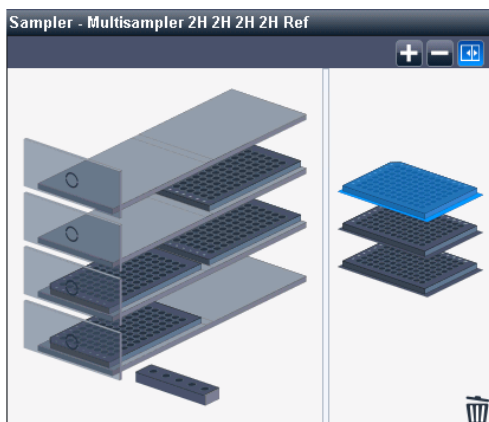


Figure 12 Multi-échantillonneur dans l'onglet **Sample entry**

La table **Sample List** propose de nombreuses fonctions qui permettent de modifier la table, telles que :

- Copier les plages de cellules
- Ajouter les cellules ou lignes copiées
- Grouper les échantillons par information spécifique
- Recopier vers le bas par incrément automatique intelligent
- Réorganiser une ou plusieurs rangées sélectionnées
- Copier le contenu d'une cellule individuelles ou les zones sélectionnées d'un tableau dans le presse-papier

Les renseignements préparés dans la liste d'échantillons doivent être les mêmes que ceux de la table de séquence (voir « [Table de séquence](#) », page 89). Une fois terminée, placez la liste des échantillons en tant que séquence dans la file d'attente.

REMARQUE

Une fois que l'exécution de la séquence a démarré, vous ne pouvez plus modifier la liste des échantillons. La modification en ligne n'est possible que dans la table de séquence.

REMARQUE

Pour continuer à modifier ce modèle de séquence dans ChemStation, commencez par le sauvegarder à l'aide du bouton **Save** dans l'onglet **Sample Entry**. Puis chargez à nouveau le modèle de séquence à partir du menu **File** ou **Sequence**.



## Table de séquence

La table de séquence détermine les méthodes utilisées pour traiter les flacons d'échantillons, ainsi que l'ordre d'acquisition et d'analyse des données des flacons. Cette table comporte également des informations sur chaque échantillon, parmi lesquelles le type de support à échantillon<sup>1</sup>, les noms des échantillons, les paramètres de quantification et les paramètres de réétalonnage.

Pour les instruments prenant en charge l'échantillonnage double (GC), une colonne supplémentaire **Injector Location** (avec comme valeurs possibles **Front** ou **Back**) s'affiche dans la table, et la case **Dual Simultaneous Injections** est disponible en bas de la table.

- Si vous cochez la case **Dual Simultaneous Injections**, le système combine les analyses et traite deux échantillons à la fois lors de chaque analyse. Les numéros des lignes sont ajustés en conséquence. Dans ce mode vous pouvez trier la table de séquence par emplacement de l'injecteur : **Front** ou **Back**.
- Si cette case n'est pas cochée alors un seul échantillon est traité par analyse. L'ordre des analyses est celui affiché dans la table. Vous pouvez utiliser les injecteurs avant et arrière alternativement.

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

## Création de séquences (séquences et modèles de séquence)


Utilisez la table de séquence pour spécifier les échantillons et les méthodes ainsi que les flacons à utiliser durant la séquence. La table de séquence énumère les échantillons de la séquence selon l'ordre dans lequel ils seront traités ; elle contient, pour chaque échantillon, le numéro du flacon ou la position de l'échantillon, la méthode, les données d'étalonnage, la quantité d'échantillon, l'étalon interne (ISTD), les facteurs de multiplication et d'autres données.

<sup>1</sup> Il est possible d'importer de nouveaux types de support à échantillon dans le panneau de commande d'OpenLAB

## Sélection des colonnes à afficher

Les informations affichées dans la table de séquence sont configurables :

- Parcourez les colonnes vers la droite ou la gauche pour avoir devant vous celles qui vous intéressent.
- Masquez les colonnes dont vous n'avez pas besoin.

Pour modifier la vue et le contenu de la table de séquence, cliquez sur  (**Column Chooser**) dans la barre d'outils de la table de séquence. Sélectionnez les colonnes que vous souhaitez afficher dans la table de séquence. Selon les logiciels installés, des colonnes supplémentaires peuvent être disponibles ; par exemple, la colonne **Target Mass** si un instrument LC/MS ou CE/MS est installé.

## Modes de sélection

Plusieurs cellules ou plages de cellules sont sélectionnables, comme dans les applications Microsoft Excel :

- **Ctrl** + Clic sélectionne plusieurs cellules individuelles
- **Maj** + Clic sélectionne une plage de cellules

## Copier, Couper, Coller

- *Copier* : copier les cellules sélectionnées pour les coller dans d'autres applications (p. ex. Microsoft Excel). Les informations copiées comprennent les balises d'en-tête de colonne. Pour voir les balises, collez les informations dans Microsoft Excel par exemple. Grâce à ces balises d'en-tête de colonne, les valeurs peuvent être recollées dans une table de séquence ChemStation même si les colonnes sont dans un autre ordre.
- *Couper* : lorsque des lignes entières sont coupées, elles sont supprimées et placées dans le presse-papiers. Si seules quelques colonnes ou cellules sont coupées, les lignes sont conservées et seul le contenu des cellules est effacé.
- *Coller* : Si toute une ligne est sélectionnée, les valeurs placées dans le presse-papiers sont insérées comme des nouvelles lignes. Si des balises d'en-tête de colonne sont disponibles dans le contenu copié, elles permettent d'ajouter les valeurs dans les colonnes appropriées. Si une seule colonne est sélectionnée, les valeurs du presse-papiers sont collées du haut vers le bas, ligne par ligne, et remplissent autant de colonnes vers la droite qu'il y en a dans le tampon du presse-papiers. Si une seule cellule est sélectionnée, les valeurs du presse-papiers remplissent les cellules en dessous et à droite de la cellule sélectionnée.

## Annuler, rétablir

La table de séquence permet d'annuler ou de rétablir la dernière opération.

## Insertion, ajout ou suppression de lignes

Pour insérer ou ajouter une nouvelle ligne vierge, ou pour supprimer une ligne existante, utilisez les boutons suivants dans la barre d'outils :



(Insert Line)



(Append Lines)



(Delete Lines)

## Utilisation de la fonction Recopier vers le bas

Si plusieurs de vos échantillons utilisent la même méthode, vous pouvez saisir rapidement ces échantillons dans la table de séquence à l'aide de l'icône



**Filldown**. Cette fonction permet de copier les informations d'une cellule dans les cellules ou les colonnes précédemment sélectionnées. Pour l'emplacement de l'échantillon, le nom de l'échantillon et le nom du fichier de données, les règles d'incrémentation définies dans la boîte de dialogue **Filldown Options** sont utilisées. Pour les autres colonnes, cette fonction copie simplement les champs (par exemple le nom de la méthode, le nombre d'injections par flacon, la quantité d'échantillon et, si spécifiés la quantité d'échantillon, la quantité d'étalon interne (ISTD), et les facteurs de multiplication et de dilution).

Les seules colonnes exclues du processus de répétition sont celles contenant des valeurs uniques, telles que les identifiants du système de gestion de laboratoire. De même, les paramètres d'étalonnage ne sont pas copiés dans les échantillons qui ne sont pas des étalons d'étalonnage.




Grâce aux **Filldown Options**, vous pouvez définir de manière fine la façon dont la fonction Recopier vers le bas remplit les cellules. Cette boîte de dialogue permet de définir les paramètres relatifs à l'emplacement et au nom des échantillons. Sur les plaques multi-puits, il est possible de choisir la direction de l'incrément et de ne l'appliquer qu'à une portion de la plaque.

La fonction de recopie vers le bas des fichiers de données est spéciale : elle ajoute un compteur, sous la forme « --001 », au nom complet du fichier. Pour les applications GC, elle ajoute également la lettre « F » ou « B », suivant l'injecteur choisi pour l'analyse lorsque la fonction Recopier vers le bas a été utilisée.

### Assistant de création de lignes

Cet assistant permet de créer efficacement de grandes tables de séquence. Pour cela, deux modes sont disponibles :


- *Mode Simple* : remplissez une ligne avec toutes les valeurs à dupliquer. Sélectionnez la ligne et utilisez l'**Insert/Filldown Wizard**  pour répéter la ligne n fois. Il est également possible de modifier le paramétrage pour que des étalonnages ou des blancs soient insérés après un certain nombre d'échantillons.

- *Mode Avancé* : remplissez plusieurs lignes pour créer un motif. Sélectionnez toutes ces lignes puis utilisez l'**Insert/Filldown Wizard**. Vous pouvez alterner les étalonnages, les témoins et les blancs et définir le nombre d'analyses d'échantillons, de niveaux d'étalonnage et de paramètres de réétalonnage.

Vous pouvez également décider, par exemple, d'effectuer tous les étalonnages sur le même flacon et de n'incrémenter que les flacons d'échantillons. Les emplacements des échantillons sont répétés selon un incrément intelligent à partir des positions de départ (décalées pour chaque bloc copié), pour conserver les distances de toutes les positions d'échantillons. Si les paramètres ne sont pas définis dans la boîte de dialogue, les valeurs sont simplement dupliquées vers le bas.

Les seules colonnes exclues du processus de répétition sont celles contenant des valeurs uniques, telles que les identifiants du système de gestion de laboratoire.

### Filtrage de la table de séquence

Grâce aux **Filter Options** , vous pouvez appliquer un ensemble de conditions pour n'afficher qu'une partie des lignes de la table de séquence.


Le filtrage permet de voir la table de séquence sous forme condensée. Vous pouvez, par exemple, choisir de ne montrer que certains types d'échantillons, certaines méthodes, certains niveaux d'étalonnage, certains emplacements d'échantillons ou certains noms d'échantillons.

Cela aide à vérifier rapidement l'homogénéité, ou à modifier uniquement un certain groupe de lignes de séquence en appliquant la fonction « remplir vers le bas » à la liste filtrée. Par exemple :

- Mettre à jour la quantité d'échantillon pour tous les échantillons à un certain emplacement.
- Changer l'emplacement des flacons ou des échantillons pour un niveau spécifique d'étalonnage.


## Lecture de codes-barres

Si votre instrument prend en charge la lecture de codes-barres, cliquez sur


**Read Bar Codes**  pour obtenir les noms des échantillons. Sélectionnez dans la table de séquence, la ligne ou la cellule, correspondant à l'emplacement de l'échantillon, dont vous souhaitez lire le code-barres. Une ou plusieurs lignes peuvent être sélectionnées. Le code-barres est placé dans la cellule contenant le nom de l'échantillon, pour chaque emplacement d'échantillon spécifié.

## Utilisation du bouton Champs personnalisés

Si des champs personnalisés ont été définis dans la/les méthode(s) utilisée(s)

dans la table de séquence, le bouton **Custom Fields**  permet de modifier les valeurs des champs personnalisés pour chaque échantillon (champs personnalisés d'échantillon) ou pour chaque composé dans la méthode d'un échantillon (champs personnalisés de composé).

## Prévisualisation de la séquence

L'outil **Sequence Preview**  ouvre une boîte de dialogue qui présente la séquence telle qu'elle sera exécutée avec tous les réétalonnages, les échantillons de contrôle qualité et les blancs dans le bon ordre.

## Séquence simple

### Présentation

**Easy Sequence** est une interface utilisateur destinée à configurer rapidement et facilement des séquences à partir des modèles. Le modèle définit les paramètres qui devront être visionnés ou modifiés par l'utilisateur. La configuration d'étalonnage présente une interface de type glisser-déplacer facile à utiliser pour définir les types d'étalonnage et les positions d'échantillons et affiche une présentation de la séquence. **Easy Sequence** permet aux utilisateurs de créer rapidement des séquences selon un certain modèle qui diffèrent dans le nombre d'échantillons, mais dont les autres caractéristiques sont semblables.

Easy Sequence Setup: C:\Chem32\2\SEQUENCE\Test Seq.est

**Method Information**

Method: DEF\_LC.M ...

Estimated Cycle Time: 10 min

**Data Information**

Data Location: C:\Chem32\2\DATA\ ...

Data File Name: Datafile\_<C> ...

☒ Reset Data File Name counter to 1 every time this sequence is run

**Sample Information**

Starting Vial Location: 1

Number of Samples: 6

Injection Volume: Use Method

Sample Name: Sample\_<C> ...

Import Samples... Fill Samples Clear Sample List

Vial	Sample Name	Inj Volume	Sample Info
1	Sample_0001	Use Method	
2	Sample_0002	Use Method	
3	Sample_0003	Use Method	
4	Sample_0004	Use Method	
5	Sample_0005	Use Method	
6	Sample_0006	Use Method	

Preview/Print Sequence... Save and Add to Queue Clear All

Automation Engine Version: 2.05 [007]

Figure 13 Onglet Easy Sequence

## Utilisation de l'onglet Easy Sequence (Séquence)

**Easy Sequence** Séquence simple sert à créer une séquence à partir du modèle créé dans l'onglet **Easy Sequence Setup**. Des échantillons sauvegardés au format CSV peuvent également être importés.

### Pour définir une séquence

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

#### CONSEIL

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

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

### Pour importer des données d'échantillon

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

- 1 Dans l'onglet **Easy Sequence**, cliquez sur l'icône **Load Easy Sequence Setup** pour ouvrir un modèle.

## 4 Automatisation/Séquences

### Séquence simple

- 2 Cliquez sur **Import Samples...**
- 3 Sélectionnez le fichier CSV que vous souhaitez importer.  
Tous les champs valides sont importés.

#### REMARQUE

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

---

- 4 Vérifiez les champs en révisant la liste des échantillons.



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

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

### Création d'un modèles Easy Sequence :

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

### **Pour définir des étalonnages :**

**Prérequis**

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

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

## Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

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

### Acquisition des données dans une séquence

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

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

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

L'emplacement de ce dossier est déterminé par les paramètres de la boîte de dialogue **Sequence Parameters** ; l'attribution du nom de ce dossier est déterminée par l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue **Preferences**. Par défaut, l'intitulé est <SeqName> <Date> <Time>, mais il peut être configuré par des jetons, ou manuellement par enregistrement du nom. Pour plus d'informations à propos de l'utilisation des jetons, voir « **Noms de fichier et jetons** », page 18. Vous pouvez utiliser les jetons suivants:

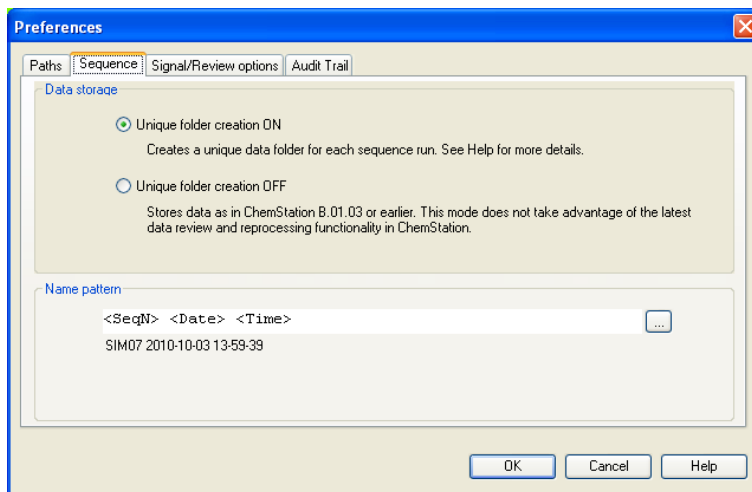
- **Current date**
- **Current time**
- **User name**
- **Instrument name**

## 4 Automatisation/Séquences

### Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

- **Sequence name**
- **Counter**
- **Computer name**

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



**Figure 14** Boîte de dialogue **Preferences**, onglet **Sequence**

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

Durant l'acquisition, les fichiers de données sont stockés dans le jeu de résultats. Dans chaque fichier de données (\*.D), une copie de la méthode de séquence est enregistrée pour cette analyse spécifique. Le fichier ACQ.txt

contient les paramètres d'acquisition de la méthode de séquence, conservant ainsi l'état initial de la méthode lors de l'acquisition du fichier de données spécifique. Le dossier DA.M contient une copie des paramètres de traitement des données utilisés dans la méthode de séquence.

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

**REMARQUE**

Le jeu de résultats doit toujours contenir le jeu complet de tous les fichiers de données (\*.D). Si vous supprimez une partie des fichiers de données, charger le résultat dans le système central de données pourrait provoquer des problèmes. Si vous devez raccourcir une séquence, créez un jeu de résultats auto-assemblés depuis le jeu réduit de lignes de séquence (reportez-vous à « [Création d'un jeu de résultats auto-assemblés](#) », page 110).

## Acquisition de données d'analyses uniques

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

## Mise à jour automatique de méthodes de référence

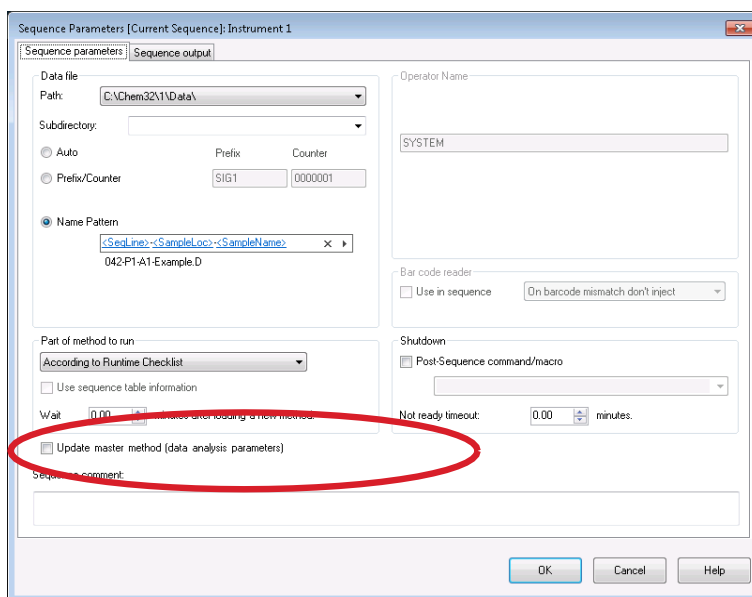
Avec cette fonction, la ChemStation met à jour automatiquement les paramètres d'analyse de données copiés dans votre jeu de résultats. Par exemple, vous pouvez utiliser cette fonction pour mettre à jour les tables d'étalonnage des méthodes de référence après avoir retraité une séquence avec des réétalonnages.

## 4 Automatisation/Séquences

### Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)

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

Les paramètres d'analyse de données des méthodes de référence sont également mises à jour après retraitement de la séquence. La condition préalable est que la méthode de référence correspondante (une méthode ayant le même nom que la méthode de séquence) existe encore dans le même répertoire des méthodes de référence qu'au moment de sa copie dans le jeu de résultats.



**Figure 15** Option de **Update master methods** dans la boîte de dialogue **Sequence Parameters**

#### REMARQUE

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

## Échantillons prioritaires

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

## Séquençage avec des échantillons de contrôle

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

## Séquenciation avec échantillons de référence vierges

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

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

Tableau 6 Exemple de séquence avec échantillons vierges.

