Agilent OpenLAB Chromatography Data System (CDS)

EZChrom

Guia do Usuário

Agilent Technologies

Avisos

© Agilent Technologies, Inc. 2014

Nenhuma parte deste manual pode serreproduzida de qualquer forma ou porqualquer meio (incluindo armazenamentoeletrônico e recuperação ou tradução paraum outro idioma) sem o consentimentoprévio, por escrito, da Agilent Technologies,Inc. como regido pelas leis de direitosautorais dos EUA e de outros países.

Número do manual

M8201-99023

Edição

Terceira edição, janeiro de 2014

Impresso nos EUA

Agilent Technologies, Inc.
5301 Stevens Creek Boulevard
Santa Clara, CA 95051

Garantia

O material contido neste documento é fornecido "como está" e está sujeito a alterações sem aviso em edições futuras. Além disso, até ondepermitido pelas leis vigentes, a Agilent se isenta de qualquer garantia, seja expressa ou implícita, relacionada a este manual e às informações aqui contidas, incluindo as garantias implícitas de comercialização e adequação a um propósito em particular, mas não se limitando a estas. A Agilent não deve ser responsabilizada por erros ou por danos incidentais ou conseqüentes relacionados ao suprimento, uso ou desempenho deste documento ou das informações aqui contidas. Caso a Agilent e o usuário tenham um outro acordo por escrito com termos de garantia que cubram o material deste documento e sejam conflitantes com estes termos, devem prevalecer os termos de garantia do acordo em separado.

Licenças de tecnologia

O hardware e/ou o software descritos neste documento são fornecidos com uma licença e podem ser usados ou copiados apenas em conformidade com os termos de tal licença.

Direitos restritos

Se o software for usado no cumprimento de um contrato ou subcontrato com o governo dos EUA, ele será fornecido e licenciado como ‘‘Software para computador comercial’’, conforme definido na DFAR 252.227-7014 (junho de 1995); como um ‘‘item comercial’’, conforme definido na FAR 2.101 (a); ou como ‘‘software de computador restrito’’, conforme definido na FAR 52.227-19 (junho de 1987) ou em qualquer regulamentação de órgão equivalente ou cláusula contratual. O uso, a duplicação ou a divulgação do Software estão sujeitos aos termos-padrão da licença comercial da Agilent Technologies; os Departamentos e os Órgãos do governo dos EUA que não os de Defesa não receberão Direitos Restritos além dos definidos na FAR 52.227-19 (c)(1-2) (junho de 1987). Usuários do governo dos EUA não receberão direitos limitados além dos definidos na FAR 52.227-14 (junho de 1987) ou na DFAR 252.227-7015 (b)(2) (novembro de 1995), conforme aplicável em qualquer dado técnico..

Avisos de segurança

CUIDADO

CUIDADO indica perigo. Ele chama a atenção para um procedimento, prática ou algo semelhante que, se não forem corretamente realizados ou cumpridos, podem resultar em avarias no produto ou perda de dados importantes. Não prossiga após um aviso de **CUIDADO** até que as condições indicadas sejam completamente compreendidas e atendidas..

WARNING

AVISO indica perigo. Ele chama a atenção para um procedimento, prática ou algo semelhante que, se não forem corretamente realizados ou cumpridos, podem resultar em ferimentos pessoais ou morte. Não prossiga após um AVISO até que as condições indicadas sejam completamente compreendidas e atendidas.

Conteúdo

Primeiros passos 17

Conceitos Básicos de Operação 19

Módulos eFamiliarization do EZChrom 19

Acessar os arquivos de Ajuda 19

Visualizar Informações sobre a Versão 20

Arquitetura do sistema 21

Sobre Novos Modelos de Arquivo 22

Sobre a janela do instrumento 22

Sobre os botões do painel de navegação 24

Visualizar sinais on-line 25

Alterar preferências de exibição 27

Assistente do instrumento 28

Para bloquear ou desbloquear a janela do instrumento 29

Abrir e salvar arquivos 29

Abrir um arquivo de método 30

Abrir um arquivo de sequência 31

Abrir um conjunto de resultados 32

Abrir um arquivo de dados 33

Abrir um arquivo aberto recentemente 36

Salvar um método 36

Salvar um método principal 37

Salvar uma sequência 37

Salvar um conjunto de resultados 38

Salvar um arquivo de dados 38

Abrir um modelo 39

Salvar como um Relatório 39

Sobre a janela do cromatograma 40

Exibir lado a lado ou sobrepor dados 41

Rolar o cromatograma 41
Adicionar um traço 41
Configuração dos eixos 44
Anotações 45
Alterar a aparência do cromatograma 46
Zoom 48
Limpar traços sobrepostos 49
Copiar para área de transferência 49
Imprimir um traço 49
Salvar um traço 49
Remover um traço 50
Definir limites para eixos X e Y 50
Sobre as operações do cromatograma 51
Mover um traço 52
Traços da pilha 52
Alinhar dois traços 53
Alargar um cromatograma 54
Normalizar traços 55
Suavização 56
Calcular derivadas 57
Adicionar dois traços 58
Subtrair dois cromatogramas 58
Multiplicar dois traços 58
Dividir cromatogramas ou traços 59
Tutorial 61
Visão geral do tutorial 61
Criar um método 62
Executar amostra 63
Configurar parâmetros de integração graficamente 64
Preparar método para calibração 65
Calibrar um método 68

Criar sequência de amostra 69
Executar sequência 71
Rever curvas de calibração em vários níveis 72
Alterar parâmetros de integração 73
Sobre Instrumentos 75
Configurar instrumento 75
Configurar um detector analógico 76
Rótulos do eixo Y normalmente usados e multiplicadores correspondentes 77
Configurar um evento externo 77
Ativar software de análise opcional 78
Configurar um coletor de frações 78
Registro de Atividades do Instrumento 79
Definir o instrumento para o modo de Suspensão ou Ativação 79
Visualizar o status do instrumento 80
Sobre os Métodos 81
Criar Método com o Assistente de Método 82
Configuração do Instrumento 83
Abrir Configuração do Instrumento 83
Importar Configuração do Instrumento 84
Detector 1 84
Gatilho 85
Eventos Externos 86
Verificação da Linha de Base 86
Traços Auxiliares 89
Coletor de Frações 89
Selecionar um Novo Projeto 90
Exibir Relatórios de Método 90
Propriedades do Método 90
Descrição das Propriedades do Método 91
Opções de Propriedades do Método 91
Propriedades do Método para Calibração 92

Log do Registro de Auditoria das Propriedades do Método 93
Registro de Auditoria das Propriedades do Método 93
Propriedades dos Dados 95
Sobre a Estrutura do Arquivo de Dados 95
Visualizar Informação Geral do Arquivo de Dados 96
Descrição do Arquivo de Dados 97
Visualizar Assinaturas Eletrônicas do Arquivo de Dados..... 97
Log do Registro de Auditoria do Arquivo de Dados 97
Registro de Auditoria do Arquivo de Dados..... 98
Opções de Método Avançado..... 98
Sobre as Opções de Método Avançado..... 98
Exportar Dados como Parte de um Método..... 99
Os dados exportados são salvos em arquivos usando as seguintes convenções: 101
Extensões de Arquivo Usadas para Exportação de Dados 102
Exportar Gráficos 104
Parâmetros de Coluna/Desempenho.....105
Selecionar Programas do Usuário e Arquivos de Linha de Base.....106
Preparação de Amostra 108
Iniciar Software Monitor de Laboratório 109
Adequação do Sistema.....109
Sobre a Adequação do Sistema 109
Configuração da Adequação do Sistema.....110
Cálculos de Adequação do Sistema 112
Executar um Teste de Adequação do Sistema e Imprimir Relatório 112
Sobre a Integração 115
Sobre as Tabelas de Integração.....115
Tabela de Eventos de Integração.....116
Tabela de Correções de Integração Manual 117
Descrições do Código da Linha de Base 119
Programação Gráfica 120
Largura.....123

Limite 123
Sensibilidade do Ombro 124
Integração Desativada 126
Vale a Vale 127
Linha de Base Horizontal 128
Linha de Base Regressiva Horizontal 129
Ponto Inferior da Linha de Base Horizontal 131
Aproximação da Tangente 132
Aproximação da Tangente Frontal 134
Área Mínima 135
Pico Negativo 136
Desativar Detecção de Fim de Pico 138
Remanejar Pico 139
Linha de Base Manual 141
Pico Manual 142
Pico Dividido 144
Início Forçado de Pico/Parada Forçada de Pico 145
Transferir Linha de Base 146
Zerar Linha de Base 148
Zerar Linha de Base no Vale 149
Aproximação exponencial 150
Aproximação Exponencial Frontal 152
Ajustar Janela TR 153
Velocidade de Amostragem 154
Sobre Sequências 157
Criar sequência com o assistente de sequência 158
Assistente de sequência - Método 158
Assistente de sequência - Desconhecidos 159
Assistente de sequência - Amostrador automático 161
Assistente de sequência - Calibração 161
Assistente de sequência - Relatórios 164

Criar uma sequência de reprocessamento 165
Editar uma sequência 166
Propriedades da Sequência 166
Propriedades da sequência 166
Sequência Fácil 167
Sequência Fácil 167
Para acessar a Sequência Fácil...: 167
Configuração da Sequência Fácil 167
Para acessar a Configuração da Sequência Fácil...: 167
Criar uma sequência a partir de um layout de bandeja 167
Para criar e modificar um modelo de layout de bandeja: 167
Para executar uma sequência usando um modelo de layout de bandeja existente: 168
Opções das propriedades da sequência 168
Registro de auditoria das propriedades da sequência 168
Log do registro de auditoria das propriedades da sequência 169
Sobre a Planilha de Sequência 169
Menu contexto da planilha de sequência 170
Preencher abaixo 172
Inserir uma nova sequência em uma planilha de sequência 173
Personalizar as colunas da planilha de sequência 173
Colunas da planilha de sequência 174
Definir tipos de corrida da amostra 176
Configurar um padrão de verificação do CQ 180
Anulação da concentração 180
Definir uma ação para uma corrida da sequência 181
Sobre aquisição de dados e controle 183
Aquisição de corrida única 184
Aquisição de corrida da sequência 189
Sobre o Modo de Preparação de Amostras Redundante 191
Calibrações através de Bracket 192
Agendar Corrida 193

Reprocessar uma sequência 193
Sobre a fila de corridas 196
Adicionar uma corrida à fila 197
Adicionar uma corrida ao resultado 197
Acesso do usuário a corridas em andamento 198
Parar uma corrida em andamento 199
Estender uma corrida 199
Adicionar e excluir itens da fila de corridas 200
Desativar o processamento para aquisição de dados 203
Enviar uma Corrida Prioritária 203
Configuração do Coletor de Frações 203
Sobre a sequência de resultados 204
Visualizar o Modo de Revisão de Resultado 204
Adicionar assinaturas à sequência de resultados 205
Revogar assinaturas 205
Propriedades do Conjunto de Resultados 206
Sobre relatórios de sequência 208
Gerar um relatório da sequência 208
Exibir relatórios de sequência 209
Imprimir relatórios sequenciais 210
Editar um modelo de relatório de sequência 211
Editar e imprimir um relatório de conteúdo de sequência 212
Sobre a Calibração 213
Teoria da Calibração 214
Passos para Criar uma Calibração 215
Executar Padrão de Calibração 216
Definir Pico Único 218
Definir Picos 220
Sobre a Tabela de Picos 222
Alterar as Propriedades da Tabela de Picos 231
Calibração de Nível Único Usando um Arquivo de Dados Armazenados 232

Renumerar IDs de Pico 234
Examinar Curvas de Calibração 235
Calculadora de Concentração 239
Cálculo da Média de Calibração 239
Média das Replicatas Automática 240
Cálculo da Média de Calibração como Parte de Sequência ou Corrida Única 242
Sobre Replicatas e a Média de Calibração 243
Calibração de Grupo e Grupos 245
Sobre Grupos e Calibração de Grupo 245
Definir um Grupo 246
Sobre a Tabela do Grupo 248
Alterar as Propriedades da Tabela do Grupo 253
Intervalo de Grupo Sem Calibração 253
Calibração de Grupo (Intervalo Calibrado) 255
Definição de Intervalo do Grupo 258
Agrupamento de Pico Calibrado (Picos Nomeados) 259
Definição de Grupo de Pico 259
Ajuste de Intervalo do Grupo 260
Relatório de Valores do Grupo 261
Exemplos de Intervalo Calibrado 261
Sobre Relatórios 267
Sobre Modelos de Relatório 267
Relatórios Padrão 268
Abrir um Relatório Padrão 268
Abrir um Relatório de Método 268
Salvar um Relatório Padrão 269
Salvar um Relatório de Método 269
Como usar o Editor de Relatórios 269
Funções Básicas do Editor de Relatórios 270
Usar a Visualização de Impressão 272
Atalhos 273

Criar Cabeçalhos e Rodapés 274
Adicionar Linhas e Caixas 275
Adicionar Campos 276
Adicionar um Cromatograma 276
Importar um Relatório 277
Inserir um Gráfico Adjacente a um Relatório 278
Adicionar Objetos 279
Adicionar uma Curva de Calibração 280
Imprimir Relatórios 280
Inserir uma Tabela de Relatórios 281
Adicionar uma Tabela de Relatórios 281
Alterar um Parâmetro da Tabela de Relatórios 283
Editar a Aparência de uma Tabela de Relatórios 284
Mostrar os Dados do Relatório no Momento do Projeto 284
Excluir uma Tabela de Relatórios 284
Tipos de Tabelas de Relatórios 285
Inserir Informações de Calibração 286
Inserir Assinaturas Eletrônicas 286
Inserir um Relatório de Métodos Filtrado 286
Inserir um Relatório Genérico 287
Inserir um Registro de Atividades do Instrumento 287
Inserir um Relatório de Configuração do Instrumento 287
Inserir um Relatório de Registro de Auditoria do Método 288
Inserir um Relatório de Método 288
Inserir um Relatório de Corridas 289
Modificar as Informações do Relatório de Corridas 291
Inserir um Relatório de Calibração da Sequência 291
Inserir um Relatório Padrão de Verificação de Sequência 291
Inserir um Relatório de Duplicação da Sequência 293
Inserir um Relatório de Marca da Sequência 295
Inserir uma Tabela de Sequências (Personalizada) 296

Inserir uma Tabela de Sequências (Completa) 297
Inserir um Relatório de Adequação do Sistema 297
Relatórios Avançados 298
Sobre Relatórios Avançados 299
Criar um Modelo de Relatório Avançado 300
Formatar o Estilo da Célula para Relatórios Avançados 300
Definir um Cabeçalho/Rodapé de Relatório Avançado 301
Adicionar um Gráfico a um Relatório Avançado 302
Adicionar uma Cor de Preenchimento a Células em um Relatório Avançado 303
Alterar Propriedades da Grade de Relatório Avançado 304
Adicionar Tabela usando o Assistente de Tabela 305
Adicionar uma Função Usando o Assistente de Funções 306
Função de Seleção do Assistente de Funções 307
Dados Dinâmicos do Assistente de Funções 307
Direção de Dados do Assistente de Funções 308
Tipos de Assistente de Funções 309
Identificação do Assistente de Funções 310
Registro de Auditoria de Relatório Avançado 311
Ver o log do Registro de Auditoria de Relatório Avançado 311
Salvar o Relatório Avançado como Modelo 312
Relatórios Inteligentes 312
Criar Relatório Inteligente 312
Abrir Relatório Inteligente 313
Salvar Relatório Inteligente 313
Modelos de Relatório Padrão 314
Abrir um Modelo de Relatório Padrão 314
Relatório de % da Área 314
Relatório ConfigContents 315
Verificação da Linha de Base Atual 316
Relatório Padrão Interno 316
Relatório Padrão Externo 317

Relatório de Normalização 317
Sinais de Condição de Erro 318
Sobre parâmetros personalizados 318
Definição de parâmetros personalizados para um método 319
Definição de parâmetros personalizados para uma sequência 321
Uso do parâmetro personalizado Relação sinal/ruído de adequação do sistema da Farmacopeia Europeia (EP). 323
Uso do parâmetro personalizado Relação sinal/ruído da Farmacopeia Norte-Americana (USP) 327
Uso do parâmetro personalizado Razão entre pico e vale 329
Uso do parâmetro personalizado Conversão de sinal 330
Uso do parâmetro personalizado Normalização ampla de canal 331
Uso do parâmetro personalizado Percentual da área relativa 333
Uso do Processador de script e dos Arquivos de script na criação de um parâmetro personalizado 334
Usar o parâmetro personalizado do Índice de Retenção do EZChrom Elite (Índice de Kovats) 335
Para adicionar parâmetros personalizados ao relatório de método: 337
Referência 339
Conversão de arquivos de dados PENelson 339
Abrir um arquivo CDF 340
Configurar eventos CIO/DIO 340
Programas do usuário 340
Desativar instrumentos GPIB 341
Formatos de arquivo ASCII 342
Sobre formatos de arquivo de sequência ASCII 342
Cabeçalho da sequência ASCII 342
Registros da sequência ASCII 343
Registro de Ações em ASCII 345
Exemplo de arquivo de sequência ASCII 347
Exemplo de arquivo de sequência ASCII para torre dupla 348
Referência funcional 352

Data.SystemWideParamByName 353
Data.AcquisitionDate 353
Data.AnalysisDate 354
Data.BCDValue 354
Data.Description 354
Data.Filename 355
Data.FullFilename 355
Data.InstrumentName 356
Data.ISTDAmount 356
Data.LastMethodFilename 357
Data.LastMethodFullFilename 357
Data.MultiplierFactor 357
Data.OriginalMethodFilename 358
Data.OriginalMethodFullFilename 358
Data.SampleAmount 359
Data.SampleID 359
Data.SystemWideParam 360
Data.TraceName 360
Funções do Datafile 362
Funções auxiliares estendidas 365
Funções de grupo 366
Funções do Instrumento 370
Descrição do parâmetro 371
Peak.CustomParamByName 373
Peak.DABTheoreticalPlates 378
Peak.DABTheoreticalPlatesPerMeter 378
Peak.EMGResolution 379
Funções de pico 381
Funções do projeto 394
Funções da sequência 396
Fórmulas e Funções de Relatórios Avançados 397

1. Fórmulas de planilha 397
1.1 Sintaxe da fórmula 398
1.2 Valores da fórmula 398
1.3 Operadores da fórmula 398
1.4 Referenciando outras células em fórmulas 400
1.5 Referenciamento de célula na Planilha 401
1.6 Expressões de restrição 402
1.7 Dependência explícita 403
2. Funções internas 403
2.1 Funções matemáticas 404
2.2 Funções Estatísticas 404
2.3 Funções estatísticas condicionais 404
2.5 Funções lógicas 404
2.4 Funções alfanuméricas 405
2.6 Funções lógicas digitais 405
2.7 Funções financeiras 405
2.8 Funções de data e hora 406
2.9 Funções diversas 407
2.10 Ferramentas incorporadas 407
3.1 Funções matemáticas 408
4. Como Usar Funções Internas da Planilha 417
4.3 Referências à célula calculada 417
5. Mensagens da Erro de Planilha 418
Cálculos internos 432
Teste de ruído 6-Sigma 434
Relação Sinal/Ruído 6-Sigma 434
Definição do Fator de Resposta de Área/Valor 435
Cálculo de ASTM LOD (Limite de detecção) 437
ASTM LOQ (Limite de quantificação) 437
Cálculos de ruído ASTM 438
Proporção Sinal/Ruído ASTM 438

Cálculos de verificação da linha de base 439
Cálculos de curva de calibração 442
Curvas de calibração 442
Determinação de concentrações de picos não calibrados 445
Valores do padrão interno 448
Cálculo de Farmacopeia Japonesa (JP), 15ª Edição 450
Centroide do Pico 455
Cálculos de desempenho 456
Retenção relativa 459
Suavização de Savitsky-Golay 460
Escalas 460
Método de cálculo USP (Farmacopeia Norte-Americana) 461
Peso e escalas 463
Método de Pesagem (Peso LSQ) 463

Primeiros passos

Use o sistema EZChrom para controlar e adquirir dados de uma variedade de instrumentos. Depois que um instrumento for conectado e configurado corretamente no Painel de Controle, a aquisição de dados e o controle exigirão a execução das seguintes etapas gerais:

Como usuário do sistema de dados:

- Crie e salve um método de aquisição e controle de dados. Um método contém várias seções, inclusive parâmetros de aquisição e controle do instrumento, informações de calibração, eventos temporizados de integração e opções de relatório. Um método também pode conter itens especiais, como instruções de exportação e parâmetros personalizados ou programas do usuário que podem ser executados depois da análise.
- Crie e salve uma sequência que contenha detalhes de corridas da calibração e amostras desconhecidas.
- Execute a sequência para calibrar o método e gerar resultados.

Nota Privilégios/Funções atribuídos no Painel de Controle podem evitar que o usuário realize todas essas tarefas.

Veja também

Conceitos Básicos de Operação

Tutorial

Sobre Instrumentos

Sobre os Métodos

Sobre a Integração

Sobre Sequências

Sobre a Calibração

Sobre Relatórios

Referência

Conceitos Básicos de Operação

Esta seção trata dos conceitos básicos de operação.

Veja também

Módulos eFamiliarization do EZChrom

Acessar os arquivos de Ajuda

Visualizar Informações sobre a Versão

Arquitetura do sistema

Sobre a janela do instrumento

Abrindo e salvando arquivos

Sobre a janela do cromatograma

Sobre aquisição de dados e controle

Módulos eFamiliarization do EZChrom

Está incluído um DVD de eFamiliarization no software OpenLAB para ajudá-lo nos primeiros passos e para se familiarizar com o EZChrom.

Também é possível adquirir os módulos eFamiliarization no site da Agilent

1. Acesse https://agilent.subscribenet.com.
2. Efetue o login com seu nome de login e sua senha. O nome de login e a senha são fornecidos durante a ativação das licenças do EZChrom.
3. Clique no link do **Software OpenLAB** e aceite as condições.
4. Selecione fazer o download dos módulos eFamiliarization para seu PC ou encomende-os em DVD.

Acessar os arquivos de Ajuda

Existe dois tipos de tópicos de arquivo de ajuda, o opcional e o principal.

Os tópicos de ajuda de software opcional estão localizados em arquivos de ajuda separados, exclusivos para cada opção. Esses arquivos de ajuda são acessados somente pelo sistema quando se está em uma caixa de diálogo ou janela específica dessa opção. Quando você acessa o arquivo

de ajuda de um programa opcional, o índice e o sumário exibidos serão do arquivo de ajuda desse programa opcional.

Todos os outros tópicos estão localizados no arquivo de ajuda principal. Para acessar os tópicos do arquivo de ajuda principal, é necessário primeiro fechar o arquivo de ajuda opcional.

Para acessar o arquivo de ajuda:

Na barra de ferramentas selecione **Ajuda > Conteúdos** ou selecione o ícone de Ajuda .

Visualizar Informações sobre a Versão

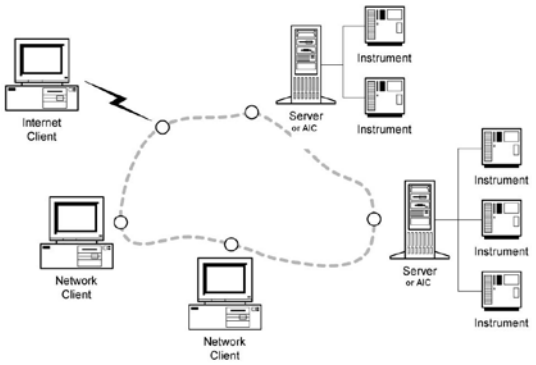
As informações sobre a versão de software de seu sistema podem ser encontradas na caixa de diálogo Sobre o Agilent OpenLAB CDS (Edição EZChrom).

1. No menu principal, selecione **Ajuda > Sobre**. A caixa de diálogo **Sobre o Agilent OpenLAB CDS (Edição EZChrom)** é exibida listando a versão do seu software **Agilent OpenLAB CDS (Edição EZChrom)**.

2. Para visualizar as informações sobre a versão dos módulos e drivers instalados, selecione **Versão** do **Módulo**. A janela **Informações sobre a Versão do Módulo** exibe o **Nome do Produto**, a **Versão do Produto** e a **Versão do Driver** de seus módulos instalados**.**

Arquitetura do sistema

Uma empresa é a combinação de clientes e servidores de sistema de dados com instrumentos configurados em uma rede. Ela pode ser tão simples quanto dois laboratórios com controladores de instrumento Agilent conectados juntos em uma rede, ou tão complexos quanto uma grande empresa farmacêutica com operações em várias localizações, edifícios e centenas de laboratórios, cada um com uma ampla gama de instrumentos.



O EZChrom Elite pode ser instalado como um sistema único de dados autônomos, como uma série de sistemas de dados autônomos ligados em rede entre si ou em um modo cliente/servidor.

Os Controladores de Instrumentos Agilent (AICs) são máquinas onde de fato ocorrem a aquisição de dados e o controle dos instrumentos. Todos os instrumentos estão conectados fisicamente aos AICs.

As estações de trabalho do cliente são onde os usuários do sistema realizam todas as operações do sistema, como desenvolver métodos e sequências, e enviar corridas e sequências de aquisição de dados aos AICs. Os clientes podem acessar os servidores ou os AICs por meio de uma conexão em rede direta, ou de localizações remotas, usando a internet.

Um sistema cliente/servidor é feito de servidores e clientes configurados juntamente em uma rede, usando um computador Windows como o controlador de domínio.

No modo cliente/servidor, ao iniciar uma corrida ou uma sequência em uma estação de trabalho cliente, você está, na verdade, enviando essa corrida ou sequência ao controlador de aquisição ao qual o instrumento está conectado. Depois de enviar uma corrida ou sequência, o servidor ou AIC assume o controle sobre as funções de aquisição e controle. Todos os métodos e sequências são copiados para o controlador de aquisição quando um item da fila de corridas é enviado para o servidor. Se a rede cair, o controlador de aquisição continuará em execução com os arquivos que estão em seu disco rígido.

Veja também

Conceitos básicos de operação

Sobre Novos Modelos de Arquivo

O sistema fornece vários modelos de arquivos pré-desenvolvidos para:

- Métodos
- Sequências
- Preps de Amostra
- Bibliotecas Espectrais
- Relatórios

Veja também

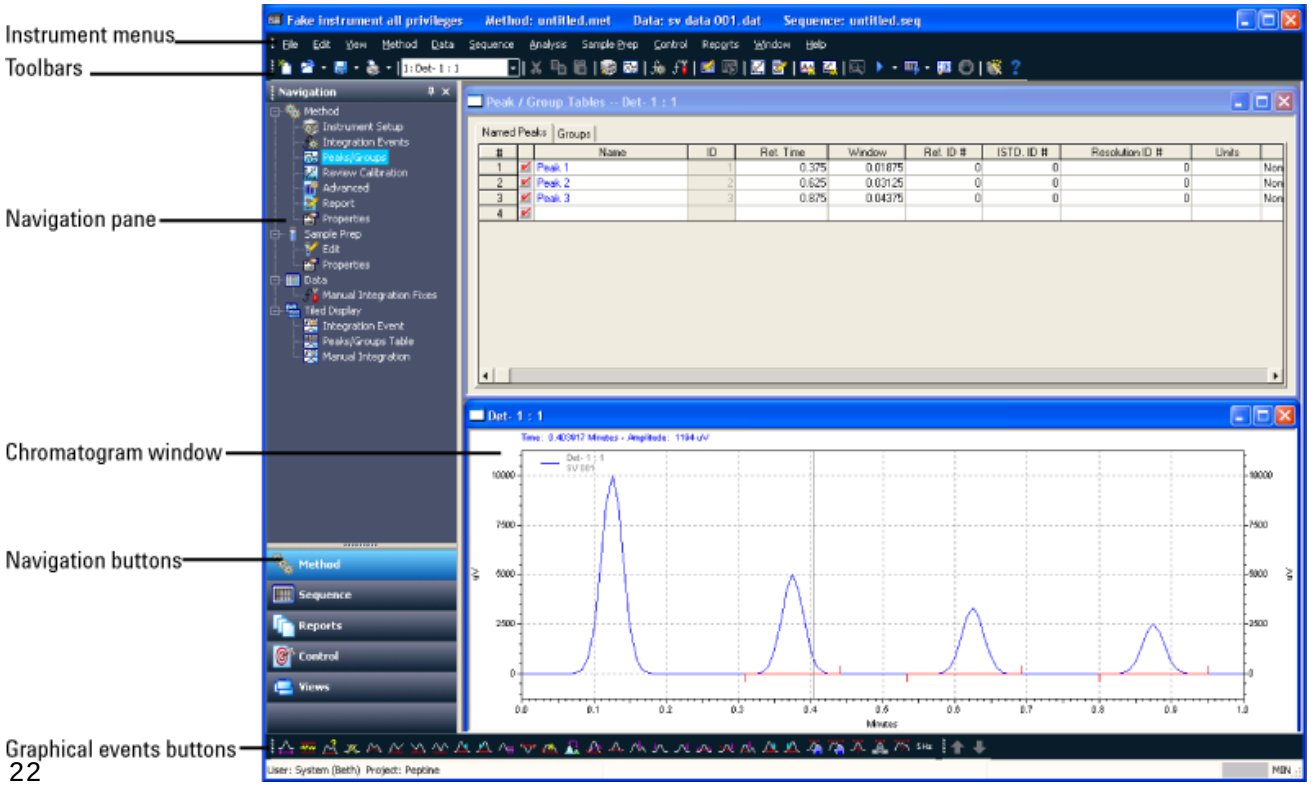
Abrir um Modelo

Sobre a janela do instrumento

Na janela do instrumento muitos aspectos do uso do instrumento são realizados, inclusive:

- Métodos
- Sequências
- Calibração
- Relatórios
- Integração

Personalize a aparência da janela do aplicativo clicando com o botão direito do mouse nos botões da barra de ferramentas ou dos eventos gráficos, e selecionando quais deles mostrar. °Veja também Alterar preferências de exibição.



Veja também

Janela do cromatograma

Botões de navegação

Botões de eventos gráficos

Visualizar sinais on-line

Alterar preferências de exibição

Assistente do instrumento

Para bloquear ou desbloquear a janela do instrumento

Sobre os botões do painel de navegação

Os botões do painel de navegação na janela do instrumento fornecem acesso ao método, à sequência, ao relatório, ao controle e às opções de exibição com um único clique. Os botões de navegação na parte inferior do painel de navegação abrem árvores de comandos que fornecem acesso a comandos também disponíveis na barra de menus da janela do instrumento.

Botão de navegação	Exibições
Método	Método, Preparação de amostra, Dados e Exibição lado a lado (para exibir dados atuais lado a lado com informações da tabela Integração ou Calibração/Pico)
Sequência	Editar, Propriedades
Relatórios	Relatório padrão, Relatório avançado, Relatório inteligente, % de área, Relatório de conteúdos de configuração, Verificação da linha de base atual, Padrão externo, Padrão interno, Normalização, Propriedades
Controle	Configuração do instrumento, Fila de corridas, Status do instrumento
Exibições	Exibição de dados (consulte Visualizar sinais on-line), Correções de integração manual/dados, Exibição lado a lado/Exibição da entrada da amostra A exibição de entrada da amostra configura a janela do instrumento de exibição das funções mais usadas durante a aquisição de dados. Quando você selecionar essa exibição, a janela do instrumento fornecerá uma exibição lado a lado contendo o status do instrumento, dados atuais e fila de corridas. Essa exibição única permite monitorar a corrida atual, verificar ou modificar os parâmetros do instrumento e enviar corridas ou sequências.

Para exibir o painel de navegação, selecione **Exibir** > **Painel de navegação**.

Para fechar o painel de navegação, selecione o botão **x** na parte superior do painel de navegação.

Para "parar" o painel de navegação, clique no botão em forma de tachinha na parte superior do painel de navegação.

Para "voltar" com o painel de navegação, clique na guia **Navegação** e depois no botão em forma de tachinha

Para personalizar as barras exibidas no painel de navegação, clique na pequena seta no canto inferior direito do painel e selecione **Exibir mais botões**, **Exibir menos botões**, ou **Adicionar ou remover botões.**

Veja também

Visualizar sinais on-line

Visualizar sinais on-line

A visualização de sinais on-line permite monitorar os sinais on-line atuais e, se o instrumento tiver suporte, suas curvas de parâmetro. Esses dados nessa visualização não são adquiridos ou armazenados e nem associados a nenhuma corrida.

Nota: Para visualizar os sinais on-line, o instrumento deverá ser monitorado com o uso da função Controle> Monitor. Nem todos os instrumentos suportam a visualização de sinais on-line.

Para visualizar sinais on-line:

1. No **Painel de navegação**, clique em **Exibições** e, em **Exibição de dados**, selecione **Sinais on-line**.
2. Na visualização de sinais on-line, clique em **Alterar** para abrir a caixa de diálogo **Editar gráfico de sinal**, na qual é possível selecionar sinais e definir os intervalos dos eixos x e y.
3. Quando tiver os sinais desejados selecionados para exibição, você poderá executar as seguintes funções nessa janela:

- Clique em **Equilíbrio** para equilibrar o detector. Este botão está disponível apenas para detectores com suporte para essa função.
- Clique em **Ajustar** para ajustar a janela de sinal para dados que excedem o intervalo de absorção definido.
- Clique nas **setas horizontais** para ajustar a faixa eixo x.
- Clique nas **setas verticais** para ajustar a faixa eixo y.

Nota: As setas horizontais e verticais estarão ativas apenas se o sinal não estiver ampliado.

Para exibir o eixo y individual de um sinal, selecione o sinal na exibição ou a descrição sinal no cabeçalho. O eixo y tem a mesma cor do sinal exibido.

Use o cursor cruzado espesso para rastrear o sinal e exibir os valores de absorção no rodapé da janela.

Ampliar a janela:

Para ampliar o gráfico de sinal on-line, mantenha pressionado o botão esquerdo do mouse e desenhe um retângulo ao redor da área de interesse. Dê um clique duplo para diminuir zoom. As setas horizontais e verticais não são ativas em uma janela de sinal ampliada. Ao se alterar o intervalo do eixo x ou do eixo y ou selecionar **Ajustar**, o zoom da janela diminui automaticamente.

Editar o gráfico de sinal on-line

Esta caixa de diálogo é usada para selecionar e modificar os intervalos dos sinais a serem exibidos na visualização **Sinal on-line**. Para abrir essa caixa de diálogo, clique em **Alterar** na janela de visualização de sinais on-line. Os sinais disponíveis para visualização deste instrumento serão exibidos na lista **Sinais disponíveis**.

Para selecionar sinais para exibição, realce o sinal na lista de Sinais disponíveis e selecione o botão **Adicionar**.

Para remover sinais da exibição, realce o sinal na lista Sinais selecionados e clique no botão Remover.

Para alterar os deslocamentos e os intervalos de um determinado sinal, selecione-o para realçá-lo. Então use os parâmetros de intervalo mostrados para inserir valores que serão usados para exibir o sinal na visualização sinal on-line:

- Selecione **Faixa previsível** a fim de inserir valores absolutos para a faixa eixo Y.
- Selecione **Intervalo Flutuante** para fornecer um desvio usado quando for selecionado o botão Ajustar na janela gráfico de sinal. O valor máximo atual é exibido na proporção da tela fornecida no desvio. Você pode usar essa função também para exibir vários sinais com um desvio. Apenas defina um desvio diferente para cada sinal e selecione Ajustar.
- A faixa eixo y define o comprimento absoluto do eixo y para o seu sinal. Para sinais que o suportam, você pode também selecionar **Ajuste automático de y** para ajustar automaticamente o eixo y, de forma que o ponto de dados mais recente fique sempre visível.
- Forneça diretamente o ponto de início e o desvio do seu eixo y para os sinais de ponto ajuste (parâmetro). Nenhum desvio ou ajuste de y é possível.

Veja também

Exibir o painel de navegação

Sobre os botões do painel de navegação

Alterar preferências de exibição

O menu Exibir é usado para configurar preferências de exibição na janela do instrumento. °Essas preferências são definidas por cada usuário, para cada instrumento.

Para alterar a aparência da janela do instrumento

1. Na barra de ferramentas, selecione **Exibir > Preferências**.
2. Na caixa de diálogo **Preferências**, selecione a guia **Geral**. °São exibidas as seguintes opções:

Opções da barra de ferramentas	Para cada área listada da janela é possível ativar ou desativar a barra de ferramentas e as dicas de ferramentas, se disponível. Clique na área da barra de ferramentas e marque as caixas de seleção **Mostrar barra de ferramentas** e **Dicas de ferramentas** para habilitar as opções dessa área.
Opções da barra de status	Marque a caixa de seleção para ativar a barra de status. A barra de status fornece breve informações na parte inferior da janela do instrumento, se habilitada.
Unidades de hora	Selecione as unidades de hora para exibição das informações cromatográficas.
Opções de dicas de ferramentas	Marque as caixas de seleção **Mostrar dicas de ferramenta de programação gráfica** ou **Mostrar dicas de ferramenta de operações de traço** para ativar suas opções para essa área.
Arquivos recentes	Defina o número máximo de arquivos recentes a serem exibidos em **Arquivos > Arquivos recentes.**
Empinhamento de traço	Selecione a caixa de seleção **Padrão normalizado** para normalizar um ou mais cromatogramas ao primeiro cromatograma por padrão. Isso ajustará as alturas, como a altura no ápice do pico selecionado combinando com a altura do pico selecionado no primeiro traço. Se essa opção não for selecionada, o padrão será Traço 1.

Assistente do instrumento

Esse assistente foi criado para orientá-lo diante das funções básicas da janela do instrumento.

Para abrir o assistente do instrumento:

Existe duas maneiras de abrir o assistente do instrumento da Janela do instrumento

- Selecione o ícone do **assistente do instrumento**
- Selecione **Ajuda > Assistente do instrumento**.

As seguintes opções serão exibidas na caixa de diálogo do **assistente do instrumento**:

Criar um novo método	Esse botão inicia o **assistente de método** que permitirá criar um método.
Modificar o método atual	Esse botão inicia o **assistente de método** que permitirá modificar um método.
Modificar um método em disco	Esse botão inicia o **assistente de método** que permitirá modificar um método em disco.
Criar sequência	Esse botão inicia o **assistente de sequência** que o permite criar uma sequência de aquisição ou reprocessamento.
Relatório inteligente com assistente	Esse botão inicia o **assistente de relatório** que permitirá criar métodos.
Executar uma amostra	Esse botão abre uma caixa de diálogo onde é possível usar um método armazenado na corrida de uma única amostra.
Exec. sequência amostras	Esse botão abre a caixa de diálogo de sequência de corridas onde é possível iniciar a aquisição de dados usando uma sequência armazenada.
Mostrar durante a inicialização do instrumento	Se essa caixa estiver selecionada, o assistente do instrumento será exibido sempre que o instrumento iniciar.

Para bloquear ou desbloquear a janela do instrumento

Esse comando é útil para laboratórios de vários de usuário onde talvez você queira bloquear o que se está trabalhando atualmente enquanto se afasta temporariamente do computador. Quando você escolher este comando, todos os itens de menu serão "bloqueados", exceto os menus **Janela** e **Ajuda**. Os comandos bloqueados não estarão acessíveis até que você os desbloqueie novamente.

Para bloquear a janela do instrumento, selecione **Janela** > **Bloquear**.

Para bloquear a janela do instrumento, selecione **Janela** > **Desbloquear.** Na caixa de diálogo **Login** , digite seu **Usuário** e **senha** definidos no painel de controle.

Abrir e salvar arquivos

Abrir e salvar arquivos faz parte dos conceitos básicos de operação. As aparências das caixas de diálogo Abrir e Salvar serão diferentes de acordo com o sistema de armazenamento.

Veja também

Abrir um arquivo de método

Abrir um arquivo de sequência

Abrir um conjunto de resultados

Abrir um arquivo de dados

Abrir um arquivo aberto recentemente

Abrir um modelo

Salvar um método

Salvar um método principal

Salvar uma sequência

Salvar um conjunto de resultados

Salvar um arquivo de dados

Salvar como um modelo

Abrir um arquivo de método

Ao abrir um arquivo de método aparecerá uma caixa de diálogo que permite abrir o arquivo, e especificar parâmetros para a pesquisa.

A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão um pouco diferentes para sistemas com a segurança avançada de arquivos habilitada. Os usuários serão limitados a armazenar arquivos na pasta de projeto atual e na pasta corporativa comum.

Para salvar um arquivo de método:

1. Selecione **Arquivo > Abrir > Método.**
2. A caixa de diálogo **Abrir Arquivo de Método** é exibida com a pasta de métodos em seus arquivos do projeto, e os **Arquivos do tipo** são definidos como **.met**.
3. A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão diferentes de acordo com o tipo de armazenamento. Continuar procedimento para:
   - Armazenamento com base em Arquivos
     a. Use os campos **Procurar em** e **Nome do arquivo** para encontrar o arquivo.
     b. Para procurar um arquivo, preencha os campos **Texto na Desc**., Nome do **Analista**, Data de **criação**, ou última data de **Modificação**, e selecione **Encontrar agora**.

     Observação: Ao usar o recurso Pesquisar, certifique-se de que a opção **Ocultar as extensões dos tipos de arquivo conhecidos** do Windows esteja desativada. Para desativá-la, selecione **Meu computador > Ferramentas > Opções de pasta > Exibir**. Então, desmarque **Ocultar as extensões dos tipos de arquivo conhecidos**.
   - Armazenamento Dados
     1. Para procurar arquivos, selecione **Avançado**.
     2. Para obter mais informações, selecione a **Ajuda** do Armazenamento Dados.
4. Selecione o resultado e clique em **Abrir.**

Abrir um arquivo de sequência

Ao abrir um arquivo de sequência aparecerá uma caixa de diálogo que permite abrir o arquivo, e especificar parâmetros para a pesquisa.

A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão um pouco diferentes para sistemas com a segurança avançada de arquivos habilitada. Os usuários serão limitados a armazenar arquivos na pasta de projeto atual e na pasta corporativa comum.

Para salvar um arquivo de sequência:

1. Selecione **Arquivo > Abrir > Sequência.**
2. A caixa de diálogo **Abrir Arquivo de Sequência** é exibida com a pasta de sequências em seus arquivos do projeto, e o **tipo de arquivo** é definido como **.seq**.
3. A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão diferentes de acordo com o tipo de armazenamento. Continuar procedimento para:
   - Armazenamento com base em Arquivos
     a. Use os campos **Procurar em** e **Nome do arquivo** para encontrar o arquivo.
     b. Para procurar um arquivo, preencha os campos **Texto na Desc**., Nome do **Analista**, Data de **criação**, ou última data de **Modificação**, e selecione **Encontrar agora**.

     Observação: Ao usar o recurso Pesquisar, certifique-se de que a opção **Ocultar as extensões dos tipos de arquivo conhecidos** do Windows esteja desativada. Para desativá-la, selecione **Meu computador > Ferramentas > Opções de pasta > Exibir. Então**, desmarque **Ocultar as extensões dos tipos de arquivo conhecidos**.
   - Armazenamento Dados
     a. Para procurar arquivos, selecione **Avançado**.
     b. Para obter mais informações, selecione a **Ajuda** do Data Store.
4. Selecione a sequência e clique em **Abrir**.

Veja também

Editar uma sequência

Salvar uma sequência

Abrir um conjunto de resultados

Depois de ter executado uma sequência é possível exibir seus resultados na caixa de diálogo **sequência de resultados**

Para abrir um arquivo de conjunto de resultados:

1. Selecione **Arquivo > Abrir > Conjunto de resultados.**
2. A caixa de diálogo **Abrir arquivo de resultado** abre a pasta de resultados em seus arquivos do projeto, e os **arquivos de tipo** são definidos como **.rst**.
3. A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão diferentes de acordo com o tipo de armazenamento. Continuar procedimento para:
   - Armazenamento com Base em Arquivos
     a. Use os campos **Procurar em** e **Nome do arquivo** para encontrar o arquivo.
     b. Para procurar um arquivo, preencha os campos **Texto na Desc**., Nome do **Analista**, Data de **criação**, ou última Data de **Modificação**, e selecione **Encontrar agora**.

     Observação: Ao usar o recurso Pesquisar, certifique-se de que a opção **Ocultar as extensões dos tipos de arquivo conhecidos** do Windows esteja desativada. Para desativá-la, selecione **Meu computador > Ferramentas > Opções de pasta > Exibir**. Então, desmarque **Ocultar as extensões dos tipos de arquivo conhecidos**.
   - Armazenamento Dados
     a. Para procurar arquivos, selecione **Avançado**.
     b. Para obter mais informações, selecione a **Ajuda** do Armazenamento Dados.
4. Selecione o resultado e clique em **Abrir**.
5. Abrem ambos o cromatograma do arquivo de dados e a caixa de diálogo **sequência de resultados**. O realçamento amarelo na caixa de diálogo **Sequência de resultados** avisa que se está no modo de revisão de resultado.
   - As colunas na caixa de diálogo **sequência de resultado** estão descritas em Colunas da planilha de sequência.
   - Clique com o botão direito na caixa de diálogo **Sequência de Resultados**para abrir o menu contexto. Estas opções estão descritas em Menu contexto da planilha de sequência.

Veja também

Sobre a planilha de sequência

Colunas da planilha de sequência

Personalizar as colunas da planilha de sequência

Menu contexto da planilha de sequência.

Abrir um arquivo de dados

Ao abrir um arquivo usando o arquivo de dados, você verá uma caixa de diálogo que permite não apenas abrir o arquivo, mas também especificar parâmetros de pesquisa, bem como visualizar o conteúdo do arquivo.

A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão um pouco diferentes para sistemas com a segurança avançada de arquivos habilitada. Os usuários serão limitados a armazenar arquivos na pasta de projeto atual e na pasta Corporativa Comum.

Para abrir um arquivo de dados:

1. Selecione **Arquivo > Abrir > Dados**.
2. A caixa de diálogo **Abrir Arquivo de Dados** é exibida com a pasta de resultados em seus arquivos do projeto, e os **arquivos do tipo** são definidos como **.dat**.
3. A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão diferentes de acordo com o tipo de armazenamento. Continuar procedimento para:

   - **Armazenamento com base em Arquivos**

     a. Use os campos **Procurar em** e **Nome do arquivo** para encontrar o arquivo.

     b. Para procurar um arquivo, preencha os campos **Texto na Desc**., nome do **Analista**, data de **Criação**, ou última data de **Modificação**, e selecione **Encontrar agora**.

     Observação: Ao usar o recurso Pesquisar, certifique-se de que a opção **Ocultar as extensões dos tipos de arquivo conhecidos** do Windows esteja desativada. Para desativá-la, selecione **Meu computador > Ferramentas > Opções de pasta > Exibir.** Então, desmarque **Ocultar as extensões dos tipos de arquivo conhecidos.**

     c. Selecione o botão **Visualização** para ter uma visualização prévia do cromatograma.

     d. A caixa **Opções** permite economizar tempo carregando informações adicionais no momento em que o arquivo de dados é aberto. Selecione **Método** ou **Resultados**.

     Caso selecione **Método**, selecione uma das seguintes opções:

     - **Atual** - o método atual não será alterado quando você abrir o arquivo de dados. Quando uma das demais opções de método for selecionada, o método selecionado será carregado no momento em que o arquivo de dados for aberto.
     - **Dos resultados** - carrega o método usado para criar os resultados selecionados.

- **Original / Aquisição** - carrega o método usado na aquisição original do arquivo de dados. Esse método substituirá o método ativo atualmente.

Caso tenha selecionado **Resultados**, o arquivo de dados será aberto junto com os resultados selecionados. Quando um arquivo de dados for aberto com resultados, a integração e as linhas de base que geraram esses resultados serão exibidas automaticamente quando o cromatograma surgir na tela.

- Se a opção **Mais recente** for selecionada, o arquivo de dados será aberto com os resultados da última vez em que o cromatograma foi analisado.
- Se a opção **Salvar todos os resultado da análise** estiver ativada no painel de controle, uma lista de todos os resultados da análise estará disponível para ser aberta com o arquivo.

e. Se aplicável, selecione **Abrir com a preparação de amostra**. Quando esta caixa estiver selecionada, o arquivo de preparação de amostra (se aplicável) usado no momento em que os dados foram adquiridos será aberto quando o arquivo de dados for aberto. Consulte Preparação de amostra.

Data Store

a. Para procurar arquivos, selecione **Avançado.**

b. Para obter mais informações, selecione a **Ajuda** do Data Store.

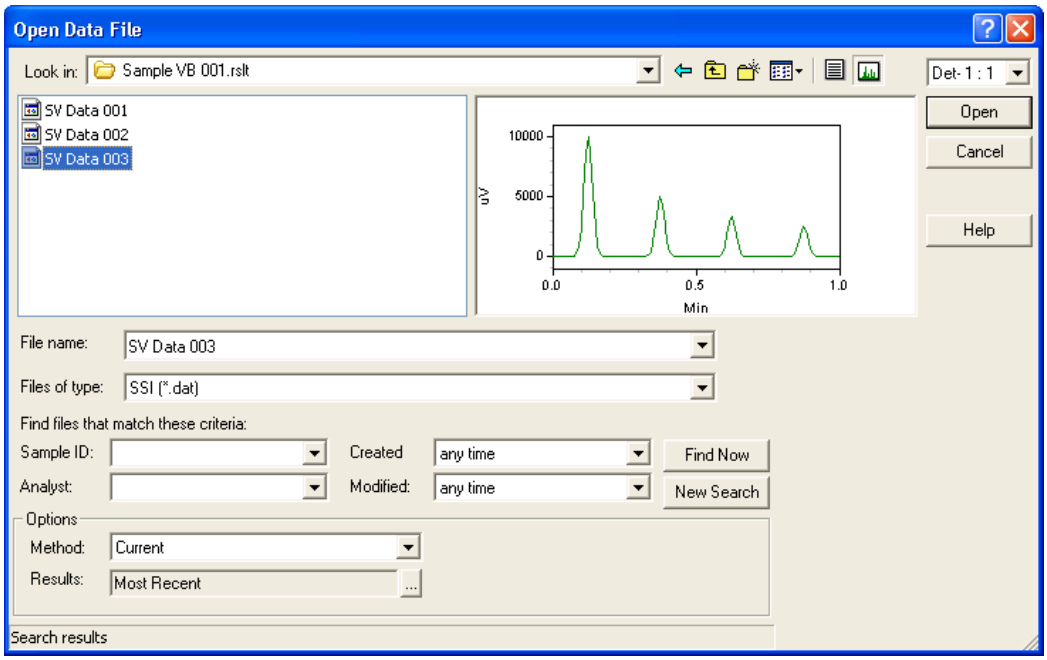
É possível abrir um arquivo de dados arquivado se a opção **Permitir que usuários naveguem fora do projeto** estiver ativada no Painel de Controle para este projeto. Para ativar esta opção, consulte a Ajuda do Painel de Controle, **Editar um Projeto.**

Se esta opção não estiver ativada, é necessário em primeiro lugar:

a. Desarquivar os arquivos no Armazenamento de Dados. Consulte a Ajuda do Armazenamento de Dados, **Arquivar e desarquivar pastas e arquivos.**

b. Restaurar o projeto no Painel de Controle. Consulte a Ajuda do Painel de Controle, **Restaurar um projeto a partir do arquivo de Armazenamento de Dados**.

4. Selecione o arquivo de dados e clique em **Abrir**.


Open Data File
Look in:
Sample VB 001.rslt
Det- 1 : 1
SV Data 001
SV Data 002
SV Data 003
10000
5000
0
uV
0.0
0.5
1.0
Min
Open
Cancel
Help
File name:
SV Data 003
Files of type:
SSI (*.dat)
Find files that match these criteria:
Sample ID:
Created
any time
Find Now
Analyst:
Modified:
any time
New Search
Options
Method:
Current
Results:
Most Recent
Search results

Abrir um arquivo aberto recentemente

Para abrir um arquivo aberto recentemente, selecione **Arquivo > Arquivos recentes** e escolha o arquivo da lista.

Para alterar o número de arquivos recentes listados, consulte Alterar preferências de exibição.

Salvar um método

Quando tiver concluído as seções para criação de um método de aquisição de dados, salve o arquivo em seu disco rígido antes de usá-lo para a aquisição dos dados.

A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão um pouco diferentes para sistemas com a segurança avançada de arquivos habilitada. Os usuários serão limitados a armazenar arquivos na pasta de projeto atual e na pasta corporativa comum.

Importante

O comando **Salvar como > Método** impactará apenas o método selecionado. Não impactará o método se a sequência for executada novamente. Para atualizar o Método principal, consulte Atualizar o método principal.

Para salvar um método com o nome do arquivo atual:

Selecione **Arquivo > Salvar > Método.**

Para salvar um método com um novo nome do arquivo:

1. Selecione **Arquivo > Salvar como > Método**.
2. A caixa de diálogo **Salvar arquivo de método** como é exibida com a pasta de métodos em seus arquivos do projeto, e o tipo de arquivo é definido como **.met**.
3. No campo **Nome do arquivo**, digite o nome do arquivo.
4. Selecione **Salvar**.

Salvar um método principal

Para impactar o método se a sequência for executada novamente, atualize o Método Principal

Para salvar as alterações ao método principal, selecione, na barra de ferramentas **Arquivo > Atualização Máster > Método**.

O comando **Salvar como > Método** impactará apenas o método selecionado. Não impactará o método se a sequência for executada novamente. Para salvar como um método regular, consulte Salvar um método.

Salvar uma sequência

Depois de criar ou editar uma sequência, você deve salvá-la em disco para que ela possa ser usada para adquirir ou processar dados.

A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão um pouco diferentes para sistemas com a segurança avançada de arquivos habilitada. Os usuários serão limitados a armazenar arquivos na pasta de projeto atual e na pasta corporativa comum.

Para salvar uma sequência com o nome do arquivo atual:

1. Selecione **Arquivo > Salvar > Sequência**.

Para salvar uma sequência com um novo nome do arquivo:

1. Selecione **Arquivo > Salvar como > Sequência.**
2. A caixa de diálogo **salvar arquivo de sequência como** abre a pasta de sequência em seus arquivos do projeto, e **Salvar como tipo** é definido em **.seq**.
3. No campo **Nome do arquivo**, digite o nome do arquivo.
4. Selecione **Salvar**.

Veja também

Abrir um arquivo de sequência

Editar uma sequência

Salvar um conjunto de resultados

Para salvar um conjunto de resultados, selecione **Arquivo > Salvar > Conjunto de resultados**.

Veja também

Sobre a sequência de resultados

Salvar um arquivo de dados

Com o EZChrom é possível abrir diversos formatos de terceiros, como AIA, CDF e PE. Ao abrir algum desses arquivos, a opção Salvar como 32-bit está habilitada. Isto permite ao usuário salvar o arquivo no formato e estrutura original do EZChrom listados em Sobre estrutura do arquivo de dados.

Esse comando salvará o arquivo de dados atual com o método atual em um único arquivo. Esse comando é habilitado somente quando o arquivo de dados atual não está no formato de dados do Elite 32 bits (como 16 bits ou arquivos convertidos). Para respeitar práticas de laboratório recomendadas, não é possível salvar como 32 bit usando o mesmo nome de um arquivo de dados existente, a menos que o arquivo esteja localizado em um diretório "Público". Uma pasta pública é onde o caminho contém o termo "público". Os arquivos de dados em todas as demais pastas do sistema de dados são protegidos contra substituição.

A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão um pouco diferentes para sistemas com a segurança avançada de arquivos habilitada. Os usuários serão limitados a armazenar arquivos na pasta de projeto atual e na pasta corporativa comum.

Para salvar um arquivo de dados:

1. Na barra de ferramentas, selecione **Arquivo > Salvar como > Dados como 32-bit**.
2. A caixa de diálogo **salvar arquivo de dados como** abre a pasta de dados em seus arquivos do projeto, e os **Salvar como tipo** é definido em **.dat**.
3. No campo **Nome do arquivo**, digite o nome do arquivo.
4. A aparência e o comportamento da caixa de diálogo serão diferentes de acordo com o tipo de armazenamento. Continuar procedimento para:
    - Armazenamento com base em arquivos
        a. Para salvar seus dados em uma pasta diferente, selecione-a no menu suspenso **Salvar em**.
        b. No campo **Descrição**, revise ou altere a descrição de dados, se necessário.

c. Marque a caixa **Compactar dados** para salvar o arquivo em um formato compactado. Depois de salvo no formato compactado, ele será "descompactado" automaticamente sempre que o arquivo for aberto. No entanto, depois que um arquivo for salvo no formato compactado, você deverá usar um comando "salvar como" para salvá-lo novamente no formato descompactado.

- Armazenamento Dados

a. Para salvar seus dados em uma pasta diferente, selecione-a no painel de navegação.

b. Para obter mais informações, selecione a **Ajuda** do Armazenamento Dados.

5. Selecione **Salvar**.

Abrir um modelo

Para abrir e criar um método, sequência, preparação de amostra ou relatório com um modelo:

1. Selecione **Arquivo > Novo**.
2. Na caixa de diálogo **novos modelos de arquivo** selecione o modelo que queira usar de base em seu novo método, sequência, preparação de amostra ou relatório.
3. Selecione **OK**.

Salvar como um Relatório

Para salvar um arquivo como Relatório, selecione **Arquivo > Salvar como > Método, Sequência**, ou**Dados como 32 bit** e acesse a pasta **Relatório** em seu diretório.

Sobre a janela do cromatograma

Quando houver dados a serem exibidos, eles serão mostrados em uma janela do cromatograma.

Para acessar comandos especializados da janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse na janela. Esses comandos permitem adicionar gráficos ou cromatogramas à janela, alterar a aparência, as anotações e os eixos, realizar operações matemáticas em cromatogramas, além de exibir ou alterar as propriedades dos traços existentes na janela.

Veja também

Exibir lado a lado ou sobrepor dados

Rolar o cromatograma

Adicionar um traço

Configuração dos eixos

Anotações

Alterar a aparência do cromatograma

Zoom

Limpar sobreposições

Operações

Copiar para área de transferência

Imprimir um traço

Salvar um traço

Remover um traço

Programação gráfica

Definir limites para eixos X e Y

Sobre a integração

Exibir lado a lado ou sobrepor dados

Ao exibir dados de vários métodos de canal, opte por exibir todos os canais em uma janela separada (**Exibir > Dados lado a lado)**, ou você pode sobrepor todos os canais em uma única janela (**Exibir/Sobrepor dados**). Quando todos os canais forem sobrepostos em uma única janela, ainda assim será possível ampliá-la e alterar as aparências do canal individual, conforme a descrição abaixo.

No modo **Lado a lado**, é possível organizar a forma como as janelas são dispostas lado a lado na tela usando o comando **Janela > Em cascata, Janela>Lado a lado horizontalmente** ou o comando **Janela > Lado a lado verticalmente**.

Rolar o cromatograma

Uma vez ampliado um cromatograma, é possível rolá-lo para a direita ou esquerda sem perder o zoom. Isso é feito pressionando as teclas **Ctrl+Shift** e movendo o mouse até que o cursor seja alterado para uma "mão" e arrastando-o para a esquerda ou para a direita.

Você também pode rolar o eixo X ou Y para exibir recursos que talvez estejam fora do intervalo. Para isso, pressione as teclas **Ctrl+Shift** enquanto o cursor do mouse permanece fora da área do gráfico, mas próximo do eixo de interesse. O cursor será alterado para uma seta para cima/baixo próxima do eixo Y, ou uma seta para esquerda/direita próxima do eixo X. Mover o mouse nesse modo irá rolar o gráfico para cima/baixo ou para esquerda/direita no eixo.

Para restaurar o modo de exibição original, na janela do cromatograma, clique no botão direito do mouse e clique em **Unzoom Total**.

Adicionar um traço

É possível exibir traços múltiplos em uma única janela do cromatograma. Isso é prático caso você queira, por exemplo, comparar uma corrida anterior com os dados atuais ou sobrepor um perfil de forno ou bomba.

Para adicionar um novo traço à janela do cromatograma:

1. Clique com o botão direito do mouse na janela do cromatograma e selecione **Adicionar traço**. Selecione das seguintes opções:

- **Dos dados atuais** - Essa seleção permite selecionar um traço dos dados do cromatograma atual.
- **De outros arquivos de dados** - Isso permite selecionar um arquivo de dados armazenados de onde se pode selecionar um traço a ser exibido. Caso escolha esta opção, selecione um arquivo de dados em **Abrir arquivo de dados**.

- **Do método atual** - Essa seleção permite selecionar um traço do método atual (caso disponível). Por exemplo, você poderia carregar um programa de temperatura forno de um método de instrumento HP5890.

2. Na caixa de diálogo **propriedades do gráfico de dados**, selecione a guia **Configuração do traço**. Cada uma das linhas da planilha representa um dos traços na janela do cromatograma atualmente. Os detalhes do traço realçado são exibidos nas caixas de propriedades do traço, na parte inferior da caixa de diálogo onde é possível exibi-los ou alterá-los. Preencha os campos a seguir:

Mostrar	Clique nessa caixa para mostrar o traço na janela do cromatograma. Desmarque essa caixa para remover o traço da exibição (mas deixando-o aberto). Essa é uma forma prática de remover temporariamente um traço da janela de exibição.
Legenda	Clique nessa caixa para mostrar a legenda do traço. A legenda é exibida no canto superior direito da janela e exibe o nome do traço. Desmarque essa caixa para remover a legenda desse traço da janela do cromatograma. A configuração da aparência da legenda (cor, etc.) é feita na **guia aparência** do item Gráfico. Nota: Se você não ativar a Legenda na caixa de diálogo **configuração dos eixos**, ela não terá nenhum efeito.
Fonte de dados	Digite o nome do arquivo do qual que obter o traço. Também é possível clicar no botão **Arquivo** adjacente ao campo e selecionar uma fonte de dados das opções listadas acima.
Traço	Selecione o traço a ser exibido. Clique no botão para exibir traços disponíveis.
Escala em	Selecione uma das opções de escala: • **Traço x** Com escala relativa a outro traço na janela. • **Definido pelo usuário** Permite que você digite um valor mínimo e máximo de Y. • **Normalizado** Permite que você normalize um traço para caber no gráfico.

Y mín	Caso você tenha selecionado uma escala definida pelo usuário, especifique o valor mínimo do eixo Y.
Y máximo	Caso você tenha selecionado uma escala definida pelo usuário, especifique o valor máximo do eixo Y.
Unidades	Selecione as unidades para exibição.
Desvio de X	Especifique um valor em unidades para o desvio do eixo X.
Escala de X	Se desejar, especifique um multiplicador a ser aplicado a todo o traço aqui.
Desvio de Y	Especifique um valor em unidades para o deslocamento do eixo Y.
Escala de Y	Se desejar, especifique um multiplicador a ser aplicado a todo o traço aqui.
Anotações	Clique nesse botão para exibir a caixa de diálogo das anotações do traço.
Ocultar detalhes	Clique nesse botão para ocultar os detalhes do traço atual e exibir apenas a planilha.
Zerar escala	Clique nesse botão para restaurar os valores originais da escala.

3. Selecione **OK**.

Para realizar operações matemáticas nos dois cromatogramas, consulteSobre operações do cromatograma.

Configuração dos eixos

A guia Configuração dos eixos permite configurar a aparência do eixo no cromatograma. Essas configurações se aplicam a traços ativos.

Para alterar as propriedades dos eixos:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Configuração dos eixos**, ou em **Propriedades > Configuração dos eixos.**

2. Os seguintes campos estão disponíveis:

- **Título do gráfico** - Digite um título para o gráfico, se desejado. Ele é exibido na parte superior do gráfico.

- **Eixo** - Usando a lista suspensa, selecione o eixo de interesse: eixo Y esquerdo, eixo Y direito ou eixo X. Em seguida, na seleção, é possível escolher os limites do eixo.

Em seleções do eixo Y, você pode escolher **Usar limites do traço** para obter os limites de um dos traços na janela, ou é possível selecionar a caixa **Definir manualmente os limites do traço a** e definir os limites do eixo Y de acordo com o intervalo desejado. Se você escolher Nenhum, nenhum valor de eixo Y será exibido.

Para o eixo X, você pode optar por usar a **Escala automática**, aonde o eixo X é definido como o maior traço. Ou você pode definir um intervalo absoluto para o eixo X clicando no botão **Usar intervalo** e, em seguida, digitar valores de eixo X mínimo e máximo para o traço. Clique no botão **Obter limites atuais do eixo** para recuperar a faixa eixo X do traço atual.

- **Margens** - Especifique um valor referente às margens do traço, em porcentagem, para a parte superior e inferior do gráfico.

- **Opções gerais** - Marque as caixas de seleção para ativar e desativar essas anotações gráficas. Caso a caixa da legenda seja marcada, a legenda de um traço pode ser ativada ou desativada na planilha de propriedades do traço.

- **Orientação** - Selecione a orientação retrato ou paisagem para o gráfico, clicando no botão apropriado.

Anotações

Para alterar as anotações no cromatograma:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Anotações**.

3. Na caixa suspensa, selecione **Picos**, **Grupos, Frações** ou **SEC**. Caso tenha a opção da SEC instalada, você pode selecioná-la para anotar recursos SEC específicos no cromatograma.

4. Clique em uma **Anotação disponível**. Quando uma anotação está realçada, é possível adicioná-la às anotações a serem mostradas, clicando na seta **Verde** (apontando para a direita). Isso também pode ser feito clicando-se duas vezes na seleção.

5. Para determinadas anotações, você também pode designar o número de casas a serem exibidas à direita do ponto decimal. Digite esse valor na caixa **casas decimais** para o item realçado.

6. Clique na(s) caixa(s) de seleção para exibir **Linha de base**, **Largura da USP** ou **Janelas do Tempo de Retenção, Mostrar picos nomeados não detectados e Intervalos do grupo** e **FRC Real** no traço. Com a opção da SEC instalada, você terá acesso a recursos de anotação da SEC adicionais. É preciso ter um Coletor de Fração instalado para que FRC Real esteja disponível.

   Nota: A anotação na janela Pico de referência exibe o conjunto de janelas na tabela de picos. Essa janela não é ajustada de acordo com o tempo de retenção relativa.

7. Caso você queira aplicar as alterações feitas na anotação a todos os canais abertos, clique no botão **Aplicar a tudo**. Se quiser aplicar as alterações ao cromatograma aberto, selecione **OK**.
   As anotações não são salvas como parte do método, sendo consideradas uma função do aplicativo do instrumento. Se você fechar um método e reabri-lo, as configurações atuais se aplicarão.

Alterar a aparência do cromatograma

É possível alterar a aparência do traço (tipo de linha, cor etc.) na guia **Aparência** na caixa Propriedades. Clique nessa guia para exibir a caixa de diálogo da guia Aparência.

Para alterar a aparência de um cromatograma ou traço:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Propriedades**.

2. Clique na guia **Aparência** . Os seguintes campos estão disponíveis:

- **Esquema** - Caso tenha salvado um esquema de aparência no disco, é possível selecioná-lo nessa caixa. O botão **Salvar como** permite salvar o esquema de aparência existente no disco dando a ele um nome. O botão **Excluir** permite excluir um esquema e recomeçar.

- **Item** - Esta lista suspensa permite selecionar qual parte da janela do cromatograma você deseja alterar a aparência. Entre as opções estarão o próprio gráfico (inclusive o sinal de fundo e as legendas) e os traços disponíveis.

- **Subitem** - Selecione o subitem que você deseja modificar. As opções serão alteradas de acordo com o item selecionado. Por exemplo, se o item selecionado for o Gráfico, você terá acesso à configuração das aparências dos subitens, inclusive do sinal de fundo, dos eixos e dos títulos do gráfico. Se o item selecionado for um canal de dados do cromatograma, você terá acesso à configuração das aparências dos subitens, como linhas de base, marcas de início e fim, além de anotações. Se o item selecionado for texto, você também terá acesso aos comandos de formatação em **Fonte**.

Quando um subitem for selecionado, você terá acesso a campos apropriados ao item. Por exemplo, se você escolheu o subitem da **linha de base**, você poderá escolher a cor e o tipo de linha. Se você escolheu o subitem da **anotação**, você poderá escolher a aparência e a cor da fonte.

É possível alterar a aparência de qualquer traço sem adicionar um novo traço usando um clique com o botão direito do mouse na janela do cromatograma e, em seguida, selecionando o comando **Aparência...**. Quando selecionar esse comando, você verá uma caixa de diálogo idêntica à mostrada acima da guia Aparência.

Os subitens disponíveis na guia Aparência são os seguintes.

Item	Subitem	Descrição
Gráfico	Fundo	Selecione a cor de fundo do gráfico. Preto é o padrão.
Gráfico	Título	Selecione uma cor e a fonte do título do gráfico. Deve haver um título do gráfico definido na guia Configuração dos eixos para que ele seja exibido na janela.
Gráfico	Eixo Y esquerdo	Selecione uma cor para o eixo Y esquerdo do gráfico.
Gráfico	Marcas máx. eixo Y esquerdo	Selecione uma cor de exibição das marcas de unidade maiores no eixo Y esquerdo.
Gráfico	Marcas mín. do eixo Y esquerdo	Selecione uma cor de exibição das marcas de unidade menores no eixo Y esquerdo.
Gráfico	Eixo Y esquerdo ativado/desativado	Ativa ou desativa o eixo Y esquerdo
Gráfico	Eixo Y direito	Selecione uma cor de exibição de um eixo Y direito.
Gráfico	Marcas máx. eixo Y direito	Selecione uma cor de exibição das marcas maiores do eixo Y direito.
Gráfico	Marcas mín. eixo Y direito	Selecione uma cor de exibição das marcas menores do eixo Y direito.
Gráfico	Eixo Y direito ativado/desativado	Ativa ou desativa o eixo Y direito.
Gráfico	Eixo X	Selecione uma cor de exibição do eixo X.
Gráfico	Marcas máx. eixo X	Selecione uma cor de exibição das marcas de unidade maiores no eixo X.
Gráfico	Marcas mín. eixo X	Selecione uma cor de exibição das marcas de unidade menores no eixo X.
Gráfico	Eixo X ativado/desativado	Ativa ou desativa o eixo X.
Gráfico	Legenda	Selecione uma cor e/ou a fonte de exibição da legenda do gráfico. A legenda indica quais são os traços atualmente exibidos na janela. A legenda é ativada ou desativada na guia Configuração dos eixos.

Item	Subitem	Descrição
Gráfico	Grade	Selecione uma cor de exibição das linhas de grade. As linhas de grade são ativadas ou desativadas na guia Configuração dos eixos.
Dados	Traço	Selecione uma cor e/ou tipo de linha de exibição do traço selecionado.
Dados	Anotação	Selecione uma cor e uma fonte de exibição de anotações do traço. Os itens anotados para um traço são selecionados na guia Anotações.
Dados	Linha de base	Selecione uma cor e/ou tipo de linha de exibição da linha de base.
Dados	Marca de início da linha de base	Selecione uma cor e/ou tipo de linha de exibição das marcas de início da linha de base.
Dados	Marca de fim da linha de base	Selecione uma cor e/ou tipo de linha de exibição das marcas de fim da linha de base.
Dados	Largura da USP	Selecione uma cor e/ou tipo de linha de exibição da largura da USP, caso calculada.
Dados	Janela TR	Selecione uma cor e/ou tipo de linha de exibição das janelas de tempo esperado de retenção de picos nomeados.
Dados	Janela TR (indeterminada)	Selecione uma cor de exibição da Janela TR para picos esperados que não foram detectados.

Zoom

Talvez você queira examinar um cromatograma mais detalhadamente ou ampliar uma parte do cromatograma. Para fazer isso, arraste uma caixa próxima da área de interesse, mantendo o botão esquerdo do mouse pressionado e arrastando a caixa até que ele realce a seção de interesse. Em seguida, solte o botão do mouse. Para mover rapidamente até o nível anterior de ampliação, clique duas vezes no cromatograma. Para ampliar todo o cromatograma novamente depois de várias operações de ampliação, clique com o botão direito do mouse em qualquer lugar da janela do cromatograma e selecione **Unzoom Total** no menu exibido. O unzoom total do cromatograma também pode ser realizado pressionando Ctrl+Z ou Shift+clique duplo na janela do cromatograma. Assim que o cromatograma estiver na exibição ampliada, será possível rolá-lo. Consulte Rolando o cromatograma.

Na parte superior da janela do cromatograma há uma exibição de **Tempo** e **Amplitude**. Esses valores mudam conforme você move o cursor e refletem o tempo e a amplitude do traço em que o cursor está localizado. Caso tenha mais de um traço, você poderá alterar a exibição para outro traço clicando no traço do cromatograma usando o mouse. Se os traços forem exibidos em cores diferentes, a cor da exibição de tempo e amplitude refletirá a cor do traço exibido.

Limpar traços sobrepostos

É possível limpar todos os traços sobrepostos desde a janela do cromatograma atual clicando com o botão direito do mouse e, em seguida, selecionando o comando **Limpar Sobreposições** no menu pop-up.

Copiar para área de transferência

O comando copiar para área de transferência copia a janela do cromatograma atual para a área de transferência como um metarquivo. Aqui, é possível colar o modo de exibição em um documento processador de texto ou outro aplicativo compatível com a área de transferência. Para colar no Microsoft Word, você precisa usar o comando Editar/Colar Especial/Figura.

Para copiar o conteúdo da janela para a área de transferência:

Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Utilitários** seguido de **Copiar para área de transferência**.

Imprimir um traço

Esse comando envia a exibição da janela do cromatograma atual para a impressora.

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Utilitários**.
2. No menu **Utilitários**, selecione **Imprimir traço**.

Salvar um traço

Use esse utilitário para salvar um traço como um arquivo de dados.

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Utilitários**.
2. No menu **Utilitários**, selecione **Salvar traço**.
3. Clique no traço que você deseja salvar.
4. Na caixa de diálogo Salvar arquivo de dados como, navegue até o local para salvar o arquivo e digite o nome do arquivo.

Remover um traço

Caso você tenha vários traços na janela do cromatograma e queira remover um ou mais deles da janela, clique com o botão direito do mouse em qualquer lugar dela e selecione o comando **Propriedades**. Uma planilha será exibida onde os traços exibidos atualmente são listados.

Para remover completamente um traço da janela do cromatograma, selecione a linha clicando no número **#** e pressione a tecla **Delete** do teclado.

Para remover temporariamente o traço da janela, desmarque a caixa de seleção na coluna **Mostrar**. Clique em **OK** para retornar à janela do cromatograma.

Definir limites para eixos X e Y

Ocasionalmente, você pode querer definir um intervalo absoluto para o eixo X ou Y, ou ambos.

Para definir limites para eixos X e Y:

1. Clique com o botão direito do mouse na janela do cromatograma e selecione **Propriedades**.

2. Clique na guia **Configuração do traço** para definir os valores mínimo e máximo do eixo Y do traço. Para definir um intervalo de tensão absoluto, use a opção **Definido pelo usuário** no campo **Escala em**. Em seguida, você deve especificar um **Y Mín** (valor mínimo do eixo Y) e um **Y Máx** (valor máximo do eixo Y) para cada cromatograma. Caso você queira que todos os cromatogramas sejam exibidos usando a mesma escala de tensão, especifique os mesmos valores para todos os cromatogramas.

3. Clique na guia **Configuração dos eixos** para definir intervalos absolutos do traço. Selecione **Eixo X** para definir o intervalo do eixo X. Clique em **Escala automática** para definir o faixa eixo X automaticamente como o intervalo do maior cromatograma (a seleção padrão) ou clique em **Usar intervalo** para especificar um intervalo absoluto em minutos. O botão **Obter limites atuais do eixo** abre a faixa eixo X na janela do cromatograma atual. Isso é útil porque permite usar a função de zoom para identificar a região desejada do cromatograma e especificar automaticamente os valores do intervalo.

4. Depois de definir um intervalo absoluto para um ou ambos os eixos, os cromatogramas designados serão sempre exibidos na janela do cromatograma usando esses intervalos até que você altere ou os reinicie.

5. Para zerar a escala de todos os cromatogramas de acordo com os valores padrão, clique no botão **Zerar escala**.

Operações de Cromatograma

Sobre as operações do cromatograma

Há várias operações matemáticas e de comparação do cromatograma disponíveis na janela do cromatograma. Elas são acessadas por meio de um clique com o botão direito do mouse na janela do cromatograma e da seleção de **Operações**.

Operação	Ação
Mover traço	Permite a você "pegar" e mover um traço dentro da janela do cromatograma.
Traços da pilha	Posicionam vários traços com um desvio.
Alinhar	Ajusta um segundo cromatograma de forma que um pico (ou ponto) de um cromatograma seja alinhado com um pico (ou ponto) no primeiro cromatograma.
Alargar	Realiza uma contração ou expansão em dois pontos do cromatograma um em relação ao outro.
Normalizar	Normaliza um ou mais cromatogramas em relação ao primeiro, ajustando as alturas de forma que a altura no ápice de um pico selecionado corresponda à do pico selecionado no primeiro traço.
Suavizar	Realiza uma operação de suavização de Savitsky-Golay de 9 pontos em um traço selecionado.
1ª derivada	Calcula e exibe a 1ª derivada de um traço selecionado.
2ª derivada	Calcula e exibe uma 2ª derivada de um traço selecionado.
Adicionar	Adiciona dois traços e exibe o resultado.
Subtrair	Subtrai dois traços e exibe o resultado.
Multiplicar	Multiplica um traço por outro e exibe o resultado.
Dividir	Divide um traço por outro e exibe o resultado.

Mover um traço

Para "pegar" um traço e movê-lo usando o mouse:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Operações** seguido de **Mover traço**.

2. "Pegue" o traço clicando com o botão esquerdo do mouse e arraste-o para um novo local. Quando você soltar o botão do mouse, o traço será colocado onde o cursor estava localizado quando você soltou o botão.

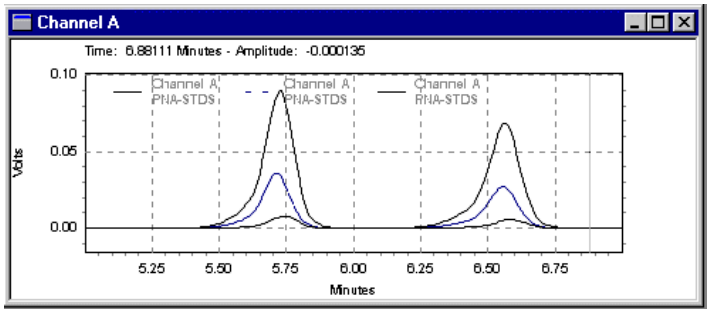
3. Você pode continuar movendo traços. Quando terminar, clique com o botão direito do mouse e selecione **Operações** seguido do comando **Mover traço** novamente para desativar a operação de movimentação do traço.

Traços da pilha

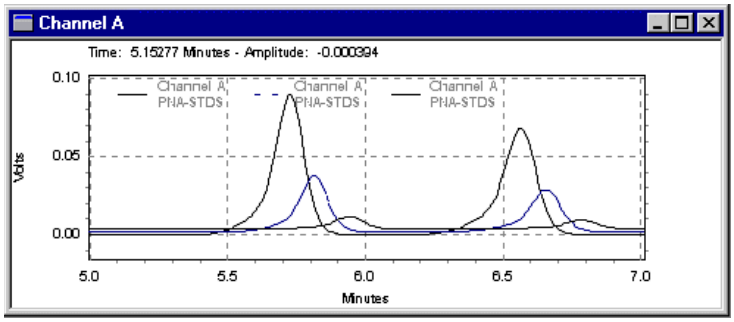
Para alterar rapidamente o desvio de um traço nos eixos X e Y:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Operações** seguido de **Traços da Pilha...**.

2. Especifique um novo desvio do eixo X e do eixo Y e clique em **OK**. O desvio será aplicado a traços adicionais exibidos na janela do cromatograma.



Cromatogramas antes do empilhamento



Cromatogramas depois do empilhamento

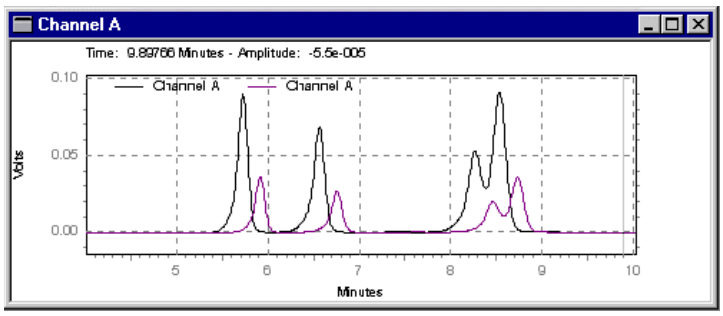
Para remover esses deslocamentos:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Propriedades.**
2. Clique na guia **Configuração do traço** e, em seguida, role para a direita das colunas de desvio dos eixos X e Y, onde é possível excluir ou alterar essas configurações.
3. Clique no botão **Zerar escala** para restaurar os valores originais de TODAS as configurações. Ou é possível usar novamente o comando **Pilha**, digitando "0" para ambos os parâmetros de pilha.

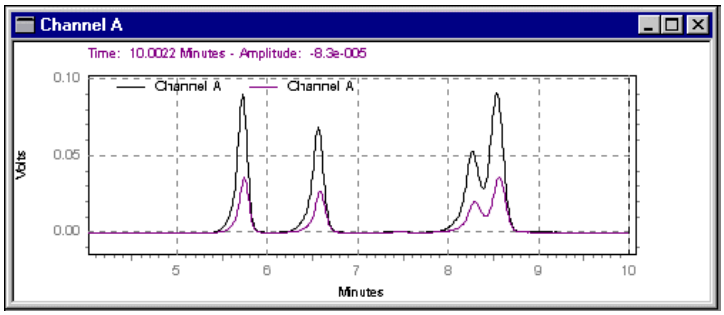
Alinhar dois traços

Para alinhar um cromatograma a outro:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Operações** seguido de **Alinhar**. Clique primeiro no ponto do cromatograma inicial ao qual deseja alinhar os outros, então clique no pico (ou ponto) do segundo cromatograma que queira alinhar ao primeiro ponto. O segundo cromatograma será ajustado de forma que o pico (ou ponto) clicado depois será alinhado com o primeiro ponto clicado.
2. Para remover o alinhamento, use o botão direito do mouse/comando **Propriedades** para exibir a planilha de traço. Clique na guia **Configuração do traço** e, em seguida, role para a direita das colunas de desvio dos eixos X e Y, onde é possível excluir ou alterar essas configurações. Clique no botão **Zerar escala** para restaurar os valores originais de TODAS as configurações.



Cromatogramas antes do alinhamento.



Primeiro pico do cromatograma superior alinhado com o primeiro pico no cromatograma inferior.

Alargar um cromatograma

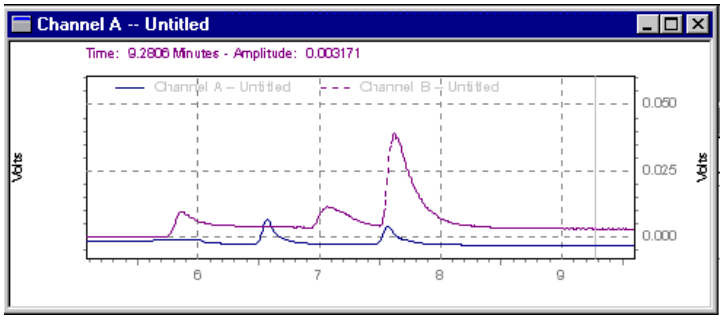
A função de alargar permite realizar uma contração ou expansão em dois pontos do cromatograma em relação um ao outro.

Para alargar um cromatograma:

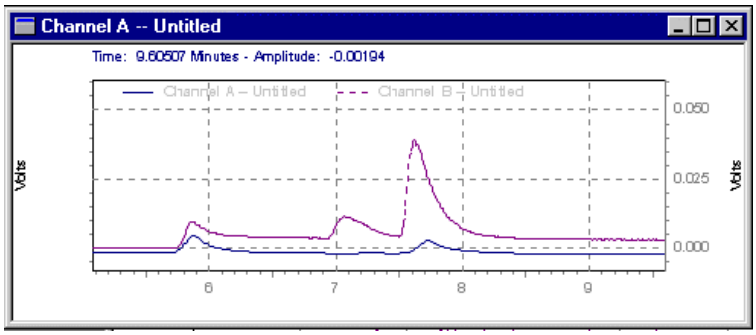
1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Operações** seguido de **Alargar**.
2. Selecione pontos (ou picos) no primeiro cromatograma até o qual o segundo será alargado (ou contraído).
3. Selecione dois pontos no segundo cromatograma. O cromatograma entre esses dois pontos será alargado ou contraído de acordo com os dois pontos especificados no cromatograma original.

Para desfazer o alargamento:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Propriedades**. Clique na guia **Configuração do traço** e, em seguida, role para a direita das colunas de desvio dos eixos X e Y, onde é possível excluir ou alterar essas configurações. Clique no botão **Zerar escala** para restaurar os valores originais de TODAS as configurações.



Cromatogramas antes do alargamento.

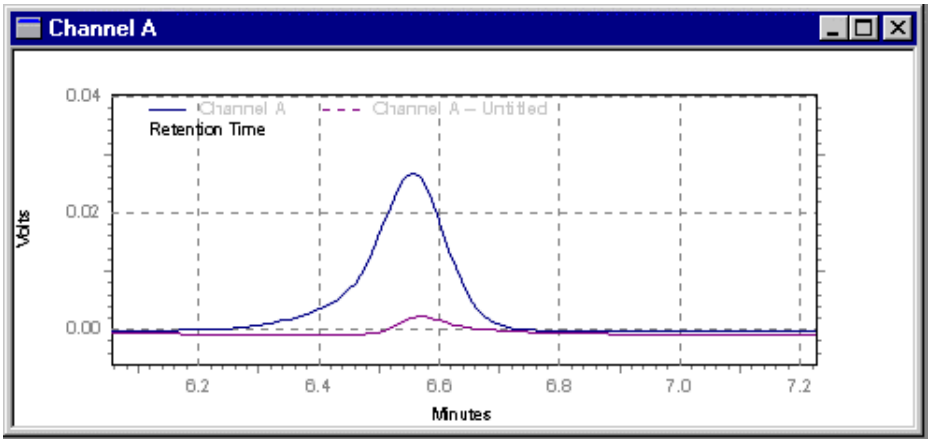


Cromatograma inferior alargado em relação ao superior.