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

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

### Exécution d'une séquence

Dès que vous placez une séquence dans la file d'attente, le modèle de séquence se transforme en liste analyse-par-analyse. Elle présente la séquence telle qu'elle sera exécutée avec tous les réétalonnages, les échantillons de contrôle qualité et les blancs dans le bon ordre. Le fichier de séquence ainsi généré est stocké dans le jeu de résultats.

REMARQUE

Si vous ajoutez des lignes de séquence alors qu'une séquence est déjà en cours d'acquisition, les noms de fichier de données correspondants dépendent de la convention de nommage que vous avez choisie dans les paramètres de séquence. Avec la convention de nommage **Name Pattern**, le nom de fichier de données est résolu lors du démarrage de l'analyse, à l'aide des jetons donnés. Avec les autres conventions de nommage, le nom de fichier par défaut suggéré dans la table de séquence est *OnlineEdited#.D*, où # est incrémenté pour chaque ligne supplémentaire.

REMARQUE

La suppression de lignes d'une séquence en cours d'analyse peut entraîner des incohérences graves, d'autant plus si l'exécution de la séquence est suspendue et puis redémarrée.



### Exemple : Séquence à injections multiples

Line	Sample Container	Sample Location	Sample Name	Method Name	Injection Source	Injection Vol...	Inj/Loc	Sample Type
1	Use Current Configuration	1	Sample1	def_LC	As Method	10	3	Sample

Figure 16    Modèle de séquence avant placement dans la file d'attente, échantillon à 3 injections

Line	Sample Container	Sample Location	Sample Name	Method Name	Injection Source	Injection Vol...	Inj/Loc	Sample Type
1	Use Current Configuration	1	Sample1	def_LC	As Method	10	1	Sample
2	Use Current Configuration	1	Sample1	def_LC	As Method	10	1	Sample
3	Use Current Configuration	1	Sample1	def_LC	As Method	10	1	Sample
4								

Figure 17    Fichier de séquence après placement dans la file d'attente, 3 lignes distinctes

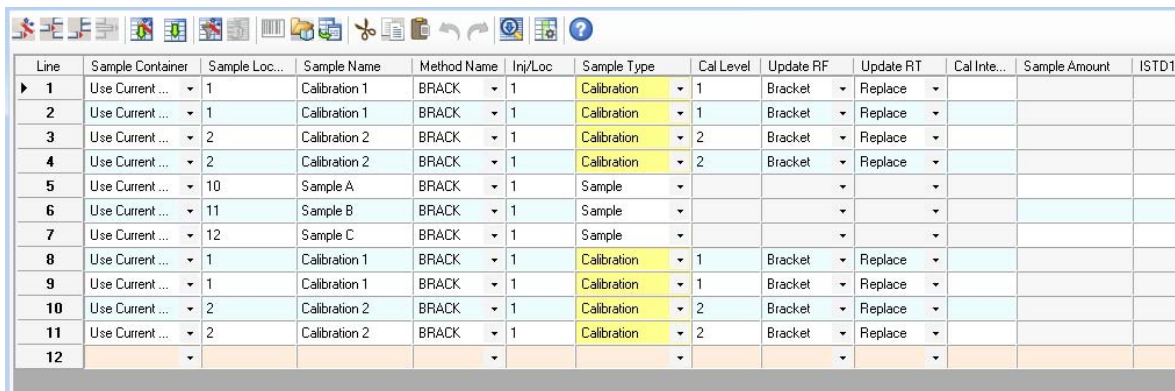
### Exemple : Séquence à étalonnage cyclique

Line	Sample Container	Sample Loc...	Sample Name	Method Name	Inj/Loc	Sample Type	Cal Level	Update RF	Update RT	Cal Inte...	Sample Amount	ISTD1
1	Use Current ...	1	Calibration 1	BRACK	2	Calibration	1	Bracket	Replace	3		
2	Use Current ...	2	Calibration 2	BRACK	2	Calibration	2	Bracket	Replace	3		
3	Use Current ...	10	Sample A	BRACK	1	Sample						
4	Use Current ...	11	Sample B	BRACK	1	Sample						
5	Use Current ...	12	Sample C	BRACK	1	Sample						

Figure 18    Modèle de séquence avant placement dans la file d'attente, étalonnage cyclique à encadrement

## 4 Automatisation/Séquences

### Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)



Line	Sample Container	Sample Loc...	Sample Name	Method Name	Inj/Loc	Sample Type	Cal Level	Update RF	Update RT	Cal Inte...	Sample Amount	ISTD1
1	Use Current ...	1	Calibration 1	BRACK	1	Calibration	1	Bracket	Replace			
2	Use Current ...	1	Calibration 1	BRACK	1	Calibration	1	Bracket	Replace			
3	Use Current ...	2	Calibration 2	BRACK	1	Calibration	2	Bracket	Replace			
4	Use Current ...	2	Calibration 2	BRACK	1	Calibration	2	Bracket	Replace			
5	Use Current ...	10	Sample A	BRACK	1	Sample						
6	Use Current ...	11	Sample B	BRACK	1	Sample						
7	Use Current ...	12	Sample C	BRACK	1	Sample						
8	Use Current ...	1	Calibration 1	BRACK	1	Calibration	1	Bracket	Replace			
9	Use Current ...	1	Calibration 1	BRACK	1	Calibration	1	Bracket	Replace			
10	Use Current ...	2	Calibration 2	BRACK	1	Calibration	2	Bracket	Replace			
11	Use Current ...	2	Calibration 2	BRACK	1	Calibration	2	Bracket	Replace			
12												

**Figure 19** Fichier de séquence après placement dans la file d'attente, étalonnage cyclique à encadrement

## Interruption d'une séquence

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

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

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

## Arrêt d'une séquence

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

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

## Abandon d'une séquence

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

## Exécution d'une séquence partielle

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

Si le mode Création de dossier unique est activé (reportez-vous à « [Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence](#) », page 115), vous pouvez choisir parmi les options suivantes pour l'acquisition de séquence partielle :

- acquisition de la séquence partielle avec un nouveau jeu de résultats ;

ou

- acquisition de la séquence partielle dans un jeu de résultats existant.

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

- un fichier de données unique ou plusieurs fichiers de données doivent être écrasés, par exemple parce qu'un flacon incorrect a été utilisé en premier lieu ;
- seule la première partie de la séquence a été exécutée en premier lieu et les échantillons manquants doivent être ajoutés en exécutant une séquence partielle. Cela peut se produire en cas de panne d'un instrument durant l'acquisition de séquence.
- Des lignes supplémentaires doivent être ajoutées au modèle de séquence après l'acquisition des lignes existantes. Les analyses supplémentaires doivent être ajoutées aux données existantes.

## REMARQUE

La suppression de lignes ou l'insertion de lignes dans une partie de la table de séquence ayant déjà été acquise entraîne des incohérences graves dans les noms des fichiers.

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

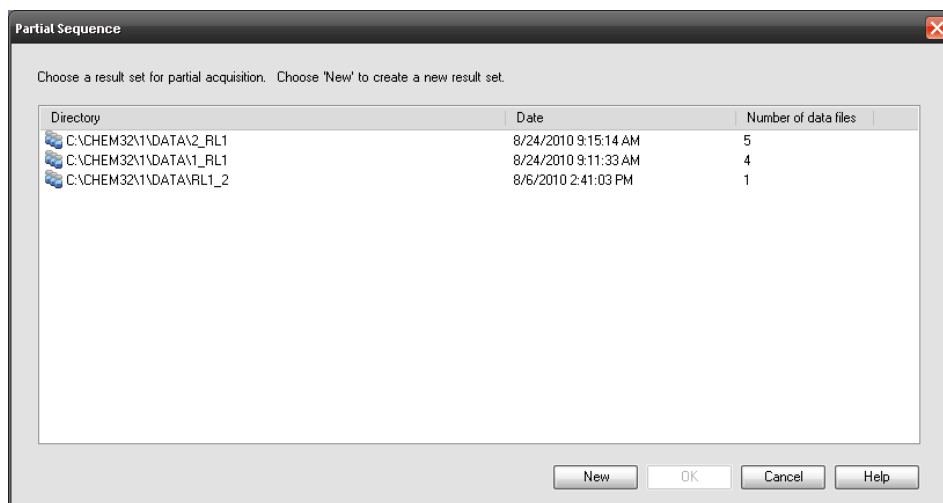


Figure 20 Boîte de dialogue **Partial Sequence**

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

- le nom du modèle de séquence (séquence source) et le nom du fichier de séquence \*.S dans le jeu de résultats (séquence cible) sont identiques ;
- le chemin d'accès des données et le sous-répertoire doivent être identiques pour les fichiers de séquence ;
- le nombre de lignes de séquence dans la séquence source doit être supérieur ou égal au nombre de lignes de séquence dans la séquence cible ;
- pour chaque ligne dans la séquence cible, le type d'échantillon et le nombre d'injections doivent être identiques aux valeurs dans les lignes correspondantes de la séquence source ;

- le schéma d'attribution de nom de fichier de données doit être identique pour les deux fichiers de séquence.

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

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

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

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

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

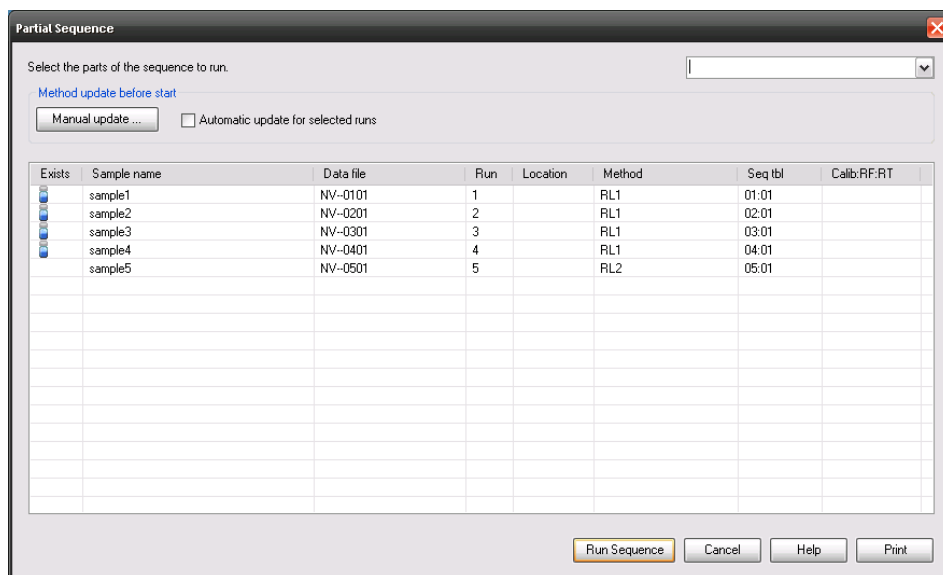
Avec la **Manual update ...**, vous ouvrez la boîte de dialogue **Update Methods**, qui vous permet de synchroniser manuellement les méthodes de référence et les méthodes utilisées dans le modèle de séquence. Avec l'option **Automatic update for selected runs**, vous pouvez mettre à jour toutes les méthodes de séquences utilisées dans les analyses sélectionnées avec leurs méthodes de référence correspondantes.

#### REMARQUE

Les paramètres d'acquisition et de traitement des données sont mis à jour.

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

## Utilisation de séquences (séquences et modèles de séquence)



**Figure 21** Boîte de dialogue **Partial Sequence**

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


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

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

## Pour assembler un nouveau jeu de résultat

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

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

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

Notez que la position d'un fichier vierge est important pour évaluer le taux signal/bruit tel qu'il est défini par la pharmacopée européenne. Voir aussi « [Séquenciation avec échantillons de référence vierges](#) », page 103.

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

## Fichier journal de séquence

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



## Procédure d'analyse de séquence

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

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

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

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

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

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

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

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

#### Etat du logiciel ChemStation

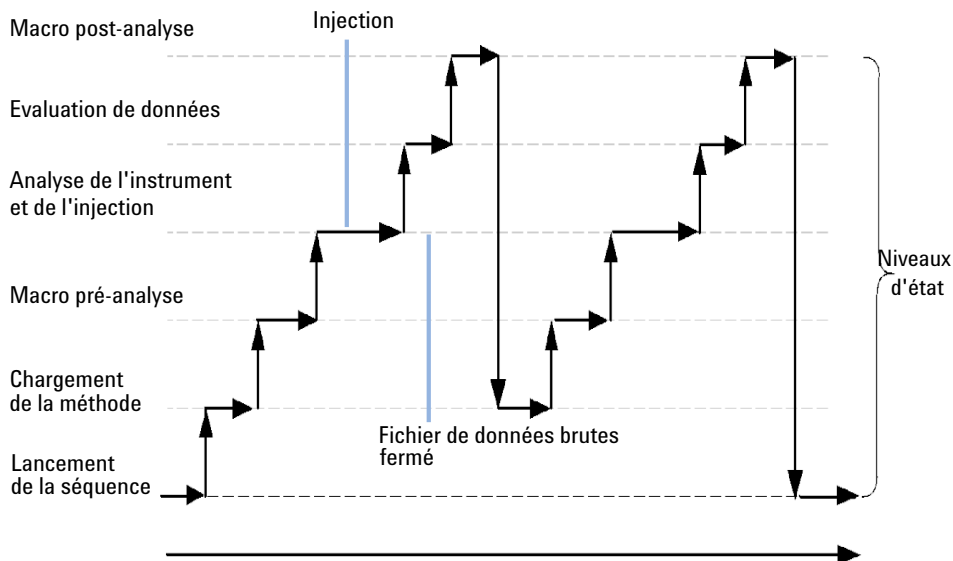
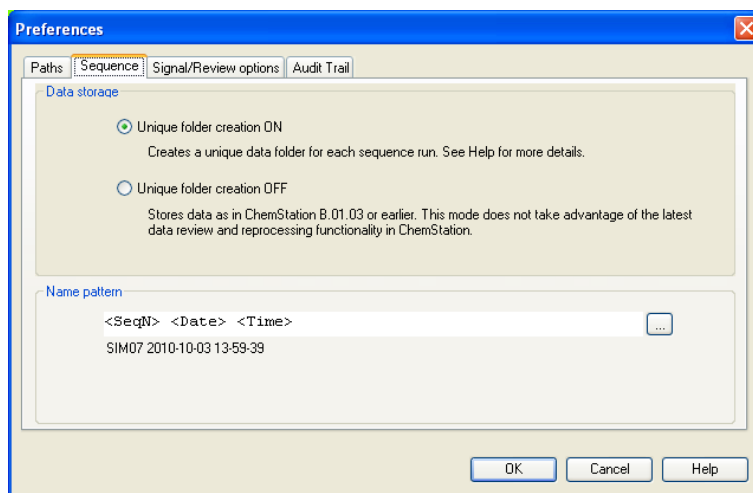


Figure 22 État de la séquence

## Structure d'un fichier de données de séquence

### Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence

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



**Figure 23** Boîte de dialogue **Préférences**, onglet **Sequence**

#### REMARQUE

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

#### REMARQUE

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

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

### Mode Création de dossiers uniques activé

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

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

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

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

### Mode Création de dossiers uniques désactivé

Dans ce mode de stockage des données, le nom de la méthode représente le seul lien entre le fichier de données et la méthode utilisée pour l'acquisition et le traitement de ces données. Aucune copie de la méthode n'est enregistrée avec la séquence ou avec le fichier de données. Ainsi, si la méthode est modifiée ou si une nouvelle méthode est créée avec ce nom, la séquence ne peut pas être exactement reproduite. Les fichiers de données de la séquence sont enregistrés selon les paramètres indiqués dans le groupe Fichier de données de la boîte de dialogue **Sequence Parameters**. La fonction d'attribution d'un nom à la séquence de l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue **Preferences** est désactivée dans ce mode. Ce mode de stockage des données étant identique à celui du logiciel ChemStation version B.02.01 (ou antérieure), il ne bénéficie pas des nouvelles fonctionnalités de révision/retraitement des données dans la vue **Data Analysis** de ChemStation.

## REMARQUE

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

## REMARQUE

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

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

- Les données de séquence ne sont pas acquises dans un jeu de résultats, mais directement dans le sous-répertoire spécifié dans les Paramètres de séquence (reportez-vous à « [Paramètres de séquence](#) », page 85). Par conséquent, le modèle de nom de séquence est en grisé dans l'onglet **Sequence** de la boîte de dialogue Préférences.
- Cela signifie que pour deux séquences d'acquisition ou plus, les données peuvent être acquises dans le même sous-répertoire.
- Aucune méthode de séquence (.M) ou copie du fichier de séquence (.S) n'est stockée avec les données ; seuls le fichier journal de séquence et le fichier batch (.B) le sont. Cela signifie que seules les méthodes et les séquences se trouvant dans les chemins d'accès spécifiés dans la boîte de dialogue **Preferences** (reportez-vous à « [Sélection du chemin d'accès](#) », page 72) sont disponibles. Elles doivent être utilisées pour l'acquisition ainsi que pour la révision et le retraitement des données. Des modifications de méthode spécifiques à une séquence ou à un fichier de données ne peuvent être enregistrées qu'en enregistrant la méthode sous un autre nom. Dans le cas contraire, ces modifications seront également appliquées à la méthode d'acquisition.
- Lorsqu'une séquence acquise avec le Mode création de dossiers uniques désactivé est chargé dans la table de navigation Table, le mode de retraitement de la vue **Data Analysis** n'est pas disponible (reportez-vous à [Figure 24](#), page 118). Ces séquences ne peuvent être retraitées qu'en mode **Method and Run Control** à l'aide de l'option **Reprocessing only** dans les **Sequence Parameters** ([Figure 25](#), page 118).

## 4 Automatisation/Séquences

### Structure d'un fichier de données de séquence

Over...	ECM	Type	Line	Inj	Vial	Sample Name	Sample Type	Man...	Cal Level	Sample Info
1			1	5		Isocratic Std. 1	Calibration	—	1	
2			2	5		Isocratic Std. 1	Calibration	—	1	
3			3	5		Isocratic Std. 1	Control Sample	—		
4			4	6		Isocratic Std. 2	Sample	—		
5			5	7		Isocratic Std. 3	Sample	—		

**Figure 24** Table de navigation pour des séquences acquises avec le mode **Unique Folder Creation** désactivé

Sequence Parameters [Queue Sequence]: Hathi, C:\CHEM32\3\SEQUENCE\def\_LC.S

Sequence parameters | Sequence output

Data file  
Path: C:\Chem32\3\data\  
Subdirectory:

☒ Auto Prefix Counter  
Prefix: SIG1 Counter: 0000001

☐ Prefix/Counter  
☐ Name Pattern  
<SeqLine>-<SampleLoc>-<SampleName>  
042-P1-A1-Example.D

Part of method to run  
Reprocessing Only  
According to Runtime Checklist  
Acquisition Only  
Reprocessing Only  
Wait 0.00 minutes after loading a new method.

☐ Update master method (data analysis parameters)

Sequence comment:

Operator Name  
admin

Bar code reader  
☐ Use in sequence On barcode mismatch don't inject

Shutdown  
☒ Post-Sequence command/macro

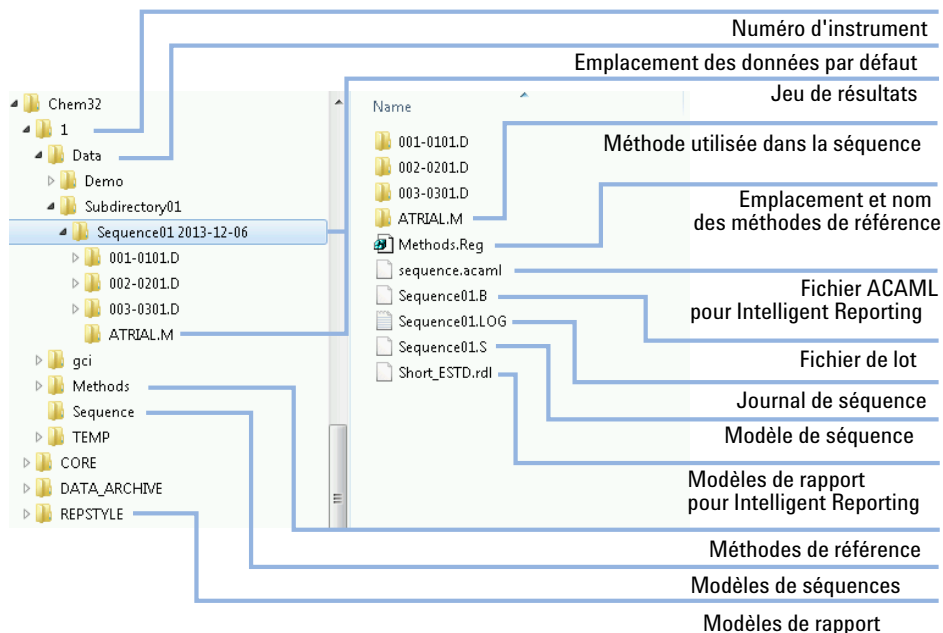
Not ready timeout: 0.00 minutes.

Back Next Cancel Help

**Figure 25** Retraitement de données de séquence acquises avec le mode **Unique Folder Creation** désactivé

## Structure des fichiers de données avec le mode Création de dossiers uniques activé

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



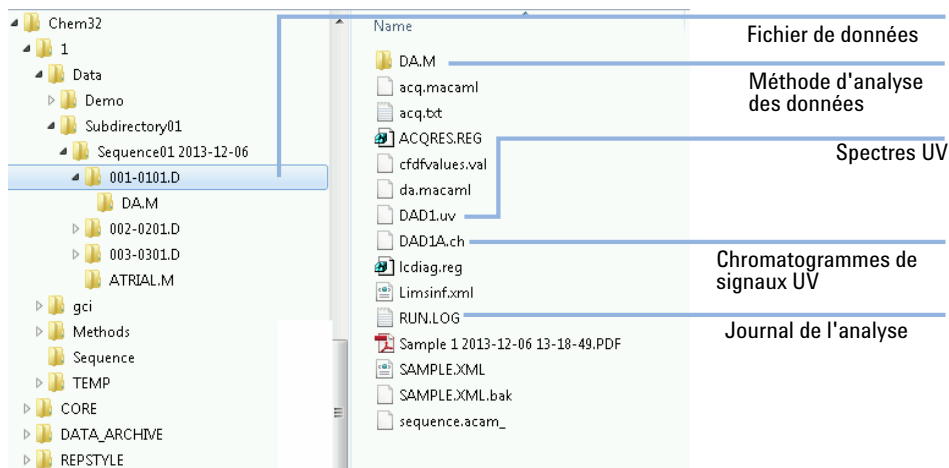
**Figure 26** Structure d'un fichier de données de séquence en mode "Création de dossiers uniques activé"

### REMARQUE

Le jeu de résultats doit toujours contenir le jeu complet de tous les fichiers de données (\*.D). Si vous supprimez une partie des fichiers de données, le téléchargement du jeu de résultats vers le système de stockage centralisé peut causer des problèmes. Si vous avez besoin de raccourcir une séquence, créez un jeu de résultats auto-assemblé à partir d'un jeu réduit de lignes de séquence (voir « [Création d'un jeu de résultats auto-assemblés](#) », page 110).

## 4 Automatisation/Séquences

### Structure d'un fichier de données de séquence



**Figure 27** Contenu des fichiers de données

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

Il est possible d'effectuer le nommage de fichier de données dans une séquence des manières suivantes :

- automatique ;
- manuelle ;
- à l'aide d'un préfixe/compteur ; ou
- à l'aide d'un modèle de nom.

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

### Flacons d'échantillons sur plateaux

Par exemple 017-0103.D

où :

- les trois premiers chiffres représentent le numéro du flacon, par exemple 017 ;



- le quatrième chiffre, en chromatographie en phase liquide et électrophorèse capillaire, est un trait d'union (-) ; en chromatographie en phase gazeuse, il s'agit des lettres F (Avant) ou B (Arrière) ;
- les cinquième et sixième chiffres représentent la ligne de séquence qui définit la méthode utilisée ; par exemple, 01 pour la première ligne de séquence ;
- les septième et huitième chiffres représentent le nombre d'injections pour le flacon, pour la méthode utilisée ; par exemple, 03 pour la troisième injection.

### Échantillons dans un multi-échantillonneur

Par exemple D1F-A3-0201.D

où :

- D1F : position (dans ce cas : à l'avant) du support à échantillon dans le tiroir (dans ce cas : D1)
- A3 : position de l'échantillon dans le support à échantillon
- 0201 : ligne de séquence 2, première injection

### Analyses à blanc

Par exemple NV--0499.D

où :

- NV signifie « Pas de flacon ».
- « - » est un trait d'union de séparation.
- 0499 est la 99<sup>e</sup> analyse à blanc de la ligne de séquence 4.

## Saisie manuelle des noms de fichier de données

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

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

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

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

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

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

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

**Tableau 7** Noms de fichier

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

## Utilisation d'un modèle de nom pour nommer des fichiers de données

Vous pouvez utiliser les jetons suivants pour créer les noms de fichier de données de chaque ligne de séquence :

<b>Sample Name</b>	Les informations qui ont reçu un code-barres ou ont été saisies dans le champ <b>Sample Name</b> .
<b>Sample Type</b>	Le type d'échantillon : échantillon de contrôle qualité, étalonnage, échantillon.
<b>Sample Location</b>	L'emplacement du flacon ou de la plaque de l'échantillon.
<b>Method</b>	Le nom de la méthode utilisée pour la ligne de séquence.
<b>Sequence Line</b>	Le numéro de ligne actuel de la séquence lancée.
<b>Replicate Number</b>	Le numéro de l'injection de ce flacon.
<b>Date</b>	Le timbre à date au début de l'acquisition de l'échantillon.
<b>Time</b>	L'horodateur au début de l'acquisition de l'échantillon.

Si votre instrument prend en charge différents emplacements d'injection (GC avec injecteur arrière et avant, par exemple), vous pouvez fournir différents modèles pour chaque emplacement. Par exemple, utilisez un préfixe avec une indication de l'emplacement de l'injection :

- *F-<Ligne de séquence>-<Emplacement de l'échantillon>-<Nom d'échantillon>* pour les injections avant et
- *B-<Ligne de séquence>-<Emplacement de l'échantillon>-<Nom d'échantillon>* pour les injections arrière.

### REMARQUE

Les noms de fichier de données ne sont pas résolus tant que l'analyse n'a pas démarré ; par conséquent, la table de séquence ne contient aucun nom de fichier de données.

Les noms de fichier de données résolus sont limités à 40 caractères ; les noms de fichier plus longs sont abrégés. Si un nom de fichier résolu n'est pas unique, un compteur est ajouté.

## Migration des jeux de résultats

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

Pour effectuer la migration, démarrez la **Result Set Migration** depuis le menu **Sequence** du mode **Data Analysis**.

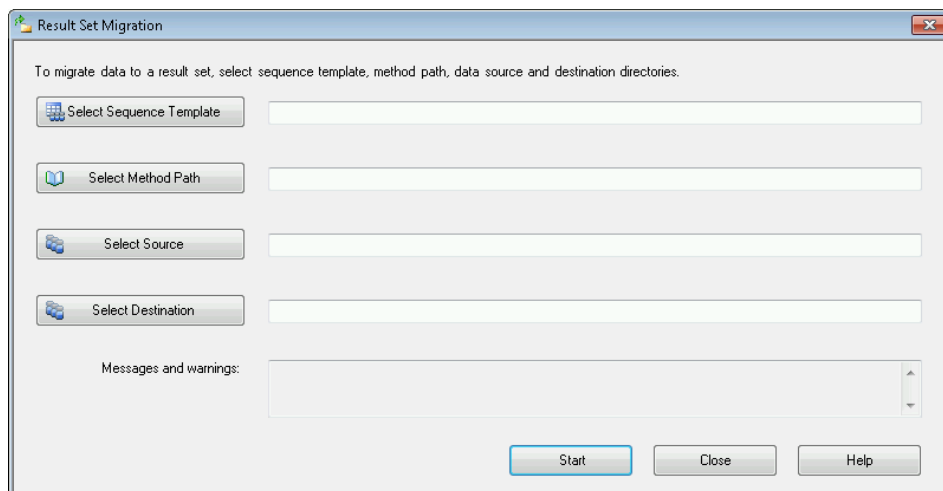


Figure 28 Migration des jeux de résultats

Renseignez les champs obligatoires suivants :

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

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

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

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

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

Les opérations suivantes sont réalisées :

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

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

## Fonctionnement post-séquence

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

- Mettre le système en état de VEILLE, où les lampes, les pompes, le thermostat et le refroidisseur d'échantillons sont éteints.
- Mettre le système en état LAMPOFF avec toutes les lampes inactives (off) (CPL et EC seulement).
- Mettre le système en état PUMPOFF avec toutes les pompes inactives (off) (CPL et EC seulement) ou
- Utiliser une macro SHUTDOWN par défaut ou modifier SHUTDOWN.MAC pour déterminer une opération spécifique.

Par exemple, vous pouvez arrêter le système au terme de la séquence.

La macro d'arrêt peut également servir à paramétrer le débit sur zéro ou à le réduire légèrement.

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

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

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

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

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

## Réétalonnage automatique

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

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

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

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

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

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

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

## Spécification de réétalonnages

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

### Paramètres de réétalonnage de la table de séquence

Le facteur de réponse (FR) et les temps de rétention/migration (RT) peuvent être mis à jour de plusieurs façons. Le niveau d'étalonnage, le facteur de réponse et les temps de rétention/migration mis à jour constituent des informations utilisées dans l'analyse des données pour le réétalonnage de la table d'étalonnage.

Lorsque les données d'étalonnage sont saisies dans la colonne du type d'échantillon de la table d'échantillons, les colonnes suivantes deviennent actives et peuvent être modifiées :

- Niveau d'étalonnage
- Mise à jour TR
- Mise à jour du FR
- Intervalle

Les valeurs qui peuvent être saisies dans chacune de ces colonnes sont affichées dans la table.



**Tableau 8** Paramètres de réétalonnage de la table de séquence

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

La table comprend les colonnes de la table de séquence qui contiennent les paramètres de réétalonnage et les valeurs qui peuvent être saisies.

### **Aucune mise à jour**

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

### **Remplacement**

Remplace les valeurs précédentes pour les temps de rétention/migration et la réponse (aires ou hauteurs) avec celles provenant uniquement de l'analyse en cours. La réponse reste inchangée dans le cas où un pic n'est pas détecté lors de ce réétalonnage.

### **Moyenne**

Fait la moyenne des temps de rétention/migration et des réponses (aires ou hauteurs) pour chaque pic, sur la base de l'étalonnage original et des moyennes de tous les réétalonnages effectués depuis. Si un pic est absent dans l'un des réétalonnages, la réponse moyenne du pic n'est pas affectée.

## **Encadrement**

Les échantillons sont encadrés par les étalonnages effectués avant et après. L'évaluation est effectuée après le dernier étalonnage post-échantillons. Les données d'étalonnage existantes sont remplacées par les données résultant de l'étalonnage pré-échantillons. La moyenne des étalonnages post-échantillons est ajoutée dans cette table d'étalonnage.

## **Intervalle**

L'intervalle représente la fréquence à laquelle l'étalonnage est effectué durant une séquence. La fréquence d'étalonnage correspond au nombre d'injections d'échantillons effectuées avant la série suivante d'injections d'étalonnage. Un étalonnage est effectué au début de l'analyse, et les résultats (facteurs de réponse) sont saisis dans la table d'étalonnage. Ces résultats sont ensuite utilisés dans les calculs quantitatifs ultérieurs. Après la réalisation du nombre d'injections spécifié, un autre étalonnage a lieu et les résultats sont saisis dans la table d'étalonnage, écrasant les résultats des étalonnages précédents.

## **% delta**

Le calcul du % delta permet de comparer les facteurs de réponse d'une analyse avec ceux saisis manuellement dans une table d'étalonnage. Le % delta est ensuite appliqué à tous les pics étalonnés de la table. Plusieurs étalons internes peuvent être identifiés. Leurs facteurs de réponse mesurés sont ensuite utilisés pour calculer de nouveaux facteurs de réponse pour les autres pics. Vous identifiez lequel des étalons internes doit servir à calculer le % delta pour chaque pic de la table d'étalonnage.

## Types de séquences

Lors de la préparation d'une séquence, vous pouvez utiliser les types de séquence suivants :

- les séquences à étalonnage explicite ;
- les séquences à étalonnage explicite à un seul niveau ;
- les séquences à étalonnage cyclique à plusieurs niveaux ;
- les séquences combinant étalonnages cyclique et explicite et
- les séquences à étalonnage cyclique avec encadrement.

### REMARQUE

Après avoir placé la séquence dans la file d'attente, toutes les séquences (y compris les séquences à étalonnage avec encadrement) sont transformées en séquences à étalonnage explicite. Voir « [Exécution d'une séquence](#) », page 104.

Pendant l'analyse, la table de séquence montre simplement les injections, analyse par analyse, telles qu'elles sont traitées par l'instrument. Si un échantillon est ajouté pendant l'analyse, tous les échantillons suivants (y compris les étalons) sont déplacés vers le bas de la table de séquence.

## Séquences d'étalonnage explicite

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

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

## Séquences d'étalonnage cyclique à un niveau

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

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

**Séquences d'étalonnage cyclique à plusieurs niveaux**

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

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

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

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

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

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

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

**Tableau 9**    Table de séquence pour les méthodes A et B

Ligne	Emplacement de l'échantillon	Nom de méthode	Inj./ Emplac.	Type d'échantillon	Niveau d'étalonnage	Mise à jour du FR	Mise à jour TR	Intervalle d'étalonnage
1	1	Méthode A	1	Étalonnage	1	Moyenne	Aucune mise à jour	2
2	2	Méthode A	1	Étalonnage	2	Moyenne	Aucune mise à jour	2
3	10	Méthode A	1					

**Tableau 9** Table de séquence pour les méthodes A et B

Ligne	Emplacement de l'échantillon	Nom de méthode	Inj./ Emplac.	Type d'échantillon	Niveau d'étalonnage	Mise à jour du FR	Mise à jour TR	Intervalle d'étalonnage
4	11	Méthode A	1					
5	12	Méthode A	1					
6	13	Méthode A	1					
7	14	Méthode A	1					
8	3	Méthode B	1	Étalonnage	1	Moyenne	Aucune mise à jour	3
9	5	Méthode B	2	Étalonnage	2	Moyenne	Aucune mise à jour	3
10	20	Méthode B	1					
11	21	Méthode B	1					
12	22	Méthode B	1					
13	23	Méthode B	1					
14	24	Méthode B	1					

### Ordre d'analyse de la méthode A

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

**Tableau 10** Ordre d'analyse de la méthode A

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

**Tableau 10** Ordre d'analyse de la méthode A

N° d'injection	Méthode	Flacon	Utilisation
8	Méthode A	13	Analyse d'échantillon et rapport
9	Méthode A	1	Niveau d'étalonnage 1 et rapport
10	Méthode A	2	Niveau d'étalonnage 2 et rapport
11	Méthode A	14	Analyse d'échantillon et rapport

### Ordre d'analyse de la méthode B

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

**Tableau 11** Ordre d'analyse de la méthode B

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

Notez que les résultats répertoriés dans le [Tableau 10](#), page 133 et dans le [Tableau 11](#), page 134 peuvent être obtenues au moyen d'une séquence partielle, de façon à avoir un aperçu de l'ordre d'analyse une fois la table de séquence configurée.

## Utilisation simultanée d'étalonnages explicites et cycliques

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

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

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

### Exemple

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

**Tableau 12** Table de séquence de SIMPREG

Ligne	Emplacement de l'échantillon	Nom de méthode	Inj./ Emplac.	Type d'échantillon	Niveau d'étalonnage	Mise à jour du FR	Mise à jour TR	Intervalle d'étalonnage
1	1	SimpReg	1	Étalonnage	1	Moyenne	Moyenne	3
2	1	SimpReg	1	Étalonnage	1	Remplacement	Remplacement	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

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

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

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

**Table de séquence**

La table de séquence comprend sept lignes. La première ligne spécifie l'échantillon de réétalonnage cyclique. La deuxième ligne indique le réétalonnage explicite effectué une seule fois, en début de séquence. De la troisième à la septième ligne sont spécifiés les échantillons à analyser.

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

**Ordre d'analyse de SimpReg**

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

**Tableau 13** Ordre d'analyse de SimpReg

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



## Séquences d'étalonnage cyclique avec encadrement

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

### Exemple

Considérons la situation suivante :

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

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

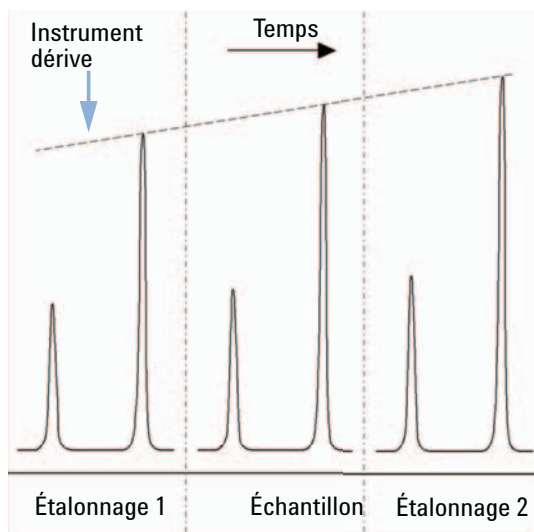


Figure 29 Encadrement

### Fonctionnement d'une séquence encadrante

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

### Exemple

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

#### Table de séquence

La table de séquence de Brack.M (page suivante) est abrégé pour simplifier l'exemple. Elle comprend sept lignes. Les deux premières lignes définissent les conditions de réétalonnage pour chaque niveau. Les autres lignes désignent les échantillons à analyser.