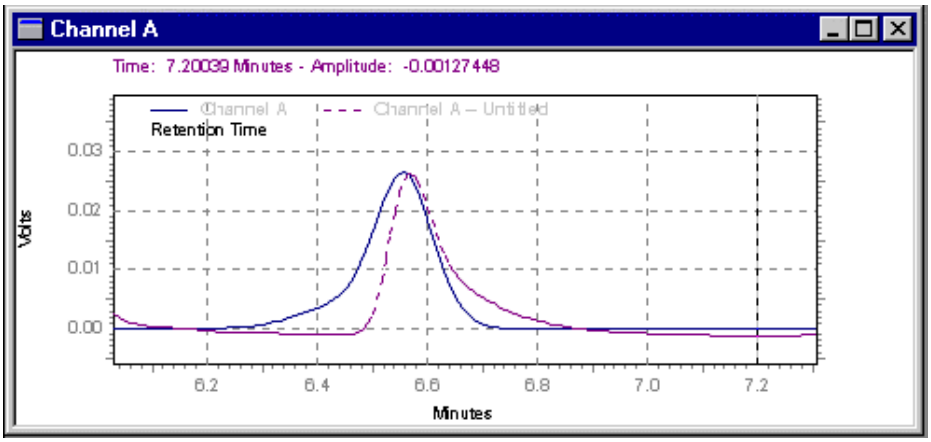
Normalizar traços

Essa função permite normalizar um ou mais cromatogramas em relação ao primeiro ajustando as alturas, de forma que a altura no ápice de um pico selecionado corresponda à do pico selecionado no primeiro traço. Depois de selecionar esse comando, o sistema solicitará que você selecione o início e, em seguida, o vértice de um pico no primeiro traço. Em seguida, o sistema solicitará que você clique no início e no vértice de um pico no segundo traço, tendo em vista a normalização.

Para desfazer a normalização, use o botão direito do mouse/comando **Propriedades** para exibir a planilha de traço. Clique na guia **Configuração do traço** e, em seguida, role para a direita das colunas de desvio dos eixos X e Y, onde é possível excluir ou alterar essas configurações. Clique no botão **Zerar escala** para restaurar os valores originais de TODAS as configurações.



Cromatogramas antes da normalização.



Depois da normalização.

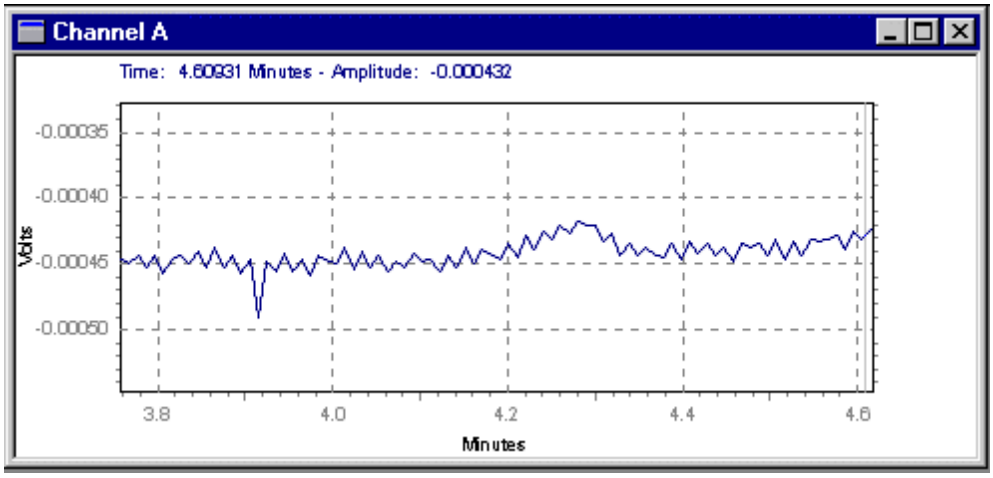
Você pode definir o traço padrão para normalizado por usuário em cada instrumento. Consulte Alterar preferências de exibição para obter mais informações.

Suavização

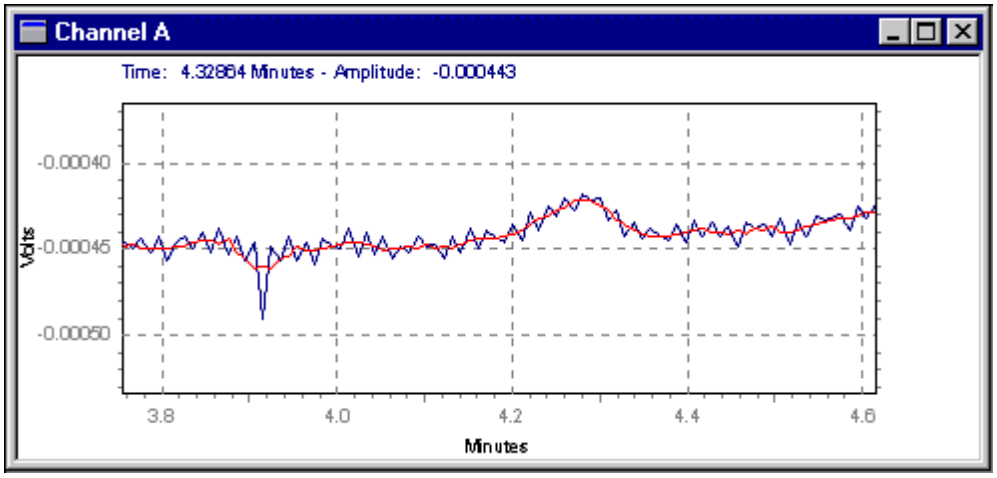
Para realizar uma operação de suavização de Savitsky-Golay de 9 pontos em um arquivo de dados selecionado:

1. Clique com o botão direito do mouse na janela do cromatograma, selecione **Operações**, e clique em **Suavizar**. Uma solicitação será exibida na janela o instruindo a **clicar no traço**.

2. Clique no cromatograma a ser suavizado. O traço dos resultados será exibido na janela.



Cromatograma antes da suavização.



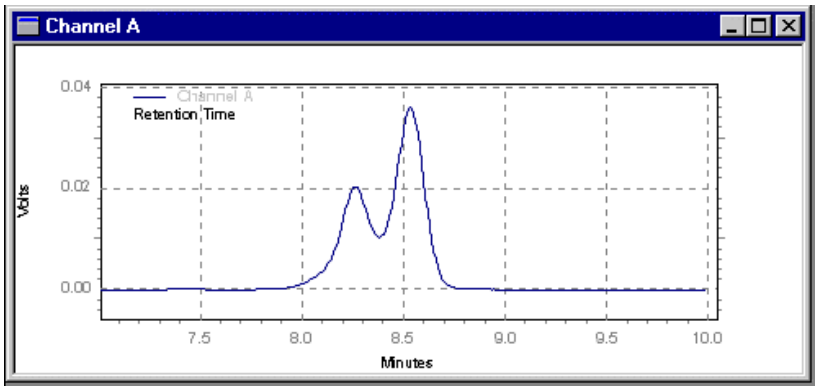
O traço dos resultados suavizado é exibido com o traço original.

Calcular derivadas

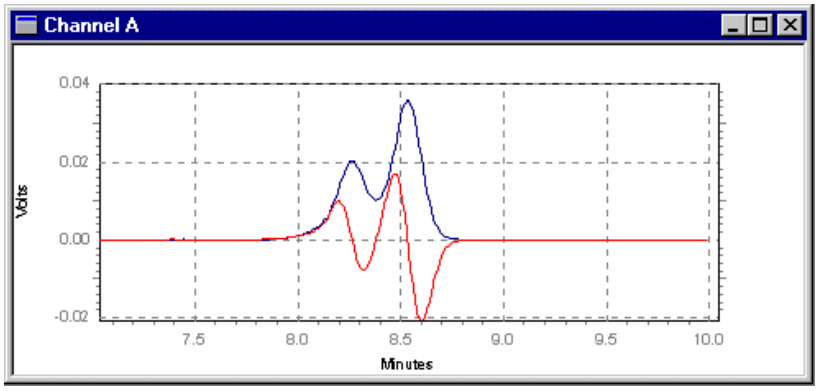
Para calcular e exibir a 1ª ou a 2ª derivada de um cromatograma:

1. Clique com o botão direito do mouse no cromatograma e selecione **Operações** seguido de **1ª Derivada** ou **2ª Derivada**. Uma solicitação será exibida na janela **clicar no traço**.

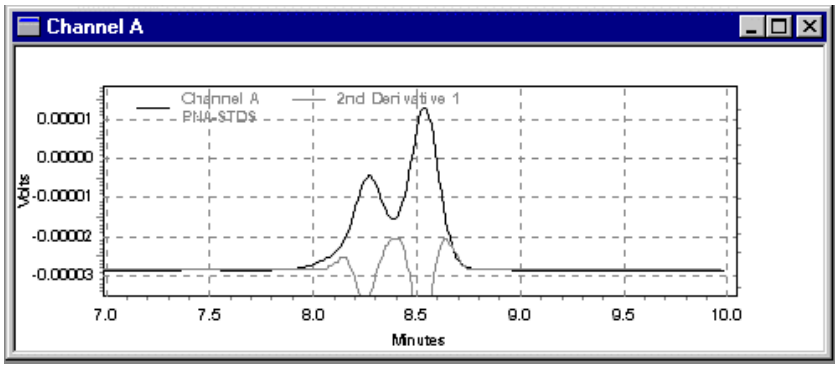
2. Clique no cromatograma para o qual você deseja realizar a operação. O traço dos resultados será exibido na janela.



Traço anterior à 1ª derivada.



1ª derivada exibida com o traço original.



2ª derivada exibida com traço original

Adicionar dois traços

Para adicionar dois traços a uma janela do cromatograma:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Operações** seguido de **Adicionar**.
2. Clique no 1º traço para selecionar o primeiro arquivo clicando com o mouse no cromatograma.
3. Clique no 2° traço para selecionar o traço a ser adicionado ao primeiro clicando no traço com o mouse. O traço dos resultados será exibido na janela. Observe que, para essa operação ser válida, ambos os traços devem ter a mesma frequência de amostragem.

Subtrair dois cromatogramas

Para subtrair dois traços:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Operações** seguido de **Subtrair**.
2. No aviso, clique no 1º traço. Selecione o primeiro traço clicando com o mouse no cromatograma.
3. Selecione o traço a ser subtraído do primeiro clicando com o mouse no traço. O traço dos resultados será exibido na janela.

Nota: Para que essa operação seja válida, ambos os traços devem ter a mesma frequência de amostragem.

Multiplicar dois traços

1. Clique com o botão direito do mouse na janela do cromatograma, selecione **Operações**, e clique em **Multiplicar.**
2. Selecione o primeiro traço clicando com o mouse no cromatograma ou no traço.
3. Selecione o traço a ser multiplicado pelo primeiro clicando com o mouse no 2º traço. O traço dos resultados será exibido na janela. Para a operação de multiplicação, as unidades do traço resultante são x .

Dividir cromatogramas ou traços

Para dividir dois traços:

1. Na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione **Operações** seguido de **Dividir**.
2. Uma solicitação será exibida na janela **clicar no 1º traço**. Selecione o primeiro traço clicando com o mouse no cromatograma.
3. Uma segunda solicitação **clicar no 2° traço** será exibida. Selecione o traço a ser dividido no primeiro clicando com o mouse no traço. O traço dos resultados será exibido na janela. A equação usada para calcular o traço dos resultados é como a que se segue.

$$p = \left(\frac{y_1}{\sqrt{y_1^2 + y_2^2}} \right) \div y_{mult}$$

Onde

p = o ponto calculado do traço dos resultados no momento t

y1 = um ponto do primeiro traço no momento t

y2 = um ponto do segundo traço no momento t

ymult = o multiplicador y do traço que o converte de microvolts a unidades exibidas do traço

Tutorial

Visão geral do tutorial

Utilize o tutorial para aprender a estabelecer um método, adquirir arquivos de dados, otimizar o método para integração e configurar a calibração. Execute todos os passos na ordem em que forem apresentados.

Veja também

Criar método

Executar amostra

Configurar parâmetros de integração graficamente

Preparar método para calibração

Calibrar método

Criar sequência de amostra

Executar sequência

Rever curvas de calibração em vários níveis

Alterar parâmetros de integração

Criar um método

O primeiro passo deste tutorial consiste em criar um método. Os métodos contêm informações necessárias para a aquisição de dados. Utilize o Assistente de Método para criar um método.

Criar um método usando o Assistente de Método

1. Selecione o ícone do **Assistente do Instrumento** .
2. Na caixa de diálogo correspondente, selecione **Criar um novo método**.
3. Cada guia na caixa de diálogo **Configuração do Instrumento** corresponde a um dos módulos configurados do seu instrumento. As guias variam dependendo do tipo de instrumento e de seus módulos configurados. Selecione cada guia para configurar os parâmetros para aquele módulo. Pressione a tecla **F1** ao visualizar cada guia para ver tópicos de ajuda específicos para aquele módulo. Consulte Configuração do Instrumento.
5. Assim que concluir o preenchimento das informações de configuração de aquisição, selecione **Arquivo > Salvar > Método.**
6. A caixa de diálogo **salvar arquivo de método como** abre a pasta de métodos em seus arquivos do projeto, e **Salvar como tipo** é definido em **.met**. No campo **Nome do Arquivo**, digite **Test.met**.
7. No campo **Descrição** revise ou altere a descrição do método, se necessário.
8. Selecione **Salvar**.
9. Saia da caixa de diálogo.
10. Em seguida, passe para Executar amostra.

Executar amostra

Agora você utilizará o método que acabou de criar para executar sua primeira aquisição de dados.

1. Para iniciar a execução, selecione **Controlar > corrida Única** na barra de ferramentas.
2. Na caixa de diálogo **Corrida Única** , localize o campo **ID da Amostra** e digite **Test**.
3. No campo **Método**, indique o nome do método que quer executar, incluindo o caminho completo. Clique no botão **Abrir Arquivo** para selecionar o **Test.met** na lista.
4. No campo **Arquivo de Dados**, escreva **Test.dat** como nome do arquivo de armazenagem. É preciso fornecer um nome de arquivo exclusivo nesse campo. Por esse motivo, se você tiver seguido este tutorial antes, será preciso primeiro excluir esse arquivo do disco ou movê-lo para um diretório diferente antes de continuar.
5. No campo **Cam. Result.:**, indique o local onde seus resultados deverão ser salvos, incluindo o caminho completo. Clique no botão **Procurar Pasta** para selecionar a pasta de resultados **. rslt** .
6. No campo **Nome Res:**, digite **Test**. Esse será o nome do seu arquivo de resultados.
7. Selecione **Submit**. Você verá os dados como foram adquiridos na janela do cromatograma em sua tela.
8. Em seguida, passe para Configurar parâmetros de integração graficamente.

Configurar parâmetros de integração graficamente

O EZChrom Elite utiliza parâmetros de integração padrão adequados para a cromatografia mais simples. A pesar disso, determinados picos poderão exigir tratamentos de integração especiais. Esses tratamentos de integração especiais são especificados em seu método como **Eventos de Integração Expirados**. Tais eventos podem ser colocados no início da corrida para aplicação a todos os picos ou inseridos em um determinado local no cromatograma, de forma que apenas alguns picos sejam afetados.

Para adicionar ao seu método eventos temporizados que desativem a integração:

1. Neste ponto, o seu cromatograma recém-adquirido deverá ser exibido na janela do cromatograma. Caso isso não aconteça, selecione **Arquivo > Abrir > Dados** e selecione seu arquivo de resultados **.rst**.

2. Na barra de ferramentas superior, clique no botão **Analisar** . Isso permitirá integraro cromatograma e exibir as linhas de base.

3. Na barra de ferramentas inferior, selecione o botão **Integração Desativada** .

4. Siga as instruções fornecidas na janela de mensagens **Integração Desativada** (consulte Para visualizar a janela de mensagem de integração). Conforme instruído na janela de mensagens, clique uma vez com o mouse em um ponto do cromatograma anterior ao ponto em que pretende desativar a integração. (Selecione uma seção do cromatograma onde ocorre a eluição de um ou mais picos.) Em seguida, clique novamente no ponto do cromatograma onde deseja reativar a integração.

5. Na caixa de diálogo **Integração Desativada**, preencha os seguintes campos:

- **Tempo início** e **Hora Parada** indicam os pontos em que clicou com o mouse. A integração será desativada entre esses pontos do seu cromatograma.

- O campo **Valor** estará configurado em zero, já que não serão necessários valores numéricos para este evento.

- **Adicionar evento ao Método (todos os dados)** selecione este campo para adicionar o evento ao método. Esse campo será usado em todos os cromatogramas analisados com esse método.

- **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados** selecione este campo para adicionar o evento somente a este arquivo de dados. O campo será aplicável somente ao cromatograma em questão.

- **Adicionar à Tabela** adicionará o evento à tabela de integração de eventos temporizados sem reintegração.

6. Clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento ao método e reintegrar o cromatograma. Seu cromatograma será redesenhado com a utilização do novo evento de integração. Observe que a área selecionada não tem linhas de base desenhadas porque a integração foi desativada para esses picos.

7. Na barra de ferramentas superior, clique no botão **Eventos de Integração** para abrir a tabela **Tabela de Eventos Temporizados de Integração**. O evento temporizado em **Integração Desativada** foi adicionado à tabela.

8. Para remover o evento do seu método, selecione o número correspondente à linha **Integração Desativada** e aperte a tecla **Delete** em seu teclado. Poderá também eliminar o evento usando os comandos **Editar > Recortar**. Para reinserir o evento, use os comantos **Editar > Colar**.

9. Para visualizar temporariamente o efeito da remoção de um evento sem na verdade removê-lo da tabela, clique na caixa de seleção adjacente ao evento para desmarcá-la. Para selecionar novamente o evento, marque a caixa de seleção novamente.

10. Assim que concluir a tabela **Eventos de Integração**, feche-a e volte para o cromatograma.

11. Em seguida, passe para Preparar método para calibração.

Preparar método para calibração

Caso esteja interessado na quantificação dos picos (cálculo de resultados baseado na execução de padrões), deverá preparar seu método de calibração. Para obter mais detalhes sobre como configurar calibrações de vários níveis consulte a seção Métodos deste manual. No entanto, para este tutorial, você configurará um único nível de calibração.

A configuração de qualquer tipo de calibração envolve as seguintes etapas.

- Identificar os Picos Calibrados e especificar quantidades padrão no método
- Executar a(s) amostra(s) padrão
- Examinar a curva de calibração

Para inserir dados de picos de calibração, execute primeiramente a amostra padrão e depois utilize o arquivo de dados armazenado para estabelecer graficamente os picos de calibração. Execute uma amostra padrão seguindo os passos apresentados em Executar uma amostra preliminar ou selecione um dos arquivos de dados proporcionado.

1. Selecione **Arquivo > Abrir > Dados** e selecione um arquivo de resultados de amostras padrão. O cromatograma se abrirá.

2. Na barra de ferramentas superior, clique no botão **Analisar** para integrar o cromatograma e exibir as linhas de base.

3. Na barra de ferramentas inferior, clique no botão **Definir Pico Único** .

4. Na caixa de diálogo **Definir Pico Único**, o tempo de retenção do primeiro pico detectado aparecerá. Para adicionar esse pico à tabela de picos, preencha os campos relacionados a seguir. Se não quiser adicionar este pico à tabela de picos, clique no botão **Próximo**. Selecione com o mouse o pico específico no cromatograma para o qual deseja ir.

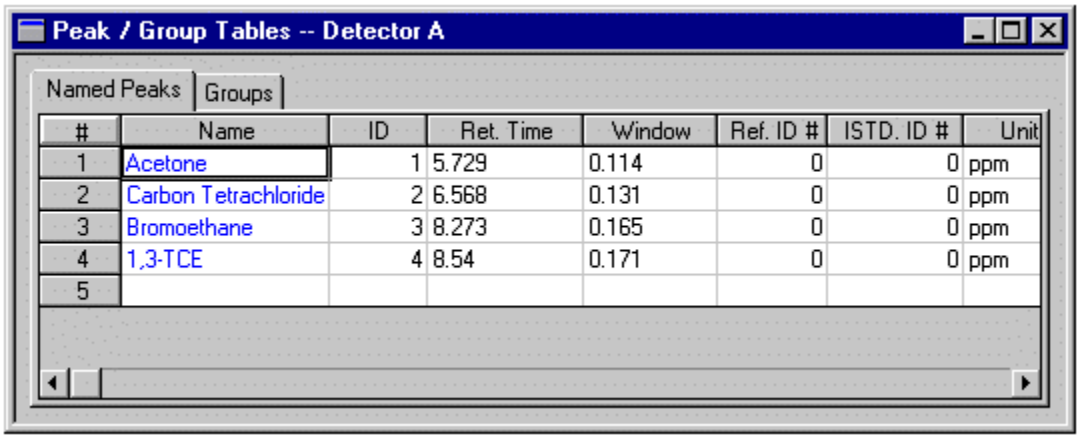
Nome do Pico	Especifique o nome do composto neste campo.
Nível de Conc	O Nível de Concentração 1 é exibido. Informe a quantidade deste composto para o nível de concentração. (Nota: para configurar mais de um nível para o composto, será preciso informar o Nível de Concentração 2 e a quantidade desse nível. Continue informando os níveis de concentração até atingir o número desejado de níveis de calibração.)
Unidades	Informe as unidades a serem usadas para exibir os resultados.
Nº do ID do ISTD	Se estiver realizando calibração do padrão interno, informe o Nº do ID do pico padrão interno do composto. Este é o número de ID do pico da tabela de picos. Caso o desconheça, você poderá adicioná-lo à tabela de picos posteriormente.
Nº do ID do Pico de Referência	Especifique um Nº de ID do pico de referência de tempo de retenção a ser usado para este pico. Este é o número de ID do pico da tabela de picos. Caso o desconheça, você poderá adicioná-lo à tabela de picos posteriormente. Os picos de referência são usados para localizar picos calibrados quando as condições cromatográficas mudam de tal forma que os tempos de retenção mudem.
Janela do Tempo de Retenção	Selecione como deseja acessar a janela de tempo de retenção relativa a este pico. A janela é usada para identificação de pico em caso de leves desvios do tempo de retenção esperado.
Relativa	Clique nesta opção se quiser que o sistema calcule a janela do tempo de retenção com base em uma¨% do tempo de retenção esperado do pico. Informe a % que deseja usar para o cálculo da janela.

Absoluto	Clique nesta opção se quiser inserir uma janela absoluta para o pico. Especifique o valor que deseja usar para a janela do tempo de retenção, em minutos.
Próximo	Selecione esta opção para ir para o próximo pico no cromatograma.
Posterior	Selecione esta opção para ir para o pico anterior detectado no cromatograma.

5. Selecione **Concluído**.

6. Na barra de ferramentas superior, selecione o botão **Tabelas de Pico/Grupo** .

7. Na caixa de diálogo **Tabelas de Pico/Grupo**, selecione a guia **Picos nomeados**. Cada pico definido corresponderá a uma linha na planilha Tabela de Picos, com o tempo de retenção e os parâmetros que você indicou.



#	Name	ID	Ret. Time	Window	Ref. ID #	ISTD. ID #	Unit
1	Acetone	1	5.729	0.114	0	0	ppm
2	Carbon Tetrachloride	2	6.568	0.131	0	0	ppm
3	Bromoethane	3	8.273	0.165	0	0	ppm
4	1,3-TCE	4	8.54	0.171	0	0	ppm
5							

8. As informações contidas na planilha podem ser editadas. Cada coluna representa um parâmetro de calibração, incluindo os **Níveis**, que contêm os valores de calibração de cada composto em cada nível de calibração. É possível personalizar a Tabela de Picos de forma que somente os parâmetros necessários para uma dada calibração sejam exibidos. Para obter mais detalhes sobre o que representa cada coluna e sobre como personalizar a Tabela de Picos, consulte o capítulo Calibração neste manual.

9. Selecione **Arquivo > Salvar > Método.** Para salvar o método com um nome diferente, selecione **Arquivo > Salvar Como > Método**. Consulte Salvar método.

10. Feche a Tabela de Picos.

11. A seguir, passe para Calibrar método.

Calibrar um método

Depois de ter Preparado um método para calibração se está pronto para calibrar o método.

1. Na barra de menus, selecione **Análise > Calibração de análise para um único nível**. Na caixa de diálogo **Análise > Calibração de análise para um único nível**, atribua a informação do arquivo para sua calibração.
2. No campo **ID da amostra** digite **Teste**.
3. No campo **método**, digite o nome do método que deseja calibrar, incluindo o nome completo do caminho. Clique no botão **Abrir arquivo** para selecionar **Test.met** da lista.
4. No campo **Arquivo de dados**, digite o nome do arquivo de dados usado para calibrar o método, incluindo o nome completo do caminho. Clique no botão **Abrir arquivo** para selecionar **Test.dat** da lista.
5. No campo **Caminho do resultado**, digite o local onde os resultados serão salvos, incluindo o nome completo do caminho. Clique no botão **Procurar pasta** para selecionar a pasta de resultados **. rslt** .
6. No campo **Nome do resultado** digite **Teste**. Este é o nome do seu arquivo de resultado.
7. Deixe os **valores de quantidade** definidos como "1". Para obter detalhes sobre como esses valores são usados, consulte Sobre métodos.
8. Clique na caixa de seleção **Calibração** e especifique um "1" para **Nível de calibração**. Como este método está atualmente descalibrado, é desnecessário marcar qualquer uma das caixas relacionadas às calibrações ou às replicações. Entretanto, se não tiver certeza do conteúdo dos métodos, clique na caixa **Limpar toda calibração** antes de iniciar.
9. Selecione **Iniciar**.
   Quando a análise estiver completa, o cromatograma será integrado, e as áreas dos picos identificadas como compostos de calibração serão inseridas no método. As curvas de calibração serão geradas com o uso dessas áreas. Nesse ponto, o método é calibrado para um único nível e pode agora ser usado para executar e analisar amostras com os compostos de calibração em quantidades desconhecidas.
10. Próximo, Criar uma sequência de amostra.

Criar sequência de amostra

Se estiver usando um amostrador automático para injetar amostras, você deverá definir as amostras a serem injetadas e como elas devem ser adquiridas e analisadas. Isso é feito utilizando-se uma Sequência de amostra. Uma Sequencia de amostra pode ser usada para adquirir amostras de calibração e desconhecidas. Ela pode também ser usada para reanalisar automaticamente os arquivos de dados armazenados. Consulte a seção Sequência para obter informações sobre como criar e utilizar sequências. Nesta parte do Tutorial, você criará e utilizará uma sequência simples para adquirir uma amostra de calibração e duas ou três amostras desconhecidas.

Para criar novas sequências:

1. Clique no botão **Assistente do Instrumento** .
2. Na caixa de diálogo **Assistente do Instrumento**, selecione **Criar sequência.**
3. No campo **Método**, indique o método a ser usado para a aquisição, incluindo o caminho completo. Clique no botão **Abrir Arquivo** para selecionar o **Test.met** na lista.
4. Selecione o botão **Para aquisição**. Isso fará com que o Assistente de Sequência solicite as informações necessárias para adquirir os dados.
5. Deixe **Valores de quantidade** com seus valores padrão. Feito isso, selecione **Próximo.**
6. No campo **ID da Amostra**, selecione a flecha azul direita e selecione o **Número da Linha** e o **Nome do Método.** Isso fará com que cada amostra seja identificada com o número da linha de sequência e com o nome do método atual.
7. No campo **Arquivo de Dados**, selecione a flecha azul direita e, depois, clique em **ID da Amostra.** Isso fará com que os arquivos de dados sejam nomeados pelo ID da amostra selecionado acima. O uso de uma identificação numerada assegura que o nome do arquivo de dados de cada corrida seja exclusivo, impedindo erros que ocorrerão se você tentar adquirir os dados usando um nome de arquivo de dados existente.
8. No campo **Número de corridas desconh. em sequência:** ,digite **3**. Deixe os demais campos com os valores padrão.
9. Clique em **Próximo**.
10. Nessa caixa de diálogo. os nomes dos arquivos **ID da calibração** e **Calibração** recebem automaticamente as identificações da caixa de diálogo anterior.
11. Estabeleça para **Número de níveis de calibração:** o valor **1** e deixe **Repetições por nível:** também com o valor **1**.

12. Deixe todas as outras caixas desmarcadas e clique em **Avançar**.

13. Assinale as caixas de seleção **Incluir corridas desconhecidas no relatório resumido** e **Incluir corridas de calibração no relatório resumido**. Não marque as outras caixas de seleção.

14. Selecione **Concluir**.

15. Uma planilha de sequência será exibida, com o arquivo e os nomes de método especificados exibidos.
    Neste ponto, a sequência é configurada para executar uma amostra de calibração e três corridas desconhecidas. Observe que os IDs da Amostra e o nomes de Arquivo de Dados são numerados automaticamente para impedir duplicação. Para executar um padrão de calibração na primeira corrida, é preciso designar essa corrida como sendo de calibração. Isso foi feito automaticamente pelo Assistente de Sequência. As corridas desconhecidas têm um Nível de "0". As informações no campo Tipo de Corrida poderão ser abreviadas se houver mais de uma designação de tipo de corrida. Para exibir os Tipos de Corrida possíveis, clique na seta próxima ao tipo de corrida. Para obter detalhes sobre cada um dos tipos de corrida, consulte Definir tipos de corrida da amostra e Sobre sequências.
    Visto que o método que estamos criando neste Tutorial é uma calibração em um único nível, apenas uma corrida padrão de calibração será necessária.

16. Para salvar o arquivo de sequência da amostra, selecione **Arquivo > Salvar > Sequência**. Navegue até a pasta **Sequência**, em **Nome do Arquivo** e digite **Test.** Por padrão, os arquivos de sequência são armazenados com a extensão **.seq**. Selecione **Salvar**.

17. Em seguida, passe para Executar sequência.

Executar sequência

Uma vez criada uma sequência de amostra você estará pronto para executá-la.

1. Na barra de ferramentas, selecione o botão **Corrida da Sequência** ou clique com o botão direito do mouse na planilha da sequência e selecione **Corrida da Sequência**. Na caixa de diálogo **Corrida da Sequência**, atribua as informações do arquivo correspondente à sua sequência.

2. No campo **Nome da Sequência**, digite o nome do arquivo de sequência que deseja executar, incluindo o caminho completo. Clique no botão **Abrir Arquivo** para selecionar o **Test.seq** na lista.

3. No campo **Cam. Result.:**, indique o local onde seus resultados deverão ser salvos, incluindo o caminho completo. Clique no botão **Abrir Arquivo** para selecionar a pasta de resultados **. rslt** .

4. No campo **Nome Res:**, digite **Test**. Esse será o nome do seu arquivo de resultados.

5. Prepare o amostrador automático para injetar sua amostra padrão, seguido por 3 amostras desconhecidas.

6. Selecione **Submit**.
   Assim que a sequência estiver concluída você terá adquirido e salvado ps arquivos de dados de uma corrida padrão e três corridas desconhecidas.

7. Em seguida, passe para Rever curvas de calibração em vários níveis.

Rever curvas de calibração em vários níveis

Quando o método estiver totalmente calibrado, as curvas de calibração e os dados associados poderão ser visualizados usando-se a função **Examinar Calibração**. Para ver uma calibração em vários níveis totalmente calibrada, use o arquivo **multilevel calibration.met** fornecido com o sistema de dados. Para obter mais detalhes sobre como usar o recurso Examinar Calibração, consulte Examinar curva de calibração.

1. Selecione **Arquivo > Abrir > Método**.
2. Selecione o arquivo **multilevel calibration.met** A partir do diretório default. Ele estará localizado na pasta \datasystem\Methods. (Em que datasystem = pasta do programa de instalação.)
3. Clique no botão **Examinar Calibração** ou, se preferir, selecione o comando **Método > Examinar Calibração**.

   Os picos calibrados no método são listados na lista de picos no canto superior direito da janela. A curva de calibração mostrada é para o pico realçado. Você pode visualizar as outras curvas realçando seu nome de pico. No topo da tela, há uma planilha que mostra todas as informações de calibração, incluindo áreas usadas para criar a curva de calibração atual.
4. O tipo de ajuste da curva de calibração, por padrão, é Ponto a Ponto. Para sobrepor um tipo de ajuste diferente, clique com o botão **direito** do mouse em qualquer lugar da caixa da curva de calibração. Selecione **Tipo de Ajuste** e selecione **Linear**. Observe que a nova curva de calibração linear se sobrepõe à curva Ponto a Ponto. Na caixa à direita, as equações dos diferentes tipos de ajuste exibidos são apresentadas, junto com o cálculo de melhor ajuste, r^2, que não é feito para a curva Ponto a Ponto por ser, por definição, um ajuste perfeito para os dados.
5. Para fechar a janela, clique na caixa com um **X** no canto superior direito da janela **Examinar Calibração**.
6. A seguir, passe para Alterar parâmetros de integração.

Alterar parâmetros de integração

Um outro aspecto importante de usar um sistema de dados computadorizado é a capacidade de personalizar a integração usando os Eventos Temporizados de Integração. Nesta porção do tutorial você aprenderá a adicionar a seu método eventos temporizados de integração e a visualizar os efeitos de alguns desses eventos. Detalhes completos sobre como cada evento temporizado de integração funciona são apresentados na seção Integração.

1. Selecione**Arquivo > Abrir > Dados** e selecione o arquivo **Test.rst**.
2. Clique no botão **Analisar** para analisar o cromatograma e exibir as linhas de base. O cursor vertical move-se com o mouse. O tempo de retenção de onde o cursor está localizado é exibido no topo da janela do cromatograma.
3. Adicione o evento temporizado **Vale a Vale** para integrar o cluster de 4 picos grandes às linhas de base vale a vale. Na barra de ferramentas de integração, selecione o botão **Vale a Vale** . Feito isso, selecione uma vez o mouse antes do primeiro pico grande e novamente logo após o último pico.
4. Na caixa de diálogo **Vale a Vale**, selecione o botão **Analisar Agora** e observe o cromatograma. Observe que os picos na região do evento são agora integrados com o uso do evento vale a vale, e as linhas de base são ajustadas de acordo.
5. Clique no botão **Eventos de Integração** na fita de comando. Observe o acréscimo do evento **Vale a Vale** na tabela.
6. Remova o evento **Vale a Vale** clicando sobre o número correspondente e apertando a tecla **Delete** no teclado. Você pode também testar a integração sem o evento e ainda deixá-la na tabela de eventos temporizados, desmarcando a caixa de seleção próxima ao evento Vale a Vale e reintegrando o cromatograma.
7. Feche a tabela **Eventos de Integração** clicando no **x** localizado no canto superior direito da tabela.

Com isso você terá concluído o tutorial. Explicações detalhadas sobre como criar calibrações em vários níveis, criar relatórios personalizados e criar e usar sequências de amostra serão apresentadas nas seções posteriores. Consulte a ajuda online durante o período em que estiver usando o software.

Sobre Instrumentos

Use o painel Instrumentos no Painel de Controle para configurar e controlar os instrumentos conectados ao sistema. Consulte a ajuda do Painel de Controle para obter mais informações sobre o painel Instrumentos.

Veja também

- Configurar instrumento
- Configurar um detector analógico
- Configurar um evento externo
- Opções de configuração
- Configurar um coletor de fração
- Registro de Atividades do Instrumento
- Definir o instrumento para o modo de Suspensão ou Ativação
- Visualizar o status do instrumento

Configurar instrumento

Configuração é o processo por meio do qual o software é informado sobre os detectores, injetores ou outros componentes instalados para um instrumento. Cada instrumento deve ser configurado antes que o programa possa ser usado para obtenção de dados a partir dele.

Antes que seja possível configurar um instrumento, ele deve ser adicionado à lista de instrumentos no Painel de Controle.

Para que o programa detecte e configure automaticamente os dispositivos instalados:

1. No painel de navegação do Painel de Controle, selecione **Instrumentos**.
2. Selecione o instrumento.
3. Na barra de ferramentas **Ações**, selecione **Configurar Instrumento**.
4. Na caixa de diálogo, selecione **Configuração Automática**.
5. Na caixa de diálogo **Configuração Automática**, insira o **Número de Detectores** e o **Número de Bombas**.
6. Selecione **Amostrador automático**, se necessário.
7. Selecione **OK**.

Para escolher manualmente quais dispositivos configurar:

1. No painel de navegação do Painel de Controle, selecione **Instrumentos**.
2. Selecione o instrumento.
3. Na barra de ferramentas **Ações**, selecione **Configurar Instrumento**.
4. Na caixa de diálogo, selecione um módulo em **Módulos disponíveis** e selecione a seta para movê-lo para **Módulos configurados**.
5. Clique duas vezes em **Módulo configurado** para abrir a caixa de diálogo relacionada ao módulo. Se aplicável, consulte Configurar um detector analógico, Configurar um evento externo ou Configurar um coletor de fração.
6. Selecione **Opções**.
7. Na caixa de diálogo **Opções de configuração**, selecione uma opção Geral: **Compatibilidade do Sistema**, **SEC**, **PDA** e **Verificação da Linha de Base**.
8. Selecione **OK**.

Configurar um detector analógico

1. A partir do Painel de Controle do painel de navegação, selecione **Instrumentos**.
2. Selecione o instrumento.
3. Na barra de ferramentas **Ações**, selecione **Configurar Instrumento**.
4. Na caixa de diálogo, selecione um detector analógico em **Módulos disponíveis** e selecione a seta para movê-lo para **Módulos configurados**.
5. Em **Módulo configurado**, clique duas vezes em um detector analógico.
6. Na caixa de diálogo **Configuração do Detector**, preencha os seguintes campos:

Nome do Detector	Insira um nome descritivo para o detector. Por exemplo, FID (Detector de ionização de chama) ou TCD (Detector de condutitividade térmica).
Modelo do Detector	Selecione o tipo de detector na lista suspensa.
Fonte de Aquisição	Selecione na lista suspensa o tipo de placa ou dispositivo de áudio/vídeo que você está usando. Depois clique no botão adjacente para o configurar.
Unidades do Eixo Y	Digite as unidades a exibir no Eixo Y de seu cromatograma. Por exemplo, microvolts ou AU, dependendo das unidades de medição do detector. Seu sinal analógico é adquirido e armazenado em microvolts. Se deseja exibir o sinal em unidades diferentes, você deve usar o multiplicador correto. Consulte a tabela abaixo.
Multiplicador do Eixo Y	O cromatograma é normalmente exibido em volts. Se deseja exibir outra unidade, insira o fator de conversão a ser aplicado. Consulte a tabela abaixo.

Rótulos do eixo Y normalmente usados e multiplicadores correspondentes

Rótulos do Eixo Y	Multiplicador do Eixo Y
Volts	0.000001
Milivolts	0.001
Microvolts	1

Configurar um evento externo

Os eventos incluem gatilhos de instrumentos, válvulas e outros eventos externos definidos pelo usuário.

Para configurar eventos para um instrumento:

1. Certifique-se de que seu evento está corretamente conectado ao sistema de dados.
2. A partir do Painel de Controle do painel de navegação, selecione **Instrumentos**.
3. Selecione o instrumento.
4. Na barra de ferramentas **Ações**, selecione **Configurar Instrumento**.
5. Na caixa de diálogo, selecione **Eventos** em **Módulos disponíveis** e selecione a seta para movê-lo para **Módulos configurados**.
6. Em **Módulo configurado**, clique duas vezes em **Eventos**.
7. Na caixa de diálogo **Configuração do Evento**, preencha os seguintes campos:

Nome	Para configurar uma linha de **Gatilho** ou **Pronto**, selecione o botão suspenso e selecione **Gatilho** ou **Pronto**. Para configurar um valor ou outro evento externo, insira o nome de seu evento.
Fonte	Selecione o botão suspenso e selecione a fonte do evento (o hardware a partir do qual o evento surge).
Configuração	Selecione o botão no campo **Configuração** para abrir uma caixa de diálogo. Insira informações para a operação deste evento.

Nota – É possível atribuir os mesmos eventos a mais de um instrumento. Tenha cuidado ao atribuir eventos para que não ocorram conflitos entre instrumentos.

8 A guia **Eventos Externos** está agora disponível no **EZChrom,** em Configuração do Instrumento.

Ativar software de análise opcional

Para selecionar o software opcional ou os recursos para ativar para um instrumento:

1. A partir do Painel de Controle do painel de navegação, selecione **Instrumentos**.
2. Selecione o instrumento.
3. Na barra de ferramentas **Ações**, selecione **Configurar Instrumento**.
4. Na caixa de diálogo, selecione **Opções**.
5. Na caixa de diálogo **Opções de Configuração**, selecione a partir das opções de análise disponíveis, como: **Compatibilidade do sistema**, **SEC**, **PDA** e **Verificação da Linha de Base**.
6. Selecione **OK**.

Veja também

Configurar instrumento

Configurar um coletor de frações

1. No painel de navegação do Painel de Controle, selecione **Instrumentos**.
2. Selecione o instrumento.
3. Na barra de ferramentas **Ações**, selecione **Configurar Instrumento**.
4. Na caixa de diálogo, selecione **Configuração Automática**.
5. Em **Módulos configurados**, selecione **FRC**.
6. Na caixa de diálogo **Configuração do Coletor de Frações (FRC)**, selecione **Ajuda** ou pressione **F1** em uma seção para obter mais informações.

Veja também Configuração do coletor de frações

Registro de Atividades do Instrumento

Para visualizar o registro de atividades do instrumento, selecione Exibir > Registro de atividades do instrumento.

As seguintes informações são exibidas:

- **Usuário**
- **Registrado**
- **Fonte**
- **Atividade**

As seguintes opções estão disponíveis:

- Para atualizar o Registro de atividades do instrumento, selecione **Atualizar**.
- Para adicionar uma entrada manualmente, selecione **Adicionar entrada manualmente**.
- Para imprimir uma seleção, selecione um ou mais itens e, depois, selecione **Imprimir seleção**.
- Para imprimir todo o registro de atividades do instrumento, selecione **Imprimir tudo**.

Definir o instrumento para o modo de Suspensão ou Ativação

Pode definir o instrumento selecionado que se encontra no estado Não conectado ou Ocioso para o estado Standby selecionando Controle >Instrumento>Suspensão ou agendando tempos de suspensão e ativação específicos por meio do driver de instrumentos.

Pode definir o instrumento selecionado que se encontra no estado Standby para o estado Ocioso selecionando Controle >Instrumento>Ativação ou agendando tempos de suspensão ou ativação específicos através do driver de instrumentos. Seu hardware e método específicos determinarão o período de tempo até o instrumento atingir o estado Ocioso e estar pronto para processar amostras.

Veja também

Visualizar o status do instrumento

Visualizar o status do instrumento

É possível visualizar constantemente o status do instrumento selecionado na barra de mensagens na parte inferior da tela.

O status é mostrado como:

Não conectado (cinza)

O instrumento selecionado é configurado com o sistema e está disponível para ser usado, mas o AIC/estação de trabalho não está atualmente em execução.

Para usar este instrumento, selecione Iniciar no Painel de Controle ou Executar uma amostra ou sequência no Sistema de Dados. Seu hardware e método específicos determinarão o período de tempo até o instrumento atingir o estado Ocioso e estar pronto para processar amostras.

Standby (verde-azulado)

O instrumento selecionado está em execução em um modo de poupança de energia (por exemplo, gases e lâmpadas desligados).

Para usar este instrumento, selecione Controle >Instrumento> Ativar ou adicione uma corrida à fila de corridas e aguarde pela hora agendada de Ativação do instrumento. Seu hardware e método específicos determinarão o período de tempo até o instrumento atingir o estado Ocioso e estar pronto para processar amostras.

Ocioso (verde)

O instrumento selecionado está sendo executado e pronto para processar amostras.

Para usar este instrumento, selecione Iniciar no Painel de Controle ou Executar uma amostra ou sequência no Sistema de Dados.

Em execução (azul)

O instrumento selecionado está atualmente coletando dados.

Para usar este instrumento, envie uma corrida para a fila de corridas ou aguarde até que fique Ocioso.

Veja também

Definir o instrumento para o modo de Suspensão ou Ativação

Sobre os Métodos

Um método contém a informação sobre como uma amostra é processada. Ele contém instruções de aquisição de dados (tempo de corrida, velocidade de amostragem, etc.), integração, calibração e informações de pico, além de relatórios, bem como funções opcionais, como exportação de dados e programas do usuário.

Todos os métodos são capazes de adquirir vários canais independentes de dados de um único cromatógrafo. Cada canal pode ter seus próprios parâmetros independentes.

Use o Assistente de Método e a informação de Configuração do Instrumento para criar e salvar um método. Também é possível selecionar um novo projeto, exibir relatórios de método e editar as propriedades do método e dos dados.

Use as Opções de Método Avançado para personalizar resultados ou criar um vínculo com sistemas de dados externos ou com redes.

Caso seu instrumento tenha suporte para software de Pré-tratamento, de Monitor de Laboratório ou de Adequação do Sistema, consulte esses tópicos.

Para adicionar integração ao seu método, consulteSobre Integração.

Veja também

Criar Método com o Assistente de Método

Configuração do Instrumento

Abrir um Arquivo de Método

Salvar um Método

Salvar um Método Principal

Selecionar um Novo Projeto

Exibir Relatórios de Método

Propriedades do Método

Propriedades dos Dados

Opções de Método Avançado

Preparação de Amostra

Iniciar Software Monitor de Laboratório

Sobre a Adequação do Sistema

Criar Método com o Assistente de Método

Para adquirir dados e salvá-los no disco rígido do computador, é preciso criar um método que tenha informações de aquisição de dados, como tempo de corrida e velocidade de amostragem. Para criar um novo método ou editar um existente, use o Assistente de Método.

É possível criar um novo método, esteja o instrumento online ou não. Contudo, você só terá acesso ao início da aquisição real de dados quando tiver um instrumento online conectado.

1. Selecione o ícone do **Assistente do Instrumento** .
2. Na caixa de diálogo do Assistente do Instrumento, selecione uma das opções seguintes:

- Selecione **Criar um novo método** para iniciar um novo método com os parâmetros do método padrão do sistema.
- Selecione **Modificar o método atual** para acessar o método atual e efetuar alterações.
- Selecione **Modificar um método em disco** para abrir um arquivo salvo e acessá-lo a fim de efetuar alterações.

3. Cada guia na caixa de diálogo **Configuração do Instrumento** corresponde a um dos módulos configurados do seu instrumento. As guias variam dependendo do tipo de instrumento e de seus módulos configurados. Selecione cada guia para configurar os parâmetros para aquele módulo. Pressione a tecla F1 quando cada guia é exibida para ver tópicos de ajuda específicos para aquele módulo. Consulte Configuração do Instrumento.
5. Quando concluir a informação de configuração do instrumento Salve o Método.

Configuração do Instrumento

Os parâmetros de controle do instrumento e de aquisição são definidos na parte de configuração do instrumento do seu método. Se estiver usando um instrumento Genérico, os parâmetros serão exibidos e permitirão que você configure a aquisição. Caso tenha instalada uma das opções de controle do instrumento e esteja usando um desses instrumentos configurados, a configuração do instrumento terá parâmetros específicos para o controle do instrumento selecionado.

Cada guia na caixa de diálogo **Configuração do Instrumento** corresponde a um dos módulos configurados do seu instrumento. As guias variam dependendo do tipo de instrumento e de seus módulos configurados. Selecione cada guia para configurar os parâmetros para aquele módulo. Selecione a tecla **F1** quando cada guia é exibida para ver tópicos de ajuda específicos para aquele módulo. Alguns dos módulos comuns estão listados abaixo.

Veja também

Abrir Configuração do Instrumento
Importar Configuração do Instrumento
Detector 1
Gatilho
Eventos Externos
Verificação da Linha de Base
Traços Auxiliares
Coletor de Frações

Abrir Configuração do Instrumento

Há três maneiras de abrir a caixa de diálogo Configuração do Instrumento:

- Na barra de ferramentas, selecione o botão **Assistente de Método** e, em seguida, selecione **Criar um novo método**.
- No painel de navegação, selecione **Método > Configuração do Instrumento**.
- Na barra de ferramentas, selecione o botão **Configuração do Instrumento** .

Veja também

Importar Configuração do Instrumento

Detector 1

Gatilho

Eventos Externos

Verificação da Linha de Base

Importar Configuração do Instrumento

Este comando permite abrir os parâmetros de configuração do instrumento a partir de um método salvo.

Para importar configuração do instrumento

1. Selecione **Método > Importar Configuração do Instrumento**.
2. Na caixa de diálogo **Abrir Arquivo de Método**, selecione o método do qual deseja importar os parâmetros de configuração do instrumento.
3. Selecione **Abrir**.

Detector 1

Para configurar o detector a ser usado para um método:

1. Abrir Configuração do Instrumento
2. Na caixa de diálogo **Configuração do Instrumento**, selecione a guia **Detector**. Se nenhum gatilho for configurado, essa guia não será exibida.
3. Para cada canal do detector configurado no instrumento, defina as seguintes informações de aquisição:

Canal de Aquisição Ativo	Selecione esta caixa para ativar a aquisição deste canal. Caso ela não esteja selecionada, nenhum dado será adquirido para esse canal.
Amostragem	Esta é a taxa com que o sistema realiza a amostragem dos dados. Você pode escolher como deseja especificar a velocidade de amostragem. Quando uma velocidade de amostragem for selecionada, um prompt será exibido indicando a largura pico mais estreita para a qual essa velocidade de amostragem será adequada. **Recomenda-se usar a Programação de Eventos Gráficos a fim de determinar a velocidade ideal de amostragem para a sua cromatografia.**
Frequência	Esta seleção está em Hz (amostras por segundo). Ela é indicada para a maioria das aplicações de cromatografia. Clique na seta para baixo para obter uma lista de frequências disponíveis para a configuração do seu

	sistema.
Período	Quando esse tipo de amostragem é selecionado, é preciso selecionar o número de segundos (ou milissegundos) entre os pontos de dados. Insira o valor e defina se o período deve ser em milissegundos (ms) ou em segundos.
Tempo de Corrida	Tempo de Corrida determina por quanto tempo ocorrerá a amostragem dos dados.
Atraso na Aquisição	Atraso na Aquisição é o intervalo entre o início da corrida (Gatilho) e a hora em que a amostragem é iniciada para este canal.

Gatilho

O gatilho determina como a amostragem de dados é iniciada.

Para selecionar o tipo de gatilho usado em um método:

1. Abrir Configuração do Instrumento
2. Na caixa de diálogo **Configuração do Instrumento**, selecione a guia **Gatilho**. Se nenhum gatilho for configurado, essa guia não será exibida.
3. Selecione o **Tipo** de Gatilho para o tipo de partida remota (se houver) instalado para o instrumento que será usado. O gatilho para cada instrumento é definido durante a configuração.

Nenhum	A amostragem inicia imediatamente após se clicar em Iniciar. As aquisições de sequência não têm pausa entre as corridas.
Manual	O operador precisa pressionar ENTER para iniciar a corrida. As aquisições de sequência fazem pausa para confirmação entre as corridas.
Externo	Se a amostragem de dados for iniciada de um gatilho externo, selecione esta opção. O tipo de gatilho é indicado quando o instrumento é configurado.

Eventos Externos

Uma vez configurados os eventos externos para seu instrumento, pode-se programar os do seu método. Quando essa guia for selecionada, uma planilha será exibida. Nela você poderá selecionar os eventos e indicar quando e como eles serão ativados durante a corrida.

Para configurar eventos externos:

1. Abrir Configuração do Instrumento
2. Na caixa de diálogo **Configuração do Instrumento**, selecione a guia **Eventos Externos**. Essa guia não será exibida no menu, a menos que eventos externos tenham sido configurados para o instrumento.
3. Para programar um evento, selecione-o na lista suspensa de eventos configurados clicando no campo **Evento**.
4. Informe a hora em que o evento deve atuar, o tempo pelo qual ele deve permanecer no estado desejado (**Duração)** e o **Estado** dele durante sua ocorrência (Fechado ou Aberto).
5. Pode-se configurar até 25 eventos para a corrida.

Para visualizar ou editar o estado atual do evento:

1. Selecione **Controle > Status do Instrumento**. Essa opção não será exibida no menu, a menos que eventos externos tenham sido configurados para o instrumento.
2. Na caixa de diálogo **Status do Instrumento**, selecione a guia **Eventos Externos**.
3. Cada evento configurado é exibido em uma linha com seu **Status** atual. Para alterar o status, clique no campo exibido na coluna **Alterar Para**.
4. Selecione **Aplicar**. Se **Ignorar** estiver selecionado no campo **Alterar Para** de um evento, pressionar **Aplicar** não alterará esse evento.

Verificação da Linha de Base

Use a **Verificação da Linha de Base** para definir os parâmetros de uma verificação da linha de base durante a aquisição de dados usando esse método.

Quando um método que contenha parâmetros de verificação da linha de base for usado para aquisição de dados, uma verificação de linha de base ocorrerá nos casos:

- A caixa de seleção **Realizar Verificação da Linha de Base** for marcada na caixa de diálogo **Corrida Única** ou
- O Tipo de Corrida da Linha de sequência atual incluir **Verificação da Linha de Base**.

Quando estiver para ocorrer uma verificação da linha de base como parte da aquisição de dados, o software primeiro fará o download das condições iniciais do método para o instrumento. Essas condições iniciais são usadas para adquirir os dados de verificação da linha de base antes da aquisição normal de dados. Se os dados de verificação da linha de base não conseguirem atingir o limite para qualquer canal, a aquisição de dados será interrompida.

Se os resultados da verificação da linha de base indicarem uma falha do teste, a corrida atual será interrompida e os resultados e dados da verificação da linha de base serão armazenados no arquivo de dados sem nenhum outro dado de aquisição. Se a corrida for interrompida (pelo usuário ou em função de um erro de hardware) antes da conclusão da aquisição de dados de verificação da linha de base, nenhum dado será salvo.

Para configurar a Verificação da Linha de Base:

1. Abrir Configuração do Instrumento
2. Na caixa de diálogo **Configuração do Instrumento**, selecione a guia **Verificação da Linha de Base**. Para que essa guia apareça, Verificação da Linha de Base deve estar habilitado nas opções de configuração de um instrumento.
3. Os seguintes campos estão disponíveis:

Para ser aprovada, a linha de base deve atender aos critérios de teste por	Especifica o tempo durante o qual a linha de base deve atingir os critérios a fim de ser aprovada no teste.
Parar verificação da linha de base caso as condições não sejam atendidas depois	Especifica o tempo máximo que será gasto na verificação da linha de base. Se as condições não forem atendidas dentro desse tempo, a verificação da linha de base falhará.
Método de Teste de Ruído	Esta opção é usada para especificar o método de cálculo de ruído que deve ser aplicado aos dados adquiridos.
Planilha de Teste	Esta planilha especifica os canais a serem usados para cálculos de linha de base e os testes que devem ser

	realizados nesses canais. O número de linhas da planilha é igual ao número de canais de aquisição com base na configuração do instrumento, além do número de canais Multicromatograma do PDA definidos na janela **Opções do PDA** (se PDA estiver configurado).
Canal	Cada entrada nessa coluna contém o nome de um canal de aquisição especificado pela configuração do instrumento ou as definições de multicromatograma do PDA. As entradas não podem ser editadas.
Ativar Teste de Ruído	Marque esta caixa de seleção para indicar que o ruído do detector deve ser calculado no canal correspondente. Se esta caixa estiver desmarcada, o campo de edição Limite à sua direita ficará desabilitado; caso contrário, ficará habilitado.
Limite (Ruído)	É usado para especificar um valor aceitável máximo para o ruído calculado. Se o ruído calculado for maior que o Limite, a verificação da linha de base terá falhado.
Ativar Teste de Desvio	Marque esta caixa de seleção para indicar que o desvio do detector deve ser calculado no canal correspondente. Se esta caixa estiver desmarcada, o campo de edição Limite à sua direita ficará desabilitado; caso contrário, ficará habilitado.
Limite (Desvio/hr)	É usado para especificar um valor aceitável máximo para o desvio calculado. Se o desvio calculado for maior que o Limite, a verificação da linha de base terá falhado.

Para realizar uma verificação da linha de base quando necessário:

Selecione **Controle > Verificação da Linha de Base**. Uma caixa de diálogo aparecerá e será possível definir os parâmetros para uma verificação da linha de base.

Para verificar o status da função de Verificação da Linha de Base:

1. Selecione **Exibir > Status da verificação da linha de base**.
2. Na caixa de diálogo **Verificação da linha de base**, o **Status geral** exibe as seguintes informações de status sobre o mais recente teste de verificação da linha de base:
   - **Ruído**
   - **Desvio**
   - **Tempo de término**
3. Na tabela, o status do ruído de cada canal é exibido na coluna **Status (Ruído)**.

Traços Auxiliares

A guia **Traços Auxiliares** é usada para adquirir traços de parâmetros de status do instrumento durante a aquisição normal de dados. Muitos instrumentos têm o recurso de relatar dados de monitoramento contínuo em parâmetros de status, como velocidade de escoamento e temperatura forno. Quando esta opção é habilitada, a guia é exibida, permitindo que você indique quais parâmetros de status deseja monitorar durante a corrida. As alterações nos traços auxiliares do Comp Coluna 1100 da Agilent, do detector RI, da bomba Isocrática, da bomba Binária e da bomba Quaternária são registradas no registro de auditoria.

Para ativar a aquisição e a exibição de traços auxiliares para um instrumento:

1. Abrir Configuração do Instrumento
2. Na caixa de diálogo **Configuração do Instrumento**, selecione a guia **Traços Auxiliares**.
3. As entradas reais nessa lista irão variar dependendo da configuração do instrumento.

Para que as informações de status registradas para um parâmetro sejam listadas nessa caixa de diálogo, clique na caixa de seleção da linha em questão e selecione as unidades apropriadas do parâmetro. Quando a aquisição de dados for realizada, as informações de status também serão adquiridas. Os dados resultantes serão apresentados como um canal de dados adicional sempre que o arquivo de dados for visualizado.

Coletor de Frações

Para configurar o coletor de Frações a usar para um método:

1. Abra Configuração do Instrumento
2. Na caixa de diálogo **Configuração de Instrumento**, selecione a guia **Coletor de Fração**. Se nenhum Coletor de Fração estiver configurado, esta guia não será exibida.
3. Selecione **F1** em qualquer seção da guia **Coletor de Fração** para obter mais informações.

Selecionar um Novo Projeto

É necessário selecionar um projeto na Painel de Controle antes de poder iniciar um instrumento. Se as configurações do instrumento no Painel de Controle incluírem **Sempre usar projeto padrão**, não será possível selecionar um novo projeto no sistema de dados.

Para alterar o projeto:

1. No menu **Arquivo**, clique em **Selecionar Projeto**.
2. Na lista dos projetos aos quais você tem direitos, clique naquele que deseja usar nesse instrumento e clique em **Selecionar Projeto**.

Exibir Relatórios de Método

Para exibir o relatório personalizado, no menu **Relatórios**, clique em **Exibir** seguido de **Relatório de Método**. Esse comando está disponível mesmo quando você não está editando o relatório personalizado. O relatório personalizado do método atual aparecerá em uma janela somente para exibição. Não é possível editar o relatório nessa janela. Consulte Sobre Relatórios e Relatórios Padrão.

Propriedades do Método

Antes de usar um método para adquirir dados, certifique-se de que opções como análise de pós-corrida automática dos dados (se desejado) estejam ativadas. Para verificar esses parâmetros, no menu **Método**, clique em **Propriedades**.

Veja também

Descrição

Opções

Calibração

Log do Registro de Auditoria

Registro de Auditoria

Descrição das Propriedades do Método

Para inserir uma descrição para o seu método:

1. No menu **Método**, clique em **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **Propriedades do Método**, selecione **Descrição**.
3. Na caixa de diálogo, insira informação de texto sobre seu método. É possível inserir qualquer informação desejada. A descrição pode ser visualizada na caixa de diálogo Abrir Arquivo e, por esse motivo, pode ser útil na classificação rápida através de métodos para encontrar o correto.

Veja também

Opções

Calibração

Registro de Auditoria

Log do Registro de Auditoria

Opções de Propriedades do Método

Para definir as opções de análise do seu método:

1. No menu **Método**, clique em **Propriedades.**
2. Na caixa de diálogo **Propriedades do Método**, selecione **Opções**.
3. Selecione uma das seguintes opções:

- **Analisar durante aquisição -** Se esta caixa de seleção for marcada, o cromatograma será automaticamente analisado durante a corrida no intervalo especificado na caixa.
- **Analisar após a aquisição -** Se esta caixa for selecionada, o cromatograma será analisado automaticamente depois de cada aquisição. Essa é a condição padrão. Se esta caixa não for selecionada, você deverá analisar manualmente o cromatograma clicando no botão Analisar, ou analisar a amostra como parte de um reprocessamento da sequência depois da corrida ter sido concluída.
- **Ativar compactação do arquivo de dados -** Quando esta caixa estiver marcada, os arquivos de dados adquiridos com o uso do sistema de dados serão automaticamente compactados antes de serem salvos. (Os arquivos de dados compactados são menores,

mas levam mais tempo para carregar.) Quando um arquivo tiver sido salvo por meio da compactação, a única forma de descompactá-lo é salvá-lo como outro arquivo de dados com compactação desativada.

Veja também

Descrição

Calibração

Registro de Auditoria

Log do Registro de Auditoria

Desativar o Processamento para Aquisição de Dados

Propriedades do Método para Calibração

Para definir os padrões de calibração do seu método:

1. No menu **Método**, clique em **Propriedades.**
2. Na caixa de diálogo **Propriedades do Método**, selecione **Calibração**.
3. Selecione uma das seguintes opções:

- **Medir automaticamente replicações consecutivas do mesmo nível** - Quando essa caixa estiver selecionada, replicações de calibração (injeções consecutivas de um único nível de calibração) terão sempre sua média calculada. Se essa caixa não estiver marcada, não será tirada a média das replicações de calibração, a menos que você especifique isso no momento da calibração. Consulte Medir Automaticamente Replicações.
- **Número de replicações em média livre** - Se desejar usar uma média livre, insira aqui o número de replicações por média.
- **Definição do Fator de Resposta** - Selecione como os fatores de resposta devem ser calculados e exibidos, **Área / Valor** ou **Valor / Área**.

Veja também

Descrição

Opções

Registro de Auditoria

Log do Registro de Auditoria

Log do Registro de Auditoria das Propriedades do Método

Use essa opção para exportar, imprimir e pesquisar uma informação de registro de auditoria.

1. No menu **Método**, selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **Propriedades do Método**, selecione **Log do Registro de Auditoria**.
3. Insira as seguintes informações:

- **Usuário**
- **Local**
- **Descrição**
- **Motivo**
- **De data/hora**
- **Para data/hora**

4. Selecione uma das seguintes opções:

- **Exportar -** Selecione esta opção para exportar o log do registro de auditoria
- **Imprimir -** Selecione esta opção para imprimir o log do registro de auditoria
- **Pesquisar -** Selecione esta opção para pesquisar o log do registro de auditoria

Veja também

Descrição

Opções

Calibração

Registro de Auditoria

Registro de Auditoria das Propriedades do Método

Selecione a guia **Registro de Auditoria**. A caixa de seleção **Habilitar o Registro de Auditoria** é uma caixa importante porque, se marcada, as alterações subsequentes no método serão registradas nele.

Para habilitar o registro de auditoria do método:

1. No menu **Método**, clique em **Propriedades.**
2. Na caixa de diálogo **Propriedades do Método**, selecione **Registro de Auditoria**.
3. Selecione **Habilitar o registro de auditoria**. Depois de ser marcada, a caixa Habilitar o Registro de Auditoria não poderá ser desmarcada. O método continuará a ter o registro de auditoria habilitado, a menos que você salve o arquivo com um novo nome.
4. Na caixa de diálogo de aviso, selecione **Sim.** Habilitar o Registro de Auditoria será permanentemente marcado para esse método.
5. Na caixa de diálogo **Propriedades do Método**, selecione uma das opções:

- **Solicitar razão a cada alteração -** Essa opção solicita ao usuário que insira um motivo para cada alteração subsequente no método no momento em que a alteração é feita.
- **Solicitar razão ao salvar Método -** Essa opção solicita ao usuário que insira uma motivo para cada alteração quando o Método é salvo.
- **Não solicitar razão -** Quando essa opção é selecionada, as alterações são documentadas, mas não é necessário que o usuário forneça um motivo.

Quando tiver selecionado a Opção de Registro de Auditoria com razões, você será solicitado a fornecer o motivo das alterações, seja no momento da alteração ou quando método/sequência/dados/sistema forem salvos.

Se tiver selecionado a opção de inserir um motivo em cada alteração, a caixa de diálogo será exibida toda vez que você efetuar uma alteração no item passando por registro de auditoria. Uma descrição da alteração é exibida na caixa **Fonte / Atividade**. Selecione o motivo para a alteração na caixa **Motivo** ou digite o seu próprio motivo e clique em **OK**.

Se tiver selecionado a opção de inserir um motivo ao salvar método/sequência/dados, a caixa de diálogo será exibida quando você salvar método/sequência/dados e um motivo deverá ser inserido para todas as alterações em método/sequência/dados. Use os botões **Posterior** e **Próximo** para visualizar as descrições das alterações. Um número de item de alteração é exibido no canto inferior direito da janela, junto com o número total de alterações. Se quiser inserir um motivo para todas as alterações, digite o motivo e clique no botão **Aplicar a Tudo**. Depois de inserir as alterações para todas as razões, clique em **OK**.

Veja também

Descrição

Opções

Calibração

Log do Registro de Auditoria

Propriedades dos Dados

Os dados são adquiridos cada vez que um método é executado. Selecione **Dados > Propriedades** para editar e visualizar a informação geral, a descrição, as assinaturas eletrônicas, o log do registro de auditoria e o registro de auditoria de arquivos de dados.

Veja também

Sobre a Estrutura do Arquivo de Dados

Visualizar Informação Geral do Arquivo de Dados

Descrição do Arquivo de Dados

Visualizar Assinaturas Eletrônicas do Arquivo de Dados

Log do Registro de Auditoria do Arquivo de Dados

Registro de Auditoria do Arquivo de Dados

Sobre a Estrutura do Arquivo de Dados

Um arquivo de dados é criado na unidade indicada sempre que você adquire uma amostra ou quando salva um arquivo de dados usando o comando **Salvar como 32 bits**. Usa-se o salvar como 32 bits para salvar arquivos de outros formatos. Com o EZChrom é possível abrir diversos formatos de terceiros, como AIA, CDF e PE. Quando um deles for aberto, Salvar como 32 bits é habilitado. Isso permite ao usuário salvar o arquivo no formato e na estrutura nativa do EZChrom listado abaixo. O arquivo contém as seguintes informações:

Cabeçalho de Informação do Arquivo. Contém informações como data e hora da aquisição.

Parâmetros do método completos usados para adquirir e processar os dados (trata-se do método "original" salvo apenas quando os dados são adquiridos). Como é possível adquirir vários canais de dados simultaneamente em um determinado cromatógrafo, a seção do método talvez contenha parâmetros completos para mais de um canal.

Pontos de dados brutos para a corrida salva.Vários cromatogramas podem estar presentes em um único arquivo de dados, cada um representando um canal do detector adquirido para a corrida. Os pontos dos dados brutos são salvos em formato binário.

Resultados. Os resultados da integração originais são salvos no arquivo, podendo ser recuperados mais tarde quando o arquivo for aberto. Além disso, os resultados da análise mais recente e o método também são salvos no arquivo de dados e atualizados a cada análise. O ID da Amostra dos resultados também é salvo, assim como correções de integração manual.

Descrição do Arquivo. Caso insira uma descrição para o arquivo, essas informações de texto serão armazenadas com ele, podendo ser exibidas em Propriedades do Arquivo de Dados ou na caixa de diálogo Abrir Arquivo de Dados.

Configuração do Instrumento. A configuração do instrumento usado para adquirir o arquivo de dados é salva.

Registro de Auditoria do Arquivo de Dados. Um log do registro de auditoria sempre é salvo no arquivo de dados que controla a análise dos dados.

Os arquivos de dados são salvos usando o nome do arquivo e a extensão especificados quando você inicia a aquisição de dados. O limite do tamanho do nome do arquivo é de 255 caracteres, incluindo o caminho.

Soma de Verificação do Arquivo de Dados. Caso a Segurança Estendida esteja habilitada, uma soma de verificação será calculada para todo o arquivo sempre que o arquivo de dados for fechado. Quando o arquivo é aberto, a soma de verificação é observada primeiro. Se houver falha na verificação, o arquivo não poderá ser aberto e uma mensagem de erro será exibida no registro de atividades do instrumento. Quando habilitada, a verificação da soma de verificação está em toda a empresa. O recurso da soma de verificação é habilitado na caixa de diálogo **Opções Corporativas** do menu principal e está identificado como **Segurança Estendida**.

Visualizar Informação Geral do Arquivo de Dados

1. No menu **Dados**, selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **Propriedades do Arquivo de Dados**, selecione **Geral**.
3. As seguintes informações são exibidas:

- **ID da Amostra**
- **Tempo de Corrida**
- **Tempo de análise**
- **Nome do Computador de Análise**

- **Frasco**
- **Volume de Injeção**

Descrição do Arquivo de Dados

Para inserir uma descrição para o seu arquivo de dados:

1. No menu **Dados**, selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **Propriedades do Arquivo de Dados**, selecione **Descrição**.
3. Na caixa de diálogo, insira informação de texto sobre seu arquivo de dados. Como a descrição pode ser visualizada na caixa de diálogo Abrir Arquivo, ela pode ser útil na classificação por meio dos arquivos de dados do seu disco. Se quiser alterar a descrição do arquivo de dados atual, você poderá inserir dados nessa caixa ou editar a partir dela.

As descrições do arquivo de dados podem ser inseridas na sequência no momento da aquisição de dados ou na caixa de diálogo **Corrida Única** ao correr uma única amostra.

Visualizar Assinaturas Eletrônicas do Arquivo de Dados

Para visualizar as assinaturas eletrônicas de um arquivo de dados:

1. Abra o arquivo de dados.
2. No menu **Dados**, selecione **Propriedades**.
3. Na caixa de diálogo **Propriedades do Arquivo de Dados**, selecione **Assinaturas**.

Veja também

Adicionar Assinaturas à Sequência de Resultados

Log do Registro de Auditoria do Arquivo de Dados

1. No menu **Dados**, selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **Propriedades do Arquivo de Dados**, selecione **Log do Registro de Auditoria**.
3. Insira as seguintes informações:

- **Usuário**
- **Local**
- **Descrição**

- **Motivo**
- **De data/hora**
- **Para data/hora**

4. Selecione uma das seguintes opções:

- **Exportar -** Selecione esta opção para exportar o log do registro de auditoria
- **Imprimir -** Selecione esta opção para imprimir o log do registro de auditoria
- **Pesquisar -** Selecione esta opção para pesquisar o log do registro de auditoria

Registro de Auditoria do Arquivo de Dados

Os arquivos de dados sempre têm um registro de auditoria associado. Selecione **Registro de Auditoria** para escolher se deseja que o sistema solicite razões quando uma alteração for feita

1. No menu **Dados**, selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **Propriedades do Arquivo de Dados**, selecione **Registro de Auditoria**.
3. Selecione uma das seguintes opções:

- **Solicitar razão** - Esta opção requer que o usuário insira um motivo para cada alteração subsequente efetuada no arquivo de dados no momento em que a alteração é feita.
- **Não solicitar razão** - Quando essa opção é selecionada, as alterações são documentadas, mas não é necessário que o usuário forneça um motivo.

Opções de Método Avançado

Sobre as Opções de Método Avançado

As Opções de Método Avançado estão disponíveis aos usuários que precisam ir além da aquisição e da análise de dados simples fornecidas, personalizando resultados ou criando vínculos com redes ou com sistemas de dados externos.

Para abrir a caixa de diálogo **Opções de Método Avançado**, selecione **Método > Avançado**. Selecione uma das seguintes guias de opção para configurar opções avançadas para seu método:

Exportação de Dados	Ativa a exportação de dados e define os parâmetros de

	exportação. Veja também Exportação de Dados para o Excel.
Exportação de Gráficos	Configura a exportação de cromatogramas e traços.
Parâmetros Personalizados	Define parâmetros personalizados
Coluna/Desempenho	Configura o cálculo automático de valores de desempenho do sistema.
Arquivos	Indica programas do usuário e subtração de arquivo de linha de base.
Relatórios Avançados	Ativa a impressão e a exportação de relatórios avançados.

Exportar Dados como Parte de um Método

É possível exportar dados analisados automaticamente quando os dados são analisados com um método. Para exportar dados, a função de exportação deve ser ativada e definida no método. Para exportar relatórios avançados, uma impressora deve estar configurada no computador que está fazendo a exportação.

Para exportar dados como parte de um método:

1. No menu **Método**, selecione **Avançado**.
2. Selecione a guia **Exportação de Dados**.
3. Clique na caixa **Exportação Ativada** para ativar a exportação de dados para o método. Enquanto esta opção estiver ativada, a exportação de dados ocorrerá após cada Análise dos dados. Como a exportação de dados ocorrerá, independente de a análise ocorrer automaticamente no final de uma corrida ou quando é executada manualmente, você deve desativar esta opção quando estiver desenvolvendo métodos.
4. Escolha o tipo de informação a exportar da lista suspensa a partir das seguintes opções:
   - Picos
   - Grupos
   - Relatórios Padrão

- Cromatograma

5. Para cada tipo de exportação escolhida, é possível selecionar parâmetros para exportação. Selecione um parâmetro para exportação clicando duas vezes nele ou clicando nele para realçá-lo, depois clique no botão de seta verde (superior) para o mover para a lista de itens de exportação na caixa à direita. Para remover um item da caixa de exportação, realce-o e depois clique no botão de seta vermelho (inferior). Se você definiu quaisquer Parâmetros Personalizados, estes aparecem na lista de itens apropriada que pode escolher para exportar.

6. Para cada parâmetro que exporta, defina o número de casas decimais reportadas realçando o parâmetro na lista Exportar estes parâmetros e inserindo o número de casas decimais no campo Casas Decimais.

7. Se você selecionou Cromatogramas para serem exportados, ser-lhe-á dada a opção de exportar no formato de arquivo AIA (*.CDF), ASCII ou ASCII Double. Selecionando a opção AIA faz com que o Elite crie um *.CDF (Arquivo de Dados do Cromatógrafo) no formato padrão especificado pela Associação de Instrumentos de Análise (AIA). A exportação de arquivos AIA Nível 2 é suportada. Isto inclui o cromatograma bruto e os resultados de integração. Isto é também denominado formato de arquivo ANDI (Intercâmbio de Dados de Análise). Isto permite que os resultados sejam lidos por outros sistemas de dados de cromatografia.

8. Se você selecionou Relatórios Padrão, pode escolher usar sua hora local ou a hora GMT em seus relatórios. Ative Usar Hora Local para exibir a hora local em seu relatório. Desative Usar Hora Local para exibir a hora GMT em seu relatório.

9. Na caixa suspensa Separador de Campos selecione Guia, Espaço ou Vírgula. Se você deseja importar o arquivo para uma planilha do Microsoft Excel, escolha Guia.

10. No campo Caminho para arquivo de exportação, selecione o nome de um caminho no diretório onde você pretende salvar seus arquivos de exportação. Se não souber o nome do diretório, pode selecioná-lo a partir de caminhos existentes clicando no botão Arquivo adjacente ao campo.

11. Selecione Ativar ODBC se deseja usar o formato ODBC para suas exportações de dados. A Conectividade Aberta de Banco de Dados (ODBC) é um método padrão da indústria de compartilhamento de dados entre bancos de dados e outros programas.

    - No campo **Nome da fonte de dados**, insira o nome da pasta de destino dos arquivos de exportação ou selecione o botão **Abrir** e procure na pasta. Para criar uma nova fonte de dados, selecione o botão **Nova**.

    - Insira um **Nome de tabela** para sua exportação de dados.

Os dados exportados são salvos em arquivos usando as seguintes convenções:

Arquivos de Exportação de Picos e de Grupos

Para cada parâmetro selecionado, um arquivo é criado contendo esse valor para cada pico nomeado, juntamente com informações sobre o nome do arquivo e do método. Cada vez que o método é usado para adquirir ou processar dados, uma linha é anexada ao arquivo contendo o novo valor calculado para esse arquivo. Cada arquivo é salvo com o nome do método, com uma extensão representando o tipo de valor selecionado. Por exemplo, este é um exemplo de um arquivo criado para a exportação da **área** de cinco corridas.

Report	Channel	# Records							
Area	A	5							
Date	Time	Sample Id	File	Method	User	Peak1	Peak2	Peak3	
5/9/92	20:48:53	STDS	c:\system\	c:\system\	cathi	63088	52014	49749	
5/9/92	20:49:09	STDS	c:\system\	c:\system\	cathi	170789	142665	136661	
5/9/92	20:49:21	STDS	c:\system\	c:\system\	cathi	298854	251660	241049	
5/9/92	20:49:34	STDS	c:\system\	c:\system\	cathi	461695	394081	376339	
5/9/92	20:51:56	STDS	c:\system\	c:\system\	cathi	780025	668245	635081	

Nota: Se você exportar dados como parte de uma sequência e quiser exibir o arquivo de exportação em outro aplicativo enquanto os dados estão sendo adquiridos, será necessário fazer uma cópia do arquivo e salvá-lo com outro nome antes de utilizá-lo. Caso contrário, pode ocorrer uma violação de compartilhamento de arquivo quando o software tentar atualizar o arquivo com dados de uma nova corrida.

Arquivos Padrão de Exportação de Relatório

Quando selecionar uma opção de Relatório Padrão, um arquivo será criado cada vez que uma análise for executada. O arquivo contém as informações do relatório selecionado.

Diferentemente da exportação de picos e grupos, as informações de corridas adicionais não são anexadas aos Arquivos Padrão de Exportação de Relatório. Cada vez que o método for usado para aquisição ou processamento, um arquivo novo será criado. O nome do arquivo novo é baseado no nome de arquivo dos dados e usa a extensão de exportação fornecida abaixo para o tipo de dados de exportação selecionado.

A tabela a seguir mostra um exemplo de arquivo criado para Exportação Padrão de um relatório Padrão Externo.

Report	Channel	# Peaks	Date	Time	Sample Id	File	Method	User	
ESTD	A	4	5/9/92	20:48:53	STDS	C:\system\	c:\system\	cathi	
Pkno	Name	Ret. Time	Conc	Area	Height				
1	Peak1	5.729	10.022	63088	7791				
2	Peak2	6.577	5	51884	5631				
3	Peak3	8.293	15.091	48187	4226				
4	Peak4	8.559	10.166	79647	7675				
Totals			40.279	242806	25323				

Veja também

Sobre as Opções de Método Avançado

Extensões de Arquivo Usadas para Exportação de Dados

O software nomeia automaticamente os arquivos usados para salvar dados exportados. Cada opção de exportação de dados usa uma convenção específica de nomeação de arquivo, como é explicado a seguir.

Arquivos de Exportação de Parâmetros de Pico e Grupo

Nome do arquivo = [nome do método]-[nome do canal].[nome abreviado do parâmetro]

Exemplo:

Nome do Método - multi level.met

Arquivo de Dados - calib std 3.dat

Canal - TCD

Opção de Exportação Personalizada Nome do Arquivo de Exportação Personalizado

(Usa o nome de arquivo do método seguido da extensão.)

Tempo de Retenção multi level-tcd.apex

Área multi level-tcd.area

Área % multi level-tcd.areaperc

Altura multi level-tcd.height

Altura % multi level-tcd.heightperc

ESTD multi level-tcd.estdconc

PI multi level-tcd.istdconc

NORM multi level-tcd.normconc

Largura multi level-tcd.width

TR Relativa multi level-tcd.relativert

Pratos Teóricos multi level-tcd.TPlates

Placas / Medidor multi level-tcd.TPlatesPerMeter

Fator de Capacidade multi level-tcd.capacity

Resolução multi level-tcd.resolution

Assimetria de Pico multi level-tcd.asymmetry

Parâmetros Personalizados multi level-tcd.custom parameter1..x

Nota: nos arquivos de exportação de Grupo, a convenção da nomeação de arquivos é como descrito acima, mas cada arquivo começa com um "G". No exemplo acima, o arquivo de exportação de grupo para NORM seria Gmulti level-tcd.normconc.

Arquivos Padrão de Exportação de Relatório

Nome do arquivo = [nome do arquivo de dados][extensão do arquivo de dados]-[nome do canal].[tipo de dados]

Exemplo:

Nome do Método - multi level.met

Arquivo de Dados - calib std 3.dat

Canal - TCD

Opção de Exportação Padrão Nome do Arquivo de Exportação Padrão

(Usa o nome de arquivo dos dados seguido da extensão.)

Área% calib std 3 dat-tcd.are

ESTD calib std 3 dat-tcd.ESD

PI calib std 3 dat-tcd.ISD

NORM calib std 3 dat-tcd.NOM

Desempenho calib std 3 dat-tcd.PER

Calibração calib std 3 dat-tcd.CAL

Relatório de FRC calib std 3 dat-tcd.FRC

Relatório de Informações da Amostra calib std 3 dat-tcd.SPL

Exportação de Cromatograma

AIA calib std 3 dat-tcd.CDF

ASCII calib std 3.dat.ASC

O exemplo a seguir demonstra o formato de um arquivo de cromatograma exportado. Os números no final do arquivo são os pontos de dados individuais do cromatograma, com os dados do canal 1 em primeiro lugar, seguidos, pela ordem, dos dados de canais adicionais, caso estejam presentes.

```
Sample ID:  Tutor.001
Vial Number : -1000
Data File:  C:\System\Chrom\Tutor.dat
Method:  C:\System\Methods\Tutor.met
User Name:  J.W.
Acquisition Date and Time:        Dec. 19, 1991          10:19:43
Sampling Rate :              0.559          1          1          1 Hz
Total Data Points :           2648          0          0          0 Pts.
X Axis Title :             Minutes    Minutes    Minutes    Minutes
Y Axis Title :             Volts      Volts      Volts      Volts
X Axis Multiplier :         0.016667          0          0          0
Y Axis Multiplier :         0.000001          0          0          0
                  103
                  108
                  124
                  115
                  110
                   82
```

O formato dos arquivos de dados ASCII que serão importados para o sistema de dados deve seguir o exemplo mostrado acima. Caso haja dados de mais de um canal, eles serão anexados à string. No exemplo, o canal B inicia no ponto de dados 2649.

Exportar Gráficos

A função de **Exportação de Gráficos** do método fará com que os gráficos indicados sejam exportados no formato .WMF toda vez que uma análise for executada com uso do método.

Para habilitar a exportação de gráficos de um método:

1. No menu **Método**, selecione **Avançado > Exportação de Gráficos**.

2. Na planilha, clique em **Exportar** e digite o nome de arquivo a ser usado para a exportação.
3. A janela de gráficos exibe o gráfico atual para exportação. Para alterar o gráfico, clique com o botão direito do mouse na janela. Todos os parâmetros de gráfico padrão são disponibilizados.
4. Selecione o **Caminho para exportar arquivos**. Os gr áficos exportados serão salvos com o nome de arquivo + " _ " + + ".wmf"

Veja também

Sobre as Opções de Método Avançado

Parâmetros de Coluna/Desempenho

A guia Coluna/Desempenho permite configurar o cálculo automático de valores de desempenho do sistema, como Pratos Teóricos, Fator de Capacidade, Resolução ou Assimetria de Pico. Para configurar os cálculos de desempenho da coluna,

1. No menu **Método**, selecione **Avançado > Coluna/Desempenho**.
2. Clique na caixa **Calcular parâmetros de desempenho para este canal**. Em seguida, preencha as informações nos campos solicitados para os cálculos.
3. Quando tiver preenchido a guia Coluna/Desempenho, o sistema calculará os parâmetros de desempenho depois de cada análise. Esses parâmetros podem ser exportados, anotados no cromatograma e impressos em um relatório personalizado.

Tempo de pico sem retenção (minutos)	Insira o tempo de retenção de um pico sem retenção nesta coluna.
Comprimento da coluna	Especifique o comprimento da coluna em metros ou em centímetros.
Diâmetro da partícula (mícrons)	Insira o diâmetro da partícula em mícrons na coluna sendo usada (se aplicável).
Número de série da coluna	Insira o número de série da coluna (se aplicável). Essas informações serão salvas com os dados e ficarão disponíveis para geração de relatórios.

Data de instalação da coluna	Insira a data em que a coluna foi instalada no instrumento (se desejado). Essas informações serão salvas com os dados e ficarão disponíveis para geração de relatórios.
Descrição da coluna	Insira a descrição da coluna, se desejado. Essas informações serão salvas com os dados e ficarão disponíveis para geração de relatórios.
Calcular parâmetros de desempenho para este canal	Selecione um ou mais métodos de cálculo. As opções incluem os métodos de cálculo USP, EMG (Exponencial Modificado de Gauss), DAB (Farmacopeia da Alemanha)/ BP (Farmacopeia do Reino Unido)/EP (Farmacopeia da Europa)/ ASTM, AOH (Área/Altura) e JP (Farmacopeia do Japão).

Veja também

Sobre as Opções de Método Avançado

Selecionar Programas do Usuário e Arquivos de Linha de Base

Para indicar arquivos de programas a serem associados ao método:

1. No menu **Método**, selecione **Avançado > Arquivos**.
2. Preencha os seguintes campos:

Programas do Usuário	Nessa seção, pode-se indicar programas do usuário a serem executados: • **Antes** de cada corrida • **Antes da Análise** do cromatograma • **Depois da Análise** do cromatograma • **Depois da exportação**. Insira o nome do programa do usuário ou selecione-o na lista suspensa. Para detalhes sobre como gravar Programas do Usuário, consulte o apêndice Programas do Usuário no final deste manual. (Nota: inclua o nome do caminho UNC completo para o arquivo.)
Arquivo de Linha de	Se quiser que o sistema de dados subtraia automaticamente um

Base	arquivo de linha de base armazenado depois de cada corrida, selecione a caixa **Arquivo de Linha de Base**. Indique um nome do arquivo de linha de base e marque cada canal do qual o arquivo deve ser subtraído. O cromatograma será analisado depois da realização da subtração. (Nota: inclua o nome do caminho UNC completo para o arquivo.)