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

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

**Tableau 14** Table de séquence de BRACK.M

Ligne	Emplacement de l'échantillon	Nom de méthode	Inj./ Emplac.	Type d'échantillon	Niveau d'étalonnage	Mise à jour du FR	Mise à jour TR	Intervalle d'étalonnage
1	1	BRACK.M	2	Étalonnage	1	Encadrement	Remplacement	3
2	2	BRACK.M	2	Étalonnage	2	Encadrement	Remplacement	3
3	10	BRACK.M	1					
4	11	BRACK.M	1					
5	12	BRACK.M	1					
6	13	BRACK.M	1					
7	14	BRACK.M	1					

## 4 Automatisation/Séquences

### Types de séquences

Run No.	Method Name	Vial No.	Inj No.	DataFile Name	Lvl No.	Upd RF	Upd Ret	Operation
1	Brack.M	1	1	c1-03001.d	1	R	R	Report for Calibration Run No.1
2	Brack.M	1	2	c1-03002.d	1	A	R	Report for Calibration Run No.2
3	Brack.M	2	1	c2-03001.d	2	R	R	Report for Calibration Run No.3
4	Brack.M	2	2	c2-03002.d	2	A	R	Report for Calibration Run No.4 Print Calibration Table
5	Brack.M	10	1	010-0301.d				Sample Analysis, no report
6	Brack.M	11	1	011-0301.d				Sample Analysis, no report
7	Brack.M	12	1	012-0301.d				Sample Analysis, no report
8	Brack.M	1	1	c1-03003.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
9	Brack.M	1	2	c1-03004.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
10	Brack.M	2	1	c2-03003.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
11	Brack.M	2	2	c2-03004.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report Print Calibration Table
				010-0301.d				Report for Sample Run No.5
				011-0301.d				Report for Sample Run No.6
				012-0301.d				Report for Sample Run No.7
				c1-03003.d	1	R		Report for Calibration Run No.8
				c1-03004.d	1	A		Report for Calibration Run No.9
				c2-03003.d	2	R		Report for Calibration Run No.10
				c2-03004.d	2	A		Report for Calibration Run No.11
12	Brack.M	13	1	013-0301.d				Sample Analysis, no report
13	Brack.M	14	1	014-0301.d				Sample Analysis, no report
14	Brack.M	1	1	c1-03005.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
15	Brack.M	1	2	c1-03006.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
16	Brack.M	2	1	c2-03005.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
17	Brack.M	2	2	c2-03006.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report Print Calibration Table
				013-0301.d				Report for Sample Run No.12
				014-0301.d				Report for Sample Run No.13
				c1-03005.d	1	R		Report for Calibration Run No.14
				c1-03006.d	1	A		Report for Calibration Run No.15
				c2-03005.d	2	R		Report for Calibration Run No.16
				c2-03006.d	2	A		Report for Calibration Run No.17

Where A = average

R = replace

**Figure 30** Ordre d'analyse d'une séquence encadrante

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

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

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

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

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

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

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

**Tableau 15** Séquence de réétalonnage cyclique utilisant 3 flacons définis pour chaque niveau

Numéro de flacon	Nom d'échantillon	Sample Type (Type d'échantillon)	Nom de méthode	Nombre d'injections	Niveau	Upd RT (Mettre à jour le temps de rétention)	Upd RF (Mettre à jour le facteur de réponse)	Interval (Intervalle)
1	Eta1a	Etalonnage	Méthode A	1	1	Moyenne	Moyenne	6
2	Eta1b	Etalonnage	Méthode A	1	1	Moyenne	Moyenne	6
3	Eta1c	Etalonnage	Méthode A	1	1	Moyenne	Moyenne	6
5	Eta2a	Etalonnage	Méthode A	1	2	Moyenne	Moyenne	6
6	Eta2b	Etalonnage	Méthode A	1	2	Moyenne	Moyenne	6
7	Eta2c	Etalonnage	Méthode A	1	2	Moyenne	Moyenne	6
10	Echantillon10	Echantillon	Méthode A	6				
11	Echantillon11	Echantillon	Méthode A	6				
12	Echantillon12	Echantillon	Méthode A	6				
13	Echantillon13	Echantillon	Méthode A	6				
14	Echantillon14	Echantillon	Méthode A	6				

L'ordre d'exécution est le suivant :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

**Tableau 16** Flacons différents utilisés pour les encadrements ouvrant et fermant

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

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

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





## 5

# File d'attente et planificateur

Flux de travail supportés 146

Utilisation de la file d'attente 148

Echantillons uniques de la file d'attente 148

Séquences de la liste d'attente 149

Pauses de la liste d'attente 149

Utilisation du planificateur 150

Ce chapitre explique les concepts de file d'attente et planificateur. Il explique comment ajouter des échantillons simples, des séquences ou des pauses à la file d'attente.



## Flux de travail supportés

La file d'attente d'analyse contrôle toutes les analyses de ChemStation :

- Lorsque vous utilisez la commande **RunControl > Run Method** ou **RunControl > Run Sequence** pour analyser une méthode ou une séquence, l'objet est d'abord ajouté à la file d'attente d'analyse et est ensuite automatiquement démarré d'ici.

Si la file d'attente est en pause, elle sera automatiquement activée pour que l'élément soit analysé immédiatement. L'instrument retourne sur pause lorsque le lancement est terminé.

- La file d'attente d'analyse vous permet de programmer une série d'échantillons et de séquences ainsi que des paramètres additionnels. Vous pouvez ajouter des échantillons ou des séquences à la liste avec la commande **RunControl > Queue Method...** ou la commande **RunControl > Queue Sequence....**

Avec la liste d'attente d'analyse, vous pouvez automatiser des opérations plus longues telles que des opérations sur la nuit ou pendant le week-end. En plus de ces échantillons et de ces séquences, vous pouvez ajouter des pauses programmées. Pendant ces interruptions, ChemStation présente un message personnalisable et attend une confirmation de l'utilisateur.

Si la file d'attente d'analyse est interrompue momentanément, vous pouvez ajouter plusieurs objets sans démarrer la première analyse. Seulement après avoir redéfini la file d'attente, les échantillons et les séquences seront analysés comme défini dans la file d'attente d'analyse.

Avec le planificateur de tâches, vous pouvez préparer des programmes d'avance et les ajouter à la file d'attente d'analyse à n'importe quel moment.

Les procédures de travail suivantes sont prises en charge :

- Analyser un échantillon unique
- Analyser une séquence unique
- Lister un échantillon unique
- Mise en file d'une séquence unique
  - a Sélection d'un modèle de séquence classique ChemStation ou de séquence simple
  - b Edition ou révision de la table de séquence

- c Edition ou révision des paramètres de séquence
- d Enregistrements des paramètres
- e Ajout de la séquence à la file
- Modifier la file d'attente d'analyse
- Préparation d'un plan de file
- Ajouter un ensemble prédéfini à la file d'attente d'analyse.
  - a Sélection d'un plan de file
  - b Ajouter le programme à la file d'attente d'analyse.

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

La liste d'attente d'analyse et le planificateur ne sont disponibles qu'en ligne sur les sessions de ChemStation dans la fenêtre **Method and Run Control**.

## Utilisation de la file d'attente

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

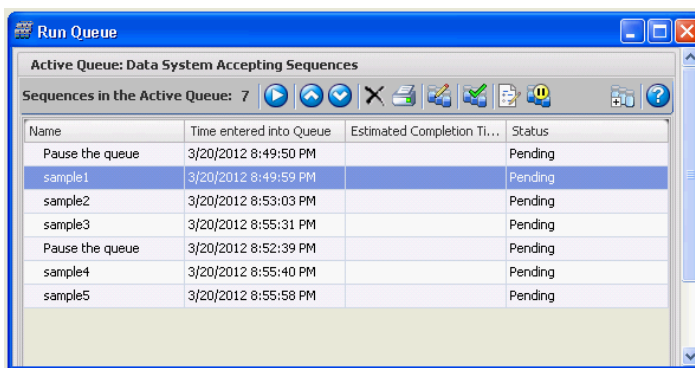


Figure 31 Boîte de dialogue **Run Queue**

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

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

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

## Echantillons uniques de la file d'attente

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

## Séquences de la liste d'attente

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

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

Selon l'état de la case à cocher, ce modèle de séquence temporaire sera conservé ou supprimé lorsque la file continue avec l'élément suivant. La case à cocher doit être sélectionnée ou assignée par défaut, en fonction des réglages du **Unique Folder Creation** (voir « [Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence](#) », page 115):

- Avec **Unique Folder Creation OFF** :

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

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

- Avec **Unique Folder Creation ON** :

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

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

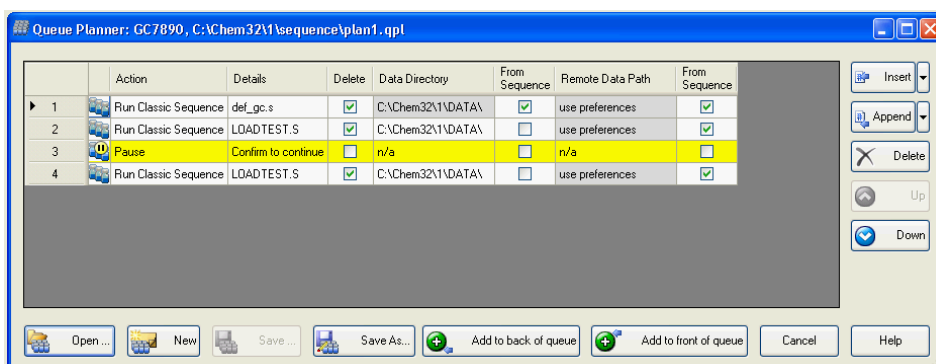
## Pauses de la liste d'attente

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

## Utilisation du planificateur

Avec le Planificateur de file, vous pouvez préparer un jeu ordonné de séquences (modèles de séquence ChemStation \*.s ou modèle de séquences simples \*.es) ou des interruptions. Le plan de file complet peut être ajouté à l'avant ou à l'arrière de la file d'attente.

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



**Figure 32** Planificateur de file

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

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



## 6 Principes de traitement et de révision des données

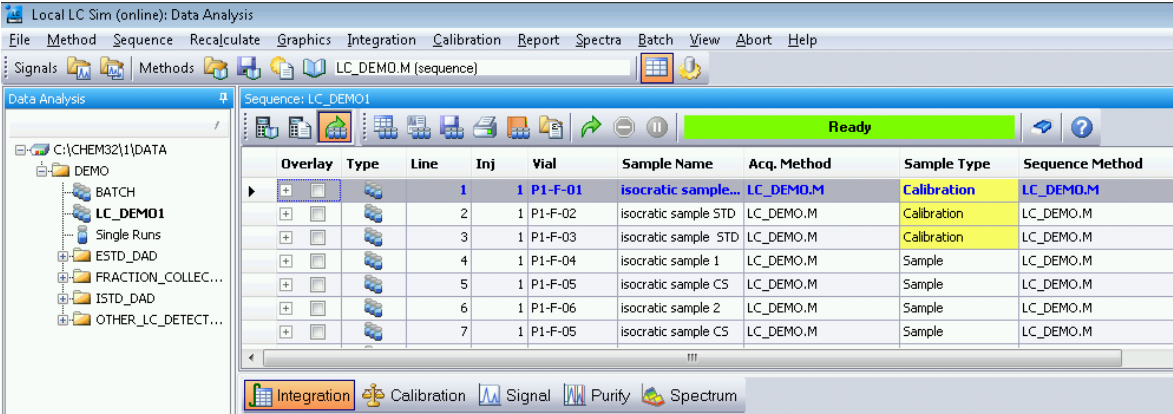
Data Analysis	152
Modes de traitement de données	154
Mode de recalcul	154
Mode Dernier résultat	157
Mode de retraitement	158
Mise à jour de méthodes	162
Visionneuse de rapports de traitement de données	163
Révision	167
Conditions pour la création intelligente de rapports	167
Sélection de fichiers de données	168
Sélection de modèles de rapports	169
Présentation de rapport	169
Procédures de révision possibles	169

Vous pouvez analyser et examiner vos données avec OpenLAB CDS ChemStation Edition. Ce chapitre décrit les options disponibles pour l'analyse et la revue des données avec ChemStation.



# Data Analysis

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



**Figure 33** Chargement d'une séquence de l'explorateur de la ChemStation dans la table de navigation

La partie principale de la table de navigation est constituée d'une liste de toutes les analyses du jeu. Pour charger l'analyse dans la mémoire de ChemStation, double-cliquez sur la ligne appropriée de la table de navigation. Plusieurs options supplémentaires sont disponibles en cliquant avec le bouton droit de la souris, par exemple le chargement ou la superposition des signaux spécifiques à partir du fichier, l'exportation des données ou l'affichage des paramètres de la méthode d'acquisition.

Les analyses de séquence sont chargées (en mode Retraitement) avec la méthode de séquence qui a été utilisée pour l'acquisition ou le retraitement. Le nom de cette méthode est affiché dans la barre d'outils, ainsi que dans la colonne **Sequence Method** dans la table de navigation. Le nom de la méthode d'acquisition est affiché dans la colonne **Acq Method**.

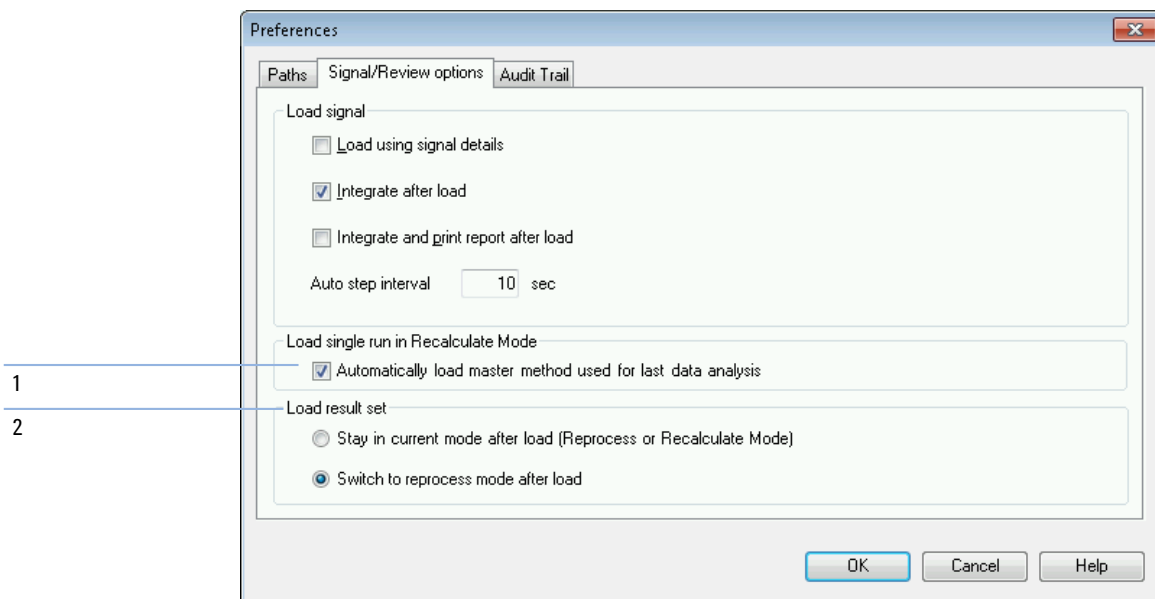


Les analyses simples peuvent être chargées avec une des méthodes suivantes, selon les paramètres définis sous **Preferences > Signal/Review options** (voir la figure ci-dessous) :

- Si la case (1) est cochée et que l'analyse simple a été analysée en dernier ou signalée avec une méthode située dans l'un des chemins de méthode de référence actuellement définis, l'analyse simple est chargée avec cette méthode de référence. La méthode est affichée dans la colonne **Analysis Method** de la table de navigation.
- Si la case (1) n'est pas cochée, les analyses simples sont chargées avec la méthode de référence chargée en dernier dans ChemStation.

Le nom de la méthode d'acquisition est affiché dans la colonne **Acq Method**.

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



**Figure 34** Onglet **Signal/Review options** de la boîte de dialogue **Preferences**

## Modes de traitement de données

Vous pouvez choisir l'un des modes d'analyse de données suivants :

- Mode de recalcul
- Mode Dernier résultat
- Mode de retraitement

Ces modes sont accessibles par le biais du menu **View** ou de la boîte à outils (voir figure ci-dessous).



**Figure 35** Sélection du mode

Pour chacun des deux modes, la boîte à outils contient des fonctions spécifiques. Les modes et leurs fonctions respectives sont décrits dans les sections suivantes. Dans l'onglet **Signal/Review Options** de la boîte de dialogue **Preferences**, vous pouvez choisir le mode qui sera actif par défaut lorsque vous chargez un jeu de résultats (voir [Figure 34](#), page 153, marqueur 2).

## Mode de recalcul

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



**Figure 36** Boîte à outils de recalcul de la Table de navigation

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

Le recalcul signifie un traitement analyse par analyse. Seules les analyses affichées dans la Table de navigation sont traitées. Si vous appliquez un filtre à la

Table de navigation, seules les analyses réellement affichées sont recalculées. Le tri de la table de navigation est également pris en compte.

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

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

### Méthode de traitement des données pour analyses simples

Dans les versions précédentes, aucune méthode n'était chargée automatiquement avec tout fichier de données en mode Recalcul. À partir de la version C.01.05, vous pouvez cocher la case pour charger automatiquement la méthode de référence utilisée pour le dernier traitement des données (voir [Figure 34](#), page 153, marqueur 1). Si cette case est cochée, les analyses simples sont chargées avec la méthode de référence correspondante, si la méthode existe toujours à l'emplacement donné.

### Recalcul avec une méthode spécifique

Avec cette fonction, vous pouvez recalculer les analyses affichées dans la Table de navigation en utilisant une méthode de référence spécifique. Vous spécifiez la méthode principale requise pour la méthode de la fenêtre de dialogue **Recalculate With Method** (voir schéma ci-dessous). Si la méthode de référence sélectionnée utilise la Création intelligente de rapports (reportez-vous à « [Création de rapports](#) », page 187), vous pouvez également indiquer le modèle de rapport qui sera utilisé pour les rapports d'injection simple.

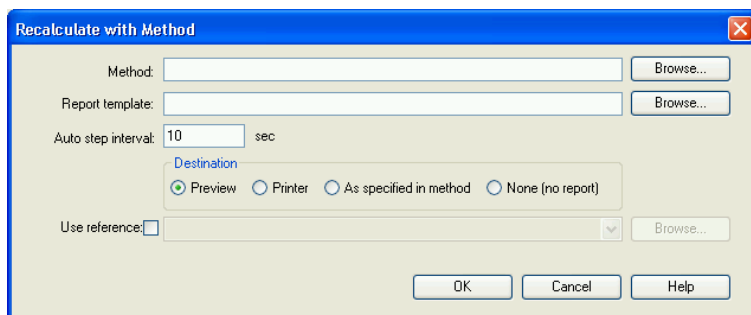


Figure 37 Boîte de dialogue **Recalculate With Method**

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

REMARQUE

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

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

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

À chaque fois que vous recalculiez un échantillon ou générez un rapport, la méthode du fichier de données (D.A.M) est automatiquement mise à jour avec les paramètres de traitement des données de la méthode utilisée. Le chemin de la méthode spécifique est enregistré comme référence dans le fichier de données.



## Mode de retraitement

Une façon différente de traiter vos données consiste à **Reprocess** une séquence complète. Contrairement au recalcul, toutes les analyses sont retraitées dans le contexte de la séquence, c'est-à-dire que les tables d'étalonnage des méthodes de la séquence sont mises à jour dans le cas d'analyses d'étalonnage et des multiplicateurs, des quantités, etc. peuvent être modifiés dans la table de la séquence.