Veja também

Sobre as Opções de Método Avançado

Programas do Usuário

Relatórios de Método Avançado

Para especificar um ou mais relatórios a serem impressos e/ou exportados quando o método é usado para analisar dados, selecione **Método > Avançado > Relatórios Avançados**. Os seguintes campos estão disponíveis:

Imprimir	Marque esta caixa de seleção se quiser imprimir o relatório indicado quando os dados forem analisados com esse método.
Exportar	Marque esta caixa de seleção se quiser exportar o relatório indicado quando os dados forem analisados com esse método. Isso resulta em exportação delimitada por tabulação apenas.
Nome do Modelo de Relatório	Insira ou selecione o nome do arquivo de modelo de relatório a ser usado para gerar esse relatório.
Caminho de Exportação	Se o relatório precisar ser exportado, insira ou selecione o caminho para o arquivo de exportação ser salvo.
Nome do Arquivo de Exportação	Selecione a nomeação de arquivo a partir dos tipos apresentados na lista. O nome do arquivo de exportação será criado usando a identificação selecionada.

Veja também

Sobre as Opções de Método Avançado

Preparação de Amostra

Uma preparação de amostra do amostrador automático (programa injetor) é composta por uma série de linhas com números, com cada uma definindo uma operação que o injetor realiza sequencialmente.

Caso o seu amostrador automático seja compatível com um programa de preparação de amostra, o menu **Preparação de Amostra** será exibido na barra de menus. Nesse menu, você pode criar/editar um programa de preparação de amostra de amostrador automático e configurar as propriedades, como uma descrição e registro de auditoria do programa de preparação de amostra.

Para abrir um arquivo de preparação de amostra:

1. Na barra de menus Janela do Instrumento, clique em **Arquivo** > **Abrir > Preparação de Amostra.** Será exibida uma caixa de diálogo, em que você pode selecionar um arquivo de preparação de amostra a abrir para o instrumento atual.
2. Selecione o arquivo a abrir ou use as caixas de pesquisa na parte inferior para pesquisar um arquivo correspondente aos critérios selecionados.

Para ativar o Registro de Auditoria para o arquivo de preparação de amostra:

1. No menu **Preparação de Amostra**, clique em **Propriedades > Registro de Auditoria**.
2. Para habilitar a função de registro de auditoria, selecione a caixa de registro de auditoria **Ativar**. Será exibido um aviso de que, se você continuar, não será possível desativar o registro de auditoria uma vez que ele tenha sido ativado.

- **Solicitar razão a cada alteração** - Essa opção solicita ao usuário que insira uma motivo para cada alteração subsequente no arquivo de preparação de amostra no momento em que a alteração é feita.
- **Solicitar razão ao salvar Método** - Essa opção solicita ao usuário que insira um motivo para cada alteração quando o arquivo de preparação de amostra é salvo.
- **Não solicitar razão** - Quando essa opção é selecionada, as alterações são documentadas, mas não é necessário que o usuário forneça um motivo.

Para inserir uma descrição para um arquivo de preparação de amostra:

1. No menu **Preparação de Amostra**, clique em **Propriedades > Descrição**.
2. Digite uma descrição para o arquivo de preparação de amostra. A descrição é salva no arquivo e pode ser visualizada quando ele for aberto ou quando for usada para pesquisa.

Para abrir um modelo de preparação de amostra:

1. No menu, selecione **Arquivo > Novo**.
2. Na caixa de diálogo **Novos Modelos de Arquivo**, selecione a guia **Preparação de Amostra**.
3. Selecione o arquivo que deseja abrir.
4. Selecione **OK**.

Iniciar Software Monitor de Laboratório

Para executar o programa Monitor de Laboratório para os instrumentos suportados, no menu **Controle**, clique em **Iniciar Software Monitor de Laboratório**. Isso será mostrado apenas quando estiver executando o 7890 GC.

Adequação do Sistema

Sobre a Adequação do Sistema

O teste de adequação do sistema, originalmente concebido pela indústria farmacêutica para determinar se um sistema cromatográfico é compatível com uma determinada análise, é agora usado rotineiramente em laboratórios em que a qualidade dos resultados é importante. Muitas vezes, o teste de adequação do sistema é usado em conjunto com um método de validação para fornecer um quadro completo da qualidade e da reprodutibilidade dos resultados laboratoriais.

A adequação do sistema envolve a corrida de uma mistura contendo os analitos que estarão presentes em suas amostras e o exame de vários parâmetros que descrevem a capacidade do cromatógrafo e da coluna de separar esses analitos.

A adequação do sistema é uma opção de licença que expande o seu Sistema de Dados para incluir o recurso de realização de cálculos automáticos de Adequação do Sistema para variáveis experimentais, como eficiência, capacidade, resolução e reprodutibilidade. O pacote vem com quatro opções de métodos de cálculo, incluindo:

- USP (Farmacopeia Norte-Americana)
- EMG (Exponencial Modificado de Gauss)
- DAB (Farmacopeia Alemã) O cálculo DAB também é usado para BP (Farmacopeia do Reino Unido), EP (Farmacopeia Europeia) e ASTM.
- AOH (Área/Altura)
- JP (Farmacopeia do Japão)

Veja também

Configuração da Adequação do Sistema

Seleção do Cálculo de Adequação

Executar um Teste de Adequação

Assistente de Sequência - Relatórios

Configuração da Adequação do Sistema

Use a Configuração da Adequação do Sistema para inserir os intervalos de aceitação necessários nos picos de interesse. Isso deve ser concluído antes que o sistema de dados faça osCálculos de Adequação do Sistema.

Para configurar os cálculos de adequação do sistema:

1. Para habilitar a Adequação do Sistema, escolha o instrumento no painel de controle e selecione**Configurar Instrumento > Opções > Adequação do Sistema.** Inicie o instrumento.
2. No EZChrom, no menu **Método**, selecione **Adequação do Sistema**.
3. Selecione o primeiro pico a ser usado para os cálculos, realçando-o com o mouse na lista **Composto**.
4. Na planilha adjacente, clique no primeiro campo da coluna **Parâmetro**. Uma lista suspensa de parâmetros disponíveis é exibida (Consulte a tabela abaixo). Selecione um parâmetro da lista. Se não quiser executar um teste de adequação em um pico qualquer, simplesmente deixe os campos de **Parâmetro** em branco. Da mesma forma, se você não quiser usar um dos critérios de teste (por exemplo, %RSD), deixe-o em branco. Alguns parâmetros têm uma opção de métodos de cálculo. Esses parâmetros têm o método de cálculo exibido depois do parâmetro entre parênteses. (por exemplo, Placas/Medidor (JP) indica Placas/Medidor calculados utilizando-se o cálculo de Farmacopeia do Japão.) Para detalhes sobre esses cálculos, consulte Cálculos internos.
5. Para cada parâmetro selecionado, informe um valor mínimo **(Mín)**, um valor máximo **(Máx)** e a porcentagem máxima permitida do desvio padrão relativo **(%RSD)**.
6. Para realizar um teste no cromatograma inteiro, clique na planilha inferior na coluna com o título **Teste.** Selecione um dos cálculos de ruído a partir da lista suspensa. Insira uma hora de **Início** e de **Término** para o teste e um **Valor** limite para determinar o limite aceitável. O valor de ruído para a porção do cromatograma entre as horas de início e de parada será calculado e comparado com o valor de limite para determinar se o teste foi aprovado ou reprovado. Observe que o número de vezes inserido para o teste de ruído deverá representar uma área de linha de base do seu cromatograma na qual não ocorre a eluição de nenhum pico.

7. Para realizar um teste de desvio, clique na planilha inferior na coluna com o título **Teste**. Selecione **Desvio (desvio/min)** na lista suspensa. Se você marcar esta caixa, será preciso inserir um hora de **Início** e de **Término** para o teste e um **Valor** de limite (em desvio/min) para o limite aceitável.
8. Quando tiver preenchido a Configuração da Adequação do Sistema, feche a caixa e defina os Cálculos de Adequação do Sistema.

Parâmetros de Adequação

Resolução de Adequação	Verifica a capacidade da coluna para separar um analito dos outros na mistura. Dois picos serão considerados resolvidos se o fator R calculado for maior que 1,5.
Reprodutibilidade da Adequação	A injeção da mesma amostra várias vezes permite determinar se o seu cromatógrafo está fornecendo resultados reproduzíveis. Em geral, de 5 a 6 amostras de reprodutibilidade são necessárias para fornecer dados adequados que forneçam resultados significativos. A reprodutibilidade pode ser determinada pelo exame de % do desvio padrão relativo (%RSD) para parâmetros como área de pico, altura ou concentração.
Assimetria de Pico de Adequação (Cauda)	Os valores quantitativos de assimetria de pico são importantes, especialmente ao se lidar com componentes de rastreamento. Além disso, como a assimetria pode variar no decorrer da vida útil de uma coluna, pode ser importante rastrear esses dados continuamente.
Pratos Teóricos de Adequação	O cálculo do número de chapas é um indicador importante da eficiência da coluna. Muitos cromatógrafos preferem monitorar o número de chapas como um indício de quando a coluna deverá ser substituída.
Ruído e Desvio de Adequação	Particularmente importantes para rastrear as análises, os valores de ruído e de desvio do seu cromatógrafo indicam os limites de detecção e de quantificação. Cálculos por pico incluem os cálculos 6-sigma e Proporção Sinal/Ruído ASTM. Os testes de ruído e de desvio realizados em uma seção indicada no cromatograma incluem Ruído rms, desvio, Ruído ASTM curto (sem escala), Ruído ASTM curto (com escala), Ruído ASTM longo (com escala) e Ruído 6-sigma.

Cálculos de Adequação do Sistema

Os cálculos de Adequação do Sistema solicitam informações sobre a coluna de cromatografia. Faça isso depois de ter Configurado a Adequação do Sistema.

Para selecionar o método de cálculo:

1. No menu **Método**, selecione **Avançado > Coluna/Desempenho**.
2. Insira os valores em **Informações da Coluna**. Isso é necessário para calcular opções de desempenho.
3. Em **Método de Cálculo**, selecione um método de cálculo dos valores de desempenho das seguintes opções:

- USP (Farmacopeia Norte-Americana)
- EMG (Exponencial Modificado de Gauss)
- DAB (Farmacopeia Alemã) O cálculo DAB também é usado para BP (Farmacopeia do Reino Unido), EP (Farmacopeia Europeia) e ASTM.
- AOH (Área/Altura)
- JP (Farmacopeia do Japão)

4. Selecione **Calcular parâmetros de desempenho para este canal** para habilitar os cálculos de adequação para o método.
5. Quando tiver concluído a caixa de diálogo, saia para aceitar os parâmetros e para Executar um Teste de Adequação do Sistema.

Veja também

Parâmetros de Coluna/Desempenho

Executar um Teste de Adequação do Sistema e Imprimir Relatório

Execute um Teste de Adequação do Sistema para criar uma sequência ou modificar uma existente e incluir uma ou mais corridas de adequação do sistema de acordo com as necessidades e SOPs do seu laboratório. Faça isso depois de completar os diálogos Configuração da Adequação do Sistema e Cálculos de Adequação do Sistema.

Por exemplo, seguindo os padrões USP, cinco padrões de replicação são executados no começo da sequência. Eles são indicados como padrões de adequação de sistema na sequência. No final da

sequência, os cálculos de adequação são feitos e o software gera um relatório de adequação do sistema.

1. Para abrir a Planilha de Sequência, selecione **Sequência > Editar.**
2. Defina o **Tipo de Corrida** da primeira amostra no seu conjunto de adequação para **Iniciar Adequação do Sistema**. Os padrões de adequação adicionais devem ser indicados como **Padrão de Adequação do Sistema** e a amostra final do seu conjunto de adequação deve ser indicada como **Parar Adequação do Sistema**. Vários tipos de corrida da amostra podem ser selecionados em uma determinada amostra.
3. Um Relatório de Adequação do Sistema será gerado no final do conjunto de padrões de adequação quando a sequência for executada. Para visualizar o Relatório de Adequação na tela, clique em **Relatórios > Visualizar > Relatório da Sequência**.
4. Para imprimir o Relatório de Adequação, clique em **Relatórios > Imprimir > Relatório da Sequência** e selecione a opção **Relatório de Adequação do Sistema**. Observe que, para imprimir o relatório automaticamente no fim da sequência, você deverá ter selecionado a opção **Imprimir Relatórios Sequenciais** na caixa de diálogo **Propriedades da Sequência**. Consulte Processar Sequência.

System Suitability Report Page 1 of 1 (1)

Sequence : \\nas\qa\Users\Elite Enterprises\Elite32\Projects\Amy\Sequence\TP005.002\syssuitp.seq
User : Amy T. Xu (qa3\axtech)
Printed : 9/6/2006 10:44:32 AM

Sample ID	Data Filename
PNA-STDS	\\nas\QA\Users\Elite Enterprises\Elite32\Projects\Amy\Data\TP005.002\multi calibration level 1.dat
PNA-STDS	\\nas\QA\Users\Elite Enterprises\Elite32\Projects\Amy\Data\TP005.002\multi calibration level 2.dat
PNA-STDS	\\nas\QA\Users\Elite Enterprises\Elite32\Projects\Amy\Data\TP005.002\multi calibration level 3.dat

System is Suitable

Channel A	Compound	Parameter	Min	Max	%RSD
	Peak 1	area	0	400000	70
	Peak 2	height	0	50000	70

Sample ID	Compound	Parameter	Average	Low	High	%RSD	Status
	Peak 1	area	178076	63056	299360	66.419	
PNA-STDS		63056					Passed
PNA-STDS		171813					Passed
PNA-STDS		299360					Passed
	Peak 2	height	15943	5631	26843	66.600	
PNA-STDS		5631					Passed
PNA-STDS		15356					Passed
PNA-STDS		26843					Passed

Sobre a Integração

Os Eventos Temporizados de Integração são usados para personalizar a integração de determinados picos ou regiões do cromatograma.

Há duas maneiras de adicionar um evento temporizado de integração a um método: adicionando manualmente o evento à Tabela de Eventos Temporizados de Integração ou graficamente, clicando no cromatograma.

São obrigatórios dois eventos de Integração para cada corrida: Largura e Limite. Esses eventos são usados para detectar o início, o fim e o ápice do pico, bem como para distinguir picos verdadeiros de ruídos. O sistema usa valores padrão de Largura = 0,2 minuto e Limite = 50.

Antes de tentar adicionar eventos de integração expirados, certifique-se de que o seu cromatograma tenha sido analisado com o método atual. Para ter certeza, procure por linhas de base e pelas marcas indicadoras de iniciar/parar no seu cromatograma. Ou clique no botão **Analisar** na fita de comando.

Veja também

Sobre a Janela do Cromatograma

Sobre as Tabelas de Integração

Tabela de Eventos de Integração

Tabela de Correções de Integração Manual

Descrições do Código da Linha de Base

Programação Gráfica

Sobre as Tabelas de Integração

Os eventos temporizados de integração são salvos em dois tipos de tabela.

- A **Tabela de Eventos de Integração** do Método é usada para todos os arquivos de dados integrados com o método.
- A Tabela de Correções de Integração Manual é salva com o arquivo de dados e usada somente para reintegração do arquivo de dados.

Ao adicionar um evento temporizado de integração graficamente, aparecerá uma caixa de diálogo semelhante a essa mostrada abaixo, permitindo que você escolha qual tabela de integração será usada para o evento. A tabela padrão para cada evento de integração está selecionada.

- Para adicionar o evento à Tabela de Eventos de Integração, selecione **Adicionar evento ao Método (todos os dados) > Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Para adicionar o evento à Tabela de Correções de Integração Manual, selecione **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados > Adicionar à Tabela**. O evento será aplicado apenas a este arquivo de dados.

Tabela de Eventos de Integração

A Tabela de Eventos de Integração contém todos os Eventos Temporizados de Integração atuais do canal do método atual. Todos os eventos de integração expirados podem ser adicionados ao seu método usando a técnica de Programação Gráfica. Cada linha da tabela de Eventos de Integração representa um evento de integração no método.

Ao adicionar um evento de integração à Tabela de Eventos de Integração, as alterações de integração serão utilizadas em todas as amostras subsequentes analisadas que usam esse método. (Pressupondo que o método foi salvo.) Essa é a seleção padrão para eventos que geralmente são usados para modificar a integração de picos que sempre ocorrem na amostra.

Para visualizar a tabela de Eventos de Integração:

Há três maneiras de visualizar a tabela.

- Na barra de ferramentas, selecione o botão **Eventos de Integração** .
- No menu **Método**, selecione **Eventos de Integração**.
- No painel de navegação, selecione **Método > Método > Eventos de Integração**

Para adicionar um evento manualmente:

1. Em uma nova linha da planilha, clique no campo **Evento** e selecione o evento que deseja adicionar.
2. Digite uma hora de Início e Parada apropriada e um Valor para o evento (se necessário).
3. Para remover o efeito de um evento de uma análise, mas manter o evento na tabela, clique na marca de verificação próxima ao evento. Somente eventos com um marca de verificação vermelha serão usados em análises subsequentes.

Para remover inteiramente um evento da tabela:

1. Clique no número da linha do evento e pressione a tecla **DELETE** do teclado.

Para remover temporariamente um evento da tabela:

Desmarque a marcação adjacente ao evento. Quando a marca de seleção não estiver sendo exibida, o evento não será aplicado à integração.

Para visualizar o menu de contexto:

Ao clicar com o botão direito do mouse em qualquer lugar da tabela, é exibido um menu de comandos para manipular células e linhas da planilha.

- Os comandos **Recortar, Copiar e Colar** habilitam você a recortar, colar e copiar o conteúdo de uma célula.
- O comando **Preencher Abaixo** copiará a linha selecionada para as linhas a seguir.
- O comando **Inserir Colagem** irá inserir uma linha e ao mesmo tempo fazer uma colagem no local.
- O comando **Inserir Linha** irá simplesmente inserir uma linha em branco onde seu cursor estiver localizado.
- O comando **Limpar** limpa o conteúdo da célula atual ou linha selecionada.
- O comando **Limpar Tudo** limpa o conteúdo da planilha inteira.

Tabela de Correções de Integração Manual

A Correção de Integração Manual é um ajuste na integração necessário somente para um determinado cromatograma.

As correções de integração manual criadas com o uso da integração gráfica são registradas na tabela de **Correções de Integração Manual**. Essas alterações manuais podem também ser inseridas na tabela, selecionando-se a alteração de integração desejada na lista suspensa **Evento** e inserindo as horas de **Início** e **Parada** e um **Valor**, se apropriado.

Essas alterações de integração são aplicadas apenas a um cromatograma individual em vez de fazer parte do método e são salvas no arquivo de dados apenas. As correções de integração manual são salvas no arquivo de dados, de modo que a integração do cromatograma pode ser criada novamente em uma data posterior.

A Tabela de Correções de Integração Manual contém todas as Correções de Integração Manual atuais para o arquivo de dados atual. Ao adicionar um evento de integração à tabela de Correções de Integração Manual, ele será aplicado somente a esse arquivo de dados. Desse modo, as Correções de Integração Manual são eventos de integração Únicos. Essa é a seleção padrão para eventos que geralmente são usados para corrigir a integração apenas uma vez, como as

alterações de Linha de Base Manual. Os resultados que usam esses eventos também podem ser armazenados no arquivo de dados. Isso permite que se reproduza posteriormente os resultados gerados usando um evento de integração manual que foi necessário apenas para uma corrida única.

Para exibir a tabela de Correções de Integração Manual:

Há três maneiras de visualizar a tabela.

- Na barra de ferramentas, selecione o botão **Tabela CIM** .
- No menu **Dados**, selecione **Correções de Integração Manual**.
- No painel de navegação, selecione **Método > Dados > Correções de Integração Manual**.

Para adicionar um evento manualmente:

1. Em uma nova linha da planilha, clique no campo **Evento** e selecione o evento que deseja adicionar.
2. Digite uma hora de Início e Parada apropriada e um Valor para o evento (se necessário).
3. Para remover o efeito de um evento de uma análise, mas manter o evento na tabela, clique na marca de verificação próxima ao evento. Somente eventos com um marca de verificação vermelha serão usados em análises subsequentes.

Para remover inteiramente um evento da tabela:

1. Clique no número da linha do evento e pressione a tecla **DELETE** do teclado.

Para remover temporariamente um evento da tabela:

Desmarque a marcação adjacente ao evento. Quando a marca de seleção não estiver sendo exibida, o evento não será aplicado à integração.

Para visualizar o menu de contexto:

Ao clicar com o botão direito do mouse em qualquer lugar da tabela, é exibido um menu de comandos para manipular células e linhas da planilha.

- Os comandos **Recortar, Copiar e Colar** habilitam você a recortar, colar e copiar o conteúdo de uma célula.
- O comando **Preencher Abaixo** copiará a linha selecionada para as linhas a seguir.
- O comando **Inserir Colagem** irá inserir uma linha e ao mesmo tempo fazer uma colagem no local.

- O comando **Inserir Linha** irá simplesmente inserir uma linha em branco onde seu cursor estiver localizado.
- O comando **Limpar** limpa o conteúdo da célula atual ou linha selecionada.
- O comando **Limpar Tudo** limpa o conteúdo da planilha inteira.

Descrições do Código da Linha de Base

Os códigos da linha de base podem ser incluídos em relatórios personalizados e também podem ser usados para explicar cromatogramas. Um código da linha de base consiste em duas letras. A primeira letra denota o tipo de linha de base do início do pico e a segunda letra indica o tipo de linha de base do fim do pico.

Código	Tipo de Linha de Base
B	Linha de base
f	Início ou Parada Forçada de Pico (definido pelo usuário)
I	Pico finalizado pelo evento Integração Desativada
N	Iniciar pico negativo
P	Encerrar pico negativo
H	Horizontal Progressivo
h	Horizontal Regressivo
M	Linha de base manual ou Pico manual
m	Início ou Fim de Transferência de linha de base
S	Ombro
T	Aproximação da tangente

V	Vale
v	Ponto de vale forçado
x	Pico dividido
E	Fim do cromatograma encontrado antes do fim do pico foi localizado. Fim do cromatograma usado como fim de pico.
R	Zerar Linha de Base
L	Ponto Inferior Horizontal

Programação Gráfica

O menu de Programação Gráfica permite adicionar eventos temporizados e configurar outros parâmetros de método graficamente clicando no cromatograma exibido. Esses comandos também estão disponíveis na barra de ferramentas Programação Gráfica/Integração, exibida, por padrão, na parte inferior da Janela do Instrumento. Os exemplos nas seções a seguir demonstram como cada evento temporizado de integração afetaria a integração do cromatograma exibido, de modo que você saiba para que um evento temporizado de integração pode ser usado em seu método de cromatografia.

A barra de ferramentas de Programação Gráfica/Integração localiza-se na parte inferior da Janela do Instrumento e contém botões de eventos gráficos. Para obter ajuda com a integração, defina que a janela de mensagem de integração apareça ao selecionar um botão de evento gráfico.

Para visualizar a barra de ferramentas de integração:

1. Selecione **Visualizar > Preferências**.
2. Em **Opções da barra de ferramentas**, selecione **Integração**.
3. Selecione **Mostrar barra de ferramentas** e **Dicas de ferramentas**.

Para visualizar a janela de mensagem de integração:

1. Selecione **Visualizar > Preferências**.
2. Em **Opções da barra de ferramentas**, selecione **Integração**.
3. Em Opções, selecione **Mostrar as dicas de ferramentas de programação gráfica**.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30

Entre os parâmetros que podem ser definidos usando a programação gráfica estão:

Comando	Ação
1. Largura	Insere um evento de Largura no ponto do cromatograma.
2. Limite	Insere um evento de Limite no ponto do cromatograma.
3. Sensibilidade do Ombro	Insere um evento Sensibilidade do Ombro no ponto do cromatograma.
4. Integração Desativada	Desativa a integração no ponto do cromatograma.
5. Vale a Vale	Ativa a detecção da linha de base vale a vale.
6. Linha de Base Horizontal	Força uma linha de base horizontal do ponto no cromatograma.
7. Linha de Base Regressiva Horizontal	Força uma linha de base regressiva horizontal do ponto no cromatograma.
8. Ponto Inferior da Linha de Base Horizontal	Força uma linha de base horizontal no próximo ponto inferior.
9. Aproximação da Tangente	Força uma aproximação da tangente.
10. Aproximação da	Força uma aproximação da tangente frontal.

Tangente Frontal	
11. Área Mínima	Define uma área mínima para a detecção de pico.
12. Pico Negativo	Ativa a detecção do pico negativo.
13. Desativação de detecção de fim de pico	Desativa a detecção de fim de pico.
14. Remanejar Pico	Designa um pico diferente como o pico calibrado.
15. Linha de Base Manual	Define manualmente uma linha de base.
16. Pico Manual	Define manualmente o início e o fim de um pico.
17. Pico Dividido	Força uma perpendicular para dividir um pico.
18. Início Forçado de Pico	Força o início de um pico.
19. Parada Forçada de Pico	Força o fim de um pico.
20. Transferir Linha de Base	Transfere manualmente uma linha de base.
21. Zerar Linha de Base	Força uma linha de base até o ponto.
22. Zerar Linha de Base no Vale	Zera a linha de base no próximo vale.
23. Aproximação exponencial	Integra pequenos picos localizados na borda traseira do pico maior.
24. Aproximação	Força a linha de base exponencial para um pico filha na borda

exponencial frontal	dianteira do pico pai.
25. Ajustar Janela do Tempo de Retenção	Ajusta a janela do tempo de retenção.
26. Ajustar Intervalo do Grupo	Ajusta o intervalo do grupo.
27. Definir Pico Único	Define um pico único e o adiciona à tabela calibração do pico.
28. Definir Picos	Define vários picos e os adiciona à tabela calibração do pico.
29. Definir Grupos	Define grupos e os adiciona à tabela calibração do grupo.
30. Sugestão de Frequência de Amostragem	Sugere uma frequência de amostragem para o cromatograma.

Largura

O evento de Largura é usado para calcular um valor para agrupar, ou uniformizar, os pontos de dados antes da aplicação do algoritmo de integração. A integração funciona melhor quando há 20 pontos ao longo de um pico. Se um pico estiver acima da amostra (isto é, a frequência de amostragem for muito alta), o parâmetro **Largura** será usado para calcular a média dos dados, de modo que o algoritmo de integração veja somente 20 pontos ao longo do pico. Na definição gráfica de um valor de **Largura**, o pico mais estreito do cromatograma deverá ser usado.

Um evento de **Largura** será aplicado a um determinado pico, contanto que ele ocorra antes ou no vértice do pico.

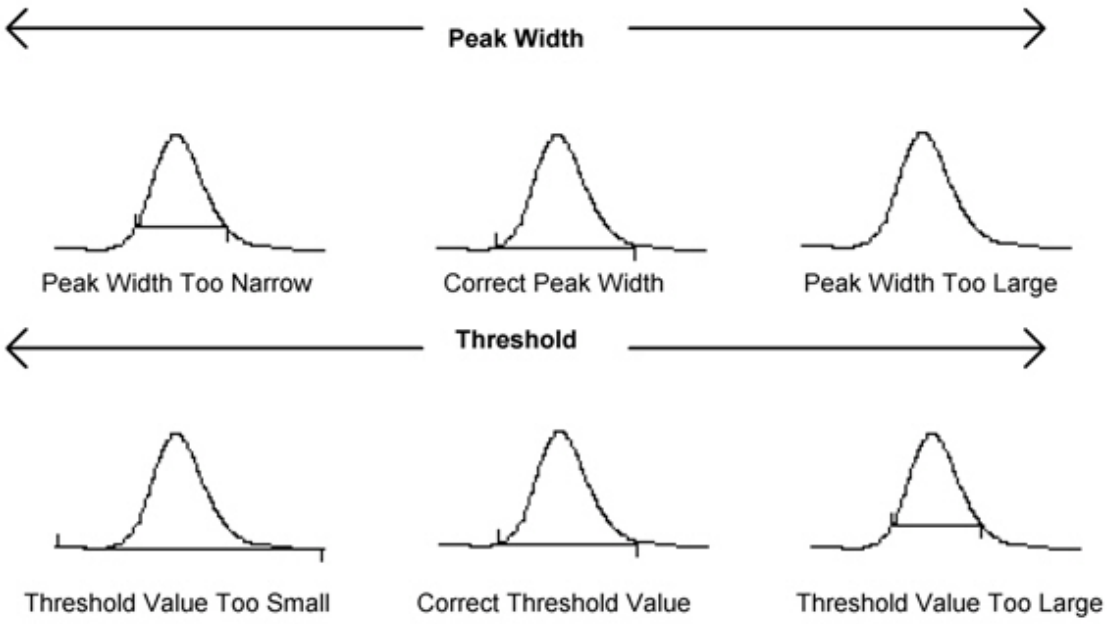
O parâmetro **Largura** é usado somente para corrigir uma superamostragem. Ele não pode corrigir dados que estiverem abaixo da amostra (isto é, frequência de amostragem muito baixa, resultando em menos de 20 pontos adquiridos ao longo do pico mais estreito).

Nota: Na maioria das circunstâncias, um valor inicial de Largura baseado no pico mais estreito do cromatograma será adequado para a integração apropriada de todos os picos. No entanto, um novo evento temporizado de Largura deverá ser inserido a cada vez que a largura pico se duplicar.

Limite

Esse parâmetro é a primeira derivada, usado para permitir que o algoritmo de integração diferencie o início e o fim dos picos a partir do ruído e desvio da linha de base. Ao definir o valor de **Limite** graficamente, selecione uma seção da linha de base. O valor de **Limite** recomendado é baseado no valor mais alto da primeira derivada determinado nessa seção do cromatograma.

O diagrama abaixo mostra exemplos de como valores incorretos para a Largura e o Limite do pico podem afetar a linha de base do pico.



Observe que valores extremos de Largura e Limite (muito altos ou muito baixos) podem resultar na não detecção dos picos.

Sensibilidade do Ombro

Esse parâmetro é usado para habilitar a detecção dos ombros em picos maiores. Um valor maior diminuirá a sensibilidade do ombro, enquanto valores menores aumentarão a sensibilidade dos picos do ombro. Ao definir o valor **Sensibilidade do Ombro** graficamente, selecione uma seção da linha de base. O valor de **Sensibilidade do Ombro** recomendado é baseado no valor mais alto da segunda derivada determinado nessa seção do cromatograma.

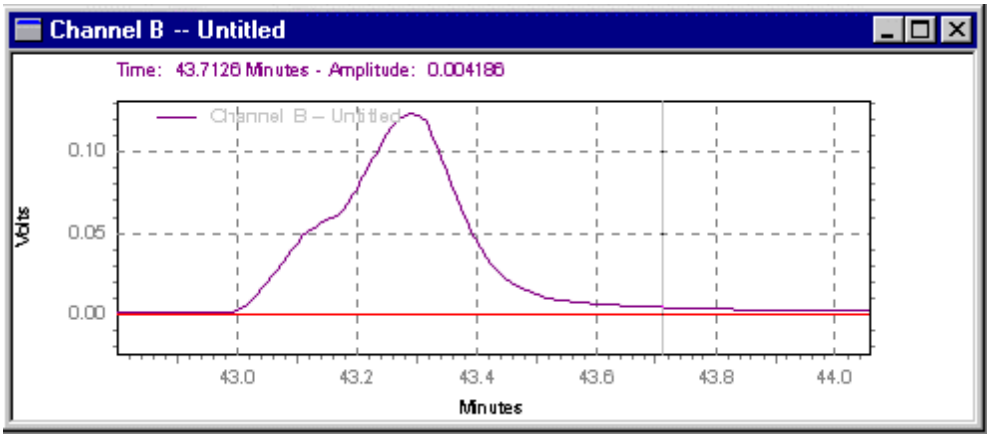
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Sensibilidade do Ombro**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final do segmento da linha de base.

3. Na caixa de diálogo **Sensibilidade do Ombro**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

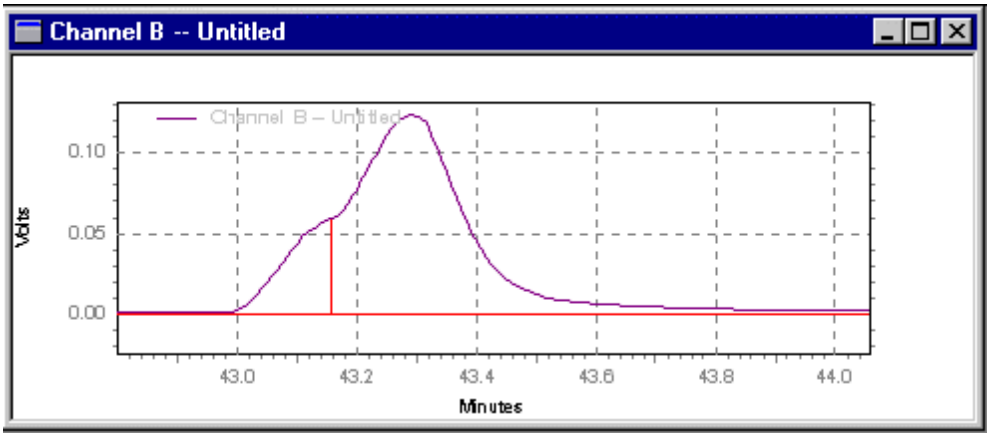
- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.

- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Conjunto de Valores da Sensibilidade do Ombro muito alto



Conjunto de Valores da Sensibilidade do Ombro correto

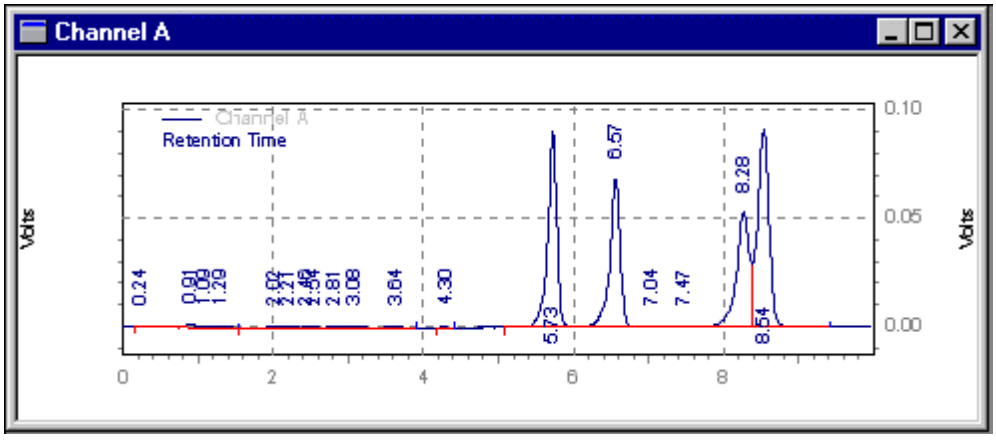
Integração Desativada

Esse evento desativa a integração do cromatograma durante o intervalo especificado. Esse evento é útil quando não se está interessado em determinadas áreas do seu cromatograma e não deseja que picos sejam relatados para essa seção.

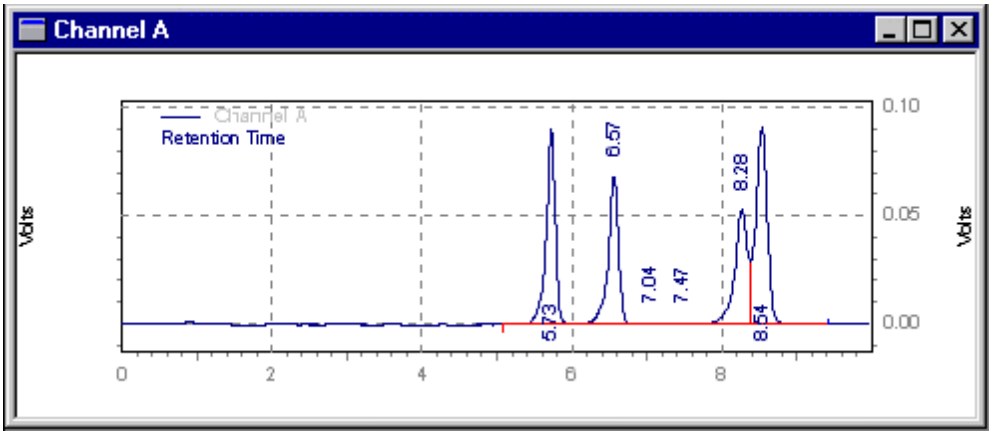
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o **Integração Desativada**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Integração Desativada**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Integração padrão



*Evento de **Integração Desativada** de 0 a 5 minutos*

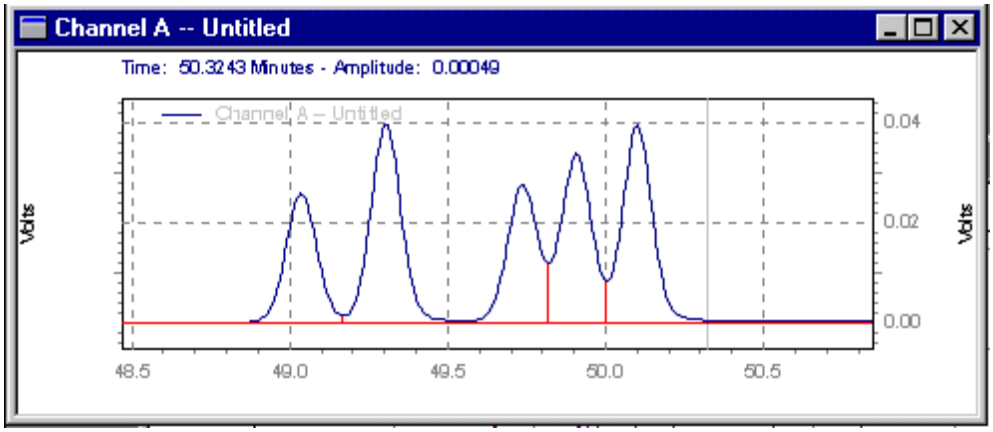
Vale a Vale

Esse evento faz com que as linhas de base dos picos que não foram totalmente resolvidos (isto é, não retornaram à linha de base) sejam alongadas até o ponto mínimo entre os picos. Se esse evento não for usado, a linha de base será projetada para o próximo ponto no qual o cromatograma retornará para a linha de base, e um perpendicular será solto para picos que não atinjam a linha de base.

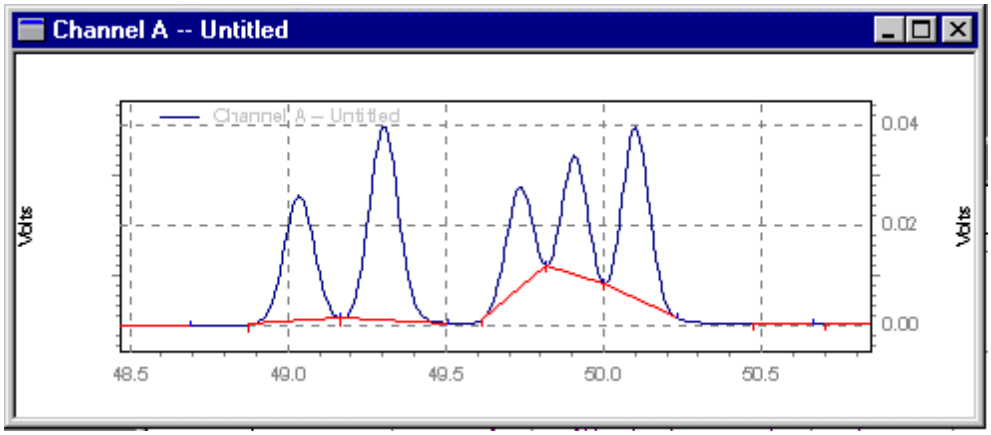
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Vale a Vale**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Vale a Vale**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Integração Padrão



*Integração com o evento de **Vale a Vale***

Linha de Base Horizontal

Esse evento permite projetar a linha de base para frente, horizontalmente, entre os intervalos de tempo especificados para o evento.

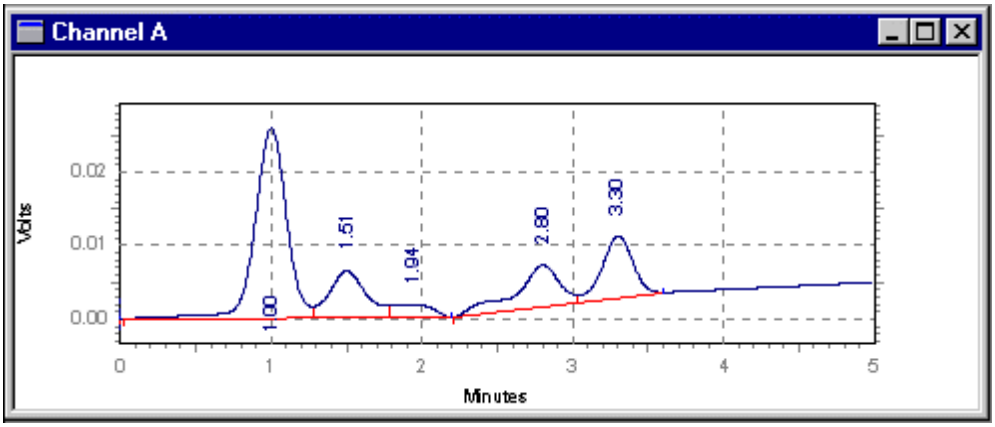
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Linha de Base Horizontal**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Linha de Base Horizontal**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for

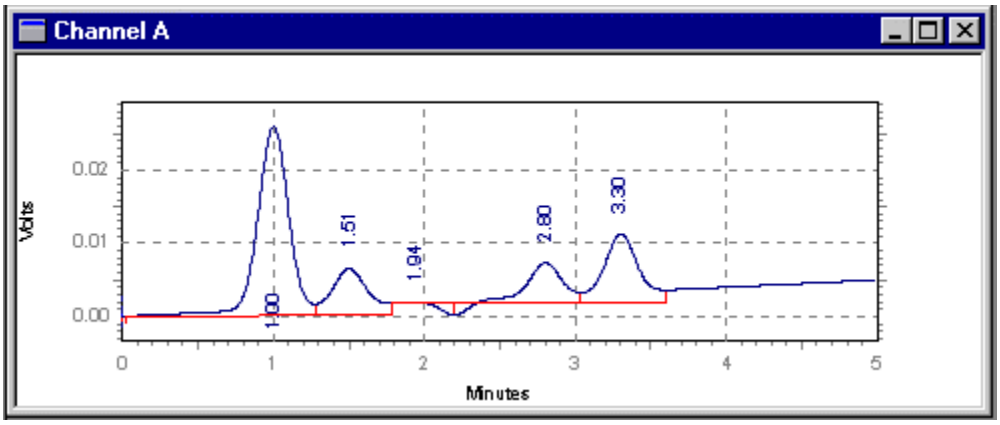
salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.

- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Integração sem o Evento de Linha de Base Horizontal



Integração com a Linha de Base Horizontal entre 1,8 e 3,6 minutos.

Linha de Base Regressiva Horizontal

Esse evento é usado para forçar a linha de base horizontal em direção ao início do cromatograma. Uma linha de base regressiva horizontal poderá ser criada entre os intervalos de tempo especificados pelo evento.

1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Linha de Base Regressiva Horizontal**.

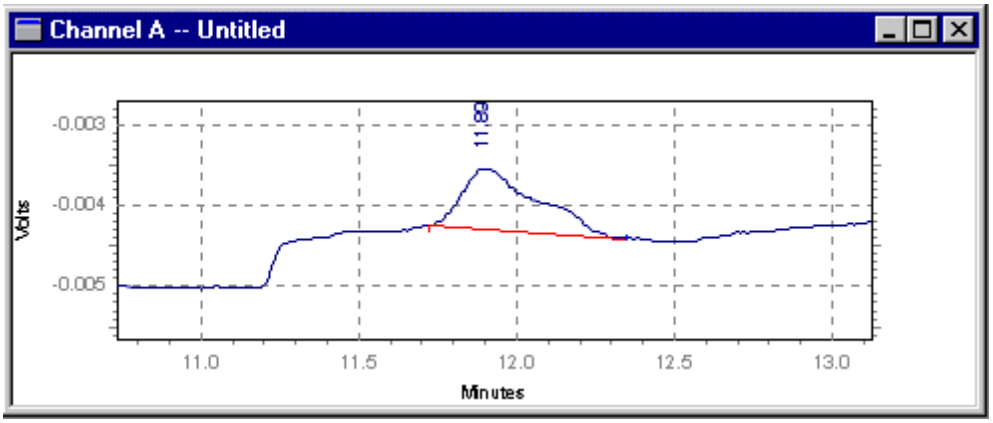
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.

3. Na caixa de diálogo **Linha de Base Regressiva Horizontal**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

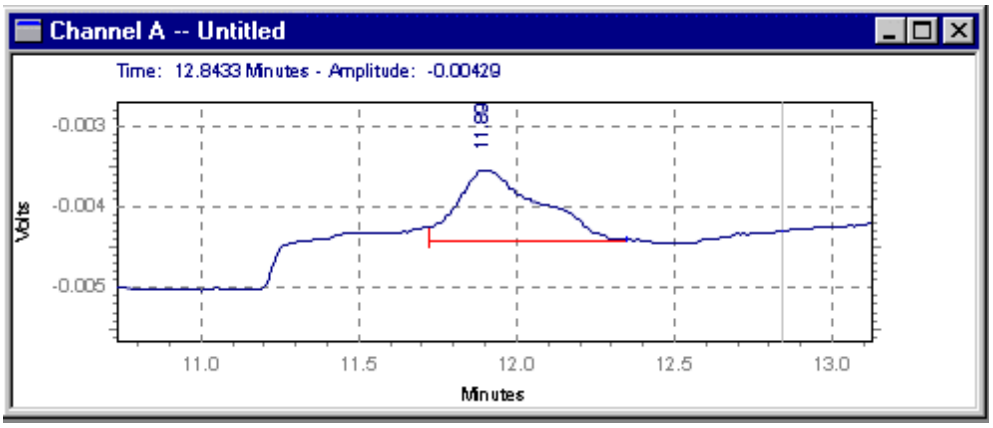
- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.

- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Integração padrão



Integração depois da linha de base regressiva horizontal

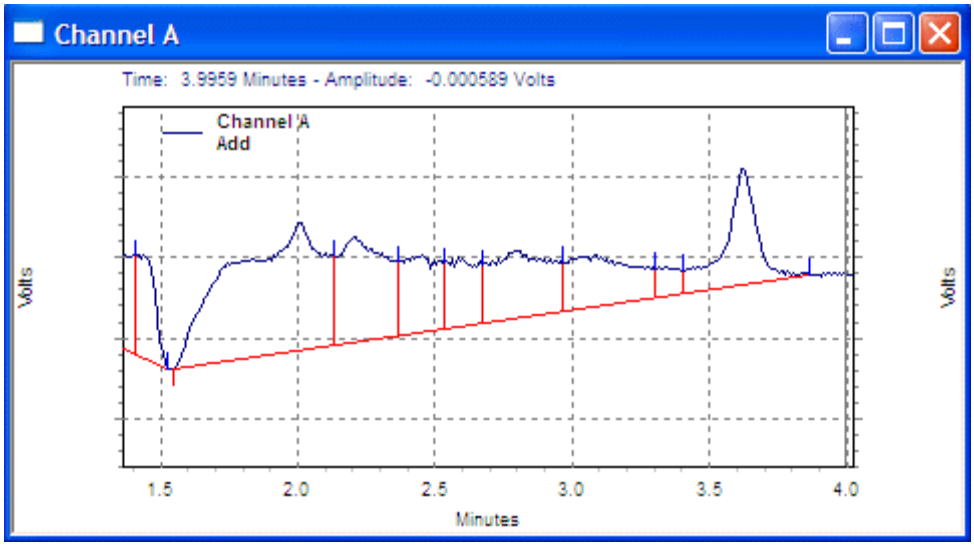
Ponto Inferior da Linha de Base Horizontal

Esse evento é semelhante ao evento de Linha de Base Horizontal, exceto pelo fato de que o ponto inferior no cromatograma é que determina a linha de base. Os valores inseridos para Hora de Início e Hora de Parada determinam a região dentro do cromatograma onde o ponto inferior da linha de base horizontal será usado.

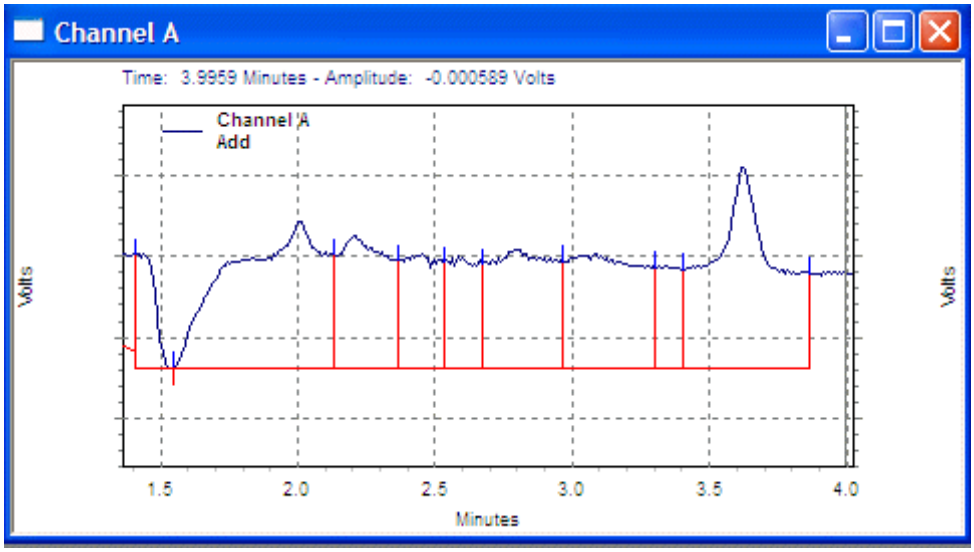
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Ponto Inferior da Linha de Base Horizontal**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Ponto Inferior da Linha de Base Horizontal**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Integração antes de usar o evento do Ponto Inferior Horizontal



Integração depois de usar o evento do Ponto Inferior Horizontal

Aproximação da Tangente

Esse evento é usado para integrar um pequeno pico localizado na borda traseira de um pico maior. A linha de base do pico menor torna-se uma tangente alongada do vale do pico maior até o ponto da tangente no cromatograma.

1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o **Aproximação da Tangente**.

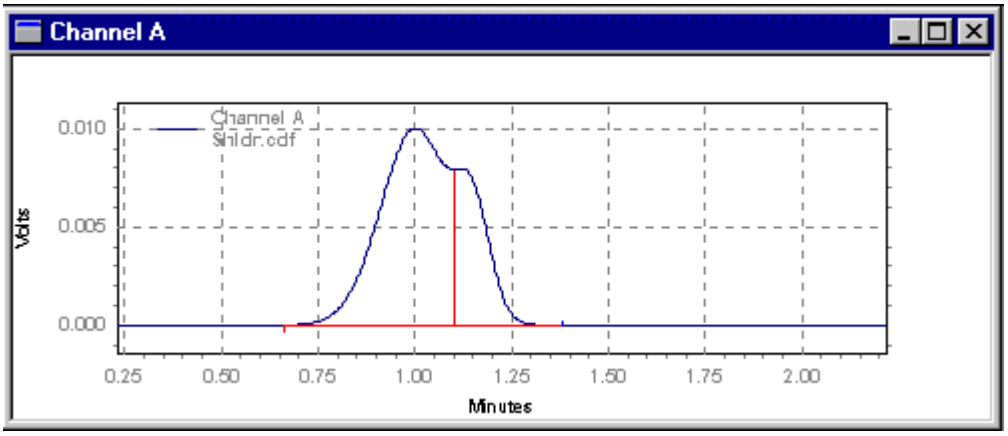
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.

3. Na caixa de diálogo **Aproximação da Tangente**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

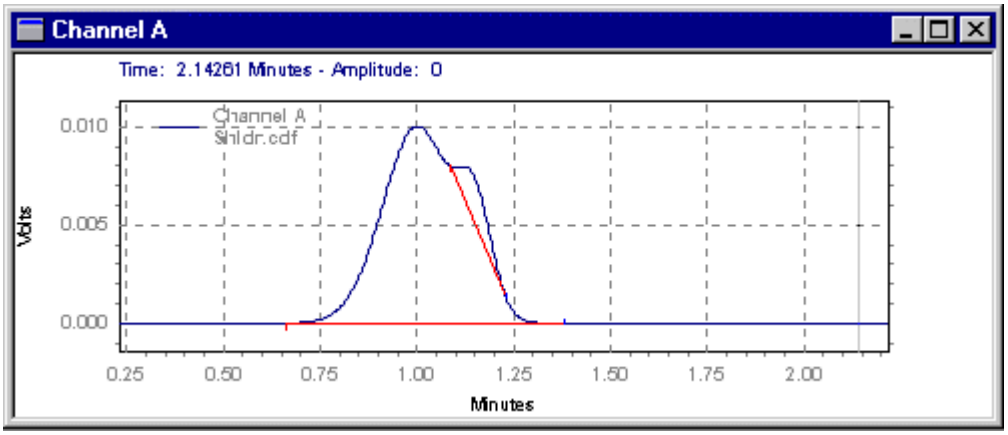
- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.

- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Integração sem o Evento de Aproximação da Tangente



Integração com o Evento de Aproximação da Tangente

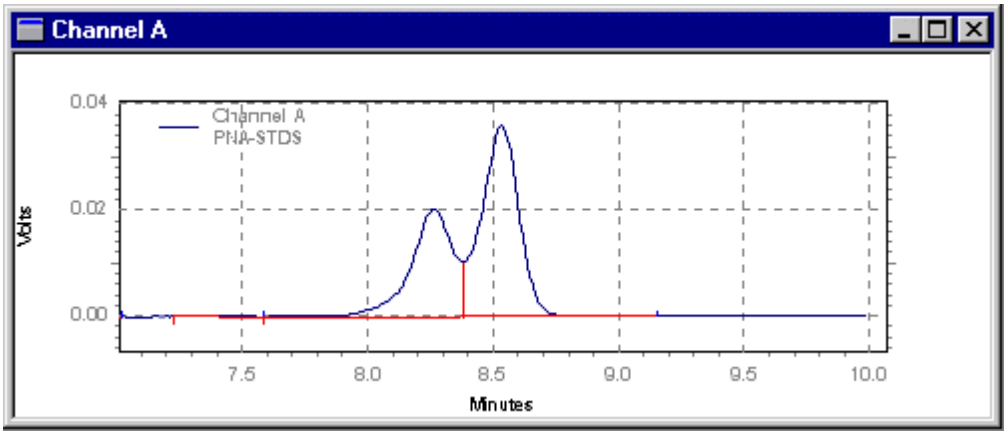
Aproximação da Tangente Frontal

O Evento de Aproximação da Tangente Frontal é usada para forçar uma linha de base tangencial para um pico filha na borda dianteira de um pico pai.

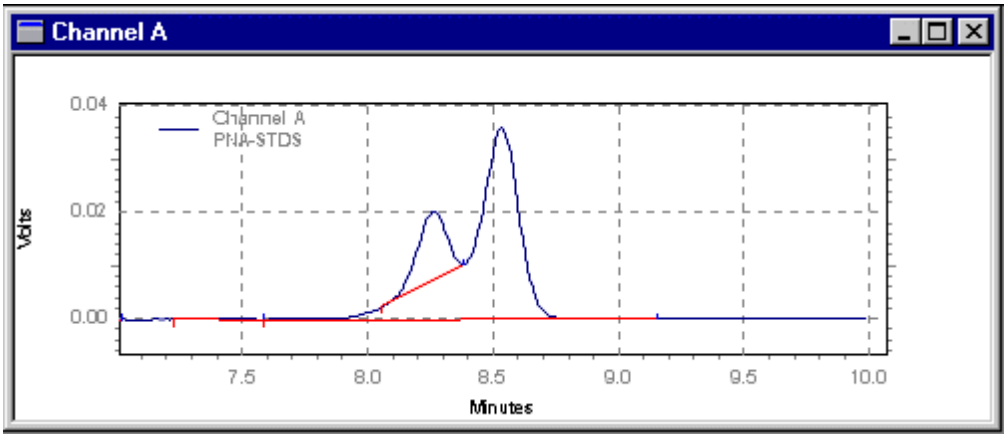
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Aproximação da Tangente Frontal**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Aproximação da Tangente Frontal**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Antes do Evento de Aproximação da Tangente



Depois do Evento de Aproximação da Tangente Frontal

Área Mínima

Esse evento permite inserir um limite de área para detecção de pico. Os picos cujas áreas se enquadram nessa área mínima não serão integrados nem reportados como picos. Esse evento é útil para eliminar picos contaminosos ou ruído do seu relatório.

1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Área Mínima**.

2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.

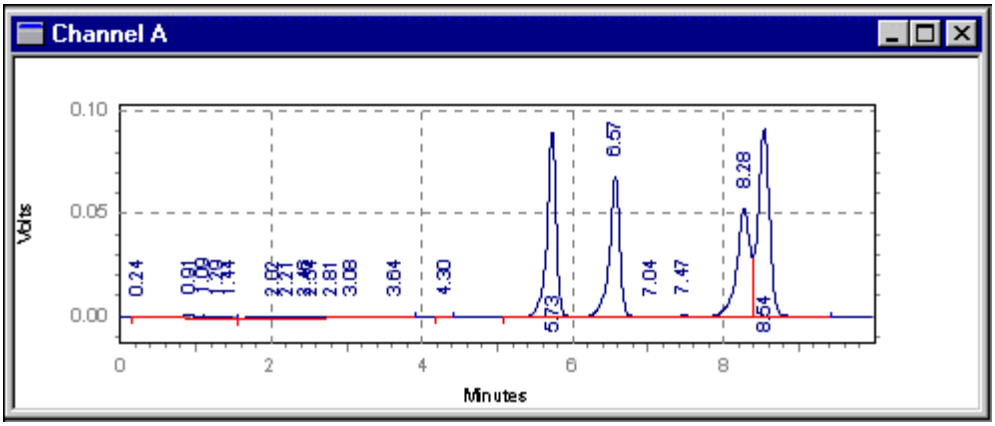
3. Na caixa de diálogo **Área Mínima**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for

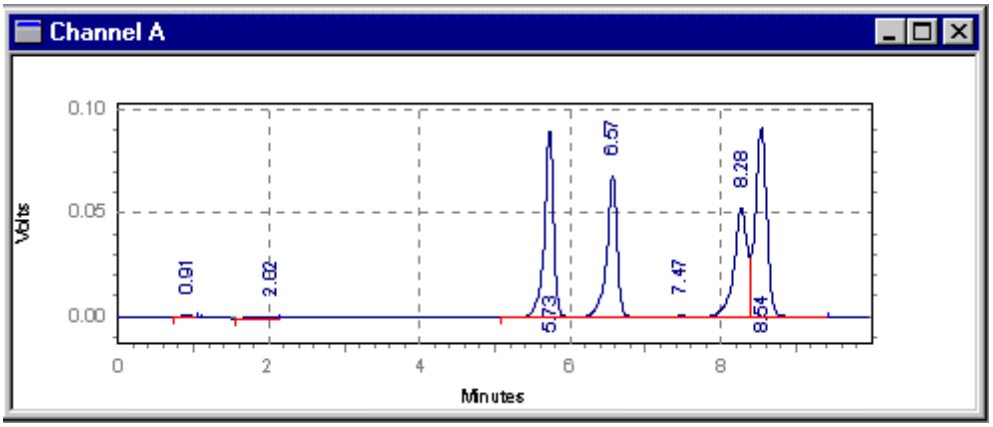
salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.

- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Integração sem Evento de Área Mínima



Integração com Evento de Área Mínima

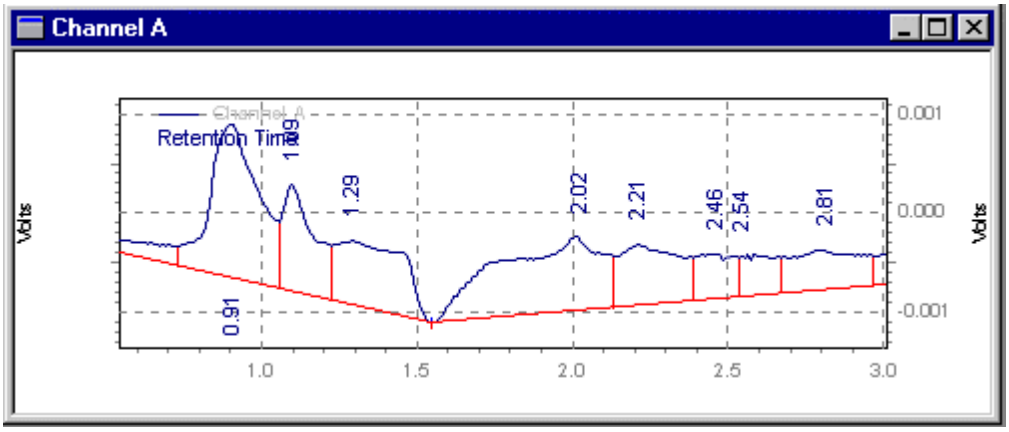
Pico Negativo

Esse evento faz com que as partes do cromatograma que ficam abaixo da linha de base sejam integradas usando a lógica de pico normal e relatadas como picos verdadeiros. Esse evento é útil ao usar detectores, como os tipos de Índice Refrativo, que dão uma resposta negativa a determinados compostos.

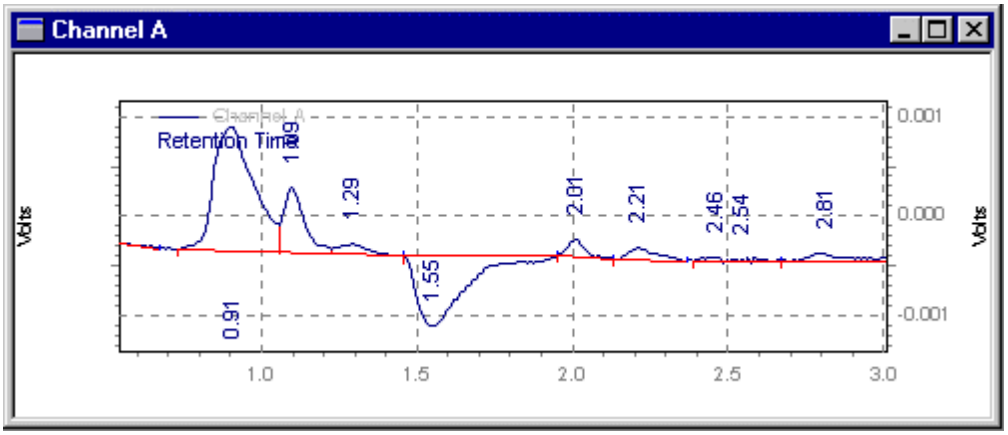
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Pico Negativo**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Pico Negativo**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Integração padrão



Integração com evento de ***Pico Negativo***

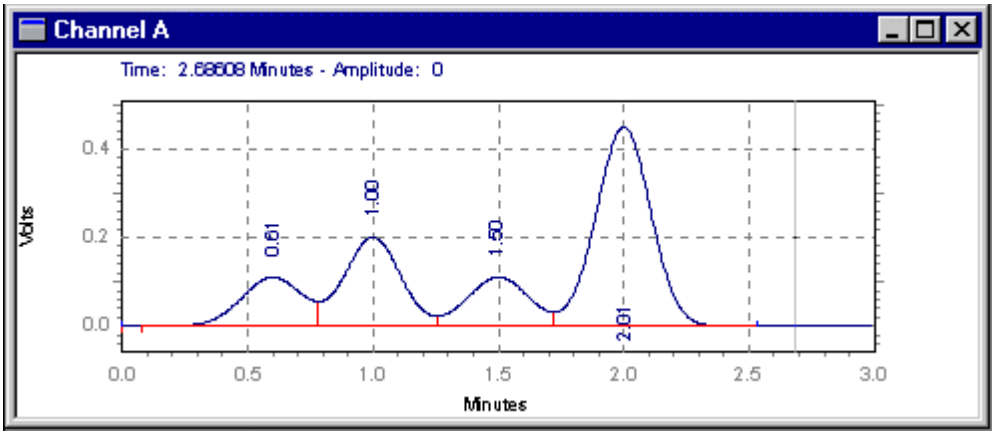
Desativar Detecção de Fim de Pico

Esse evento é usado para desativar a detecção de fim de pico entre intervalos de tempo especificados, forçando o software a tratar picos que se enquadram na janela do evento como um pico único. Esse evento é uma maneira útil de se combinar as áreas de uma série de picos contíguos em uma única área. Como os picos são considerados parte de um pico único, o tempo de retenção é atribuído ao tempo do primeiro vértice depois do evento Desativar Detecção de Fim de Pico.

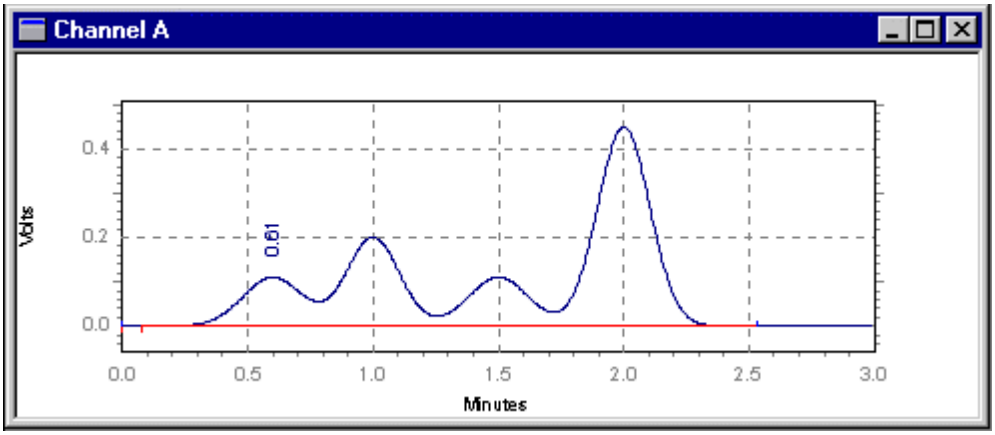
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Desativar Detecção de Pico Final**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Desativar Detecção de Pico Final**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Integração Padrão



Desativar Detecção de Fim de Pico entre 0,4 e 2,2 minutos

Remanejar Pico

Esse evento permite designar graficamente um pico diferente como o pico calibrado no lugar do pico que foi identificado. Esse evento não altera os valores na Tabela de Picos.

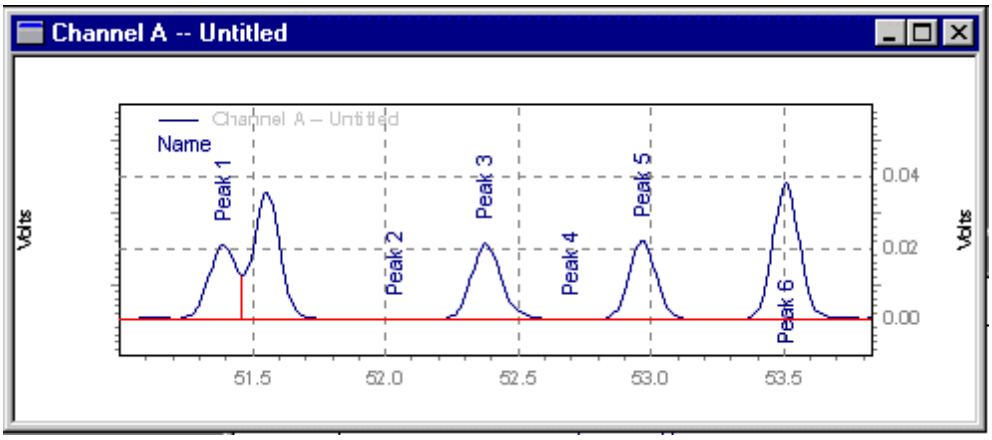
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Remanejar Pico**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Remanejar Pico**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.

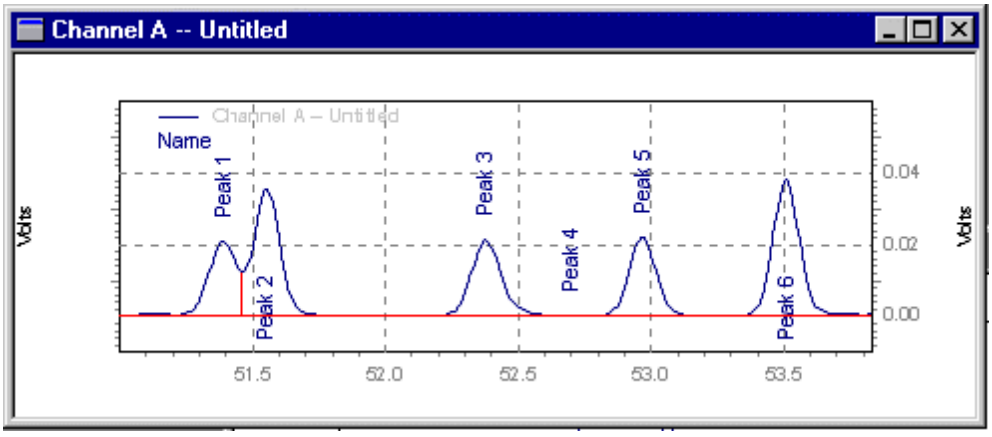
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.

No exemplo a seguir, o Pico 2 foi remanejado para um novo pico.



Antes do remanejamento do Pico 2



Depois do remanejamento do Pico 2

Linha de Base Manual

Esse evento permite alterar a maneira como a linha de base de um pico é retirada sem alterar os parâmetros de integração. Isso é útil quando se deseja alterar onde a linha de base será retirada de um pico sem alterar a maneira em que ela será retirada de outros picos do cromatograma.

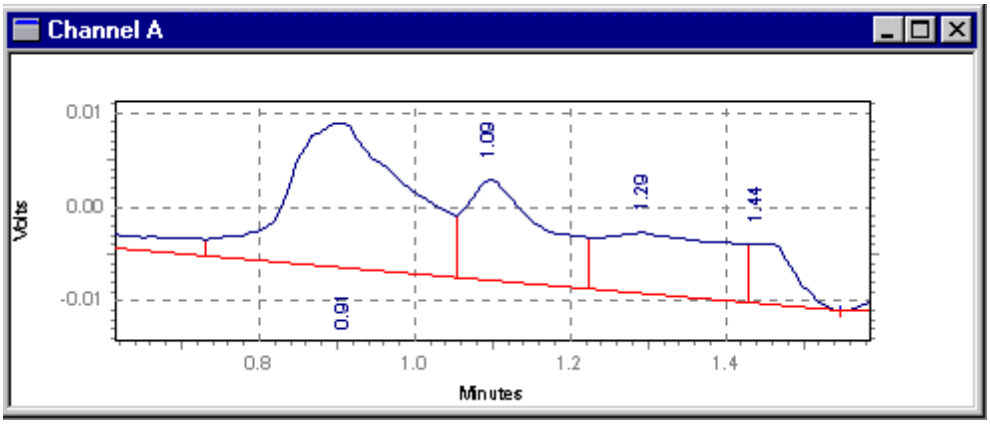
O evento de **Linha de Base Manual** foi usado para "desenhar" uma nova linha de base do segundo pico. Para desenhar a nova linha de base, selecione o comando **Linha de Base Manual** e clique com o mouse no início da linha de base desejada e novamente no fim da linha de base desejada.

1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Linha de Base Manual**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Linha de Base Manual**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

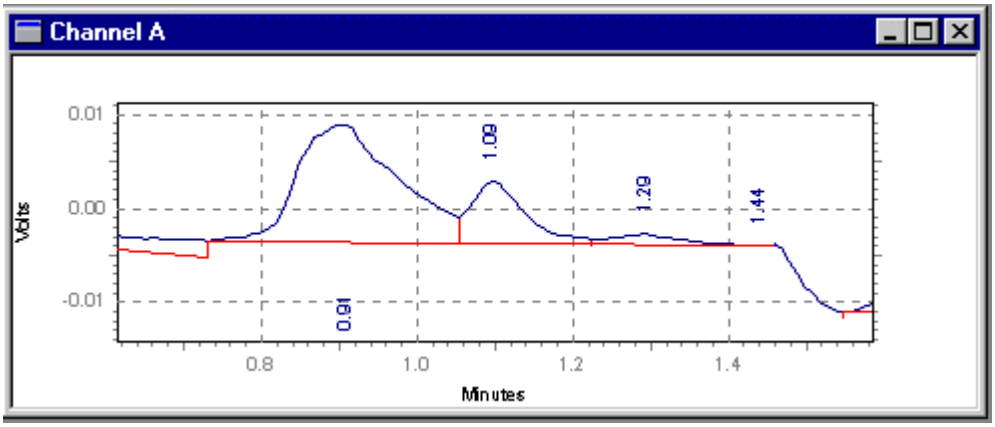
- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.

Os eventos de **Linha de Base Manual** são armazenados, por padrão, na tabela de Correções de Integração Manual.



Integração Padrão



Integração com a Linha de Base Manual entre 0,765 e 1,43 minutos

Pico Manual

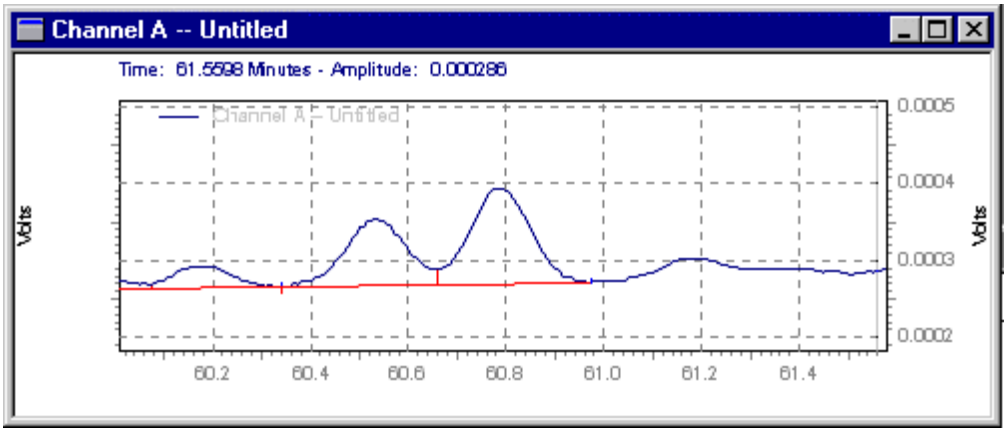
Esse comando permite definir graficamente um pico que não foi detectado anteriormente. Isso é útil quando se deseja forçar a integração de um pico, mas não quer alterar os parâmetros gerais de integração.

1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Pico Manual**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Pico Manual**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

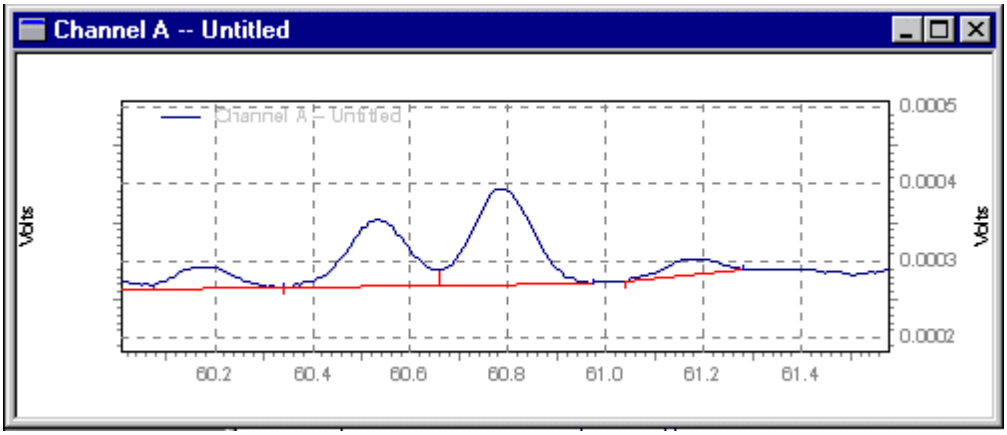
- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.

- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento



Integração Padrão



Integração de picos forçada usando o evento de Pico Manual

Pico Dividido

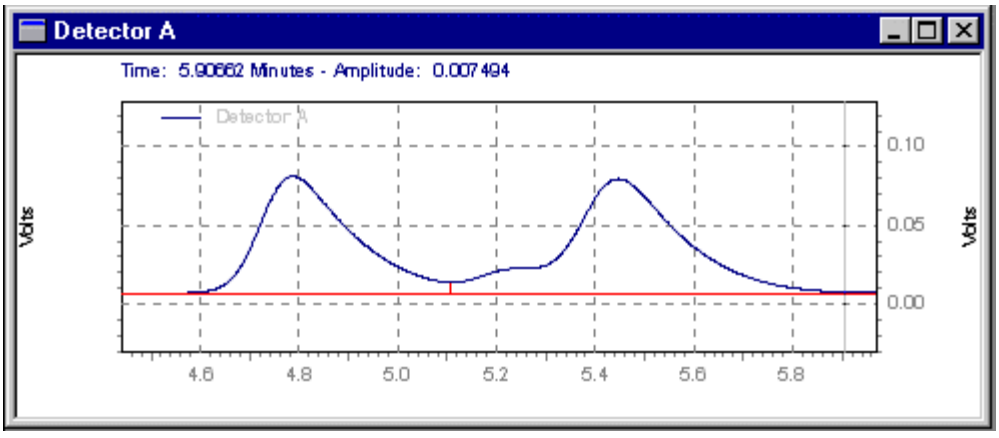
Esse evento é usado para forçar uma integração de linha vertical perpendicular em um pico. O perpendicular será solto no ponto em que o evento será inserido.

1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela Instrumento, selecione o botão **Pico Dividido**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial e final.
3. Na caixa de diálogo **Pico Dividido**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

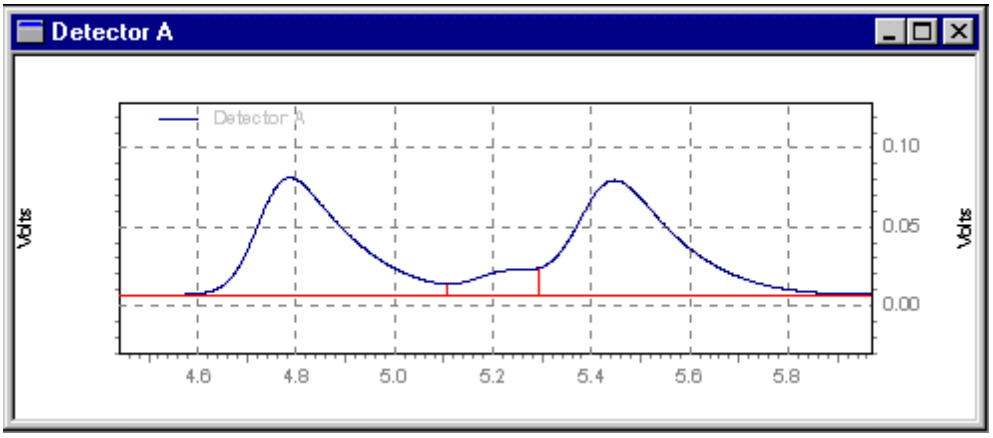
- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.

Esse evento é armazenado, por padrão, na tabela de Correções de Integração Manual.



Integração antes do pico dividido



Integração depois do pico dividido adicionado aos 5,3 minutos

Início Forçado de Pico/Parada Forçada de Pico

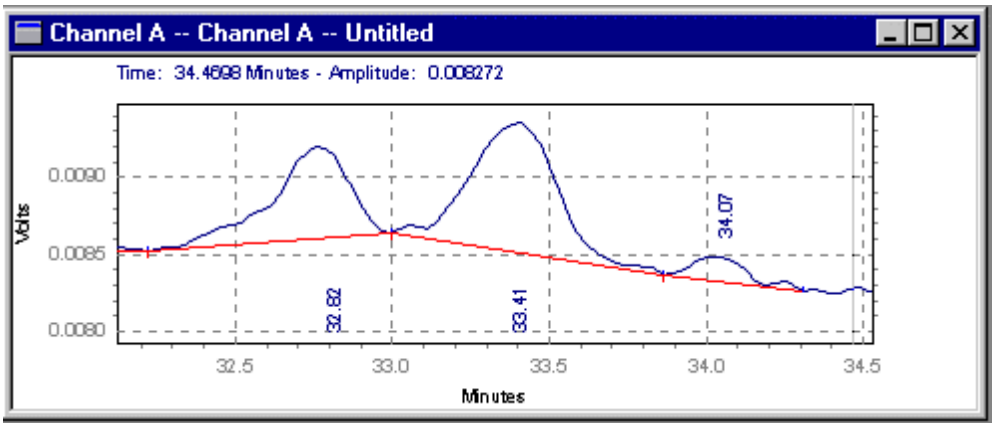
Esses eventos são usados para forçar o início ou a parada da integração de picos em um ponto específico.

1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Início Forçado de Pico**ou**Parada Forçada de Pico**.
2. No cromatograma, selecione os pontos inicial ou de parada.
3. Na caixa de diálogo **Início Forçado de Pico**ou**Parada Forçada de Pico** , selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

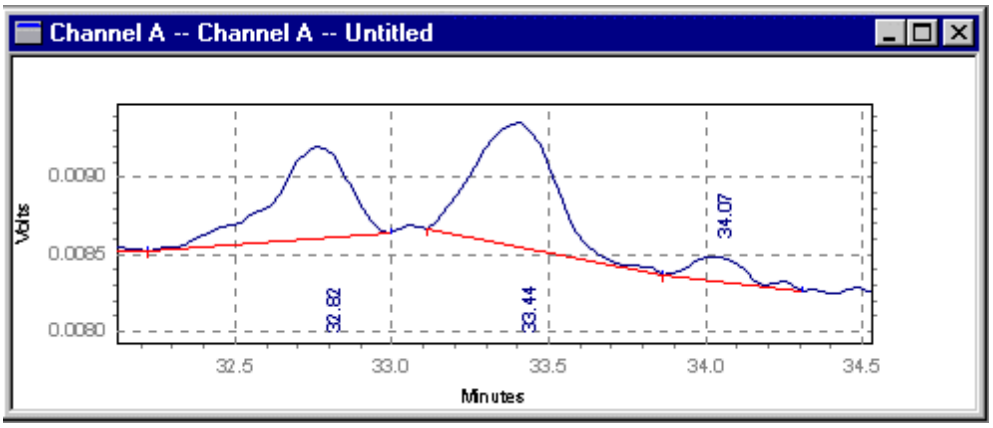
- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento temporizado e cancelar a operação. Clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma que usa esse evento.

Esse evento é armazenado, por padrão, na tabela de Correções de Integração Manual.



Integração Padrão



Integração depois o início forçado do pico central para 33,1 minutos.

Transferir Linha de Base

Esse evento permite transferir o início ou o fim de uma linha de base clicando nele e arrastando-o para um novo local.

1. Ao selecionar **Transferir Linha de Base,** será solicitado que você clique no segmento da linha de base que deseja modificar. Os pontos de início e fim da linha de base aparecerão destacados com uma caixa.

2. Ao mover o cursor para um local dentro do intervalo do ponto de início ou fim, ele se transformará em uma "âncora". Clique no botão esquerdo do mouse e "arraste" o ponto inicial da linha de base para o novo local e solte o botão.

3. Você pode continuar a "clicar e arrastar" a linha de base dessa forma até que ela esteja no local correto. Em seguida, pressiona a tecla "Esc". Uma caixa de diálogo aparecerá com os valores de início e fim antigos e novos da linha de base.

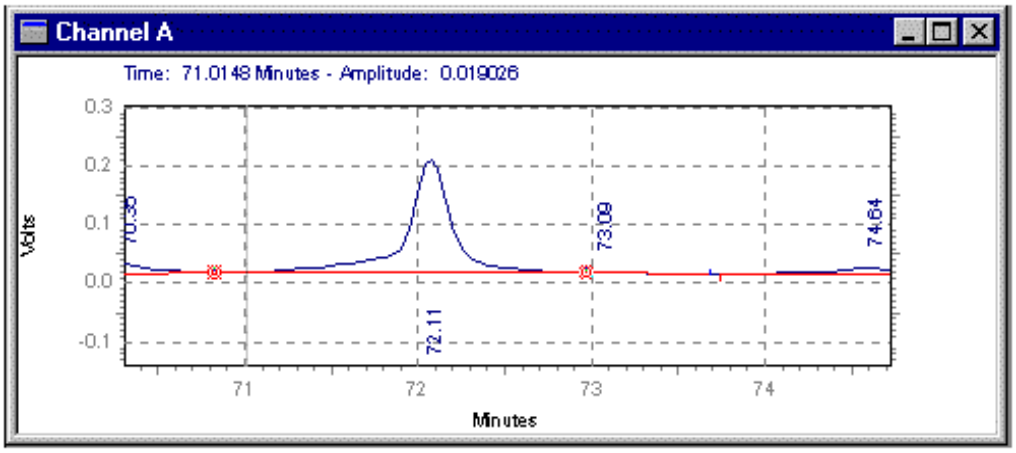
4. Clique em **Selecionar** para incluir a linha de base modificada. Quando essa caixa não for selecionada, o evento de transferência de linha de base não será usado para integração.

5. Selecione **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**para tornar a alteração dessa linha de base uma parte do método a ser usado sempre que ele for usado para integrar dados. Selecione **Adicionar eventos apenas a este arquivo de dados** para que a alteração dessa linha de base seja feita somente no arquivo de dados atual (correção de integração manual).

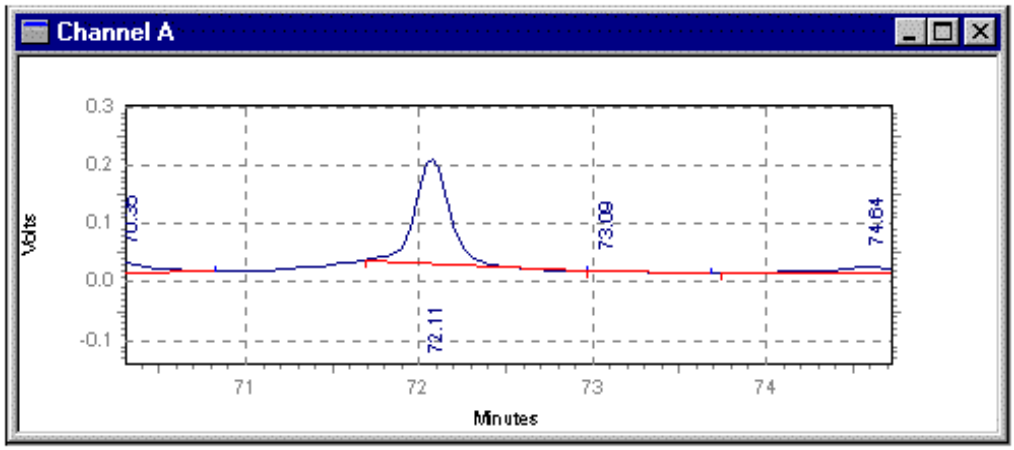
6. Clique no botão **Adicionar à Tabela** e o evento temporizado será inserido na **Tabela de Eventos de Integração** ou na **Tabela de Correções de Integração Manual**, dependendo do item que foi selecionado na etapa 5 acima. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento temporizado e cancelar a operação. Clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma que usa esse evento.

7. Os eventos de Início de Transferência de Linha de Base e Fim da Transferência de Linha de Base são armazenados, por padrão, na tabela de Correções de Integração Manual.

A seguir um exemplo do evento de **Início de Transferência de Linha de Base**.



Antes da transferência da linha de base. Os pontos de início e fim da linha de base estão indicados



Início da linha de base do pico transferido para aproximadamente 71,7 minutos.

Zerar Linha de Base

Esse evento permite definir a linha de base em um ponto designado do cromatograma.

Para inserir o evento graficamente

1. Na janela do cromatograma, clique no botão de evento gráfico **Zerar Linha de Base**.
2. Clique com o mouse no ponto do cromatograma ao qual adicionar o evento.
3. Clique em **Adicionar evento ao Método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**
4. Clique em **Adicionar à Tabela** para adicionar o evento à tabela de eventos de integração.
5. Na caixa de diálogo **Zerar Linha de Base**:
    - Selecione **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, para adicionar o evento à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
    - Selecione **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados** para adicionar o evento à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.
    - Clique em **Cancelar** para ignorar o evento temporizado e cancelar a operação. Clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma que usa esse evento.

Zerar Linha de Base no Vale

Esse evento fará com que a linha de base seja zerada no próximo vale detectado depois do evento.

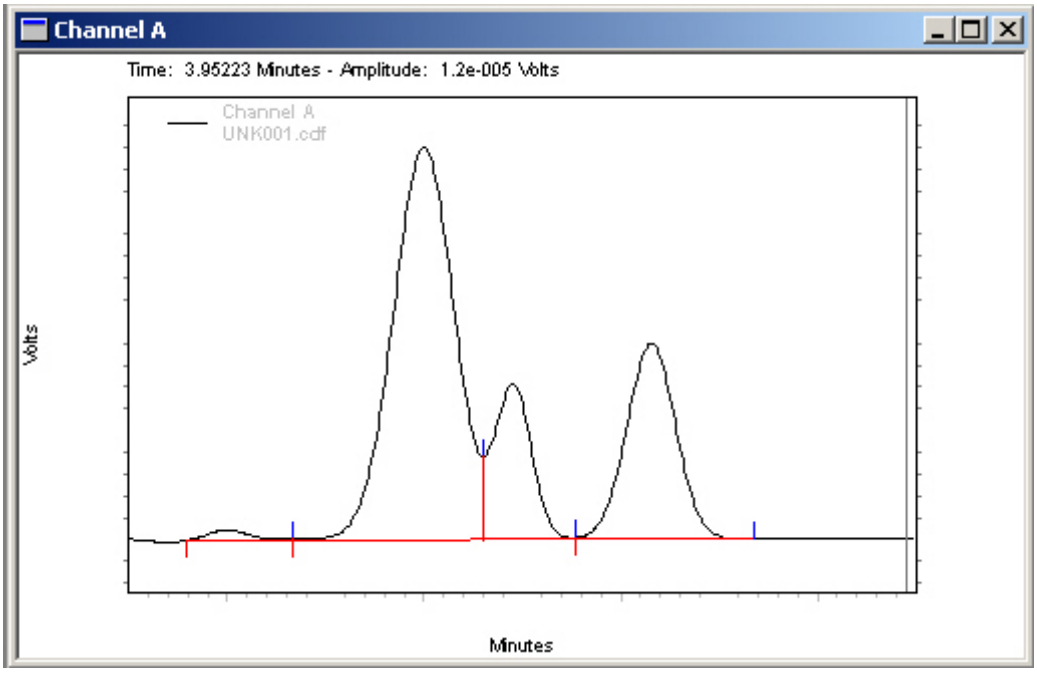
Nota: O evento deve ser colocado depois do início do primeiro pico do cluster; caso contrário, o início do pico será identificado como o vale.

1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Zerar Linha de Base no Vale**.
2. No cromatograma, selecione um local depois do início do primeiro pico do cluster; caso contrário, o início do pico será identificado como o vale.
3. Na caixa de diálogo **Zerar Linha de Base no Vale**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

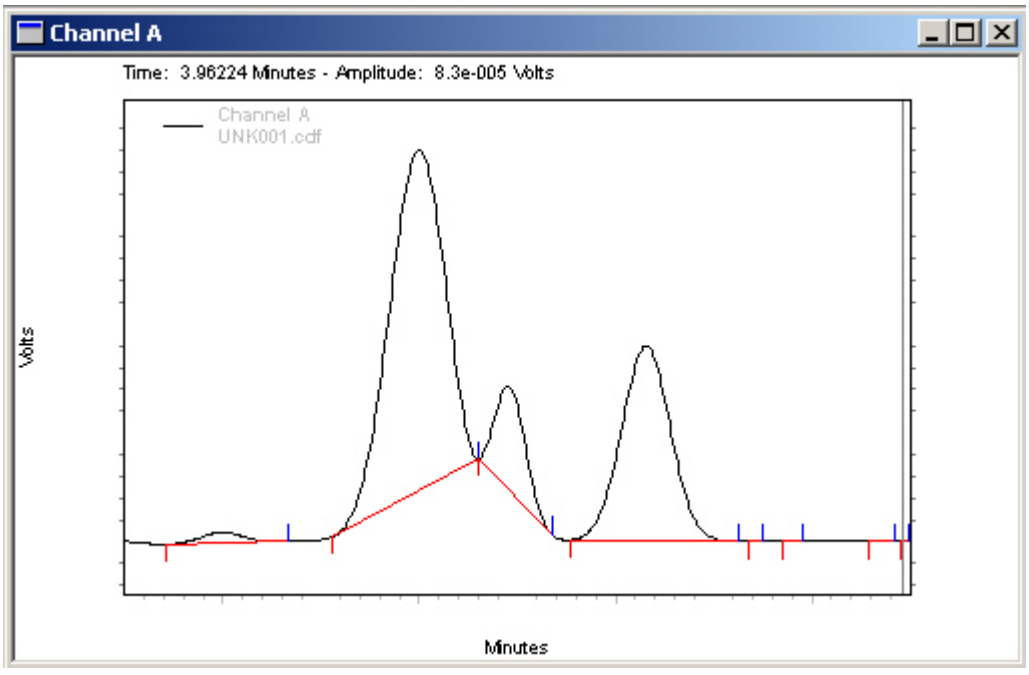
- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

4. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.

Abaixo, segue um exemplo desse evento.



Linha de Base antes do evento Zerar Linha de Base no Vale



Linha de Base depois do evento Zerar Linha de Base no Vale

Aproximação exponencial

Esse evento é usado para integrar pequenos picos localizados na borda traseira do pico maior. A linha de base do pico menor torna-se um exponencial alongado do vale do pico maior até o ponto da tangente no cromatograma.

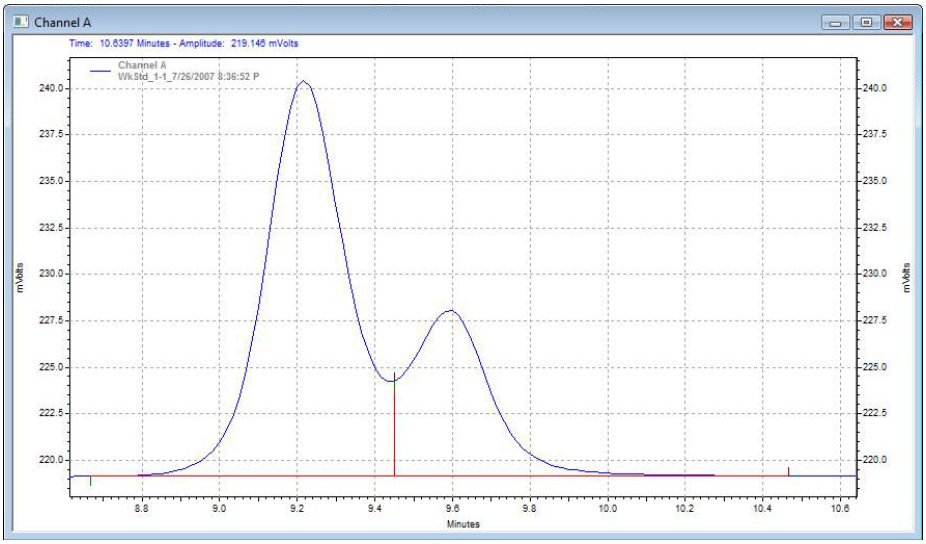
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Aproximação de Exponente**.

2. Na caixa de diálogo **Aproximação de Exponente**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

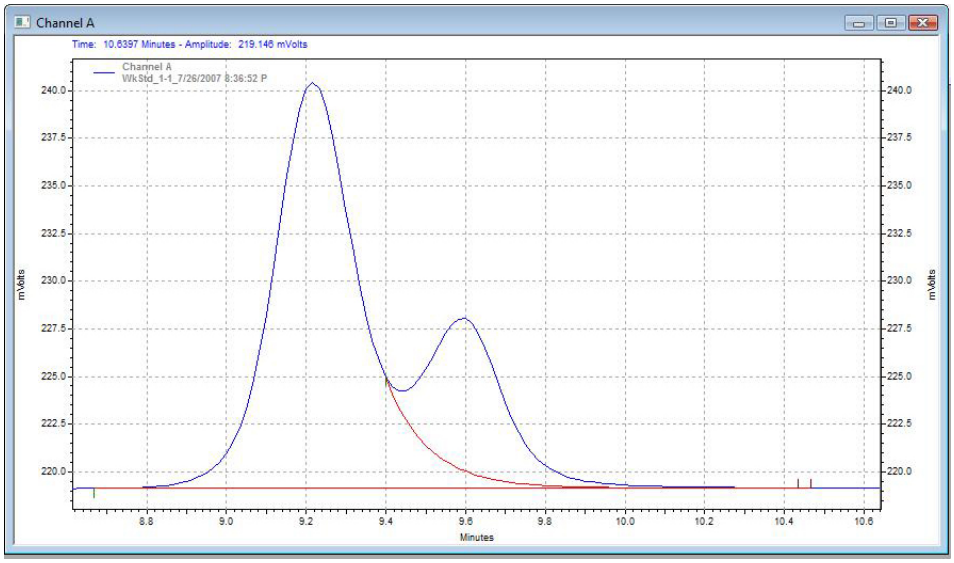
- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.

- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

3. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Antes do evento de Aproximação de Exponente



Depois do evento de Aproximação de Exponente

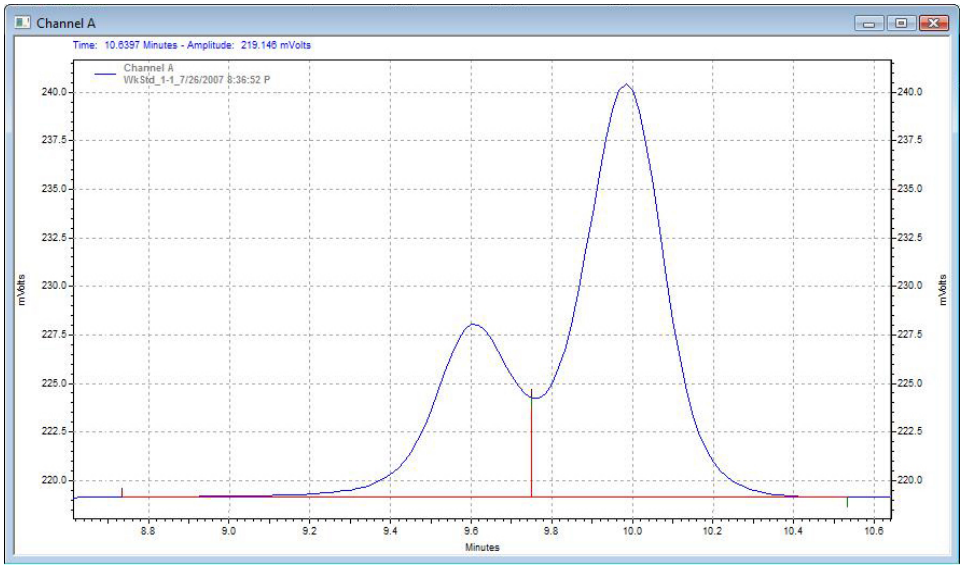
Aproximação Exponencial Frontal

A Aproximação de Exponente Frontal é usada para forçar uma linha de base exponencial para um pico filha na borda dianteira de um pico pai.

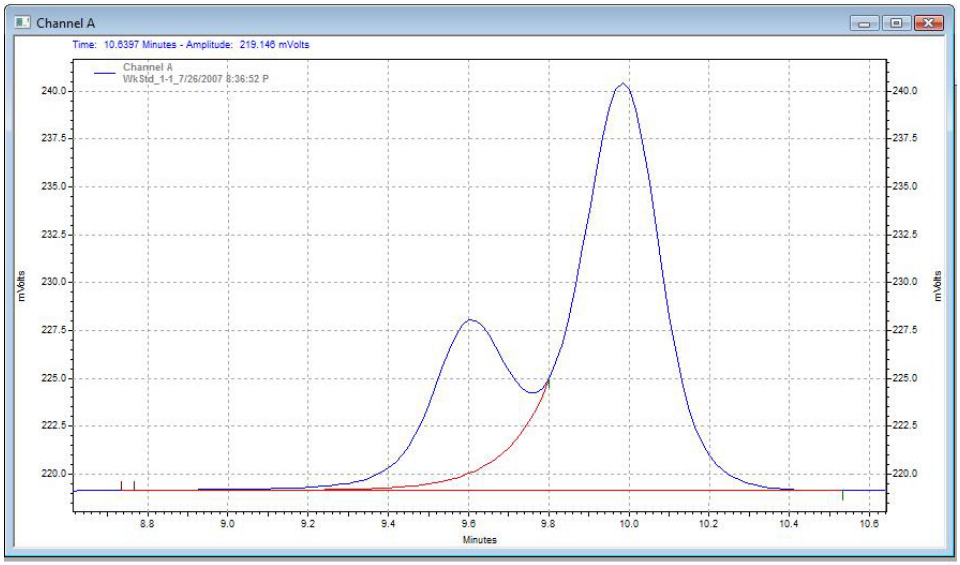
1. Na barra de ferramentas de Integração localizada na parte inferior da janela do instrumento, selecione o botão **Aproximação de ExponenteFrontal**.
2. Na caixa de diálogo **Aproximação de Exponente Frontal**, selecione **Adicionar evento ao método (todos os dados)** ou **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados.**

- Ao selecionar **Adicionar evento ao Método (todos os dados)**, o evento será adicionado à tabela Eventos de Integração ao clicar no botão **Adicionar à Tabela**. Se o método for salvo, então o evento será aplicado a cada arquivo de dados integrado que usar esse método.
- Ao selecionar **Adicionar evento apenas a este arquivo de dados**, o evento será adicionado à tabela de Correções de Integração Manual ao clicar no botão **Adicionar à Tabela** e será aplicado somente a esse arquivo de dados.

3. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento expirado e cancelar a operação ou clique em **Analisar Agora** para adicionar o evento à tabela e analisar o cromatograma usando o evento.



Antes do evento de Aproximação de Exponente Frontal



Depois do evento de Aproximação de Exponente Frontal

Ajustar Janela TR

A janela do tempo esperado de retenção esperado é definida ao adicionar um pico à tabela calibração. É possível alterar graficamente a janela do tempo de retenção para qualquer pico calibrado usando esse evento gráfico.

Nota: Para ajustar graficamente a janela do tempo de retenção, você deve ter uma anotação da Janela TR ativada. Para ativar a Janela do Tempo de Retenção, na janela do cromatograma, clique com o botão direito do mouse e selecione Anotações... Em Propriedades de Anotação de Traço, verifique se a Janela TR está selecionada no painel "Outro", na parte inferior.

Para ajustar a Janela TR na Janela Cromatograma

1. Clique no botão **Ajustar Janela TR** na parte inferior da Janela Cromatograma e clique na Janela TR que deseja ajustar. O cursor se transformará em uma seta dupla e serão exibidas duas caixas.
2. É possível ajustar a janela tr arrastando o fim ou a própria barra de tempo de retenção.
3. Se você mover a barra, o TR Esperado será atualizado e a Janela TR permanecerá igual.
4. Se você mover a ponta da barra, a outra ponta permanecerá em sua posição atual, e o TR Esperado e a Janela TR serão atualizados.
5. Repita o procedimento para ajustar as janelas de TR adicionais.
6. Depois de ajustar as janelas de acordo com sua preferência, pressione **ESC** para concluir. Surgirá um diálogo exibindo uma tabela com as alterações feitas na janela TR. Cada linha exibe o **Nome** do pico, o **Tempo de Ret. Anterior**, o **Tempo de Retenção Novo**, a **Janela de TR Antiga** e a **Janela de Retenção Nova**. É possível ajustar manualmente o **Novo Tempo de Retenção** e as **Janela de Novo TR** clicando no campo e digitando o valor desejado.
7. Por padrão, todas as atualizações da janela de TR são **Selecionadas**. Limpe a caixa **Selecionar** para cada atualização de ajuste da janela TR que não deseja incluir.
8. Clique em **Atualizar TR** e os Tempos de Retenção serão atualizados na tabela de picos. Clique em **Cancelar** para ignorar o evento e cancelar a operação. Clique em **Analisar Agora** para atualizar a tabela de picos e analisar o cromatograma usando o Tempo de Retenção e as janelas de TR atualizados.

Velocidade de Amostragem

A velocidade de amostragem usada para adquirir seus dados determina quantas informações o algoritmo de integração tem para desenhar e integrar o cromatograma. A frequência de amostragem é definida na parte Configuração do Instrumento do método. Para ter certeza de que a velocidade de amostragem está correta, use o comando **Sugestão de Frequência de Amostragem** na programação gráfica. Uma leve superamostragem de dados é corrigida com o parâmetro de integração **Largura** e não é um problema. Entretanto, tente evitar a superamostragem dos dados, já que isso não oferece uma integração melhor e ocupa espaço no disco rígido do seu computador. Contudo, o mais importante é não deixar a velocidade ficar abaixo do normal, visto que não há nenhuma forma de corrigir os pontos de dados insuficientes para definir e integrar os picos.

Antes de tentar adicionar eventos de integração expirados, certifique-se de que o seu cromatograma tenha sido analisado com o método atual. Para ter certeza, procure por linhas de base e pelas marcas indicadoras de iniciar/parar no seu cromatograma. Ou clique no botão **Analisar** na fita de comando.

Sugestão de Frequência de Amostragem

1. Clique com o botão direito no cromatograma e selecione **Programação Gráfica > Sugestão de Frequência de Amostragem**.

2. Seguindo as instruções na barra de status, clique uma vez no começo do pico de interesse mais estreito e mais uma vez no final desse pico. O software sugerirá uma velocidade de amostragem ou um período para aquisição da amostra. Você pode inserir esse valor para sua velocidade de amostragem usando o botão **Configuração do Instrumento**.

Sobre Sequências

A sequência é a pedra fundamental da operação automática. Uma sequência permite adquirir, processar e armazenar automaticamente diversas corridas. Você pode usar uma sequência para automatizar a calibração, seja durante a aquisição das corridas ou após a aquisição, por meio do reprocessamento da sequência. É possível configurar filas de corrida para execução automática de sequências e disparar eventos com base nos resultados de uma corrida em uma sequência (consulte Definir uma ação para uma corrida da sequência). Uma vez que uma sequência é constituída de dados de aquisição, você poderá monitorar o progresso das sequências usando a função fila de corridas.

Veja também

Criar sequência usando o assistente de sequência

Criar uma sequência a partir de um layout de bandeja

Abrir um arquivo de sequência

Editar uma sequência

Salvar uma sequência

Propriedades da sequência

Sobre a planilha de sequência

Sobre aquisição de dados e controle

Sobre a sequência de resultados

Sobre relatórios de sequência

Sequência Fácil

Criar sequência com o assistente de sequência

O assistente de sequência é usado para criar uma nova sequência.

Para iniciar o assistente de sequência:

1. Na Janela do Instrumento, clique no botão Assistente do Instrumento e, em seguida, clique em **Criar sequência**.
2. Conclua o assistente para definir a sequência. O assistente avançará passo a passo através de várias telas de parâmetros exigidos para criar uma sequência de aquisição ou reprocessamento, dependendo de suas opções e do instrumento configurado. A primeira tela do assistente e a Assistente de sequência - Método.
3. Quando concluir o assistente, clique em **Finalizar**.
4. Para salvar a sequência clique do menu em **Arquivo > Salvar como... > Sequência.** Procure o local onde deseja salvar a sequência, digite o nome da sequência e clique em **Salvar**. Consulte Salvar uma sequência.

Veja também

Tutorial - Criar uma sequência de amostra

Assistente de sequência - Método

Assistente de sequência - Desconhecidos

Assistente de sequência - Amostrador automático

Assistente de sequência - Calibração

Assistente de sequência - Relatórios

Criar uma sequência de reprocessamento

Assistente de sequência - Método

1. Especifique um **método** a ser usado para a sequência ou selecione-o em uma lista de métodos existentes clicando no botão **Abrir arquivo**.
2. Selecione um **tipo do arquivo de dado** das seguintes opções:

- **Para aquisição** permite designar novos nomes de arquivos a serem utilizados para aquisição.

- **De arquivos de dados existentes** permite selecionar os nomes dos arquivos de dados em uma lista dos arquivos de dados existentes no diretório de dados. Isso normalmente é usado para criar uma sequência para reprocessamento. Para obter mais detalhes, consulte Criar uma sequência de reprocessamento.

3. Na seção **valores de quantidade**, você pode especificar valores que afetarão a forma como a concentração de amostras desconhecidas será calculada.

- **Quantidade da amostra -** O valor de quantidade da amostra é usado como um divisor durante o cálculo das concentrações. Seu objetivo é compensar as diferenças entre as amostras devido à ponderação e quando estão sendo calculadas as porcentagens da amostra total em vez da concentração detectada em uma injeção.

- **Valor do padrão interno -** Para corridas de calibração, o valor do padrão interno é obtido da tabela de picos do método. Para corridas desconhecidas, insira o valor do padrão interno em sua amostra desconhecida.

- **Fatores de multiplicação -** Especifique até 3 fatores de multiplicação para serem usados nessas corridas. Todos os picos quantificados serão multiplicados por esses fatores.

- **Fatores de diluição -** Especifique até 3 fatores de diluição para serem usados nessas corridas. Todos os picos quantificados serão divididos por esses fatores.

4. Quando concluir essa caixa de diálogo, clique em **Avançar** para continuar. Consulte Assistente de sequência - Desconhecidos.

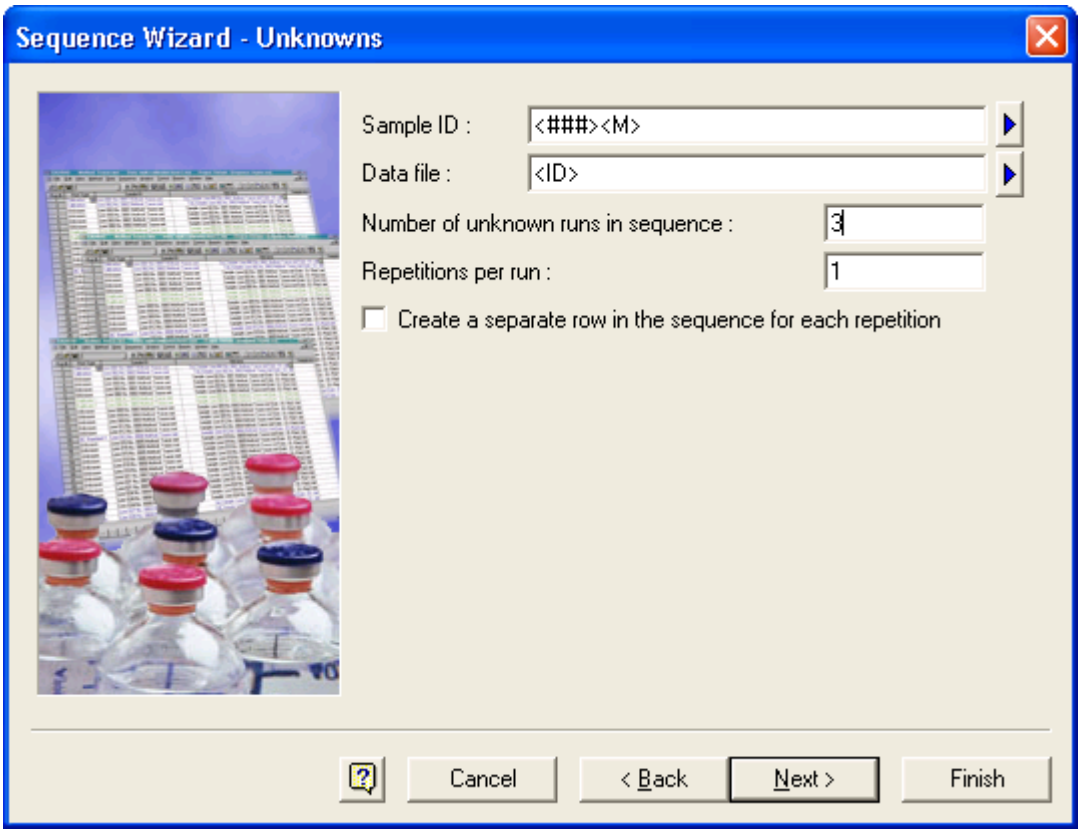
Assistente de sequência - Desconhecidos

Nessa caixa de diálogo, você deve especificar informações para armazenamento de dados e corridas de sequência.

ID da amostra	Digite um rótulo de identificação da amostra. O formato pode ser de texto e/ou numérico e o rótulo será salvo com cada arquivo de dados. Se quiser que o sistema gere um ID da amostra automaticamente, clique na seta azul e selecione um parâmetro para ser usado como base da amostra. É possível selecionar mais de um parâmetro, que será adicionado sequencialmente ao ID da Amostra. Por exemplo, se você selecionar número da linha e nome do instrumento, os IDs da amostra gerados incluirão o número da

	sequência seguido do nome do instrumento: **3HPLC.** Para usar a opção número de incremento, especifique um número para iniciar o incremento entre sinais de menor e maior. Por exemplo, iniciaria a numeração em 33. Por padrão, a opção número de Incremento permite usar 3 dígitos. Para diminuir ou aumentar esse número, ajuste os dígitos entre os sinais de menor e maior conforme desejado. Por exemplo .
Arquivo de dados	Especifique um nome para os arquivos de dados. Para que nomes exclusivos de arquivo de dados sejam criados automaticamente, você pode fazer o sistema gerar esses nomes com base em um parâmetro do sistema. Clique na seta azul e selecione um parâmetro para ser usado como base para os nomes de arquivo de dados. É possível selecionar mais de um parâmetro. O software anexa automaticamente a extensão **.DAT** aos nomes de arquivo de dados. Por exemplo, você pode usar o ID da amostra como nome do arquivo de dados. Nota: Para gerar automaticamente nomes de arquivo exclusivos para cada arquivo de dados, inclua o número da linha ou número de incremento em alguma parte do nome do arquivo.
Número de corridas desconhecidas em sequência	Especifique o número de amostras desconhecidas que deverão ser adquiridas ou reprocessadas com a sequência.
Repetições por corrida:	Especifique o número de vezes que cada amostra desconhecida será repetida ou reinjetada.
Criar uma linha separada na sequência para cada repetição	Clique nessa caixa se quiser criar uma linha separada na sequência para cada repetição. Se você não selecionar essa caixa, as repetições desconhecidas não serão exibidas na planilha de sequência, embora arquivos de dados individuais sejam criados e armazenados para cada repetição adquirida.

Quando concluir essa caixa de diálogo, clique em **Avançar** para continuar. Consulte Assistente de sequência - Amostrador automático.



Assistente de sequência - Amostrador automático

Se você tiver uma opção de controle de amostrador automático, essa tela do assistente de sequência será exibida. Ela é usada para configurar o número de frascos para o primeiro desconhecido e para calibração da sequência, juntamente com o número de incremento. Um volume de injeção padrão também pode ser especificado. Isso pode ser alterado em uma base por corrida na planilha de sequência.

Quando concluir a caixa de diálogo, clique em **Avançar** para continuar. Consulte Assistente de sequência - Calibração.

Assistente de sequência - Calibração

Essa caixa de diálogo permite configurar padrões de calibração na sua sequência.

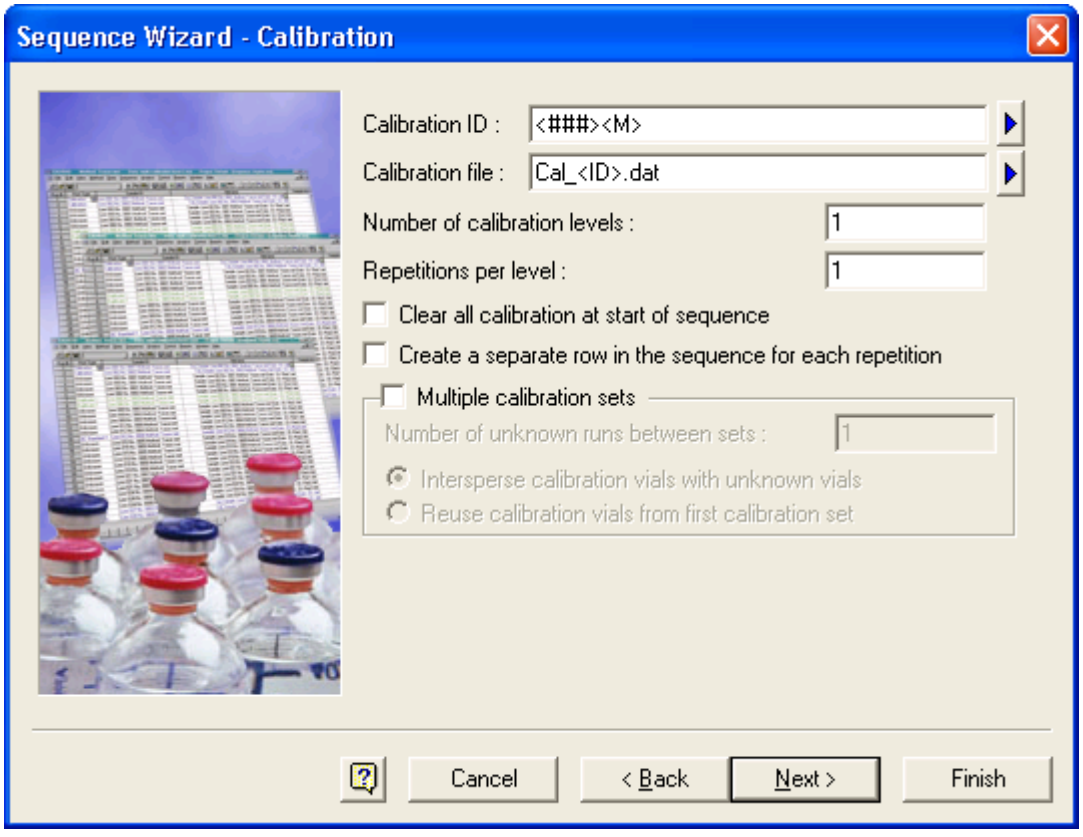
ID da calibração

Especifique uma identificação da amostra de calibração. Esse é um valor de texto que é armazenado no arquivo de dados de calibração. Os identificadores de ID da amostra são inseridos automaticamente para associar IDs da calibração aos IDs dos seus arquivos de dados. Opcionalmente, você pode fazer o sistema gerar automaticamente um ID da calibração diferente com base em um parâmetro do sistema.

	Clique na seta azul e selecione um parâmetro para ser usado como base para o ID da calibração.
Arquivo de calibração	Especifique um nome para os arquivos de dados de calibração. O sistema aplicará automaticamente o prefixo **Cal**__ a cada arquivo de calibração na sequência. Você pode mudar isso, se quiser. Os identificadores de arquivo de dados são especificados automaticamente para associar os nomes dos arquivos de calibração com os nomes dos seus arquivos de dados. Opcionalmente, você pode mudar isso clicando no botão azul e selecionando os parâmetros a serem utilizados como base para o nome do arquivo de calibração. É possível selecionar mais de um parâmetro. Nota: Para gerar automaticamente nomes de arquivo exclusivos para cada arquivo de dados, inclua o número da linha ou número de incremento em alguma parte do nome do arquivo.
Número de níveis de calibração:	Especifique o número total de níveis de calibração a serem executados na sequência.
Repetições por nível:	Especifique o número de repetições ou reinjeções para cada nível de calibração. Nota: Se forem especificadas diversas repetições, será gerado um arquivo de resultado para cada injeção, sendo que o nome do arquivo de dados será criado anexando Rep1, Rep2, etc. ao nome do arquivo de dados.
Limpar toda calibração no início da sequência	Selecione essa caixa se quiser limpar todas as informações de calibração (fatores de resposta, replicações) antes da primeira corrida da sequência.
Criar uma linha separada na sequência para cada repetição	Selecione essa caixa se quiser criar uma linha separada para cada repetição da calibração na sequência. Se essa caixa estiver desmarcada, um arquivo de dados separado será criado para cada repetição da calibração, mas as repetições não aparecerão na planilha de sequência.
Conjuntos de	Selecione essa caixa se você pretende executar cada nível de

calibração múltipla	calibração (mais suas replicações) mais de uma vez.
Número de corridas desconhecidas entre conjuntos	Se você selecionar a caixa **Conjuntos de calibração múltipla**, essa opção aparecerá. Digite o número de amostras desconhecidas a serem executadas entre cada conjunto de calibração. Se você tiver um amostrador automático com controle instalado, as opções de frascos ficarão disponíveis.
Frascos	Selecione **Frascos intercalados de calibração com frascos desconhecidos** se quiser executar amostras desconhecidas entre conjuntos de calibração. Selecione **Reutilizar frascos de calibração do primeiro conjunto de calibração** se quiser reutilizar o mesmo conjunto de frascos de calibração para toda a sequência.

Quando concluir essa caixa de diálogo, clique em **Avançar** para continuar. Consulte Assistente de sequência - Relatórios.



Assistente de sequência - Relatórios

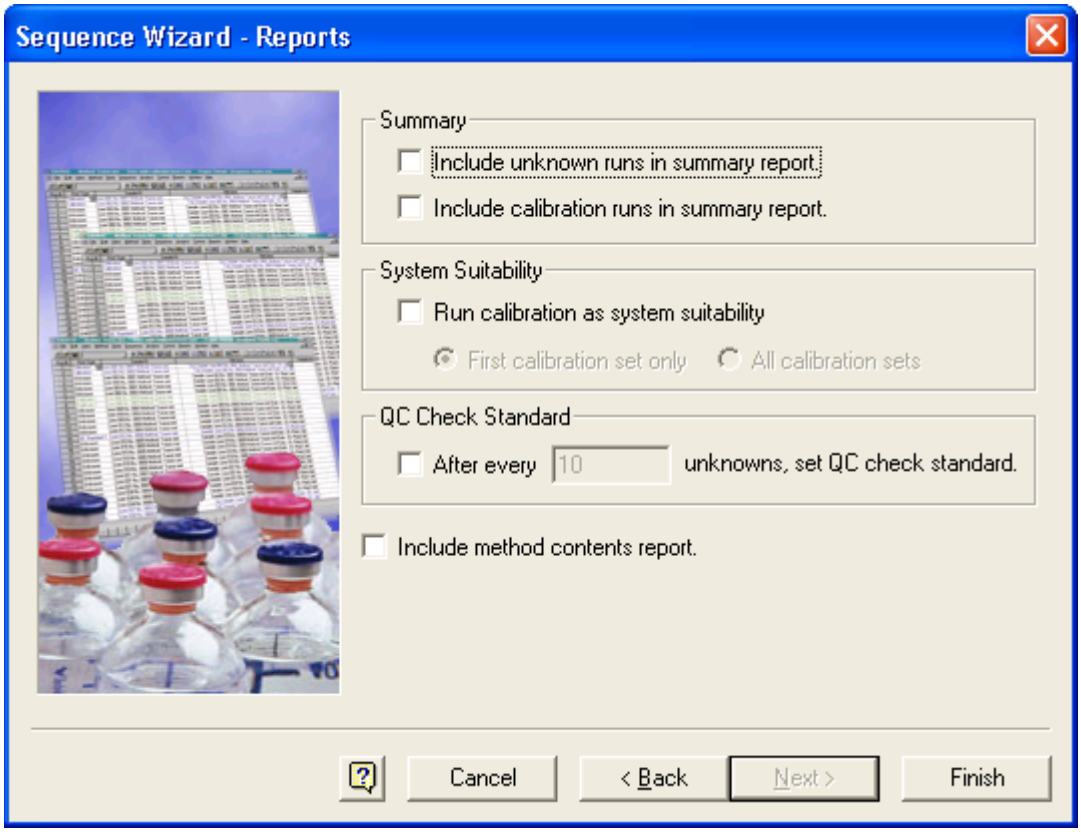
Use essa caixa de diálogo para configurar relatórios resumidos para a sequência.

Resumo	Essas opções permitem designar corridas resumidas.
Incluir corridas desconhecidas no relatório resumido	Selecione essa caixa se quiser que o relatório resumido inclua corridas desconhecidas. Essas corridas terão seu tipo de corrida definido como corrida resumida.
Incluir corridas de calibração no relatório resumido	Selecione essa caixa se quiser que o relatório resumido inclua as corridas de calibração. Essas corridas terão seu tipo de corrida definido para serem incluídas como uma corrida resumida.
Adequação do sistema	Essas opções permitem designar corridas de adequação do sistema.
Calibração de corrida como adequação do sistema	Selecione essa caixa tiver a opção de adequação do sistema no software e quiser designar corridas de calibração como tipos de adequação do sistema. Esse também resultará na exibição de parâmetros de adequação do sistema na planilha de sequência. Selecione **Apenas primeiro conjunto de calibração** ou **Todos os conjuntos de calibração.** Consulte Sobre a Adequação do Sistema.
Padrão de verificação do CQ	**Após cada _____ desconhecidos, definir padrão de verificação do CQ.**
Incluir relatório de conteúdo do método	Quando essa caixa é selecionada, um relatório de conteúdo do método é gerado automaticamente sempre que há uma mudança de método em uma sequência. Quando essa opção é habilitada, a sequência adiciona automaticamente um tipo de corrida **imprimir relatórios adicionais** para cada corrida em que o método tenha mudado com relação à corrida anterior na sequência. Isso pode ser alterado ou excluído de qualquer corrida específica na planilha Editar sequência.

Quando concluir essa caixa de diálogo, clique no botão **Finalizar**. Uma sequência será criada com base nas informações especificadas nas caixas de diálogo e exibida como uma planilha.

A nova sequência será exibida como "sem título". Para salvar a nova sequência, use o comando **Arquivo > Salvar Como > Sequência** e digite o nome da nova sequência.

Para fechar a planilha de sequência, clique na caixa **X** no canto superior direito da planilha. Para abrir a planilha de sequência atual, use o comando **Sequência>Editar** ou clique no botão **Editar sequência** na fita de comando.



Criar uma sequência de reprocessamento

Você pode usar o assistente de sequência para criar uma sequência contendo arquivos de dados existentes apenas para fins de reprocessamento.

Para criar uma sequência de reprocessamento:

1. Na Janela do Instrumento, clique no botão Assistente do Instrumento e, em seguida, clique em **Criar sequência**.

2. Conclua o Assistente de Sequência para selecionar métodos e arquivos de dados a serem usados para reprocessamento.

3. Noassistente de sequência - Método, selecione **De arquivos de dados existentes** como o **tipo do arquivo de dados**. Isso evitará as telas do assistente necessárias para criar uma sequência de aquisição e permitirá que você selecione arquivos de dados para serem reprocessados. Além disso, os valores de quantidade dos arquivos de dados selecionados serão inseridos na sequência.

4. Quando concluir o assistente, clique em **Finalizar**.

5. Para salvar a sequência clique do menu em **Arquivo >Salvar como > Sequência.** Procure o local onde deseja salvar a sequência, digite o nome da sequência e clique em **Salvar**.

Editar uma sequência

Tendo criado uma sequência, você pode exibir ou alterá-la a partir da Janela do Instrumento.

Para editar a sequência atual:

1. No menu **Sequência**, clique em **Editar.**

2. Modifique a sequência usando a planilha. exibida.

Veja também

Abrir um arquivo de sequência

Salvar uma sequência

Propriedades da Sequência

Propriedades da sequência

Selecione **Sequência > Propriedades** para editar e visualizar a descrição, informação de exportação, log do registro de auditoria e registro de auditoria dos arquivos de dados.

Veja também

Opções das propriedades da sequência

Log do registro de auditoria das propriedades da sequência

Registro de auditoria das propriedades da sequência

Sequência Fácil

Sequência Fácil é uma interface simples para usar e configurar sequências com modelos pré-definidos. As configurações de sequência podem ser criadas, modificadas e reutilizadas para diferentes usuários e tipos de análise. Este procedimento minimiza a ocorrência de erros cada vez que uma sequência é criada.

Sequência Fácil

A opção Sequência Fácil... permite que um usuário execute uma sequência usando um modelo pré-definido.

Para acessar a Sequência Fácil...:

1. No menu principal, selecione **Sequência**.
2. Selecione **Sequência Fácil...**. A caixa de diálogo **Sequência Fácil** será exibida. Para obter mais informações, consulte a Ajuda da Sequência Fácil.

Configuração da Sequência Fácil

A opção **Configuração da Sequência Fácil...** permite que um usuário crie e modifique relatórios.

Para acessar a Configuração da Sequência Fácil...:

1. No menu principal, selecione **Sequência**.
2. Selecione **Configuração da Sequência Fácil...** A caixa de diálogo **Configuração da Sequência Fácil** será exibida. Para obter mais informações, consulte a Ajuda do Modelo da Sequência Fácil.

Criar uma sequência a partir de um layout de bandeja

A opção Entrada da Amostra fornece uma interface gráfica fácil de usar para configurar sequências a partir de um layout de bandeja. Os modelos de layout de bandeja podem ser criados, modificados e reutilizados para diferentes usuários e tipos de análise.

Esta opção está ativa somente quando forem usados dispositivos compatíveis em seu sistema.

Para criar e modificar um modelo de layout de bandeja:

No menu principal, selecione **Sequência > Entrada da Amostra.** A caixa de diálogo **Entrada da Amostra** será exibida. Para obter mais informações, selecione **Ajuda** na caixa de diálogo **Entrada da Amostra**.

Para executar uma sequência usando um modelo de layout de bandeja existente:

No menu principal, selecione **Sequência > Entrada da Amostra.** A caixa de diálogo **Entrada da Amostra** será exibida. Para obter mais informações, selecione **Ajuda** na caixa de diálogo **Entrada da Amostra**.

Opções das propriedades da sequência

Ao criar uma nova sequência usando o assistente de sequência, você fornece uma descrição, especifica um resumo do caminho de exportação e designa os diretórios padrão para dados e métodos.

Para visualizar ou alterar essas propriedades:

1. No menu **Sequência**, selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **propriedades da sequência**, selecione **Opções**.
3. Informe as propriedades para a sequência.

- **Descrição** - Digite um texto descritivo da sequência, se quiser. A descrição é salva no arquivo de sequência e pode exibida a partir da caixa de diálogo **abrir sequência**.
- **Exportar resumo** - Clique nessa caixa para exportar o relatório resumido. Especifique o caminho onde deseja que o arquivo texto do resumo seja salvo. O resumo será exportado a um arquivo "Sequence Summary - 000005000.txt" onde os números representam nBatchTower, nReportRunTypeID e nReportNumber.
- **Caminhos de arquivo** - Selecione caminhos padrão para serem usados para métodos, dados e amostrador automático, conforme apropriado. Você pode selecionar um caminho disponível no disco clicando no botão arquivo adjacente ao campo. Esses caminhos serão usados caso um arquivo seja especificado na tabela de sequências sem um caminho.

Registro de auditoria das propriedades da sequência

Para habilitar o registro de auditoria para sequências:

1. No menu **Sequência**, selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **propriedades da sequência**, selecione **registro de auditoria**.
3. Clique em **Habilitar o Registro de Auditoria**. Depois de ser marcada, a caixa Habilitar o Registro de Auditoria não poderá ser desmarcada. O registro de auditoria da sequência permanecerá habilitado, a menos que você salve o arquivo com outro nome.

4. Quando a caixa Habilitar o registro de auditoria é marcada, as seguintes opções de documentação de alterações tornam-se disponíveis.

- **Solicitar razão a cada alteração** - Esta opção requer que o usuário insira um motivo para cada alteração subsequente efetuada à sequência no momento em que a alteração é feita.
- **Solicitar razão ao salvar sequência** - Esta opção requer que o usuário insira um motivo para cada alteração quando a sequência é salva.
- **Não solicitar razão** - Quando essa opção é selecionada, as alterações são documentadas, mas não é necessário que o usuário forneça um motivo.

Log do registro de auditoria das propriedades da sequência

Para exibir o log do registro de auditoria da sequência atual:

1. No menu **Sequência**, selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **propriedades da sequência**, selecione **Log do registro de auditoria**.
3. Insira as seguintes informações:

- **Usuário**
- **Local**
- **Descrição**
- **Motivo**
- **De data/hora**
- **Para data/hora**

4. Selecione uma das seguintes opções:

- **Exportar -** Selecione esta opção para exportar o log do registro de auditoria
- **Imprimir -** Selecione esta opção para imprimir o log do registro de auditoria
- **Pesquisar -** Selecione esta opção para pesquisar o log do registro de auditoria

Sobre a Planilha de Sequência

Uma sequência é exibida como uma planilha, com cada linha representando uma corrida de cromatografia ou um arquivo a ser reprocessado. Em cada linha, você designa um método, o nome do arquivo de dados e se a amostra é um padrão de calibração, juntamente com várias opções sobre como os dados deverão ser processados. A seção seguinte descreve as funções da planilha de sequência.

Veja também

Menu contexto da planilha de sequência

Preencher abaixo

Inserir uma nova sequência em uma planilha de sequência

Personalizar as colunas da planilha de sequência

Colunas da planilha de sequência

Definir tipos de corrida da amostra

Configurar um padrão de verificação do CQ

Anulação da concentração

Parâmetros personalizados da sequência

Definir uma ação para uma corrida da sequência

Menu contexto da planilha de sequência

Todas as sequências são exibidas em uma planilha semelhante à que é mostrada abaixo. Embora as informações nos campos variem, as planilhas sempre oferecem suporte a certos recursos básicos. Para obter uma lista de colunas da planilha e suas definições, consulte Colunas da planilha de sequência.

Cada linha recebe um **nº da corrida**, seguido de colunas de informações para cada corrida na sequência. As informações de linhas e campos podem ser recortadas, copiadas, coladas e limpas. Para acessar o menu com esses comandos, clique com o botão direito do mouse em qualquer lugar da planilha.

Comandos do menu contexto

Recortar	Esse comando recorta a seleção atual e a coloca na área de transferência. Subsequentemente, você pode inserir as informações em outro aplicativo usando o comando de colar, ou mover a seleção para outro local na planilha selecionando o local e usando o comando **colar**. Nota: Quando uma linha é limpa ou excluída da planilha, a linha em branco permanece até que você feche e reabra a planilha de sequência ou pressione a tecla F5.
Copiar	Use esse comando para gerar uma cópia exata da seleção na área de transferência. Depois de selecionar **copiar**, você pode colar a seleção em outro aplicativo ou copiá-la para outro local na planilha.
Colar	Esse comando é usado para colar as informações que estão atualmente na área de transferência na planilha, no local do cursor.
Preencher abaixo	Isso lhe permite copiar automaticamente informações da planilha, em sentido descendente, de um campo ou linha para o restante da planilha.
Inserir colagem	Esse comando funciona como uma combinação dos comandos de inserir linha e colar. O item que está atualmente na área de transferência é colado em uma nova linha acima da posição atual do cursor.
Inserir linha	Esse comando insere uma linha em branco na planilha, acima da posição atual do cursor.
Limpar	Use esse comando para limpar as informações existentes no local selecionado. (A tecla Delete do teclado também pode ser usada para essa função.) A tecla de função **F5** pode ser usada para contrair linhas que foram excluídas da planilha.
Limpar tudo	Use esse comando para limpar todas as informações da planilha.
Selecionar tudo	Use esse comando para selecionar toda a planilha.
Abrir método	Esse comando abre o método associado à corrida selecionada atualmente na planilha.

Abrir dados	Esse comando abre o arquivo de dados associado à corrida selecionada atualmente na planilha. O arquivo de dados é aberto com "últimos resultados". Se "últimos resultados" não estiver disponível, o arquivo de dados será recuperado com os resultados originais.
Sequência de Processo...	Esse comando abre o a caixa de diálogo sequência de processo, que permite reprocessar total ou parcialmente a sequência atual.
Executar sequência...	Esse comando abre a caixa de diálogo de sequência de corridas, que permite iniciar a aquisição de sequência.
Inserir nova sequência...	Esse comando inicia o assistente de sequência para criar uma nova sequência, que será inserida na atual, abaixo da linha selecionada no momento.
Definir tipos de corrida...	Esse comando permite selecionar o tipo de corrida desejado na lista exibida, para ser aplicado às linhas selecionadas.
Propriedades...	Esse comando abre a caixa de diálogo propriedades da sequência, onde você pode adicionar/editar a descrição da sequência e selecionar caminhos padrão para os arquivos de dados e de método.

Nota: Ao copiar ou colar planilhas do sistema de dados para outros aplicativos, parâmetros "ocultos" que não aparecem na planilha (como os parâmetros de item de ação) não são colados.

Preencher abaixo

O comando **Preencher abaixo** permite copiar automaticamente informações da planilha em sentido descendente de um campo ou linha para o restante da planilha.

Para usar o comando Preencher abaixo:

1. Na planilha de sequência, selecione uma linha ou campo realçando-o com o mouse.
2. Clique com o botão direito do mouse e selecione **Preencher abaixo**. Se você tiver selecionado um campo numérico, como nível ou repetições, o item selecionado será preenchido automaticamente em sentido descendente na planilha a partir de onde está realçado. Se você selecionar uma linha, nome do arquivo ou ID da amostra, será exibida uma caixa de diálogo para designar um nome e indicar se deseja incrementar a numeração associada.

3. Para campos de ID da amostra e arquivo de dados, você pode optar pelo incremento automático do número ou alteração do nome marcando a caixa de seleção **Incrementar**. Você pode selecionar parâmetros para o incremento de maneira semelhante à utilizada no assistente de sequência, clicando na seta azul e selecionando na lista. (Lembre-se de incluir o número certo de marcadores de lugar. Por exemplo, se você começar no número mas o número de arquivos estiver entre 100 e 1000, especifique .) Clique em **OK** para preencher a informação pela planilha.

Inserir uma nova sequência em uma planilha de sequência

Para criar linhas de sequência e inseri-las em sua planilha:

1. Na planilha de sequência, clique com o botão direito do mouse no ponto onde deseja inserir novas linhas de sequência e, em seguida, clique em **Inserir nova sequência**.
2. O assistente de sequência aparecerá. Complete o assistente para definir as novas linhas para a sequência.
3. Clique em **Concluir**. As novas linhas da sequência serão inseridas **Acima** da linha selecionada.

Personalizar as colunas da planilha de sequência

Você pode personalizar a planilha de sequência para incluir apenas as colunas em uso. As seleções são salvas separadamente para cada usuário e instrumento. Ou seja, cada usuário pode definir as propriedades da planilha para cada instrumento.

1. Na planilha de sequência, clique com o botão direito do mouse e selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **Propriedades**, selecione as colunas que aparecerão na tabela de picos. As colunas com uma marca de seleção serão exibidas na planilha. As que não tiverem uma marca de seleção não serão exibidas.
3. A "âncora" azul indica qual coluna será usada para ancorar o rolamento horizontal da planilha. Quando essa âncora é definida, as colunas à direita da âncora rolam para a direita e para a esquerda. As colunas à esquerda da âncora não rolam. Para alterar a âncora, clique no nome da coluna que você deseja usar como âncora e, em seguida, clique no botão **Definir âncora**. A âncora azul será movida para a coluna âncora designada.

Nota: Ao usar a âncora, é melhor remover todas as colunas desnecessárias da planilha e deixá-la com a maior largura possível antes de definir a âncora. Se a âncora for definida em uma coluna que normalmente não é mostrada, você não conseguirá rolar a planilha.

Colunas da planilha de sequência

A seguintes colunas aparecem na planilha de sequência e na sequência de resultados. Embora o assistente de nova sequência lhe permita criar automaticamente uma sequência, você deverá revisá-la para certificar-se de que as informações de cada corrida estejam corretas antes que ela seja executada.

Para selecionar um campo, clique nesse campo para realçá-lo. Para selecionar uma linha, clique em **Corrida Nº** para realçar toda a linha. Para selecionar toda a planilha, use o menu do botão direito do mouse e clique no comando **Selecionar Tudo**.

Para redimensionar as colunas, mova o cursor para a área de título acima da coluna que deseja redimensionar. O cursor se transformará em duas linha verticais com setas. Clique e arraste o cursor até que a coluna esteja no tamanho desejado e libere o botão do mouse.

Para visualizar a planilha, selecione, no painel de navegação, **Sequência > Editar**.

Status	Esse campo torna-se ativo quando uma aquisição ou processamento de sequência está em andamento. Ele indica o status atual da corrida.
Tipo de corrida	Selecione um tipo de corrida dentre os tipos disponíveis clicando no botão de seta no campo. Será exibida uma caixa de diálogo onde você poderá selecionar os tipos de corrida. Para ver uma lista dos tipos de corrida e suas ações, consulte **Definir tipos de corrida de amostra**. **Parâmetros do tipo de corrida** Para cada tipo de corrida selecionado, o sistema pode solicitar que você especifique os parâmetros necessários para que esse tipo de corrida seja utilizado. Na maioria dos casos, isso envolve a seleção de um modelo a ser usado para o relatório. **Configuração de tipos de corrida para corridas múltiplas** Você pode alterar rapidamente o tipo de corrida para corridas múltiplas realçando as linhas desejadas na planilha, clicando com o botão direito do mouse e selecionando **Definir tipos de corrida**. O tipo de corrida selecionado na lista exibida será aplicado às linhas selecionadas.
Nível	Para uma corrida de calibração, você deve especificar o número do nível do padrão de calibração. (Por exemplo, se você tiver 5 níveis de concentração de calibração, cada corrida de calibração terá um número de **nível** representando o nível de concentração da calibração que está sendo

executada. Esse número, porém, NÃO é a quantidade da concentração dos padrões. As quantidades de concentração são especificadas na tabela de picos.)

Anulação de conc.

Esse campo lhe permite especificar uma anulação da concentração para um ou mais picos na corrida de calibração selecionada. Essa opção só estará ativa se a corrida selecionada tiver sido designada como uma corrida de calibração.

Parâmetros personalizados

Quando você clicar nesse campo, será exibida a caixa de diálogo **parâmetros personalizados**, onde você poderá definir parâmetros personalizados da sequência por pico ou para todo o sistema. Os parâmetros personalizados disponíveis são derivados do método ativo para a linha da sequência sendo configurada. Consulte Sobre parâmetros personalizados e Definição de parâmetros personalizados para uma sequência.

Reps

Insira o número de repetições por frasco.

Frac. Inicial

Selecione o local inicial (frasco ou poço) para o coletor de fração.

Método

Esse é o nome do método a ser usado para aquisição de dados e processamento. Se não souber o nome do método, clique no botão para selecioná-lo em uma lista de métodos disponíveis no disco.

Nome do arquivo

Especifique o nome do arquivo a ser usado para armazenar os dados brutos da corrida. O nome do arquivo já terá um número exclusivo anexado a ele. Insira um nome de arquivo dos dados na nova caixa de diálogo de sequência, no seguinte formato, <*NomeDoArquivo*>.

Nota: Se forem especificadas diversas repetições, será gerado um arquivo de resultado para cada injeção, sendo que o nome do arquivo de dados será criado anexando Rep1, Rep2, etc. ao nome do arquivo de dados.

Quant amostra

O valor de quantidade da amostra é usado como um divisor durante o cálculo das concentrações. Seu objetivo é compensar as diferenças entre as amostras devido à ponderação e quando estão sendo calculadas as porcentagens da amostra total em vez da concentração detectada em uma injeção.

Quantidade do PI	Para corridas de calibração, o valor do padrão interno é obtido da tabela de picos do método. Para corridas desconhecidas, insira o valor do padrão interno em sua amostra desconhecida.
Multiplicador 1,2,3,4,5	Especifique até três fatores de multiplicação para serem usados nessa corrida. Todos os picos quantificados serão multiplicados por esses fatores.
Diluidor 1,2,3,4 ,5	Especifique até três fatores de diluição para serem usados nessa corrida. Todos os picos quantificados serão divididos por esses fatores.
Ação	Abre a caixa de diálogo de ação da corrida, onde você pode especificar combinações de teste/resultado/ação para cada corrida. Para obter mais detalhes sobre a configuração de uma ação, consulte **Definir uma ação para uma corrida da sequência**. Nota: Os itens de ação que possuem interatividade com o usuário (por exemplo, pausa e alarme) não dispararão qualquer entrada do usuário em máquinas clientes quando o modo de operação cliente/servidor estiver sendo usado. Isso acontece porque o servidor está controlando o instrumento.
Descrição	Digite uma descrição para essa amostra. Essas informações de texto serão armazenadas no arquivo de dados brutos.

Definir tipos de corrida da amostra

Os **tipos de corrida** da amostra são usados em uma sequência para sinalizar uma corrida para procedimentos específicos de processamento, calibração ou inclusão em relatório. Múltiplos tipos de corrida podem ser atribuídos a uma amostra. Alguns tipos de corrida são atribuídos automaticamente quando você usa o assistente de sequência para criar uma nova sequência.

Para alterar ou adicionar um tipo de corrida depois que a sequência foi criada:

1. Na planilha de sequência, clique no seta do campo **tipo de corrida** da amostra de interesse.
2. Selecione um tipo de corrida dentre os tipos disponíveis clicando na caixa de seleção desse tipo de corrida.
3. Se necessário, campos de parâmetros serão exibidos para que você os especifique ou selecione modelos a serem usados no processamento do tipo de corrida designado.

Tipo de corrida	Ação
Limpar toda calibração	Limpa todos os fatores de resposta e coeficientes de calibração em todos os níveis de calibração.
Limpar calibração no nível	Limpa apenas os fatores de resposta e coeficientes do nível atual.
Imprimir relatório de calibração	Imprime um relatório de calibração ao final da calibração.
Média das replicatas	Força o cálculo da média das replicações.
Limpar replicações	Limpa as replicações de calibração nesse nível antes da calibração.
Iniciar loop	Indica que a corrida é o início de um loop infinito. As corridas incluídas entre esses sinais, inclusive as que contêm o indicador, serão executadas continuamente até serem interrompidas.
Parar Loop	Indica o final de um loop de sequência infinita.
Inicialização	Indica que essa amostra é uma amostra de inicialização. (Aparece quando o instrumento em uso oferece suporte a esse tipo.)
Desligamento	Indica que essa amostra é uma amostra de desligamento.
Imprimir Relatórios Adicionais	Permite selecionar relatórios adicionais para serem impressos.
Iniciar Adequação do Sistema	Primeira corrida de um conjunto de amostras

	de adequação do sistema.
Padrão de adequação do sistema	Amostra padrão de adequação do sistema, entre Iniciar e Parar adequação do sistema.
Parar adequação do sistema	Última corrida de um conjunto de amostras de adequação do sistema.
Iniciar resumo	A primeira corria incluída em um resumo da sequência, também indica o modelo de relatório resumido a ser usado no relatório. Consulte Sobre relatórios de sequência.
Corrida resumida	Corrida a ser incluída em um resumo da sequência. Consulte Sobre relatórios de sequência.
Parar resumo	Última corrida a ser incluída em um resumo da sequência. Consulte Sobre relatórios de sequência.
Resumo do frasco	Cria um relatório resumido de frascos.
Padrão de Verificação de CQ	Amostra de padrão de verificação. Um padrão de verificação inserido em uma sequência é usado para gerar um relatório do padrão de verificação. É uma maneira de "verificar" a cromatografia e as condições sem recorrer a uma calibração.
Não Marcado	Amostra não marcada de um par Marcado/Não Marcado usado para o relatório de marca
Marcado	Amostra marcada usada em análises de marca de nível único (amostra desconhecida e amostra marcada.)

Spike 1 de 2	Primeira amostra marcada usada para relatórios de marca
Spike 2 de 2	Amostra duplicada usada para relatórios de duplicação.
Duplicação	Amostra duplicada usada para relatórios de duplicação.
Iniciar calibração	Primeira mistura de calibração a ser usada no relatório resumido de calibração. Quando esse tipo de corrida é encontrado, o sistema de dados armazena os tempos de retenção atuais de todos os picos nomeados. Esses tempos são exibidos em relatórios como "TR antigo". Depois que a amostra Parar calibração é executada, os tempos de retenção atualizados são armazenados e exibidos como "TR novo" no relatório de calibração. Além disso, o fator de resposta médio de cada pico é calculado, a % DPR é calculada e comparada à % DPR esperado com base na tabela de picos. Os compostos que estejam acima desse percentual disparam a ação de falha.
Parar calibração	Última mistura de calibração a ser usada no relatório resumido de calibração.
Verificação da linha de base	Habilita a verificação da linha de base.
Arquivo de linha de base	Designa essa corrida como um arquivo de subtração da linha de base. Seleciona os canais a serem subtraídos dos arquivos subsequentes na sequência.

Configurar um padrão de verificação do CQ

Para designar uma amostra como padrão de verificação do CQ:

1. Na planilha de sequência, clique em **tipo de corrida** na amostra de padrão de verificação do CQ.
2. Na caixa de diálogo **tipo de corrida**, clique em **padrão de verificação do CQ.**
3. Especifique **Verificar número do padrão** e selecione o modelo **QC Check Standard.rep** a ser usado para o relatório.

Para designar automaticamente múltiplas corridas em uma sequência como tipos de corrida padrão de verificação do CQ:

1. Na planilha de sequência, clique e arraste o mouse em **Corrida Nº** das linhas para realçá-las.
2. Clique com o botão direito do mouse nas linhas realçadas e, em seguida, clique em **Definir Tipos de Corrida** seguido de **padrão de verificação do CQ.**
3. Digite o número de corridas entre corridas padrão de verificação. (Por exemplo, se você especificar **2**, a primeira linha será definida como padrão de verificação do CQ, seguida de duas corridas não definidas como padrão de verificação do CQ, depois a quarta corrida será definida como padrão de verificação do CQ, e assim por diante até o final das linhas realçadas.) Clique em **OK**. Os tipos de corrida serão definidos como padrão de verificação do CQ.

Anulação da concentração

A **anulação da concentração** permite modificar uma concentração para um componente de calibração que é diferente da concentração no método. Isso pode ser feito a partir da **planilha de sequência** .

Para especificar uma anulação da concentração:

1. Na planilha de sequência, clique em **anulação da concentração** da corrida cuja concentração você deseja alterar.
2. Selecione o **Canal** que deseja editar.
3. Localize o pico para o qual você deseja especificar uma nova concentração e clique em **NovaConc**. Digite a concentração que deseja usar para esse pico da corrida determinada. Você pode atualizar a concentração de quantos picos de componente forem necessários.
4. Clique em **OK** para concluir.

Nota: e O campo de anulação da concentração só está disponível para corridas determinadas como corridas de calibração.

Definir uma ação para uma corrida da sequência

Uma ação de sequência permite programar uma ação para ocorrer com base em um resultado especificado de uma corrida da sequência. A ação é designada na planilha de sequência para a corrida de interesse.

Para designar uma ação a uma corrida da sequência:

1. Na Janela do Instrumento, clique no botão **Editar sequência** para abrir a planilha de sequência.
2. Role a sequência para a direita até que a coluna **Ação** esteja visível. (Se a coluna não estiver visível, consulte Personalizando as colunas da planilha de sequência .)
3. Clique em **Ação** para a corrida desejada.
4. Na caixa de diálogo **ação**, selecione um **teste** cujo resultado ativará a ação pós-corrida selecionada. As condições disponíveis incluem:

- Qualquer Condição
- Calibração
- CQ
- Adequação do sistema
- Status do hardware
- Limite conc.
- Verificação da linha de base

5. Clique em **Resultado** para selecionar um resultado do teste que disparará a ação. Os resultados podem incluir:

- Aprovado
- Reprovado
- Recuperável
- Acima do limite
- Abaixo do limite.

6. Clique em **ação** e selecione a ação que ocorrerá quando o resultado selecionado ocorrer.

- Abortar
- Pausar
- Alarme
- Executar desligamento
- Continuar
- Reinjetar
- Executar programa do usuário
- Ir para
- Reiniciar adequação do sistema

7. Se necessário, especifique um **parâmetro** para a ação. (Se nenhum parâmetro for exigido, esse campo não estará disponível.)

As seguintes ações não exigem parâmetros:	
Ação	**Efeito**
Abortar	Abortar a sequência
Pausar	Pausar a seqüência depois da corrida atual e aguardar que o usuário revise e continue a sequência.
Alarme	Disparar alarme
Executar desligamento	No resultado, a sequência pesquisará e executará a próxima corrida com um tipo de corrida "desligamento". Se nenhum tipo de corrida "desligamento" for encontrado, ela pesquisará desde o início da sequência.
Continuar	No Resultado, continuar a sequência.

As ações a seguir exigem parâmetros de ação.	
Reinjetar	Especifique o número de vezes que pretende tentar a reinjeção da amostra se a injeção falhar.
Executar programa do usuário	Especifique o caminho UNC do programa a ser executado. Para garantir que o caminho e o nome do arquivo estão corretos, clique no botão Arquivo para procurar o local e selecionar o arquivo.
Ir para	Especifique uma linha na sequência para "Ir Para" e um "Número de repetições" indicando o número de tentativas antes de seguir para a próxima linha.
Reiniciar adequação do sistema	Especifique o número de vezes que pretende tentar o reinício da adequação do sistema.

8. Você pode continuar a adicionar múltiplas ações para essa corrida, se desejar. Ao concluir, clique em OK.
9. Nota: Os itens de ação que possuem interatividade com o usuário (por exemplo, pausa e alarme) não dispararão qualquer entrada do usuário em máquinas clientes quando o modo de operação cliente/servidor estiver sendo usado. Isso acontece porque o servidor está controlando o instrumento.

Sobre aquisição de dados e controle

Os comandos disponíveis no menu **Controle** estão relacionados à aquisição de dados e ao controle do instrumento. Em geral, existem duas formas de adquirir dados:

1. **Corrida única**, onde são adquiridos dados para uma única injeção.
2. **Corrida da sequência**, onde são automaticamente adquiridos dados para uma série de corridas usando uma sequência pré-programada que define o número de injeções, métodos, nomes de arquivos e calibração. Itens de menu de controle adicionais serão exibidos de acordo com os recursos compatíveis com o instrumento configurado.

Veja também

Aquisição de corrida única

Aquisição de corrida da sequência

Sobre o Modo de Preparação de Amostras Redundante

Calibrações através de Bracket

Reprocessar uma sequência

Sobre a fila de corridas

Adicionar uma corrida à fila

Adicionar uma corrida ao resultado

Acesso do usuário a corridas em andamento

Parar uma corrida em andamento

Estender uma corrida

Adicionar e excluir itens da fila de corridas

Desativar o processamento para aquisição de dados

Configuração do Coletor de Frações

Definir o instrumento para o modo de Suspensão ou Ativação

Aquisição de corrida única

Há duas formas para adquirir dados. Uma é com uma sequência (para corridas múltiplas), e a outra é criando uma corrida única. Para criar uma única corrida de aquisição de dados, é preciso especificar o método a ser usado para a análise e um nome do arquivo para armazenamento de dados.

Nota: Para usar um método de aquisição de dados, a Configuração do instrumento deverá estar com o canal de aquisição ativado e ter uma velocidade de amostragem e um tempo de corrida atribuídos.

Para criar uma corrida única:

1. Selecione da barra de ferramentas o botão **Corrida única** , ou do menu **Controle > Corrida única**.
2. Na caixa de diálogo **Corrida única**, complete os campos listados na tabela abaixo.

3. Quando tiver preenchido a caixa de diálogo **Corrida única**, clique em **Iniciar** para iniciar a aquisição.

4. Os dados atuais serão exibidos na janela do cromatograma à medida que forem adquiridos e armazenados no disco. No final da corrida, o cromatograma será analisado de acordo com os parâmetros do método, e um relatório será gerado, se especificado. Se a amostra não for analisada no final da aquisição, clique no botão **Analisar** se quiser visualizar os resultados.

Informações corrida

Esta seção permite especificar arquivos para a corrida.

- **Id da amostra -** Insira o ID de amostra para a corrida. Ele pode conter texto e números, e é salvo com o arquivo de dados. É possível também clicar na seta e selecionar a partir de vários IDs pré-definidos.

- M**étodo -** Informe o nome do método a ser usado para aquisição e processamento de dados. Inclua todo o nome do arquivo se o método não estiver em seu diretório de método padrão. Você pode selecionar o método em uma lista de métodos disponíveis no disco clicando no botão **Arquivo** adjacente ao campo.

- **Arquivo de dados -** Informe um nome do arquivo a ser usado para salvar os dados em disco. Você pode selecionar um dos tipos de nome pré-definido clicando no botão de seta adjacente ao campo. Não é possível usar um nome do arquivo existente, a menos que exista um arquivo em um diretório cujo caminho contenha o termo "público". Por exemplo, se os seus arquivos de dados estiverem salvos em um diretório denominado "C:\Public\Data", os arquivos salvos nesse diretório poderão ser substituídos. O software agrega automaticamente uma extensão de arquivo .dat **.**

- **Caminho do resultado -** Informe um nome do caminho onde o arquivo de dados adquirido para essa corrida será armazenado. Clique no botão **Arquivo** para selecionar um caminho em uma lista dos que estão presentes no disco.

- N**ome do resultado -** Informe um nome para o arquivo

de resultado.

Número de corridas

Insira o número de corridas que deseja criar. As corridas serão criadas sem nenhuma análise até serem concluídas, incrementando cada nome de arquivo conforme designado. Se a sequência de corridas únicas for interrompida e o usuário repetir a aquisição única sem alterar nenhum parâmetro, o número da corrida iniciará com o número seguinte, como se a sequência não tivesse sido interrompida. Por exemplo, são definidas 4 corridas com o número da corrida inicial de 101, e ocorre a interrupção durante a corrida 102. Ao reiniciar, o número da corrida seguinte será 105. Se o ID da Amostra for também incrementado, ele aumentará em paralelo.

Relatórios

- **Salvar como PDF** - Ao marcar esta caixa, um relatório será salvo como arquivo PDF ao final da corrida.
- **Imprimir separata** - Ao marcar esta caixa, um relatório será impresso no final da corrida.
- **Selecionar impressora** - Se a opção Imprimir separata estiver marcada, selecione uma impressora do menu suspenso

Valores de Quantidade

Nesta seção, você pode inserir valores que afetam o modo como as concentrações são calculadas. Caso esteja sendo feita uma aquisição única de dados antes de calibrar o seu método, simplesmente deixe esses valores no nível padrão.

Quantidade da amostra

O valor de quantidade da amostra é usado como um divisor durante o cálculo das concentrações. Seu objetivo é compensar as diferenças entre as amostras devido à ponderação e quando estão sendo calculadas as porcentagens da amostra total em vez da concentração detectada em uma injeção.

PI

Para corridas de calibração, o valor do padrão interno é obtido da Tabela de picos do método. Para corridas desconhecidas, insira o valor do padrão interno em sua amostra desconhecida.

Multiplicadores	Insira de um a cinco fatores de multiplicação a serem usados para esta corrida. Todos os picos quantificados serão multiplicados por esses fatores.
Diluidores	Insira de um a cinco fatores de diluição a serem usados para esta corrida. Todos os picos quantificados serão divididos por esses fatores.
Calibrar	Marque esta caixa de seleção se a amostra precisar ser de calibração. Quando esta caixa for selecionada, os seguintes campos e opções estarão disponíveis. • **Nível de calibração -** Informe o número do nível de calibração representado por esse padrão de calibração. Se esta for uma calibração de nível único, insira 1. • **Limpar toda calibração -** Marque esta caixa se quiser limpar todos os fatores de calibração existentes do seu método antes de executar a amostra. • **Limpar calibração no nível -** Marque esta caixa se quiser limpar os fatores de resposta existentes deste nível apenas antes de executar a amostra. • **Imprimir relatório de calibração -** Marque esta caixa se quiser imprimir um relatório de calibração depois de executar a amostra.
Limpar replicações	Marque esta caixa se quiser limpar todas as replicatas existentes do nível de calibração antes de executar a amostra.
Média das replicatas	Clique nesta caixa se quiser tirar a média das replicatas deste nível de calibração.
Verificação da linha de base	Esta caixa será exibida se a opção **Verificação da linha de base** estiver implementada na configuração do instrumento. Quando essa caixa estiver selecionada, ela ativará uma verificação da linha de base antes do início da corrida.

Iniciar corrida

Por padrão, a corrida será iniciada imediatamente. Para determinar quando quer que a corrida inicie, selecione o botão **Agendar corrida** . Na caixa de diálogo **agendar corrida** , selecione das seguintes opções:

- **Agora -** imediatamente
- **Depois -** depois de determinado tempo
- **Às -** em uma data e hora específicas

Descrição...

Clique neste botão para inserir uma descrição da amostra para esta corrida.

Inicialização/Desligamento

Para instrumentos com esse suporte, as caixas de inicialização e desligamento serão exibidas na caixa de diálogo. Essas caixas permitem determinar a corrida como uma amostra de inicialização ou desligamento. Quando uma dessas caixas for selecionada, ela acionará a rotina de inicialização ou desligamento no seu instrumento. Para mais detalhes, consulte a documentação de controle do seu instrumento.

Amostrador automático

Se o amostrador automático configurado tiver a capacidade de usar o volume de injeção especificado pelo método, essa seção irá aparecer.

- **Usar programa -** Clique na caixa de seleção caso queira usar um programa de preparação de amostra em seu amostrador automático. Depois de clicar na caixa de seleção, clique no botão de pasta para procurar e selecionar o arquivo de preparação de amostra que deseja usar.
- F**rasco -** Informe o número frasco do amostrador automático a ser usado para a injeção.
- **Frac. Inicial** - Insira o número do frasco do coletor de fração a usar para esta injeção.
- V**olume de injeção -** Informe o volume de injeção para essa corrida. Para amostradores automáticos que

oferecem suporte a esse modo, a opção Usar método irá aparecer. Quando selecionada, essa opção usa o volume de injeção padrão especificado para o instrumento na Configuração do instrumento **.**

Aquisição de corrida da sequência

Depois de criar e salvar uma sequência, você pode usá-la para adquirir e processar dados.

Para iniciar uma aquisição de sequência:

1. Na Janela do Instrumento, clique no botão **Corrida da sequência** , ou, no menu **Controle** e clique em **Corrida da sequência...**
2. Na caixa de diálogo**Corrida da sequência**, complete os campos listados na tabela abaixo.
3. Clique em **Iniciar**para iniciar a aquisição de sequência. Você poderá ver os dados exibidos em tempo real nas janelas do cromatograma se a opção "dados atuais" estiver selecionada para exibição.

Informações da sequência	**E**sta seção permite especificar arquivos para a corrida. • **Nome da sequência** - Informe o nome da sequência a ser utilizada ou clique no botão **Arquivo** para selecionar o arquivo de sequência em uma lista de arquivos de sequência disponíveis. O nome do arquivo não pode conter mais de 70 caracteres. • **Caminho do resultado -** Informe um nome do caminho onde o arquivo de dados adquirido para essa corrida será armazenado. Clique no botão **Arquivo** para selecionar um caminho em uma lista dos que estão presentes no disco. • **Nome do resultado -** Informe um nome para o arquivo de resultado.
Intervalo de corridas	Selecione o intervalo da sequência a ser executada. • **Todas** - Clique nessa opção para executar todas as corridas na sequência. • **Seleção** - Se você tiver realçado uma série de corridas na planilha de sequência para selecioná-las, clique nessa opção para executar

apenas as corridas realçadas.

- **Intervalo** - Especifique um intervalo de corridas a serem executadas. Por exemplo, uma entrada de **4 - 6** executará as corridas 4, 5 e 6 da sequência. Uma entrada de **4-** atribui a 4ª corrida até o fim da sequência.

Selecione como você deseja lidar com torres duplas do amostrador automático (caso estejam presentes), modo de processamento e calibração através de Bracket (caso seja usada).

- **Torre** - Se o seu instrumento estiver configurado para Torre Dupla, é possível selecionar o modo da torre a ser utilizado na corrida da sequência. As opções incluem Dupla, Frente e Traseira.
- **Modo de processamento** - Selecione um modo de reprocessamento de dados. As opções disponíveis variarão de acordo com o instrumento configurado. Caso o instrumento não ofereça suporte a esse recurso, a opção estará acinzentada. Para certos amostradores automáticos, o modo de **preparação de amostras redundante** estará disponível. Consulte Sobre preparação de amostras redundante para obter mais informações e conhecer as restrições ao uso desse modo.

Modo

- **Limitação** - Selecione o tipo de limitação que deseja aplicar. (Consulte a seção Calibração através de limitações para obter mais detalhes.)
  - **Nenhuma** Selecione essa opção se não quiser limitar calibrações.
  - **Padrão** Selecione essa opção se quiser aplicar o modo padrão de limitação de calibrações.
  - **Sequência** Selecione essa opção se quiser aplicar o modo de sequência de limitação de calibrações.
  - **Sequência com Calc Básico**Selecione essa opção se quiser aplicar o modo de sequência da limitação de calibrações e calcular retroativamente as corridas de calibração.

Revisão

- **Revisão de resultados** - Clique nessa caixa se quiser que a sequência faça uma pausa entre corridas para que você revise os

resultados.

- **Exame da calibração** - Clique nessa caixa se quiser que a sequência faça uma pausa após cada conjunto de calibração, definindo-se conjunto de calibração como uma ou mais corridas de calibração que ocorrem em sequência.

Relatórios

- **Salvar como PDF** - Ao marcar esta caixa, um relatório será salvo como arquivo PDF ao final da corrida. Selecione um relatório de **Método** ou **Sequência**.
- **Imprimir separata** -Ao marcar esta caixa, um relatório será impresso no final da corrida.
- **Selecionar impressora** - Se a opção Imprimir separata estiver marcada, selecione uma impressora do menu suspenso

Iniciar corrida

Por padrão, a corrida será iniciada imediatamente. Para determinar quando quer que a corrida inicie, selecione o botão **Agendar corrida** . Na caixa de diálogo **agendar corrida** , selecione das seguintes opções:

- **Agora -** imediatamente
- **Depois -** depois de determinado tempo
- **Às -** em uma data e hora específicas

Destinatário(s) de E-mail

Use esse campo para habilitar o envio da notificação por e-mail para um endereço designado (especificado no campo **Para:**).

- Selecione a caixa **Na partida** para enviar a notificação por e-mail quando a sequência for iniciada.
- Selecione a caixa **Na parada ou erro** para enviar a notificação por e-mail quando a sequência parar um erro ocorrer.

Sobre o Modo de Preparação de Amostras Redundante

Quando a opção **Preparação de Amostras Redundante** está selecionada na caixa de diálogo Corrida da sequência enquanto se executa uma seqüência, o software envia toda a sequência para

o hardware de uma só vez, e não linha por linha. Essa opção permite ao amostrador automático otimizar a taxa de transferência executando pré-tratamento sobreposto de amostras.

Ao usar o Modo Preparação de Amostras Redundante:

- Não use os tipos de corrida Iniciar loop ou Parar loop
- Não especifique qualquer ação de falha exceto Alarme, Continuar ou Enviar e-mail
- Não edite a sequência depois de iniciada.

Para certos amostradores automáticos com suporte, conforme cada linha da sequência é enviada para o instrumento, o número frasco e o programa de pré-tratamento da próxima linha da seqüência também são transferidos para implantação da sobreposição amostra. A sobreposição amostra:

- Faz uma pré-recuperação do próximo frasco de amostra enquanto uma linha da sequência é analisada
- Faz uma pré-lavagem da seringa e carrega a amostra

Para esses amostradores automáticos, nenhuma opção da tabela de sequências é proibida. Caso ocorra uma alteração na ordem de processamento como resultado de uma corrida prioritária, interrupção na corrida da sequência ou ação Sequência Inteligente, a amostra pré-recuperada não será analisada, e sim descartada.

Nota: O modo de preparação de amostras redundante só está disponível em amostradores automáticos que oferecem suporte a esse modo. Consulte a documentação fornecida com o seu amostrador automático para determinar como ele lida com a sobreposição amostra.

Calibrações através de Bracket

Na caixa de diálogo Corrida da sequência a opção **Limitação** permite processar dados usando replicações de calibração que são executadas de maneira "limitada" nas amostras da sequência. Isso lhe permite processar todos os arquivos de dados usando fatores de resposta consistentes. Quando uma opção de limitação é escolhida, o cálculo dos resultados é efetuado de modo que os padrões de calibração sejam processados antes do cálculo dos resultados desconhecidos, independentemente do fato de que os padrões de calibração são limitados em torno das amostras desconhecidas. A limitação também pode ser executada como parte do reprocessamento da sequência.

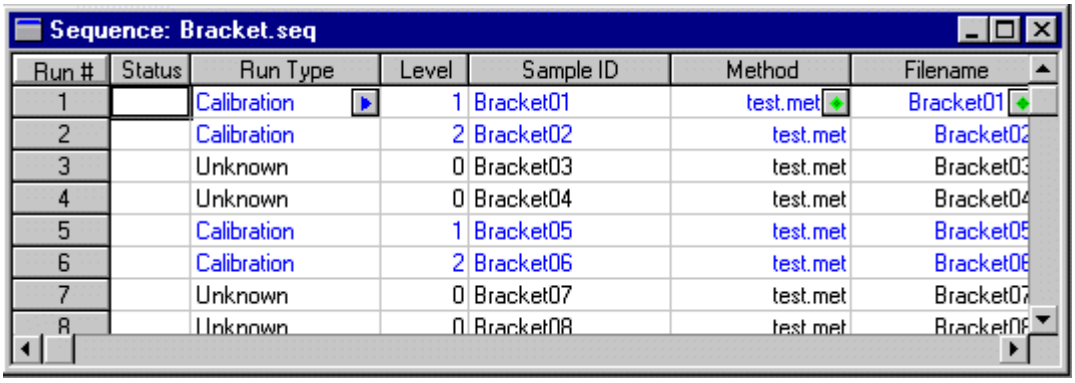
- **Limitação Padrão** - Se escolher esse método de limitação da calibração, cada grupo de amostras desconhecidas será calculado com base nos fatores de resposta determinados pelos padrões de calibração diretamente antes e depois do grupo desconhecido na sequência.

- **Sequência em Bracket** - Se você escolher essa opção de limitação, os resultados de amostras desconhecidas serão calculados com base nos fatores de resposta gerados por toda a seqüência de padrões de calibração, seja qual for sua posição na sequência. A calibração ocorre depois que todas as amostras e padrões são executados.

- **Sequência em Bracket com Cálculo Básico** - Esse método de limitação usa o método de limitação de sequência e, em seguida, efetua um cálculo retroativo e informa as quantidades das corridas de calibração usando as curvas de calibração finais.

Tomando a sequência a seguir como exemplo, usando o método de limitação **Padrão**, as amostras desconhecidas número 3 e 4 serão calculadas usando fatores de resposta gerados depois da conclusão das corridas de calibração 1, 2, 5 e 6. As corridas de amostra desconhecida 7 e 8 serão calculadas usando fatores de resposta gerados depois da execução das corridas de amostra de calibração 5, 6, 9 e 10.

No mesmo exemplo, usando o método de limitação de **Sequência**, todas as amostras desconhecidas serão calculadas usando fatores de resposta gerados depois da conclusão de todos os padrões de calibração (1, 2, 5, 6, 9 e 10).



Run #	Status	Run Type	Level	Sample ID	Method	Filename
1		Calibration	1	Bracket01	test.met	Bracket01
2		Calibration	2	Bracket02	test.met	Bracket02
3		Unknown	0	Bracket03	test.met	Bracket03
4		Unknown	0	Bracket04	test.met	Bracket04
5		Calibration	1	Bracket05	test.met	Bracket05
6		Calibration	2	Bracket06	test.met	Bracket06
7		Unknown	0	Bracket07	test.met	Bracket07
8		Unknown	0	Bracket08	test.met	Bracket08

Agendar Corrida

Esta caixa de diálogo aparece quando você clica no botão **Iniciar Corrida** na caixa de diálogo Aquisição de Corrida Única ou Corrida da Sequência. Permite designer quando pretende que a corrida inicie: imediatamente (**Agora**), após um período designado (**Após**) ou em uma data e hora específicas (**Em**).

Reprocessar uma sequência

Depois que os dados forem adquiridos, você pode usar uma sequência para analisar ou reanalisar automaticamente todos ou alguns dos arquivos na sequência. O reprocessamento de uma sequência é uma maneira conveniente de reanalisar dados se você tiver alterado a integração ou outros parâmetros do método e quiser gerar novos resultados para uma série de arquivos de

dados. Também é possível usar uma sequência para calibrar ou recalibrar um método de calibração com diversos níveis.