Le jeu de résultats contient tous les fichiers nécessaires au retraitement : les fichiers de données, une copie du fichier de séquence et toutes les méthodes de séquence initialement employées avec l'acquisition. Ainsi, pour retraiter une séquence, il vous suffit de la charger dans la table de navigation et de sélectionner la boîte à outil de retraitement.

S'il devient nécessaire de propager des modifications de la méthode de séquence vers la méthode de référence correspondante en tant qu'entrée pour toutes les analyses d'acquisition futures, vous pouvez réaliser cela très commodément en utilisant la fonctionnalité **Update Master Method** (reportez-vous à « [Mise à jour des paramètres de traitement des données dans la méthode de référence](#) », page 59).

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

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



**Figure 39** Barre d'outils de retraitement de séquence de la Table de navigation

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

Notez que les icônes de retraitement de la table de navigation ne sont disponibles que pour les jeux de résultats créés avec une version ChemStation B.02.01 ou ultérieure. Le retraitement n'est pas accessible dans le module **Data Analysis** pour des données d'Analyse simple, pour les données créées avant la version B.02.01 et pour des données acquises lorsque le mode **Unique Folder Creation** est désactivé (reportez-vous à « [Boîte de dialogue Préférences - Onglet Séquence](#) », page 115). Ces séquences doivent être retraitées dans **Method and Run Control**, en définissant le paramètre de séquence **Part of method to run** sur **Reprocess Only**. Pour des séquences créées avec ChemStation version B.02.01 et ultérieure, l'option de retraitement de **Method and Run Control** a été supprimée et la table de navigation propose le retraitement en tant que **Data Analysis Task**.

Une autre alternative est d'ajouter de tels échantillons ou de telles séquences à un nouveau jeu de résultats auto-assemblés. À partir de ce moment, vous pouvez également attribuer des méthodes de séquence et vous pouvez ensuite retraiter la séquence complète (reportez-vous à « [Jeu de résultats auto-assemblés](#) », page 162).

Notez les règles suivantes concernant le retraitement :

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

Sequence Parameters: Local LC

Sequence parameters | Sequence output

Data file  
Path: C:\Chem32\1\1\Data\  
Subdirectory:  
☒ Auto Prefix Counter  
☐ Prefix/Counter SIG1 000001

Operator Name  
SYSTEM

ChemStore  
Transfer Settings...

Part of method to run  
Reprocessing Only  
☒ Use sequence table information  
Wait 0.00 minutes after loading a new method.

Shutdown  
☒ Post-Sequence command/macro  
PUMPALL OFF  
Not ready timeout: 0.00 minutes.

Bar code reader  
☐ Use in sequence On barcode mismatch don't inject  
☐ Update master method (data analysis parameters)

Fraction information  
Fraction start location:

Sequence comment:

OK Cancel Help

**Figure 40** Paramètres de séquence pour le traitement des données

## Traitement d'événements manuels d'intégration

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

Par conséquent, dans ChemStation version B.04.01 et ultérieure, des événements manuels d'intégration peuvent être enregistrés directement dans le fichier de données plutôt que dans la méthode. Chaque fois que le fichier de données est révisé ou retraité, les événements manuels dans le fichier de données sont automatiquement appliqués. Une analyse contenant des événements d'intégration manuels est marquée dans la table de navigation dans la colonne correspondante.



Outre les outils utilisés pour dessiner une ligne de base et effacer un pic manuellement, trois autres outils sont disponibles dans l'interface utilisateur afin :

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

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

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

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

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

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

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

Afin de convertir les événements manuels enregistrés dans une méthode pour les stocker dans le fichier de données, il convient d'appliquer les événements de la méthode et d'enregistrer les résultats dans le fichier de données. Si nécessaire, vous pouvez éliminer les événements de la méthode.

Si la case **Manual Events** de la **Integration Events Table** d'une méthode est cochée, les événements manuels de la méthode sont toujours appliqués lors du chargement d'un fichier de données utilisant cette méthode. Si le fichier de données contient des événements manuels supplémentaires, on utilise les événements dans le fichier de données. Quand la case **Manual Events** est cochée, l'utilisateur n'est jamais invité à enregistrer les événements dans le fichier de données.

### **Jeu de résultats auto-assemblés**

Dans la vue **Data Analysis**, la Table de navigation affiche le contenu d'une analyse simple ou d'une séquence chargée. Vous pouvez charger, télécharger ou ajouter des fichiers à la Table de navigation. Au moyen de la commande **Sequence > Create New Result Set** vous pouvez créer un nouvel ensemble de résultats depuis le tableau de navigation (voir « [Pour assembler un nouveau jeu de résultat](#) », page 110). Les jeux de résultats auto-assemblés peuvent être retraités de la même manière que ceux créés automatiquement.

### **Déchargement d'ensembles de données actives**

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

### **Suppression d'un fichier de données sélectionné**

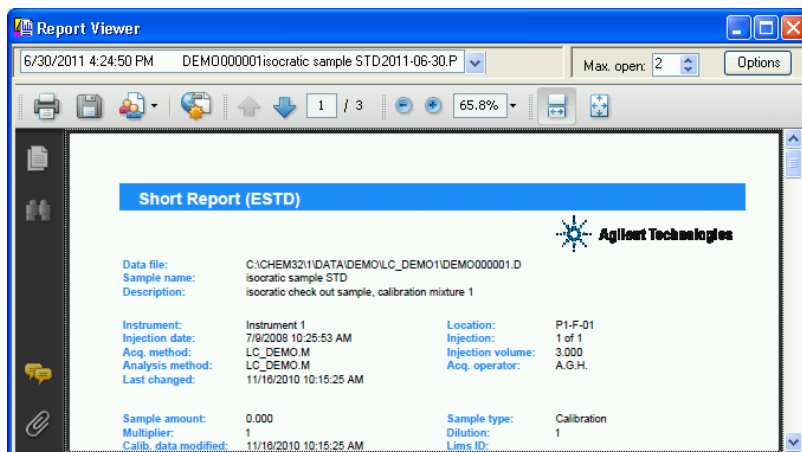
A l'aide de la commande **Remove selected Data Files** du menu contextuel de la Table de navigation, vous pouvez supprimer les lignes sélectionnées de la Table. Cela ne supprime que la référence dans la Table de navigation mais ne supprime pas le fichier de données physique du jeu de résultats chargé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

## **Mise à jour de méthodes**

Dans la vue **Data Analysis**, vous disposez de plusieurs options pour copier des méthodes entre les répertoires de méthodes de référence et les jeux de résultats. Pour plus d'informations, reportez-vous à « [Administration des méthodes](#) », page 56.

## Visionneuse de rapports de traitement de données

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



**Figure 41** Report Viewer

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

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

## Démarrage de la visionneuse de rapports

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

Pour voir des rapports d'injection simple :

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



Pour voir les rapports récapitulatifs de séquence :

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



## Configuration des fenêtres de la visionneuse de rapports

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

Vous pouvez définir le nombre maximal de fenêtres de la visionneuse de rapports qui seront ouvertes en parallèle. Les fenêtres sont réutilisables de manière cyclique. Lorsque vous examinez plus de fichiers de rapports que le nombre maximal de fenêtres de la visionneuse de rapports, la première fenêtre ouverte sera celle dont le contenu sera changé en premier lieu.

**REMARQUE**

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

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

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

### **Disposition des fenêtres de la visionneuse de rapports**

Les fenêtres de la visionneuse de rapports sont toujours affichées en haut de l'application ChemStation. Afin de travailler avec l'application ChemStation et avec la visionneuse de rapports en même temps, vous pouvez redimensionner et positionner toutes les fenêtres de manière à les voir toutes et de pouvoir travailler commodément.

Lorsque vous fermez l'application ChemStation, la taille et les positions des fenêtres sont sauvegardées. La prochaine fois que vous relancerez l'application ChemStation, la même configuration sera réutilisée.

### **Travail avec la visionneuse de rapports**

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

- Vous configurez la méthode et la séquence pour enregistrer des rapports au format PDF dans le système de fichiers. Après avoir terminé l'exécution de la séquence, vous ouvrez les fichiers de rapports (rapport récapitulatif de séquence ou rapports d'injection simple) directement depuis l'application ChemStation dans la visionneuse de rapports. Utilisez les fonctionnalités d'Adobe Reader comme l'agrandissement ou la recherche pour examiner le rapport en détails.

- Vous téléchargez une séquence qui contient déjà des fichiers de rapport du système de stockage central.
  - Pour voir le résultat final, vous sélectionnez l'échantillon convenable dans la table de navigation, et vous ouvrez le fichier de rapport directement dans la visionneuse de rapports de l'application ChemStation.
  - Si nécessaire, vous pouvez modifier la méthode et retraiter la séquence. Pendant le retraitement en cours, vous commencez à visionner les rapports des échantillons déjà terminés.

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

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

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

## Révision

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

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

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

### REMARQUE

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

## Conditions pour la création intelligente de rapports

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

## Sélection de fichiers de données

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

### Chargement de fichiers de données

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

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

### Ajout de fichiers de données

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

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

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

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



## Sélection de modèles de rapports

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

## Présentation de rapport

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

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

## Procédures de révision possibles

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

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

## **6 Principes de traitement et de révision des données**

### **Révision**



## 7 Étalonnage

Terminologie	172
Types d'étalonnage	173
Étalonnage simple	173
Étalonnage multiniveau	174
Plages d'étalonnage	176
Ajustement de la courbe d'étalonnage	176
Traitement de l'origine	177
Table d'étalonnage	180
Sommation des pics	181
Échantillons inconnus	182
Réétalonnage	183
Qu'est-ce que le réétalonnage ?	183
Pourquoi réétalonner ?	183
Réétalonnage manuel	184
Réétalonnage avec sommation des pics	184
Modes de réétalonnage	185
Réétalonnage des pics non identifiés	185
Réétalonnage dans Batch Review (Examen des lots)	186

Ce chapitre présente les principes de l'étalonnage.



## Terminologie

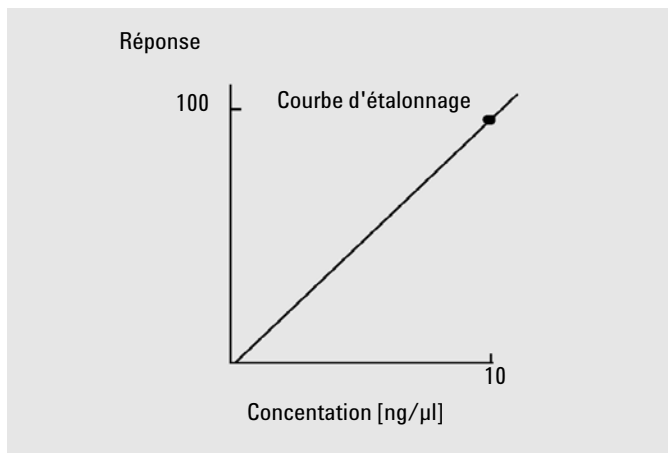
<b>Étalonnage</b>	L'étalonnage est le processus consistant à déterminer les facteurs de réponse utilisés pour calculer les concentrations absolues de composé en injectant des échantillons étalons préparés spécialement à cet effet. La table d'étalonnage est également utilisée pour l'identification.
<b>Composé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

## Types d'étalonnage

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

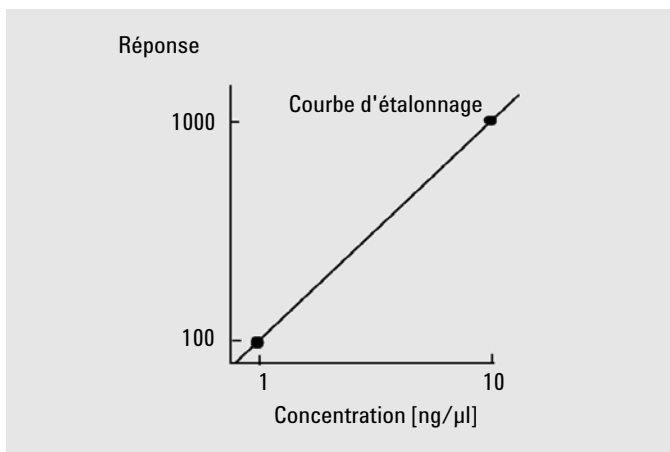
### Étalonnage simple

La courbe d'étalonnage présentée dans [Figure 42](#), page 173 comporte un seul point, c'est-à-dire un niveau. Avec une courbe d'étalonnage simple, la réponse du détecteur est censée être linéaire sur la plage de mesure des concentrations pour les échantillons concernés. Le facteur de réponse d'un pic de composant donné correspond à l'inverse de la pente de la courbe d'étalonnage passant par ce point et l'origine. L'étalonnage simple présente un inconvénient : la réponse du détecteur en fonction de la concentration d'un échantillon est censée être linéaire et passer par l'origine sur un tracé de la concentration en fonction de la réponse. Ce n'est pas toujours le cas et des résultats inexacts peuvent être générés.



**Figure 42** courbe d'étalonnage simple

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



**Figure 43**   Courbe d'étalonnage à deux niveaux

Par exemple, si vous souhaitez quantifier un composé et que la concentration des échantillons inconnus devrait être comprise entre 1 et 10 ng/μl, la courbe d'étalonnage doit alors comporter au moins deux niveaux (voir [Figure 43](#), page 174).

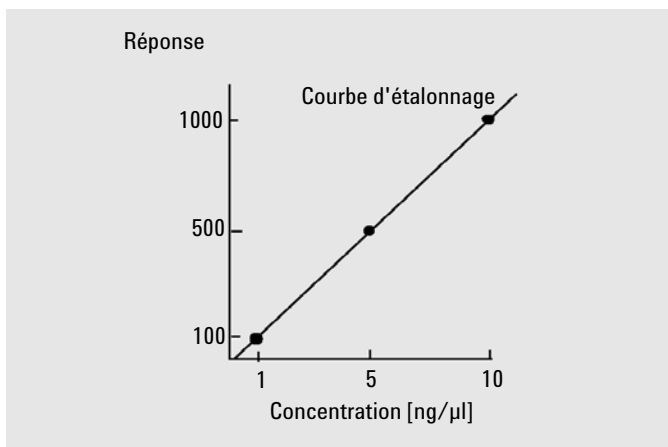
### Limites quantitatives

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

## Étalonnage multiniveau

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

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



**Figure 44** Courbe d'étalonnage multiniveau avec trois niveaux

La table d'étalonnage correspondante, qui présente sous forme de tableau les informations utilisées pour générer cette courbe, est semblable à celle présentée dans [Tableau 17](#), page 175.

**Tableau 17** Table d'étalonnage

Niveau	Quantité (ng/μl)	Réponse (calcul de l'aire)
1	1	100
2	5	500
3	10	1000

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

## Plages d'étalonnage

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

## Ajustement de la courbe d'étalonnage

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

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

### Ajustement non linéaire

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

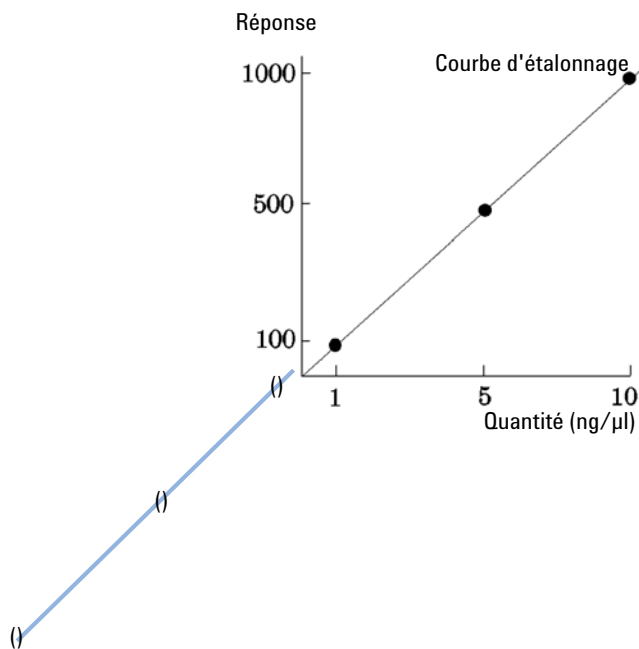


## Traitement de l'origine

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

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

Pour forcer l'intégration de l'origine dans la courbe d'étalonnage, les points d'étalonnage sont mis en correspondance par rapport à l'origine, depuis le premier quadrant dans le troisième quadrant. L'utilisation de tous les points pour le calcul de régression assure que la courbe d'étalonnage passe par l'origine. Ceci est également décrit dans [Figure 45](#), page 177.



**Figure 45** Forcer l'intégration de l'origine

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

## Pondération des points d'étalonnage

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

Les options de pondération suivantes peuvent être sélectionnées :

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

Pondération	Description
Quadratique (réponse)	Un point d'étalonnage de réponse $y$ possède un facteur de pondération de $1/y^2$ , normalisé par rapport à la plus faible réponse, de telle sorte que le facteur de pondération le plus élevé soit 1. La normalisation est effectuée en multipliant la pondération par la plus faible réponse. Par exemple, la pondération d'un point d'étalonnage de quantité $y$ est $(1/y^2) \times b^2$ , où $b$ désigne la réponse correspondant à la plus faible quantité de composé étalon préparée dans les étalons.
Nombre d'étalonnages	Un point d'étalonnage est pondéré en fonction de son nombre de réétalonnages. Aucune normalisation n'est effectuée.

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

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

## Table d'étalonnage

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

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

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

## Somme des pics

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

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

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

**REMARQUE**

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

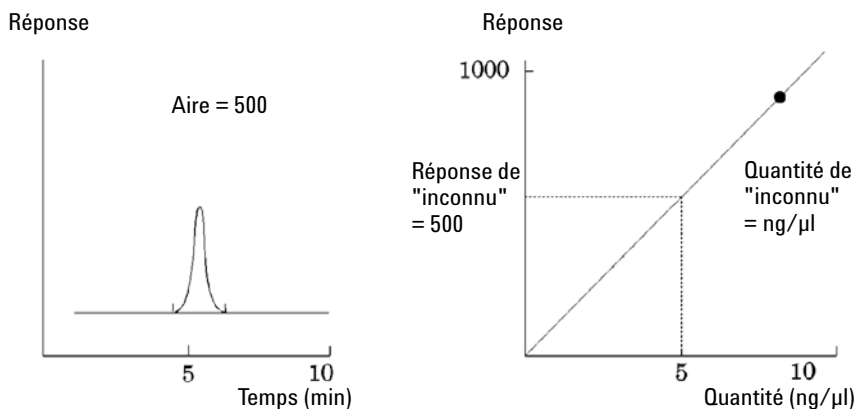
## Échantillons inconnus

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

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

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

Par exemple, si l'aire de pic d'un échantillon inconnu est égale à 500, il est possible de déterminer que la quantité du composé correspondant dans l'échantillon inconnu est de 5 ng/μl, en utilisant la courbe d'étalonnage de la [Figure 46](#), page 182.



**Figure 46** Signal d'un échantillon inconnu et courbe d'étalonnage

## Réétalonnage

### Qu'est-ce que le réétalonnage ?

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

### Pourquoi réétalonner ?

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

## Réétalonnage manuel

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

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

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

## Réétalonnage avec sommation des pics

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



## Modes de réétalonnage

Le logiciel ChemStation propose deux modes de réétalonnage. Vous pouvez procéder à un réétalonnage interactif ou à un réétalonnage automatique pendant une séquence d'analyses automatisée. Le réétalonnage interactif consiste à suivre directement les étapes du processus de réétalonnage à l'aide du logiciel ChemStation après avoir injecté un ou plusieurs échantillons étalons. Le réétalonnage séquentiel consiste à spécifier à quel moment le réétalonnage est effectué, mais le réétalonnage est ensuite effectué automatiquement par le logiciel. Pour plus d'informations, voir la section « [Réétalonnage automatique](#) », page 127.

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

## Réétalonnage des pics non identifiés

Vous pouvez réétalonner les pics non identifiés de trois façons.

### No Recalibration

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

### Partial Recalibration

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

### Recalibration of all Retention/Migration Times

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

## Réétalonnage dans Batch Review (Examen des lots)

La méthodologie de réétalonnage dans Batch Review diffère du réétalonnage dans la séquence originelle.

En cliquant sur le bouton **Update Calibration** de la part d'outils d'examen des lots, le système effectue un réétalonnage à partir de toutes les analyses d'étalonnage du lot afin de créer une table d'étalonnage réétalonnée. En cliquant sur le bouton **Start** de la barre d'outils d'examen des lots Batch Review, les quantités de chaque composé étalonné seront recalculées. Les quantités de tous les échantillons seront calculées à partir de la table d'étalonnage réétalonnée.



## 8 Création de rapports

Qu'est-ce qu'un rapport ?	188
Création de rapports classiques et Intelligent Reporting	189
Conséquences de l'activation d'Intelligent Reporting	189
Création intelligente de rapports	190
Avantages de la création intelligente de rapports	190
Éditeur de modèles de rapports (RTE, Report Template Editor) pour la création intelligente	191
Enregistrement des modèles de rapports	194
Enregistrement des rapports créés	196
Modèles de rapport du système de stockage central de données	197
Création de rapports classique	198
Édition des résultats	198
Résultats quantitatifs	199
Valeurs de champ personnalisé de génération de rapport	200
Styles de rapports	200
Autres paramètres de style de rapport	203
Rapport récapitulatif de séquence	204
Formats des fichiers de rapport	208

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



## Qu'est-ce qu'un rapport ?

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

### Rapports pour différents usages

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

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

Avec la Création intelligente de rapports, vous pouvez créer des modèles pour différents types de rapports selon leur usage. Pour plus d'informations, reportez-vous à « [Types de rapports](#) », page 191.

### Destination du rapport

Un rapport peut être envoyé aux destinations suivantes :

- **Screen**  
Le rapport (texte et graphiques inclus) s'affiche à l'écran dans la fenêtre de présentation du rapport, à partir de laquelle vous pouvez l'imprimer.
- **Printer**  
Le rapport (texte et graphiques inclus) est imprimé sur l'imprimante sélectionnée.
- **File**  
Le rapport est enregistré dans un fichier, par exemple, un fichier Adobe PDF.

## Création de rapports classiques et Intelligent Reporting

Avec Agilent OpenLAB CDS, vous pouvez choisir le type de création de rapports que vous souhaitez utiliser : La *Création de rapports ChemStation classique*, qui reste inchangée par rapport à la création de rapports ChemStation B, ou la nouvelle *Création intelligente de rapports*.

Les sections suivantes décrivent les deux types de création de rapports.

### Conséquences de l'activation d'Intelligent Reporting

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

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

- La vue **Report Layout** affiche l'éditeur de modèle de rapport pour la création intelligente. Il est désormais possible d'éditer les modèles de rapport classiques dans cette vue et d'adopter la création intelligente de rapports.
- La vue **Review** est disponible.
- Dans les boîtes de dialogue **Sequence Parameters** et **Specify Report**, vous pouvez choisir la création de rapports classique ou intelligente. Il reste possible d'utiliser les paramètres de la création classique de rapports et les modèles de rapports « classiques », qui existent déjà pour l'instrument.

## Création intelligente de rapports

### Avantages de la création intelligente de rapports

La création intelligente de rapports présente les avantages suivants :

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

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

### Types de rapports

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

Les types de rapports suivants sont disponibles :

- **Single Injection**

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

- **Single Sequence Summary**

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

- **Cross-Sequence Summary**

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

### Format de modèles

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

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

## Champs de données

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

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

## Éléments de rapport

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

- Champs de texte
- Champs de données
- Tableaux
- Matrices
- Groupes composites
- Images
- Chromatogrammes
- Courbes d'étalonnage
- Spectre
- Diagrammes
- Informations sur les méthodes



## **Parcelles**

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

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

## **Calcul personnalisé**

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

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

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

## **Formatage conditionnel**

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

### **Données de démonstration**

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

## **Enregistrement des modèles de rapports**

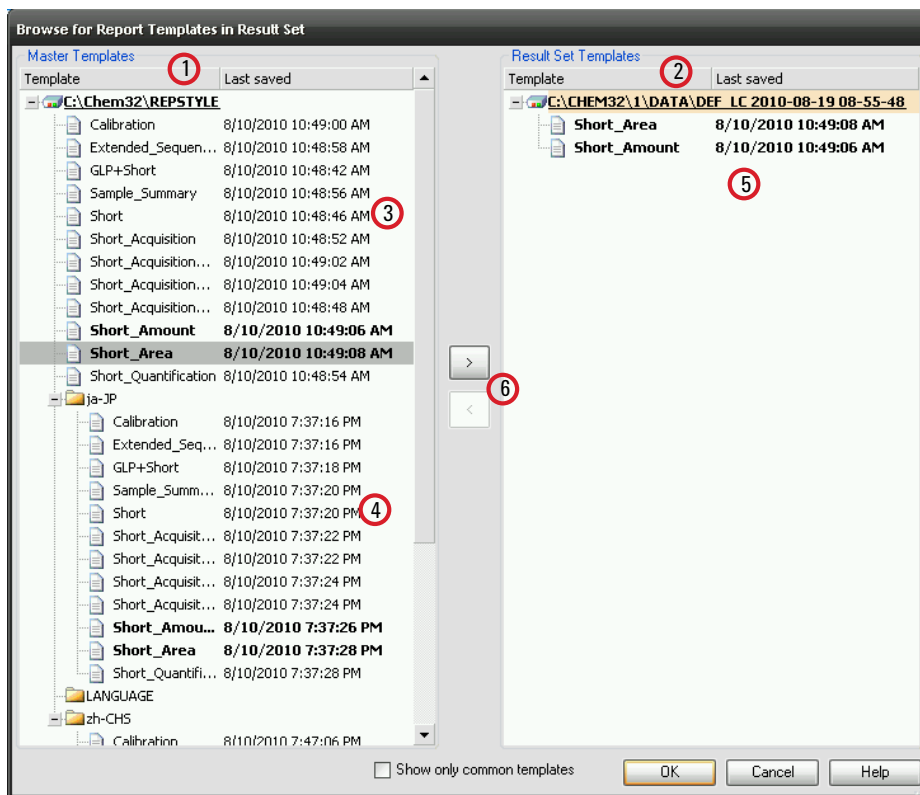
La ChemStation comporte un certain nombre de modèles de rapports prédéfinis. Ces modèles par défaut se situent dans le répertoire chem32\repstyle.

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

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

### **Boîte de dialogue Rechercher des modèles**

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



**Figure 47** Boîte de dialogue **Browse for Report Templates in Result Set**

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

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

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

## **Enregistrement des rapports créés**

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

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

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

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

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

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

## Modèles de rapport du système de stockage central de données

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

## Création de rapports classique

### Édition des résultats

Deux types de rapport sont disponibles :

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

#### Rapports non étalonnés

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

#### Rapports étalonnés

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

#### Rapport d'étalon externe

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

## Rapport d'étalon interne

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

## Rapport de tableaux

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

## Résultats quantitatifs

Le type de rapport est identifié par le nom de la méthode de calcul utilisée pour le préparer (par exemple, un rapport ISTD). Chaque type est décrit brièvement ci-dessous. Les calculs effectués pour chaque rapport sont fournis dans « [Résultats quantitatifs](#) », page 199.

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

**Height%** fournit un rapport semblable au rapport Area% (% aire), à la différence près que c'est la hauteur et non l'aire du pic qui sert aux calculs.

**Norm%** fournit un rapport dans lequel chaque composé est rapporté comme pourcentage de tous les composés présents. La réponse du détecteur des pics est corrigée avant le calcul de chaque pourcentage.

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

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

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

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

## Valeurs de champ personnalisé de génération de rapport

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

## Styles de rapports

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



Les styles de rapports suivants sont disponibles :

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

Pour les méthodes non étalonnées, les paramètres du rapport incluent le numéro du pic, le temps de rétention/migration, l'aire et la hauteur du pic, la description du signal, la largeur vraie du pic à mi-hauteur (reportez-vous également à *Largeur de pic réelle  $W_x[min]$*  dans le Guide de référence, la symétrie,  $k'$ , l'efficacité (plateaux) et la résolution pour chaque pic.

Pour les méthodes étalonnées, les paramètres du rapport incluent le numéro du pic, le temps de rétention/migration, le nom du composé, la quantité, la description de l'acquisition, la vraie largeur du pic à mi-hauteur, la symétrie,  $k'$ , l'efficacité (plateaux) et la résolution pour chaque pic.

Le calcul du pic à mi-hauteur est différent de la formule de calcul de largeur de pic la plus complexe utilisée par l'intégrateur. Les valeurs d'efficacité et de résolution sont basées sur la largeur de pic calculée. L'en-tête du rapport reprend toutes les informations pertinentes pour la méthode, y compris l'instrument, la colonne/capillaire, l'échantillon et les paramètres d'acquisition. Le signal est également tracé.

- **Performance + Noise** : combine le style de rapport Performances avec les calculs des plages de bruits définies dans la boîte de dialogue Modifier une plage de bruits du menu Conformité du système. En outre, le bruit est calculé comme six fois l'écart-type, en tant que bruit pic à pic et bruit ASTM. La dérive et la déviation sont également déterminées.
- **Performance + Extended** : génère un rapport étendu reprenant l'ensemble des paramètres des calculs de performances de pic ainsi que les tracés de chaque pic. Ces tracés incluent la ligne de base, les tangentes, ainsi que les largeurs de pic aux hauteurs définies. Ce type de rapport n'inclut que les pics étalonnés.

En plus des paramètres imprimés pour le style de rapport Performances, d'autres paramètres de performances de pic sont déterminés : les temps de début et de fin de pic, l'asymétrie, l'excès, la largeur de pic, le facteur de traîne USP, l'intervalle de temps entre les points de données, le nombre de points de données, les moments statistiques, les plateaux, les plateaux par mètre, la sélectivité et la résolution de chaque pic sont imprimés. La largeur de pic, les plateaux, les plateaux par mètre, la sélectivité et la résolution sont calculés à l'aide des méthodes vraie à mi-hauteur, de tangente, de traînée et 5 sigma (pour plus d'informations, reportez-vous à *Définition des tests de performances*).

L'en-tête du rapport reprend toutes les informations pertinentes pour la méthode, notamment l'instrument, la colonne/le capillaire, l'échantillon et les paramètres d'acquisition, ainsi qu'un tracé du signal. Pour une liste complète des algorithmes des paramètres de performances des pics, reportez-vous aux *Définitions des tests de performances* dans le Guide de référence.

Les styles de rapport spectral (**Short + Spectrum**, **Detail + Spectrum**, **Performance + Library Search**) sont décrits dans le manuel *Comprendre votre module spectral*.

### Ajout d'un rapport personnalisé aux styles de rapport

Vous pouvez ajouter à la liste des styles de rapport disponibles un modèle de rapport personnalisé, créé dans la vue Mise en page de rapport de ChemStation.

#### REMARQUE

Tous les rapports, à l'exception des rapports de performances, répertorient les largeurs de pic calculées à l'aide d'une formule plus complexe employée par l'intégrateur (pour plus d'informations sur les calculs de largeur de pic, reportez-vous à *Largeur de pic* dans le Guide de référence).

## Autres paramètres de style de rapport

### Table de sommation des pics

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

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

Lorsque le rapport est généré, ChemStation utilise la table de sommation des pics pour créer un rapport de sommation des pics imprimé une fois les calculs de rapport standard effectués, à l'exception de Norm% (% norm) qui est remplacé par le rapport de sommation des pics.

### Mise en page de rapport pour pics non étalonnés

Pour modifier la mise en page de rapport pour pics non étalonnés, choisissez l'une des options suivantes dans la boîte de dialogue Specify Report (Spécifier le rapport).

- Utilisez l'option Separately (Séparément) pour rapporter les pics non étalonnés dans une table distincte si le tri par temps de rétention/migration

est sélectionné, ou dans des tables distinctes si le tri par signal est sélectionné.

- Utilisez l'option With Calibrated Peaks (Pics étalonnés) pour rapporter les pics non étalonnés et les pics étalonnés.
- Utilisez l'option Do Not Report (Ne pas rapporter) pour supprimer le rapport des pics non étalonnés.

## Rapport récapitulatif de séquence

### Présentation

ChemStation peut imprimer toute une série de rapports standard pour les analyses d'échantillon individuelles. Le rapport récapitulatif de séquence est un autre moyen de générer un rapport. Il permet de calculer et d'inclure dans un rapport les paramètres de différentes analyses. Il s'avère particulièrement utile, par exemple pour tester la stabilité d'un instrument ou la fiabilité d'une nouvelle méthode.

Un rapport récapitulatif de séquence peut inclure les éléments suivants :

- une page de titre ;
- la configuration de l'instrument, y compris ses numéros de version et les détails de la colonne d'analyse/du capillaire utilisés ;
- les listes de la table de séquence décrivant la séquence automatisée des analyses qui doit être réalisée ;
- les descriptions du journal expliquant les opérations effectuées par la séquence et détaillant les événements inattendus relevés au cours de cette séquence ;
- les listes de méthodes ;
- des rapports individuels pour chaque échantillon ;
- des statistiques sur les analyses, sur la base des critères sélectionnés, sachant que *les statistiques sont calculées pour les composés étalonnés uniquement* et
- une table des matières incluant les numéros de page afin d'accéder facilement aux différentes sections du rapport.

## Élaboration d'un rapport de résumé de séquences

Pour élaborer un rapport de résumé de séquences, vous pouvez sélectionner toute combinaison des neuf catégories suivante en cochant les cases appropriées et, le cas échéant, sélectionner un style de rapport à partir de la sélection de modèles. Chaque modèle spécifie le contenu et le format de la rubrique particulière du rapport global de résumé de séquence.

Vous pouvez choisir l'un des styles de rapport de résumé de séquences suivants :

### One Page Header

Le modèle GLP imprime GLP en grosses lettres comme titre de la page pour le rapport suivant. Il inclut également la date et l'emplacement pour la signature.

### Configuration

Sélectionner **Configuration** si vous voulez inclure la configuration et la colonne analytique/les spécifications capillaires de l'instrument dans le rapport.

### Sequence Table

Sélectionner la **Sequence Table** pour inclure une liste des échantillons, les paramètres de quantification des échantillons et le nom des méthodes dans le rapport. La liste montre ce que le système devrait avoir analysé.

### Logbook

Sélectionner **Logbook** pour obtenir la liste des analyses que le système a effectuées, y compris les conditions d'analyse et les événements inhabituels survenus sur l'instrument pendant l'analyse des échantillons.

### Methods

Sélectionner **Methods** pour obtenir la liste de toutes les méthodes d'analytiques utilisées dans la série d'analyses automatisées.

## Analysis Reports

Sélectionner **Analysis Reports** pour obtenir les rapports d'analyse individuels selon le style de rapport prédéfini pour la méthode.

Les rapports d'analyse individuels peuvent être imprimés après chaque analyse en fonction du style de rapport spécifié pour l'analyse en question, en plus des sections de rapport spécifiées dans **Sequence Summary Reporting**. Voir « Résultats de séquence » ci-dessous.

## Statistics for Calibrated and Sample Runs

En sélectionnant les statistiques des analyses d'étalons, vous obtenez la tendance statistique pour les échantillons d'étalonnage. En sélectionnant les **Statistics** des analyses d'échantillons, vous obtenez la tendance statistique pour les échantillons inconnus. Les deux sélections de statistiques comprennent des styles de modèles version standard et version étendue. **Extended Statistics** imprime les tendances statistiques des analyses sous forme de graphiques, alors que la sélection **Standard Statistics** n'imprime que du texte. Les sélections que vous faites dans la boîte de dialogue **Items and Limits for Extended Statistics** sont utilisées uniquement lorsque vous choisissez la ou les options de **Extended Statistic** dans la boîte de dialogue **Sequence Summary Parameters**.

Si vous choisissez la ou les options de **Standard Statistic** dans la boîte de dialogue **Sequence Summary Parameters**, les statistiques rapportées concernent les éléments suivants :

- temps de rétention/migration ;
- surface ;
- hauteur ;
- quantité ;
- largeur de pic (basée sur le style de rapport, voir « Styles de rapports », page 200) ;
- symétrie.

Le calcul statistique ne distingue pas entre différents niveaux d'étalonnage dans une séquence utilisant des méthodes d'étalonnage multi-niveaux. Cela veut dire que les éléments dépendants de la concentration tels que la surface, la hauteur et la quantité (voir la boîte de dialogue pour les éléments et les limites de statistiques étendues) sont tous pris ensemble, quel que soit le niveau d'étalonnage. Les valeurs de **Statistics for Calibration Runs** ne sont donc pas utiles pour les méthodes d'étalonnage multi-niveaux dans des séquences.

## Résumé

La sélection **Summary** imprimera une vue globale de la série d'échantillons analysés ainsi que les méthodes utilisées. Si Résumé est sélectionné en même temps que d'autres sélections de Résumé de séquences, les numéros de pages se rapportant aux autres parties du rapport de résumé de séquence seront inclus. Deux styles de résumé sont disponibles :

Le **Sample Summary** contient des informations sous forme de tableau concernant les analyses d'échantillons d'une séquence, avec des données telles que le nom des échantillons, les noms fichier, la méthode et les numéros de flacon.

Le **Compound Summary** fournit des informations sous forme de tableau sur les analyses d'échantillons avec les résultats de quantification de base de chaque composé étalon, ou chaque pic, selon le type de rapport spécifié dans la méthode.

## Résultats de séquence

Dans la boîte de dialogue **Sequence Output**, vous pouvez définir où doit être imprimé le rapport de résumé de séquences.

Sélectionner **Report to file** et saisir un nom de fichier pour imprimer le rapport vers le fichier spécifié. Le paramétrage par défaut est que les données sont sauvegardées dans le fichier GLPrpt.txt. Dans les systèmes de GC à double injection, les données sont sauvegardées dans les fichiers GLPrptF.txt et GLPrptB.txt pour l'injecteur avant et l'injecteur arrière respectivement.

Sélectionner **Report to PDF** pour sauvegarder le rapport sous forme de document pdf. Le rapport est sauvegardé dans le dossier de séquences sous le nom de GLPrpt.pdf

Sélectionner **Report to HTML** pour imprimer le rapport au format HTML. Le rapport est sauvegardé dans un répertoire HTML dans le sous-répertoire de données ou le répertoire contenant les séquences. Le rapport HTML comprend un fichier index (index.htm) et au moins deux autres fichiers, un fichier de contenu (contents.htm) et un fichier GIF (Graphics Interchange Format) pour chaque page du rapport (par ex. page1.gif). Pour voir le rapport HTML, ouvrir le fichier index avec votre navigateur.