Para reprocessar uma sequência:

1. Abra o conjunto de resultados.
2. Na Janela do Instrumento, selecione **Definir resultado > Processo** .
3. Preencha os seguintes campos:

Informações da Sequência	**Nome da sequência, Caminho de resultado** e **Nome do resultado** são preenchidos automaticamente.
Intervalo de corridas	Selecione o intervalo da sequência a ser executada. • **Todas** - Clique nessa opção para executar todas as corridas na sequência. • **Seleção** - Se você tiver realçado uma série de corridas na planilha de sequência para selecioná-las, clique nessa opção para executar apenas as corridas realçadas. • **Intervalo** - Especifique um intervalo de corridas a serem executadas. Por exemplo, uma entrada de **4 - 6** executará as corridas 4, 5 e 6 da sequência. Uma entrada de **4-** atribui a 4ª corrida até o fim da sequência.
Modo	Selecione como você deseja lidar com torres duplas do amostrador automático (caso estejam presentes), modo de processamento e calibração através de Bracket (caso seja usada). • **Torre** - Se o seu instrumento estiver configurado para Torre Dupla, é possível selecionar o modo da torre a ser utilizado na corrida da sequência. As opções incluem Dupla, Frente e Traseira. • **Modo de processamento** - Selecione um modo de reprocessamento de dados. **Reintegrar** analisa os dados brutos usando o método designado para cada linha. **Usar Últimos Resultados** imprime relatórios ou resumos de sequência usando os últimos resultados salvos no arquivos de dados. **Usar Resultados Originais** imprime relatórios ou resumos de

sequência usando os resultados originais armazenados no arquivo de dados. Selecione **Revisar Apenas** para simplesmente examinar os arquivos.

- **Limitação** - Selecione o tipo de limitação que deseja aplicar. (Consulte a seção Calibração através de limitações para obter mais detalhes.)
  - **Nenhuma** Selecione essa opção se não quiser limitar calibrações.
  - **Padrão** Selecione essa opção se quiser aplicar o modo padrão de limitação de calibrações.
  - **Sequência** Selecione essa opção se quiser aplicar o modo de sequência de limitação de calibrações.
  - **Sequência com Calc Básico**Selecione essa opção se quiser aplicar o modo de sequência da limitação de calibrações e calcular retroativamente as corridas de calibração.

Revisão

- **Revisão de resultados** - Clique nessa caixa se quiser que a sequência faça uma pausa entre corridas para que você revise os resultados.
- **Exame da calibração** - Clique nessa caixa se quiser que a sequência faça uma pausa após cada conjunto de calibração, definindo-se conjunto de calibração como uma ou mais corridas de calibração que ocorrem em sequência.

Relatório

- **Salvar como PDF** -Selecione **Método**ou **Sequência.** Ao marcar esta caixa, um relatório será salvo como arquivo PDF ao final da corrida.
- **Imprimir separata** - **Selecionar Método ou Sequência.** Ao marcar esta caixa, um relatório será impresso no final da corrida.
- **Selecionar impressora** - Selecione uma impressora do menu suspenso

Veja também

Desativar o processamento para aquisição de dados

Sobre a fila de corridas

A fila de corridas é usada para gerenciar e programar corridas únicas e corridas da sequência. Ao ser iniciada uma sequência ou corrida única, esta é inserida automaticamente na fila de corridas.

Para exibir a fila de corridas atual, selecione o botão **Exibir fila de corridas** . Cada linha da fila de corridas representa uma amostra ou sequência que está sendo processada ou em espera. Serão exibidas as amostras e sequências tanto de aquisição como de reprocessamento desse instrumento.

A partir da fila de corridas, é possível ver detalhes sobre cada corrida ou sequência na fila, inclusive:

- **Tipo** - corrida única ou da sequência
- **Nome** - nome do arquivo de dados resultante
- **Estado** - Pendente, Em execução, Concluída
- **Status** - Concluída com êxito, Interrompida, Reprovada, A cada X minutos.
- **Usuário**
- **Frasco**
- **Volume**
- **Descrição.**

Se você estiver executando uma sequência, o **Status** mostrado na planilha de sequência indicará o status de uma corrida individual na sequência.

Quando houver itens na fila de corridas, os botões na parte superior da janela estarão disponíveis:

- **Iniciar** inicia a fila de corridas novamente depois do botão **Pausar** ter sido pressionado. Este botão é desabilitado enquanto uma amostra estiver em execução ou se a fila de corridas estiver vazia.
- **Pausar** irá pausar a fila de corridas assim que uma corrida estiver completa e aguardará uma ação sua. Não é necessário aguardar que a sequência inteira esteja completa.
- **Abortar** irá finalizar imediatamente o item em execução naquele instante na fila e pausar a sequência.

- Você pode executar funções adicionais para a fila de corridas clicando com o botão direito do mouse na janela da fila de corridas.

Enviar uma Corrida à Fila

O botão **Enviar** é exibido quando os dados são adquiridos com o uso de uma corrida única ou da sequência e você abre a caixa de diálogo corrida única ou corrida da sequência .

Selecione o botão **Enviar** para enviar uma única aquisição a ser executada na conclusão da corrida atual. A corrida será inserida no final da fila de corridas se você estiver atualmente executando uma sequência de corridas.

Veja também

Adicionar uma corrida à fila

Adicionar uma corrida à fila

Para adicionar uma corrida à fila:

1. Na barra de ferramentas, selecione o botão **Exibir fila de corridas** .
2. Selecione da lista suspensa **Método**, da caixa de diálogo **Fila de corridas**, o método a ser usado na corrida. Os métodos exibidos se referem ao projeto atual.
3. Na caixa **ID da amostra**, digite um ID da amostra exclusivo para ser usado na amostra. É possível inserir qualquer parâmetro válido de ID da amostra suportado pelo ID da Amostra na caixa de diálogo de corrida única, como . Este campo será incrementado a cada vez que o botão **Enviar** for pressionado.
4. Para especificar informações adicionais para a corrida, selecione **Avançado** para abrir o diálogo**corrida única**
5. Clique em **Enviar** para enviar uma corrida única à fila.

Adicionar uma corrida ao resultado

Você pode adicionar corridas únicas ou múltiplas a um recipiente existente.

Para adicionar corridas múltiplas a um recipiente existente:

1. Selecione **Controle > Adicionar corridas ao resultado** desde o menu.

2. Na caixa de diálogo **adicionar corridas ao resultado**, os campos são preenchidos com o método aberto. Certifique-se de que todos os campos estejam preenchidos.

3. Selecione **Iniciar**.

Para adicionar uma corrida única ao resultado:

1. Selecione **Controle > Adicionar corrida única ao resultado** desde o menu.

2. Na caixa de diálogo **adicionar corrida única ao resultado**, os campos são preenchidos com o método aberto. Certifique-se de que todos os campos estejam preenchidos.

3. Selecione **Iniciar**.

Veja as novas corridas na caixa de diálogo sequência de resultados no modo de revisão de resultado

Acesso do usuário a corridas em andamento

O usuário que enviou a corrida ou a sequência terá acesso às funções Parar corrida, Estender corrida ou Parar sequência.

Outros usuários, que não enviaram a corrida ou sequência,podem visualizar a corrida (caso tenha os direitos do instrumento), mas não parar uma corrida ou sequência iniciada por outro usuário. Usuários com direitos de **administração do sistema** ou **administração do instrumento** têm acesso completo à corrida e às funções de sequência.

Uma vez enviada uma corrida ou sequência a um controlador de aquisição de uma estação de trabalho cliente, é possível modificar o método. Você deve salvar o arquivo (Arquivo > Salvar método**)** para que as alterações sejam usadas nas corridas de sequência subsequentes que usem esse método. Caso mais de um cliente altere e salve o método, as alterações feitas pelo último cliente serão salvas e todas as demais, perdidas. Se o método não for salvo antes do início da próxima corrida da sequência que usa esse método, as alterações feitas em um cliente serão perdidas quando a próxima corrida da sequência começar.

O usuário que enviou uma sequência para o controlador de aquisição pode adicionar ou remover corridas da sequência enviada de uma estação de trabalho cliente (caso o usuário tenha a atribuição de privilégio apropriada). Para que as alterações feitas à sequência entrem em vigor, ela deve ser salva (Arquivo > Salvar > Sequência**)**. Quando a sequência for salva, todos os demais clientes serão notificados da alteração, e a próxima corrida de sequência será executada na sequência modificada.

Parar uma corrida em andamento

Quando uma corrida for interrompida, os dados gerados até esse momento serão salvos no arquivo de dados. Entretanto, nenhuma análise dos dados será realizada. Se quiser gerar um relatório ou exibir os resultados de uma corrida que foi interrompida, você deverá analisar o arquivo de dados.

Caso não seja o usuário que enviou a corrida ou a sequência ou esteja usando um instrumento off-line, você não terá acesso ao comando Parar.

Nota: Ao usar o botão Parar, certifique-se de manter o botão do mouse pressionado até o ícone do botão Parar mudar para a aparência de "pressionado" antes da liberação.

Para parar aquisição de dados durante uma corrida:

1. Selecione **Controle > Parar corrida**.
2. Selecione a maneira como deseja interromper a corrida:

- **Parar corrida atual somente** - Selecione esta opção para finalizar a corrida atualmente em progresso. Se a corrida fizer parte de uma sequência atualmente em fila, a sequência continuará com a próxima corrida.
- **Parar corrida atual e da sequência** - Esta seleção interrompe a corrida atualmente em progresso e finaliza a sequência da qual ela faz parte. Outros itens em fila continuarão sendo processados.
- **Parar sequência após finalizar a corrida atual** - Esta seleção interrompe a sequência depois da corrida em adamento atualmente for finalizada.
- **Parar todos itens enviados da fila de corridas** - Esta seleção interrompe a corrida atualmente em progresso e finaliza todos os itens da fila que foram enviados a você. Os itens da fila enviados por outros usuários não serão afetados.
- **Parar todos itens da fila de corridas** - Esta seleção interrompe a corrida atualmente em progresso e finaliza todos os itens da fila de corrida.

Estender uma corrida

Enquanto houver uma corrida em andamento, é possível estender a aquisição de dados além do tempo de corrida determinado. Caso você não seja o usuário que enviou a corrida ou a sequência,

ou esteja usando um instrumento off-line, você não terá acesso aos comandos Parar ou Estender Corrida.

1. No menu, clique em **Controle** seguido de **Estender Corrida**.
2. Uma caixa de diálogo será exibida onde é possível especificar o tempo em que você deseja estender a corrida.
3. Digite o número de minutos que você deseja estender a corrida e clique no botão **OK**.

Adicionar e excluir itens da fila de corridas

A fila de corridas da amostra é usada para controlar a aquisição e processamento de amostras. Ao ser iniciada uma corrida única ou sequência, esta é inserida automaticamente na fila de corridas.

Para adicionar ou excluir itens da fila de corridas:

1. Na Janela do Instrumento, clique no botão **Exibir fila de corridas** , ou, no menu **Controle** e clique em **Fila de Corridas...** .
2. Na **fila de corridas**, clique com o botão direito do mouse no item da fila de corridas que deseja alterar.
3. Selecione a alteração que deve ser feita.
4. Ao concluir, feche a fila de corridas.

Excluir	Esse comando excluirá o item selecionado da fila de corridas.
Excluir minhas corridas	Esse comando excluirá somente as corridas que você enviou.
Excluir tudo	Esse comando excluirá todos os itens da fila de corridas.
Alterar Hora de Início...	Para determinar quando quer que a corrida inicie, selecione o botão **Agendar corrida** . Na caixa de diálogo **agendar corrida** , selecione das seguintes opções: • **Agora -** imediatamente • **Depois -** depois de determinado tempo • **Às -** em uma data e hora específicas

Relatórios

- **Método como PDF** - Ao marcar esta caixa, um relatório de método será salvo como arquivo PDF ao final da corrida.
- **Sequência como PDF -** Ao marcar esta caixa, um relatório de método será salvo como arquivo PDF ao final da corrida.
- **Método como separata** -Ao marcar esta caixa, um relatório de método será impresso ao final da corrida.
- **Sequência como separata** - Ao marcar esta caixa, um relatório da sequência será impresso ao final da corrida.
- **Selecionar impressora** - Se **Método como separata** ou **Sequência como separata** estiverem marcados, selecione uma impressor do menu suspenso.

Imprimir relatórios de método

Quando a impressão de relatórios de método está ativada para o item da fila realçado, uma marca de seleção é exibida. É possível desativar a função impressão de relatórios de método para o item da fila selecionado clicando em **Imprimir relatórios de método** para remover a marca de seleção.Agora diferente, Imprimir relatórios > Método como PDF, Sequência como PDF, Método como separata, Sequência como separata

Imprimir relatórios sequenciais

Quando a impressão do relatório da sequência está ativada para o item da fila realçado, uma marca de seleção é exibida. É possível desativar a função impressão de relatórios de sequência para o item da fila selecionado clicando em **Imprimir relatórios sequenciais** para remover a marca de seleção.Agora diferente, Imprimir relatórios > Método como PDF, Sequência como PDF, Método como separata, Sequência como separata

Corrida única Não consegue ver isto ou o seguinte na barra de ferramentas do RT, botões? Controle > ?

Esse comando abre a caixa de diálogo **Aquisição de Corrida Única**, onde você designar uma aquisição de corrida única para a fila de corridas. Se uma aquisição estiver em andamento, clique em **Enviar** para adicionar a corrida à fila de corridas. Se você clicar no botão **Prioridade de Envio** para adicionar um item à fila, o objeto que está sendo enviado será agendado para ser executado imediatamente após o término da corrida atual. Depois que o item prioritário for concluído, a sequência que estava sendo executada anteriormente será

retomada.

Análise Única

Esse comando abre a caixa de diálogo **Calibração de análise para um único nível** para adicionar um reprocessamento de corrida única (análise/calibração de nível único) à fila de corridas. Se uma aquisição estiver em andamento, clique em **Enviar** para adicionar a análise à fila de corridas. Se você clicar no botão **Prioridade de Envio** para adicionar um item à fila, o objeto que está sendo enviado será agendado para ser executado imediatamente após o término da corrida atual. Depois que o item prioritário for concluído, a sequência que estava sendo executada anteriormente será retomada.

Corrida da Sequência

Esse comando abre a caixa de diálogo **Sequência de Corridas**, onde você pode designar uma sequência para ser adicionada à fila de corridas. Se uma aquisição estiver em andamento, clique em **Enviar** para adicionar a sequência à fila de corridas. Se você clicar no botão **Prioridade de Envio** para adicionar um item à fila, o objeto que está sendo enviado será agendado para ser executado imediatamente após o término da corrida atual. Depois que o item prioritário for concluído, a sequência que estava sendo executada anteriormente será retomada.

Processo de Sequência

Esse comando abre a caixa de diálogo **Sequência de Processo**, onde você pode adicionar uma sequência para processamento à fila de corridas. Se uma aquisição estiver em andamento, clique em **Enviar** para adicionar o processo de sequência à fila de corridas. Se você clicar no botão **Prioridade de Envio** para adicionar um item à fila, o objeto que está sendo enviado será agendado para ser executado imediatamente após o término da corrida atual. Depois que o item prioritário for concluído, a sequência que estava sendo executada anteriormente será retomada.

Nota: Caso uma sequência esteja sendo reprocessada no momento, é necessário que a a opção de revisão de resultados (pausar após cada corrida) esteja selecionada para que uma sequência adicional possa ser enviada para a fila. Se a sequência estiver sendo reprocessada sem essa opção selecionada, você terá que parar a sequência, selecionar a opção Revisão de resultados (pausar após cada corrida) e depois reiniciá-la. Nesse ponto, você poderá enviar uma ou mais sequências para a fila.

Desativar o processamento para aquisição de dados

Se você quiser adquirir e armazenar dados no disco rígido, mas adiar o processamento completo até examinar os dados, desative a opção de analisar depois da aquisição antes de adquirir os dados.

Para desativar o processamento pós-aquisição:

1. Na barra de menus, clique em **Método** seguido de **Propriedades.**
2. Clique em **Opções**.
3. Clique na caixa de seleção para limpar a opção **Analisar depois da aquisição**. Se a caixa de seleção **Analisar depois da aquisição** estiver marcada, os arquivos de dados gerados com esse método serão integrados e os resultados gerados automaticamente após cada aquisição. Se você **desmarcar** dessa opção em seu método, nenhuma análise ocorrerá quando você adquirir corridas com esse método. Os dados serão salvos no disco, mas nenhum resultado será gerado.

Nota: A opção de desativar a análise depois da aquisição faz parte do método. Se você quiser adiar o processamento de uma sequência até depois que a aquisição de dados esteja concluída, certifique-se de que essa opção está desativada em todos os métodos especificados em sua sequência.

Veja também

Reprocessar uma sequência

Enviar uma Corrida Prioritária

O botão Prioridade de Envio... aparece quando os dados estão sendo adquiridos usando uma sequência ou corrida única e você abre a caixa de diálogo Corrida Única ou Corrida da Sequência. O botão Prioridade de Envio... permite enviar uma aquisição única para ser executada na conclusão da corrida atual. A corrida é inserida no final da Fila de Corridas se você estiver executando atualmente uma sequência de corridas.

Nota: Se o cromatograma não estiver integrado no final da corrida ou se você estiver esperando um relatório e nenhum foi impresso, verifique a seção Propriedades do Método de seu método para se certificar de que a análise de dados e os relatórios estão ativos para este método.

Configuração do Coletor de Frações

1. Selecione **Controle > Configuração > Coletor de Frações**.
2. Na caixa de diálogo **Configuração do Coletor de Frações**, selecione **Ajuda** ou pressione **F1** em uma seção para obter mais informações.

Veja também Configurar um coletor de frações

Sobre a sequência de resultados

A sequência de resultados é uma sequência das corridas adquiridas e dos dados apresentados com elas.

Veja também

Visualizar o Modo de Revisão de Resultado

Abrir a sequência de resultados

Adicionar assinaturas à sequência de resultados

Revogar assinaturas

Propriedades do conjunto de Resultados

Salvar um conjunto de resultados

Visualizar o Modo de Revisão de Resultado

O modo de revisão de resultado o notifica que está na revisão de dados.

1. Na barra de ferramentas, selecione **Visualizar > Preferências**.
2. Na caixa de diálogo**Preferências**, sob **opções da barra de ferramentas**, selecione **Resultados**.
3. Selecione **Mostrar barra de ferramentas**.
4. Selecione **OK**.

O **Modo de revisão de resultado** amarelo aparece na janela do instrumento.

Veja também

Adicionar assinaturas à sequência de resultados

Aplica-se assinaturas à sequência de resultados.

1. Abrir a sequência de resultados.
2. Na barra de ferramentas selecione **Dados > Aplicar assinatura**.
3. Na caixa de diálogo **aplicar assinatura eletrônica** , selecione das seguintes opções:

- **Assinar arquivo atual -** Esta opção adicionará uma assinatura ao arquivo atual.
- **Intervalo** - Selecione o intervalo da sequência a ser executada. Pode-se usar um conjunto ou intervalos de linhas, por exemplo **1, 3, 5, 7** ou **1-3, 7-10**.
- **Ass. todos arquivos** - Esta opção adiciona assinaturas a todos os arquivos em Abrir arquivo de resultado.

5. Informe um **usuário**e **senha**.
6. Selecione o **Motivo** da lista suspensa.
7. Adicione um **Comentário** se necessário.
8. Selecione **Signoff**. Os dados estão bloqueados para análise posterior.

Veja também

Revogar assinaturas

Revogar assinaturas

Os usuários com direitos apropriados podem revogar uma assinatura eletrônica. Uma vez que a assinatura eletrônica tenha sido revogada, os dados podem ser analisados. Quando a assinatura for revogada, uma entrada será feita no registro de auditoria.

1. Abrir a sequência de resultados.
2. Na barra de ferramentas selecione **Dados > Revogar assinatura**.
3. Na caixa de diálogo de aviso, selecione **Sim**.
4. Na caixa de diálogo **revogar assinatura eletrônica** , selecione das seguintes opções:

- **Revogar arquivo atual -** Esta opção revoga a assinatura no arquivo atual.

- **Intervalo** - Selecione o intervalo da sequência a ser executada. Pode-se usar um conjunto ou intervalos de linhas, por exemplo **1, 3, 5, 7** ou **1-3, 7-10**.
- **Revogar todos os arquivos** - Esta opção revoga as assinaturas de todos os arquivos em Abrir arquivo de resultado.

5. Informe um **usuário**e **senha**.
6. Digite um **Motivo**.
7. Selecione **Signoff**. Agora os dados podem ser analisados.

Veja também

Adicionar assinaturas à sequência de resultados

Propriedades do Conjunto de Resultados

Desde o menu, selecione **Conjunto de resultados > Propriedades** para visualizar as opções do conjunto de resultados, log do registro de auditoria e habilitar o registro de auditoria.

Opções do conjunto de resultados

1. Abra um arquivo de resultado (**.rst**).
2. No menu **Conjunto de resultados**, clique em **Propriedades**.
3. Na caixa de diálogo **propriedades do conjunto de resultados**, selecione a guia **Opções**.

- **Descrição** - Digite as informações sobre seu arquivo de resultado na caixa de diálogo. Como a descrição pode ser visualizada na caixa de diálogo **abrir arquivo**, ela pode ser útil na classificação por meio dos arquivos do seu disco.
- **Exportar resumo** - Marque esta caixa para exportar o resumo. Então, selecione o local onde os arquivos devem ser salvos:
  - **Caminho -** Digite um resumo do caminho de exportação
  - **Método** - Digite um caminho do método

Visualize o log do registro de auditoria do conjunto de resultados

1. Abra um arquivo de resultado (**.rst**).
2. No menu **Conjunto de resultados**, clique em **Propriedades**.

3. Na caixa de diálogo **propriedades do conjunto de resultados**, selecione a guia **Log do registro de auditoria**.

4. Insira as seguintes informações:

- **Usuário**
- **Local**
- **Descrição**
- **Motivo**
- **De data/hora**
- **Para data/hora**

5. Selecione uma das seguintes opções:

- **Exportar -** Selecione esta opção para exportar o log do registro de auditoria
- **Imprimir -** Selecione esta opção para imprimir o log do registro de auditoria
- **Pesquisar -** Selecione esta opção para pesquisar o log do registro de auditoria

Habilitar o registro de auditoria do conjunto de resultados

1. Abra um arquivo de resultado (**.rst**).
2. No menu **Conjunto de resultados**, clique em **Propriedades**.
3. Na caixa de diálogo **propriedades do conjunto de resultados**, selecione a guia **Registro de auditoria**.
4. Selecione **Habilitar o registro de auditoria**. Depois de ser marcada, a caixa Habilitar o Registro de Auditoria não poderá ser desmarcada.
5. Na caixa de diálogo de aviso, selecione **Sim.** A caixa habilitar o registro de auditoria estará permanentemente marcada.
6. Selecione uma das seguintes opções:

- **Solicitar razão a cada alteração -** Essa opção solicita ao usuário que insira um motivo para cada alteração subsequente no método no momento em que a alteração é feita.
- **Solicitar razão ao salvar sequência -** Esta opção requer que o usuário insira um motivo para cada alteração quando a sequência é salva.

- **Não solicitar razão -** Quando essa opção é selecionada, as alterações são documentadas, mas não é necessário que o usuário forneça um motivo.

Sobre relatórios de sequência

É possível gerar relatórios contendo resultados das execuções em uma sequência. O arquivo de sequência não contém o relatório, mas aponta para um ou mais modelos externos usados para gerar os relatórios conforme a sequência é executada ou reprocessada.

A geração de relatórios para uma determinada amostra em uma planilha de sequência é designado como parte de seutipo de corrida. Se o tipo **Corrida Resumida** é selecionado, a amostra será incluída no relatório de resumo da sequência. Se a caixa **Imprimir relatórios adicionais** for selecionada, os relatórios designados serão impressos para essa amostra.

Para criar um modelo de relatório personalizado contendo informações da corrida da sequência (como um relatório de resumo da sequência), selecione Relatório avançado do menu. O aplicativo Relatórios avançados permite criar um modelo de resumo da sequência (arquivo .tpl) que pode ser usado para gerar um relatório para uma sequência. Como o modelo não é salvo como parte da sequência, este pode ser usado independentemente para resumir dados de qualquer sequência.

Para detalhes sobre como criar um modelo de resumo de sequência, consulte Sobre relatórios avançados.

Veja também

Gerar um relatório de resumo da sequência

Exibir relatórios de sequência

Imprimir relatórios sequenciais

Editar um modelo de relatório de sequência

Editar e imprimir um relatório de conteúdo de sequência

Gerar um relatório da sequência

Para gerar um relatório da sequência durante a aquisição ou o reprocessamento, as corridas que serão incluídas no relatório resumido devem ser designadas como corridas resumidas na sequência. Se você estiver usando o **Assistente de sequência**, esses arquivos serão selecionados durante a criação da sequência na etapa **Relatórios** do assistente.

Para determinar quais corridas serão incluídas no relatório da sequência:

1. Abra o arquivo de sequência, se ainda não estiver aberto.
2. Para abrir a planilha de sequência clique, na barra de menus, em **Sequência** seguido de **Editar**.
3. Na primeira linha da sequência a ser incluída no relatório resumido, clique em **Tipo de corrida**.
4. Na caixa de diálogo **Tipos de corrida da amostra**, selecione a caixa **Iniciar resumo**.
5. Clique no botão Abrir arquivo para procurar e selecionar o modelo de relatório a ser usado para gerar o relatório (o relatório summary.tpl é fornecido como um modelo padrão).
6. Para cada linha a ser incluída nos relatório resumido, clique em **Tipo de corrida** e selecione **Corrida resumida**.
7. Para a última linha a ser incluída nos relatório resumido, clique em **Tipo de corrida** e selecione **Corrida resumida**.
8. Salve a sequência. Todas as corridas resumidas designadas entre, e incluindo, a corrida Iniciar de resumo e a corrida Parar resumo serão resumidas no relatório.
9. Nas caixas de diálogo Corrida única, Corrida da sequência, ou Processo de sequência, marque a caixa **Imprimir separata**.
10. Iniciar a sequência.

Depois que a sequência tiver sido adquirida ou reprocessada, o relatório será impresso na impressora padrão. Você também pode exibir o relatório a partir da Janela do Instrumento.

Veja também

Exibir relatórios de sequência

Imprimir relatórios sequenciais

Editar um modelo de relatório de sequência

Editar e imprimir um relatório de conteúdo de sequência

Exibir relatórios de sequência

Para exibir o relatório da sequência:

1. Gerar um relatório de resumo da sequência.
2. No menu **Relatórios**, clique em **Exibir** seguido de **Relatório da sequência**.
3. Será exibida uma caixa de listagem contendo os relatórios de sequência disponíveis para a sequência atual. Para cada relatório da sequência, o tipo de relatório é listado juntamente com as linhas da sequência incluídas no relatório e o modelo de relatório usado para produzir o relatório. Para exibir um relatório na tela, clique nele para realçá-lo e depois clique no botão **Exibir**.

Nota: Os relatórios da sequência só aparecerão nessa janela se a sequência tiver sido executada ou analisada.

Nota: Para exibir um relatório de resumo da sequência, é necessário que você tenha definido um modelo de relatório avançado de resumo da sequência e configurado o tipo de corrida para incluir o resumo na tabela de sequências de modo que as corridas da sequência sejam incluídas no relatório, designando o arquivo de modelo de resumo da sequência correto a ser utilizado para gerar o relatório.

Veja também

Gerar um relatório de resumo da sequência

Imprimir relatórios sequenciais

Editar um modelo de relatório de sequência

Editar e imprimir um relatório de conteúdo de sequência

Imprimir relatórios sequenciais

Para imprimir um relatório sequencial automaticamente:

1. Gerar um relatório de resumo da sequência.
2. Nas caixas de diálogo Corrida única, Corrida da sequência, ou Processo de sequência, marque a caixa **Imprimir separata**.
3. Iniciar a sequência.

Para imprimir um relatório sequencial manualmente:

1. Gerar um relatório de resumo da sequência.
2. Da barra de menus, selecione **Relatórios > Imprimir > Relatório da sequência**.

3. Na caixa de diálogo **imprimir relatórios sequenciais**, selecione um relatório da sequência. São exibidos o tipo de relatório, as linhas da sequência e o modelo de relatório.

4. Selecione **Imprimir**.

Nota: Os relatórios da sequência só aparecerão nessa janela se a sequência tiver sido executada ou analisada.

Nota: Para exibir um relatório da sequência, é necessário ter definido um modelo de relatório avançado de resumo da sequência e configurado o Tipo de corrida, para incluir o resumo na tabela de sequências de modo que as corridas da sequência sejam incluídas no relatório, designando o arquivo de modelo de resumo da sequência correto a ser utilizado para gerar o relatório.

Veja também

Gerar um relatório de resumo da sequência

Exibir relatórios de sequência

Editar um modelo de relatório de sequência

Editar e imprimir um relatório de conteúdo de sequência

Editar um modelo de relatório de sequência

Você pode modificar um modelo de relatório de resumo da sequência existente usando o recurso Relatórios avançados.

Para abrir um arquivo de modelo existente para edição:

1. Selecione **Arquivo > Abrir > Relatório avançado.**
2. Procure e realce o arquivo de modelo **Summary.tpl** (ou o modelo de resumo que deseja modificar) e clique em **Abrir**.
3. Modifique o modelo de relatório usando o editor de Relatórios avançados e então salve o arquivo de modelo selecionando **Arquivo > Salvar > Relatório avançado.**

Veja também

Gerar um relatório de resumo da sequência

Exibir relatórios de sequência

Imprimir relatórios sequenciais

Editar e imprimir um relatório de conteúdo de sequência

Editar e imprimir um relatório de conteúdo de sequência

O relatório de conteúdo de sequência usa o arquivo de modelo **SequenceContentsReport.rep**, localizado na pasta *Modelo* do projeto atual.

Para editar o modelo da sequência atual:

1. Da janela do instrumento selecione **Arquivo > Abrir > Relatório padrão** e navegue à pasta Modelo do projeto atual.
2. Selecione o arquivo **SequenceContentsReport.rep** e clique em **Abrir**.
3. Na janela Relatório padrão, clique com o botão direito do mouse na tabela do relatório Impressão da sequência para personalizar o conteúdo da tabela. Consulte Usando o editor de relatórios.
4. Selecione **Arquivo > Salvar como > Relatório padrão.** Navegue à pasta do modelo e salve-o como SequenceContentsReport.rep (substituindo o modelo existente).

Para imprimir a sequência atual:

1. Da Janela do Instrumento selecione **Arquivo > Imprimir > Sequência**.
2. Na caixa de diálogo **Configurar impressão** selecione a impressora do menu suspenso **Nome**.
3. Selecione **OK**.

Um relatório de conteúdo de sequência será gerado na impressora designada.

Veja também

Gerar um relatório de resumo da sequência

Exibir relatórios de sequência

Imprimir relatórios sequenciais

Editar um modelo de relatório de sequência

Sobre a Calibração

Antes de obter quantidades precisas calculadas nas áreas de picos desconhecidos, você deverá ter um método que tenha uma curva de calibração a partir da qual as respostas devem ser calculadas. Isso envolve a configuração do seu método de aquisição para receber as áreas de picos padrão calibrados e executar dos padrões, de modo que as áreas padrão sejam inseridas no seu método. **Não é possível obter resultados precisos até o método ser completamente calibrado**. Em outras palavras, os padrões de cada nível de calibração deverão ser executados para concluir o método calibrado.

Quando o método estiver configurado para calibração, a calibração não será concluída até as áreas de picos das amostras padrão serem inseridas no método. A atualização do método com essas áreas é chamada de "Calibração" ou "Calibração do Método". A calibração pode ser realizada pela atualização da calibração no método automaticamente à medida que cada amostra padrão é executada; ou realizada pelo reprocessamento da sequência com o uso de arquivos de dados padrão adquiridos previamente e armazenados em disco.

Para informações sobre como criar sequência para executar amostras de calibração ou reprocessar arquivos de dados armazenados, consulte a seção Sobre Sequências**.**

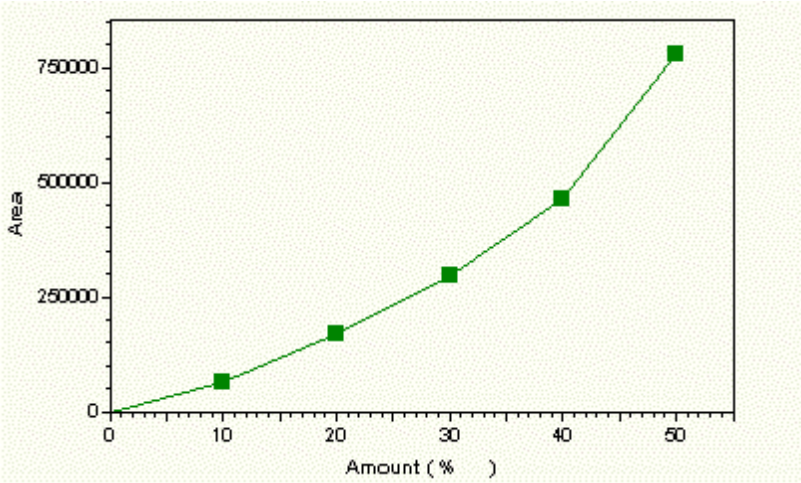
Você pode também executar um padrão de calibração por vez usando o procedimento Corrida Única. Para calibrar um método de nível único usando um padrão de calibração único salvo em disco, siga o procedimento descrito em Calibração de Nível Único Usando um Arquivo de Dado Armazenado.

Veja também

Teoria da Calibração
Passos para Criar uma Calibração
Executar Padrão de Calibração
Definir Pico Único
Definir Picos
Sobre a Tabela de Picos
Alterar as Propriedades da Tabela de Picos
Calibração de Nível Único Usando um Arquivo de Dado Armazenado
Renumerar IDs de Pico
Examinar Curvas de Calibração
Calculadora de Concentração
Cálculo da Média de Calibração
Sobre Grupos e Calibração de Grupo

Teoria da Calibração

A calibração de instrumentos de cromatografia é geralmente necessária para se obter resultados precisos. A finalidade de se calibrar um instrumento é verificar a resposta de um detector para um determinado componente. O mesmo detector pode dar respostas diferentes para quantidades iguais de diferentes componentes em condições cromatográficas idênticas. Um outro motivo para a calibração envolve a linearidade do detector. A velocidade de resposta do detector para vários compostos diminuirá aumentando a concentração do componente, exigindo assim a calibração do detector em níveis de concentração variáveis do mesmo componente (uma calibração em vários níveis).



Curva de Calibração em Vários Níveis

Quando todos os padrões de calibração tiverem sido executados, cada componente calibrado terá sua própria curva de calibração, representando a resposta do composto para o detector sobre o intervalo de concentração. Quando uma amostra desconhecida é executada, cada concentração de componente é determinada a partir da curva de calibração por meio da localização da quantidade correspondente à área (ou altura) de componentes. Há duas técnicas gerais para calibrar amostras: Padrão Interno e Padrão Externo.

Padrões Internos

Com a técnica do Padrão Interno, cada amostra (as padrões e as desconhecidas) são marcadas com uma concentração conhecida de um composto conhecido. Quando as amostras forem subsequentemente executadas, as áreas serão ajustadas com o uso do padrão interno. Essa técnica é usada para compensar as variações na elaboração da amostra e na técnica de injeção.

Padrões Externos

A técnica Padrão Externo não usa um componente padrão marcado. Todas as amostras desconhecidas são comparadas com os padrões sem correção e, por isso, é importante que o tamanho da injeção seja preciso e reproduzível.

Calibrações de Nível Único e Vários Níveis

Uma curva de calibração pode ter um nível ou vários níveis. Uma curva de calibração de nível único é criada com a execução de apenas uma amostra padrão. A curva de calibração de cada pico se torna uma linha através da origem e um ponto que representa o relacionamento de área/valor do pico no padrão.

A execução de várias (duas ou mais) amostras padrão com diferentes quantidades de concentração cria uma curva de calibração com vários níveis (também conhecida como Multinível). A curva de calibração de um determinado componente se torna uma linha entre os pontos que representam os relacionamentos de área/valor do composto em cada concentração. Em alguns casos, a curva de calibração é "forçada através de zero", o que faz com que a linha use a origem como um dos pontos. Isso elimina a possibilidade de concentrações negativas serem calculadas para áreas com poucos picos. Diversos tipos de cálculos estão disponíveis para cálculo da curva real (denominados "tipos de ajuste"). O melhor tipo de ajuste seria aquele em que os pontos de calibração se ajustassem o mais perto possível da linha.

Para detalhes sobre as calibrações e as equações usadas para calcular os resultados, consulte Cálculos internos.

Passos para Criar uma Calibração

Configurar uma calibração de vários níveis para um método envolve os seguintes passos:.

1. Usando o seu método de aquisição de dados, execute um padrão de calibração, salvando-o em disco. Certifique-se de que suas condições de cromatografia e a integração estejam corretas.
2. Use o seu arquivo de dados padrão armazenado para criar graficamente a tabela de picos de calibração usando o comando Definir Pico Único ou Definir Picos.
3. Todos os parâmetros de calibração de cada composto calibrado serão inseridos na Tabela de Picos de Calibração. As informações de pico são preenchidas graficamente, e as informações específicas de cada pico são inseridas manualmente. Se estiver efetuando a calibração de canal múltiplo, certifique-se de definir os parâmetros de calibração de **cada** canal. Preencha a tabela de picos digitando os nomes de pico e as quantidades de concentração, o pico de referência, número do padrão interno e outros parâmetros necessários para as suas amostras.
4. Salve seu método.

5. Calibre o seu método. O método pode ser calibrado com o uso de arquivos de dados padrão adquiridos anteriormente ou automaticamente à medida que você executa os padrões. É possível executar a calibração das seguintes formas:

Calibração de Nível Único

- Calibre usando áreas de um arquivo padrão armazenado
- Calibre executando a amostra padrão
- Calibre executando a amostra padrão como parte de uma sequência de corridas

Calibração em Vários Níveis

- Calibre usando os arquivos padrão armazenados (um nível por vez ou reprocessamento de sequência)
- Calibre através de Bracket usando os arquivos padrão armazenados (reprocessamento de sequência usando calibração através de Bracket)
- Calibre executando os padrões de calibração como parte de uma sequência de aquisição

Nota: Os resultados da concentração de uma corrida desconhecida não poderão ser calculados até haver uma curva de calibração salva no método.

Executar Padrão de Calibração

Antes de executar um padrão de calibração, o método deverá conter os nomes de todos os picos que você pretende quantificar, seus tempos de retenção esperados para identificação e as quantidades que injetará na(s) amostra(s) padrão. Esses valores são inseridos em uma tabela semelhante a uma planilha denominada Tabela de Picos.

Como definir picos nomeados graficamente:

A forma mais eficiente e precisa de inserir esses dados no seu método é injetar a primeira amostra padrão e salvar o arquivo de dados em disco, depois usar o cromatograma armazenado para inserir graficamente a maioria dos dados necessários.

Nota: As etapas seguintes consideram que a velocidade de amostragem da aquisição e a porção de integração do método tenham sido otimizados para as amostras a serem adquiridas.

Se precisar adquirir a primeira amostra padrão, siga a etapa de aquisição abaixo. Se você já tiver adquirido um padrão de calibração e ele estiver salvo em disco, avance para a **Etapa 3**.

1. Selecione o comando **Controle > Corrida Única** no menu ou clique no botão **Corrida Única** na fita de comando. Uma caixa de diálogo será exibida. Preencha as informações listadas abaixo. Nesse ponto, deixe Valores de quantidade com os valores padrão.

ID da Amostra	Insira o ID da Amostra para a corrida. Ele pode conter texto e números, e é salvo com o arquivo de dados.
Método	Informe o nome do método a ser usado para aquisição e processamento de dados. Inclua todo o nome do arquivo se o método não estiver em seu diretório de método padrão. Você pode selecionar o método em uma lista de métodos disponíveis em disco clicando no botão Pasta de Arquivo adjacente ao campo.
Arquivo de Dados	Insira um nome do arquivo a ser usado para salvar os dados em disco. Não é possível sobrescrever um arquivo de dados existente. Para usar um nome do arquivo de dados existente, será preciso usar os utilitários do Windows para renomear o arquivo existente, ou movê-lo para outro local primeiro.
Caminho do resultado	Insira o caminho do local onde o arquivo de resultado/dados será armazenado. Se quiser, você pode selecionar um caminho clicando no botão Arquivo.
Nome do resultado	Especifique um nome para os arquivos de resultado.
Calibrar	Não selecione esta caixa de seleção agora, já que você ainda não preparou seu método para calibração!

2. Quando estiver pronto, clique em **Iniciar** para iniciar a aquisição de sua amostra.
3. Quando a corrida estiver concluída, o cromatograma com linhas de base desenhado deverá ser exibido na tela. (Se estiver iniciando com um arquivo de dados já adquirido, certifique-se de que o arquivo esteja aberto e tenha sido analisado.)
4. Se as linhas de base não forem exibidas, clique no botão **Analisar** para certificar-se de que o cromatograma foi analisado. Se a linha de base ainda não for exibida, clique com o botão direito do mouse na janela do cromatograma e selecione **Aparência...** Certifique-se de que a linha de base seja exibida em uma cor que fique visível na tela. Consulte Alterar a Aparência do Cromatograma. Você está agora pronto para definir os picos calibrados.

5. Há duas formas de definir os picos de calibração. Usando Definir Picos, você adiciona todos os picos de interesse à tabela de picos, depois insere nomes e as informações de níveis na tabela. Usando Definir Pico Único, você nomeia e define cada pico à medida que os adiciona à tabela de picos.

Definir Pico Único

O botão **Definir Pico Único** permite a criação de uma linha na tabela de picos de calibração para um único pico. É possível editar cada pico na Tabela de Picos.

Para adicionar um pico único à tabela de picos:

1. Abrir o arquivo de dados para exibir o cromatograma.
2. Clique com o botão direito do mouse no cromatograma e selecione **Programação Gráfica > Definir Pico Único** ou, na barra de ferramentas de integração, selecione o botão **Definir Pico Único** .
3. Selecione os picos que deseja definir.
4. Na caixa de diálogo **Definir Pico Único**, o tempo de retenção do primeiro pico detectado aparecerá. Se não quiser adicionar este pico à tabela de picos, clique no botão **Avançar**. Se quiser mover para um pico específico no cromatograma, clique nesse pico com o mouse. O tempo de retenção mostrado na caixa de diálogo mudará para refletir o pico selecionado. Preencha os campos a seguir:

Nome do Pico	Especifique o nome do composto neste campo.
Nível de Conc	O Nível de Concentração 1 é exibido. Informe a quantidade deste composto para o nível de concentração. Caso execute mais de um nível para o composto, informe o Nível de Concentração 2 e a quantidade desse nível. Continue informando os níveis de concentração até concluir o número desejado de níveis de calibração. Você pode também inserir ou editar as quantidades de nível de concentração relativas à Tabela de Picos do método.
Unidades	Informe as unidades a serem usadas para exibir os resultados.
Nº do ID de PI	Se estiver realizando calibração do padrão interno, informe o Nº do ID do pico padrão interno do composto. Este é o número de ID do pico da tabela de picos. Caso o desconheça, você poderá

adicioná-lo à tabela de picos posteriormente.

Nº do ID de Referência

Especifique um Nº de ID do pico de referência de tempo de retenção a ser usado para este pico. Este é o número de ID do pico da tabela de picos. Caso o desconheça, você poderá adicioná-lo à tabela de picos posteriormente. Os picos referência são usados para calcular os Tempos de Retenção Relativas.

Janela do Tempo de Retenção

Os valores da Janela do Tempo de Retenção definem uma janela ao redor do tempo esperado de retenção dos picos calibrados. Uma janela do tempo de retenção é importante por permitir que um pico seja levemente desviado (dentro da janela) e ainda seja identificado como um pico calibrado. Se nenhuma janela do tempo de retenção for definida, um pico calibrado deverá SEMPRE ocorrer exatamente no tempo esperado de retenção para que seja identificado como o componente calibrado. É possível selecionar uma Janela do Tempo de Retenção **Relativa**ou **Absoluto**.

Relativa

A janela do tempo de retenção Relativa é baseada na % do tempo esperado de retenção do componente. Por padrão, a Janela do Tempo de Retenção Relativa é definida como 2,5%, o que significa que a Janela do Tempo de Retenção para os picos calibrados será definida como 2,5% do seu tempo esperado de retenção. Configurar uma Janela do Tempo de Retenção Relativa significa que os picos a serem eluídos posteriormente no cromatograma terão janelas de tempo de retenção maiores do que os picos a serem eluídos antes no cromatograma. Use uma janela do tempo de retenção relativa se o seus picos tenderem a se deslocar posteriormente na corrida.

Absoluto

A janela do tempo de retenção Absoluto define uma janela de tempo de retenção igual para todos os picos calibrados. Insira um valor para a janela do tempo de retenção a ser usada para os picos. Uma janela do tempo de retenção absoluto não varia com o tempo de retenção do pico calibrado.

3. Clique em **Avançar** para ir para o próximo pico detectado. Clique em **Voltar** para ir para o pico anteriormente detectado no cromatograma. Se quiser ir diretamente para um pico específico, clique nesse pico no cromatograma. O pico atual e o total de picos no cromatograma são exibidos à direita da caixa de diálogo.
4. Quando terminar de adicionar picos à sua tabela de picos, clique em **Concluído**.
5. Preencha a tabela de picos para cada composto calibrado, conforme descrito em Sobre a Tabela de Picos.

Definir Picos

O botão **Definir Picos** permite criar uma linha na tabela de picos de calibração para cada pico detectado em um intervalo selecionado. Você pode editar cada pico na Tabela de Picos.

Para adicionar picos à tabela de picos:

1. Abrir o arquivo de dados para exibir o cromatograma.
2. Clique com o botão direito do mouse no cromatograma e selecione **Programação Gráfica > Definir Picos** ou, na barra de ferramentas de integração, selecione o botão **Definir Picos** .
3. Selecione os picos que deseja definir.
4. Na caixa de diálogo **Definir Picos**, insira os picos de sua calibração clicando uma vez à esquerda do primeiro pico de calibração no cromatograma e uma vez à direita do último pico de calibração no cromatograma. Uma caixa de diálogo será exibida, onde é possível configurar alguns dos parâmetros dos picos que serão adicionados à tabela de picos. Preencha os campos a seguir:

Definir picos em intervalo	Todos os picos detectados no intervalo entre a **Hora de Início** e a **Hora de Parada** mostradas serão adicionados à sua tabela de picos. Esse intervalo foi definido pelos cliques no cromatograma. É possível alterar esses horários manualmente nas caixas mostradas, se for de seu interesse.
Janela do tempo de retenção	Os valores da Janela do Tempo de Retenção definem uma janela ao redor do tempo esperado de retenção dos picos calibrados. Uma janela do tempo de retenção é importante por permitir que um pico seja levemente desviado (dentro da janela) e ainda seja identificado como um pico calibrado. Se nenhuma janela do tempo de retenção for definida, um pico

	calibrado deverá SEMPRE ocorrer exatamente no tempo esperado de retenção para que seja identificado como o componente calibrado. É possível selecionar uma Janela do Tempo de Retenção **Relativa**ou **Absoluto**. A janela do tempo de retenção **Relativa** é baseada na % do tempo esperado de retenção do componente. Por padrão, a Janela do Tempo de Retenção Relativa é definida como 2,5%, o que significa que a Janela do Tempo de Retenção para os picos calibrados será definida como 2,5% do seu tempo esperado de retenção. Configurar uma Janela do Tempo de Retenção Relativa significa que os picos a serem eluídos posteriormente no cromatograma terão janelas de tempo de retenção maiores do que os picos a serem eluídos antes no cromatograma. Use uma janela do tempo de retenção relativa se o seus picos tenderem a se deslocar posteriormente na corrida. A janela do tempo de retenção **Absoluto** define uma janela de tempo de retenção igual para todos os picos calibrados. Insira um valor para a janela do tempo de retenção a ser usada para os picos. Uma janela do tempo de retenção absoluto não varia com o tempo de retenção do pico calibrado.
Unidades	Informe as unidades a serem usadas para rotular os resultados de concentração usando os picos calibrados.
Quantificar Picos Ativado	Selecione **Área** ou **Altura** para a base de cálculo dos fatores de resposta. Nota: se estiver fazendo as quantificações de Pico e Grupo com o uso de padrões internos, tanto os Picos quanto os Grupos deverão usar o mesmo tipo de medição de quantificação (área ou altura).
Área Mínima de Pico	Se você inserir uma área mínima de pico, qualquer pico encontrado no intervalo de pico definido cujas áreas fiquem abaixo desse limite não será considerado pico de calibração e não será inserido na Tabela de Picos de Calibração.
Adicionar todos os	Selecione este botão para adicionar os picos do intervalo de

picos à tabela	pico atual definido aos picos existentes em sua tabela calibração.
Substituir picos existentes na tabela	Selecione este botão se quiser substituir todos os picos existentes na tabela de picos de calibração atual pelos picos do intervalo de pico definido.

3. Clique em **OK** para aceitar suas seleções.
4. Uma exibição de planilha da **Tabela de Picos** aparecerá com o tempo de retenção de cada pico no intervalo de pico selecionados exibido. Preencha a tabela de picos para cada composto calibrado, conforme descrito em Sobre a Tabela de Picos.

Sobre a Tabela de Picos

Todas as informações necessárias para calcular as concentrações de picos desconhecidos usando uma calibração estão contidas na Tabela de Picos. Cada linha dessa tabela de picos representa um dos componentes calibrados. Ao inserir graficamente os picos na tabela, (consulte Criar Calibrações Graficamente), será preciso preenchê-la com as informações necessárias para identificar e calcular corretamente as concentrações desconhecidas de cada pico. Pode não ser preciso usar todas as colunas da planilha. Insira as informações apenas nas colunas que serão necessárias para o cálculo das quantidades de cada pico de interesse.

Nota: Quando se familiarizar com as colunas de parâmetros da tabela de picos, você poderá personalizar a aparência da tabela para exibir apenas as colunas de seu interesse clicando com o botão direito do mouse na tabela e selecionando "Propriedades". Consulte Alterar as Propriedades da Tabela de Picos.

Para abrir as tabelas de Pico/Grupo:

1. Há três maneiras de abrir as tabelas de Pico/Grupo.

- No painel de navegação, selecione **Método > Picos/Grupos**
- No menu, selecione **Método > Picos/Grupos**
- Na barra de ferramentas, selecione o botão **Picos/Grupos** .

2. Na caixa de diálogo **Tabelas de Pico/Grupo**, selecione a guia **Pico Nomeado**.

3. As seguintes colunas na Tabela de Picos são usadas para calcular os resultados dos picos calibrados.

#	Número da linha
Nome	Digite o nome do componente correspondente ao tempo de retenção exibido.
ID	Número de identificação do pico. O sistema de dados irá automaticamente atribuir um Nº de ID a cada pico, começando com "1". Esse Nº de ID é usado para designar o pico de referência e o número do pico padrão interno. Caso esteja adicionando picos a uma tabela de picos existente, você poderá renumerar a nova tabela de picos automaticamente clicando com o botão direito do mouse na tabela e escolhendo a opção **Renumerar Nº de ID do Pico**. Nota: caso renumere o nº de ID do Pico, certifique-se de que qualquer programa de parâmetro personalizado ou outros programas do usuário que possam usar o Nº de ID do Pico sejam atualizados para refletir os novos Nºs de ID do Pico.
Tempo de Ret.	O tempo esperado de retenção do pico calibrado. Caso tenham sido usados eventos gráficos para inserir os picos na tabela de picos, os Tempos de Retenção serão automaticamente preenchidos no uso dos tempos de retenção dos picos detectados no arquivo padrão usado para criar a tabela.
Janela	A janela do tempo de retenção de componentes calibrados usada para a identificação os picos calibrados. A largura da janela é indicada e está centralizada no valor do tempo de retenção. Se o tempo de retenção de um pico (ajustado para deslocamento de pico de referência) ficar fora dessa janela, o pico não será considerado como sendo calibrado. Se mais de um pico ficar na janela, o que estiver mais próximo ao centro da janela será identificado como o componente calibrado. Você pode alterar o tamanho da janela inserindo um novo valor.
Nº do ID de Resolução	Insira um nº de ID do pico a ser usado para o cálculo da resolução, se desejado. Se esta opção for deixada em branco, a resolução será

calculada para o pico de interesse baseado no pico detectado anterior a ele. Se o pico inserido aqui não for detectado, ou se um pico se referir a ele mesmo para o Nº de ID de Resolução, a resolução não será calculada.

Nº do ID de Referência

Nº de ID do pico a ser usado como referência para este componente. Um pico de referência é usado para ajustar o tempo esperado de retenção de um componente calibrado a fim de compensar as alterações no cromatógrafo, como velocidade de escoamento. Se mais de um pico ficar na janela de pico de referência, o maior pico presente na janela será usado como o de referência. Cada pico pode ter seu próprio pico de referência.

O pico de referência ideal é aquele que está sempre presente na amostra e está bem-resolvido em relação a outros picos do cromatograma. (Padrões internos geram excelentes picos referência.)

Se um pico nomeado for atribuído um pico de referência, seu tempo esperado de retenção será calculado conforme segue:

TR Esperado = (TR de Pico de Ref. Real/TR de Pico de Ref. Esperado) * TR de Pico

Nº do ID de PI

Nº de ID do pico a ser usado como padrão interno para este componente, caso seja usado um método do padrão interno.

NOTA: Caso esteja realizando uma calibração do Padrão Interno, você deverá inserir um Nº de ID de PI para cada componente calibrado. Se o pico estiver em um padrão interno, insira seu próprio Nº de ID na coluna Nº de ID do ISTD. Caso esteja realizando uma calibração Padrão Externa, você deverá inserir "0" na coluna Nº de ID do ISTD para todos os componentes. Você pode designar mais de um padrão interno.

Unidades

Informe as unidades de concentração a serem usadas para exibir os resultados, como mg/ml ou vol%.

Atualizar TR

Selecione a maneira como deseja atualizar os tempos de retenção esperados em sua Tabela de Picos. A seleção inclui Nenhum, depois de cada análise (Corrida), depois de corridas de calibração apenas (Calibração) ou depois de cada corrida e calibração (Corrida e

	Calibração).
LOD	Esse parâmetro é usado para calcular e relatar o valor ASTM LOD (Limite de Detecção) usado para determinar se o pico está entre os Limites de Detecção, como anteriormente determinado para o método. O valor inserido aqui é a proporção S/N (proporção sinal-ruído) a ser usada para o cálculo desse pico. Esse cálculo é válido somente para métodos ESTD ou ISTD.
LOQ	Esse parâmetro é usado para calcular e relatar o valor ASTM LOQ (Limite de Quantificação) usado para determinar se o pico está entre o Limites de Quantificação, como anteriormente determinado para o método. O valor inserido aqui é a proporção S/N (proporção sinal-ruído) a ser usada para o cálculo desse pico. Esse cálculo é válido somente para métodos ESTD ou ISTD.
Quantificar	Defina se a calibração e a quantificação devem se basear na altura pico ou na área de pico. Nota: se estiver fazendo as quantificações de Pico e Grupo com o uso de padrões internos, tanto os Picos quanto os Grupos deverão usar o mesmo tipo de medição de quantificação (área ou altura).
Tipo de Ajuste	Esta opção determina como a curva de calibração será ajustada para os dados. Nota: Você tem cinco opções de como as curvas de calibração serão desenhadas: ajustes ponto a ponto, linear, quadrático, cúbico e FR Médio. É preciso ter pelo menos dois níveis de calibração para um ajuste linear (não incluindo zero), três níveis para um ajuste quadrático e quatro níveis para um ajuste cúbico.
Forçar Zero	Quando esta caixa estiver selecionada, a curva de calibração será forçada através de zero.
Indicador de Calib	A seleção **Substituir / Peso Médio** permite determinar como as áreas/alturas de calibração de cada pico do seu método serão afetadas pela execução de um padrão: ou elas serão substituídas, ou sua média será tirada em relação às áreas de replicação atual presentes no método de calibração. Se Peso da Calib for definido com um valor

diferente de 100, uma média ponderada das áreas/alturas será calculada. Para detalhes sobre o cálculo da média de calibração, consulte Sobre Replicações e Média de Calibração.

Toda vez que uma média de calibração for tirada, o valor será salvo no método como "Última Área", que será subsequentemente usado para o cálculo das médias ponderadas.

Peso da Calib

Você pode designar um "peso" para a média das replicações. O fator de ponderação é aplicado às injeções de replicação, como mostra o exemplo a seguir.

Valor de corrida atual (área/altura) 101

Replicação 1 104

Replicação 2 100

Replicação 3 102

Último Valor de Área Atual = 102

Usando um fator de ponderação de 60, a média do novo método será:

[((104 + 100 + 102) / 3) * .6] + [101 * .4] = 101.6

Nota: Para calibrações de Padrão Interno, cada Replicação representa uma proporção da área/altura de componentes para a área/altura do padrão interno.

% da Margem de Calib

Esta seleção cria uma margem de aceitação baseada na diferença de % entre a área ou a altura de pico encontrada durante a calibração e a área ou a altura de pico atual no método. Se a diferença de % entre esses valores exceder esse limite, a calibração para esse pico não será atualizada.

Escala

Esse parâmetro permite aplicar um fator de escala à curva de calibração. Esse fator é aplicado às quantidades inseridas ou aos valores de resposta antes do cálculo da curva de calibração. A finalidade de usar um fator de escala é criar um relacionamento entre as áreas (ou as alturas) e as quantidades ou as respostas que podem ser aproximadas por um ajuste polinomial. É possível aplicar um fator de escala a qualquer tipo de ajuste. As operações de escalas

disponíveis são:

Nenhum

1/Valor

$1/Valor^2$

ln[Valor]

1/ln[Valor]

sqrt[Concentração]

$Valor^2$

1/Resposta

$1/Resposta^2$

ln[Resposta]

1/ln[Resposta]

sqrt[Resposta]

$Resposta^2$

Log (Concentração)

1/ log (Valor)

log (Resposta)

1/ log (Resposta)

ln (Quantidade)&ln(Resposta)

log(Quantidade)&log(Resposta)

Método de Ponderação

Selecione um Método de Ponderação LSQ a ser usado para o cálculo de ajustes de regressão por mínimos quadrados, seja 1/Resposta, $1/Resposta^2$, 1/Valor, $1/Valor^2$ ou nenhum. A ponderação dá mais importância a áreas e concentrações menores no cálculo da regressão.

Nível

Digite a concentração exata de cada composto (corrigida para pureza) no seu primeiro padrão de calibração na coluna "Nível 1". Caso esteja sendo realizada uma calibração de nível único, não será preciso

preencher nenhuma outra coluna "Nível". Caso esteja realizando uma calibração em vários níveis (por exemplo, há mais de uma mistura padrão de calibração), será preciso repetir esse processo para cada nível de concentração padrão que você planeja injetar.

Por exemplo, considere que exista uma calibração em vários níveis, em que o componente A está presente na mistura padrão 1 a 10 ppm, na mistura padrão 2 a 20 ppm e na mistura padrão 3 a 30 ppm. É possível inserir 10 na coluna **Nível 1**, 20 na coluna **Nível 2** e 30 na coluna **Nível 3**.

Nota: Vez ou outra, pode surgir uma situação em que um ou mais componentes nomeados podem não estar presentes na mistura de nível de calibração. Para evitar a apresentação de erro em sua curva de calibração, é possível fazer com que a área de componentes seja ignorada nesse nível, deixando o "Nível" de interesse desse componente em branco. (Clique na célula e pressione a tecla Delete.)

Nº do ID Padrão

Caso deseje calcular a concentração de um pico para o qual não há nenhuma amostra padrão, você poderá definir uma curva de calibração de um pico diferente para ser usada. Usando Mult STD (veja abaixo), é possível multiplicar o resultado para se chegar a um número proporcional.

Mult STD

Caso seja atribuído outro pico a ser usado para calcular concentração, insira aqui um multiplicador a ser usado. A equação usada para calcular a concentração do pico de interesse se torna

$$Conc_i = f(Area_i) x \frac{Mult_s}{Mult_i}$$

Onde:

f = equação da curva de calibração do pico padrão de acordo com o tipo de ajuste selecionado (linear, quadrático, ponto a ponto, etc.)

$Conc_I$ = concentração do pico de interesse

$Área_i$ = área do pico de interesse

$Mult_S$ = Mult. Pd do pico padrão designado

$Mult_I$ = Mult Pd do pico de interesse

FR Manual

Caso deseje atribuir um fator de resposta a ser usado para um pico em vez do fator de resposta calculado a partir dos dados padrão, insira esse valor aqui. Se um fator de resposta manual estiver presente nesse campo, ele será usado no lugar da curva de calibração para calcular quantidades para esse pico.

Conc Baixa

É possível inserir um limite de concentração inferior nessa coluna. Depois de cada análise, o sistema de dados pode comparar a concentração calculada do pico com esse valor. Se o valor ficar abaixo do valor do limite inferior, uma ação de sequência pós-corrida deverá ser selecionada para que uma mensagem seja lançada no registro de Atividades do Instrumento. Nota: Caso seja inserido um valor igual a "zero", essa função será desabilitada.

Conc Alta

É possível inserir um limite de concentração superior nessa coluna. Depois de cada análise, o sistema de dados pode comparar a concentração calculada do pico com esse valor. Se o valor de concentração ficar acima do valor do limite superior, uma ação de sequência pós-corrida deverá ser selecionada para que uma mensagem seja lançada no registro de Atividades do Instrumento.

Parâmetros de Relatórios de CQ

Os seguintes parâmetros na Tabela de Picos são usados para calcular os Relatórios de CQ.

Verificar Conc Padrão 1...5

Insira a concentração do componente presente no Padrão de Verificação designado. (Até 5 padrões de verificação podem ser definidos.) Caso seja inserido um valor igual a "zero", a verificação será desabilitada. Nota: Caso seja inserido um valor igual a "0", a verificação será desabilitada.

Verificar %RD Padrão 1...5

Caso esteja sendo gerado um Relatório Padrão de Verificação, insira aqui o valor a ser usado para o limite de diferença relativa de porcentagem. Quando a corrida é criada, a concentração calculada do pico será comparada com a concentração de padrão de verificação especificada na tabela de picos (Verificar Conc Padrão). Se a diferença

	for menor do que Verificar %RD Padrão, o componente será aprovado. Se a diferença for maior que Verificar %RD Padrão, o componente não será aprovado, e uma "ação de falha" para essa linha da sequência será tomada. Até 5 padrões de verificação podem ser definidos. Nota: Caso seja inserido um valor igual a "0", a verificação será desabilitada.
Valor de Spike 1	Para o Relatório de Recuperação de Spikes, insira as concentrações dos primeiros componentes usados para marcar a primeira amostra marcada.
Valor de Spike 2	Para o Relatório de Recuperação de Spikes, insira as concentrações dos segundos componentes usados para marcar a segunda amostra marcada (caso esteja marcando a amostra duas vezes).
Limite Inferior de Marca	Insira o limite inferior (em %) para recuperação de spikes. A recuperação de spikes calculada será comparada com esse valor. Se ficar abaixo do limite inferior de marca, ocorrerá uma falha. Nota: Caso seja inserido um valor igual a "0", a verificação será desabilitada.
Limite Superior de Marca	Insira o limite alto (em %) para recuperação de spikes. A recuperação de spikes calculada será comparada com esse valor. Se ficar acima do limite superior de marca, ocorrerá uma falha.
Limite de RD % duplicada	Informe o valor a ser usado para diferença relativa percentual de relatórios duplicados. Se essa diferença ficar acima desse valor, a amostra "falhará". Nota: Caso seja inserido um valor igual a "0", a verificação será desabilitada.
Limite de RSD% de FR	Insira o desvio padrão relativo da % dos fatores de resposta da calibração. Quando um "Início da Calibração" e um "Fim da Calibração" forem especificados na tabela de sequências, esse valor será usado para determinar se a calibração é "aprovada" ou "reprovada". Nota: Caso seja inserido um valor igual a "0", a verificação será desabilitada.
Parâmetros de PDA	As seguintes colunas serão exibidas se você tiver um detector de PDA configurado.

Detecção	Selecione a base para a identificação do pico. Se Tempo de Retenção for escolhido, apenas o tempo de retenção será usado para identificação do pico. Se você escolher Tempo de Ret com Confirmação Espectral, a semelhança do espectro do pico com a de um espectro de referência designado será usada junto com o tempo de retenção como a base da identificação do pico.
Espectro	Se quiser que a semelhança seja usada como base para a identificação do pico, clique na seta à direita desse campo para especificar o espectro de referência armazenado a ser usado para comparação. Durante a identificação, esse espectro de referência será comparado com o espectro de ápice do pico, e um índice de semelhança será calculado. Um pico será considerado identificado se esse índice de semelhança calculado estiver pelo menos no valor especificado na coluna Semelhança da tabela de picos. Se a semelhança não for especificada como a base para a identificação do pico, este campo será ignorado.
Semelhança	Se a semelhança não for especificada como a base para a identificação do pico, este campo especificará o índice de semelhança mínimo para que um pico seja considerado identificado. Durante a identificação, o espectro de referência (veja a seção anterior) será comparado com o espectro de ápice do pico, e um índice de semelhança será calculado. Um pico será considerado identificado se esse índice de semelhança calculado estiver pelo menos no valor deste campo. Se a semelhança não for especificada como a base para a identificação do pico, este campo será ignorado.
Canal de Análise	Especifica qual canal de comprimento de onda da Matriz do Diodo deve ser usado para análise do pico. As opções serão as especificadas em Configuração do Instrumento/DAD.

Alterar as Propriedades da Tabela de Picos

Se não estiver usando um ou mais dos parâmetros apresentados na Tabela de Picos, você poderá removê-los da visualização. As seleções inseridas são salvas por instrumento/por usuário. Isso

permite que cada usuário defina seus próprios parâmetros de tabela de picos para cada instrumento.

Para alterar as colunas exibidas na tabela de picos:

1. Na tabela de picos, clique com o botão direito do mouse e selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **Propriedades**, selecione as colunas que aparecerão na tabela de picos. As colunas com uma marca de seleção serão exibidas na planilha Tabela de Picos. As que não tiverem uma marca de seleção não serão exibidas.
3. A "âncora" azul indica qual coluna será usada para ancorar o rolamento horizontal da planilha. Quando essa âncora é definida, as colunas à direita da âncora rolam para a direita e para a esquerda. As colunas à esquerda da âncora não rolam. Para alterar a âncora, clique no nome da coluna que você deseja usar como âncora e, em seguida, clique no botão **Definir Âncora**. A âncora azul será movida para a coluna âncora designada.

Nota: Ao usar a âncora, é melhor remover todas as colunas desnecessárias da planilha e deixá-la com a maior largura possível antes de definir a âncora. Se a âncora for definida em uma coluna que normalmente não é mostrada, você não conseguirá rolar a planilha.

Calibração de Nível Único Usando um Arquivo de Dados Armazenados

Se já tiver seu padrão de calibração salvo em disco, você poderá calibrar o método usando as áreas deste arquivo. Isso não inicia a aquisição de dados. Ela atualiza o método especificado usando áreas do arquivo de dados armazenados especificado.

1. No menu **Análise**, clique em **Calibração de Análise para um Único Nível**.
2. Preencha os campos listados abaixo.
3. Quando a caixa de diálogo estiver concluída, clique em **Iniciar**. O arquivo de dados armazenados será aberto, e as áreas dos picos calibrados serão usadas para atualizar o método especificado.

ID da Amostra	O ID da amostra do arquivo de dados selecionado é exibido aqui.
Método	Especifique o nome do método a ser calibrado. Inclua todo o nome do arquivo se o método não estiver em seu diretório de método padrão. Você pode selecionar o método em uma lista de métodos

	disponíveis no disco clicando no botão Arquivo adjacente ao campo.
Arquivo de Dados	Especifique o nome do arquivo a ser usado para calibrar o método. Você pode selecionar um arquivo de dados clicando no botão Arquivo adjacente ao campo.
Caminho do resultado	Insira o nome do caminho onde o arquivo de resultado está localizado. Você pode selecionar o nome do caminho em uma lista clicando no botão Arquivo.
Nome do resultado	Insira o nome do resultado.
Salvar como PDF	Quando essa caixa estiver marcada, os relatórios de método serão salvos como PDF.
Imprimir Separata	Quando essa caixa estiver marcada, os relatórios de método serão impressos.
Valores de quantidade	Nesta seção, você pode inserir valores que afetam o modo como as concentrações são calculadas. Caso esteja sendo feita uma aquisição única de dados antes de calibrar o seu método, simplesmente deixe esses valores no nível padrão.
Quantidade da Amostra	O valor de Quantidade da Amostra é usado como um divisor durante o cálculo das concentrações. Seu objetivo é compensar as diferenças entre as amostras devido à ponderação e quando estão sendo calculadas as porcentagens da amostra total em vez da concentração detectada em uma injeção.
Valor do Padrão Interno	Para corridas de calibração, o Valor do Padrão Interno é obtido da Tabela de Picos do método. Para corridas desconhecidas, insira o valor do padrão interno em sua amostra desconhecida.
Fatores de multiplicação	Insira até 3 fatores de multiplicação a serem usados para esta análise/calibração. Todos os picos quantificados serão multiplicados por esses fatores.
Fatores de diluição	Insira até 3 fatores de diluição a serem usados para esta

	análise/calibração. Todos os picos quantificados serão divididos por esses fatores.
Calibrar	Selecione esta caixa para ativar a calibração. Quando esta caixa for selecionada, os seguintes campos e opções estarão disponíveis.
Nível de Calibração	Insira o número do nível de calibração representado pelo padrão de calibração armazenado. Se esta for uma calibração de nível único, insira **1**.
Limpar toda calibração	Marque esta caixa se quiser limpar todos os fatores de calibração existentes do seu método antes de executar a calibração.
Limpar calibração no nível	Marque esta caixa se quiser limpar os fatores de resposta existentes deste nível apenas antes de executar a calibração.
Imprimir relatório de calibração	Marque esta caixa se quiser imprimir um relatório de calibração depois de executar a calibração.
Limpar replicações	Marque esta caixa se quiser limpar as replicações existentes deste nível antes de executar a calibração.
Média das replicatas	Clique nesta caixa se quiser tirar a média das replicatas deste nível de calibração.

Renumerar IDs de Pico

Os números do ID de Pico são atribuídos a picos calibrados na ordem em que são adicionados. Se adicionar picos à tabela de picos, renumere a ID do Pico para que os números da ID estejam na ordem dos tempos de retenção do pico.

Para renumerar as IDs do pico, na tabela de picos, clique com o botão direito e selecione **Renumerar IDs do Pico**. Os números do ID de Pico na tabela de picos serão renumerados (incluindo os números dos Picos de Ref e ISTD para refletir as alterações).

Nota: Renumerar IDs de Pico pode exigir que os itens identificados pelo Nº do ID de Pico em parâmetros personalizados ou relatórios personalizados sejam redefinidos com o uso de novos números de IDs de pico.

Examinar Curvas de Calibração

Depois de ter concluído a execução de todos os padrões de calibração do seu método, você poderá rever a curva de calibração e os dados associados clicando no botão **Examinar Calibração** . Uma janela será exibida com as informações de calibração do seu método atual.

Em Examinar Calibração, é possível

- Observar a curva de calibração para cada pico calibrado.
- Alterar e sobrepor os tipos de ajuste da curva de calibração.
- Rever as equações dos tipos de ajuste da curva e o valor R-quadrado (melhor ajuste) para cada uma.
- Remover os pontos temporariamente da curva de calibração.
- Exibir fatores de resposta, áreas de replicação e valores de desvio padrão.
- Usa a calculadora de concentração para calcular as quantidades de áreas inseridas manualmente.

Exibição da Curva de Calibração

Os picos calibrados estão listados na **Lista de Picos**. Para exibir as informações de calibração de um determinado pico calibrado, clique no nome do pico na Lista de Picos. Ele será realçado; a planilha e a curva de calibração serão atualizadas para incluir as informações de calibração atual desse pico.

A curva de calibração do pico selecionado é exibida no canto inferior esquerdo da janela.

A caixa no canto inferior direito da janela exibe parâmetros e dados de cálculo para a curva de calibração exibida. Isso inclui Fator de Resposta Médio, o Desvio Padrão do Fator de Resposta, a DPR % do Fator de Resposta, o fator de Escala, o fator de Ponderação LSQ, Forçar Liga ou Desliga Através de Zero, modo de Replicação e cálculos para cada tipo de ajuste exibido, junto com r^2 para o ajuste.

Remover os pontos temporariamente da curva de calibração

Se quiser ver o efeito de remover um dos pontos de sua curva de calibração, você poderá removê-lo temporariamente do cálculo clicando no ponto uma vez com o mouse. O ponto ficará vermelho, o que indica que ele não é usado atualmente para o cálculo da curva de calibração. As células da

planilha representadas pelo ponto também ficarão vermelhas. Para retornar o ponto ao cálculo da curva, clique no ponto novamente. Os pontos podem também ser desabilitados da planilha clicando-se na célula da planilha e pressionando a tecla **Delete**. Para restaurar o ponto, pressione a tecla **Delete** novamente.

Uso do botão direito do mouse

Clique com o botão direito do mouse para visualizar menus de acesso rápido. Ao clicar com o botão direito do mouse na região da curva de calibração da janela, um menu será exibido, no qual será possível alterar as características da curva de calibração exibida.

Exibir Tipo de Ajuste	Selecione um novo tipo de ajuste a ser exibido no gráfico de avaliação da calibração de pico. O ajuste é sobreposto pela curva de calibração atual. Você pode também selecionar **Exibir todos os ajustes** ou **Limpar todos os ajustes** desse menu.
Alterar Tipo de Ajuste	Selecione um novo tipo de ajuste a ser aplicado à curva de calibração. Quando altera-se o tipo de ajuste, a alteração será também inserida na sua tabela de picos relativa a esse pico.
Escalas	Selecione um novo fator de escala para as curvas de calibração. Essas escalas serão aplicadas a todos os ajustes de calibração exibidos e à tabela de picos relativa a esse pico.
Ponderação LSQ	Selecione pelo menos um fator de ponderação quadrado a ser aplicado à curva de calibração. (Aplica-se somente a ajustes lineares, cúbicos e quadráticos.) A Ponderação LSQ selecionada será inserida na sua tabela de picos relativa a esse pico.
Forçar Através de Zero	Selecione esta opção para forçar a(s) curva(s) de calibração através da origem. Essa alteração mudará automaticamente a tabela de picos relativa a esse pico.
Modo de Exibição	Selecione **Picos** ou **Grupos** para exibição.
Modo de Exibição de Replicação	Esta opção seleciona o modo como os dados de replicação devem ser exibidos na planilha de dados de calibração. Selecione **Área / Altura** para exibir as áreas ou alturas de replicação. Selecione **Fator de Resposta** para exibir os fatores

	de resposta de replicação.
Definição do Fator de Resposta	Selecione o modo como os fatores de resposta devem ser calculados e exibidos - **Área/Valor** ou **Valor/Área**. A seleção de **Área/Valor** ou **Valor/Área** do seu método está localizada na caixa de diálogo **Método>Propriedades>Calibração**.
Imprimir Pico Atual/Grupo	Selecione esta opção para imprimir as informações de pico ou grupo selecionadas atualmente.
Imprimir Todos os Picos/Grupos	wSelecione esta opção para imprimir todas as informações de pico ou grupo.
Unzoom Total	Restaura a exibição em 100% da curva de calibração.
Calculadora de Concentração	A Calculadora de Concentração permite calcular as quantidades baseado em áreas ou alturas inseridas. Consulte Calculadora de Concentração.

Exibição dos Dados de Calibração

Quando um pico for selecionado na lista de picos, os dados de calibração desse pico serão exibidos na planilha no topo da janela. Cada linha da planilha representa um nível de calibração desse composto.

Nível	Um nível de calibração corresponde a um ponto (ou pontos, se forem usadas replicações) na curva de calibração e representa o relacionamento da(s) área(s) de pico com o valor calibrado. O número de níveis de calibração pode ser diferente para cada componente. O software EZChrom pode manipular um número ilimitado de níveis de concentração por componente. Para cada Nível, os seguintes campos são exibidos.
Concentração/Proporção de Concentração	Este é o componente Concentração (padrão externo) ou Proporção de Concentração (padrão interno) representado por esse nível.

Área (ou Altura)/Proporção de Área (Proporção da Altura)	Esta é a área ou altura de pico (para padrão externo) ou Proporção de Área/Altura (para padrão interno) do nível designado.
FR	Este é o fator de resposta do pico no nível designado.
Última Área (proporção)/Altura (proporção)	Se nenhuma injeção de replicação for feita, está será a última área ou altura (ou proporção de área/altura) do pico no nível designado. Se injeções de replicação tiverem sido feitas, essa será a média anterior das replicações, que será usada para fins de ponderação.
Residual	Um residual é a diferença entre a concentração inserida pelo usuário e a concentração lida na curva de calibração calculada.
Rep StDev	Este é o desvio padrão das replicações
Rep DPR%	Este é o desvio padrão relativo em % das replicações.
Rep 1…x Área (proporção)/Altura (proporção)	Cada nível pode ter várias **replicações** (injeções duplicadas de um único nível padrão). Rep 1 é a primeira corrida de replicação de calibração, Rep 2 é a segunda replicação, etc. Quando os padrões de replicação são usados e Peso da Calib é definido como 100, o fator de resposta será baseado na média verdadeira de todas as replicações no nível de calibração. Para que as replicações sejam usadas, é preciso selecionar a opção **Peso Médio** na coluna Indicador de Calib da Tabela de Picos. Caso contrário, cada injeção em um determinado nível substituirá as áreas/alturas da calibração atual.
Rep 1…x Usuário	Este é o usuário registrado no momento em que a calibração foi realizada pela última vez com o uso desta replicação.
Rep 1…x Arquivo de	Este é o arquivo de dados em que os dados de replicação são

Dados	armazenados.
Rep 1...x ID da Amostra	Este é o ID da Amostra de replicação.
Rep 1...x Hora Hora	Estas são data e hora de realização da última calibração com o uso desta replicação.

Calculadora de Concentração

A Calculadora de Concentração permite calcular as quantidades baseado em áreas ou alturas inseridas. Para usar a calculadora de concentração, é necessário ter um método calibrado aberto.

Para abrir a Calculadora de Concentração:

1. Na Janela do Instrumento, clique no botão **Examinar Calibração do Pico** .
2. Clique com o botão direito do mouse na janela da curva de calibração e depois clique em **Calculadora de Concentração**.
3. Preencha os seguintes campos:

- **Tipo de Ajuste** - Selecione um tipo de ajuste a ser usado para calcular a área ou a concentração.
- **Escala** - Se quiser, selecione um fator de escala a ser usado para o cálculo.
- **Ponderação LSQ** - Selecione pelo menos um fator de ponderação quadrado a ser usado, se desejado.
- **Forçar Através de Zero** - Selecione esta opção se quiser forçar a curva através da origem para o cálculo.
- **Área** - Se quiser calcular uma **Concentração**, insira uma área que representa o pico a ser calculado e depois clique no botão **Calcular**.

Cálculo da Média de Calibração

As seleções a seguir indicam como o Cálculo da média de calibração deve ser tratado para o método.

Para ativar a calibração automática pela média, selecione **Método > Propriedades > Calibração.** Verificar**Medir automaticamente replicações consecutivas do mesmo nível**

Para desativar, desmarque a caixa.
Consulte Média das Replicatas Automática.

Para designar um tipo de corrida de calibração, selecione **Controle > Corrida única**. Verificar **Média das Replicatas**. Para desativar, desmarque a caixa.
Consulte Cálculo da Média de Calibração como Parte de Sequência ou Corrida Única

Para medir as áreas do pico calibrado, na Tabela de Picos, defina o Indicador de calib para o pico na **Peso Médio**. Se não quiser que seja tirada a média das áreas de um pico, defina o Indicador de Calib desse pico como **Substituir.**
Consulte Sobre Calibrações de Replicação e de Média

Média das Replicatas Automática

O recurso de calibração automática pela média é uma forma rápida de tirar a média das replicações de calibração agrupadas, e é o meio mais comum de uso do recurso de média.

Para configurar o seu método para que todas as calibrações fiquem dentro da média:

1. No menu **Método**, clique em **Propriedades** e clique na guia **Calibração**. Aqui, é possível selecionar a opção de tirar a média automaticamente depois de cada calibração. Para ativar o recurso de média, certifique-se de que existe uma marca de seleção próxima ao prompt "**Média das Replicatas Automática**". Essa é a seleção padrão (recomendada). O recurso de média padrão está explicado abaixo. Consulte Propriedades do Método para Calibração.

Quando o recurso de cálculo automático de média das replicatas for selecionado, a média de todas as replicatas de um determinado nível será tirada até as replicatas serem removidas. Se uma calibração da sequência (ou calibração de reprocessamento da seqüência) for executada, o cálculo automático de média de todas as replicatas de um determinado nível ocorrerá automaticamente no final de uma série de replicas de calibração desse nível. A média de área/altura nesse ponto será salva no método como "Última Área". Quando um novo nível for encontrado, as replicações do nível anterior serão removidas automaticamente do método.

Nota: A média é tirada apenas para picos em que Indicador de Calib foi definido como Peso Médio.

Se desativar o recurso de cálculo automático de média, lembre-se de que para os picos cujo Indicador de Calib foi definido como Peso Médio, nenhum resultado será calculado até você forçar a tiragem da média definindo Tipo de Corrida como "Média das Replicatas" em uma corrida única ou em uma corrida da sequência.

Calibração de Média Móvel

Se tiver inserido um número para replicações em média livre na caixa de diálogo **Método > Propriedades do Método > Calibração**, uma média livre será calculada para replicações, conforme descrito abaixo. Consulte Propriedades do Método para Calibração.

A média de replicação livre é feita como no exemplo a seguir.

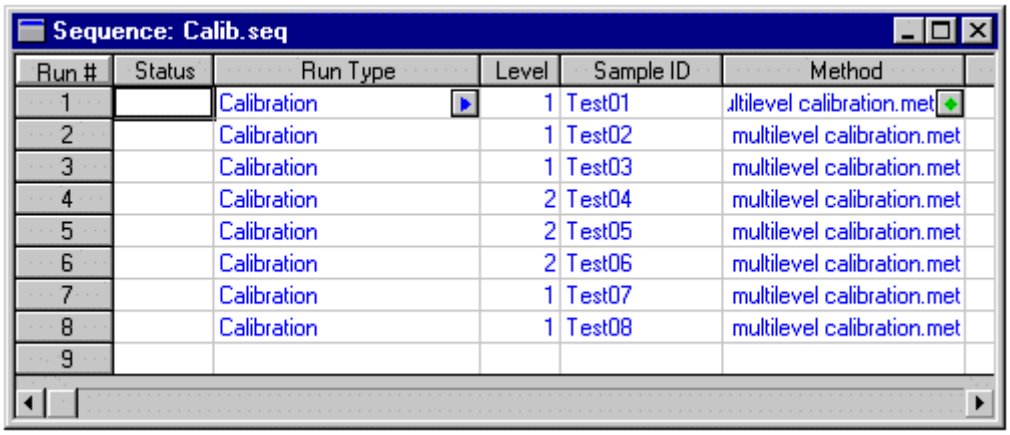
Para uma sequência de aquisição, em que S = Padrão e U = Desconhecido, e o número de replicações em média livre = 4,

S1, U1, S2, U2, S3, U3, S4, U4, S5, U5, S6, U6, S7, U7

Na sequência de aquisição acima, U1 seria quantificado usando S1, U2 seria quantificado usando a média de S1 e S2, U3 seria quantificado usando a média de S1, S2 e S3, U4 seria quantificado usando a média de S1, S2, S3 e S4, e U5 seria quantificado com a média de S2, S3, S4 e S5. Nesse exemplo, a cada 4 replicações de calibração "rolarão" a média adiante.

O exemplo seguinte mostra como as replicações são tratadas durante uma sequência de calibração usando o recurso de cálculo automático de média:

1. Conforme cada corrida é analisada, a área de cada pico nomeado é salva no método como a área atual. No fim da Corrida 3, uma média verdadeira será calculada a partir das replicações para as Corridas 1 a 3 do Nível 1. Esse valor é a área/altura de calibração desse nível.
2. Na Corrida 4, a calibração do Nível 2 começa. As replicações do Nível 2 serão salvas para as corridas 4, 5 e 6.
3. No fim da Corrida 6, será tirada a média das replicações do Nível 2, que serão usadas para calcular o ponto de calibração do Nível 2. Essa área/altura é salva como "Última Área" para o Nível 2.
4. No começo da Corrida 7, as replicações existentes para o Nível 1 serão apagadas, e novas replicações do Nível 1 serão salvas para a Corrida 7 e a Corrida 8.
5. No fim da Corrida 8, a área/altura de calibração existente se tornará a "Última Área", a média verdadeira das Corridas 7 e 8 será calculada, e uma média ponderada será calculada com o uso desse valor e de "Última Área" (veja o cálculo na seção Peso da Calib). Observe que, se o Peso da Calib está definido como 100, o Último Valor de Área não é levado em conta.



Cálculo da Média de Calibração como Parte de Sequência ou Corrida Única

Corrida Única

Esteja ou não executando a Calibração Automática pela Média, é possível designar a média no início de uma corrida única ou como parte do **Tipo de Corrida** de uma entrada de sequência.

Para designar um tipo de corrida de calibração, selecione **Controle > Corrida Única**. Verificar **Média das Replicatas**. As replicações têm a média calculada, e a média é usada juntamente com o Peso da Calib e o Indicador de Calib para calcular um novo ponto de calibração.

Sequência

Para uma sequência, o cálculo da média de calibração é designado como parte do **Tipo de Corrida** de uma corrida.

Na planilha de sequência, selecione o campo **Tipo de Corrida**. Na caixa de diálogo **Amostra Tipo(s) de Corrida**, selecione **Média das Replicatas**. As replicações têm a média calculada, e a média é usada juntamente com o Peso da Calib e o Indicador de Calib para calcular um novo ponto de calibração.

É possível determinar rapidamente se uma corrida de calibração tem o tipo de corrida **Média das Replicatas** associado a ela observando a tabela de sequências. As corridas designadas para **Média das Replicações** têm o código **Média das Replicatas** na coluna **Tipo de Corrida**.

Se clicar no Tipo de Corrida de uma dessas corridas, você verá que a caixa **Média das Replicatas** foi marcada para o Tipo de Corrida dessa amostra. Clique novamente nessa marca de seleção para remover Média das Replicatas do Tipo de Corrida para essa amostra, se desejado.

Nota: Quando o recurso de cálculo automático de média estiver desativado, as replicatas de calibração continuarão a ser salvas no método até você apagá-las ou tirar a sua média no começo de uma corrida de calibração.

Sobre Replicatas e a Média de Calibração

Inicialmente, um método não contém nenhuma calibração. Ao executar o primeiro padrão de calibração, as áreas/alturas de cada pico calibrado são inseridas na calibração do método. Se executar um padrão subsequente no mesmo nível de calibração (uma **replicação**), você terá a opção de escolher como deseja que o sistema de dados trate as novas áreas/alturas da calibração.

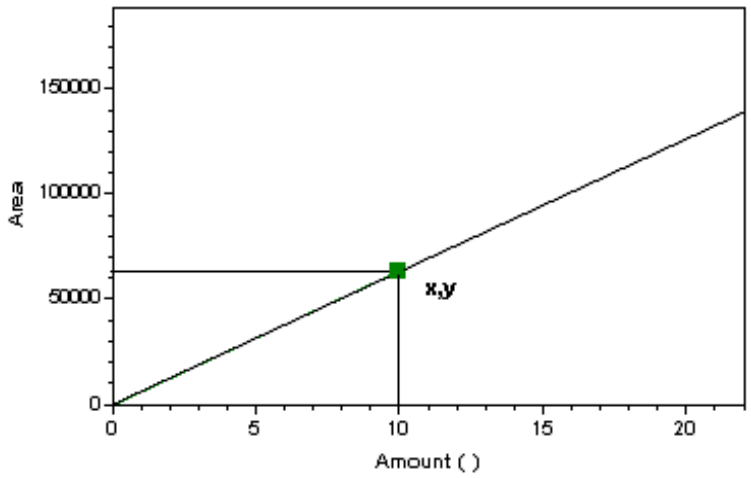
Para medir as áreas do pico calibrado, na Tabela de Picos, defina o **Indicador de calib** para o pico na **Peso Médio**. Se não quiser que seja tirada a média das áreas de um pico, defina o **Indicador de Calib** desse pico como **Substituir**.

Se você optar por **Substituir** a calibração existente, as áreas/alturas de cada replicação substituirão a área/altura da replicação anterior na calibração. Apenas as áreas/alturas de replicação mais recentes são usadas para criar a curva de calibração. As replicações anteriores são ignoradas.

Caso escolha **Peso Médio**, cada ponto de calibração na curva será determinado pela tiragem da média da calibração atual com as áreas/alturas de replicação anteriores no método. O seguinte exemplo descreve como isso é concluído.

Considere um método inicial para uma calibração de nível único sem nenhum dado existente de calibração. Depois de uma série de amostras de replicação de calibração "n" serem executadas, a curva de calibração será determinada, como mostrado abaixo.

Nível 1	Área de Replicação
1.	$Área_1$
2.	$Área_2$
3.	$Área_3$
. .	
. .	
. .	
n	$Área_n$



A curva de calibração resultante está mostrada acima, com o ponto **(x,y)** representando o ponto de calibração para Nível 1. A área **y** desse ponto é calculada tirando-se a média das replicações neste nível.

$$y = \frac{area1 + area2 + ...arean}{n}$$

Essa média y é salva como a **última área** no método. Esse valor é usado para calcular a média ponderada quando uma nova série de replicações para esse nível é executada, como mostrado abaixo.

Nível 1 Área de Replicação

1 $Área_1$

2 $Área_2$

3 $Área_3$

. .

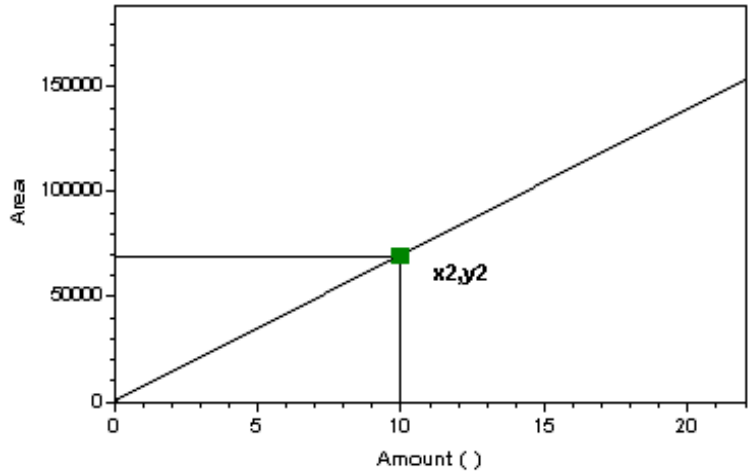
. .

. .

m $Área_m$

Como esta é a segunda vez que uma série de replicações foi executada para este nível, uma média ponderada será calculada agora, usando o Peso da Calib (fator de ponderação) definido na tabela de picos.

Uma nova curva de calibração é calculada.



O novo ponto de calibração (**x2,y2**) é usado para desenhar a curva de calibração, com a área **y2** calculada conforme segue.

$$y2 = \left[\left(\frac{area1 + area2 + ...aream}{m}\right) * W\right] + [y * (1 - W)]$$

Onde

y2 = área do ponto de calibração x2, y2

W = Peso da Calib, expresso em porcentagem

y = Última área

Calibração de Grupo e Grupos

Sobre Grupos e Calibração de Grupo

Um "grupo" é uma coleção de picos que estão de alguma forma relacionados. O sistema de dados permite definir quantos grupos você quiser. Os picos de um grupo não precisam ser contíguos no cromatograma e podem ser tratados em uma das três formas:

- Intervalo Descalibrado. Nesse tipo de agrupamento, você define um intervalo de tempo. Um fator de resposta manual será aplicado para determinar a concentração de picos Não calibrados com eluição nesse intervalo de tempo.
- Intervalo Calibrado (Calibração de Grupo). Usando essa técnica, você calibra picos unidos como um grupo, criando um fator de resposta comum para o grupo. Os picos no Intervalo

Calibrado serão relatados como um pico único que usa o fator de resposta comum para o grupo como base para o cálculo da concentração.

- Atribua Picos Nomeados a serem incluídos em um grupo (Grupo de Picos Calibrados). Usando essa técnica, um relatório de grupo apresenta a somatória de concentrações de todos os picos calibrados designados como pertencentes a esse grupo. Todos os picos do grupo podem também ser relatados individualmente porque eles também aparecem na Tabela de Picos.

Veja também

Definir um Grupo

Propriedades da Tabela do Grupo

Intervalo de Grupo Sem Calibração

Calibração de Grupo (Intervalo Calibrado)

Tabela do Grupo

Definição de Intervalo do Grupo

Exemplos de Intervalo Calibrado

Agrupamento de Pico Calibrado (Picos Nomeados)

Definição de Grupo de Pico

Ajuste de Intervalo do Grupo

Relatório de Valores do Grupo

Definir um Grupo

Definir um grupo é igual a definir picos calibrados. O grupo pode ser definido manualmente, pela digitação das informações na tabela Grupos, ou definido graficamente com a utilização de um cromatograma integrado.

Para definir um grupo graficamente:

1. Abrir o arquivo de dados para exibir o cromatograma.
2. Clique com o botão direito do mouse no cromatograma e selecione **Programação Gráfica > Definir Grupos** ou, na barra de ferramentas de integração, selecione o botão **Definir Grupos** .

3. Selecione o grupo que deseja definir. Clique uma vez no começo e uma vez no final de uma região de picos que deseja adicionar ao grupo. Você pode continuar adicionando grupos clicando para definir as regiões de grupo. Quando tiver concluído a definição das regiões de grupo, pressione a tecla ESC.

4. Na caixa de diálogo **Definir Picos**, defina o grupo ao preencher os campos a seguir:

Nome do grupo	Insira um nome a ser atribuído a esse grupo.
Tipo de grupo	Selecione Intervalo Descalibrado, Intervalo Calibrado ou Picos Nomeados para o tipo de grupo que deseja definir.
Quantificar grupo ativado	Selecione se deseja usar a Área ou a Altura para o cálculo dos fatores de resposta. Nota: Se estiver fazendo as quantificações de Pico e Grupo com o uso de padrões internos, tanto os Picos quanto os Grupos deverão usar o mesmo tipo de medição de quantificação (área ou altura).
Nº do ID de PI	Se quiser usar um método do padrão interno para a calibração do grupo, será preciso adicionar à sua amostra uma concentração conhecida de um padrão interno. O padrão interno deverá ser inserido em sua Tabela de Picos e ter um valor de calibração atribuída a ele. Insira o número de ID do Pico relativo ao padrão interno de sua Tabela de Picos neste campo.
Nº do ID de Referência	Caso seja usado um pico de referência, insira o número de ID do Pico da Tabela de Picos relativo ao pico a ser usado como referência. O tempo de retenção do pico de referência será usado para ajustar as horas de início e de parada das janelas do grupo. Observe que o pico de referência deve ser identificado na Tabela de Picos e receber um tempo esperado de retenção. O pico de referência não precisa ter níveis de calibração atribuídos a ele.
Unidades	Informe as unidades a serem usadas para exibir os resultados de concentração do grupo.
Incluir picos nomeados	Clique nesta caixa se quiser incluir picos calibrados individualmente (picos nomeados) nesse grupo calibrado. As áreas dos picos nomeados serão usadas no cálculo do fator de resposta de grupo.

Calcular concentração de picos não nomeados no grupo	Selecionar a caixa **Calcular concentração de picos não nomeados no grupo** fará com que as concentrações dos picos não nomeados (descalibrados) no grupo sejam calculadas com o fator de resposta do grupo e listadas no relatório de pico. O relatório de pico incluirá as concentrações de picos não nomeadas, mas não relatará a concentração do grupo como um "pico". A concentração do grupo será relatada em uma seção separada do "relatório do grupo". Nota: Quando essa caixa for marcada, a área e a altura totais do grupo não serão relatadas como parte da tabela de picos, portanto, as colunas Área% e Altura% do relatório de pico resultarão em 100%. Se grupos forem relatados no relatório de corridas, uma seção separada do relatório será gerada incluindo apenas grupos. Esse será o único local onde a concentração total do grupo que usa essa opção pode ser visualizada. Se essa caixa de seleção não estiver selecionada, o grupo será relatado como parte da tabela de picos; assim, as concentrações de Área% e Altura% podem resultar em mais de 100%.

Para exemplos de relatórios que usam várias opções de Intervalo Calibrado, consulte Exemplos de Intervalo Calibrado.

Sobre a Tabela do Grupo

Para visualizar a Tabela do Grupo:

1. Há três maneiras de abrir as tabelas de Pico/Grupo.

- No painel de navegação, selecione **Método > Picos/Grupos**
- No menu, selecione **Método > Picos/Grupos**
- Na barra de ferramentas, selecione o botão **Picos/Grupos**.

2. Na caixa de diálogo **Tabelas de Pico/Grupo**, selecione a guia **Grupos**.
3. Para calibrar os grupos, é preciso inserir valores de calibração para cada grupo. Nas colunas da tabela do grupo rotuladas **Nível 1** etc., insira o valor de calibração a ser usado no cálculo da curva de calibração desse grupo. Além disso, insira as unidades de

concentração para resultados do grupo de geração de relatórios na coluna rotulada **Unidades**.

4. Para fazer a calibração do grupo adequadamente, é necessário designar os seguintes parâmetros:

#	Número da linha
Nome	Insira o nome do componente.
Nº do ID de Referência	Nº de ID do grupo a ser usado como referência de grupo para este componente.
Nº do ID de PI	Nº de ID do grupo a ser usado como padrão interno para este componente, caso seja usado um método do padrão interno. NOTA: Caso esteja realizando uma calibração do Padrão Interno, você deverá inserir um Nº de ID de PI para cada componente calibrado. Se o pico estiver em um padrão interno, insira seu próprio Nº de ID na coluna Nº do ID de PI. Caso esteja realizando uma calibração Padrão Externa, você deverá inserir "0" na coluna Nº do ID de PI para todos os componentes. Você pode designar mais de um padrão interno.
Tipo de Grupo	O campo **Tipo de Grupo** deverá indicar **Intervalo Calibrado**.
Def do Grupo	Ao clicar no campo **Def do Grupo**, você verá o intervalo de tempos de retenção para as regiões selecionadas usando o mouse para definir o grupo.
Unidades	Informe as unidades de concentração a serem usadas para exibir os resultados, como mg/ml ou vol%.
Quantificar	Defina se a calibração e a quantificação devem se basear na altura pico ou na área de pico. Nota: se estiver fazendo as quantificações de Pico e Grupo com o uso de padrões internos, tanto os Picos quanto os Grupos deverão usar o mesmo tipo de medição de quantificação (área ou altura).

Tipo de Ajuste

Esta opção determina como a curva de calibração será ajustada para os dados.

Nota: Você tem cinco opções de como as curvas de calibração serão desenhadas: ajustes ponto a ponto, linear, quadrático, cúbico e FR Médio. É preciso ter pelo menos dois níveis de calibração para um ajuste linear (não incluindo zero), três níveis para um ajuste quadrático e quatro níveis para um ajuste cúbico.

Zero

Quando esta caixa estiver selecionada, a curva de calibração será forçada através de zero.

Indicador de Calib

A seleção **Substituir / Peso Médio** permite determinar como as áreas/alturas de calibração de cada grupo serão afetadas pela execução de um padrão: ou elas serão substituídas, ou sua média será tirada em relação às áreas de replicação atual presentes no método de calibração. Se Peso da Calib for definido com um valor diferente de 100, uma média ponderada das áreas/alturas será calculada. Para detalhes sobre o cálculo da média de calibração, consulte a seção**Replicações e Média de Calibração**.

Toda vez que uma média de calibração for tirada, o valor será salvo no método como "Última Área", que será subsequentemente usado para o cálculo das médias ponderadas.

Peso da Calib

Você pode designar um "peso" para a média das replicações. O fator de ponderação é aplicado às injeções de replicação, como mostra o exemplo a seguir.

Valor de corrida atual (área/altura) 101

Replicação 1 104

Replicação 2 100

Replicação 3 102

Último Valor de Área Atual = 102

Usando um fator de ponderação de 60, a média do novo método será:

[((104 + 100 + 102) / 3) * .6] + [101 * .4] = 101.6

Nota: Para calibrações de Padrão Interno, cada Replicação representa uma proporção da área/altura de componentes para a área/altura do padrão interno.

% da Margem de Calib

Esta seleção cria uma margem de aceitação baseada na diferença de % entre a área ou a altura de grupo encontrada durante a calibração e a área ou a altura de grupo atual no método. Se a diferença de % entre esses valores exceder esse limite, a calibração para esse grupo não será atualizada.

Escala

Esse parâmetro permite aplicar um fator de escala à curva de calibração. Esse fator é aplicado às quantidades inseridas ou aos valores de resposta antes do cálculo da curva de calibração. A finalidade de usar um fator de escala é criar um relacionamento entre as áreas (ou as alturas) e as quantidades ou as respostas que podem ser aproximadas por um ajuste polinomial. É possível aplicar um fator de escala a qualquer tipo de ajuste. As operações de escalas disponíveis são:

Nenhum

1/Valor

$1/Valor^2$

ln[Valor]

1/ln[Valor]

sqrt[Concentração]

$Valor^2$

1/Resposta

$1/Resposta^2$

ln[Resposta]

1/ln[Resposta]

sqrt[Resposta]

Resposta^2

Log (Concentração)

1/ log (Valor)

log (Resposta)

1/ log (Resposta)

ln (Quantidade)&ln(Resposta)

log(Quantidade)&log(Resposta)

Método de Ponderação

Selecione um Método de Ponderação a ser usado para o cálculo dos mínimos quadrados dos ajustes de regressão 1/Resposta, $1/Response^2$ 1/Valor $1/Amount^2$ ou nenhum. A ponderação dá mais importância a áreas e concentrações menores. Um fator de escala pode ser aplicado a ajustes lineares, quadráticos e cúbicos.

Nível 1...x

É preciso designar um ou mais níveis de calibração a serem usados no cálculo de um fator de resposta de grupo. Para cada Nível, é preciso inserir a concentração do grupo da amostra de calibração.

Nota: Ocasionalmente, convém calibrar um grupo com menos níveis do que outros grupos presentes em sua tabela do grupo. (Por exemplo, quando você tiver mais de uma mistura de calibração para o mesmo nível de concentração.) Para evitar a apresentação de erro em sua curva de calibração, você poderá fazer com que a área de grupos seja ignorada nesse nível deixando o "Nível" de interesse desse grupo em branco. Para inserir um espaço em branco, dê um clique duplo na célula e pressione a tecla Delete.

Se estiver realizando verificações de CQ, você deverá preencher as colunas apropriadas dos seus grupos. Consulte a seção Calibração para mais detalhes sobre essas colunas.

Nota: Assim como a Tabela de Picos, a Tabela do Grupo pode ser "personalizada" para incluir apenas as colunas de parâmetros necessárias à calibração do seu grupo. Para selecionar os parâmetros de grupo, clique no canto superior esquerdo da planilha do grupo e selecione "Propriedades" no menu suspenso. Na caixa de diálogo, clique nos parâmetros que deseja incluir na planilha.

Assegure-se de salvar o seu método. Para concluir a calibração do grupo, será preciso executar um padrão de calibração em cada nível para o qual inseriu um valor. Isso pode ser feito manualmente usando os arquivos de dados armazenados ou como uma parte da sequência. Para obter detalhes sobre como calibrar, consulte Calibração.

Alterar as Propriedades da Tabela do Grupo

Se não estiver usando um ou mais dos parâmetros apresentados na Tabela do Grupo, você poderá removê-los da visualização. As seleções inseridas são salvas por instrumento/por usuário. Isso permite que cada usuário defina seus próprios parâmetros de tabela de picos para cada instrumento.

Para alterar as colunas exibidas na tabela do grupo:

1. Na Tabela do grupo, clique com o botão direito do mouse e selecione **Propriedades**.
2. Na caixa de diálogo **Propriedades**, selecione as colunas que aparecerão na tabela do grupo. As colunas com uma marca de seleção serão exibidas na planilha Tabela do Grupo. As que não tiverem uma marca de seleção não serão exibidas.
3. A "âncora" azul indica qual coluna será usada para ancorar o rolamento horizontal da planilha. Quando essa âncora é definida, as colunas à direita da âncora rolam para a direita e para a esquerda. As colunas à esquerda da âncora não rolam. Para alterar a âncora, clique no nome da coluna que você deseja usar como âncora e, em seguida, clique no botão **Definir Âncora**. A âncora azul será movida para a coluna âncora designada.

Nota: Ao usar a âncora, é melhor remover todas as colunas desnecessárias da planilha e deixá-la com a maior largura possível antes de definir a âncora. Se a âncora for definida em uma coluna que normalmente não é mostrada, você não conseguirá rolar a planilha.

Intervalo de Grupo Sem Calibração

O tipo de grupo do Intervalo sem calibração é usado para inserir um fator de resposta para picos descalibrados com eluição em um intervalo de tempos de retenção especificado. Quando o cromatograma é analisado, a concentração de picos não nomeados com eluição no intervalo descalibrado será calculada com o uso do fator de resposta inserido para o intervalo descalibrado.

A definição de um Grupo do Intervalo sem calibração é feita com o uso de um cromatograma armazenado. Como você está apenas definindo um intervalo para picos descalibrados, não é preciso que o cromatograma seja analisado para criar o grupo.

Para definir um intervalo de grupo sem calibração:

1. Selecione **Arquivo > Abrir > Dados**. Acesse o arquivo de dados que contém os intervalos que deseja incluir no seu grupo.

2. Clique em **Analisar**. Certifique-se de que todos os picos que deseja incluir no grupo sejam detectados. (opcional)

3. Clique no botão **Definir Grupo** ou selecione o comando Definir Grupo clicando com o botão direito do mouse e acessando o menu de programação gráfica. Com essa função, define-se uma ou mais janelas de grupo usando o mouse. As regiões definidas pelo mouse se tornam os intervalos descalibrados para o grupo. É possível definir quaisquer regiões no cromatograma, estejam os picos presentes ou não.

4. Clique no mouse uma vez em um ponto no cromatograma onde deseja definir o começo da região do grupo.

5. Clique no mouse novamente para definir o final da região do grupo.

6. Se quiser adicionar mais regiões de pico ao mesmo grupo, repita o procedimento acima quantas vezes forem necessárias. Quando terminar de adicionar regiões ao grupo, pressione a tecla **[ESC]**.

7. Uma caixa de diálogo será exibida para o grupo. Selecione **Intervalo Descalibrado** para o tipo de grupo e insira um nome para o Nome do Grupo. Como a concentração do intervalo descalibrado é calculada a partir do fator de resposta manual, não é necessário introduzir valores para qualquer outro campo, exceto **Unidades** para fins de geração de relatórios.

8. Quando a caixa de diálogo estiver concluída, clique em **OK**. Uma linha será adicionada à Tabela do Grupo que contém as informações inseridas.

9. Para exibir a tabela do grupo, clique no botão **Tabelas de Pico/Grupo** na fita de comando. Clique na guia **Grupos** para visualizar a tabela de informações do grupo.

10. Insira um fator de resposta a ser usado para o Grupo do Intervalo sem calibração na coluna **FR Manual** do grupo.

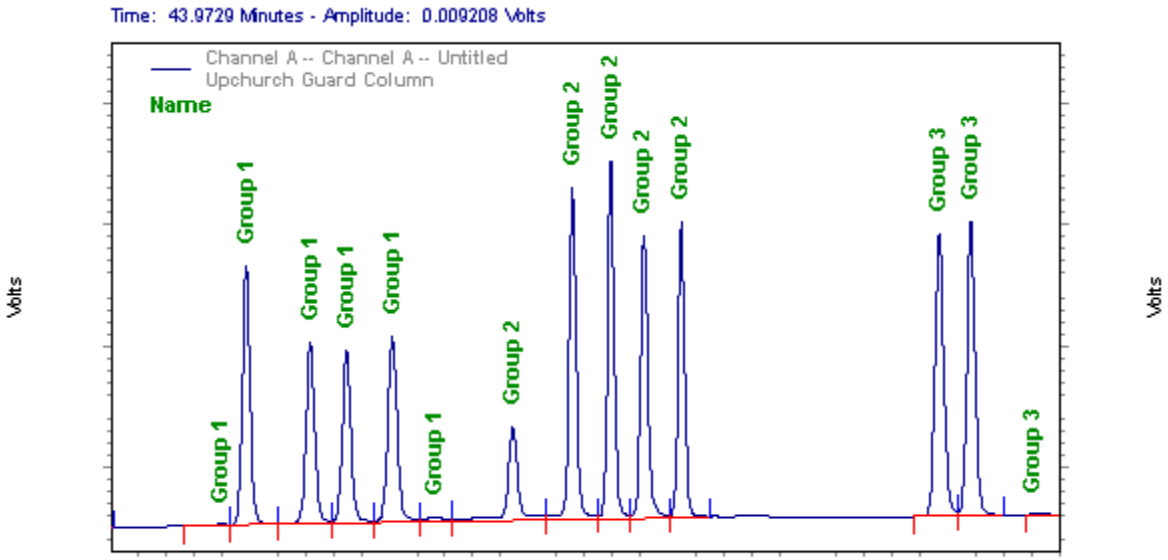
11. Caso seja usado um pico de referência, insira o número de ID do Pico da Tabela de Picos relativo ao pico a ser usado como referência. O tempo de retenção do pico de referência será usado para ajustar as horas de início e de parada das janelas do grupo. Observe que o pico de referência deve ser identificado na Tabela de Picos e receber um tempo esperado de retenção. O pico de referência não precisa ter níveis de calibração atribuídos a ele.

12. Nenhum outro parâmetro é necessário. Clique no X para sair da caixa Tabelas de Pico/Grupo. Assegure-se de salvar o seu método.

Calibração de Grupo (Intervalo Calibrado)

O agrupamento Intervalo Calibrado calibra e analisa picos definidos no grupo como um pico único. Um fator de resposta comum é calculado para o grupo, baseado em uma ou mais corridas de calibração, em que os níveis de concentração são definidos para o grupo. Além disso, você pode optar por incluir picos calibrados (nomeados) no grupo.

No exemplo, seguinte, não queremos calibrar picos individualmente. Em vez disso, queremos combinar picos em certas regiões do cromatograma e calibrá-los em grupos, criando um fator de resposta exclusivo para cada grupo. Siga as etapas para configurar os grupos.



Para definir um grupo de picos graficamente usando o cromatograma armazenado:

1. Selecione **Arquivo > Abrir > Dados**. Acesse o arquivo de dados que contém os picos que deseja incluir no seu grupo.
2. Clique em **Analisar**. Certifique-se de que todos os picos que deseja incluir no grupo sejam detectados.
3. Clique no botão **Definir Grupo** ou selecione o comando Definir Grupo clicando com o botão direito do mouse e acessando o menu de programação gráfica. Com essa função, define-se uma ou mais janelas de grupo usando o mouse. Todos os picos detectados na(s) janela(s) do grupo passarão a fazer parte do grupo sendo definido. Isso permite que você crie um grupo que contenha picos não contíguos no cromatograma.
4. Dê um clique à esquerda do primeiro pico a ser incluído no grupo. Isso define o começo de uma janela do grupo.

5. Dê um clique novamente à direita do último pico a ser incluído na janela do grupo. Isso define o final da janela do grupo.

6. Se quiser adicionar mais regiões de pico ao mesmo grupo, repita o procedimento acima quantas vezes forem necessárias. Quando terminar de adicionar picos ao grupo, pressione a tecla **[ESC]**.

7. Uma caixa de diálogo será exibida, na qual você poderá dar ao grupo um nome, número e designar um pico de referência e um padrão interno ao grupo. Preencha os campos a seguir:

Nome do Grupo	Insira um nome a ser atribuído a esse grupo.
Tipo de Grupo	Selecione **Intervalo Calibrado** para o tipo de grupo que deseja definir.
Quantificar Grupo Ativado	Selecione se deseja usar a Área ou a Altura para o cálculo dos fatores de resposta. Nota: Se estiver fazendo as quantificações de Pico e Grupo com o uso de padrões internos, tanto os Picos quanto os Grupos deverão usar o mesmo tipo de medição de quantificação (área ou altura).
Nº do ID de PI	Se quiser usar um método do padrão interno para a calibração do grupo, será preciso adicionar à sua amostra uma concentração conhecida de um padrão interno. O padrão interno deverá ser inserido em sua Tabela de Picos e ter um valor de calibração atribuída a ele. Insira o número de ID do Pico relativo ao padrão interno de sua Tabela de Picos neste campo.
Nº do ID de Referência	Caso seja usado um pico de referência, insira o número de ID do Pico da Tabela de Picos relativo ao pico a ser usado como referência. O tempo de retenção do pico de referência será usado para ajustar as horas de início e de parada das janelas do grupo. Observe que o pico de referência deve ser identificado na Tabela de Picos e receber um tempo esperado de retenção. O pico de referência não precisa ter níveis de calibração atribuídos a ele.
Unidades	Informe as unidades a serem usadas para exibir os resultados

	de concentração do grupo.
Incluir Picos Nomeados	Clique nesta caixa se quiser incluir picos calibrados individualmente (picos nomeados) nesse grupo calibrado. As áreas dos picos nomeados serão usadas no cálculo do fator de resposta de grupo.
Calcular concentração de picos não nomeados no grupo	Selecionar a caixa **Calcular concentração de picos não nomeados no grupo** fará com que as concentrações dos picos não nomeados (descalibrados) no grupo sejam calculadas com o fator de resposta do grupo e listadas no relatório de pico. O relatório de pico incluirá as concentrações de picos não nomeadas, mas não relatará a concentração do grupo como um "pico". A concentração do grupo será relatada em uma seção separada do "relatório do grupo". Nota: Quando essa caixa for marcada, a área e a altura totais do grupo não serão relatadas como parte da tabela de picos, portanto, as colunas Área% e Altura% do relatório de pico resultarão em 100%. Se grupos forem relatados no relatório de corridas, uma seção separada do relatório será gerada incluindo apenas grupos. Esse será o único local onde a concentração total do grupo que usa essa opção pode ser visualizada. Se essa caixa de seleção não estiver selecionada, o grupo será relatado como parte da tabela de picos; assim, as concentrações de Área% e Altura% podem resultar em mais de 100%.

8. Quando a caixa de diálogo estiver concluída, clique em **OK**. Uma linha será adicionada à Tabela do Grupo que contém as informações inseridas.
9. Depois do grupo ter sido definido, você deverá inserir os níveis de calibração na tabela do grupo e executar as amostras de calibração para determinar os fatores de resposta do grupo. Consulte as seções Tabela do Grupo e Definição de Intervalo do Grupo para mais informações sobre como realizar a configuração de calibração de grupo.
10. Depois de ter concluído a calibração e a configuração do grupo, os picos nos grupos definidos serão exibidos no seu cromatograma se você estiver com a anotação de "picos" ativada.

Para exemplos de relatórios que usam várias opções de Intervalo Calibrado, consulte Exemplos de Intervalo Calibrado.

Definição de Intervalo do Grupo

Caso queira rever ou alterar os intervalos de hora do cromatograma atualmente selecionados para o grupo:

1. Abra a Tabela do Grupo clicando no botão **Tabelas de Pico/Grupo** e clique em **Grupos**.
2. Clique no campo **Def do Grupo**. É exibida a caixa de diálogo **Definição de Intervalo do Grupo**com os intervalos definidos atualmente para o grupo. É possível alterar manualmente os intervalos, se desejado.

Nota: Se o grupo selecionado for um grupo de Picos Nomeados, uma caixa de diálogo diferente será exibida. Consulte Definição de Grupo de Pico.

3. Clique na opção **Incluir Picos Nomeados** se quiser incluir no grupo qualquer pico nomeado (calibrado) que fique dentro do intervalo. Quando esta opção estiver marcada, as áreas dos picos nomeados que ficam dentro dos intervalos definidos serão usadas no cálculo do fator de resposta do grupo. Se isso não estiver selecionado, os picos nomeados com eluição nessa região não serão considerados parte do grupo, e as áreas não serão usadas no cálculo do fator de resposta do grupo.
4. Selecionar a caixa **Calcular concentração de picos não nomeados no grupo** fará com que as concentrações dos picos não nomeados (descalibrados) no grupo sejam calculadas com o fator de resposta do grupo e listadas no relatório de pico. O relatório de pico incluirá as concentrações de picos não nomeadas, mas não relatará a concentração do grupo como um "pico". A concentração do grupo será relatada em uma seção separada do "relatório do grupo".

Nota: Quando essa caixa for marcada, a área e a altura totais do grupo não serão relatadas como parte da tabela de picos, portanto, as colunas Área% e Altura% do relatório de pico resultarão em 100%. Se grupos forem relatados no relatório de corridas, uma seção separada do relatório será gerada incluindo apenas grupos. Esse será o único local onde a concentração total do grupo que usa essa opção pode ser visualizada. Se essa caixa de seleção não estiver selecionada, o grupo será relatado como parte da tabela de picos; assim, as concentrações de Área% e Altura% podem resultar em mais de 100%.

Para ver exemplos, consulte Exemplos de Intervalo Calibrado.

Agrupamento de Pico Calibrado (Picos Nomeados)

Esta técnica considera que você calibrou cada pico do seu cromatograma. Defina os grupos designando, na Tabela do Grupo, os picos nomeados a serem incluídos em cada grupo e dando um nome a cada grupo.

Nota: Para definir um grupo de pico graficamente, certifique-se de que 1) o cromatograma atual seja o cromatograma que deseja usar, 2) já tenha sido criada uma tabela de picos calibrados no seu método e 3) o cromatograma tenha sido analisado.

1. Abra o arquivo de dados que contém os picos que deseja incluir no seu grupo. Clique em **Analisar** para integrar o cromatograma e verificar se os picos são detectados.
2. Defina os picos pertencentes ao grupo "definindo" graficamente o grupo que usa um cromatograma armazenado. Para fazer isso, clique no botão **Definir Grupo** na barra de ferramentas ou selecione o comando Definir Grupo clicando com o botão direito do mouse e acessando o menu de programação gráfica. Clique à esquerda do primeiro pico a ser incluído no grupo e clique novamente à direita do último pico a ser incluído no grupo (se forem picos contíguos). Você pode continuar adicionando picos ao grupo, clicando para definir as regiões de pico. Quando tiver concluído a adição de picos ao grupo, pressione a tecla **Esc** do teclado. Uma caixa de diálogo será exibida:
3. Digite um nome a ser usado para o grupo no campo **Nome do Grupo**.
4. Selecione **Picos Nomeados** para o **Tipo de Grupo.** Clique em **OK** para aceitar e sair do diálogo.
5. Clique no botão **Tabelas de Pico/Grupo** na fita de comando. Clique na guia **Grupos** para visualizar a tabela do grupo.
6. O campo **Tipo de Grupo** deverá mostrar **Picos Nomeados**. Clique na seta **Def do Grupo** para rever os picos calibrados selecionados para esse grupo. Consulte a Definição de Grupo de Pico para detalhes sobre como definir os picos nomeados desse grupo.

Definição de Grupo de Pico

Para rever ou editar picos em um grupo:

1. Na barra de ferramentas de comandos, clique no botão **Tabelas de Pico/Grupo** e selecione a guia **Grupos**.
2. Para o grupo que deseja rever ou editar, clique no campo **Def do Grupo**. Se esse grupo for um grupo de **Picos Nomeados**, a caixa de diálogo **Definição de Grupo de Pico** será exibida.

Nota: Se o grupo selecionado não for um grupo de Picos Nomeados, uma caixa de diálogo diferente será exibida. Consulte Definição de Intervalo do Grupo.

3. Reveja a lista de picos à direita. Se houver um pico indesejado no grupo, clique nele e depois clique em **Remover Seleção**.

4. Para adicionar um pico ao grupo, selecione-o na lista **Picos Nomeados** e clique em **Adicionar Seleção**. Você pode adicionar ou remover todos os picos rapidamente usando os botões **Adicionar Tudo** ou **Remover Tudo**.

5. Quando concluir, clique em **OK**. Os picos presentes na caixa **Picos Neste Grupo** se tornarão os picos definidos para esse grupo, e a Tabela do Grupo aparecerá uma vez mais.

6. Caso esteja usando um grupo de pico calibrado, não insira nenhuma informação de **Nível** na tabela, visto que o total do grupo será calculado com o uso das quantidades calibradas para os picos individuais no grupo. Para sair da tabela de grupos, clique no canto superior esquerdo da planilha Tabela do Grupo.

Quando o seu grupo de pico tiver sido definido, ele poderá ser armazenado em relatório selecionando-se a opção **Grupos de relatório** nas propriedades do relatório.

Ajuste de Intervalo do Grupo

Para alterar graficamente o Intervalo de Grupos, é preciso ter a opção de exibição de anotação de Intervalo do Grupo ativada.

1. Para ativar a anotação de Intervalo do Grupo, clique com o botão direito do mouse no cromatograma e selecione **Anotações**. Na caixa de diálogo Propriedades de Anotação de Traço, selecione **Intervalo do Grupo**.

2. Para ajustar o Intervalo de Grupo da Janela de cromatograma, clique no botão **Ajustar Intervalo do Grupo** na parte inferior da Janela do Cromatograma.

3. Selecione o Intervalo do Grupo que deseja ajustar. O cursor se transformará em uma seta dupla e serão exibidas duas caixas. Você pode ajustar o Intervalo do Grupo arrastando uma das extremidades ou arrastando a própria barra de Intervalo do Grupo. Se você pegar a própria barra e movê-la, o início e o fim do Intervalo do Grupo serão atualizados. Se você pegar a extremidade da barra e movê-la, a sua outra extremidade permanecerá na posição atual, e o Intervalo do Grupo será atualizado de acordo.

Nota: A correspondência entre os grupos dos resultados e o método é feita com base no Nº do grupo. Por isso, é preciso analisar primeiro (se o método tiver sido alterado) antes de fazer a programação gráfica do intervalo do grupo.

4. Depois de ajustar a janela de acordo com sua preferência, pressione **ESC** para concluir.

5. Na caixa de diálogo **Ajustar Intervalo do Grupo**, selecione **Atualizar Grupo**. O Intervalo do Grupo será atualizado na tabela do grupo. Selecione **Analisar Agora** para analisar o cromatograma usando o Intervalo do Grupo atualizado.

Relatório de Valores do Grupo

Para informar os valores dos grupos em um novo relatório padrão:

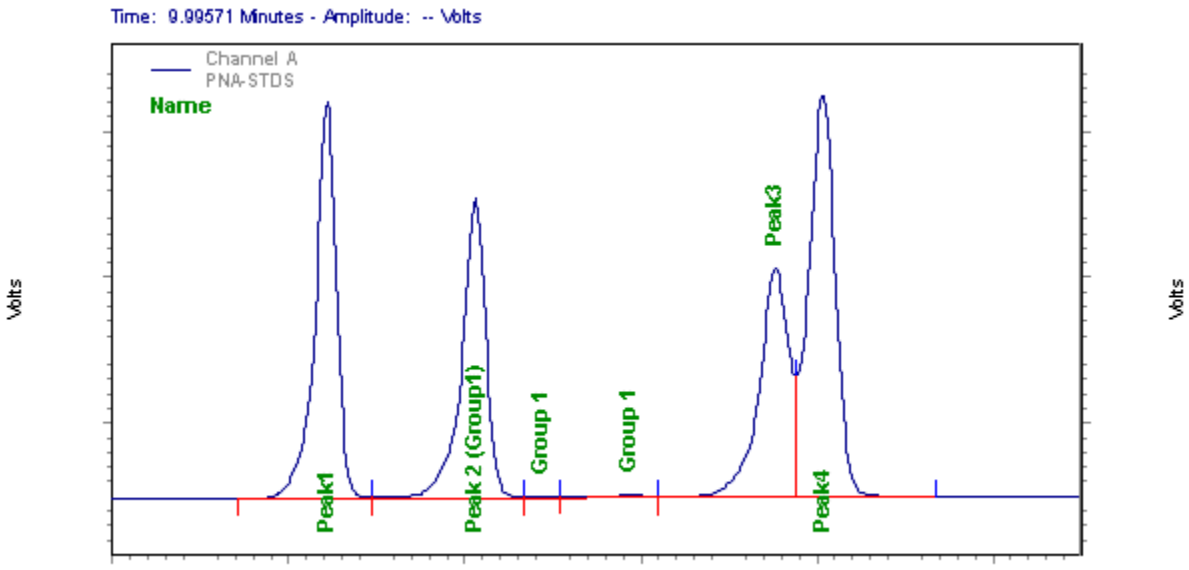
1. Na painel de navegação, selecione **Relatórios > Relatório Padrão**.
2. Clique com o botão direito no editor de relatório e selecione **Inserir Relatório > Relatório de Corridas**.
3. Na caixa de diálogo **Relatório de Corridas**, selecione **Grupos**.
4. Para fazer relatório de picos que fazem parte do Grupo do Intervalo sem calibração, selecione **Picos Não Nomeados**.
5. Selecione **OK**.

Para adicionar os valores do grupo a uma tabela de relatórios de corridas:

1. Na tabela de relatórios de corridas existente, clique com o botão direito e selecione **Propriedades do Relatório**.
2. Na caixa de diálogo **Relatório de Corridas**, selecione **Grupos**.
3. Para fazer relatório de picos que fazem parte do Grupo do Intervalo sem calibração, selecione **Picos Não Nomeados**.
4. Selecione **OK**.

Exemplos de Intervalo Calibrado

Os seguintes relatórios de exemplo foram gerados com as opções de pico de grupos de intervalos calibrados, usando o cromatograma simples mostrado na seqüência. Nesse exemplo, há quatro picos nomeados (calibrados) **Pico 1...Pico 4** e um grupo de intervalos calibrados definido, **Grupo 1**, em que Pico 2 fica no intervalo de tempo definido para o grupo. Nessa situação, há várias opções sobre como tratar o pico nomeado como parte do grupo.



Os vários relatórios são gerados baseados nas opções selecionadas na caixa de diálogo **Definição de Intervalo do Grupo**. Ela é exibida quando você define o grupo graficamente ou clica no campo de def do grupo na Tabela do Grupo.

Exemplo 1

Neste exemplo, a concentração de Pico 2 é calculada usando-se o seu próprio fator de resposta, e sua área é usada no cálculo do fator de resposta de grupo. (a opção **Incluir picos nomeados** está **Ativa**). As concentrações de picos não nomeados no intervalo do grupo são calculadas com o fator de resposta de grupo. A concentração de grupo é calculada pela soma das concentrações dos picos definidos para o grupo. O total de grupos não é incluído no relatório de pico individual, mas listado separadamente na seção "relatório do grupo". Como o total de grupos não é incluído como uma linha separada na tabela de picos, as concentrações Área% e Norm resultam em 100%. (a opção **Calcular concentração de picos não nomeados** está **Ativa**.)

Name	Retention Time	Area	Area Percent	ESTD Conc	NORM Conc	Response Factor
Peak1	5.719	462656	25.363	40.000	30.891	10405.54
Peak 2 (Group1)	6.558	394564	21.630	8.000	6.178	38653.03
Group 1	6.932	1750	0.096	2.479	1.914	705.93
Group 1	7.435	6360	0.349	9.009	6.958	705.93
Peak3	8.264	375582	20.589	30.000	23.168	10020.50
Peak4	8.530	583249	31.974	40.000	30.891	13135.42
Totals		1824161	100.000	129.488	100.000	
Group 1		402674	22.074	19.488	15.050	705.93
Totals		402674	22.074	19.488	15.050	

Exemplo 2

Neste exemplo, a concentração de Pico 2 é calculada usando-se o seu próprio fator de resposta, e sua área é usada no cálculo do fator de resposta de grupo. (a opção **Incluir picos nomeados** está **Ativa**). As concentrações de picos não nomeados no intervalo do grupo não são calculadas e relatadas individualmente. A concentração de grupo é calculada usando-se a área total de todos os picos de grupo definidos e o fator de resposta de grupo. A concentração total do grupo é incluída no relatório de pico individual. Como o total de grupos é incluído como uma linha separada na tabela de picos, as concentrações Área% e Norm não resultam em 100%. (a opção **Calcular concentração de picos não nomeados** está **Inativa**.)

Name	Retention Time	Area	Area Percent	ESTD Conc	NORM Conc	Response Factor
Peak1	5.719	462656	25.363	40.000	5.810	10405.54
Peak 2 (Group1)	6.558	394564	21.630	8.000	1.162	38653.03
Group 1	6.932	1750	0.096	0.000	0.000	705.93
Group 1	7.435	6360	0.349	0.000	0.000	705.93
Peak3	8.264	375582	20.589	30.000	4.358	10020.50
Peak4	8.530	583249	31.974	40.000	5.810	13135.42
Group 1		402674	22.074	570.414	82.859	705.93
Totals		2226835	122.074	688.414	100.000	

Exemplo 3

Neste exemplo, a concentração de Pico 2 é calculada e relatada com o uso do seu próprio fator de resposta. Sua área NÃO é usada no cálculo do fator de resposta do grupo. (a opção **Incluir picos nomeados** está **Inativa**.) As concentrações de picos não nomeados no intervalo do grupo são calculadas com o fator de resposta de grupo. A concentração de grupo é calculada pela soma das concentrações dos picos definidos para o grupo. O total de grupos não é incluído no relatório de pico individual, mas listado separadamente na seção "relatório do grupo". Como o total de grupos não é incluído como uma linha separada na tabela de picos, as concentrações Área% e Norm resultam em 100%. (a opção **Calcular concentração de picos não nomeados** está **Ativa**.)

Name	Retention Time	Area	Area Percent	ESTD Conc	NORM Conc	Response Factor
Peak1	5.719	462656	25.363	40.000	2.649	10405.54
Peak 2 (Group1)	6.558	394564	21.630	8.000	0.530	38653.03
Group 1	6.932	1750	0.096	300.343	19.892	5.83
Group 1	7.435	6360	0.349	1091.533	72.293	5.83
Peak3	8.264	375582	20.589	30.000	1.987	10020.50
Peak4	8.530	583249	31.974	40.000	2.649	13135.42
Totals		1824161	100.000	1509.876	100.000	
Group 1		8110	0.445	1391.876	92.185	5.83
Totals		8110	0.445	1391.876	92.185	

Exemplo 4

Neste exemplo, a concentração de Pico 2 é calculada e relatada com o uso do seu próprio fator de resposta. Sua área NÃO é usada no cálculo do fator de resposta do grupo. (a opção **Incluir picos nomeados** está **Inativa**.) As concentrações de picos não nomeados no intervalo do grupo não são calculadas e relatadas individualmente. A concentração de grupo é calculada usando-se a área total de todos os picos de grupo definidos e o fator de resposta de grupo. A concentração total do grupo é incluída no relatório de pico individual. Como o total de grupos é incluído como uma linha separada na tabela de picos, as concentrações Área% e Norm não resultam em 100%. (a opção **Calcular concentração de picos não nomeados** está **Inativa**.)

Name	Retention Time	Area	Area Percent	ESTD Conc	NORM Conc	Response Factor
Peak1	5.719	462656	25.363	40.000	2.649	10405.54
Peak 2 (Group1)	6.558	394564	21.630	8.000	0.530	38653.03
Group 1	6.932	1750	0.096	0.000	0.000	5.83
Group 1	7.435	6360	0.349	0.000	0.000	5.83
Peak3	8.264	375582	20.589	30.000	1.987	10020.50
Peak4	8.530	583249	31.974	40.000	2.649	13135.42
Group 1		8110	0.445	1391.876	92.185	5.83
Totals		1832271	100.445	1509.876	100.000	

Sobre Relatórios

Relatórios Padrão e Relatórios de Método usam o Editor de Relatórios, que é similar a um programa de processamento de palavras. Pode-se alterar fontes, cores, margens, inserir cromatogramas, gráficos, informação do sistema, sons e clipes de vídeo multimídia.

Relatórios Avançados usam planilhas. Fórmulas podem ser inseridas para criar uma exibição personalizada de estatísticas simples ou de cálculos matemáticos complexos para os dados.

Relatórios Inteligentes

Modelos de relatório padrão são fornecidos para habilitar a impressão fácil de relatórios.

Veja também

Sobre Modelos de Relatório

Relatórios Padrão

Relatórios Avançados

Relatórios Inteligentes

Modelos de Relatório Padrão

Sobre Modelos de Relatório

Modelos de relatório são "designs de relatório" que lhe permitem personalizar seus relatórios criando um design de relatório que pode ser reutilizado ou modificado, conforme desejado.

É fornecido um conjunto de modelos de relatório padrão para todos os tipos de relatórios. Estes podem ser usados conforme estão ou podem ser modificados e salvos como modelos novos.

Modelos de Relatório Padrão

Os modelos padrão para todos os relatórios são fornecidos com o sistema de dados, porém, você pode querer criar o seu ou editar os modelos fornecidos. Os modelos de relatório padrão (% de Área, Padrão Externo, Padrão Interno e Normalização) são fornecidos e têm a extensão .SRP. É possível criar novos modelos de relatório padrão salvando seu modelo de relatório usando a extensão .SRP. Podem ser encontrados exemplos dos relatórios padrão na seção Modelos de Relatório Padrão.

Relatórios de Sequência

Os relatórios de resumo de sequência são criados e salvos usando o editor de Relatórios Avançados. Os modelos de relatórios de sequência não são salvos como parte do arquivo de sequência e, assim, devem ser salvos como um arquivo de modelo se desejar usar um modelo de

relatório de sequência para gerar um relatório. Os modelos de relatório de sequência padrão fornecidos (Calibração, Resumo, Duplicado, QCCheckStd, Spike e SysSuit) possuem a extensão .brp, .tpl, ou .rdl. Consulte Sobre Relatórios da Sequência e Sobre Relatórios de Resumo da Sequência.

Os modelos de relatório de sequência são usados para dados de relatório gerados durante as operações de sequência de lote. Por exemplo, alguns Tipos de Corrida necessitam de um modelo de relatório para reportar os dados. Quando você designa uma corrida como uma corrida para Iniciar Resumo, por exemplo, ser-lhe-á pedido para atribuir um nome do modelo para o relatório de resumo. Outros tipos de corrida que necessitam de modelos incluem a Adequação, Padrões de Verificação de CQ e Duplicados.

Relatórios Padrão

Crie e edite Relatórios padrão e Relatórios de método no editor de relatórios.

Veja também

Abrir um Relatório Padrão

Abrir um Relatório de Método

Salvar um Relatório Padrão

Salvar um Relatório de Método

Como usar o Editor de Relatórios

Abrir um Relatório Padrão

Para abrir um relatório padrão, selecione **Relatório > Relatório Padrão** no painel de navegação.

Abrir um Relatório de Método

Para abrir um relatório de método, selecione **Método > Relatório**. O editor de relatórios abrirá, com uma “página em branco” onde você poderá criar o seu relatório ou com o relatório personalizado do método atual.

Para abrir o relatório de método para edição, clique no botão **Editar Relatório Personalizado** na barra de ferramentas.

O Relatório de Método é parte do método e não é salvo como modelo.

Salvar um Relatório Padrão

Para salvar um relatório padrão com o nome do arquivo atual:

Selecione **Arquivo > Salvar > Relatório Padrão**.

Para salvar um relatório padrão com um novo nome do arquivo:

1. Selecione **Arquivo > Salvar Como > Relatório Padrão**.
2. A caixa de diálogo **Salvar Arquivo de Modelo de Relatório Padrão Como** abre para a pasta modelo em seus arquivos de projeto e **Salvar como tipo** é configurado para **.rep**.
3. No campo **Nome do arquivo**, digite o nome do arquivo ou selecione-o na lista suspensa.
4. Selecione **Salvar**.

Salvar um Relatório de Método

O Relatório de Método faz parte do método e não é salvo como um modelo.

Se você abriu um relatório de método que está vinculado a um método, ele é salvo automaticamente quando se fecha o relatório.

Como usar o Editor de Relatórios

O Editor de Relatórios permite criar e editar relatórios.

O Editor de Relatórios é similar a um programa de processamento de palavras. Pode-se alterar fontes, cores, margens, inserir cromatogramas, gráficos, informação do sistema, sons e clipes de vídeo multimídia.

Além do texto de forma livre, você pode selecionar uma ampla variedade de informações e objetos para inserir no relatório. Esses itens são apresentados em quatro categorias:

- Itens de Campo são campos individuais de informações relacionadas aos dados atuais. Nome do arquivo, nome do método e volume de injeção são exemplos de itens do campo de cromatografia.
- Os itens Gráficos geralmente contêm grupos de informações graficamente relacionadas que se enquadram na mesma categoria. Os cromatogramas são exemplos de itens de gráfico. Esses itens podem ser inseridos, movidos e editados independentemente de outros itens do relatório.
- Relatórios são tabelas das informações com colunas definidas pelo usuário. Uma tabela de relatórios pode incluir, por exemplo, o nome do composto, tempo de retenção e concentração e/ou vários outros itens relacionados às amostras. As tabelas de relatórios também podem ser formatadas com fontes, centralização e casas decimais. Os relatórios

são inseridos como tabelas porque o número de linhas é dinâmico e pode mudar a cada corrida.

- Itens de Objeto são objetos não-cromatográficos que aprimoram ou reforçam a utilidade do relatório. Esses objetos podem incluir imagens de mapa de bits, planilhas do Excel ou gráficos e clipes de áudio ou de vídeo.

Veja também

Funções Básicas do Editor de Relatórios

Usar a Visualização de Impressão

Atalhos

Criar Cabeçalhos e Rodapés

Adicionar Linhas e Caixas

Adicionar Campos

Adicionar um Cromatograma

Importar um Relatório

Inserir um Gráfico Adjacente a um Relatório

Adicionar Objetos

Adicionar uma Curva de Calibração

Imprimir Relatórios

Inserir uma Tabela de Relatórios

Funções Básicas do Editor de Relatórios

Para definir a fonte padrão:

Há duas maneiras de alterar as fontes. Se quiser definir uma fonte padrão que será usada a menos que você altere especificamente a formatação de um intervalo de texto selecionado, clique com o botão direito do mouse e selecione **Texto**. Selecione o comando **Fonte...** para definir a fonte padrão para o texto inserido em seu relatório.

A seleção de fonte também está disponível na fita de comando. Você pode usar a lista suspensa de seleção da fonte para alterar a fonte atual ou para alterar rapidamente um bloco de texto

destacado sem alterar a fonte padrão. Use o botão de cor, juntamente com os botões Negrito, Itálico, Sublinhado e rasurado para formatar rapidamente esses aspectos do texto.

Para definir justificação:

Clique com o botão direito do mouse seguido por **Editar > Texto > Justificação à Esquerda, Justificação ao Centro** ou **Justificação à Direita**. Esses comandos também estão disponíveis na fita de comando.

Para adicionar marcadores:

1. No editor de relatórios, clique no botão **Marcadores** ou clique com o botão direito do mouse e selecione **Editar** seguido por **Texto** e, depois, **Marcadores**.
2. Quando esse botão é ativado, cada novo parágrafo de texto é acrescentado com um marcador.
3. Para desativar os marcadores, clique novamente no botão **Marcadores**.

Para adicionar bordas e sombreamento:

1. Selecione o item e clique no botão **Bordas e Sombreamento** , ou clique com o botão direito do mouse e selecione **Editar**, seguido de **Texto** e, depois, clique em **Bordas e Sombreamento**.
2. Marque as caixas de seleção para indicar onde a borda ou o sombreamento deverá aparecer.
3. Opcionalmente, digite a porcentagem de sombreamento a ser aplicada.
4. Clique em **OK** para aplicar as bordas e sombreamento.

Para definir os níveis de zoom:

Selecione o nível de “ampliação” para a exibição do seu relatório clicando no botão **Ampliar** na fita de comando e selecionando a porcentagem do nível de zoom. Você pode "ampliar" o documento (aumentar a porcentagem de ampliação) para ver melhor os seus detalhes ou "diminuir zoom" (reduzir a porcentagem de ampliação) para ver uma maior área da página em tamanho reduzido.

Para definir as margens padrão:

Para definir as margens do relatório, clique com o botão direito do mouse e selecione **Configuração da Margem...** Será exibido um diálogo para que você especifique as unidades (polegadas ou centímetros) e as margens da página (direita, esquerda, superior e inferior).

Outros recursos:

- A régua, que mostra a posição com relação à página. As setas pretas, que podem ser arrastadas de acordo com suas necessidades para indicar margens e recuos.
- A fita de comando, que contém comandos usados frequentemente para formatação. Esses botões incluem negrito, itálico, sublinhado, tachado, cor, justificação à esquerda, ao centro e à direita, exibir cabeçalho/rodapé, adicionar botões, bordas/sombreamento e zoom. Quando um botão é clicado, a formatação que ele representa é aplicada a qualquer texto ou item que esteja selecionado. Tendo sido clicado, o botão de formatação permanece ativo para novo texto até que seja clicado novamente.
- O clique com o botão direito do mouse fornece acesso a menus para a inserção de cromatogramas, objetos de relatório, cromatografia, informações de método e campos de signoff de resultados eletrônicos.
- Os itens inseridos no relatório devem ser “ativados ” com um clique para que possam ser editados ou movidos.
- As tabelas de relatórios podem ser removidas rapidamente por meio de um clique com o botão direito do mouse dentro da tabela, seguido da seleção do comando **Excluir Tabela**.

Usar a Visualização de Impressão

Para pré-visualizar o relatório personalizado atual, clique no botão **Visualização de Impressão** na fita de comando ou clique com o botão direito do mouse e selecione **Visualização de Impressão...** . A tela Visualização de Impressão permite examinar uma ou duas páginas do relatório atual de cada vez.

Quando estiver na tela de visualização de impressão, o cursor mudará temporariamente para uma imagem de uma "lente de aumento". Pode-se clicar em um local do relatório para ampliar e obter mais detalhes.

Imprimir

Clique nesse botão para imprimir o relatório.

Próxima Página

Clique nesse botão para exibir a próxima página do relatório.

Página Anterior

Clique nesse botão para exibir a página anterior do relatório.

Duas Páginas

Clique nesse botão para exibir duas páginas do relatório ao mesmo tempo.

Ampliar

Clique nesse botão para ampliar no cromatograma. Isso produz o mesmo efeito de um clique no relatório quando o cursor tem a forma de uma lente de aumento.

Diminuir Zoom

Clique nesse botão para diminuir zoom em um nível.

Fechar

Clique nesse botão para voltar ao editor de relatórios personalizados.

Atalhos

Existem vários atalhos que podem ser usados para personalizar a aparência das informações no editor de relatórios.

Desfazer Rapidamente

Se quiser reverter ou "desfazer" uma ação que acabou de ser aplicada, pressione **Ctrl-Z**. A última ação realizada (por exemplo, inserir um campo) será revertida. O mesmo efeito pode ser obtido clicando com o botão direito do mouse e selecionando o comando **Editar>Desfazer**.

Selecionar Tudo

Pressione **Ctrl-A** para selecionar todo o relatório personalizado.

Cópia/recorte/colagem rápida

Pressione **Ctrl-C** para copiar o item selecionado.

Pressione **Ctrl-V** para colar o item.

Pressione **Ctrl-X** para recortar um item selecionado.

Quebra de Página Forçada

Se quiser que um certo elemento do relatório seja sempre impresso na parte superior de uma nova página, insira uma "quebra de página" antes desse item. Para inserir uma quebra de página no relatório personalizado, posicione o cursor no ponto onde a nova página deverá começar e

pressione **Ctrl Enter** no teclado. Isso forçará o que quer que venha a seguir no relatório a ser impresso em uma nova página quando o relatório for impresso. Uma quebra de página é indicada no modelo de relatório personalizado por uma linha pontilhada ao longo da página. Para remover uma quebra de página, coloque o cursor imediatamente abaixo da linha de quebra de página e pressione a tecla de **Backspace** até que a quebra de página seja removida.

Paradas de Tabulação

As paradas de tabulação são usadas para alinhar itens em uma página. Por padrão, são definidas paradas de tabulação a cada ½ polegada. Entretanto, você pode mover as paradas de tabulação de modo que haja espaço suficiente entre os itens para acomodar alterações (por exemplo, itens de campo com comprimento variável). Uma nova parada de tabulação é definida usando o mouse para "inserir" a tabulação na barra de régua na parte superior da página, como é descrito a seguir. Depois de inserir uma nova parada de tabulação, pode-se movê-la clicando e "arrastando-a" para um novo local na régua horizontal. Para remover uma parada de tabulação, clique nela e "arraste-a" completamente para a esquerda na régua horizontal.

Parada de Tabulação à Esquerda Clique com o botão esquerdo do mouse na régua, no local da nova tabulação. Uma parada de tabulação à esquerda justifica à esquerda o texto tabulado para esse local.

Parada de Tabulação à Direita Clique com o botão direito do mouse na régua, no local da nova tabulação. Uma parada de tabulação à direita justifica à direita o texto tabulado para esse local.

Parada de Tabulação Centralizada Mantendo a tecla Shift pressionada, clique com o botão esquerdo do mouse na régua, no local da nova tabulação. Uma parada de tabulação centralizada justifica centralmente o texto tabulado para esse local.

Parada de Tabulação Numérica Mantendo a tecla Shift pressionada, clique com o botão direito do mouse na régua, no local da nova tabulação. Na parada de tabulação numérica, o texto tabulado é alinhado pelo ponto decimal.

Criar Cabeçalhos e Rodapés

Se quiser inserir informações que apareçam em todas as páginas do relatório, clique no botão **Exibir Cabeçalho/Rodapé** ou clique com o botão direito do mouse em qualquer lugar na área do relatório e, em seguida, selecione **Cabeçalho/Rodapé**. Isso lhe permitirá exibir e editar a área de cabeçalho e rodapé do relatório. Para editar o cabeçalho ou rodapé, clique na área de cabeçalho ou rodapé exibida e insira as informações que deseja incluir. Observe que essa área

pode conter tanto texto livre como campos de cromatografia e objetos. Entretanto, ela não pode incluir tabelas de relatórios ou objetos de desenho.

Quando terminar de formatar o cabeçalho e/ou rodapé, você pode desativar novamente a exibição de cabeçalho e rodapé clicando no botão **Exibir Cabeçalho/Rodapé** na barra de ferramentas ou clicando com o botão direito do mouse e selecionando **Cabeçalho/Rodapé**. Observe que a marca de seleção ao lado de **Cabeçalho/Rodapé** é desativada.

Adicionar Linhas e Caixas

Você pode adicionar ênfase ao seu relatório desenhando linhas e caixas nas áreas mais importantes.

Para adicionar linhas ou caixas:

No editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse onde deseja adicionar a linha ou a caixa e, em seguida, clique em**Desenho > Linha, Retângulo** ou **Caixa de Texto** e siga as instruções abaixo.

Desenhar uma linha

Para adicionar uma linha ao relatório, clique com o botão direito do mouse e, em seguida, clique em **Desenho** seguido de **Linha**. Uma linha aparecerá no local do cursor. Ative a linha clicando nela com o mouse. Uma caixa aparecerá em cada extremidade da linha e o cursor mudará para um "+". Você pode clicar e arrastar as alças da linha para alterar seu tamanho e orientação na página (ângulo). Você também pode arrastar e soltar a linha selecionando-a com o mouse, mantendo o botão do mouse pressionado e arrastando a linha para um novo local no relatório.

Desenhar uma caixa

Você pode desenhar uma caixa no relatório clicando com o botão direito do mouse e, em seguida, clicando em **Desenho** seguido de **Retângulo**. Uma retângulo aparecerá no relatório, no local onde o cursor estava posicionado. Para redimensionar a caixa, clique nela e arraste as bordas até o tamanho desejado. Para mover a caixa, clique nela para ativá-la e mova o cursor logo para **fora** da caixa até que ele se transforme em um "+". Em seguida, mantendo o botão do mouse pressionado, arraste a caixa e solte-a em sua nova posição.

Criação de uma Caixa de Texto

Se quiser adicionar uma caixa de texto ao seu relatório, clique com o botão direito do mouse e, em seguida, clique em **Desenho** seguido de **Caixa de Texto**. Uma retângulo aparecerá, com um cursor onde você pode digitar texto. Essa ferramenta cria uma caixa de texto independente no local do cursor. Para mover a caixa de texto, clique nela para ativá-la e mova o cursor logo para **fora** da caixa de texto até que ele se transforme em um "+". Em seguida, mantendo o botão do mouse pressionado, arraste a caixa e solte-a em sua nova posição.

Posicionar Gráficos ao Lado de Tabelas

Você pode usar a função Caixa de Texto para mover um cromatograma ou outro gráfico e posicioná-lo ao lado de uma tabela de relatórios. Para fazer isso, primeiramente crie uma caixa de texto. Em seguida, clique dentro da caixa de texto e insira um gráfico. Tendo inserido o gráfico na caixa de texto, você pode usar o recurso de "arrastar e soltar" da caixa de texto para mover o cromatograma ou o gráfico para uma posição adjacente a uma tabela de relatórios em seu relatório personalizado.

Desfazer Inserir/Excluir

Depois de inserir um item em seu relatório (campo, relatório, gráfico), você pode "Desfazer" a ação pressionando **Ctrl-Z** no teclado.

Adicionar Campos

Para adicionar um campo de informação selecionado:

1. No editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse onde deseja inserir o campo e clique em **Inserir Campo.**
2. Selecione o campo que deseja inserir nas opções exibidas.

Quando você clicar em qualquer dos itens de Campo, ele será colocado no relatório no local atual do cursor. Esses itens podem ser inseridos individualmente ou agrupados para criar uma área personalizada de informações de cromatografia no relatório. Os itens são atualizados para refletir as informações dos dados atuais sempre que um relatório é impresso ou exibido. Eles também podem ser atualizados selecionando o comando **Atualizar Campos** no menu do clique do botão direito do mouse ou pressionando a tecla **F9** para atualizar o campo atual.

Nota: o caminho do diretório mostrado para os arquivos de dados em relatórios é o caminho do diretório especificado originalmente, mesmo que os dados tenham sido movidos posteriormente.

Depois de adicionar um campo ao relatório, você pode movê-lo e alterar a fonte ou a aparência. A formatação permanecerá constante, mas as informações do campo mudarão conforme cada relatório seja impresso para refletir as informações atuais.

Adicionar um Cromatograma

Você pode incluir quantos cromatogramas quiser no seu relatório. Cada cromatograma pode ser exibido em sua própria região, ou você pode exibir vários cromatogramas, perfis de bomba ou gráficos na mesma região. É possível incluir cromatogramas salvos em disco e também dados atuais que mudarão conforme cada corrida seja adquirida.

Para adicionar um cromatograma ou um traço:

1. No editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse onde deseja inserir o traço e clique em **Inserir Gráfico** seguido de **Gráfico de Dados**.
2. Em Propriedades do Gráfico de Dados, selecione a fonte de dados e defina a aparência e as anotações desejadas para o gráfico. A planilha permite adicionar cromatogramas ou outros traços ao gráfico atual. Cada linha representa um traço que aparecerá nesse gráfico. Para cada linha, você deve indicar como os dados deverão ser exibidos.
3. Depois de inserir o gráfico, para modificar qualquer desses itens ou adicionar traços, clique com o botão **Direito do mouse** em qualquer lugar na caixa de traço e faça as alterações desejadas.

Ampliação do Cromatograma

Depois de inserir o cromatograma no relatório, você pode ajustar a exibição clicando nele para ativá-lo e, em seguida, ampliando exatamente como é feito na janela do cromatograma. Para voltar ao nível de zoom anterior, clique duas vezes com o mouse na região do cromatograma no relatório.

Rolamento do Cromatograma

Uma vez ampliado um cromatograma, é possível rolá-lo para a direita ou esquerda sem perder o zoom. Isso é feito pressionando as teclas CTRL e SHIFT, movendo o mouse até que o cursor até que o cursor mude para uma "mão" e arrastando para a esquerda ou para a direita.

Você também pode rolar o eixo X ou Y para exibir recursos que talvez estejam fora do intervalo. Para isso, pressione as teclas Ctrl+Shift enquanto o cursor do mouse permanece fora da área do gráfico, mas próximo do eixo de interesse. O cursor será alterado para uma seta para cima/baixo próxima do eixo Y, ou uma seta para esquerda/direita próxima do eixo X. Mover o mouse nesse modo irá rolar o gráfico para cima/baixo ou para esquerda/direita no eixo.

Para restaurar o modo de exibição original, clique com o botão direito do mouse na janela do cromatograma e selecione o comando **Unzoom Total**.

Nota: se você inserir Dados Atuais no relatório, eles serão atualizados sempre que os dados atuais mudarem. Portanto, é possível ver os efeitos da integração clicando no botão Análise enquanto estiver na tela do relatório personalizado.

Importar um Relatório

Pode-se importar um modelo de relatório existente para um relatório no editor de relatórios. Quando um modelo de relatório é importado, ele substitui o modelo de relatório atual.

Para importar um relatório existente:

1. No editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse e selecione **Importar Relatório** Você será perguntado se deseja substituir o relatório atual.

2. Se você clicar em **Sim**, será aberta uma caixa de diálogo onde você poderá selecionar o relatório que deseja importar. Quando você selecionar o novo relatório e clicar em **Abrir**, as informações do relatório atual serão substituídas pelo relatório selecionado.

3. Se você clicar em **Não**, o relatório existente será mantido e nenhuma importação de relatório será realizada.

Nota: não é possível importar um modelo de relatório avançado para um método ou relatório padrão.

Inserir um Gráfico Adjacente a um Relatório

Para inserir um cromatograma (ou outro gráfico) adjacente a um relatório:

1. Desenhe uma caixa de texto no relatório usando o comando **clique com o botão direito do mouse>Desenho>Caixa de texto**.

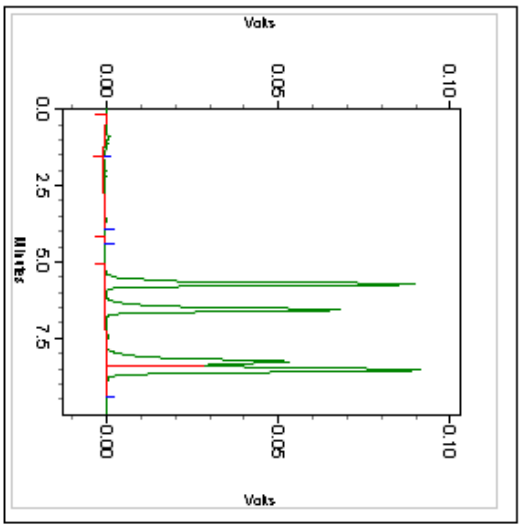
2. Use o comando **clique com o botão direito do mouse/Inserir Gráfico>Gráfico de Dados** dentro da caixa de texto para inserir um cromatograma (ou outro gráfico) na caixa.

3. Para mover a caixa de texto contendo o cromatograma/gráfico, clique na borda da caixa de texto até que “alças” retangulares pretas apareçam. Em seguida, mova o cursor ligeiramente para fora da borda até que ele se transforme em um retículo de mira “+”. Nesse ponto, mantendo o botão esquerdo do mouse pressionado, arraste a caixa de texto com o gráfico para um novo local (por exemplo, ao lado de um relatório) e libere o botão do mouse.

4. Para editar o cromatograma/gráfico (anotações, etc.), clique duas vezes dentro dele. Certifique-se de que você selecionou o cromatograma e não a caixa de texto. Para redimensionar o cromatograma, selecione a caixa de texto (procure pelas “alças” da caixa de texto), clique nas alças e arraste-as até o tamanho desejado.

Observe que não é possível posicionar dois relatórios lado a lado.

Name	Retention Time	Area
Peak1	5.729	779320
Peak2	6.568	667324
Peak3	8.283	633854
Peak4	8.540	994037
Totals		
		3074535



Adicionar Objetos

Relatórios personalizados têm suporte total a OLE (Vínculo e Inserção de Objeto). Isso significa que você pode adicionar objetos que estão vinculados a outros aplicativos Windows, como o Excel. Você pode até mesmo adicionar um clipe de vídeo ou uma gravação de voz ao relatório. Esses itens são adicionados como Objetos ao relatório.

Vários tipos de objetos (figuras, gráficos, mapas de bits, logotipos, documentos do Word) podem ser adicionados a um relatório personalizado.

Para adicionar um objeto ao relatório:

1. No editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse no local onde deseja inserir o objeto. Clique em **Inserir Objeto...**.
2. Selecione **Criar Novo** para criar um novo objeto do **Tipo de Objeto** selecionado ou selecione **Criar a partir do arquivo** para procurar e selecionar o objeto nos arquivos existentes. Se estiver criando a partir de um arquivo, clique na caixa **Vincular** para criar um vínculo para o objeto no relatório.
3. Clique em **Exibir como ícone** para exibir o objeto como um ícone no editor. Também é possível selecionar o ícone que será utilizado para o objeto caso essa opção seja selecionada.

Há uma ampla variedade de tipos de objeto que podem ser inseridos, dependendo dos aplicativos que estejam instalados no seu computador. Para muitas seleções, a inserção de um objeto fará um aplicativo ser “executado” dentro do seu editor de relatórios, permitindo que você modifique e edite o objeto. Para sair do aplicativo e voltar ao relatório personalizado, simplesmente clique em

qualquer lugar fora da área do objeto no relatório. Você pode criar um novo objeto para ser inserido ou abrir um arquivo de objeto existente.

Por exemplo, um gráfico do Microsoft Excel pode ser inserido como um objeto no relatório personalizado. Quando o gráfico do Excel é inserido, os menus e faixas do Microsoft Excel tornam-se disponíveis e permanecem ativos para que você possa editar e modificar o objeto.

Se um objeto OLE, como um gráfico do Microsoft Excel, for inserido como um objeto vinculado, ele será atualizado automaticamente no relatório personalizado quando o gráfico for alterado. Isso proporciona uma maneira extremamente eficiente de combinar dados em relatórios.

Adicionar uma Curva de Calibração

1. Clique com o botão direito do mouse em qualquer lugar do editor de relatórios. Selecione o comando **Inserir Gráfico/Curva de Calibração**.

2. A caixa de diálogo **Propriedades da Curva de Calibração** será exibida.

- **Fonte de Dados de Calibração** - Selecione a origem dos dados da curva de calibração.

- **Origem** - Selecione a origem dos dados da curva de calibração na lista suspensa **Fonte de Dados/Fonte de Calibração**. Escolha **Picos**, **Grupos ou Modelo** para selecionar a tabela de picos de calibração que será usada.
  Você só deve selecionar **Modelo** se estiver editando um modelo de relatório de calibração. Se essa opção for selecionada dentro de um modelo de relatório de método, as informações não serão impressas. Se você selecionar **Modelo**, as curvas de calibração de todos os picos da calibração serão impressas automaticamente conforme definido no arquivo **.crp** de modelo de relatório de calibração.

- **Traço** - Para o traço da curva de calibração, selecione os dados específicos que serão exibidos. Quando um canal de dados é selecionado para o traço, é necessário selecionar em seguida um **Pico** na lista. Esse pico sempre será exibido.

- **Exibir pontos de replicação** - Clique nessa caixa se quiser que pontos de dados replicados sejam exibidos na curva de calibração do relatório.

3. Clique em **OK** para inserir a curva de calibração no seu relatório personalizado.

Imprimir Relatórios

Há quatro maneiras de imprimir relatórios:

1. A partir do editor de relatórios. Para imprimir um relatório a partir do editor de relatórios, use o botão Imprimir na **Visualização de Impressão** ou imprima o relatório diretamente clicando com o botão direito do mouse e selecionando **Imprimir**.

2. A partir de uma janela do instrumento. Para imprimir o método ou o relatório da sequência atual, clique em **Relatórios** na barra de menus, seguido de **Imprimir** e selecione o relatório que deseja imprimir.

3. Como parte da aquisição ou reprocessamento de dados. Um relatório personalizado pode ser impresso no final de cada análise, no final de uma corrida de aquisição de dados, durante uma sequência ou no seu final. A impressão ou não de um relatório personalizado do método é determinada selecionando a opção **Imprimir Relatórios de Método** ao iniciar uma corrida, aquisição de sequência ou ao reprocessar. Nenhum relatório será impresso se essa opção não for selecionada. Os relatórios de sequência só são impressos quando a opção **Imprimir Relatórios Sequenciais** é selecionada.

4. A partir de uma corrida da sequência. No Tipo de Corrida, selecione a opção **Imprimir relatórios adicionais**. Isso lhe permitirá selecionar modelos de relatório para impressão e especificar quando os relatórios deverão ser impressos.

Nota: quando um instrumento é aberto on-line, a impressora configurada para esse instrumento é lembrada independentemente do usuário. Quando um instrumento é aberto off-line, a impressora configurada é lembrada para o usuário desse instrumento.

Inserir Tabela de Relatórios

Inserir uma Tabela de Relatórios

Tabelas de relatórios podem ser inseridas em um relatório padrão. Os seguintes tópicos descrevem os tipos, a criação e a edição de tabelas de relatórios.

Veja também

Adicionar uma Tabela de Relatórios

Alterar um Parâmetro da Tabela de Relatórios

Editar a Aparência de uma Tabela de Relatórios

Mostrar os Dados do Relatório no Momento do Projeto

Excluir uma Tabela de Relatórios

Tipos de Tabelas de Relatórios

Adicionar uma Tabela de Relatórios

Há uma ampla variedade de tabelas de relatórios que podem ser adicionadas a um relatório padrão.

Para adicionar uma tabela de relatórios:

1. No editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse onde deseja inserir a tabela de relatórios e clique em **Inserir Relatório...** Uma lista de tabelas de relatórios disponíveis será exibida.

2. Selecione o tipo de relatório que deseja inserir dentre as seguintes opções

Relatório de Verificação da Linha de Base

Use esse comando para inserir uma tabela com informações de Verificação da Linha de Base.

Informações de Calibração

Use esse comando para inserir uma tabela contendo detalhes de sua calibração.

Tabela de Calibração

Use esse comando para inserir uma tabela contendo detalhes da calibração do pico em seu relatório.

Registro de Auditoria dos Dados

Use esse comando para inserir a tabela de registro de auditoria do arquivo de dados em seu relatório.

Tabela e Assinatura Eletrônicas

Use esse comando para inserir a tabela e assinatura eletrônica no relatório.

Colunas de Sequência Extra

Use esse comando para inserir uma tabela contendo nome e dados para coluna de sequência extra.

Relatório de Frações

Use esse comando para inserir uma tabela contendo informações do relatório de fração.

Relatório Genérico

Use esse comando para inserir um arquivo de tabela de relatórios criado por um programa do usuário. Uma caixa de diálogo será exibida para que você insira o nome para o arquivo de relatório genérico. Você também pode selecionar esse arquivo clicando no botão Abrir.

Para obter mais detalhes sobre o formato exigido para relatórios genéricos, consulte Sobre Tabelas de Relatórios Genéricos.

Registro de Atividades do Instrumento

Use esse comando para criar ou atualizar o modelo de exibição e impressão de Registros de Atividade do Instrumento (LogViewInstActReport.lrp).

Relatório de Configuração do Instrumento

Use esse comando para inserir um relatório de configuração do instrumento em seu relatório.

Relatório de Definição de Biblioteca

Use esse comando para inserir uma tabela contendo Definições de Biblioteca.

Relatório de Pesquisa da Biblioteca

Use esse comando para inserir um relatório de pesquisa da biblioteca.

Registro de Auditoria do Método

Use esse comando para criar ou atualizar o modelo para exibição e impressão do Registro de Auditoria do Método (LogViewMethodAuditReport.lrp).

Relatório de Método

Use esse comando para inserir um relatório contendo detalhes do método em seu relatório.

Relatório de Pureza

Use esse comando para inserir um relatório de pureza.

Relatório de Corridas

Use esse comando para inserir uma tabela contendo resultados de cromatografia em seu relatório.

Registro de Auditoria da Sequência

Use esse comando para inserir o registro de auditoria da sequência em seu relatório.

Relatório de Espectro

Use esse comando para inserir o relatório de espectro em seu relatório personalizado.

Alterar um Parâmetro da Tabela de Relatórios

Para alterar um parâmetro de relatório sem redefinir todo o relatório:

1. No cabeçalho da tabela de relatórios, clique com o botão direito do mouse e selecione **Alterar Parâmetro**.
2. O parâmetro selecionado no momento será realçado. Selecione o novo parâmetro na lista de parâmetros disponíveis
3. Especifique o número de casas decimais a serem exibidas (para parâmetros numéricos).
4. Digite o nome do parâmetro como você quer que ele apareça no **Cabeçalho da Coluna**.
5. Clique em **OK** para substituir o parâmetro selecionado pelo novo.

Nota: esse comando pode ser usado para substituir parâmetros existentes ou para atualizá-los com um novo nome de cabeçalho da coluna ou outro número de casas decimais.

O parâmetro atual será selecionado. Para alterá-lo, simplesmente clique em outro parâmetro na lista e depois clique em **OK**.

Editar a Aparência de uma Tabela de Relatórios

O clique com o botão direito do mouse dá acesso a comandos para modificar a tabela de relatórios.

Alterar Largura da Coluna

Para alterar a largura de uma coluna, mova o cursor sobre a borda da coluna até que linhas verticais duplas apareçam. Mantendo o botão do mouse pressionado, arraste a borda da coluna até a largura desejada.

Alterar Fontes

Para alterar uma fonte de texto na tabela, selecione o texto realçando-o com o mouse ou clique uma vez no campo. Em seguida, escolha um dos botões de formatação para alterar a formatação para a aparência desejada. Pode-se alterar a formatação tanto dos cabeçalhos de coluna como das áreas de dados da amostra.

Alterar Títulos/Cabeçalhos de Coluna

Cada parâmetro selecionado para o relatório será exibido com um título padrão. Você pode mudar os títulos das colunas editando-os na caixa **Cabeçalho da Coluna** na caixa de diálogo **clique do botão direito do mouse / Propriedades do Relatório**. Não é possível alterar os campos de dados, com a exceção das alterações de formatação.

Excluir uma tabela de relatórios

As tabelas de relatórios podem ser removidas rapidamente por meio de um clique com o botão direito do mouse dentro da tabela, seguido da seleção do comando **Excluir Tabela**.

Mostrar os Dados do Relatório no Momento do Projeto

Por padrão, o software exibe campos de modelo quando você cria tabelas de relatórios em um relatório padrão, sem que os dados reais sejam exibidos.

Para visualizar os dados reais ao editar um modelo, clique o botão direito em uma tabela do editor de relatórios e, em seguida, clique em **Exibir Dados no Momento do Projeto**. Quando essa opção é habilitada, os dados da tabela de relatórios sempre são exibidos no modelo durante a edição.

Excluir uma Tabela de Relatórios

Para excluir uma tabela:

1. Na janela do relatório, clique com o botão direito do mouse dentro da tabela e selecione o comando **Excluir Tabela**.
2. Clique em **Sim** para confirmar que deseja excluir a tabela do relatório.

Tipos de Tabelas de Relatórios

Tipos de Tabelas de Relatórios

Para inserir os seguintes relatórios no relatório padrão, clique com o botão direito no editor de relatórios e selecione **Inserir Relatório**.

Veja também

Inserir Informações de Calibração

Inserir um Relatório de Calibração

Inserir Assinaturas Eletrônicas

Inserir um Relatório de Métodos Filtrado

Inserir um Relatório Genérico

Inserir um Registro de Atividades do Instrumento

Inserir um Relatório de Configuração do Instrumento

Inserir um Relatório de Registro de Auditoria do Método

Inserir um Relatório de Método

Inserir um Relatório de Corridas

Modificar Informações do Relatório de Corridas

Inserir um Relatório de Calibração da Sequência

Inserir um Relatório Padrão de Verificação de Sequência

Inserir um Relatório de Duplicação da Sequência

Inserir um Relatório de Marca da Sequência

Inserir uma Tabela de Sequências (Personalizada)

Inserir uma Tabela de Sequências (Completa)

Inserir um Relatório de Adequação do Sistema

Inserir um Relatório de Frações

Inserir Informações de Calibração

Para inserir informações de calibração:

1. No editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse onde deseja inserir as informações de calibração e clique em **Inserir Relatório** seguido de **Informações de Calibração.**

2. Na caixa de diálogo **Configuração das Informações de calibração**, complete os seguintes campos:

- **Origem** - Selecione a origem das informações de calibração na lista suspensa **Fonte de Dados/Fonte de Calibração**. Escolha **Picos**, **Grupos** ou **Modelos** para selecionar a tabela de picos de calibração que será usada.
  Selecione **Modelo** somente se estiver criando ou editando um modelo de relatório de calibração. Se essa opção for selecionada para um relatório de método, as informações não serão impressas. Se você selecionar **Modelo**, as informações de calibração de todos os picos na calibração serão impressas automaticamente, conforme definido no arquivo **Calibration.brp** de modelo de relatório de calibração.

- **Detector**

- **Pico**

Inserir Assinaturas Eletrônicas

Para adicionar uma tabela e assinatura eletrônica, na janela de relatório personalizado, clique com o botão direito do mouse no relatório e selecione **Inserir Relatório** seguido de **Tabela de assinaturas eletrônicas**. Esse comando inserirá uma tabela contendo as assinaturas eletrônicas desse arquivo de dados em seu relatório.

Para excluir uma tabela e assinatura eletrônica, clique com o botão direito do mouse na tabela, selecione **Excluir Tabela** e clique em **OK**.

Inserir um Relatório de Métodos Filtrado

Um relatório de métodos filtrado é um relatório de método condensado que pode ser inserido em um relatório personalizado. O Layout do Relatório de Métodos Filtrado deve ser criado previamente para aparecer na lista de layouts de método filtrado.

Para inserir um Relatório de Métodos Filtrado:

1. Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse, selecione **Inserir Relatório** e, em seguida, selecione **Relatório de Métodos Filtrado**.
2. Selecione o layout do relatório de métodos filtrado a ser inserido. Um layout do relatório de métodos filtrado deverá estar disponível para que esse recurso possa ser utilizado. O layout de relatório selecionado será inserido em seu relatório assim que ele for selecionado.

Inserir um Relatório Genérico

Use esse comando para inserir um arquivo de tabela de relatórios criado por um programa do usuário.

Para inserir um relatório genérico:

1. No painel de navegação, selecione **Relatórios > Relatório Padrão**.
2. No editor de relatórios, clique com o botão direito e selecione **Inserir Relatório > Relatório Genérico**.
3. Uma caixa de diálogo será exibida para que você insira o nome para o arquivo de relatório genérico. Você também pode selecionar esse arquivo clicando no botão **Abrir**.

Para obter mais detalhes sobre o formato exigido para relatórios genéricos, consulte o tópico Tabelas de Relatórios Genéricos.

Inserir um Registro de Atividades do Instrumento

Para inserir uma cópia do registro de atividades do instrumento:

1. Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse no local onde deseja inserir o relatório, depois clique em **Inserir Relatório** seguido de **Registro de Atividades do Instrumento**.
2. Uma tabela para o registro de atividades do instrumento será inserida em seu relatório. Essa tabela é um espaço reservado do modelo e não exibirá o relatório de atividade do instrumento real até que o relatório personalizado seja impresso.

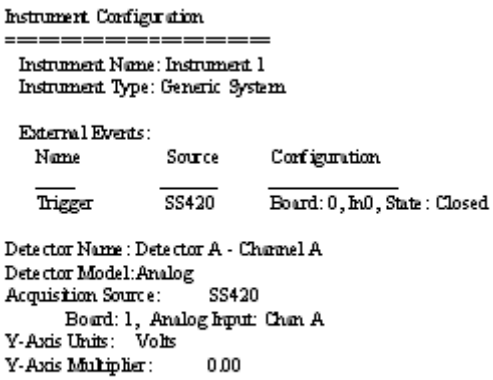
User	Logged	Activity
Demo	01\02\99 12:34:56	What was changed and how

Inserir um Relatório de Configuração do Instrumento

Para adicionar uma listagem da configuração do instrumento atual:

1. Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse no local onde deseja inserir o relatório, depois clique em **Inserir Relatório** seguido de **Relatório de Configuração do Instrumento**.