Sélectionner **Report to printer** pour imprimer le rapport sur l'imprimante du système. L'impression d'un rapport individuel pour chaque analyse active également l'impression d'un rapport d'échantillon après chaque analyse. Ces rapports sont imprimés en plus des rapports spécifiés pour le rapport de résumé de séquences produits à la fin d'une séquence complète. Vous pouvez spécifier une nouvelle destination pour ces rapports dans la boîte de dialogue **Sequence Output** ou utiliser la destination spécifiée dans chaque méthode.

## Formats des fichiers de rapport

Un rapport peut être sauvegardé sous différents formats. Chaque format possède une extension spécifique. Il est possible de sélectionner plus d'un format de rapport.

- .TXT** Le texte du rapport est imprimé sous forme de fichier texte UNICODE.
- .EMF** Chaque graphique du rapport (signaux ou courbe d'étalonnage) est sauvegardé sous forme de méta-fichier Microsoft Windows (wmf). Il est possible d'avoir plusieurs fichiers .wmf pour un seul rapport. Le format de fichier généré adhère au format de méta-fichier standard de Microsoft tel que défini dans la documentation de développement du logiciel Windows. Ces fichiers sont compatibles avec le format Aldus Placeable Metafile (apm) utilisé par plusieurs suites de logiciel propriétaires.
- .DIF** Les données rapportées sous forme de tableau sont sauvegardées au format Data Interchange Format (dif). Ce format est accepté par les programmes de tableurs tels que EXCEL de Microsoft Windows. Indépendamment du style de rapport sélectionné, seules les informations contenues dans le style de rapport court (Short) seront sauvegardées.

### REMARQUE

Aucun fichier dif n'est généré pour les rapports de performance.

- 
- .CSV** Le rapport est au format Comma Separated Values (csv). Il s'agit d'un format très simple pour les données sous forme de tableau, accepté par de nombreux tableurs et bases de données. Indépendamment du style de rapport sélectionné, seules les informations contenues dans le style de rapport court (Short) seront sauvegardées.



Il peut y avoir plusieurs fichiers .dif et .csv pour un seul rapport. Pour chaque bloc de rapport, le premier fichier, par exemple, report00.csv, contient les informations du titre du rapport. Les fichiers suivants contiennent les résultats sous forme de tableau.

Si les résultats sont classés en fonction du temps de rétention/migration, seul un fichier est requis pour le tableau complet, par exemple, report01.csv.

Si les résultats sont classés par signal, un tableau séparé est nécessaire pour chaque signal. Dans ce cas, les fichiers sont nommés report01.csv à reportNN.csv où NN est le numéro du signal.

**REMARQUE**

Aucun fichier csv n'est généré pour les rapports de performance.

- 
- .XLS** Le rapport est exporté sous un format de tableur Microsoft Excel (xls). Les données nécessitent généralement un traitement supplémentaire.
- .PDF** Le rapport est imprimé sous forme de fichier .pdf. Le logiciel ChemStation installe une imprimante PDF, appelée « PDF-XChange 4.0 ». L'imprimante ne sera visible dans le menu **Start Menu/Settings/Printers and Faxes** que lorsque l'ordinateur sera redémarré. Lors du lancement de ChemStation, une autre imprimante temporaire est créée, « ChemStation PDF », basée sur l'imprimante PDF-XChange. Pendant que le logiciel ChemStation est actif, ChemStation PDF sera dans la liste du menu **Start Menu/Setting/Printers and Faxes**. L'option **Unique pdf file name** vous permet de sauvegarder vos rapports .pdf indépendamment des rapports avec des noms de fichier du type  
<sequence\_container\_name>\_<data\_file\_name>.pdf

## **8**    **Création de rapports**

### Création de rapports classique



## 9

# Principes et fonctions propres à l'EC

Fonctions propres à l'EC ChemStation Agilent dans la vue Méthode et Contrôle de méthode et d'analyse 212

Table de flacons 212

Table de conflit de méthode 213

Table de conflit de séquence 214

Type de sommet de pic 215

Types d'étalonnages 216

Étalonnages basés sur le temps de migration 217

Étalonnage à l'aide de la correction de mobilité 217

CE-MS 219

Soustraction du bruit de fond 219

Sous-répertoires de méthode pour différents modes EC 220

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



## Fonctions propres à l'EC ChemStation Agilent dans la vue Méthode et Contrôle de méthode et d'analyse

### Table de flacons

#### REMARQUE

La fonctionnalité **Vial Table** n'est disponible que pour les sessions en ligne de la ChemStation.

La **Vial Table** est une table qui associe les flacons du plateau à des échantillons et surtout à des flacons destinés à des tâches précises, comme les tampons, le flacon de rinçage, le flacon de nettoyage et le flacon de récupération. La **Vial Table** est liée à la table de séquence. Lorsqu'une séquence est chargée, les informations de la table de séquence sont copiées dans la table de flacons. Toutefois, les entrées de la table de flacons ne sont pas répercutées dans la table de séquence. La boîte de dialogue **Vial Table Advanced Settings** apparaît lorsque vous cliquez sur le bouton **Advanced** dans la **Vial Table**. Elle vous permet d'activer des avertissements de conflits entre la **Vial Table**, la méthode ou la séquence et l'utilisation de noms symboliques. Vous devez sélectionner **Enable vial table checks and warnings** pour contrôler les conflits entre la **Vial Table** et la méthode ou la séquence.

Lorsqu'une méthode ou une séquence est chargée, un contrôle de cohérence est effectué entre les attributions de flacons dans la **Vial Table** et celles de la méthode ou de la séquence. Les éventuels conflits d'attribution de flacons se règlent facilement à l'aide des tables **Conflict**.

#### REMARQUE

La position 49 du plateau de flacons est réservée au flacon de rinçage de l'aiguille et la position 50 est laissée libre pour permettre le retour du mécanisme de levage du flacon. Ces positions ne sont pas disponibles dans la **Vial Table**.

La colonne **Used in** de la Table de flacons permet de préciser l'utilisation du flacon. Il existe cinq entrées valides pour les champs **Used in** :

- Ignorer**    Aucun contrôle de cohérence n'est effectué
- Méthode**    Le flacon est référencé dans la méthode

<b>Séquence</b>	Le flacon est référencé dans la table de séquence
<b>Système</b>	<p>Il s'agit d'un flacon spécial appartenant à la configuration du système. Le <b>Name</b> doit être l'un des noms symboliques suivants :</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• <b>@INLET</b> le flacon d'entrée</li> <li>• <b>@OUTLET</b> le flacon de sortie</li> <li>• <b>@FLUSH</b> le flacon de rinçage</li> <li>• <b>@WASTE</b> le flacon de déchets</li> <li>• <b>@clean tubes</b> le flacon utilisé pour le nettoyage des tubes</li> <li>• <b>@USER X</b> (où x peut être un nombre entre 1 et 10) l'emplacement de la séquence</li> </ul> <p>Cette option permet d'indiquer les numéros de chaque flacon correspondant aux noms symboliques utilisés dans la méthode. L'utilisateur peut ainsi indiquer des flacons différents pour Référence d'entrée, Référence de sortie, Remplissage, Préconditionnement, Postconditionnement, etc. pour chaque ligne de la séquence.</p>
<b>Non utilisé</b>	Il n'y a aucun flacon dans cette position

## Table de conflit de méthode

La **Method Conflict Table** apparaît lorsque vous chargez une méthode dont les flacons définis entrent en conflit avec les flacons définis dans la table de flacons. La **Method Conflict Table** est composée de deux parties : la partie gauche contient une image de la **Vial Table**, la partie droite représente les flacons en conflit.

Pour résoudre les conflits, vous pouvez choisir de remplacer (flèche simple) ou de déplacer le flacon de la méthode vers la position libre suivante dans la **Vial Table** (flèche double). Cette opération est possible pour chaque flacon en conflit dans la table.

Lorsque des flacons définis par l'utilisateur (avec des noms symboliques @User1, @User2, etc.) sont utilisés, le test de conflit ne peut pas être effectué sur ces flacons. En effet, en l'absence d'informations de séquence, il est impossible de savoir s'il existe un conflit.

## Table de conflit de séquence

La **Sequence Conflict Table** apparaît lorsque vous configurez ou chargez une séquence dont les flacons définis entrent en conflit avec les flacons définis dans la table de flacons. La **Sequence Conflict Table** est composée de deux parties : la partie gauche contient une image de la **Vial Table**, la partie droite représente les flacons en conflit.

Pour résoudre les conflits, vous pouvez choisir de remplacer les informations de la **Vial Table** par celles de la **Sequence Table**. Si le conflit est lié à une entrée système, elles ne peuvent pas être remplacées. Vous pouvez choisir de fermer la **Sequence Conflict Table** sans résoudre les conflits.

Lorsque des flacons définis par l'utilisateur (dans les colonnes User1, User2, etc.) sont utilisés, le test de conflit ne peut pas être effectué. En effet, en l'absence d'informations relatives à la méthode, il est impossible de savoir s'il existe un conflit.

## Type de sommet de pic

Contrairement aux pics CPL, CPG ou SM, il est normal que les pics EC soient asymétriques. En raison de cela, il est très important de pouvoir sélectionner des paramètres d'intégration qui produiront le plus haut degré d'exactitude et de reproductibilité possible dans vos résultats de quantification.

Les types de sommet de pic suivants sont disponibles lorsque vous sélectionnez **Peak Top Type** dans le menu déroulant **Integration** :

### Point le plus élevé

- sélectionné lorsque le pic est de forme triangulaire, et
- lorsque vous travaillez avec différentes concentrations

### Interpolation parabolique

- utilisée pour la traînée, pics non séparés

### Centre de gravité

- fournit des calculs plus précis, avec des pics de forme triangulaire
- échantillons avec des concentrations similaires

### Méthode gaussienne d'ajustement

- utilisé pour des pics symétriques

## Types d'étalonnages

L'étalonnage par étalon est basé sur la surface ou la hauteur du pic. Lorsque vous sélectionnez **Standard Calibration**, vous pouvez **Calculate Signals Separately** ou **Calculate with Corrected Areas**.

L'option Calculate Signals Separately (Calculer les signaux séparément) est sélectionnée lorsque vous souhaitez vous assurer que, dans le calcul des rapports %Norm, le pourcentage des signaux rapportés séparément atteint 100 % pour chaque signal. Lorsque l'option **Calculate signals separately** est désélectionnée, le pourcentage de tous les signaux cumulés s'élève à 100 %. L'option **Calculate signals separately** doit impérativement être sélectionnée si vous souhaitez trier la table d'étalonnage par signal.

Sélectionnez **Calculate with Corrected Areas** pour corriger la surface du pic en fonction du temps de migration. Dans ce mode, la surface est divisée par le temps de migration, ce qui peut améliorer la reproductibilité dans l'analyse quantitative lorsque les temps de migration sont instables.

Outre l'étalonnage par étalon, trois étalonnages propres à l'électrophorèse capillaire représentent des signaux basés sur le temps de migration.

Les différents types d'étalonnage sont disponibles dans la liste déroulante de votre table d'étalonnage :

- **Standard Calibration**
- **Protein Molecular Weight Calibration**
- **DNA Base-Pair Calibration**
- **Capillary Isoelectric Focusing Calibration**

Pour de plus amples informations sur les étalonnages propres à l'électrophorèse capillaire, voir *OpenLAB CDS ChemStation Edition – Référence des principes de fonctionnement* (CDS\_CS-references.pdf).



## Étalonnages basés sur le temps de migration

### Utilisation des étalonnages basés sur le temps de migration dans une séquence

Les étalonnages et réétalonnages basés sur le temps de migration peuvent être inclus dans une séquence, mais seuls les étalonnages explicites et les réétalonnages cycliques sont pris en charge. Le réétalonnage encadrant ne l'est pas. Il n'existe pas de rapport récapitulatif de séquence relatif aux étalonnages basés sur le temps de migration.

### Styles de rapport pour les étalonnages basés sur le temps de migration

Les seuls styles de rapport disponibles pour les étalonnages basés sur le temps de migration sont **Short** (résultats quantitatifs au format texte) et **Full** (en-tête, informations d'échantillon, conditions d'instrument, journal, résultats quantitatifs et tracé de pureté du pic).

## Étalonnage à l'aide de la correction de mobilité

De légères modifications de composition du tampon, de viscosité ou de température d'analyse et d'adsorption au niveau de la paroi capillaire peuvent influencer le flux électro-osmotique (EOF) et le rendre instable. Les changements du flux électro-osmotique peuvent créer un écart type assez élevé des temps de migration. Les corrections de mobilité peuvent réduire considérablement l'effet des décalages de temps de migration d'une analyse à l'autre, en surveillant le temps de migration du pic de référence de mobilité, et augmenter ainsi considérablement la reproductibilité du temps de migration.

Le pic de référence de mobilité doit être choisi avec les priorités suivantes :

- Sélectionner le pic avec le signal le plus élevé.
- Sélectionner le pic le plus isolé.
- Le marqueur EOF ou étalon interne peut également faire office de pic de référence de mobilité.
- Agrandir la fenêtre de recherche pour être certain de trouver le pic de référence de mobilité.

## 9 Principes et fonctions propres à l'EC

### Types d'étalonnages

- Si plusieurs pics se retrouvent dans la fenêtre de recherche, le pic avec le signal le plus élevé est automatiquement choisi comme pic de référence de mobilité.

Il existe deux types de correction de mobilité :

#### **Correction de mobilité effective**

La **Effective Mobility Correction** utilise les mobilités effectives de tous les pics. Les données de rampe de tension et de l'électrophorégramme doivent être disponibles. En outre, travailler avec une correction de mobilité effective permet de déterminer les mobilités effectives réelles de tous les composants d'échantillon.

#### **Correction de mobilité relative**

La **Relative Mobility Correction** peut s'effectuer en l'absence de données de tension, ce qui suppose une tension constante pour toutes les mesures.

## CE-MS

### Soustraction du bruit de fond

Quand vous sélectionnez l'élément de menu **Subtract Background** (BSB), le dernier spectre de masse sélectionné est soustrait de chaque point de l'électrophorétogramme actuel. Les données résultantes sont enregistrées dans le même répertoire et avec le même nom que le fichier de données d'origine ; cependant, l'extension du fichier devient .BSB.

Le nouveau fichier de données devient le fichier de données actuel et l'électrophorétogramme avec soustraction de bruit de fond s'affiche. Un enregistrement du nombre de soustractions du bruit de fond effectuées est conservé dans l'élément Opérateur de l'en-tête du fichier de données.

Si vous visualisez une liste des données BSB sous forme de tableau, vous pouvez observer des différences dues à la précision de la représentation des données.

#### REMARQUE

Les fichiers texte AIDE dans le LC/MS concernent uniquement les paramètres LC et non EC. Certaines fonctions disponibles dans le logiciel LC/MS ne sont pas disponibles ou applicables aux applications CE/MS mais sont utilisées dans le LC. La fonction **peak matching** ne s'applique pas aux CE-MS et est donc inactive. Dans CE-MS, UV et MS, la détection a lieu à différentes longueurs effectives du capillaire de séparation. L'identification des pics est impossible en raison de la résolution différente à différentes longueurs effectives.

## Sous-répertoires de méthode pour différents modes EC

Dans les systèmes EC, les méthodes dépendent du mode EC sélectionné. Elles sont donc stockées dans des sous-répertoires différents du répertoire Method (Méthode) :

- CE**    Stocke les méthodes du mode EC
- CEC**    Stocke les méthodes du mode CEC
- CEp**    Stocke les méthodes du mode EC sous pression
- CEMS**    Stocke les méthodes du mode EC-SM.
- CEMSp**    Stocke les méthodes du mode EC-SM sous pression.

# Glossaire d'IU

## A

Acq Method  
Méthode d'acquisition

Acquisition Method Viewer  
Visionneuse de méthode d'acquisition

Acquisition Method Viewer...  
Visionneuse de méthode d'acquisition...

Add  
Ajouter

Add Data Files...  
Ajouter fichiers de données

Add Pause to Queue  
Ajouter une Pause à la liste d'attente

Advanced  
Avancé

Always ask user to choose an option  
Demandez toujours à l'utilisateur de choisir une option

Analysis Method  
Méthode d'analyse

Analysis Reports  
Rapports d'analyse

Append Lines  
Ajouter ligne

Apply Manual Events from Method  
Appliquer les événements manuels de la méthode

Area%  
% aire

Automatic update for selected runs  
Mise à jour automatique pour les analyses sélectionnées

## B

Back  
Arrière

Back Sample List  
liste d'échantillons arrière

Batch  
Par lots

Blank  
Vide

Bracketing  
Encadrant

Bracketing/Cyclic  
Encadrant/Cyclique

Break Session Lock  
Désactiver le verrouillage de session

Browse  
Parcourir

Browse for methods in master paths  
Rechercher des méthodes dans les chemins principaux

Browse for Report Templates in Result Set  
Rechercher des modèles de rapports dans un jeu de résultats

Browse for templates in master paths  
Rechercher des modèles dans les chemins principaux

## C

Calculate signals separately  
Calculer les signaux séparément

Calculate Signals Separately  
calculer les signaux séparément

Calculate with Corrected Areas  
les calculer avec des surfaces corrigées

Calibrant  
Étalon

Calibration  
Étalonnage

Calibration Interval  
Intervalle d'étalonnage

Calibration Mode  
Mode d'étalonnage

Capillary Isoelectric Focusing Calibration  
Étalonnage de la focalisation isoélectrique capillaire

Change Root...  
Changer la racine...