2. Uma tabela para o relatório de configuração do instrumento será inserida em seu relatório. As informações de configuração do instrumento são exibidas usando **Clique com o botão direito do mouse>Visualização de Impressão** ou quando o relatório é impresso.


Instrument Configuration
==========
Instrument Name: Instrument 1
Instrument Type: Generic System

External Events:

Name	Source	Configuration
Trigger	SS420	Board: 0, In0, State: Closed

Detector Name: Detector A - Channel A
Detector Model: Analog
Acquisition Source: SS420
Board: 1, Analog Input: Chan A
Y-Axis Units: Volts
Y-Axis Multiplier: 0.00

Inserir um Relatório de Registro de Auditoria do Método

Para inserir uma listagem dos métodos de registro de Auditoria atuais:

1. Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse no local onde deseja inserir o Relatório de Registro de Auditoria, depois clique em **Inserir Relatório** seguido de **Registro de Auditoria do Método**.

2. Um modelo de tabela para o relatório de registro de auditoria será inserido em seu modelo de relatório personalizado. Essa tabela é um espaço reservado do modelo e não exibirá o relatório de registro de auditoria real até que o relatório personalizado seja impresso.

User	Logged	Source	Activity	Reason
Demo	01\02\99 12:34:56	Source of change	What was changed and how	Why it was changed

Inserir um Relatório de Método

Para adicionar detalhes sobre o método atual ao seu relatório, selecione a opção **Relatório de Método** no menu do botão direito do mouse **Inserir Relatório**. Será exibida uma caixa de diálogo onde você poderá selecionar os itens do método que deseja incluir no relatório.

Use o menu suspenso para selecionar um ou mais canais cujas informações do método deverão ser exibidas. Em seguida, selecione os itens do método a serem exibidos clicando nas caixas de seleção adjacentes aos itens desejados. Ao concluir, clique em OK.

Um relatório de método pode ser excluído do modelo de relatório personalizado clicando com o botão direito do mouse dentro da tabela e selecionando o comando **Excluir Tabela**.

Inserir um Relatório de Corridas

Para adicionar detalhes de corrida a um relatório:

1. Na janela de relatório, clique com o botão direito do mouse onde deseja inserir as informações de corridas e clique em **Inserir Relatório** seguido de **Relatório de Corridas**.
2. Na caixa de diálogo, indique itens para o relatório.
3. Clique em **OK** para inserir a tabela de detalhes da corrida em seu relatório.

Fonte de Dados	Selecione a Fonte de Dados (dados atuais ou arquivo de dados armazenados) e o Canal cujas informações deseja exibir.
Relatório	Use as caixas de seleção para selecione os picos que serão incluídos no relatório. **Picos Nomeados** Selecione **Todos** se quiser incluir no relatório todos os picos calibrados, detectados ou não. Selecione **Só detectados Apenas** se quiser incluir no relatório somente os picos calibrados detectados na amostra. **Picos Não Nomeados** Clique aqui se quiser incluir picos não calibrados em seu relatório. Não é criada uma tabela separada. Quando um pico indefinido é parte de um grupo, o nome do grupo é usado no campo do nome do pico no relatório. **Grupos**

Clique aqui se quiser incluir grupos definidos em seu relatório.

Totais

Clique aqui se quiser incluir totais nas colunas numéricas do seu relatório.

Parâmetros Disponíveis

Uma lista dos parâmetros possíveis para o relatório é exibida nessa caixa. Para adicionar um dos parâmetros ao relatório, clique duas vezes nele, ou clique no parâmetro para selecioná-lo e depois clique na seta verde para movê-lo para a caixa **Relatar os seguintes parâmetros**. Você pode selecionar mais de um parâmetro ao mesmo tempo mantendo pressionada a tecla **Shift** (para selecionar parâmetros contíguos)ou a tecla **Ctrl** (para selecionar parâmetros não contíguos.)

Casas Decimais

Para cada parâmetro numérico, pode-se inserir o número de casas decimais a serem exibidas. Clique no parâmetro na caixa **Relatar os seguintes parâmetros** e digite o número de casas decimais a serem exibidas para esse parâmetro. O número padrão de casas decimais é exibido para todos os parâmetros numéricos.

Cabeçalho da Coluna

Use essa caixa para inserir ou editar o título que aparecerá na parte superior da coluna.

Clique em **OK** para inserir a tabela de relatórios em seu relatório personalizado no local atual do cursor. A tabela de relatórios aparecerá na página do relatório personalizado exibindo os cabeçalhos de coluna e os espaços reservados de dados.

Modificar as Informações do Relatório de Corridas

Depois de inserir um Relatório de Corridas em seu relatório, você pode editar essas informações.

Para editar as informações do relatório de corridas:

1. Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse na tabela de relatórios de corridas e selecione **Propriedades do Relatório**.
2. Na caixa de diálogo, redefina ou adicione itens ao relatório.
3. Quando concluir, clique em **OK**.

Inserir um Relatório de Calibração da Sequência

Para adicionar um relatório de calibração da sequência:

1. Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse no local onde deseja inserir o relatório, depois clique em **Inserir Relatório** seguido de **Calibração da Sequência**.
2. Um modelo de tabela será inserido em seu relatório da sequência para o relatório de calibração da sequência. Observe que essa tabela contém apenas informações de espaços reservados, não dados do seu sistema.

Channel A						
Compound	Old RT (Min)	New RT (Min)	RF Average	RF %RSD	RF %RSD Limit	Status
Peak 1	44.350	43.758	231.123456789	21.123456789	25.00	Passed
Peak 2	44.350	43.758	231.123456789	21.123456789	20.00	FAILED

Nota: para que o relatório da sequência contenha informações do Relatório de Calibração válidas quando for impresso, o método e a sequência devem ser configurados para criar um relatório de calibração da sequência. Certifique-se de que sua **Tabela de Picos do Método** contenha valores de Limite de DPR % de RF para picos em sua calibração. Além disso, a tabela de sequências deverá conter Tipos de Corrida corretos para **Iniciar Calibração**, **Parar Calibração** e **Imprimir Calibração** nas corridas apropriadas da sequência.

Inserir um Relatório Padrão de Verificação de Sequência

Se quiser que seu relatório da sequência inclua um Relatório Padrão de Verificação de Sequência:

1. Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse, selecione **Inserir Relatório** e clique em **Padrão de Verificação de Sequência**.

2. Ao ser solicitado, indique se deseja incluir nomes de arquivo Totalmente Qualificados. Marque a caixa se quiser incluir caminhos completos nos nomes de arquivo.

3. Um modelo de tabela será inserido em seu relatório para o relatório padrão de verificação de sequência. Observe que essa tabela contém apenas informações de espaços reservados, não dados do seu sistema.

File	Sample ID	Acquired			
D:\CHROM\Data\Multical.001	Multi 1	1/30/97 9:28:38 Monday			
Channel A					
Compound	Expected Conc.	Actual Conc.	%RD Actual	%RD Limit	Status
Peak 1	24.000	25.232	4.883	5.000	Passed
Peak 2	24.000	25.232	4.883	4.000	FAILED

Para que o relatório da sequência contenha informações padrão de verificação válidas quando for impresso, o método e a sequência devem ser configurados para criar um relatório padrão de verificação de sequência.

Na Tabela de Picos do Método, a concentração do composto na amostra de verificação é especificada como o valor Verificar Conc Padrão. O percentual limite da diferença relativa entre a quantidade real e a quantidade calculada é especificado como Verificar %RD Padrão.

Na Sequência, selecione Padrão de Verificação de CQ na coluna Tipo de Corrida das amostras que serão usadas como padrão de verificação do CQ.

Depois que as amostras de verificação do CQ forem analisadas, o Relatório do Padrão de Verificação do CQ será impresso mostrando o valor de concentração esperado com base na Tabela de Picos, a concentração calculada, o percentual calculado de diferença relativa para a amostra, o percentual limite de diferença relativa para a Tabela de Picos e o status Aprovado/Reprovado do resultado.

É mostrado a seguir um exemplo de um relatório do Padrão de Verificação do CQ.

Relatório do Padrão de Verificação do CQ

File	Sample ID	Acquired
C:\datasystem\data\multilevel002.dat	Multilevel Calibration Level 2	2/18/97 12:58:38 PM

Channel A

Compound	Expected Conc.	Actual Conc.	%RD Actual	%RD Limit	Status
Peak1	25.000	20.000	20.000	25.000	Passed
Peak2	15.000	6.000	60.000	25.000	FAILED
Peak3	25.000	20.000	20.000	25.000	Passed
Peak4	25.000	20.000	20.000	25.000	Passed

A seguinte equação é usada nesse relatório Padrão de CQ:

$$\%RD = \frac{\text{Abs} \mid \text{Conc. Esperada} - \text{Conc. Real} \mid * 100}{\text{Conc. Esperada}}$$

Inserir um Relatório de Duplicação da Sequência

1. Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse, selecione **Inserir Relatório** e clique em **Duplicação da Sequência**.
2. Ao ser solicitado, indique se deseja incluir nomes de arquivo Totalmente Qualificados. Marque a caixa se quiser incluir caminhos completos nos nomes de arquivo.
3. Um modelo será inserido em seu relatório para o relatório de duplicação da sequência. Observe que essa tabela contém apenas informações de espaços reservados, não dados do seu sistema.

Type	File	Sample ID	Acquired			
Dup 1	D:\CHROM\ Data\Multical .001	Multi 1	1/30/97 9:28:38 Monday			
Dup 2	D:\CHROM\ Data\Multical .001	Multi 1	1/30/97 9:28:38 Monday			
Channel A						
Compound	Dup 1 Conc.	Dup 2 Conc.	Mean Conc.	%RD Actual	Dup %RD Limit	Status
Peak 1	15.000	20.000	17.500	28.571	30.000	Passed
Peak 2	15.000	20.000	17.500	28.571	25.000	FAILED

Para que o relatório da sequência contenha informações válidas do relatório duplicado quando for impresso, o método e a sequência devem ser configurados para criar um relatório de duplicação da sequência.

Na Tabela de Picos do Método, o percentual de limite da diferença relativa das concentrações calculadas entre amostras duplicadas é inserida como o valor de RD duplicada.

Na Sequência, selecione Duplicação na coluna Tipo de Corrida das amostras de interesse. Para cada duplicação, você deverá também indicar o **Nível de Duplicação** dessa amostra. (Por exemplo, Duplicação 1 e Duplicação 2.)

Depois que as Amostras duplicadas são analisadas, o Relatório Duplicado de CQ é impresso, mostrando as concentrações calculadas das duas amostras, o valor médio das concentrações, o percentual calculado da diferença relativa entre as duas amostras, o percentual dos limites de diferença relativa inseridos na Tabela de Picos e o status Aprovado/Reprovado dos resultados.

É mostrado a seguir um exemplo de um relatório Duplicado de CQ.

Relatório Duplicado

Type	File	Sample ID	Acquired
Dup 1	C:\datasystem\data\multical001.dat	Multilevel Calibration Level 1	11/26/90 8:48:53 PM
Dup 2	C:\datasystem\data\multical002.dat	Multilevel Calibration Level 2	11/26/90 8:49:09 PM

Channel A

Compound	Dup 1 Conc.	Dup 2 Conc.	Mean Conc.	%RD Actual	Dup %RD Limit	Status
Peak1	10.000	20.000	15.000	66.667	50.000	FAILED
Peak2	5.000	6.000	5.500	18.182	60.000	Passed
Peak3	15.000	20.000	17.500	28.571	50.000	Passed
Peak4	10.000	20.000	15.000	66.667	50.000	FAILED

As seguintes equações são usadas nesse relatório Duplicado de CQ:

$$\text{Conc. Média} = \frac{\text{Conc. Dup. 1} + \text{Conc. Dup. 2}}{2}$$

$$\text{DR\%} = \frac{|\text{Conc. Dup. 2} - \text{Conc. Dup. 1}| * 100}{\text{Conc. Média}}$$

Inserir um Relatório de Marca da Sequência

Para adicionar um relatório de marca da sequência:

1. Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse e, em seguida, clique em **Inserir Relatório** seguido de **Spike da Sequência**.

2. Selecione o botão **Marcar / Desmarcar** caso o relatório deva abranger uma amostra marcada seguida de uma amostra não marcada. Selecione o botão **Spike 2 de 2** se quiser gerar um relatório do Spike de CQ em que a amostra não marcada é seguida pela primeira amostra marcada e depois pela segunda amostra marcada.

3. Marque a caixa **Arquivos completamente qualificados** se quiser incluir os caminhos completos nos nomes de arquivo.

4. Clique em **OK**. Um modelo de tabela será inserido em seu relatório para o relatório de Marca da sequência. Observe que essa tabela contém apenas informações de espaços reservados, não dados do seu sistema.

Type	File	Sample ID	Acquired				
UnSpiked	D:\CHROM\Data\Multical.001	Multi 1	1/30/97 9:28:38 Monday				
Spiked	D:\CHROM\Data\Multical.001	Multi 1	1/30/97 9:28:38 Monday				
Channel A							
Compound	Unspiked Conc.	Spiked Amount	Spike Conc.	Spike Recovery	Low Limit	High Limit	Status
Peak 1	30.094	30.000	40.034	33.133	25.000	45.000	OK
Peak 1	30.094	30.000	40.034	33.133	45.000	55.000	Low
Peak 1	30.094	30.000	40.034	33.133	5.000	25.000	High

Para que o relatório da sequência contenha informações de marca válidas quando for impresso, o método e a sequência devem ser configurados para criar um relatório de marca da sequência.

Na Tabela de Picos do Método, são criadas entradas para Valor de Marca 1 e Valor de Marca 2 (caso duas amostras marcadas devam ser executadas), Limite Inferior de Marca e Limite Superior de Marca. Os valores de limite de marca Inferior e Superior são inseridos como uma recuperação percentual usada para determinar se o teste foi aprovado ou reprovado.

Na Sequência, uma amostra deve ter um Tipo de Corrida **não marcado**. Essa é a amostra que não é marcada. Essa amostra deve ser seguida pela amostra **marcada**. Essa amostra é idêntica à amostra **não marcada**, exceto que foi marcada com o(s) componente(s) padrão.

Depois que as amostras não marcada e marcada são analisadas, um relatório é impresso mostrando a concentração calculada do(s) composto(s) na amostra não marcada, as quantidades especificadas para as quantidades marcadas, as concentrações calculadas para as amostras marcadas e os percentuais de quantidades marcadas recuperadas. O valor da porcentagem de recuperação é comparado aos valores de Limite Inferior e Superior e o status dos resultados (Baixo, Alto ou OK) é impresso.

O exemplo a seguir mostra um relatório do Spike de CQ (modelo Spike1.brp), onde uma amostra não marcada é seguida por uma amostra marcada.

Relatório de Marca

Type	File	Sample ID	Acquired
UnSpiked	C:\datasystem\data\multilevel003.dat	Multilevel Calibration Level 3	11/26/90 8:49:21 PM
Spiked	C:\datasystem\data\multilevel004.dat	Multilevel Calibration Level 4	11/26/90 8:49:34 PM

Channel A

Compound	Unspiked Conc.	Spiked Amount	Spike Conc.	Spike Recovery	Low Limit	High Limit	Status
Peak1	30.000	10.000	40.000	100.000	90.000	110.000	OK
Peak2	7.000	1.500	8.000	66.667	75.000	125.000	OK
Peak3	25.000	4.500	30.000	111.111	90.000	110.000	OK
Peak4	30.000	10.000	40.000	100.000	90.000	110.000	OK

A seguinte equação é usada nesse relatório do Spike de CQ:

$$\text{Recuperação de Spikes} = 100 \times \frac{\text{Conc. Marcada} - \text{Conc. Não Marcada}}{\text{Quant. Marcada}}$$

Inserir uma Tabela de Sequências (Personalizada)

A Tabela de Impressão da Sequência contém as informações de todas as linhas da sequência.

Para adicionar uma Tabela de Impressão da Sequência a um relatório:

1. No editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse onde deseja inserir a tabela e clique em **Inserir Relatório** seguido de **Tabela de Sequências (Personalizada)**.
2. Nas **Propriedades** exibidas, marque ou desmarque as caixas de seleção dos itens que deseja incluir no relatório. Clique em **Selecionar Tudo** para marcar rapidamente todas as caixas de seleção ou clique em **Limpar Tudo** para desmarcar rapidamente todas as caixas de seleção. Quando terminar, clique em **OK** para inserir a tabela no relatório.
3. Para modificar o relatório, na área da tabela de relatórios, clique com o botão direito do mouse para acessar o menu de opções do relatório. Clique no comando **Texto** para mudar a fonte e a justificação do texto no relatório. Clique em **Exibir Dados no Momento do**

Projeto para que a tabela seja preenchida com dados da sequência atual enquanto é projetada. Clique em **Excluir Tabela** para remover a tabela do relatório. Clique em **Propriedades** para abrir a caixa de diálogo de propriedades da tabela, onde você pode mudar o conteúdo da tabela.

4. Para visualizar a aparência do relatório quando for impresso, clique no botão **Visualização de Impressão** na parte superior da janela de edição.

Inserir uma Tabela de Sequências (Completa)

A Tabela de Sequência Completa de Impressão contém as informações de todas as linhas e colunas da sequência.

Para adicionar uma Tabela de Impressão da Sequência a um relatório:

1. Na janela relatório, clique com o botão direito do mouse onde deseja inserir a tabela e clique em **Inserir Relatório** seguido de **Tabela de Sequências (Completa)**.

2. Para modificar o relatório, na área da tabela de relatórios, clique com o botão direito do mouse para acessar o menu de opções do relatório. Clique no comando **Texto** para mudar a fonte e a justificação do texto no relatório. Clique em **Exibir Dados no Momento do Projeto** para que a tabela seja preenchida com dados da sequência atual enquanto é projetada. Clique em **Excluir Tabela** para remover a tabela do relatório. Clique em **Propriedades** para abrir a caixa de diálogo de propriedades da tabela, onde você pode mudar o conteúdo da tabela.

3. Para visualizar a aparência do relatório quando for impresso, clique no botão **Visualização de Impressão** na parte superior da janela de edição.

Inserir um Relatório de Adequação do Sistema

Para adicionar um relatório de Adequação do Sistema ao seu relatório:

1. Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse e, em seguida, clique em **Inserir Relatório** seguido de **Adequação do Sistema**.

2. Um modelo de tabela será inserido em seu relatório para o relatório de Adequação de Sistema da sequência. Observe que essa tabela contém apenas informações de espaços reservados, não dados do seu sistema.

		SYSTEM IS NOT SUITABLE					
Channel A	Compound	Parameter	Min	Max	%RSD		
	Peak 1	Area	1234.23	1468.99	0.094		
Sample ID	Compound	Parameter	Average	Low	High	%RSD	Status
	Peak 1	Area	1287.84	1178.23	1397.45	0.067	
Samp 1		1397.45					Passed
Samp 2		1178.23		FAILED			FAILED
Channel A	Sample ID	Test	Start(Min)	Stop(Min)	Threshold	Result	Status
	Samp 1	Noise	3.2	4.2	234.34	232.23	Passed

Para que o relatório da sequência contenha informações de padrão de verificação válidas quando for impresso, o método e a sequência devem ser configurados para criar um relatório de Adequação de Sistema da sequência. Para obter mais detalhes sobre como fazer isso, consulte a seção **Adequação do Sistema**.

Inserir um Relatório de Fração

Na janela do editor de relatórios, clique com o botão direito do mouse no local onde deseja inserir o relatório e selecione **Inserir Relatório > Relatório de Fração**. Será inserida no relatório uma tabela para o relatório de fração. A seguir, está um exemplo de um Relatório de Fração.

Fraction Report

Sample ID:	
Data File:	C:\projects\Elite\Exe\Enterprise\Projects\Default\Data\4-7-2011 3-14-41 PM.dat
Method File:	C:\Projects\Elite\Exe\Enterprise\Projects\Default\Method\VBSample.met
User Name:	System
Acquisition Time:	4/7/2011 3:14:48 PM
Fraction Data Points:	4
Instrument Name:	VB Sample

Fraction Number	Vial Number	Start Time (min.)	Stop Time (min.)
1	1	0.00	0.25
2	2	0.25	0.49
3	3	0.49	0.74
4	4	0.74	0.98

Relatórios Avançados

Sobre Relatórios Avançados

O recurso Relatórios Avançados usa um "formato de planilha" para facilitar a criação de relatórios personalizados complexos. São fornecidos vários modelos de relatórios avançados que você pode modificar facilmente de acordo com as necessidades do seu aplicativo. (Os relatórios resumidos da sequência, por exemplo, são criados usando um modelo de relatório avançado.) Além disso, é possível criar modelos de relatório completamente personalizados que extraem praticamente qualquer dado ou informação de arquivo e aplicam funções matemáticas a ele. Por exemplo, pode-se criar relatórios que combinam dados de pico de múltiplos canais em um único relatório. Ou pode-se extrair os resultados de uma sequência de corridas e calcular uma análise estatística neles.

Cada relatório avançado começa como um modelo de relatório avançado. Tendo sido criado e salvo, o modelo de relatório pode ser usado para criar e imprimir relatórios de corridas de sequências ou para reprocessamento da sequências indicando o modelo de relatório em Tipo de Corrida na corrida da sequência.

Nota: Para exportar relatórios avançados, uma impressora deve estar configurada no computador que realiza a exportação.

Veja também

Criar um Modelo de Relatório Avançado

Formatar o Estilo da Célula para Relatórios Avançados

Definir um Cabeçalho/Rodapé de Relatório Avançado

Adicionar um Gráfico a um Relatório Avançado

Adicionar Cor a Células em um Relatório Avançado

Alterar Propriedades da Grade de Relatório Avançado

Adicionar Tabela usando o Assistente de Tabela

Adicionar uma Função Usando o Assistente de Funções

Registro de Auditoria de Relatório Avançado

Ver o log do Registro de Auditoria dos Relatórios Avançados

Salvar o Relatório Avançado como Modelo

Criar um Modelo de Relatório Avançado

Para criar um novo modelo de relatório avançado:

1. No painel de Navegação, selecione **Relatórios > Relatório Avançado**. Um modelo de planilha em branco será exibido.
2. Defina o novo modelo inserindo séries de dados, fórmulas e texto nas células da planilha. Também é possível definir o cabeçalho e o rodapé, inserir gráficos de dados e formatar as células. Consulte Sobre Relatório Avançado para links a esses tópicos.
3. Selecione **Arquivo > Salvar Como> Relatório Avançado**. Na caixa de diálogo **Salvar Arquivo de Relatório Avançado Como**, navegue para a pasta de modelos. Insira um **Nome do arquivo** e selecione **Salvar**.

Formatar o Estilo da Célula para Relatórios Avançados

Existe uma ampla variedade de maneiras de formatar automaticamente o estilo de uma ou mais células selecionadas.

1. Escolha a célula a ser formatada e selecione o botão **Estilo da Célula**

.
2. Na caixa de diálogo **Estilo da Célula**, selecione uma **Categoria**. Dependendo da sua seleção, campos à direita podem tornar-se ativos para definir mais precisamente o estilo da célula.
3. Em **Casas decimais**, insira o número de casas decimais a serem exibidas para dados numéricos.
4. Selecione uma das seguintes opções:

- **Flutuante** - Se essa opção for selecionada, texto ou dados numéricos que excedam a largura da célula "flutuarão" automaticamente para a próxima célula (se estiver vazia). Se essa opção estiver em **Desativado**, o texto ou os dados que ultrapassarem os limites da largura da célula serão truncados ou exibidos com um "indicador de transbordamento" selecionado.
- **Quebrar Linha** - Quando esse botão é selecionado, as informações inseridas em uma célula são "quebradas" para a próxima linha quando atingem a extremidade da célula.
- **Normal** - Quando esse botão é selecionado, as informações são exibidas no modo padrão.

5. Na caixa suspensa **Indicador de transbordamento**, selecione a maneira como as células que transbordarem são exibidas: sem indicador, com reticências (por exemplo, **transbordamento de célula é...**) ou com sinal de libra (#########).
6. Selecione **OK.**

Definir um Cabeçalho/Rodapé de Relatório Avançado

Para definir o cabeçalho e/ou rodapé do relatório, clique na planilha com o botão direito do mouse e selecione o comando **Cabeçalho/Rodapé...**. Será exibida uma caixa de diálogo para que você defina o conteúdo do cabeçalho e do rodapé.

Clique em um dos campos das colunas "Alinhado à Esquerda", "Centralizado" ou "Alinhado à Direita". Digite texto que aparecerá com o alinhamento indicado ou insira códigos de campo para inserção automática de itens como data, hora e números de página. Depois de selecionar uma célula, pode-se alterar a fonte clicando no botão **Fonte...** e selecionando a fonte desejada e as suas características.

Nota: não há suporte a cores de fonte nas seções de cabeçalho e de rodapé.

Códigos de campo que podem ser inseridos em um cabeçalho ou rodapé:

$F Nome do Modelo de Relatório

$P Número da página

$N Número de páginas

$SEQNUM Número da página da sequência

$d Data – você pode especificar a formatação da data com um parâmetro adicional, como, por exemplo, $D{%h:%m}

Códigos de formato de data:

%a Nome do dia da semana abreviado

%A Nome do dia da semana por extenso

%b Nome do mês abreviado

%B Nome do mês por extenso

%c Representação de data e hora apropriada para a localidade

%d Dia do mês como um número decimal (01 - 31)

%H Hora em formato de 24 horas (00 - 23)

%I Hora em formato de 12 horas (01 - 12)

%j Dia do ano como um número decimal (001 - 366)

%m Mês como um número decimal (01 - 12)

%M Minutos como um número decimal (00 - 59)

%p Indicador A.M./P.M. para relógio de 12 horas

%S Segundos como um número decimal (00 - 59)

%U Semana do ano como um número decimal, com domingo como o primeiro dia da semana (00 - 51)

%w Dia da semana como um número decimal (0 - 6; domingo é 0)

%W Semana do ano como um número decimal, com segunda-feira como o primeiro dia da semana (00 - 51)

%x Representação padrão da Data

%X Representação padrão da Hora

%y Ano sem século, como um número decimal (00 - 99)

%Y Ano com século, como um número decimal

%z, %Z Nome ou abreviação do fuso horário; nenhum caractere se o fuso horário for desconhecido

Distância do quadro

Os valores especificados aqui determinam a que distância da borda do papel o cabeçalho e o rodapé serão posicionados. Esse valor é independente da margem do papel e, se for definido incorretamente, pode provocar sobreposição com o corpo do relatório.

Para visualizar cabeçalhos e rodapés:

Quando você clicar no botão **OK**, o cabeçalho e rodapé definidos passarão a fazer parte do seu modelo, embora não sejam visíveis. Para exibir o cabeçalho e o rodapé, clique no botão **Visualização de Impressão** e amplie para ver os detalhes.

Adicionar um Gráfico a um Relatório Avançado

Para adicionar um gráfico a um relatório avançado:

1. Abra o modelo de relatório avançado.
2. No editor de modelo de relatório avançado, clique com o botão direito do mouse onde deseja adicionar o gráfico e, em seguida, clique em **Inserir** seguido de **Gráfico**.
3. Conclua os parâmetros e clique em **OK** para inserir o gráfico.

Título do Gráfico	Digite um título que aparecerá na parte superior do seu gráfico.
Fonte	Clique nesse botão para alterar a fonte usada no título do gráfico.
Estilo do Gráfico	Selecione o estilo do gráfico na lista suspensa.
Célula Inicial	Especifique a célula na qual os dados iniciais estão localizados (a primeira célula de uma série, por exemplo). Em muitos casos, o

	local da célula que deseja especificar corresponde à célula onde a fórmula da série de dados está definida.
Conjunto de Dados	Selecione se a série de dados estende-se verticalmente ou horizontalmente na planilha.
Grupos	Escolha **Único** para exibir apenas uma série de dados ou **Múltiplo** para exibir mais de uma série de dados. Por exemplo, em um relatório de resumo da sequência em que a tabela de resumo contenha áreas de quatro picos em cinco corridas, você escolheria Único para representar graficamente as áreas de um pico ou Múltiplo para representar graficamente áreas dos quatro picos.
Títulos de Grupo	Digite uma referência da célula para ser usada em títulos (legendas) da série de dados representada graficamente ou digite o texto a ser utilizado.
Mostrar gráf. exemplo	Marque essa caixa caso queira exibir um exemplo do gráfico em sua planilha de relatório avançado. (Nota: esses não são os dados reais. Para exibir os dados reais no gráfico, clique no botão de visualização de impressão.)

Adicionar uma Cor de Preenchimento a Células em um Relatório Avançado

Use a ferramenta de balde de tinta para adicionar cor a células em um relatório avançado.

Para adicionar uma cor de preenchimento em células:

1. Abra um relatório avançado.
2. Selecione as células que deseja colorir.
3. Selecione uma cor usando a seta próximo ao ícone do balde de tinta .

Alterar Propriedades da Grade de Relatório Avançado

Para formatar as características gerais do seu relatório avançado, clique com o botão direito do mouse na planilha e selecione **Propriedades da Grade.** Um diálogo no qual será possível personalizar o tamanho da grade, as margens, a ordem de página e o estilo de célula padrão aparecerá.

Tamanho da Grade	Pode-se limitar o tamanho da planilha de relatório para torná-la mais administrável.
Número de linhas	Para limitar a quantidade de linhas em seu relatório, digite um número aqui.
Número de colunas	Digite o número de colunas para seu relatório.
Auto-dimensionar ao gerar relatórios	Quando essa opção é selecionada, a grade da planilha é reduzida automaticamente para incluir apenas o número de linhas e colunas necessárias para o relatório durante a impressão. Se essa opção não for selecionada, linhas e colunas vazias serão impressas.
Ordem de Página	Selecione a ordem de impressão das páginas.
Margens	Especifique as margens da página nos campos indicados. Isso estabelecerá as margens usadas para imprimir o corpo do relatório avançado. Observe que essas margens são independentes da configuração de “distância do quadro” do cabeçalho e rodapé.
Estilo de Célula Padrão	Selecione a configuração padrão de estilo da célula. Qualquer célula ou intervalo de células pode ser alterado independentemente dessa configuração.
Flutuante	Se essa opção for selecionada, texto ou dados numéricos que excedam a largura da célula “flutuarão” automaticamente para a próxima célula (se estiver vazia). Se essa opção estiver em **Desativado**, o texto ou os dados que ultrapassarem os limites da largura da célula serão truncados ou exibidos com um

	"indicador de transbordamento" selecionado.
Indicador de transbordamento	Selecione como as células que transbordam devem ser exibidas: sem indicador, com reticências (por exemplo, **transbordamento de célula é...**) ou com sinal de libra (#########).
Quebrar Linha	Quando esse botão é selecionado, as informações inseridas em uma célula são "quebradas" para a próxima linha quando atingem a extremidade da célula.
Normal	Quando esse botão é selecionado, as informações são exibidas no modo padrão.

Adicionar Tabela usando o Assistente de Tabela

Use o Assistente de Tabela para criar tabelas em relatórios avançados.

1. No painel de navegação, selecione **Relatórios > Relatório Avançado**.
2. Selecione a célula na qual deseja que sua tabela esteja localizada e selecione o botão **Assistente de Tabela** para iniciar o assistente.
3. Na caixa de diálogo **Tipo** de **Tabela**, escolha o tipo de tabela dentre os disponíveis e selecione **Próximo**.
4. Na caixa de diálogo **Parâmetros**, selecione **Picos** ou **Grupos** na lista suspensa.
5. Selecione um parâmetro na lista à esquerda clicando duas vezes nele. Pode-se selecionar quantos parâmetros desejar. Se o parâmetro for numérico, pode-se inserir um valor em Precisão ou aceitar o valor apresentado.
6. Selecione o **Índice do Traço** do canal que deseja incluir (se estiver usando um arquivo multicanal), sendo 1 = primeiro traço, 2 = segundo traço, etc e selecione **Próximo**.
7. Na caixa de diálogo **Tipos**, selecione os tipo de picos ou de grupos a serem incluídos no seu resumo marcando as caixas e selecionando **Próximo**.
8. Na caixa de diálogo **Parâmetros de Corrida**, clique duas vezes em cada parâmetro que deseja incluir para cada corrida na tabela de resumo e selecione **Próximo.**

9. Na caixa de diálogo **Direção da Corrida**, escolha em qual direção deseja que as corridas sejam exibidas na tabela e selecione **Próximo.**

10. Na caixa de diálogo **Estatísticas**, selecione **Sim** caso deseje incluir uma seção de estatísticas na sua tabela. As estatísticas calculadas incluem Mínimo, Máximo, Média, Padrão Desvio e DPR %.

11. Selecione **Concluir**. Uma tabela resumida da sequência será inserida no Relatório Avançado, no local da célula atual.

Adicionar Função Usando o Assistente de Funções

Adicionar uma Função Usando o Assistente de Funções

Funções inserem dados no relatório extraindo a informação desejada do sistema de dados. O Assistente de Funções permite selecionar o tipo de informação a ser exibida e como ela aparecerá no relatório. O resultado de suas escolhas é transformado em uma fórmula (uma combinação de funções) que é colocada na célula selecionada da planilha.

Para usar o Assistente de Funções:

1. No painel de navegação, selecione **Relatórios > Relatório Avançado**.

2. Selecione a célula na qual deseja que sua tabela esteja localizada e selecione o botão **Assistente de Funções** .

3. O Assistente de Funções avançará passo a passo através das seguintes caixas de diálogo para ajudá-lo a definir as informações que serão inseridas na célula selecionada.

Veja também

Função de Seleção do Assistente de Funções

Dados Dinâmicos do Assistente de Funções

Direção de Dados do Assistente de Funções

Tipos de Assistente de Funções

Identificação do Assistente de Funções

Fórmulas e Funções de Relatórios Avançados

Referência Funcional

Função de Seleção do Assistente de Funções

As opções do Assistente de Funções mudarão dependendo das suas seleções nessa caixa de diálogo.

1. Na caixa de diálogo **Selecionar Função** em **Fonte de Dados**, selecione **Arquivo de Sequência** ou **Arquivo de dados atual**.
2. Selecione uma categoria das seguintes opções:

- **Dados** - Dados e parâmetros disponíveis em um arquivo de dados
- **Grupo** - Informações da tabela do grupo
- **Instrumento** - Parâmetros do instrumento (ID, Nome, Nome do Usuário)
- **Pico** - Informações da tabela de picos
- **Projeto** - Nome do projeto e caminhos associados
- **Sequência** - Nomes de sequência, números de corrida e tipos de corrida

3. Selecione uma função da lista à direita. Descrições detalhadas de todas as funções podem ser encontradas em Relatório Avançado de Fórmulas e Funções e Referência Funcional.
4. Selecione **Repetindo fórmula**, caso a fórmula deva ser repetida para uma série de picos ou de arquivos, e selecione **Próximo**.

Veja também

Dados Dinâmicos do Assistente de Funções

Direção de Dados do Assistente de Funções

Tipos de Assistente de Funções

Identificação do Assistente de Funções

Dados Dinâmicos do Assistente de Funções

Essa tela só aparece se você tiver selecionado a caixa **Repetindo fórmula**. As perguntas feitas aqui permitem especificar a fonte dos dados para fórmulas repetidas.

Quando o Relatório Avançado é usado para exibir dados dinâmicos, como dados de uma sequência de corridas ou picos de cada corrida em que o número de picos pode variar, o relatório usa Funções Dinâmicas de Dados. Esse tipo de função permite que o relatório seja expandido ou contraído ao repetir a função com todos os dados que satisfizerem os requisitos especificados.

1. Na caixa de diálogo **Dados Dinâmicos**, selecione uma das opções:

- **Repetir fórmula para todas as corridas em uma sequência** - Selecione essa caixa para extrair os dados indicados de todas as corridas da sequência. Por exemplo, se a função selecionada é a área de pico de um arquivo de sequência, essa opção lhe permitiria selecionar um pico de um traço da sequência e, em seguida, informaria essa área para cada corrida na sequência.

- **Repetir fórmula para todos os picos ou grupos** - Essa opção extrai a informação indicada para todos os picos ou para todos os grupos da corrida da sequência selecionada. (Uma solicitação do número da corrida da sequência é exibida quando essa opção é selecionada.) Por exemplo, se a função selecionada é a área de pico de um arquivo de sequência, essa opção extrai a área de todos os picos ou grupos da corrida da sequência selecionada.

- **Repetir fórmula para todas as corridas em uma sequência** e Repetir para todos os picos ou grupos - Caso tenha selecionado **ambas** as opções, a fórmula será repetida para todas as corridas e para todos os picos/grupos da sequência. Por exemplo, se a função selecionada é a área de pico de um arquivo de sequência, a combinação dessas opções produziria uma listagem de áreas de todos os picos em cada corrida da sequência.

2. Selecione **Próximo.**

Veja também

Função de Seleção do Assistente de Funções

Direção de Dados do Assistente de Funções

Tipos de Assistente de Funções

Identificação do Assistente de Funções

Direção de Dados do Assistente de Funções

Na caixa de diálogo **Direção dos Dados**, selecione como deseja que a série de dados seja exibida:

- **Ao longo** da linha

- **Abaixo** de uma coluna

Veja também

Função de Seleção do Assistente de Funções

Dados Dinâmicos do Assistente de Funções

Tipos de Assistente de Funções

Identificação do Assistente de Funções

Tipos de Assistente de Funções

Essa caixa de diálogo permite selecionar informações de picos ou de grupos.

Picos

Em uso

Selecione as caixas dos tipos de picos que você pretende usar.

Índice do Traço

Selecione o número do traço (em arquivos multicanal), sendo o primeiro traço = 1, o segundo traço = 2, etc.

Grupos

Quando você selecionar grupos para gerar os dados, as seguintes opções aparecerão.

Em uso

Selecione o tipo de grupo a ser relatado. Suporte para grupos de intervalos calibrados e de pico nomeado. Para grupos de Intervalos calibrados, se você tiver definido o grupo para calcular concentrações de picos não nomeados, poderá incluí-los no seu relatório de grupos selecionando o botão apropriado.

Índice do Traço

Selecione o número do traço (em arquivos multicanal), sendo o primeiro traço = 1, o segundo traço = 2, etc.

Quando concluir essa caixa de diálogo, clique em **Concluir**. A função definida pelas suas respostas ao Assistente de Funções será inserida na célula selecionada atualmente.

Veja também

Função de Seleção do Assistente de Funções

Dados Dinâmicos do Assistente de Funções

Direção de Dados do Assistente de Funções

Identificação do Assistente de Funções

Identificação do Assistente de Funções

Pico

Quando uma função de pico é especificada, essa caixa de diálogo permite indicar qual pico será relatado.

Índice do Traço

Selecione o número do traço (em arquivos multicanal), sendo o primeiro traço = 1, o segundo traço = 2, etc.

Índice de Pico

Se você selecionar esse botão, especifique o número de índice de pico para o pico de interesse, sendo o primeiro pico = 1, o segundo pico = 2, etc.

ID do Pico

Se você selecionar esse botão, especifique o número de ID do Pico na tabela de picos para o pico de interesse.

Em uso

Selecione as caixas dos tipos de pico que serão incluídos.

Grupo

Se uma função de pico for especificada, essa caixa de diálogo permite indicar qual grupo será relatado.

Índice do Traço

Selecione o número do traço (em arquivos multicanal), sendo o primeiro traço = 1, o segundo traço = 2, etc.

Índice do Grupo

Se você selecionar esse botão, especifique o número de índice do grupo para o grupo de interesse, sendo o primeiro grupo = 1, o segundo grupo = 2, etc.

Em uso

Selecione o tipo de grupo a ser relatado. Suporte para grupos de intervalos calibrados e de pico nomeado. Para grupos de Intervalos calibrados, se você tiver definido o grupo para calcular concentrações de picos não nomeados, poderá incluí-los no seu relatório de grupos selecionando o botão apropriado.

Veja também

Função de Seleção do Assistente de Funções

Dados Dinâmicos do Assistente de Funções

Direção de Dados do Assistente de Funções

Tipos de Assistente de Funções

Registro de Auditoria de Relatório Avançado

Para ativar o Registro de Auditoria de Relatório Avançado:

1. No menu **Relatórios**, clique em **Propriedades de Relatório Avançado**.
2. Selecione a guia **Registro de Auditoria**.
3. Selecione **Habilitar o registro de auditoria** para ativar o registro de auditoria de Modelos de Relatório Avançado.
4. Selecione uma das seguintes opções:

- **Solicitar razão ao salvar arquivo** - Essa opção solicita ao usuário que insira um motivo para cada alteração quando o modelo é salvo.
- **Não solicitar razão** - Quando essa opção é selecionada, as alterações são documentadas, mas não é necessário que o usuário forneça um motivo.

Ver o log do Registro de Auditoria de Relatório Avançado

Para ver o log do Registro de Auditoria de Relatório Avançado:

1. Na barra de ferramentas, selecione **Relatórios > Propriedades de Relatório Avançado**.

2. Selecione a guia **Log do Registro de Auditoria**.
3. Insira as seguintes informações:
    - **Usuário**
    - **Local**
    - **Descrição**
    - **Motivo**
    - **De data/hora**
    - **Para data/hora**
4. Selecione uma das seguintes opções:
    - **Exportar -** Selecione esta opção para exportar o log do registro de auditoria
    - **Imprimir -** Selecione esta opção para imprimir o log do registro de auditoria
    - **Pesquisar -** Selecione esta opção para pesquisar o log do registro de auditoria

Salvar o Relatório Avançado como Modelo

1. Selecione **Arquivo > Salvar Como> Relatório Avançado**.
2. Na caixa de diálogo **Salvar Arquivo de Relatório Avançado Como**, selecione a pasta de modelos.
3. Insira um **Nome do arquivo** e selecione **Salvar**.

Relatórios Inteligentes

Veja também

Criar Relatório Inteligente

Abrir Relatório Inteligente

Salvar Relatório Inteligente

Criar Relatório Inteligente

Para criar um relatório inteligente, selecione **Relatório > Relatório Inteligente** no painel de navegação ou na barra de ferramentas. O editor do Open Lab Intelligent Report (OLIR) abre.

Para criar um novo Relatório Inteligente usando o Assistente de Relatório, selecione **Relatórios > Relatório Inteligente com Assistente** na barra de ferramentas. O Assistente de Relatório abre.

Abrir Relatório Inteligente

Para abrir um Relatório Inteligente dos seus arquivos de projeto:

1. Na barra de ferramentas, selecione **Arquivo > Abrir > Relatório Inteligente**.
2. Na caixa de diálogo **Abrir Arquivo de Relatório Inteligente**, navegue até a pasta **Modelo** e selecione um arquivo **.rdl**.
3. Selecione **Abrir**.

Para abrir um Relatório Inteligente dos modelos no seu sistema de dados:

1. Na barra de ferramentas, selecione **Arquivo > Novo**.
2. Na caixa de diálogo **Novos Modelos de Arquivo**, selecione a guia **Relatório**.
3. Selecione um arquivo **.rdl**.
4. Selecione **OK**.

Salvar Relatório Inteligente

Para salvar um Relatório Inteligente:

Na barra de ferramentas, selecione **Arquivo > Salvar > Relatório Inteligente**.

Ou

Na barra de ferramentas, selecione o menu suspenso próximo ao ícone Salvar e selecione **Salvar Relatório Inteligente**.

Para salvar um Relatório Inteligente com um nome ou um local diferente:

1. Na barra de ferramentas, selecione **Arquivo > Salvar Como > Relatório Inteligente**.
2. Na caixa de diálogo **Salvar Arquivo de Relatório Inteligente Como**, navegue até a pasta em que deseja salvar o relatório.
3. Insira um **Nome do arquivo** e um **Tipo** e selecione **Salvar**.

Modelos de Relatório Padrão

Abrir um Modelo de Relatório Padrão

Modelos de relatório padrão são fornecidos para habilitar a impressão fácil de relatórios.

Para abrir um modelo de relatório padrão:

Selecione **Arquivo > Abrir > Relatório Padrão**. Na caixa de diálogo **Abrir Arquivo de Relatório Padrão**, navegue para a pasta **Modelos**.

Ou

Selecione **Relatórios** no painel de navegação. Escolha dentre os seguintes modelos de relatório padrão.

Veja também

Área %

Relatório ConfigContents

Verificação da Linha de Base Atual

Padrão Externo

Padrão Interno

Normalização

Sinais de Condição de Erro

Relatório de % da Área

Este é um exemplo de saída do modelo de relatório de % da Área (**Area%.srp**).

Area % Report

Page 1 of 1

Method Name: C:\datasystem\methods\multicalibration.met
Data: C:\datasystem\data\multicalibration001.dat
User: System
Acquired: 11/26/90 8:51:56 PM
Printed: 4/10/97 8:29:23 AM

Channel A Results

Pk #	Retention Time	Area	Area %	Height	Height %	Codes
1	5.729	779320	**25.26**	90135	29.67	BV
2	6.568	667324	**21.63**	68471	22.54	VV
3	7.041	2005	**0.06**	185	0.06	VV
4	7.475	8964	**0.29**	661	0.22	VV
5	8.273	633854	**20.54**	52979	17.44	VV
6	8.540	994037	**32.22**	91392	30.08	VV
Totals		3085504	**100.00**	303823	100.00	

Veja também

Abrir um Modelo de Relatório Padrão

Relatório ConfigContents

Este é um exemplo de saída do modelo de Relatório ConfigContents (**ConfigContentsReport.srp**).

Page 1 of 1

User Name: System (Beth)
Print Time: 8/13/2010 11:33:21 AM (GMT -07:00)

```
Instrument Configuration
========================
   Instrument Name: Fake Instrument no privileges
   Instrument Type: Sample VB

General Options
===============
   System Suitability:       Disabled
   SEC:                      Disabled
   PDA:                      Disabled
   Baseline Check:           Disabled

   <No configured devices>
```

Veja também

Abrir um Modelo de Relatório Padrão

Verificação da Linha de Base Atual

Esse é um exemplo de saída do modelo de relatório da Verificação da Linha de Base Atual (**Current Baseline Check.srp**).

```
Baseline Check Report
Noise Test                Test Not
                          Completed
Drift Test                Test Not
                          Completed
Required Stable Time      15.0 Minutes
Total Test Time           0.0 Minutes
Noise Test Type           rms
Test End Time             7/7/2010 1:02:08 PM (GMT
                          -07:00)

Channel                   Threshold       Status           Threshold     Status
                          (Noise Test)    (Noise Test)     (Drift/hr)    (Drift Test)
```

Veja também

Abrir um Modelo de Relatório Padrão

Relatório Padrão Interno

Este é um exemplo de relatório que usa o modelo de saída de Padrão Interno (**Internal Standard.srp**).

Internal Standard Report **Page 1 of 1**

Method Name: C:\datasystem\methods\istd.met
Data: C:\datasystem\data\multical005.dat
User: System
Acquired: 11/26/90 8:49:21 PM
Printed: 4/10/97 10:49:56 AM

Channel A Results

Pk #	*Name*	*Retention Time*	*Area*	*Conc*
6	Peak 1	5.710	298528	**1.000**
7	Peak 2	6.558	250174	**0.688**
9	Peak 3	8.264	239475	**0.985**
10	Peak 4	8.530	376822	**1.977**
Totals			1164999	**4.650**

Veja também

Abrir um Modelo de Relatório Padrão

Relatório Padrão Externo

Este é um exemplo de relatório que usa o modelo Padrão Externo (**External Standard.srp**).

External Standard Report

Page 1 of 1

Method Name: C:\datasystem\methods\test.met
Data: C:\datasystem\data\multical005.dat
User: System
Acquired: 11/26/90 8:51:56 PM
Printed: 4/10/97 10:38:56 AM

Channel A Results

Pk #	*Name*	*Retention Time*	*Area*	*Conc*
2	Acetone	5.729	779320	**50.046**
3	Carbon Tetrachloride	6.568	667324	**9.017**
6	Bromoethane	8.273	633854	**35.026**
7	1,3-TCE	8.540	994037	**50.020**
Totals			3074535	**144.110**

Veja também

Abrir um Modelo de Relatório Padrão

Relatório de Normalização

Este é um exemplo de saída de modelo de Relatório Normalizado (**Normalization.srp**).

Normalization Report

Page 1 of 1

Method Name: C:\datasystem\methods\test.met
Data: C:\datasystem\data\multilevel005.dat
User: System
Acquired: 11/26/90 8:51:56 PM
Printed: 4/10/97 10:43:48 AM

Channel A Results

Pk #	*Name*	*Retention Time*	*Area*	*Conc*
1	Peak1	5.729	779320	**34.728**
2	Peak2	6.568	667324	**6.257**
5	Peak3	8.273	633854	**24.305**
6	Peak4	8.540	994037	**34.710**
Totals			3074535	**100.000**

Veja também

Abrir um Modelo de Relatório Padrão

Sinais de Condição de Erro

Sempre que uma condição de erro ocorrer para um valor calculado, um "indicador de erro" será impresso indicando a natureza do problema. Esses sinais são usados em relatórios, em dados exportados e em determinadas anotações.

0,00 BDL Abaixo do limite de detecção

0,00 PI Problema com pico PI

0,00 PD Problema com pico padrão

0,00 FIT Problema com ajuste de curva

CAL Atualmente calibrando, = conc. tabela de picos para nível atual

0,00 NEG Concentração negativa

LC Baixa conc., = conc. calculada

HC Alta conc., = conc. calculada

Nos casos em que "0,00" é relatado, isso acontece porque a natureza do erro impede a realização de mais cálculos.

Veja também

Abrir um Modelo de Relatório Padrão

Sobre parâmetros personalizados

Os parâmetros personalizados são usados para calcular valores específicos de seu interesse, mas que não são normalmente calculados. Esse recurso dá acesso a todo o banco de dados de picos nomeados e detectados. Os programas de parâmetros personalizados são chamados depois da conclusão de todas as outras análises.

Os programas de parâmetro personalizado podem ser escritos em VB Script ou ser DLLs compiladas escritas em C++. As DLLs compiladas devem implementar uma função denominada "EvaluateCustomParam()". Consulte o CD Elite para acessar a documentação completa e exemplos sobre desenvolvimento de programas de parâmetro personalizado.

Os parâmetros personalizados podem ser relatados em um relatório personalizado, exportados como resultado e anotados em cromatogramas (apenas parâmetros por pico).

Os parâmetro personalizado são separados dos cálculos internos. Os cálculos internos são disponibilizados sem precisar configurar nenhum parâmetro personalizado e são sempre calculados. Consulte Cálculos internos.

Veja também

Definição de parâmetros personalizados para um método

Definição de parâmetros personalizados para uma sequência

Uso do parâmetro personalizado Relação sinal/ruído de adequação do sistema da Farmacopeia Europeia (EP).

Uso do parâmetro personalizado Relação sinal/ruído da Farmacopeia Norte-Americana (USP)

Uso do parâmetro personalizado Razão entre pico e vale

Uso do parâmetro personalizado Conversão de sinal

Uso do parâmetro personalizado Normalização ampla de canal

Uso do parâmetro personalizado Percentual da área relativa

Uso do Processador de script e dos Arquivos de script na criação de um parâmetro personalizado

Adição de parâmetros personalizados ao relatório de método

Definição de parâmetros personalizados para um método

1. No menu **Método**, selecione **Avançado > Parâmetros Personalizados**.
2. Para definir um Parâmetro Personalizado, insira o título que deseja usar para relatar o resultado no campo **Nome do Parâmetro**.
3. Em seguida, clique no campo **Tipo**. As opções **Todo o sistema** ou **Por pico serão** exibidas.
    - Um parâmetro para **todo o sistema** é aquele calculado uma vez para todo o cromatograma. Os parâmetros para todo o sistema podem ser exibidos em um relatório personalizado e serão impressos na parte inferior do relatório. Um exemplo de parâmetro para todo o sistema é o cálculo de BTU, em que o programa multiplica cada pico por seu conteúdo de BTU e soma os valores de BTU calculados, fornecendo um único valor igual ao conteúdo de BTU de toda a mistura.
    - Um parâmetro **por pico é aquele** calculado uma vez para cada pico no cromatograma. Os parâmetros por pico podem ser exibidos em uma coluna de relatório personalizado da mesma forma que a concentração ou o número do pico seriam exibidos. Os parâmetros por pico podem também ser anotados no

cromatograma. Um exemplo de um Parâmetro por pico é a altura equivalente a um prato teórico (HETP). Para HETP, o programa de parâmetro personalizado usa o comprimento da coluna (em centímetros) e o divide por "n", os pratos teóricos do componente já calculado pelo sistema.

Nota: Se o parâmetro personalizado for indicado como um parâmetro da tabela de sequências, qualquer alteração no Tipo (por pico ou todo o sistema) não será atualizada até você reabrir a caixa de diálogo de parâmetro personalizado de sequência a partir da sequência.

4. Selecione **Número** ou **String** na lista suspensa **Retornos** para selecionar qual tipo de valor é retornado pelo parâmetro ou pelo cálculo.

5. Clique no campo **Fonte**. Na caixa de diálogo **Fonte do Parâmetro**, selecione uma das opções:

   - **RelArea Perc**
   - **Processador de Script** - Selecione esta opção e clique duas vezes no campo Parâmetros Adicionais para abrir o Script de Parâmetro Personalizado.
   - **Parâmetro da Tabela de Sequências** - Selecione esta opção se quiser definir o parâmetro personalizado como parte da sequência.

6. Use o campo **Parâmetros Adicionais** conforme a necessidade para o seu aplicativo de parâmetro personalizado. O valor aqui inserido será o padrão para o parâmetro, a menos que seja inserido na tabela de sequências.

7. Quando houver um parâmetro personalizado definido no método, o software tentará executar os programas de parâmetro personalizado indicados sempre que o cromatograma for analisado.

Nota: Para inserir um parâmetro personalizado de sequência em uma planilha de sequências, o método deverá ter um parâmetro personalizado definido como sequencial e deverá ser salvo.

Definição de parâmetros personalizados para uma sequência

Para inserir um parâmetro personalizado de sequência em uma planilha de sequência, o método deverá ter um parâmetro personalizado definido como sequencial e deverá ser salvo.

Definição de uma sequência com base em parâmetros personalizados para um método

1. Abra um método.

2. Na janela do instrumento principal, selecione **Método > Avançado**.

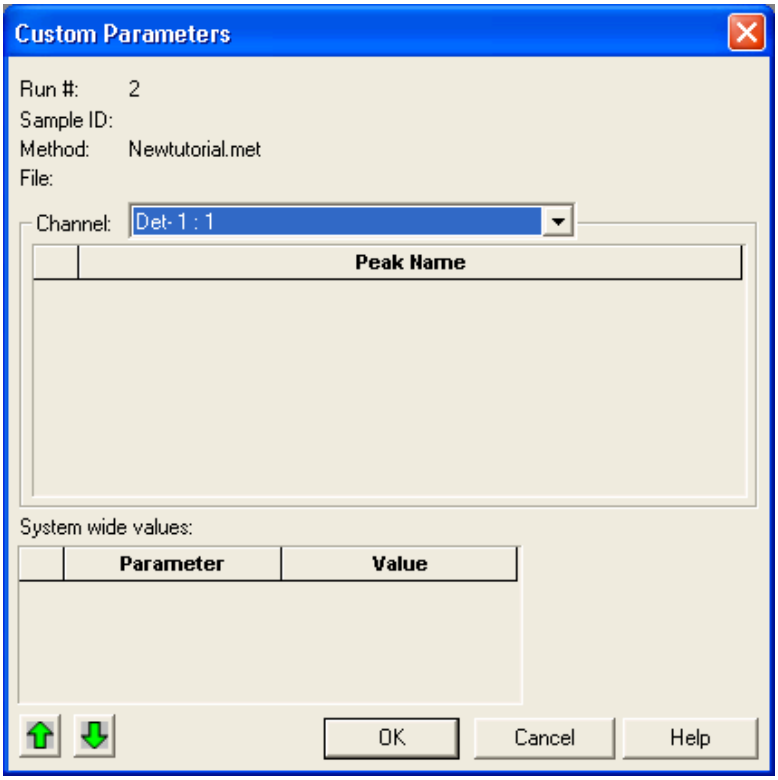
3. Na caixa de diálogo **Opções de método avançado**, selecione a guia **Parâmetros personalizados**.

4. Na tabela **Parâmetros personalizados,** na lista **Fonte**, selecione **Parâmetro da tabela de sequências**.

5. Salve o **Método**.

Definição de parâmetros personalizados para uma sequência

1. Na janela do instrumento principal, selecione **Sequência> Editar.**
2. Na planilha de sequência, selecione o campo **parâmetros personalizados.**
3. Na caixa de diálogo **parâmetros personalizados**, estará ativa a área **Canal** ou a área **valores para todo o sistema**. Isso é determinado pela forma como o parâmetro personalizado foi definido no método designado para essa linha da sequência.
   - Se **Canal** estiver ativo, selecione o cana para o qual queira definir os parâmetros por pico do menu suspenso. Os picos definidos para esse canal aparecerão na planilha. Em Nome do pico, digite um valor para o parâmetro personalizado em cada um dos picos exibidos.
   - Se **valores para todo o sistema estiver** ativo, digite um valor a ser usado. Esse valor é aplicável a todo o cromatograma.
4. Para definir parâmetros para múltiplas corridas, use as setas para cima e para baixo para ir para a próxima sequência, ou para a anterior. Você também pode copiar ou preencher os parâmetros que não mudam entre corridas, se todas estiverem usando o mesmo método.
5. Selecione **OK**.



Uso do parâmetro personalizado Relação sinal/ruído de adequação do sistema da Farmacopeia Europeia (EP).

O parâmetro personalizado de *Relação sinal/ruído da adequação do sistema da Farmacopeia Europeia* calcula uma relação de picos entre o sinal e o ruído usando as técnicas documentadas para a Farmacopeia Europeia e influencia a precisão da quantificação.

Não use a opção Integração Desativada quando for usar o *parâmetro personalizado Relação sinal/ruído de adequação do sistema da Farmacopeia Europeia*. A **Integração Desativada** desativa picos, mas essas regiões ainda serão incluídas no cálculo de ruído. Deixe todos os picos integrados para obter os valores corretos de ruído.

Cálculo

Uso do parâmetro personalizado *Relação sinal/ruído de adequação do sistema da Farmacopeia Europeia* é calculado usando a seguinte equação:

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

H= A altura do pico correspondente ao componente no cromatograma obtido com a solução de referência prescrita. É medida a partir do máximo do pico até a linha de base extrapolada do sinal observado a uma distância igual a 20 vezes a largura a meia altura.

h= O intervalo do ruído de fundo em um cromatograma obtido depois da injeção ou aplicação de um branco. É observada em uma distância igual a 20 vezes a largura a meia altura do pico no cromatograma obtido com a solução de referência prescrita. Se possível, será situada igualmente em torno do local em que esse pico seria encontrado.

O intervalo de tempo para a determinação do ruído pode ser fornecido manualmente ou determinado automaticamente. Este intervalo deve ser pelo menos cinco vezes a largura a meio pico do pico. A determinação automática de intervalo de ruído usa 20 vezes a largura do pico de meio pico, centralizado no tempo de retenção do pico de interesse onde for possível. Em casos onde o intervalo de tempo determinado automaticamente não possa ser diretamente centralizado no pico (por exemplo, quando o pico estiver perto demais do início ou do fim do cromatograma), o intervalo será deslocado de forma a permanecer dentro dos limites do cromatograma.

Uso do parâmetro

Neste exemplo, o ruído é calculado usando um cálculo de ruído curto sem escala ASTM no intervalo de ruído. Para obter informações sobre o cálculo de ruído curto sem escala ASTM, consulte Cálculos de ruído ASTM.

O parâmetro calculará os valores dos picos com e sem nome, e os resultados serão armazenados com as informações de pico no arquivo de resultados. Depois, essas informações poderão ser transformadas em relatórios usando as ferramentas padrão de relatórios no sistema.

Para usar este parâmetro personalizado, é necessário incluir uma corrida em branco na sequência. Esta corrida em branco será usada na determinação do ruído. Com isso, será uma representação adequada do ruído no sistema. Apenas umas corrida em branco pode ser usada em cada sequência. A corrida em branco deve usar os mesmos parâmetros do método de aquisição que as corridas de amosta, e deve conter os mesmos sinais que as corridas de amostra.

1. Na janela do instrumento principal, selecione **Método > Avançado**.
2. Na caixa de diálogo Opções de Método Avançado, selecione a guia **Coluna / Desempenho**.
3. Ative a opção **Calcular parâmetros de desempenho para este canal**.
   Esta seleção é necessária para ativar a determinação da largura de pico a meio pico para a determinação do intervalo de ruído.
   Não é preciso selecionar nenhum método de cálculo opcional para gerar os valores do parâmetro personalizado.
4. Selecione a guia **Parâmetros Personalizados**.
5. Na tabela **Parâmetros personalizados,** preencha os seguintes campos:

Coluna	Valor
Nome do Parâmetro	Insira o **EP de relação sinal / ruído** ou qualquer nome desejado. Este nome será usado em relatórios e anotações gráficas. O nome precisa conter um **/**.
Tipo	Na lista, selecione **Por pico**.
Retorno	Na lista, selecione **Número**.
Fonte	Na lista, selecione **Relação sinal / ruído**.
Parâmetros adicionais	Insira os argumentos adicionais como descrito abaixo.

Na lista **Parâmetros adicionais**, insira os argumentos adicionais como mostrado nos exemplos a seguir:

- **BASELINE_FILE_NAME:** Nome da corrida do arquivo de linha de base na sequência atual
- Hora de início e Hora de parada (opcional): Indica o intervalo (em minutos) para a determinação do nível de ruído
- Separe os argumentos por ponto e vírgula (;). Pode-se inserir um ponto e vírgula após o último argumento, mas não é necessário.
- Se a hora de início for fornecida, ela deve ser acompanhada por uma hora de parada e vice-versa.
- Não forneça separadores ponto e vírgula vazio nas horas de início e de parada (baselinefile.dat;;), a menos que outros parâmetros o sigam (consulte a seção Códigos de diagnóstico abaixo). Caso contrário, o sistema gerará um erro e o resultado não será calculado.
- **BASELINE_FILE_NAME;StartTime;StopTime**
- Para inserir um arquivo de linha de base com uma hora de início de 1,5 minutos e de parada de 3,5 minutos, ambas fornecidas manualmente, para a determinação de ruído, insira **solvent002.dat;1.5;3.5** no campo Parâmetros adicionais.
- Também é possível incluir relatórios de valores intermediários usados nos cálculos. Esses valores pode ser passados para relatórios através de um quarto argumento opcional no campo **Parâmetros adicionais**. O quarto argumento opcional é um código de diagnóstico que controla o valor de retorno do DLL do parâmetro. Ao inserir parâmetros de diagnóstico, é importante que o método especifique o mesmo arquivo de linha de base e as mesmas opções de intervalo de tempo usadas no cálculo do parâmetro de relação sinal/ruído. Caso contrário, os valores do parâmetro de diagnóstico não refletirão os valores intermediários usados no cálculo da relação sinal/ruído.

Código de diagnóstico	**O valor retornado pelo DLL do parâmetro personalizado de relação sinal/ruído de adequação do sistema.**
NB	Hora de início da determinação de ruído (em minutos)
NE	Hora de término da determinação de ruído (em minutos)
NV	Valor do ruído (h) - Calculado como (valor de sinal máx - valor de sinal mín) dentro do intervalo de tempo do ruído
SV	Valor do sinal (H) – Idêntico à altura do pico
VC	Usado para indicar se um valor de relação sinal/ruído foi calculado (1=Sim, 0=Não) *Consulte as anotações

- Quando estive determinando ruídos usando intervalos de tempo fixos, basta adicionar o quarto parâmetro adicional à lista de parâmetros para que o valor de diagnóstico de interesse seja retornado.

  BASELINE_FILE_NAME;StartTime;StopTime;DiagnosticCode

- Quando estiver usando intervalos de tempo automáticos, coloque três caracteres ponto e vírgula entre o nome do arquivo de linha de base e o código de diagnóstico para que o código fique no quarto espaço na lista de parâmetros.

  BASELINE_FILE_NAME;;;DiagnosticCode

O cálculo de relação sinal/ruído EP não é realizado durante a aquisição. É necessário processar novamente para obter este cálculo.

Observações adicionais

Tempo de processamento

Lembre-se que se mais de um valor de diagnóstico for selecionado, ocorrerá um grande aumento no tempo necessário para se processar os resultados, já que o código do parâmetro personalizado é ativado apenas uma vez para cada valor de diagnóstico retornado. Como o parâmetro personalizado precisa abrir dois arquivos de sinal diferentes cada vez, o tempo de processamento pode ser longo.

Correspondência de sinal

O código de parâmetro personalizado tenta calcular a relação sinal/ruído para cada vestígio de sinal no arquivo de dados. Para que o cálculo seja realizado, um vestígio exato correspondente deve existir no arquivo de ruído da linha de base. Se nenhum vestígio de sinal correspondente for encontrado no arquivo de ruído da linha de base, o código do parâmetro personalizado gravará um erro no registro de atividades do instrumento indicando que o sinal correspondente não pôde ser encontrado. Se nenhum sinal correspondente estiver presente no arquivo de ruído da linha de base, nenhum valor de relação sinal/ruído será calculado para nenhum vestígio de sinal.

Valor zero

Quando nenhum valor for calculado para a relação sinal/ruído ou para os parâmetros de diagnóstico associados, o sistema retornará o valor zero. Isto ocorre porque o sistema precisa indicar um valor no parâmetro de retorno. Nesses casos, o parâmetro de diagnóstico “VC” também deve retornar zero para indicar que o resultado é inválido.

Uso do parâmetro personalizado Relação sinal/ruído da Farmacopeia Norte-Americana (USP)

O parâmetro personalizado *Relação sinal/ruído USP* realiza um cálculo da relação sinal/ruído de acordo com as linhas guias apresentadas pela Farmacopeia Norte-Americana. Depois que o parâmetro personalizado estiver ativado em um método, as variáveis de geração de relatórios ficarão disponíveis para relatórios e anotações.

Não use a opção **Integração Desativada** quando for usar o parâmetro personalizado Relação sinal/ruído. A **Integração Desativada** desativa picos, mas essas regiões ainda serão incluídas no cálculo de ruído. Deixe todos os picos integrados para obter os valores corretos de ruído.

O parâmetro personalizado da Farmacopeia Norte-Americana não é compatível com o EZChrom Elite 3.3.2 & 3.3.2 SP1.

Cálculo

Uso do parâmetro personalizado *Relação sinal/ruído da Farmacopeia Norte-Americana* é calculado usando a seguinte equação:

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

H = A altura do pico correspondente ao componente de interesse.

h_n = A diferença entre o maior e o menos valor de ruído em uma distância de 20 vezes a largura em meia altura do pico.

O intervalo de tempo para o ruído pode ser inserido manualmente ou automaticamente. Se este valor precisar ser calculado manualmente, o usuário deverá fornecer os dois primeiros parâmetros sendo o tempo de início do ruído e o tempo de parada do ruído.

Uso do parâmetro

Para que este parâmetro personalizado seja automaticamente computado para os picos de um cromatograma, modifique o método da seguinte maneira:

1. Na janela do instrumento principal, selecione **Método > Avançado**.
2. Na caixa de diálogo Opções de Método Avançado, selecione a guia **Coluna/Desempenho**.
3. Selecione **Calcular parâmetros de desempenho para este canal.**
4. Selecione a guia **Parâmetros Personalizados**.

5. Na tabela **Parâmetros personalizados**, preencha os seguintes campos:

Coluna	Valor
Nome do Parâmetro	Insira o **Relação sinal/ruído USP** ou qualquer nome desejado. Este nome será usado em relatórios e anotações gráficas. O nome precisa conter um **/**.
Tipo	Na lista, selecione **Por pico**.
Retorno	Na lista, selecione **Número**.
Fonte	Na lista, selecione **Relação sinal/ruído USP**.
Parâmetros adicionais	Os Parâmetros adicionais são opcionais. O parâmetro que será usado para o cálculo real: **Hora de início;Hora de parada** — Para inserir manualmente as horas de início e parada para o ruído. Esses parâmetros serão usados no cálculo da relação sinal/ruído da Farmacopeia Norte-Americana. Se esses parâmetros manuais não forem inseridos, o sistema usará automaticamente os valores de início e de parada do cálculo acima. Parâmetro de diagnóstico que fornecem resultados: **;;NB** – Retorna o início do ruído (Hora de início) **;;NE** – Retorna o término do ruído (Hora de término) **;;VC** - Retorna se o cálculo é bom ou ruim (1 é bom e 0 é ruim) **;;NV** – Retorna o valor do ruído – Calculado como (Valor máx sinal – Valor mín sinal) dentro do intervalo de tempo do ruído **;;SV** – Retorna o valor do sinal – Idêntico à altura do pico

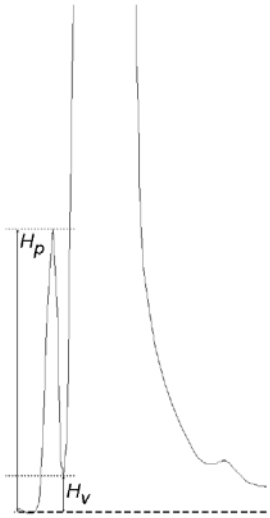
Se este parâmetro personalizado tiver sido adicionado após a realização de uma corrida, será preciso realizar uma análise antes de o parâmetro ser calculado.

Uso do parâmetro personalizado Razão entre pico e vale

Quando uma separação de linha de base entre dois picos não é alcançada, o parâmetro personalizado *Razão entre pico e vale* pode ser usado como um requisite de adequação do sistema em um teste para substâncias relacionadas.

Cálculo

O parâmetro personalizado *Razão entre pico e vale* é calculado usando a seguinte equação:



$$p/v = \frac{Hp}{Hv}$$

H_p = A altura acima da linha de base extrapolada do menor pico.

H_v = A altura acima da linha de base extrapolada no ponto mais baixo da curva que separa o pico menor do pico maior.

Uso do parâmetro

Para que este parâmetro personalizado seja automaticamente computado para os picos de um cromatograma, modifique o método da seguinte maneira:

1. Na janela do instrumento principal, selecione **Método > Avançado**.
2. Na caixa de diálogo Opções de método avançado, selecione a guia **Parâmetros personalizados**.
3. Na tabela **Parâmetros personalizados**, preencha os seguintes campos:

Coluna	Valor
Nome do Parâmetro	Insira a **Razão entre pico e vale** ou qualquer nome desejado. Este nome será usado em relatórios e anotações gráficas. O nome precisa conter um */*.
Tipo	Na lista, selecione **Por pico**.
Retorno	Na lista, selecione **Número**.
Fonte	Na lista, selecione **Razão entre pico e vale**.
Parâmetros adicionais	Os Parâmetros adicionais são opcionais.

Uso do parâmetro personalizado Conversão de sinal

O parâmetro personalizado *Conversão de sinal* permite calcular a área e a altura do pico usando os valores reais do sinal no eixo Y do cromatograma sem o uso de multiplicadores. Depois que o parâmetro personalizado estiver ativado em um método, as variáveis de geração de relatórios ficarão disponíveis para relatórios e anotações.

O parâmetro personalizado Conversão de sinal não é compatível com o EZChrom Elite 3.3.2 & 3.3.2 SP1.

Cálculo

O parâmetro personalizado *Conversão de sinal* é calculado usado a seguinte equação:

Parâmetro adicional 1: Altura do pico/10^9

Parâmetro adicional 2: Área do pico/10^9

Uso do parâmetro

Para que este parâmetro personalizado seja automaticamente computado para os picos de um cromatograma, modifique o método da seguinte maneira:

1. Na janela do instrumento principal, selecione **Método > Avançado**.
2. Na caixa de diálogo Opções de método avançado, selecione a guia **Parâmetros personalizados**.
3. Na tabela **Parâmetros personalizados**, preencha os seguintes campos:

Coluna	Valor
Nome do Parâmetro	Insira o **Conversão de sinal** ou qualquer nome desejado. Este nome será usado em relatórios e anotações gráficas. O nome precisa conter um **/**.
Tipo	Na lista, selecione **Por pico**.
Retorno	Na lista, selecione **Número**.
Fonte	Na lista, selecione **Conversão de sinal**.
Parâmetros adicionais	Insira **1** para altura do pico e **2** para área do pico.

Se este parâmetro personalizado tiver sido adicionado após a realização de uma corrida, será preciso realizar uma análise antes de o parâmetro ser calculado.

Uso do parâmetro personalizado Normalização ampla de canal

O parâmetro personalizado *Normalização ampla de canal* é usado para calcular os valores de concentração normalizados em todos os canais disponíveis. Este é um parâmetro personalizado por pico.

Uso do parâmetro

Para que este parâmetro personalizado seja automaticamente computado para os picos de um cromatograma, modifique o método da seguinte maneira:

1. Na janela do instrumento principal, selecione **Método > Avançado**.
2. Na caixa de diálogo Opções de método avançado, selecione a guia **Parâmetros personalizados**.
3. Na tabela **Parâmetros personalizados**, preencha os seguintes campos:

Coluna	Valor
Nome do parâmetro	Insira a **Normalização ampla de canal** ou qualquer nome desejado. Este nome será usado em relatórios e anotações gráficas. O nome precisa conter um **/**.
Tipo	Na lista, selecione **Por pico**.
Retorno	Na lista, selecione **Número**.
Fonte	Na lista, selecione **Normalização ampla de canal**.
Parâmetros adicionais	Os **Parâmetros adicionais** são opcionais e podem conter os seguintes itens: Esses itens não levam em conta maiúsculas e mínusculas: • Indicador de tipo de normalização • **/estd** Use para normalizar as concentrações ESTD em todos os canais. • **/istd** Use para normalizar as concentrações ISTD em todos os canais. • **/norm** Use para normalizar as concentrações NORM em todos os canais. • Indicador de exportação de relatório • **/report** Use para gerar um arquivo de exportação dos resultados normalizados. Se nenhum parâmetro adicional for especificado, a concentração usada será ESTD ou ISTD dependendo do que estiver disponível no arquivo de dados. Além disso, nenhum

	relatório de exportação será gerado. Apenas um dos indicadores de tipo de normalização pode ser especificado por vez. Não é possível combinar esses indicadores. Por exemplo, é um erro especificar **/estd /istd**. Se **/report** for especificado, então o indicador de tipo de normalização também deve ser especificado. O relatório exportado será colocado em um subdiretório do diretório do arquivo de dados. O subdiretório terá o nome de **Export (exportação)**, e o nome do arquivo exportado será o mesmo que o do arquivo de dados, com uma extensão **.NOM**. Por exemplo, se o arquivo de dados tiver o nome **C:\EZChrom Elite\Data\Test1.dat**, então os resultados exportados serão **C:\EZChrom Elite\Data\Export\Test1.nom**. Qualquer arquivo de exportação neste diretório com o mesmo nome será sobrescrito pelo novo arquivo.

Uso do parâmetro personalizado Percentual da área relativa

Este tópico descreve a instalação e o uso de um DLL de parâmetro personalizado para computador o *Percentual da área relativa* para picos de um cromatograma relativo a um pico de referência especificado por usuários.

O *Percentual da área relativa* de um pico é a razão entre a área do pico e a área de um pico de referência especificado por um usuário.

Cálculo

O parâmetro personalizado *Percentual da área relativa* é calculado usado a seguinte equação:

$$\text{Rel. Area Pct} = (\text{Area}_{\text{Peak}} / \text{Area}_{\text{Reference Peak}}) \times 100\%$$

Uso do parâmetro

Para que este parâmetro personalizado seja automaticamente computado para os picos de um cromatograma, modifique o método da seguinte maneira:

1. Na janela do instrumento principal, selecione **Método > Avançado**.
2. Na caixa de diálogo Opções de método avançado, selecione a guia **Parâmetros personalizados**.
3. Na tabela **Parâmetros personalizados,** preencha os seguintes campos:

Coluna	Valor
Nome do Parâmetro	Insira a **Percentual da área relativa** ou qualquer nome desejado. Este nome será usado em relatórios e anotações gráficas. O nome precisa conter um **/**.
Tipo	Na lista, selecione **Por pico**.
Retorno	Na lista, selecione **Número**.
Fonte	Na lista, selecione **Percentual da área relativa**.
Parâmetros adicionais	Insira o número do pico a ser usado como o pico de referência no cálculo.

Depois que o cromatograma tiver sido analisado com este método, o percentual da área relativa de cada pico será disponibilizado como um resultado em relatórios avançados e personalizados, além de poder ser exportado e usado como anotação em gráficos.

Uso do Processador de script e dos Arquivos de script na criação de um parâmetro personalizado

O processador de script permite que usuários avançados escrevam simples cálculos em VB. O arquivo de script permite que scripts previamente escritos sejam usados para o parâmetro personalizado.

Para obter mais informações sobre como criar scripts, consulte o *Guia de scripts para parâmetros personalizados* (CDS_EE-script-custom-param.pdf)que se encontra na pasta de documentos do OpenLAB CDS.

Uso do processador de script

1. Na janela do instrumento principal, selecione **Método > Avançado**.
2. Na caixa de diálogo Opções de método avançado, selecione a guia **Parâmetros personalizados**.
3. Na tabela **Parâmetros personalizados**, insira um **Nome de parâmetro**. Pode ser qualquer nome desejado.
4. Selecione **Tipo** e **Retorno**.
5. Na lista **Fonte**, selecione **Processador de script.**
6. No campo **Parâmetros adicionais**, clique na seta para editar o script.
7. Na caixa de diálogo **Script de parâmetro personalizado**, insira seu script entre **Sub EvaluatecustomParam()** e **End Sub**.
8. Selecione **OK**.

Uso de um arquivo de script

1. Na janela do instrumento principal, selecione **Método > Avançado**.
2. Na caixa de diálogo Opções de método avançado, selecione a guia **Parâmetros personalizados**.
3. Na tabela **Parâmetros personalizados,** insira um **Nome de parâmetro**. Pode ser qualquer nome desejado.
4. Selecione **Tipo** e **Retorno**.
5. Na lista **Fonte**, selecione **Arquivo de script.**
6. Na caixa de diálogo **Selecionar arquivo de parâmetro personalizado**, escolha o arquivo de script.
7. Selecione **Abrir**.

Usar o parâmetro personalizado do Índice de Retenção do EZChrom Elite (Índice de Kovats)

O Índice de Retenção do EZChrom Elite é usado para calcular o índice de retenção de um soluto com base nos tempos de retenção de uma série de alcanos normais a uma determinada temperatura isotérmica para uma fase estacionária específica. Os indices de retenção podem ser usados para comparar a ordem de eluição relativa de solutos para uma coluna e condições cromatográficas específicas. Os índices de retenção também podem ser usados para comparar a retenção ou seletividade de duas colunas.

Regras do Índice de Retenção

Os alcanos normais são como picos de referência: independente de seus tempos de eluição, seus índices de retenção são determinados pelo número de átomos de carbon em suas moléculas. Os índices de retenção dos outros picos na mistura são determinados pelos seus tempos relativamente aos n-alcanos.

O índice de retenção de um n-alcano é sempre 100 vezes seu número de carbono e deve ser reportado dessa forma, como por exemplo, C-10 equivale a 1000 e C-13 equivale a 1300.

O tempo de retenção usado no cálculo do índice de retenção é o tempo real de retenção do pico no cromatograma (corrigido pelo tempo do pico sem retenção). O tempo de retenção detectado do primeiro pico na Tabela de Picos é usado como o tempo do pico sem retenção.

$$I=100(y) + (100(z-y)\ ((\log tRx - \log tRy)/(\log tRz - \log tRy))$$

Em que:

I = Índice de retenção

x = Soluto de interesse

y = n-alcano com átomos de carbono y, eluindo antes de x

z = n-alcano com átomos de carbono z, eluindo depois de x

tR = Tempo de retenção menos tempo de pico sem retenção

Para usar o parâmetro:

1. Copie RetentionIndex.DLL e RetIndex.CFG para seu diretório do EZChrom Elite.
2. Crie uma mistura padrão com os alcanos normais cobrindo o intervalo do ponto de ebulição dos solutos que você pretende medir.
3. Analise esta mistura usando as condições cromatográficas (temperatura isotérmica e tipo de coluna) para comparação.

4. Crie uma Tabela de Picos com os nomes e tempos de retenção dos n-alcanos e outros solutos na mistura. Lembre-se de que o pico sem retenção (normalmente metano) deve estar na Tabela de Picos.

5. Usando o Microsoft NotePad ou um editor de texto similar, edite o arquivo RETINDEX.CFG em seu diretório do EZChrom para incluir cada um dos solutos de n-alcano em sua mistura de calibração. Use a Guia para separar os valores em uma fila. Não use espaços entre os valores; isso pode provocar uma falha no Parâmetro Personalizado quando for executado.

    - número de picos de n-alcano, como Picos;
    - Canal (A, B, C, D);
    - Tipo (P de Pico);
    - nº de ID do Pico para cada alcano da Tabela de Picos;
    - Número de átomos de carbono na molécula deste pico (nº de Carbono);
    - Tempo de retenção (Ret.) de cada pico.

6. Se estiver usando uma Estação de Trabalho/Estação de Trabalho em Rede, salve o arquivoem uma pasta local ou em um local de rede compartilhado acessível por meio da estação de trabalho (por exemplo, "c:\RegIndexConfigFiles\MethodName.cfg"). Se estiver usando um Cliente-Servidor, salve o arquivo em um local de rede compartilhado acessível pelo cliente e pelo AIC (por exemplo, "\\RetIndexConfigShare\MethodName.cfg").

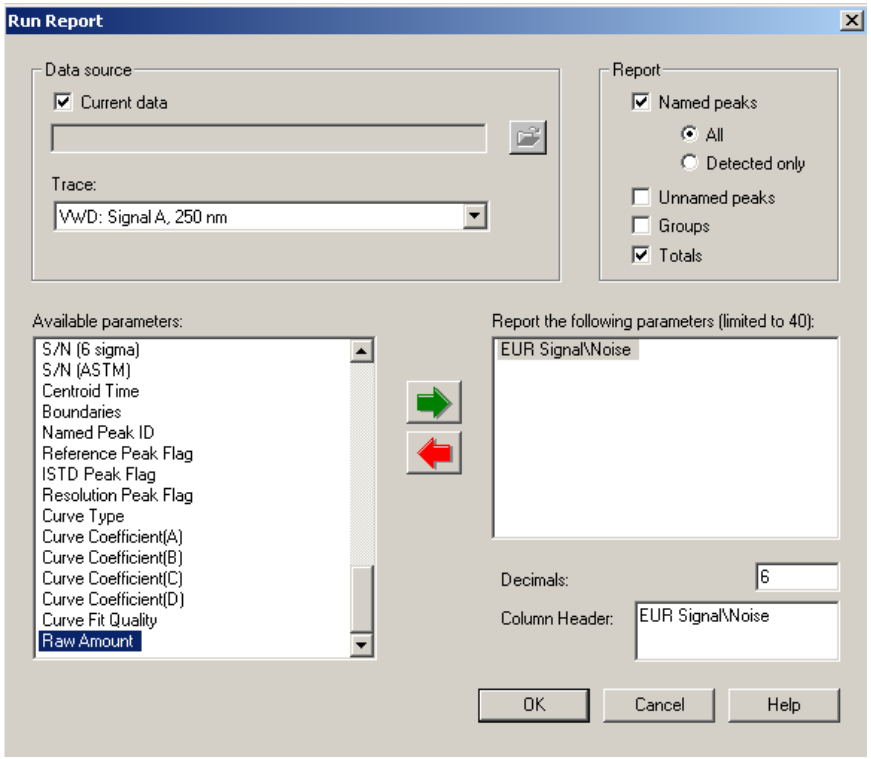
7. Definir um parâmetro personalizado para um método.

8. Adicionar parâmetros personalizados ao relatório de método.

Para adicionar parâmetros personalizados ao relatório de método:

Uma vez que o parâmetro personalizado tenha sido definido nas **Opções de Método Avançado** e que o método tenha sido salvo, o parâmetro será exibido na lista de parâmetros disponíveis no relatório de método e poderá ser incluído na definição de relatório.

1. No **Editor de relatório de método**, adicione um relatório de corrida ou edite um já existente para incluir os parâmetro personalizado adicionais. Consulte Sobre Relatórios.
2. Na caixa de diálogo **Relatório de Corridas**, adicione os parâmetros personalizados adicionais da lista **Parâmetros Disponíveis**.
3. Ajuste a precisão de relatórios de texto e dados do **Cabeçalho da Coluna** conforme necessário.



A visualização da tabela de relatório da corrida exibirá as novas colunas de parâmetro, mas nenhum dado de visualização estará disponível até que os dados tenham sido processados.