ChemStation Administrator  
Administrateur ChemStation

ChemStation Analyst  
Analyste ChemStation

ChemStation Lab Manager  
Gestionnaire ChemStation Lab

ChemStation Operator  
Opérateur ChemStation

Choose Master Method to update  
Choisir la méthode de référence à mettre à jour

Close  
Fermer

Column Chooser  
Outil de sélection de colonne

Commands  
Commandes

Compound Details  
Détails sur les composés

Compound Summary  
Résumé du composé

## Glossaire d'IU

Computer name  
Nom de l'ordinateur

Configuration Editor  
Éditeur de configuration

Conflict  
Conflit

Control Chart  
Tableau

Counter  
Compteur

Create New Result Set  
Créer un nouveau jeu de résultats

Cross-Sequence Summary  
Récapitulatif de séquences croisées

Current date  
Date actuelle

Current time  
Heure actuelle

Custom Fields  
Champs personnalisés

Cyclic  
Cyclique

## D

Data  
Données

Data Analysis  
Traitement des données

Data Analysis Navigation table  
Table de navigation dans l'analyse de données

Data Analysis Task  
Tâche de traitement de données

Data Location  
Emplacement des données

Data Storage  
Stockage des données

Datafile  
Fichier de données

Delay Calibration Summary  
Résumé de l'étalonnage du délai de collecte

Delete Lines  
Supprimer lignes

Delete temporary Sequence Template after completion  
Supprimer le modèle de séquence temporaire après achèvement

Detail  
Détail

Details  
Détails

Disconnect  
Déconnecter

DNA Base-Pair Calibration  
Étalonnage des paires de bases d'ADN

Download method to instrument  
Méthode de téléchargement vers l'instrument

Dual Simultaneous Injections  
Injections doubles simultanées

## E

Easy Sequence  
Séquence simple

Easy Sequence Setup  
Configuration de séquence simple

Effective Mobility Correction  
Correction de mobilité effective

Enable vial table checks and warnings  
Activer les contrôles et avertissements de la table de flacons

ESTD%  
ESTD% (% ESTD)

Evaluate Delay Calibration Data  
Évaluer les données d'étalonnage du délai de collecte

Exit  
Quitter

Extended  
Étendu

Extended Statistic  
Statistique étendue

Extended Statistics  
Statistiques étendues

## F

File  
Fichier

Fill Samples  
Remplir échantillons

Filldown  
Recopier vers le bas

Filldown Options  
Options de Recopier vers le bas

Filter Options  
Options de filtrage

Finish Queue Sequence  
Terminer la séquence de la file

Force Shutdown  
Forcer la fermeture

Fract. Start  
Début de fraction

Front  
Avant

Full  
Complet

## G

GLP  
GPL

## H

Header  
En-tête

Height%  
% hauteur

## Help

Aide

## Hide

Masqués

**I**

## Import Sample Container Type

Importer type de récipient à échantillons

## Import Samples

Importer des échantillons

## Import Samples...

Importer des échantillons

## injection volume

volume d'injection

## injections/vial

injections/flacon

## Injector Location

Emplacement de l'injecteur

## Insert Line

Insérer ligne

## Insert/Filldown Wizard

Assistant Insérer/Recopier vers le bas

## Instrument Administration

Administration de l'instrument

## Instrument Control

Contrôle de l'instrument

## Instrument name

Nom de l'instrument

## Integration

Intégration

## Integration Events Table

Table des événements d'intégration

## ISTD amount

quantité d'ISTD

## ISTD%

ISTD% (% ISTD)

## Items and Limits for Extended Statistics

Éléments et limites de statistiques étendues

**L**

## Library Search

Recherche en bibliothèque

## Load

Charger

## Load Easy Sequence Setup

Charger une configuration de séquence simple

## Logbook

Journal

**M**

## Manage Rules and Alerts...

Gérer les règles et alertes...

## Manual Events

Événements manuels

## Manual update ...

Mise à jour manuelle ...

## Messages and warnings

Messages et avertissements

## Method

Méthode

## Method and Run Control

Méthode et contrôle de l'analyse

## Method Conflict Table

table de conflit de méthode

## Method Resolution Info

Informations de résolution de méthode

## Methods

Méthodes

**N**

## Name

Nom

## Name Pattern

Modèle de nom

## New

Nouveau

## New method from instrument

Nouvelle méthode depuis l'instrument

## No Recalibration

Absence de réétalonnage

## Noise

Bruit

## None

Aucun

## Norm%

Norm% (% norm)

## Number of Samples

Nombre d'échantillons

**O**

## One Page Header

Titre de page

## Open

Ouvrir

## Open Easy Sequence Setup

Ouvrir une configuration de séquence simple

**P**

## Part of method to run

Partie de la méthode à exécuter

## Partial Recalibration

Réétalonnage partiel

## Partial Sequence

Séquence partielle

## Path

Chemin d'accès

## Paths

Chemins

## peak matching

identification des pics

## Peak Top Type

Type de sommet de pic

## Pending

En attente

## Glossaire d'IU

Perform Delay Calibration Run  
Effectuer l'étalonnage du délai de collecte

Performance  
Performances

Preferences  
Préférences

Preview/Print Sequence...  
Prévisualiser/Imprimer la séquence

Print  
Imprimer

Printer  
Imprimante

Printers and Faxes  
Imprimantes et fax

Protein Molecular Weight Calibration  
Étalonnage du poids moléculaire des protéines

## Q

QC Sample  
Échantillon QC

Queue Planner...  
Planificateur de file...

Queue Sequence...  
Séquence de file...

## R

Read Bar Codes  
Lire les codes-barres

Read-Only  
Lecture seule

Recalculate With Method  
Recalculer avec la méthode

Recalibration of all Retention/Migration Times  
Réétalonnage de tous les temps de rétention/migration

Relative Mobility Correction  
Correction de mobilité relative

Remove  
Supprimer

Remove Manual Events from Method  
Supprimer les événements manuels de la méthode

Remove selected Data Files  
Supprimer des fichiers de données sélectionnés

Replicate Number  
Numéro de réplique

Report  
Rapport

Report Layout  
Mise en page de rapport

Report Templates  
Modèles de rapports

Report to file  
Rapport vers fichier

Report to HTM  
Rapport vers HTM

Report to PDF  
Rapport vers PDF

Report to printer  
Rapport vers l'imprimante

reprocess  
Retraiter

Reprocess  
Retraiter

Reprocess Only  
Retraiter uniquement

Reprocessing only  
Retraitement uniquement

Restore initial order  
Restorer l'ordre initial

result set  
jeu de résultats

Result Set Migration  
Migration des jeux de résultats

Review  
Révision

Run Method  
Méthode de lancement

Run Queue  
File d'attente

Run Sequence  
Séquence de lancement

Run Time Checklist  
Liste de vérification de l'exécution

RunControl  
Contrôle d'analyse

## S

sample amount  
quantité d'échantillon

Sample entry  
Saisie d'échantillon

Sample Entry  
Saisie d'échantillon

Sample Info  
Informations sur l'échantillon

Sample List  
Liste des échantillons

Sample Location  
Emplacement de l'échantillon

Sample Name  
Nom d'échantillon

Sample Summary  
Résumé d'échantillons

Sample type  
Type d'échantillon

Sample Type  
Type d'échantillon

Samples  
Échantillons

Samples/Injections  
Échantillons/Injections

Save  
Sauvegarder



Save and Add to Queue Enregistrer et ajouter à la file	Sequence name Nom de séquence	Standard Calibration Étalonnage standard
Save As Enregistrer sous	Sequence Name Nom de la séquence	Standard Statistic Statistique standard
Save as New Master Method Enregistrer comme nouvelle méthode de référence	Sequence Output Sortie de séquence	Standard Statistics Statistiques standard
Save method with Data Enregistrer la méthode avec les données	Sequence Parameters Paramètres de séquence	Start Démarrer
Screen Écran	Sequence Preview Aperçu de la séquence	Start Menu Démarrer
Select Destination Sélectionner la destination	Sequence Start Lancement de la séquence	Starting Vial Location Position du flacon initial
Select Method Path Chemin de méthode	Sequence Summary Parameters Paramètres de résumé de séquences	Statistics statistiques
Select Sequence Template Sélectionner le modèle de séquence	Sequence Summary Reporting Rapport du résumé de séquences	Statistics for Calibrated and Sample Runs Statistiques sur les analyses d'étalons et d'échantillons
Select Source Sélectionner la source	Sequence Table Table de séquences	Statistics for Calibration Runs Statistiques sur les analyses d'étalonnage
Sequence Séquence	Setting Configuration	Status État
Sequence > Create New Result Set Séquence > Créer un nouvel ensemble de résultats	Settings Configuration	Subtract Background Soustraire le bruit de fond
Sequence Conflict Table table de conflit de séquence	Short Court	Summary Résumé
Sequence Diagram Diagramme de séquence	shutdown arrêt	
Sequence End Fin de la séquence	Signal/Review options Options de signal/Révision	<b>T</b>
Sequence Line Ligne de séquence	Signal/Review Options Option de signal/révision	Take over ChemStation Remote Session Prendre le contrôle de la session à distance de ChemStation
Sequence Location Emplacement de la séquence	Simple Calibration Étalonnage simple	Target Mass Masse cible
Sequence Method Méthode de séquence	Single Injection Injection simple	Time Heure
sequence methods méthodes de séquence	Single Sequence Summary Récapitulatif de séquence simple	<b>U</b>
	Specify Report Spécifier le rapport	Unique folder Creation Mode de création de dossiers uniques
	Spectrum Spectre	

Unique Folder Creation	Use method from data file	View with Instrument Configuration...
Création de dossiers uniques	Utiliser la méthode du fichier de données	Afficher avec la configuration de l'instrument...
Unique folder Creation OFF	Use reference	View with Original Configuration...
Mode Création de dossiers uniques désactivé	Utiliser comme référence	Afficher avec la configuration d'origine...
Unique Folder Creation Off	Use sequence method	
Mode Création de dossiers uniques désactivé	Utiliser la méthode de séquence	
Unique Folder Creation OFF	Use Sequence Table information	
Mode Création de dossiers uniques désactivé	Utiliser la table de séquence	
Unique Folder Creation ON	Used in	
Mode Création de dossiers uniques activé	Utilisation dans	
Unique pdf file name	User name	
Nom de fichier pdf unique	Nom d'utilisateur	
Unload Current Dataset	<b>V</b>	
Décharger un ensemble de données actives	Vial Table	
	Table de flacons	
Update any Master Method ...	Vial Table Advanced Settings	
Mettre à jour toute méthode de référence ...	Paramètres avancés de la table de flacons	
Update Calibration	View	
Mise à jour du réétalonnage	Affichage	
Update Manual Events of Method	View ACQ Method	
mettre à jour les événements manuels de la méthode	Voir la méthode ACQ	
Update Master Method	View Method	
Mise à jour de la méthode de référence	Afficher la méthode	
Update master methods	View Report File	
Mise à jour de méthode de référence	Voir le fichier de rapport	
Update Methods	View saved Report File(s)	
Mettre à jour les méthodes	Voir le(s) fichier(s) de rapport sauvegardé(s)	
Update Methods...	View Saved Report File(s)	
Mettre à jour les méthodes...	Voir le(s) fichier(s) de rapport sauvegardé(s)	
Upload method from instrument	View Saved Sequence Summary Report File(s)	
Méthode de chargement depuis l'instrument	Voir le(s) fichier(s) de rapport récapitulatif sauvegardé(s)	
Use current method	View Summary Report File	
Utiliser la méthode active	Voir le fichier de rapport récapitulatif	

# Index

## %

% delta 130

## A

abandon  
séquence 107  
ACAML 167  
ACQ.TXT 39  
acquisition de données 72  
acquisition des données 24  
ajustement  
courbe 177  
analyse des données  
nouveau 26  
options 26  
analyse  
exactitude 185  
arborescence des méthodes 56  
arrêt  
séquence 106  
aucune mise à jour 129  
automatique  
mise hors tension 126  
recherche de librairie 68  
réétalonnage 127  
automatisation  
définition 83

## B

blanc  
analyses 121  
bonnes pratiques de laboratoire 33

## C

calcul personnalisé 193  
CDS 11  
champ de données 192  
champs personnalisés 47, 190  
chemin d'accès aux données 73  
chemins d'accès 72  
ChemStation  
explorateur 56  
personnalisation 30  
codage couleur 78  
commande à distance 12  
composé 172  
configuration 16  
connexion de bureau à distance 14  
contrôle de l'instrument 46  
contrôle  
signal 75  
courbe d'étalonnage  
ajustement 177, 177  
multiniveau 174  
pondération des points  
d'étalonnage 178  
simple 173  
types 173  
zéro (origine) forcé 177  
courbe  
ajustement 177  
création classique de rapports 29  
création de dossiers uniques  
activation/désactivation 115  
création de rapports 29, 167  
création intelligente de rapports  
activer 189

avantages 190  
conditions 167  
fichiers de données 168  
présentation 169

## D

DA.M 40, 70, 157  
data analysis 152  
Data Store 15  
déconnexion de la session 12  
déconnexion 12  
destination  
rapport 188  
DOC 169  
données de démonstration 194

## É

échantillon inconnu 182  
échantillon vierge 103  
échantillon  
étalonnage 172  
inconnu 182

## E

ECM 15

## É

Éditeur de modèles de rapport 191  
éléments de rapport 192

## E

ELN 11  
encadrant

## Index

étalonnage 130  
encadrement  
    étalonnage cyclique 137  
enregistrer avec les données  
    copie de la méthode 70  
enregistrer les données de BPL 69

## É

étalonnage cyclique  
    encadrement 137  
étalonnage mult niveau 174  
étalonnage  
    composé 172  
    cyclique à plusieurs niveaux 132  
    échantillon 172  
    encadrant 130  
    fréquence 130  
    mult niveau 174  
    niveau 172  
    plages 176  
    point 172  
état de veille 126  
état  
    instrument 78

## E

exactitude  
    analyse 185  
expression 190, 193  
extrapolation 176

## F

facteur de réponse  
    mise à jour 128  
fichier de données de référence 103, 156  
fichier de méthode  
    paramètres d'instrument 54  
fichier

méthode 54  
formatage conditionnel 193  
formatage  
    modèle de rapport 193  
formats de fichier  
    rapport des résultats 208

## G

GLPSave.Reg  
    enregistrer avec la méthode 69

## I

informations de méthode 46  
instrument  
    état 78  
intégration  
    événements 46  
    table de résultats 67  
interruption  
    séquence 106  
intervalle  
    réétalonnage 130

## J

jeu de résultats auto-assemblés 162  
jeu de résultats  
    auto-assemblés 162  
    migration 124  
journal 76

## L

limites quantitatives 174  
liste de vérification de l'exécution  
    acquisition de données 67  
    commande de post-analyse 69  
    enregistrer les données de BPL 69  
    enregistrer une copie de la méthode 70  
    macro de post-analyse 69

traitement des données 67

## M

macro  
    mise hors tension 126  
messages d'erreur 76  
messages d'événement 76  
méthode  
    afficher les paramètres d'acquisition 57  
    création 51  
    état 78  
    GLPSave.Reg 69  
    intégration 67  
    mise à jour automatique 101, 109  
    mise à jour manuelle 109, 61, 59  
    mode en ligne 54  
    mode hors ligne 55  
    modification 51  
    modifier 52  
    parties 46  
    récapitulatif de l'exécution 64  
    recherche de librairie 68  
    répertoire 54  
    utiliser spécifique 155  
migration  
    jeu de résultats 124  
mise à jour  
    facteur de réponse 128  
    méthode de référence 59  
    méthode 101, 61  
    temps de rétention 128  
mise en évidence de résultats 190  
mise hors tension  
    automatique 126  
    macro 126  
    système 126  
mode dernier résultat 157  
modèle de nom 100  
modèle de rapport

- calcul personnalisé 193
  - éléments de rapport 192
  - enregistrement 194
  - format d'exportation 169
  - formatage conditionnel 193
  - par défaut 169
  - parcelles 190, 193
  - rechercher 194
  - modèle de séquence 84
  - multi-échantillonneur 86, 121
  - multiniveau
    - étalonnage 174
- N**
- nom de fichier
    - rapport d'injection simple 196
    - rapport récapitulatif de séquence 196
- O**
- opération post-séquence 126
  - origine
    - connecter 177
    - forcer 177
    - ignorer 177
    - inclure 177
    - traitement 177
- P**
- paramètres d'acquisition 39
  - paramètres de séquence 73, 85, 159
  - parcelles 190, 193
  - PDF 169, 169
  - personnalisation
    - traitement des données 69
  - Pharmacopée européenne 31, 156
  - pharmacopie européenne 111, 190
  - Pharmacopie européenne 103
  - pic
    - identification 47, 68
    - quantification 47, 68
  - pics non identifiés
    - réétalonnage 185
  - plages
    - étalonnage 176
  - plusieurs niveaux
    - séquences cycliques 132
  - pondération
    - linéaire 178
    - points d'étalonnage 178
    - quadratique 178
    - uniforme 178
  - post-analyse
    - commande 69
    - macro 69
  - préférences 72, 100, 115
  - préfixe 122
    - nom de fichier 122
  - présentation de rapport 169
  - présentation du logiciel
    - configuration du système 16
    - méthodes et séquences 16
    - modèle de données 18
  - prise de contrôle de la session à distance 13
  - prise de contrôle de session 13
  - procédures
    - révision 169
- R**
- rapport de résumé de séquences
    - configuration 205
    - journal 205
    - méthodes 205
    - page de résumé 207
    - rapports d'analyse 206
    - spécifications de résultats 207
    - statistiques 206
    - table d'échantillons 205, 205
  - titre 205
  - rapport de séquence simple 191
  - rapport de séquences croisées 191
  - rapport d'injection simple 191
  - rapport signal/bruit 156
  - rapport
    - champs personnalisés 190
    - classique ou intelligent ? 189
    - définition 188
    - destination 188
    - formats de fichiers 208
    - injection simple 188
    - mise en évidence de résultats 190
    - nom de fichier 196
    - non étalonné 198
    - récapitulatif de séquence 188
    - style 200
  - recalculer
    - dernier résultat 157
  - recalcul 29, 40, 154
  - recherche de bibliothèque 68
  - Récepteur à échantillons 86
  - reconnexion 13
  - réétalonnage partiel 185
  - réétalonnage
    - automatique 127
    - complet 185
    - définition 185
    - intervalle 130
    - justification 185
    - moyenne 129
    - partiel 185
    - pics non identifiés 185
    - temps de rétention 185
  - remplacement 129
  - répertoire
    - jeu de résultats 119
    - méthode 54
  - réponse détecteur 173
  - réponse

## Index

détecteur 173  
retraitement 29, 40, 117, 158  
révision 167  
RTE 191

## S

saisie d'échantillon 86  
séquence partielle  
    lignes de séquence 109  
    sélection d'un jeu de résultats 107  
séquence simple 94  
séquence  
    abandon 107  
    acquisition 99  
    analyses à blanc 121  
    arrêt 106  
    attribution d'un nom à des  
    fichiers 120  
    chargement 152  
    création 99  
    créer 89  
    enregistrement 99  
    étalonnage cyclique 132  
    interruption 106  
    modifier 99  
    paramètres de réétalonnage 128  
    retraitement 158  
    table 89  
séquences  
    configuration 94  
signal analogique 72  
signal de référence 31  
signal numérique 72  
signal  
    contrôle 75  
    détails 46  
stockage centralisé des données 15  
stockage des données 117  
surveiller  
    état de l'instrument 78

système  
    messages 76  
    mise hors tension 126

## T

table de navigation  
    déchargement d'ensembles de  
    données 162  
    suppression d'un fichier de  
    données 162  
table de séquence  
    réétalonnage 128  
table de sommation des pics 203  
table d'étalonnage  
    définition 180  
taux signal/bruit 103, 111  
temps de rétention  
    mise à jour 128  
    réétalonnage 185  
traitement des données 46  
    méthode 50  
    personnalisée 69  
    quantification 27  
    recalcul 29  
    retraitement 29  
    révision par lot 28  
TXT 169  
type de méthode  
    fichier de données 50  
    traitement des données 50  
type de rapport  
    injection simple 191  
    séquence croisées 191  
    séquence simple 191  
types de méthodes  
    référence 49  
    séquence 49

## V

visionneuse de méthode d'acquisition 57

Visual Basic 190, 193

## X

XLS 169, 169



## **Contenu de ce manuel**

Ce guide décrit divers concepts du logiciel OpenLAB CDS ChemStation d'Agilent. Il a pour objectif de vous aider à mieux comprendre le fonctionnement du système. Il contient des informations concernant les thèmes suivants :

- Concepts basiques
- Acquisition des données
- Automatisation/Séquences
- File d'attente et planificateur de file d'attente
- Principes de traitement et de révision des données
- Étalonnage
- Création de rapports
- Concepts spécifiques CE et fonctions

© Agilent Technologies 2010-2016

Printed in Germany  
10/2016



M8301-93018



**Agilent Technologies**