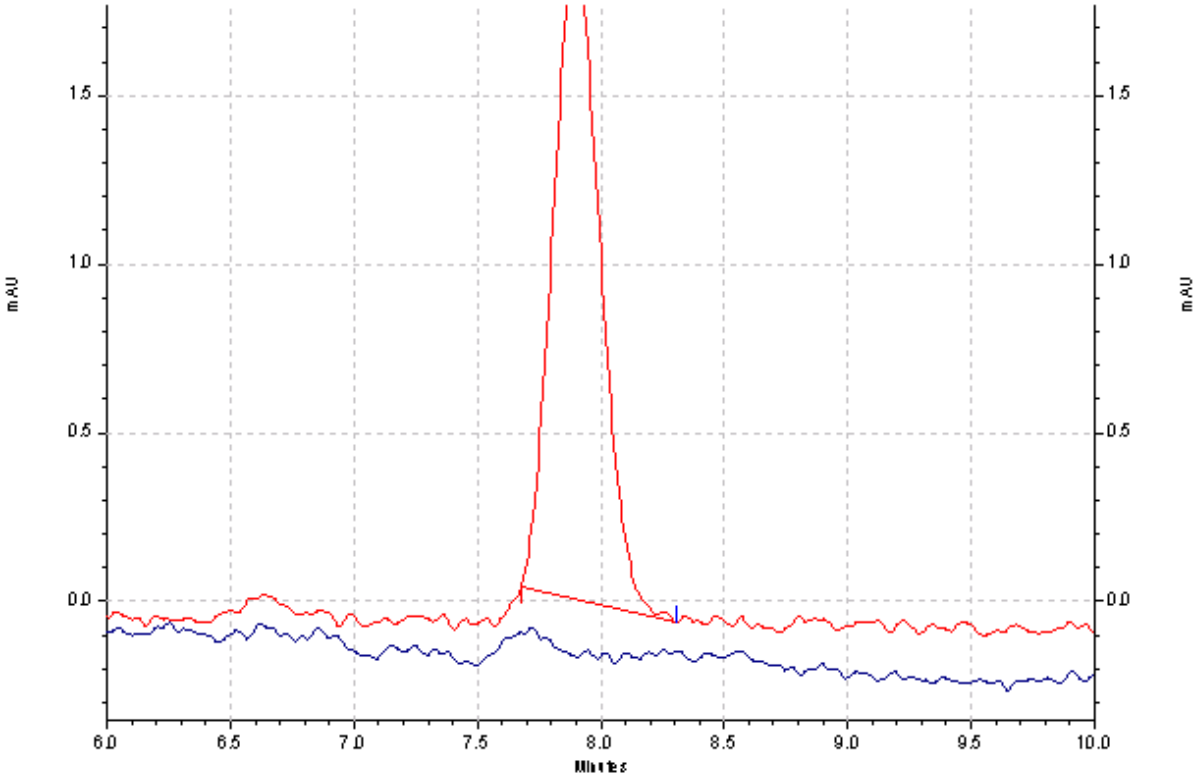
<Trace Data Header>						
Pk #	**Name**	Height	EP Signal/Noise	Noise Begin Time	Noise End Time	Noise Value
0	Sample Data	0	0.000	0.00	0.00	0.000

Para exibir e imprimir o relatório personalizado

Uma vez que os dados tenham sido processados, o relatório final exibirá os resultados do parâmetro personalizado e outros dados de corrida que foram adicionados ao relatório.

Para visualizar o relatório final, selecione **Relatórios > Exibir > Relatório de método**.

Para imprimir relatório final, selecione **Relatórios > Imprimir > Relatório de método** no cliente do instrumento.



DAD:
Signal
A, 214
nm/Bw:4
nm
Results

Pk #	Name	Height	EP Signal/Noise	Noise Begin Time	Noise End Time	Noise Value
4	Compound X	4016	19.033	5.78	10.01	422.000
Totals		4016				

Referência

Veja também

- Conversão de arquivos de dados PENelson
- Abrir um arquivo CDF
- Configurar eventos CIO/DIO
- Programas do usuário
- Desativar instrumentos GPIB
- Sobre formatos de arquivo de sequência ASCII
- Referência funcional
- Fórmulas e funções de relatórios avançados
- Cálculos internos

Conversão de arquivos de dados PENelson

Há suporte para a conversão transparente de arquivos de dados .RAW do TurboChrom versão 6.1 e do AccessChrom. Algumas conversões talvez exijam a presença do software PE para que funcionem.

A tabela a seguir resume as limitações aceitáveis na conversão dos arquivos de dados:

Arquivo de dados	Requisitos de software do PE
AccessChrom	Nenhum
TurboChrom 4.0 e anteriores	Nenhum
TurboChrom 4.1 e posteriores	O TurboChrom deve ser instalado no PC do cliente (o sistema de dados iniciará automaticamente o TurboChrom para realizar a conversão)
TotalChrom	O TotalChrom deve estar instalado no PC do cliente e o

usuário deve se registrar no sistema. (O sistema de dados iniciará automaticamente o TotalChrom, mas o usuário precisará efetuar login para que o sistema de dados realize a conversão.)

Em todos os casos, apenas os pontos de dados serão convertidos, e não os resultados ou outras partes do arquivo de dados.

Abrir um arquivo CDF

Ao abrir um arquivo CDF, o software procura um dos seguintes títulos de eixo Y:

"microVolts", "uVolts", "uV", "uAU" ou "milliVolts", "mVolts", "mV", "mAU"

Caso um desses títulos não seja encontrado, o software tentará lê-lo em um arquivo **AIA.ini** , que é usado para obter multiplicadores para tipos de arquivo não-padrão. Se não houver nenhum arquivo AIA.ini disponível, o software tentará criar uma estimativa com base no intervalo de valores.

Se o arquivo CDF lido não for padrão será preciso criar um arquivo **AIA.ini** e colocá-lo na pasta de programa do sistema de dados. O arquivo deverá conter o rótulo do eixo y e o multiplicador.

Configurar eventos CIO/DIO

Se você estiver usando uma das placas CIO/DIO, uma caixa de diálogo será exibida ao clicar no campo **Configuração** da planilha de configuração do evento.

- **Placa** - Selecione a placa para a qual quer configurar eventos.
- **Conector** - Selecione o conector a ser utilizado.
- **Sinal** - Selecione a fonte de sinal para o evento.
- **Estado ocioso** - Selecione o estado ocioso para o evento: padrão, aberto ou fechado.

Ao terminar de preencher a caixa de diálogo, clique no botão **OK**. Depois de configurar os eventos, é possível programá-los a partir da seção **Configuração do instrumento** dos métodos para instrumentos que usem essa placa.

Programas do usuário

Os programas do usuário são os programas externos executados antes de uma aquisição ou antes/depois de uma análise. Esses programas devem sincronizar ações entre o sistema de dados e um instrumento ou outro programa de processamento de dados que possa estar em execução.

Um programa do usuário pode ser um arquivo executável (.EXE) ou de biblioteca de ligação dinâmica (.DLL).

Se o programa do usuário for um programa executável (.EXE), o sistema de dados abrirá o programa e aguardará até o programa ser encerrado. O EXE é aberto com uma linha de comando que contém três argumentos de string:

addlParams - O conteúdo do campo 'Parâmetros adicionais' (da caixa de diálogo)

strMethod - O caminho/nome de arquivo totalmente qualificado do método atual (entre aspas simples)

strData - O caminho/nome de arquivo totalmente qualificado do arquivo de dados atual (entre aspas simples)

Observe que, embora o programa do usuário receba o nome do método atual e do arquivo de dados, o .EXE não tem acesso ao conteúdo dos arquivos.

Se um programa do usuário for uma .DLL, ele terá acesso a todos os dados e parâmetros do método atual e do arquivo de dados. Quando o programa do usuário for uma .DLL, o sistema de dados chamará a função RunUserProg() na .DLL e aguardará o seu retorno antes de continuar. A .DLL deverá implementar a seguinte função:

void RunUserProg ((LPCTSTR)m_addlParams, (CClientInfo*) m_pInfo)

em que 'm_addlParams' é o conteúdo do campo 'Parâmetros adicionais' (da caixa de diálogo).

'm_pInfo' indica um objeto CClientInfo

Nota: Por padrão, todos os nomes de arquivo/caminho de programa do usuário são especificados com o uso de letras de unidade. Em vez disso, para usar convenções de nomenclatura UNC, crie valores DWORD denominados 'UserProgramNetworkPaths' com um valor de '1' no seguinte local de registro (substitua 'c:/datasystem' pelo seu diretório de instalação):

\HKEY_LOCAL_MACHINE\Software\ChromatographySystem\c:/datasystem\Inst\

Aviso - sempre consulte seu administrador de rede antes de editar o registro do Windows.

Desativar instrumentos GPIB

Caso você esteja usando dois instrumentos conectados a uma placa GPIB, é importante fechar o aplicativo de instrumento (ou fechar a janela do instrumento e, em seguida, o servidor) antes de

desligar o instrumento ou seus módulos; do contrário, o outro instrumento conectado à placa GPIB pode congelar.

Formatos de arquivo ASCII

Sobre formatos de arquivo de sequência ASCII

Uma sequência ASCII apropriada à importação consiste em linhas de texto (cada uma encerrada com um caractere de nova linha). A primeira linha do arquivo texto deve ser: "Sequência ASCII n" em que n é o número da versão da sequência ASCII. Atualmente, esse número deve ser definido como “1” (um), para que a primeira linha do arquivo seja “Sequência ASCII 1”. A exportação ASCII double é uma versão acima do número da versão ASCII. Um arquivo de sequência ASCII contém os seguintes elementos:

Cabeçalho da sequência ASCII

Registros da sequência ASCII

Registro de Ações em ASCII

Veja também

Exemplo de arquivo de sequência ASCII

Exemplo de arquivo de sequência ASCII para torre dupla

Cabeçalho da sequência ASCII

A próxima parte do arquivo texto contém informações do "cabeçalho" da sequência do formulário

=

Por exemplo:

DATAPATH=C:\DATASYSTEM\DATA

As palavras-chave a seguir são reconhecidas como elementos do cabeçalho da sequência (diferenciam maiúsculas de minúsculas e devem ser digitadas conforme mostrado abaixo):

CREATIONDATE=

LASTCHANGEDATE=

METHODPATH= (máximo de 128 caracteres)

PRINTREPORTS=(YES ou NO)

DATAPATH= (máximo de 128 caracteres)

PRETREATPATH= (máximo de 128 caracteres)

SUMMARYPATH= (máximo de 128 caracteres)

DESCRIPTION=

Nenhuma dessas palavras-chave é obrigatória; se não houver uma no arquivo texto, será usado um valor padrão.

Nota: Durante a criação de campos de descrição com várias linhas, um caractere 0x07 hexadecimal pode ser usado para incorporar uma (nova linha) ao texto. Normalmente, isso deve ser feito por um programa de software capaz de gravar diretamente caracteres hexadecimais. Alguns editores de texto oferecem suporte à entrada por teclado dos caracteres hexadecimais, mantendo-se a tecla alt pressionada enquanto se digita 07 no teclado numérico.

Registros da sequência ASCII

Depois da especificação de todos os elementos de cabeçalho da sequência, o restante do arquivo texto consiste em linhas especificando os registros da tabela de sequências. O registro contém elementos delimitados por vírgula que detalham a operação dessa linha da sequência.

Nota: Alguns amostradores automáticos usam uma designação não numérica para posições do frasco (por exemplo, 'A7' para uma microchapa). Caso a configuração do instrumento inclua um amostrador automático desse tipo, consulte o guia de instalação do driver para obter detalhes sobre como codificá-lo de maneira a estar compatível com a importação de sequências ASCII.

Estas são as linhas do formulário:

RECORD=a,b,c,d,e,f,g,h,i,j,k,l,m,n,o,p,q,r,s,t,u

Onde:

a = ID da amostra (máximo de 63 caracteres)

b = Nome do método (máximo de 63 caracteres)

c = Nome do arquivo (máximo de 63 caracteres)

d = Nível de calibração (0 - x, 0 = sem calibração)

e = Quantidade da amostra (número real > 0)

f = Valor do padrão interno (número real > 0)

g = Fator de multiplicação 1 (número real > 0)

h = Frasco de injeção

i = Volume de injeção

j = Nome do arquivo de pré-tratamento

k = Nome do arquivo de coletor de fração

l = Reservado; não especifique nada entre as vírgulas

m = Tipo de corrida (consulte lista abaixo)

n = Ação (Deixe em branco. Esta linha não é mais usada.)

o = Descrição da corrida

p = Repetições por frasco (1 - 9)

q = Fator de multiplicação 2 (número real > 0)

r = Fator de multiplicação 3 (número real > 0)

s = Fator de diluição 1 (número real > 0)

t = Fator de diluição 2 (número real > 0)

u = Fator de diluição 3 (número real > 0)

Tipos de Corrida

Nome	*Hexadecimal*	*Decimal*
4	0x0000004	Não marcado
8	0x0000008	Marcado
16	0x0000010	Spike 1 de 2
32	0x0000020	Spike 2 de 2
64	0x0000040	Duplicação 1
128	0x0000080	Duplicação 2
256	0x0000100	Início de adequação do sistema
512	0x0000200	Término de adequação do sistema

1024 0x0000400 Padrão de adequação do sistema

2048 0x0000800 Desligamento

4096 0x0001000 Iniciar calibração

8192 0x0002000 Parar calibração

16384 0x0004000 CQ padrão

32768 0x0008000 Início do resumo

65536 0x0010000 Fim do resumo

131072 0x0020000 Corrida resumida

262144 0x0040000 Limpar todos fatores de resposta

524288 0x0080000 Limpar fatores de resposta neste nível

1048576 0x0100000 Imprimir fatores de resposta

2097152 0x0200000 Média das replicatas

4194304 0x0400000 Limpar replicações

8388608 0x0800000 Iniciar loop

16777216 0x1000000 Parar loop

Registro de Ações em ASCII

Os registros de ações se relacionam apenas ao registro da sequência anterior.

Formulário:

AÇÃO=a,b,c,d,e

a: CONDIÇÃO:

0 Qualquer Condição

1 Calibração

2 CQ

3 Adequação do sistema

4 Status do hardware

5 Limite conc.

b: RESULTADO:

0 Aprovar

1 Reprovar

2 Abaixo do limite

3 Acima do limite

c: AÇÃO:

0 Abortar

1 Pausar

2 Reinjetar

3 Executar programa do usuário

4 Executar desligamento

5 Alarme

6 Ir para

7 Reiniciar adequação do sistema

d: PARÂMETRO 1:

Para Reinjetar e Ir para - Número de repetições

Para Executar programa do usuário - Caminho e nome do programa.

e: PARÂMETRO 2:

Para Ir para - Ir para número do registro.

Notas: Em relação ao nome do método, do arquivo, do pré-tratamento e do arquivo de coletor de fração: Se esses itens não tiverem nomes de caminho incorporados, o caminho apropriado do cabeçalho será usado (arquivos de coletor de fração devem se encontrar no caminho do arquivo de pré-tratamento). Todos os elementos da linha de registro DEVEM estar presentes; no entanto, qualquer elemento de registro que não seja de interesse pode ser ignorado, não especificando nada entre as vírgulas. Caso você esteja criando o arquivo ASCII com o Microsoft Excel, salve o arquivo no formato *.CSV. O ID da amostra deve estar na mesma célula de RECORD= para impedir uma vírgula depois de (=). Os métodos e os caminhos de dados devem ser selecionados manualmente usando as propriedades da sequência, pois o .CSV adiciona uma vírgula ao caminho.

Exemplo de arquivo de sequência ASCII

Este é um exemplo de um arquivo de sequência ASCII.

Sequência ASCII 1

CREATIONDATE=

LASTCHANGEDDATE=

METHODPATH = D:\System\Methods

PRINTREPORTS = NO

DATAPATH = D:\System\data

PRETREATPATH =

SUMMARYPATH =

DESCRIPTION = A descrição desta sequência ASCII.

RECORD=Amostra,MULTICAL.MET,Multical001.dat,0,1.2,2.91,1.1,1,12,,,,16384,1,,3

RECORD=Amostra,MULTICAL.MET,Multical002.dat,0,1.2,2.91,1.1,2,12,,,,,2,Descrição do Registro,3

RECORD=Amostra,MULTICAL.MET,Multical003.dat,3,1.2,2.91,1.1,1,12,,,,16384,,,3

ACTION = 1,1,3,D:\CHROM\Program.EXE

ACTION = 1,0,2,4

RECORD=Amostra,MULTICAL.MET,Multical004.dat,0,1.2,2.91,1.1,2,12,,,,,4,Descrição do Registro,3

RECORD=Amostra,MULTICAL.MET,Multical005.dat,0,1.2,2.91,1.1,1,12,,,,16384,,,3

ACTION = 3,1,6,7 ,2

ACTION = 3,0,2,4

RECORD=Amostra,MULTICAL.MET,Multical006.dat,6,1.2,2.91,1.1,2,12,,,,16384,3,,3

RECORD=Amostra,MULTICAL.MET,Multical007.dat,0,1.2,2.91,1.1,1,12,,,,,2,,3

RECORD=Amostra,MULTICAL.MET,Multical008.dat,0,1.2,2.91,1.1,2,12,,,,76,,Descrição do Registro,3

ACTION = 4,1,5

ACTION = 4,0,2,4

RECORD=Amostra,MULTICAL.MET,Multical009.dat,9,1.2,2.91,1.1,1,12,,,,16384,1,,3

RECORD=Amostra,MULTICAL.MET,Multical010.dat,0,1.2,2.91,1.1,2,12,,,,16384,2,,3

Exemplo de arquivo de sequência ASCII para torre dupla

Sequência ASCII 1

CREATIONDATE=

LASTCHANGEDDATE=

METHODPATH = \\Qa-glisowski01\transfer

PRINTREPORTS =

NO DATAPATH = \\Qa-glisowski01\transfer\public

PRETREATPATH =

SUMMARYPATH =

DESCRIPTION = A descrição desta sequência ASCII.

TOWER=0

RECORD=Amostra inicial 1,HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical001.dat,0,1.2,2.91,1.1,1,1,,,,16384,1,,3

RECORD=Amostra inicial 2,HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical002.dat,0,1.2,2.91,1.1,2,1,,,,,2,Descrição do registro,3

RECORD=Amostra inicial 3,HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical003.dat,3,1.2,2.91,1.1,3,1,,,,16384,,,3

ACTION = 1,1,3,D:\CHROM\Program.EXE

ACTION = 1,0,2,4

RECORD=Amostra inicial 4,HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical004.dat,0,1.2,2.91,1.1,4,1,,,,,4,Descrição do registro,3

RECORD=Amostra inicial 5,HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical005.dat,0,1.2,2.91,1.1,5,1,,,,16384,,,3

ACTION = 3,1,6,7 ,2

ACTION = 3,0,2,4

RECORD=Amostra inicial 6,HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical006.dat,6,1.2,2.91,1.1,6,1,,,,16384,3,,3

RECORD=Amostra inicial 7,HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical007.dat,0,1.2,2.91,1.1,7,1,,,,,2,,

RECORD=Amostra inicial 8,HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical008.dat,0,1.2,2.91,1.1,8,1,,,,76,,Descrição do registro,3

ACTION = 4,1,5,

ACTION = 4,0,2,4,

RECORD=Amostra inicial 9,HP6890 FRONT

JL01.MET,FrontMultical009.dat,9,1.2,2.91,1.1,9,1,,,,16384,1,,3,

RECORD=Amostra frontal 10,HP6890 FRONT
JL01.MET,FrontMultical010.dat,0,1.2,2.91,1.1,10,1,,,,16384,2,,3,

TOWER=1 Sequência ASCII 1

CREATIONDATE=

LASTCHANGEDDATE=

METHODPATH = \\Qa-glisowski01\transfer

PRINTREPORTS =

NO DATAPATH = \\Qa-glisowski01\transfer\public

PRETREATPATH =

SUMMARYPATH =

DESCRIPTION = A descrição desta sequência ASCII.

RECORD=Amostra final 1,REAR

JL01.MET,RearMultical001.dat,0,1.2,2.91,1.1,11,1,,,,16384,1,,3

RECORD=Amostra final 2,HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical002.dat,0,1.2,2.91,1.1,12,1,,,,,2,Descrição do registro,3

RECORD=Amostra final 3,HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical003.dat,3,1.2,2.91,1.1,13,1,,,,16384,,,3

ACTION = 1,1,3,D:\CHROM\Program.EXE

ACTION = 1,0,2,4

RECORD= Amostra final 4,HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical004.dat,0,1.2,2.91,1.1,14,1,,,,,4,Descrição do registro,3

RECORD=Amostra final 5,HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical005.dat,0,1.2,2.91,1.1,15,1,,,,16384,,,3

ACTION = 3,1,6,7 ,2

ACTION = 3,0,2,4

RECORD=Amostra final 6,HP6890REAR

JL01.MET,RearMultical006.dat,6,1.2,2.91,1.1,16,1,,,,16384,3,,3

RECORD=Amostra final 7,HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical007.dat,0,1.2,2.91,1.1,17,1,,,,,2,,3

RECORD=Amostra final 8,HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical008.dat,0,1.2,2.91,1.1,18,1,,,,76,,Descrição do registro,3

ACTION = 4,1,5

ACTION = 4,0,2,4

RECORD= Amostra final 9,HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical009.dat,9,1.2,2.91,1.1,19,1,,,,16384,1,,

RECORD=Amostra final 10,HP6890 REAR

JL01.MET,RearMultical010.dat,0,1.2,2.91,1.1,20,1,,,,16384,2,,3

Referência funcional

As funções são usadas para definir quais dados deverão ser exibidos e a fonte dos dados, bem como para aplicar fórmulas matemáticas. As funções não aparecem na planilha, a menos que estejam sendo editadas. (Para exibir a função em uma célula, clique duas vezes nessa célula.) Os resultados das funções definidas não aparecem na planilha, mas aparecerão na Visualização de impressão, ou quando o relatório for impresso, contanto que os dados necessários para que a função opere estejam disponíveis. (Por exemplo, as tabelas de resumo da sequência não conterão dados válidos até que uma sequência seja adquirida e processada ou reprocessada.)

Caso os dados necessários para a operação da função não estejam disponíveis, uma mensagem de erro pode ser exibida na planilha. Quando isso acontecer, clique em OK para fechar a mensagem de erro e, em seguida, clique no botão Visualização de impressão. Se a função estiver tecnicamente correta mas não tiver dados disponíveis, nenhuma mensagem de erro aparecerá na visualização de impressão. Se uma mensagem de erro aparecer na visualização de impressão, a função não foi especificada corretamente.

As seguintes funções estão disponíveis durante a criação de relatórios avançados usando o editor de modelo.

Notas quanto à sintaxe:

= Todas as funções descritas aqui são colocadas em células na planilha de relatório modelo e devem começar com um sinal '**=**'. Por exemplo, se uma função fosse descrita como Func.Person(["Param A"]), a função real seria algo semelhante a =Func.Person("Param A")

[ ] Esses colchetes indicam parâmetros opcionais. Os próprios colchetes não estão incluídos nos parâmetros reais. Por exemplo, se uma função fosse descrita como Func.Person(["Param A"]), a função real seria algo semelhante a =Func.Person("Param A")

< > Esses sinais indicam parâmetros obrigatórios. Os próprios sinais não estão incluídos nos parâmetros reais. Por exemplo, se uma função fosse descrita como Func.Person(<"Param A">), a função real seria algo semelhante a =Func.Person("Param A")

"" Aspas devem ser mostradas. As aspas estão incluídas nos parâmetros reais. Por exemplo, se uma função fosse descrita como Func.Person(<"Param A">), a função real seria algo semelhante a =Func.Person("Param A")

Data.SystemWideParamByName

Retorna um resultado personalizado para todo o sistema do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.ParâmetroTodoSistemaPorNome (,)

Parâmetros

O nome do identificador do parâmetro personalizado para todo o sistema solicitado.

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Tipo de retorno

String / Número

Data.AcquisitionDate

Retorna data e hora da aquisição do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.DataAquisição()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Data/Hora

Data.AnalysisDate

Retorna data e hora da última análise do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.DataAnálise()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Data/Hora

Data.BCDValue

Retorna valor de BCD do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.ValorBCD()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Data.Description

Retorna a descrição do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.Descrição()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.Filename

Retorna o nome do arquivo de dados especificado. Apenas o nome do arquivo é retornado; as informações sobre o caminho, não.

Sintaxe

=Dados.NomeArquivo()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.FullFilename

Retorna o nome completo do arquivo de dados especificado. O nome do arquivo e as informações sobre o caminho são retornados.

Sintaxe

=Dados.NomeCompletoArquivo()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.InstrumentName

Retorna o nome do instrumento usado para adquirir o arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.NomeInstrumento()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.ISTDAmount

Retorna a amostra PI do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.QuatidadePI()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Data.LastMethodFilename

Retorna o nome do último arquivo de método usado para analisar o arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.NomeÚltArqMétodo()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.LastMethodFullFilename

Retorna o nome completo e o caminho do último arquivo de método usado para analisar o arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.NomeComplÚltArqMétodo()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.MultiplierFactor

Retorna o fator multiplicador do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.FatorMultiplicador()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Data.OriginalMethodFilename

Retorna o nome do arquivo de método usado para adquirir o arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.NomeArqMétodoOriginal()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.OriginalMethodFullFilename

Retorna o nome completo e o caminho do arquivo de método usado para adquirir o arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.NomeComplArqMétodoOriginal()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.SampleAmount

Retorna a quantidade da amostra do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.QuantidadeAmostra()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Data.SampleID

Retorna o ID da amostra do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Data.SampleID()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.SystemWideParam

Retorna um resultado personalizado para todo o sistema do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.ParâmetroTodoSistema (,)

Parâmetros

Um identificador numérico do parâmetro personalizado para todo o sistema solicitado.

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String / Número

Data.TraceName

Retorna o nome do traço do índice especificado e do arquivo de dados.

Sintaxe

=Data.TraceName(,)

Parâmetros

Um índice numérico do traço solicitado.

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.UserName

Retorna o nome do usuário que adquiriu o arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.Usuário()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Data.Vial

Retorna frasco do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.Frasco()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Data.Volume

Retorna o volume do arquivo de dados especificado.

Sintaxe

=Dados.Volume()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção descrição do parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Funções do Datafile

Essas funções retornam informações sobre arquivos de dados coletados e analisados.

Ex.D

Retorna um intervalo de células para um conjunto dinâmico de dados. Se os dados em uma célula forem expandidos dinamicamente, essa função poderá ser usada para criar uma referência às células para as quais os dados se expandem.

Sintaxe

=Ex.D (, [Direção do Intervalo])

Parâmetros

Contém uma referência a uma célula que será expandida para um intervalo dinâmico de dados. Ela está na forma 'B5', 'C12' etc. Não há aspas na referência da célula.

[Direção do Intervalo] Esse é um parâmetro numérico opcional que especifica a direção da expansão dinâmica a ser usada. Caso os dados sejam expandidos em apenas uma direção, esse parâmetro não será necessário. Caso os dados estejam em expansão na horizontal e na vertical, esse parâmetro poderá ser usado para controlar o intervalo a ser usado. Os valores desse parâmetro são os seguintes:

Não Usado ou 0 Uso de qualquer intervalo dinâmico disponível. Se os dados se expandirem na horizontal e na vertical, um intervalo será gerado contendo toda a expressão.

1 Gere apenas um intervalo para dados dinâmicos que se expandam ao longo da planilha.

2 Gere apenas um intervalo para dados dinâmicos que se expandam abaixo da planilha.

Tipo de retorno

Intervalo de células

Ex.R

Essa função pode ser usada para repetir uma fórmula em planilha em uma série de células com base em um conjunto de dados dinâmicos. Por exemplo, essa função poderia ser usada para produzir um campo total mostrando a soma de um conjunto de áreas de pico para todos os picos em um arquivo de dados.

Durante seu uso, a função incluída não deve ter nenhuma informação sobre corrida, traço ou pico. Por exemplo, a fórmula para mostrar a área de pico do primeiro pico nomeado do arquivo de dados atual usando o primeiro traço seria:

=Pico.Área("RC", "T1", "P1;3")

No entanto, durante a repetição da fórmula com a função EX.R, para mostrar a área de pico de todos os picos nomeados de todas as corridas de uma sequência que usam o primeiro traço, a fórmula seria como a seguinte:

=Ex.R(Pico.Área(), "RA;1;0", "T1", "PA;3;0;0")

Sintaxe

=Ex.R(, , [Info Traço], [Informações Dinâmicas de Pico])

ou

=Ex.R(, , [Info Traço], [Info Grupo Dinâmico])

Parâmetros

Contém todas as fórmulas de planilha válidas que serão expandidas para um intervalo dinâmico de dados.

[Direção do Intervalo] Esse é um parâmetro numérico opcional que especifica a direção para a qual se deve repetir a fórmula. Caso a célula referenciada esteja sendo repetida em apenas uma direção, esse parâmetro não será necessário. Caso a célula referenciada esteja sendo repetida na horizontal e na vertical, esse parâmetro poderá ser usado para controlar a direção a ser usada. Os valores desse parâmetro são os seguintes:

Não Usado ou 0 Repetir exatamente como a célula referenciada. Se a célula referenciada se repetir na horizontal e na vertical, essa fórmula será repetida tanto na horizontal quanto na vertical.

1 Repita apenas a fórmula ao longo da planilha como faz a célula referenciada.

2 Repita apenas a fórmula abaixo da planilha como faz a célula referenciada.

Usado para determinar o intervalo dinâmico para expandir a fórmula.

[Info Traço] Trata-se de um parâmetro opcional usado para determinar o intervalo dinâmico e expandir a fórmula. Consulte a seção Descrição do parâmetro para obter uma descrição desse parâmetro.

[Informações Dinâmicas de Pico] Trata-se de um parâmetro opcional usado para determinar o intervalo dinâmico e expandir a fórmula.

Tipo de retorno

Nenhum

'Informações Dinâmicas da Corrida' pode ser um dos seguintes:

"CA"	A corrida atual ou o arquivo de dados carregado atualmente.
"C"	A corrida da sequência especificada pela corrida .
"R; ; "	As corridas de sequência especificadas por . As corridas serão repetidas na direção especificada por , sendo separadas por linhas ou colunas.
"RA; ; "	Toda a sequência é executada. As corridas serão repetidas na direção especificada por , sendo separadas por linhas ou colunas.

'Informações Dinâmicas de Pico' pode ser um dos seguintes:

"P; "	O pico com um índice igual a com o tipo de pico indicado.
"P; ; ; "	Os picos com um índice no intervalo com o tipo de pico indicado. Os picos serão repetidos na direção especificada por , sendo separados por linhas ou colunas.
"PA; ; ; "	Todos os picos do tipo especificado. Os picos serão repetidos na direção especificada por , sendo separados por linhas ou colunas.

'Info grupo Dinâmico' pode ser um dos seguintes:

"G; "	O grupo com um índice igual a com o tipo de grupo indicado.
"G; ; ; "	Os grupos com um índice no intervalo com o tipo de grupo indicado. Os grupos serão repetidos na direção especificada por , sendo separados por linhas ou colunas.
"GA; ; ; "	Todos os grupos do tipo especificado. Os grupos serão repetidos na direção especificada por , sendo separados por linhas ou colunas.

'Direção' pode ser uma das seguintes:

0	Os dados serão repetidos ao longo da planilha.

1	Os dados serão repetidos abaixo da planilha.

'**Tipo de Pico**'**pode ser qualquer combinação de:**

1	Relatar picos nomeados detectados.
2	Relatar picos nomeados não detectados.
4	Picos não nomeados relatados.

'**Tipo de Grupo**' **pode ser um dos seguintes:**

0	Relatar grupos de intervalos calibrados que calculam concentrações de picos não nomeados neste grupo.
1	Relatar grupos de intervalos calibrados que não calculam concentrações de picos não nomeados neste grupo.
2	Relatar grupos de picos nomeados.

Funções auxiliares estendidas

Essas funções são fornecidas para facilitar o uso de outros recursos da planilha.

Group.Area

Retorna a área dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Grupo.Área(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Group.AreaPercent

Retorna o percentual de área dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Grupo.ÁreaPorcentagem(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Group.ESTDConcentration

Retorna a concentração ESTD dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Grupo.ConcentraçãoESTD(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Funções de grupo

Essas funções retornam informações sobre grupos.

Group.Height

Retorna a altura dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Grupo.Altura(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Group.HeightPercent

Retorna a porcentagem de altura dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Grupo.AlturaPorcentagem(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Group.ISTDConcentration

Retorna a concentração PI dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Grupo.ConcentraçãoPI(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Group.Name

Retorna o nome dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Grupo.Nome(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Group.NORMConcentration

Retorna a concentração NORM dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Grupo.ConcentraçãoNORM(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Group.Number

Retorna o número dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Grupo.Número(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Group.Quantitation

Retorna a quantificação dos grupos solicitados. Isso retornará 'Área', 'Altura' ou 'Contagens'.

Sintaxe

=Grupo.Quantificação (, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Group.ResponseFactor

Retorna o fator de resposta dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Group.ResponseFactor(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Group.Units

Retorna as unidades dos grupos solicitados.

Sintaxe

=Grupo.Unidades(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os grupos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Funções do Instrumento

Essas funções retornam informações sobre o instrumento atual.

Instrument.ID

Retorna o id do instrumento interno atual.

Sintaxe

=Instrumento.ID()

Parâmetros

Nenhum

Tipo de retorno

Número

Instrument.Name

Retorna o nome do instrumento interno atual.

Sintaxe

=Instrumento.Nome()

Parâmetros

Nenhum

Tipo de retorno

String

Instrument.UserName

Retorna o nome do usuário registrado no instrumento atual.

Sintaxe

=Instrumento.Usuário()

Parâmetros

Nenhum

Tipo de retorno

String

Descrição do parâmetro

A seguir, a descrição dos parâmetros que podem ser passados para funções de modelo a fim de descrever informações sobre o arquivo de dados solicitado, o pico e o grupo.

'Info Corrida' pode ser um dos seguintes:

"CA" A corrida atual ou o arquivo de dados carregado atualmente.

"C" A corrida da sequência especificada pela corrida .

'**Info Traço**' **pode ser um dos seguintes:**

"T" O traço especificado pelo índice .

'**Info Pico**' **pode ser um dos seguintes:**

"P; " O pico com um índice igual a com o tipo de pico indicado.

'**Info Grupo**' **pode ser um dos seguintes:**

"G; " O grupo com um índice igual a com o tipo de grupo indicado.

'**Direção**' **pode ser uma das seguintes:**

0 Os dados serão repetidos ao longo da planilha.

1 Os dados serão repetidos abaixo da planilha.

'**Tipo de Pico**'**pode ser qualquer combinação de:**

1	Relatar picos nomeados detectados.
2	Relatar picos nomeados não detectados.
4	Picos não nomeados relatados.

'Tipo de Grupo' pode ser um dos seguintes:

0	Relatar grupos de intervalos calibrados que calculam concentrações de picos não nomeados neste grupo.
1	Relatar grupos de intervalos calibrados que não calculam concentrações de picos não nomeados neste grupo.
2	Relatar grupos de picos nomeados.

Peak.CustomParamByName

Retorna o resultado de pico personalizado dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.ParâmetroPersonalizadoPorNome(, , ,)

Parâmetros

O nome do parâmetro de pico personalizado solicitado.

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor. Consulte o apêndice para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String / Número

Peak.AOHResolution

Retorna a resolução AOH dos picos solicitados.

Sintaxe

=Peak.AOHResolution(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.AOHTheoreticalPlates

Retorna as pratos teóricos AOH dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosAOH(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.AOHTheoreticalPlatesPerMeter

Retorna as pratos teóricos AOH por medidor dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosAOHPorMetro(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.Area

Retorna a área dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.Área(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.AreaPercent

Retorna o percentual de área dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.ÁreaPorcentagem(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.Asymmetry

Retorna a assimetria dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.Assimetria(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.AsymmetryTenPercent

Retorna a assimetria em 10% dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.AssimetriaDezPorcento(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.CapacityFactor

Retorna o fator de capacidade dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.FatorCapacidade(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.CurrentResponseFactor

Retorna o fator de resposta atual dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.FatorRespostaAtual(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.CustomParam

Retorna o resultado de pico personalizado dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.ParâmetroPersonalizado(, , ,)

Parâmetros

Um identificador numérico do parâmetro de pico personalizado solicitado.

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String / Número

Peak.DABResolution

Retorna a resolução DAB dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.ResoluçãoDAB(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.DABTheoreticalPlates

Retorna os pratos teóricos DAB dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosDAB(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.DABTheoreticalPlatesPerMeter

Retorna os pratos teóricos DAB por medidor dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosDABPorMetro(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.EMGResolution

Retorna a resolução EMG dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.ResoluçãoEMG(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.EMGTheoreticalPlates

Retorna os pratos teóricos EMG dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosEMG(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.EMGTheoreticalPlatesPerMeter

Retorna os pratos teóricos EMG por medidor dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosEMGPorMetro(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.ESTDConcentration

Retorna a concentração ESTD dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.ExpectedRetentionTime

Retorna o tempo esperado de retenção dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.TempoRetençãoEsperado(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Funções de pico

Essas funções retornam informações sobre picos detectados e nomeados.

Peak.Height

Retorna a altura dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.Altura(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.HeightPercent

Retorna a porcentagem de altura dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.AlturaPorcentagem(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.Index

Retorna as informações de índice do pico nomeado selecionado com base no id de pico. As informações retornadas podem ser usadas no lugar de para outra função. Por exemplo para localizar o nome do pico nomeado com o id de um pico igual a 2 no arquivo de dados atual, use a seguinte fórmula: =Pico.Nome("CA", "T1", Pico.Índice(2, "CA", "T1"))

Sintaxe

=Pico.Índice(, ,)

Parâmetros

Um identificador numérico do pico nomeado solicitado. Esse número advém da tabela de picos.

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Peak.IntegrationCodes

Retorna os códigos de integração dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.CódigosIntegração(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Peak.ISTDConcentration

Retorna a concentração PI dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.ConcentraçãoPI(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.JPResolution

Retorna a resolução JP dos picos solicitados.

Sintaxe

=Peak.JPResolution(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.JPTheoreticalPlates

Retorna os pratos teóricos JP dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosJP(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.JPTheoreticalPlatesPerMeter

Retorna os pratos teóricos JP por medidor dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosJPPorMetro(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.Name

Retorna o nome dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.Nome(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Peak.NORMConcentration

Retorna a concentração NORM dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.ConcentraçãoNORM(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.Number

Retorna o número do pico detectado dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.Número(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.Quantitation

Retorna a quantificação dos picos solicitados. Isso retornará 'Área', 'Altura' ou 'Contagens'.

Sintaxe

=Pico.Quantificação (, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Peak.RelativeRetentionTime

Retorna o tempo de retenção relativa dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.TempoRetençãoRelativa(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.Resolution

Retorna os resolução dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.Resolução(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.ResponseFactor

Retorna o fator de resposta dos picos solicitados.

Sintaxe

=Peak.ResponseFactor(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.ResolutionID

Retorna o ID de resolução dos picos solicitados.

Sintaxe

=Peak.ResolutionID(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.RetentionTime

Retorna o tempo de retenção dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.TempoRetenção(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.StartTime

Retorna a hora de início dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.HoraInício(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.StopTime

Retorna a hora de parada dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.HoraTérmino(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.TheoreticalPlates

Retorna os pratos teóricos dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricos(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.TheoreticalPlatesPerMeter

Retorna os pratos teóricos por medidor dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosPorMetro(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.Units

Retorna as unidades de concentração dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.Unidades(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

String

Peak.USPResolution

Retorna a resolução USP dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.ResoluçãoUSP(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.USPTheoreticalPlates

Retorna os pratos teóricos USP dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosUSP(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.USPWidth

Retorna a largura da USP dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.LarguraUSP(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.USPTheoreticalPlatesPerMeter

Retorna os pratos teóricos USP por medidor dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.PratosTeóricosUSPPorMetro(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.Width

Retorna a largura dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.Largura(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetropara obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.WidthFiftyPercent

Retorna a largura em 50% dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.LarguraCinquentaPorcento(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.WidthFivePercent

Retorna a largura em 5% dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.LarguraCincoPorcento(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Peak.WidthTenPercent

Retorna a largura em 10% dos picos solicitados.

Sintaxe

=Pico.LarguraDezPorcento(, ,)

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Descreve o traço a ser usado para extrair o valor.

Descreve os picos a serem usados para o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Project.DataPath

Retorna o caminho padrão usado para armazenar arquivos de dados no projeto atual.

Sintaxe

=Projeto.CaminhoDados()

Parâmetros

Nenhum.

Tipo de retorno

String

Project.Description

Retorna a descrição do projeto atual.

Sintaxe

=Projeto.Descrição()

Parâmetros

Nenhum.

Tipo de retorno

String

Funções do projeto

Essas funções retornam informações sobre o projeto atual.

Project.MethodPath

Retorna o caminho padrão usado para armazenar arquivos de método no projeto atual.

Sintaxe

=Projeto.CaminhoMétodo()

Parâmetros

Nenhum.

Tipo de retorno

String

Project.Name

Retorna o nome do projeto atual.

Sintaxe

=Projeto.Nome()

Parâmetros

Nenhum.

Tipo de retorno

String

Project.RootPath

Retorna o caminho raiz padrão do projeto atual.

Sintaxe

=Projeto.CaminhoRaiz()

Parâmetros

Nenhum.

Tipo de retorno

String

Project.SequencePath

Retorna o caminho padrão usado para armazenar arquivos de sequência no projeto atual.

Sintaxe

=Projeto.CaminhoSequência()

Parâmetros

Nenhum.

Tipo de retorno

String

Project.TemplatePath

Retorna o caminho padrão usado para armazenar arquivos de modelo de relatório no projeto atual.

Sintaxe

=Projeto.CaminhoModelo()

Parâmetros

Nenhum.

Tipo de retorno

String

Sequence.Filename

Retorna o nome do arquivo de sequência a ser usado para relatório. Apenas o nome do arquivo é retornado; as informações sobre o caminho, não.

Sintaxe

=Sequência.NomeArquivo()

Parâmetros

Nenhum.

Tipo de retorno

String

Sequence.FullFilename

Retorna o nome completo do arquivo de sequência a ser usado para relatório. O nome do arquivo e as informações sobre o caminho são retornados.

Sintaxe

=Sequência.NomeCompletoArquivo()

Parâmetros

Nenhum.

Tipo de retorno

String

Funções da sequência

Essas funções retornam informações sobre o arquivo de sequência a ser usado para fins de relatório.

Sequence.RunNumber

Retorna o número da corrida da sequência especificada. Essa função pode ser usada com a fórmula EX.R() para gerar o número das corridas em uma sequência. Por exemplo, a seguinte fórmula iria gerar números de todas as corridas de uma sequência abaixo: =EX.R(SEQUÊNCIA.NÚMEROCORRIDA(),"RA;1;0")

Sintaxe

=Sequência.NúmeroCorrida()

Parâmetros

Descreve os arquivos de dados a serem usados para extrair o valor.

Consulte a seção Descrição do Parâmetro para obter uma descrição dos parâmetros acima.

Tipo de retorno

Número

Fórmulas e Funções de Relatórios Avançados

Esta seção apresenta detalhes das fórmulas disponíveis no mecanismo de planilha usado no recurso relatórios avançados.

Veja também

1. Fórmulas de planilha

As fórmulas são a base de uma planilha, estabelecendo e calculando relações matemáticas entre seus elementos. Enquanto entradas numéricas continuam as mesmas até que você as altere, células definidas por fórmulas são alteradas automaticamente para refletir alterações em células referenciadas - mesmo quando há interdependências complexas entre células.

As fórmulas da planilha podem ser calculadas usando números, texto, valores lógicos, referências de célula e outras fórmulas. Por exemplo, é possível calcular facilmente a soma de uma série de células, o total de valores em uma coluna, um valor mínimo ou máximo dentro de um intervalo, o resultado arredondado de outra fórmula ou o valor absoluto de uma entrada de célula. Fórmulas podem expressar interdependências complexas entre as células, podendo definir restrições quanto ao cálculo, como limites para valores aceitáveis ou condições específicas sob as quais um cálculo deve ocorrer.

Uma vez inseridas em uma célula, as fórmulas são escondidas nos bastidores, realizam seu trabalho em segundo plano e exibem apenas o resultado do cálculo. Para exibir a fórmula em uma célula, basta selecionar a célula. A Planilha também fornece uma opção que

permite tornar todas as expressões de fórmula visíveis (por meio de CGXGridParam::m_nDisplayExpression).

Também fornece uma ampla matriz de funções que realizam determinadas tarefas. As funções podem ser usadas sozinhas ou com fórmulas e outras funções. A Planilha fornece muitas funções especializadas, além das encontradas em planilhas de finanças típicas.

1.1 Sintaxe da fórmula

A forma geral de uma fórmula de planilha é:

= **expressão ; expressão de restrição // comentário**

em que expressão define os cálculos necessários à geração do valor da célula, expressão de restrição impõe limites quanto a valores aceitáveis ou circunstâncias sob as quais o cálculo deve acontecer e comentário é um texto que deseje anexar à célula.

A parte de expressão das fórmulas da Planilha é semelhante a uma fórmula algébrica; ela contém valores e operadores que definem as relações entre valores.

A Planilha usa as seguintes convenções nas fórmulas:

Uma fórmula deve começar com um sinal de (=) igual. Quando começa a digitar em uma célula, a Planilha pressupõe automaticamente que você está digitando uma fórmula caso comece com um dos seguintes caracteres:

0 1 2 3 4 5 6 7 8 9 . - @ = +

·Fórmulas podem ter até 511 caracteres. É possível digitar espaços, caso queira, mas a planilha os remove automaticamente.

1.2 Valores da fórmula

As fórmulas podem conter qualquer um ou todos os tipos de valor a seguir:

- Números, como 123, -123, 12.3.
- Endereços de células únicas, como A1, D5, Z100.
- Endereços de intervalos de célula, como B12..G29, A1..D5.
- Referências de célula absoluta denotadas com sinais de cifrão antes da coordenada fixa (A1, $A1 ou A$1), que não serão atualizadas quando a célula de referência for movida ou copiada.
- Funções de planilha, como @SUM ou @RADIANS, com argumentos.
- Texto entre aspas duplas, como "A soma é " ou "Total".
- Nomes de célula ou nomes de intervalo de célula definidos pelo usuário, como **TOTAIS** ou **PROJETO1**

1.3 Operadores da fórmula

A Planilha oferece suporte a todos os operadores aritméticos, booleanos e lógicos disponíveis na linguagem de programação C. Ela não oferece suporte a operadores de

endereço C ou a operadores com efeitos colaterais, como ++. Ela fornece dois operadores, de exponenciação (**) e porcentagem (%), não disponíveis na linguagem C.

As fórmulas da Planilha podem conter os seguintes operadores para definir a relação entre valores.

Operador Precedência Definição

% 14 Porcentagem unário

****** 13 Exponenciação

+ 12 Mais unário

- 12 Menos unário

~ 12 Componente bitwise (inteiro)

! 12 Não lógico

***** 11 Multiplicação

/ 11 Divisão

% 11 Resto (inteiro)

+ 10 Adição

- 10 Subtração

<< 9 À esquerda (inteiro)

>> 9 À direita (inteiro)

< 8 Menor que

> 8 Maior que

<= 8 Menor ou igual a

= 8 Maior ou igual a

== 7 Igual a

!= 7 Diferente de

& 6 Bitwise e ou concatenação de string

^ 5 Bitwise Exclusivo-ou (inteiro)

| 4 Bitwise ou

&& 3 Lógico e

|| 2 Lógico ou

?: 1 Condicional

Em fórmulas com mais de um operador, a Planilha avalia operadores na ordem de precedência apresentada acima, com a maior precedência primeiro. Ou seja, os operadores AND/OR/NOT são avaliados depois dos operadores de desigualdade em uma expressão lógica, e as operações de multiplicação/divisão são realizadas antes das operações de subtração/adição em uma expressão aritmética. Operadores no mesmo nível de precedência são avaliados da esquerda para a direita.

A precedência dos operadores pode ser substituída pelo uso de parênteses para especificar explicitamente a ordem de avaliação.

Eis algumas observações especiais sobre operadores da Planilha:

- Os operadores marcados ``(inteiro)'' na tabela acima convertem automaticamente operandos em inteiros.
- O operador & realiza uma tarefa dupla: como bitwise ``e'', caso os operandos sejam números, ou como um operador de concatenação de string que une duas strings, caso os operandos sejam texto.
- O operador % também realiza uma tarefa dupla: como o operador ``porcentagem'' quando anexado a um número ou expressão numérica, ou como operador ``módulo'' no estilo C quando aplicado entre duas expressões de inteiros.
- Operadores que definem relações de igualdade/desigualdade (como == e <) podem ser usados para comparar strings de texto lexicamente (ordem alfabética). Ao comparar strings mistas lexicamente, a Planilha considera operandos de string inferiores a operandos numéricos.
- O operador condicional retorna o segundo operando caso o primeiro seja avaliado como Verdadeiro (diferente de zero) e retorna o terceiro operando em caso de Falso (zero).
- Em fórmulas com operandos condicionais, o segundo e o terceiro operandos podem ser de qualquer tipo ao qual a planilha oferece suporte, inclusive intervalos. Por exemplo, a expressão

=@SUM(A1 ? B1..C20 : C10..D15)

retorna a soma igual a B1..C20 caso A1 seja avaliado como diferente de zero; do contrário, ela retorna a soma de C10..D15.

- A Planilha aceita a maioria dos operadores aritméticos usada em outras planilhas como o MS Excel, mas existem algumas diferenças na sintaxe e na precedência.

1.4 Referenciando outras células em fórmulas

O potencial real da Planilha está em sua capacidade de calcular relações entre células diferentes na planilha digitando as coordenadas de linha/coluna, ou endereço, na fórmula.

Para referenciar uma célula por endereço:

Digite as coordenadas de linha e coluna da célula na fórmula. Por exemplo, para referenciar a Linha 5 na Coluna D, digite D5.

Para referenciar um grupo contíguo de células por endereço:

Digite as coordenadas de linha e de coluna das duas células nos cantos opostos do bloco a ser referenciado com dois pontos finais (..) entre as coordenadas. Por exemplo, para referenciar as cinco primeiras colunas e as cinco primeiras linhas da planilha, digite A1..E5.

1.5 Referenciamento de célula na Planilha

A Planilha diferencia referências relativas, absolutas e indiretas. Esta última é exclusiva da Planilha.

1.5.1 Referência relativa

A Planilha controla a célula referenciada considerando sua posição em relação à célula da fórmula, não pelo endereço. Por exemplo, caso a fórmula na célula A1 referencie a célula B2, a Planilha se lembra de que a célula referenciada está uma linha abaixo e uma coluna à direita. Se você copiar a fórmula na célula A1 para outro local (por exemplo, D17), a fórmula referenciará a célula uma linha abaixo e uma coluna à direita do novo local (por exemplo, E18).

1.5.2 Referência absoluta

Referências absolutas permanecem iguais, independentemente para onde a fórmula original é movida ou copiada. Por exemplo, caso a fórmula na célula A1 referencie a célula B2 e você copie a fórmula na célula A1 para outro local (por exemplo, D17), a fórmula continua referenciando a célula B2. Para especificar um endereço absoluto da célula, insira um cifrão ($) antes da coordenada do endereço a ser fixada ou antes e ambas coordenadas caso sejam as coordenadas de linha e coluna a serem fixadas. Por exemplo: B2.

Para especificar todo ou parte de um endereço de célula como absoluto, insira um cifrão ($) antes da coordenada do endereço que deve permanecer fixa. Por exemplo:

- B5 torna o endereço completo absoluto.
- $B5 torna a coordenada da coluna (B) absoluta, a coordenada da linha (5) relativa.
- B$5 torna a coordenada da coluna (B) relativa, a coordenada da linha (5) absoluta.

Como os intervalos de célula também são relativos, quando você move um intervalo de célula, as referências em fórmulas dentro desse intervalo são atualizadas para refletir o novo local.

Para especificar uma referência de intervalo absoluto, insira cifrões ($) antes das coordenadas na fórmula. Por exemplo, para tornar o intervalo A1..D5 absoluto, digite a referência como A1..D5.

Para especificar parte de um intervalo de célula como absoluto, insira cifrões antes das coordenadas que devem permanecer absolutas. Por exemplo, $A1..$D5 fixará as coordenadas de coluna das referências de célula, mas ajustará as coordenadas de linha para refletir o novo local.

1.5.3 Para referenciar uma célula ou intervalo por nome:

Digite o nome previamente atribuído da célula ou do bloco de célula na fórmula.

Para atribuir um nome a uma célula ou a um intervalo de células, use o comando DefinirNomeIntervalo.

1.5.4 Referência da célula atual

Determinadas expressões dentro do contexto da Planilha exigem um meio de expressar a célula atual.

Entre os exemplos estão as funções estatísticas condicionais descritas em "Funções de planilha internas" e expressões de restrição descritas em expressões de restrição de seção.

A célula atual é identificada em qualquer expressão com um sinal de sustenido (#). Referências a células nas proximidades da célula atual são feitas com valores de deslocamento entre chaves ({}) seguidos de #.

Os deslocamentos informam à Planilha onde procurar, em relação à célula atual, a célula referenciada.

O formato é o seguinte:

#{deslocamento da coluna, deslocamento da linha}

- Caso você inclua apenas um valor no deslocamento, a Planilha irá supor que ela seja um deslocamento da coluna. Por exemplo, a referência de desvio #{-1} solicita à Planilha observar a coluna à esquerda da célula atual.
- Os valores de deslocamento podem ser constantes ou expressões.

Exemplos:

- #{0,-1} se refere à célula acima da célula atual.
- #{-2} se refere à célula duas colunas à esquerda da célula atual.
- #{1} se refere à célula à direita da célula atual.
- #{0,1} se refere à célula abaixo da célula atual.
- @CSum(C4..C100, #{-1} == "Joe") calcula a soma de todos os valores no intervalo C4..C100 para o qual a célula na coluna à esquerda contém a string ``Joe''.
- @CCOUNT(C4..C100, # #{0,-1}) conta todas as células no intervalo C4..C100 cujo valor é maior que o conteúdo da célula imediatamente acima.
- @XVALUE("master.xs3", #) retorna o valor da mesma referência da célula em que essa função é armazenada na folha indicada.
- /verb/#-1+2/ adiciona 2 ao valor da célula à esquerda.

1.6 Expressões de restrição

Restrições são limitações ou condições impostas sobre as variáveis na planilha. Elas são expressas como expressões algébricas acrescentadas a fórmulas. É possível anexar uma expressão de restrição a qualquer fórmula digitando um ponto-e-vírgula (;) e as condições de restrição depois da fórmula.

Expressões de restrição estabelecem condições nas quais uma fórmula opera ou limites para resultados válidos da fórmula. Elas podem ser relações de igualdade/desigualdade simples ou fórmulas arbitrárias. Qualquer expressão válida da Planilha que retorne um valor numérico também é uma expressão de restrição válida. No entanto, diferentemente da expressão que define um valor da célula, uma expressão de restrição pode referenciar a célula em que reside usando o símbolo #.

Por exemplo, a fórmula

=A1 + A2 ; #2 && #<=B5 || #==C7

significa ``o valor da célula atual é a soma das células A1 e A2 e esse valor deve ser maior que 2 e menor igual ao valor da célula B5, ou igual ao valor da célula C7.''

Expressões de restrição são usadas, por exemplo, nas funções estatísticas condicionais.

O benefício das expressões de restrição é maximizado quando combinado com o suporte à referência da célula

(#) conforme indicação no exemplo acima.

1.7 Dependência explícita

Talvez haja instâncias em que você precise forçar um recálculo quando determinados valores de célula forem alterados, quando não houver nenhuma dependência implícita na fórmula que acionaria um recálculo automático. Essa opção é indicada acrescentando-se uma barra invertida (\) ao final da fórmula dependente. Por exemplo, a fórmula:

=@SUM(A1..A20)\D50

instrui a Planilha a recalcular @SUM(A1..A20) sempre que o conteúdo de D50 for alterado. Esse recurso é especialmente importante quando se tem uma expressão de restrição contendo uma referência de desvio, que produz uma referência da célula fora do intervalo de células referenciado em uma fórmula dependente. Nessas circunstâncias, o recálculo automático não seria necessariamente acionado. Use, por exemplo, o que descrevemos acima:

@CCOUNT(C4..C100, # #{0,-1})

conta todas as células no intervalo C4..C100 cujo valor é maior que o conteúdo da célula imediatamente acima. Para que C4 seja avaliado, ele deve ser comparado com C3 - que não faz parte do intervalo explícito, C4..C100. Sem indicar uma dependência explícita, C4 nunca será avaliado corretamente. Assim, nesse caso, a dependência seria indicada da seguinte forma:

@CCOUNT(C4..C100, # #{0,-1})\C3..C99

que informa à Planilha para recalcular sempre que uma célula no intervalo C3..C99 é alterada.

2. Funções internas

Funções de planilha são fórmulas predefinidas fornecidas com o programa. Elas oferecem um atalho na realização do trabalho de fórmulas longas e complexas. Funções matemáticas e estatísticas costumam ser usadas para somar uma coluna de números, calcular uma média, determinar um valor mínimo ou máximo ou arredondar os resultados de uma fórmula. Outras funções são usadas para fins mais especializados, como calcular o valor futuro de um investimento ou o produto da multiplicação de um intervalo de célula por outro. Algumas funções realizam cálculos que operadores aritméticos não podem, como manipulações de strings de texto.

Funções de planilha são classificadas nas seguintes categorias:

- Matemáticas
- Estatísticas
- Estatísticas condicionais
- String
- Lógicas
- Lógicas digitais
- Financeiras
- Data e Hora
- Diversas
- Ferramentas incorporadas

2.1 Funções matemáticas

As funções matemáticas realizam cálculos, como a determinação de valor absoluto, a localização da parte inteira de um número ou o estabelecimento do valor de uma constante. Embora seja possível realizar essas tarefas com uma fórmula, usar uma função economiza tempo e evita problemas.

A Planilha também fornece um intervalo completo de funções trigonométricas, inclusive seno, cosseno, tangente, arcoseno, seno hiperbólico, arco-seno hiperbólico, bem como vetor, matriz aritmética e manipulação.

Funções matemáticas realizam cálculos com valores numéricos no lugar de argumentos, retornando valores numéricos.

2.2 Funções Estatísticas

As funções estatísticas realizam operações de agregação, como calcular médias, mínimos e máximos.

A Planilha também fornece funções de teste estatístico mais sofisticadas, que realizam operações em um grupo de valores expressos como uma lista de argumentos. Entre eles estão F-test, t-tests, coeficiente de correlação, desvios e todas as médias comuns.

Funções estatísticas retornam valores numéricos.

2.3 Funções estatísticas condicionais

As funções estatísticas condicionais operam de maneira semelhante às funções de agregação estatísticas, exceto pelo último argumento ser uma expressão de restrição que Planilha avalia para todas as células da lista de argumentos.

Apenas células que atendam a critérios de restrição são incluídas no cálculo. A expressão de restrição pode ser qualquer expressão da Planilha que avalie um resultado numérico.

Funções estatísticas condicionais retornam um valor numérico.

2.5 Funções lógicas

As funções lógicas retornam um valor caso um argumento atenda a determinados critérios; e outro valor, caso contrário.

Funções lógicas são usadas como um adjunto para instruções condicionais.

Funções lógicas retornam o valor 1, 0 ou um valor.

2.4 Funções alfanuméricas

As funções alfanuméricas manipulam e avaliam strings de caractere. Por exemplo, funções alfanuméricas podem retornar o comprimento de uma string, encontrar a primeira ocorrência de uma string em um intervalo, alterar uma string de maiúsculas para minúsculas e vice-versa ou substituir uma string por outra.

Funções alfanuméricas retornam strings ou valores numéricos.

2.6 Funções lógicas digitais

As funções lógicas digitais realizam operações lógicas digitais, como AND, OR, NOT etc.

Funções lógicas digitais retornam os valores 0, 1 ou -1 (desconhecido). Qualquer valor cuja parte inteira não seja igual a 0 ou 1 é considerado desconhecido. Valores de entrada desconhecidos podem causar valores de saída desconhecidos.

2.7 Funções financeiras

As funções financeiras realizam cálculos financeiros comuns, como o cálculo do valor futuro de uma anuidade a uma determinada taxa de juros, depreciação direta, depreciação com declinação dupla ou as condições de pagamento de determinado investimento. As funções financeiras na Planilha abrangem anuidades, fluxos de caixa, ativos, títulos e letras do tesouro.

Funções financeiras são mais úteis para solucionar cálculos de fluxo de caixa em que você sabe tudo, exceto uma variável. Por exemplo, caso você saiba o valor presente de um investimento, taxa de juros e pagamento periódico, é possível usar a função @FV para calcular o valor futuro do investimento. Se souber o valor futuro e as demais variáveis, mas precisar saber o valor presente , você poderá usar a função @PV.

Muitas funções financeiras exigem a especificação de uma base de contagem de dias. Uma base de contagem de dias indica a forma na qual os dias de um mês e de um ano devem ser contabilizados. A maioria das funções financeiras em valores mobiliários envolvem quatro bases de contagem de dias diferentes: 30/360, real/real, real/360 e real/365. A base de contagem de dias 30/360 pressupõe meses de 30 dias e anos de 360 dias (12 meses x 30 dias). A Planilha também segue a regra ``Final do mês'' que pressupõe que um título pague juros e sempre cobrará juros no último dia do mês. Regras especiais são seguidas durante o cálculo de dias entre duas datas na base de contagem de dias 30/360.

Por exemplo, Data_Inicio = D1/M1/Y1, Data_Termino = D2/M2/Y2.

1. Se D1=31, a Planilha usará 30 para D1.

2. Se D2=31, a Planilha usará 31, a menos que D1=30 ou D1=31. Nesse caso, a Planilha usará 30.

3. Se D1 for o último dia de fevereiro (D1=28 ou 29, em ano bissexto), a Planilha usará 30 para D1.

4. Se D2 for o último dia de fevereiro (D2=28 ou 29, em ano bissexto) e D1 também for o último dia de

fevereiro, a Planilha usará 30 para D2.

Os argumentos especiais usados por funções financeiras da Planilha são definidos na tabela LISTA DE TAREFAS:

Funções financeiras usam os argumentos definidos na tabela **Taxa de juros.** A taxa de juros a ser usada no cálculo. A taxa pode ser especificada como anual, mensal ou trimestral, mas deve concordar com o incremento usado nos períodos. Por padrão, a taxa de juros é anual.

valor atual O valor presente de um investimento, representando a quantia já recebida de ou colocada em um investimento.

período O número de períodos em que o empréstimo, investimento ou depreciação deve ser calculado. Os períodos podem ser definidos em meses, trimestres ou anos, mas devem concordar com o incremento usado para definir a taxa de juros.

valor futuro O valor futuro de um investimento, dados um determinado valor presente, taxa de juros e número de períodos.

custo O custo original de um ativo de capital depreciável.

valor de salvação O valor restante de um ativo de capital depois do vencimento do período de depreciação.

vida permitida A vida útil de um item perecível.

resultado A taxa de juros que tornará o valor presente dos fluxos de caixa futuros esperados iguais ou preço do instrumento financeiro.

preço O valor presente dos fluxos de caixa futuros esperados onde a taxa de desconto é igual ao resultado do instrumento financeiro.

valor nominal O valor nominal anual de um título.

frequência O número de pagamentos de cupom por ano.

base A base de contagem de dias a ser usada no cálculo.

Funções relacionadas a valores mobiliário de renda fixa normalmente exigem datas especiais como argumentos: data de emissão, data de liquidação, data do primeiro cupom, data do último cupom, data de vencimento de um título. Quando especificadas, as seguintes restrições devem ser seguidas:

vencimento de liquidação da emissão

vencimento do primeiro cupom de emissão

vencimento do último cupom de emissão

2.8 Funções de data e hora

As funções de data e hora retornam valores correspondentes à data, ao mês, à hora, ao minuto ou ao segundo especificados. Também é possível usar funções de data/hora para especificar a hora e a data do sistema atual em uma célula.

Essas funções abrem muitas possibilidades para gerenciar contas a receber e calcular tempos de teste.

A Planilha armazena internamente informações de data e hora usando a mesma convenção dos demais programas de planilha conhecidos:

- Datas são representadas como um inteiro igual ao número de dias desde 31 de dezembro de 1899, logo,
- 1º de janeiro de 1900 é igual a 1.
- Horas são representadas como frações de um dia, começando à meia-noite. Por exemplo, 6h00 é armazenado

como 0,25 (um quarto de um dia com 24 horas).

Usando essa convenção, os valores de data e hora podem ser usados juntos. Por exemplo, o valor de data/hora

1,25 corresponde a 6h00min00 de 1º de janeiro de 1900.

2.9 Funções diversas

As funções diversas realizam vários cálculos, como o retorno de uma referência para células ou intervalos específicas, ou o retorno do argumento N° de uma lista de argumentos.

2.10 Ferramentas incorporadas

As ferramentas incorporadas são um recurso eficiente da Planilha. O seu potencial deriva em parte da possibilidade de retornar um conjunto de dados, e não apenas um único valor. Essa função facilita o uso de operações não escalares, como multiplicação de matrizes e recálculo "ao vivo" tão fáceis de usar quanto uma função de planilha básica.

Ferramentas incorporadas armazenam valores em um grupo de células adjacentes. Essas células adjacentes são definidas como fórmulas constantes com dependências explícitas de células próximas. Por exemplo, uma ferramenta incorporada na célula

B2 pode produzir a fórmula =1.3459\B2 na célula B3. Essa fórmula indica que a célula contém atualmente a constante 1,3459, mas que o valor depende do conteúdo da célula B2 (a célula que contém a ferramenta incorporada).

Essa noção de dependências explícitas é importante para o recálculo. Ela garante que qualquer célula que referenciar B3 não será recalculada até que a célula B2 seja recalculada. Isso garante que os dados gerados pela ferramenta incorporada estejam sempre atualizados.

Ferramentas incorporadas são semelhantes a funções normais, podendo ser copiadas, movidas e formatadas assim como qualquer outra fórmula na planilha. No entanto, você deve seguir uma orientação importante: NÃO combine ferramentas incorporadas com outras ferramentas incorporadas em uma única fórmula. Por exemplo, a fórmula

@INVERT(@MMUL(A1..C4,F1..I3))

não é permitida.

3.1 Funções matemáticas

@ABS(*X*) -O valor absoluto de *X*.

@ACOS(*X*) -O arco-cosseno de *X*.

@ASIN(*X*) -O arcoseno de *X*.

@ATAN(*X*) -O arco-tangente de dois quadrantes de *X*.

@ATAN2(*X, Y*) -O arco-tangente de quatro quadrantes de *Y/X*.

@CEIL(*X*) -O menor inteiro maior ou igual a *X*.

@COS(*X*) -O cosseno de *X*.

@COSH(*X*) -O cosseno hiperbólico de *X*.

@DEGREES(*X*) -Converte o ângulo expressado em radianos em graus ( ).

@DET(*M*) -O determinante do intervalo da matriz *M*, que deve ser uma matriz quadrada.

@DOT(*R1, R2*) -O produto final dos vetores *R1* e *R2*.

@EXP(*X*) -*e* elevado à potência *X*.

@FACT(*N*) - O valor de *N!*.

@FLOOR(*X*) -O maior inteiro menor ou igual a *X*.

@FRAC(*X*) -A parte fracionária de *X*.

@GAMMA(*X*) -O valor da função gama avaliada em *X*.

@GRAND -Uma aproximação binomial de 12 graus em relação a um número aleatório Gaussiano com média zero e variação de unidade.

@INT(*X*) -A parte inteira igual a *X*.

@LN(*X*) -O logaritmo natural (base *e*) de *X*.

@LNGAMMA(*X*) -A base de registro *e* da função gama avaliada em *X*.

@LOG(*X*) -A A base de registros 10 de *X*.

@LOG10(*X*) -A A base de registros 10 igual a *X*.

@LOG2(*X*) -A A base de registros 2 de *X*.

@MOD(*X, Y*) -O resto de *X/Y*.

@MODULUS(*X, Y*) -O módulo de *X/Y*.

@PI -O valor de p.

@POLY(*X, ...*) -O valor de um polinomial de grau *N* em *X*.

@PRODUCT(*X, ...*) -O produto de todos os valores numéricos na lista de argumentos.

@RADIANS(*X*) -Converte o ângulo expresso em graus em radianos ( ).

@RAND -Um número aleatório uniforme do intervalo [0,1).

@ROUND(*X, n*) -*X* arredondado para n número de casas decimais (0 a 15).

@SIGMOID(*X*) -O valor da função sigmóide.

@SIN(*X*) -O seno de *X*.

@SINH(*X*) -O seno hiperbólico de *X*.

@SQRT(*X*) -A raiz quadrada positiva de *X*.

@SUMPRODUCT(*R1, R2*) -O produto final dos vetores *R1* e *R2*, em que *R1* e *R2* têm a mesma dimensão.

@TAN(*X*) -A tangente de *X*.

@TANH(*X*) -A tangente hiperbólica de *X*.

@TRANSPOSE(*M*) -A transposição da matriz *M*.

@VECLEN(...) -A raiz quadrada da soma dos quadrados dos argumentos.

3.2 Funções estatísticas

@AVG(...) -A média (média aritmética) dos argumentos.

@CORR(*R1, R2*) -Coeficiente de correlação produto/momento de Pearson dos dados comparados em intervalos *R1* e *R2*.

@COUNT(...) -Uma contagem dos argumentos que não estão em branco.

@F(*M, N, F*) -O integral da distribuição *F* de Snedecor com graus *M* e *N* de liberdade em relação à infinidade inferior de *F*.

@ERF(*L[, U]*) -Função de erro integrada entre 0 e *L*; caso *U* seja especificada, entre *L* e *U*.

@ERFC(*L*) -Função de erro complementar integrada entre *L* e infinidade.

@FORECAST(...) -Valores *Y* previstos para determinado *X*.

@FTEST(*R1, R2*) -O nível de importância ( ) do teste *F* de dois lados em variâncias dos dados especificados por *R1* e *R2*.

@GMEAN(...) -A média geométrica dos argumentos.

@HMEAN(...) -A média harmônica dos argumentos.

@LARGE(*R, N*) -O *N* maior valor do intervalo *R*.

@MAX(...) -O máximo dos argumentos.

@MEDIAN(...) -O mediano (valor intermediário) do intervalo *R1*.

@MIN(...) -O mínimo dos argumentos.

@MODE(...) - O modo ou o valor mais frequente.

@MSQ(*...*) -A média dos quadrados dos argumentos.

@PERCENTILE(*R, N*) -O valor do intervalo *R* dentro do percentual *N* em *R*.

@PERCENTRANK(*R, N*) -A classificação em percentual do número *N* dentre os valores no intervalo *R*.

@PERMUT(*S, T*) -O número de objetos *T* que podem ser escolhidos no conjunto *S*, em que a ordem é significativa.

@PTTEST(*R1, R2*) -O nível de importância ( ) do teste *T* de dois lados das amostras comparadas contidas nos intervalos *R1* e *R2*.

@QUARTILE(*R, Q*) -O quartil *Q* dos dados no intervalo *R*.

@RANK(*E, R[, O]*) -A classificação de um argumento numérico *E* no intervalo *R*.

@RMS(*...*) -A raiz da média dos quadrados dos argumentos.

@SMALL(*R, N*) -O *N* menor valor do intervalo *R*.

@SSE(*...*) -O erro ao quadrado da soma dos argumentos. Isso equivale a @VAR(...) @COUNT(...).

@SSQ(*...*) -A soma dos quadrados dos argumentos.

@STD(*...*) -O desvio padrão de população (ponderação N) dos argumentos.

@STDS(*...*) -O desvio padrão da amostra (ponderação N-1) dos argumentos.

@SUM(*...*) -A soma dos argumentos.

@T(*N, T*) -A

distribuição integral *T* de Student com *N* graus de liberdade em relação à infinidade inferior de *T*.

@TTEST(*R, X*) -O nível de importância (da população única de dois lados de teste *T* das amostras de população contidas no intervalo *R*.

@TTEST2EV(*R1, R2*) -O nível de importância do teste ( ) *T* de dois lados da população dupla dos intervalos *R1* e *R2*, em que as variâncias de população são iguais.

@TTEST2UV(*R1, R2*) -O nível de importância do teste ( ) *T* de dois lados da população dupla dos intervalos *R1* e *R2*, em que as variâncias de população não são iguais.

@VAR(*...*) -A variância de amostra (ponderação N) dos argumentos.

@VARS(*...*) -A variância de amostra (ponderação N-1) dos argumentos.

@VSUM(...) -A ``soma visual'' dos argumentos, usando a precisão e o arredondamento de valores de célula formatados.

3.3 Funções estatísticas condicionais

@CAVG(..., C) – Média condicional.

@CCOUNT(..., C) – Contagem condicional.

@CMAX(..., C) – Máximo condicional.

@CMIN(..., C) – Mínimo condicional.

@CSTD(..., C) – Desvio padrão condicional da amostra (ponderação N).

@CSTDS(..., C) – Desvio padrão condicional da amostra (ponderação N-1).

@CSUM(..., C) – Soma condicional.

@CVAR(..., C) – Variância condicional de população (ponderação N).

@CVARS(..., C) – Variância condicional de população (ponderação N-1).

3.4 Funções alfanuméricas

@CHAR(*N*) -O caractere representado pelo código *N*.

@CLEAN(*S*) -A string formada pela remoção de todos os caracteres de não-impressão da string *S*.

@CODE(*S*) -O código ASCII do primeiro caractere na string *S*.

@EXACT(*S1, S2*) -Retorna verdadeiro (1) caso a string *S1* corresponda exatamente à string *S2*; do contrário, retorna 0.

@FIND(*S1, S2, N*) -O índice da primeira ocorrência de *S1* em *S2*.

@HEXTONUM(*S*) -O valor numérico da interpretação hexadecimal de *S*.

@LEFT(*S, N*) -A string composta dos *N* caracteres à esquerda de *S*.

@LENGTH(*S*) -O número de caracteres em *S*.

@LOWER(*S*) -*S* convertido em minúsculas.

@MID(*S, N1, N2*) -A string de comprimento *N2* que começa na posição *N1* em *S*.

@NUMTOHEX(*X*) - A representação hexadecimal da parte inteira igual a *X*.

@PROPER(*S*) -A string *S* com a primeira letra de cada palavra em maiúsculas.

@REGEX(*S1, S2*) -Retorna verdadeiro (1) caso a string *S1* corresponda exatamente à string *S2*; do contrário, retorna falso (0). Permite comparações ``coringa'' interpretando *S1* como uma expressão regular.

@REPEAT(*S, N*) -A string *S* repetida *N* vezes.

@REPLACE(*S1, N1, N2, S2*) -A string formada pela substituição dos caracteres *N2* começando na posição *N1* em *S1* com a string *S2*.

@RIGHT(*S, N*) -A string composta dos *N* caracteres à direita de *S*.

@STRCAT(*...*) -A concatenação de todos os argumentos.

@STRING(*X, N*) -A string que representa o valor numérico igual a *X*, em *N* casas decimais.

@STRLEN(*...*) -O comprimento total de todas as strings nos argumentos.

@TRIM(*S*) -A string formada pela remoção de espaços da string *S*.

@UPPER(*S*) -A string *S* convertida em maiúsculas.

@VALUE(*S*) -O valor numérico representado pela string *S*; do contrário, 0 caso *S* não represente um número.

3.5 Funções lógicas

@FALSE -O valor lógico igual a 0.

@FILEEXISTS(*S*) -1 caso o arquivo *S* possa ser aberto para leitura; do contrário, 0.

@IF(*X, V, F*) -O valor de *V* caso *X* seja avaliado como em zero, ou *F* caso *X* seja avaliado como zero.

@ISERROR(*X*) -Retorna 1 caso *X* ``contenha'' um erro; do contrário, 0.

@ISNUMBER(*X*) -1 caso *X* seja um valor numérico; do contrário, 0.

@ISSTRING(*X*) -1 caso *X* seja um valor de string; do contrário, 0.

@TRUE -O valor lógico igual a 1.

Funções lógicas digitais

@AND(...) -0 caso algum argumento seja 0; 1 caso todos os argumentos sejam 1; do contrário, -1.

@NAND(...) -0 caso todos os argumentos sejam 1; 1 caso algum argumento seja 0; do contrário, -1.

@NOR(...) -0 caso algum argumento seja 1; 1 caso todos os argumentos sejam 0; do contrário, -1.

@NOT(*X*) -0 caso *X*=1; 1 caso *X*=0; do contrário, -1.

@OR(...) -0 caso todos os argumentos sejam 0; 1 caso algum argumento seja 1; do contrário, -1.

@XOR(...) -- 1 caso algum dos argumentos não seja 0 ou 1; do contrário, 0, caso o número total de argumentos com o valor 1 seja par; 1 caso o número total de argumentos com o valor 1 seja ímpar.

3.6 Funções financeiras

@ACCRINT(I, Ft, S, R, P, F[, B]) -Juros acumulados de um título que paga juros periodicamente.

@ACCRINTM(I, S, R, P[, B]) - Juros acumulados de um título que paga juros no vencimento.

@COUPDAYBS(S, M, F[, B]) -O número de dias entre o início do período do cupom e a data de liquidação.

@COUPDAYS(S, M, F[, B]) -O número de dias no período do cupom em que se encontra a data de liquidação.

@COUPDAYSNC(S, M, F[, B]) -O número de dias entre a data de liquidação e a próxima data do cupom.

@COUPNCD(S, M, F[, B]) -A próxima data do cupom depois da data de liquidação.

@COUPNUM(S, M, F[, B]) -O número de pagamentos do cupom entre a data de liquidação e a data de vencimento.

@COUPPCD(S, M, F[, B]) -A data de cupom anterior (mais recente) antes da data de liquidação.

@CTERM(R, FV, PV) -O número de períodos compostos de um investimento.

@CUMIPMT(R, NP, PV, S, E, T) -Os juros acumulados em um empréstimo entre os períodos inicial S e final E.

@CUMPRINC(R, NP, PV, S, E, T) -O principal acumulado pago em um empréstimo entre os períodos inicial S e final E.

@DB(C, S, L, P[, M]) -Abatimento da dívida com redução fixa.

@DDB(C, S, L, N) -Abatimento da dívida com redução dupla.

@DISC(S, M, P, R[, B]) -A taxa de desconto de um título.

@DOLLARDE(FD, F) -Converte uma quantia em dólar expressa como uma fração na forma decimal.

@DOLLARFR(DD, F) -Converte uma quantia em dólar expressa na forma decimal em fração.

@DURATION(S, M, R, Y, F[, B]) -

A duração Macauley de um título com suposto valor nominal de US$ 100.

@EFFECT(*NR, NP*) -Retorna a taxa de juros anual efetiva.

@FV(*P, R, N*) -Valor futuro de uma anuidade.

@FVSCHEDULE(*P, S*) -O valor futuro de um investimento inicial depois da composição de uma série de taxas de juros.

@INTRATE(*S, M, I, R[, B]*) -A taxa de juros de um título com pleno investimento.

@IPMT(*R, P, NP, PV, FV[, T]*) -O pagamento de juros de um período específico de um investimento com base em pagamentos periódicos e constantes, com uma taxa de juros constante.

@IRR(*G, F*) -A taxa interna de retorno de um investimento. (Consulte também @XIRR e @MIRR.)

@MDURATION(*S, M, R, Y, F[, B]*) -A duração Macauley modificada de um título com suposto valor nominal de US$ 100.

@MIRR(*CF, FR, RR*) -A taxa interna modificada de retorno de uma série de fluxos de caixa periódicos.

@NOMINAL(*ER, NP*) -A taxa de juros anual nominal.

@ODDFPRICE(*S, M, I, FC, R, Y, RD, F[, B]*) -O preço por valor nominal de US$ 100 de um título com um período inicial (curto ou longo) ímpar.

@ODDFYIELD(*S, M, I, FC, R, PR, RD, F[, B]*) -O resultado de um título com um período inicial (curto ou longo) ímpar.

@PMT(*PV, R, N*) -O pagamento periódico de um empréstimo.

@PPMT(*R, P, NP, PV, FV, T*) -O pagamento do principal em um período específico de um investimento com base em pagamentos periódicos e constantes, com uma taxa de juros constante.

@PRICE(*S, M, R, Y, RD, F[, B]*) -O preço por valor nominal de US$ 100 de um título que paga juros periódicos.

@PRICEDISC(*S, M, D, RD[, B]*) -O preço por valor nominal de US$ 100 de um título com desconto.

@PRICEMAT(*S, M, I, R, Y[, B]*) -O preço por valor nominal de US$ 100 de um título que paga juros no vencimento.

@PV(*P, R, N*) -O valor presente de uma anuidade

@RATE(*FV, PV, N*) -A taxa de juros necessária para se atingir o valor futuro *FV*.

@RECEIVED(*S, M, I, D, [, B]*) -O valor recebido no vencimento de um título totalmente repassado.

@SLN(*C, S, L*) -Abatimento da dívida linear.

@SYD(*C, S, L, N*) -Abatimento da soma da depreciação dos anos deficitários.

@TBILLEQ(*S, M, D*) -O resultado equivalente do tesouro (BEY) de uma letra do tesouro.

@TBILLYIELD(*S, M, D*) -O resultado de uma letra do tesouro.

@TERM(*P, R, FV*) -O número de períodos de pagamento de um investimento.

@VDB(*C, S, L, S, E*) -Abatimento da dívida com redução fixa entre dois períodos.

@XIRR(*G, V, D*) -Taxa interna de retorno de uma série de fluxos de caixa com intervalos variáveis.

@XNPV(*R, V, D*) -Retorna o valor presente líquido de uma série de fluxos de caixa com intervalos variáveis.

@YIELD(*S, M, R, PR, RD, F[, B]*) -Resultado de um título que paga juros periódicos.

@YIELDMAT(*S, M, I, R, PR[, B]*) -Resultado anual de um título que paga juros no vencimento.

3.7 Funções de data e hora

@DATE(*Y, M, D*) -A data do ano *Y*, do mês *M* e do dia *D*.

@DATEVALUE(*S*) -O valor de data correspondente de uma determinada string *S*.

@DAYS360(*S, E*) -O número de dias entre duas datas com base em um sistema de contagem de dias 30/360.

@DAY(*DT*) -O número do dia no valor de data/hora *DT*.

@EDATE(*S, M*) -O valor data/hora que representa o número de meses (*M*) antes ou depois da data inicial (*S*).

@EOMONTH(*S, M*) -O valor de data/hora que representa o último dia do mês *M* meses depois de *S*, caso M seja positivo, ou *M* meses antes, caso *M* seja negativo.

@HOUR(*DT*) -O valor de hora (0-23) do valor de data/hora *DT*.

@MINUTE(*DT*) -O valor de minuto (0-59) do valor de data/hora *DT*.

@MONTH(*DT*) -O número do mês no valor de data/hora *DT*.

@NETWORKDAYS(*S, E[, H]*) -O número de dias úteis, começando por *S* e indo até *E*, excluindo finais de semana e feriados.

@NOW -O valor de data/hora da data e hora do sistema atual.

@SECOND(*DT*) -O valor de segundos (0-59) do valor de data/hora *DT*.

@TIME(*H, M, S*) -O valor de tempo para a hora*H*, o minuto *M* e o segundo *S*.

@TIMEVALUE(*S*) -O valor de tempo correspondente de um determinado valor de string *S*.

@TODAY -O valor de data da data de sistema atual.

@WEEKDAY(*D*) -O inteiro que representa o dia da semana em que o dia *D* cai. 1 é domingo, 7 é sábado.

@WORKDAY(*S, D[, H]*) -O dia *D* dias úteis depois de *S*, caso *D* seja positivo, ou antes de *S*, caso *D* seja negativo, excluindo finais de semana e todos os feriados especificados como datas no intervalo *H*.

@YEAR(*DT*) -O valor de ano do valor de data/hora *DT*.

@YEARFRAC(*S, E[, B]*) -A parte do ano representada pelo número de dias entre as datas inicial (*S*) e final (*E*).

3.8 Funções diversas

@CELLREF(*N1, N2*) -Uma referência à célula na coluna *N1* e na linha *N2*.

@CHOOSE(*N, ...*) -O *N* argumento da lista.

@COL(*C*) -O endereço de coluna da célula referenciada por *C*.

@COLS(*R*) -O número de colunas no interv. específico *R*.

@HLOOKUP(*X, S, R*) -O valor da célula no intervalo *S*, ou seja, o número *R* de linhas abaixo de *X*.

@INIT(*X1, X2*) -O primeiro argumento na primeira aprovação de recálculo e o segundo argumento em todas as aprovações de recálculo subsequentes quando a Planilha está realizando cálculos iterativos.

@INTERP2D(*R1, R2, N*) -O valor de interpolação de um vetor bidimensional.

@INTERP3D(*R, X, Y*) -O valor de interpolação de um vetor tridimensional.

@MATCH(*V, R[, T]*) -A posição relativa no intervalo *R* do valor *V* com base nos critérios de posicionamento *T*.

@N(*R*) -O valor numérico da célula superior esquerda no intervalo *R*.

@RANGEREF(*N1, N2, N3, N4*) -Uma referência ao intervalo definido pelas coordenadas *N1* a *N4*.

@ROW(*C*) -O endereço de linha da célula referenciada por *C*.

@ROWS(*R*) -O número de linhas no interv. específico *R*.

@S(*R*) -O valor de string da célula superior esquerda no intervalo *R*.

@VLOOKUP(*X, S, C*) -O valor da célula no intervalo *S*, que é o número *C* de colunas à direita de *X*.

IMPORTANTE: Algumas funções da Planilha retornam um resultado que é o intervalo ou a referência da célula.

A Planilha não inclui essas referências indiretas na determinação do padrão de recálculo.

Planeje cuidadosamente antes de usar essas funções. Consulte a seção, Referências à célula calculada no final deste capítulo para obter mais informações.

3.9 Ferramentas incorporadas

@DFT(*R*) -A transformada discreta de Fourier do intervalo *R*.

@EIGEN(*M*) -As raízes latentes da matriz *M*.

@FFT(*R*) -A transformada discreta de Fourier do intervalo *R* usando um algoritmo rápido da transformada Fourier.

@FREQUENCY(*R, B*) -Retorna uma distribuição de frequência dos valores *R* com um conjunto de intervalos *B*.

@INVDFT(*R*) -O inverso da transformada discreta de Fourier do intervalo *R*.

@INVERT(*M*) -O inverso da matriz *M*.

@INVFFT(*R*) -O inverso da transformada discreta de Fourier do intervalo *R* usando um algoritmo rápido da transformada Fourier.

@LINFIT(*X, Y*) -O ajuste dos mínimos quadrados de linha reta. Essa função é equivalente a @POLYFIT(*X, Y, 1*).

@LLS(*A, Y*) -A solução de mínimos quadrados lineares *X* para o sistema de equações com determinação excedida *AX=Y*.

@MMUL(*M1, M2*) -O produto da multiplicação da matriz *M2* pela matriz *M1*.

@PLS(*X, Y, d*) -Analisa o modelo polinomial de mínimos quadrados *Y=P(X)*, em que *P* é polinômio de grau *d*.

@POLYCOEF(*X, Y, d*) -Os coeficientes de mínimos quadrados para o ajuste polinomial *Y=P(X)*, em que *P* é polinômio de grau *d*.

@TRANSPOSE(*M*) -A transposição da matriz *M*.

@TREND(*NX, KX, KY*) -Os valores *y* dos novos valores *x* dados valores *x* e *y* existentes.

Nota

Ferramentas incorporadas não devem estar dentro de outras funções ou operações aritméticas em uma única fórmula. No entanto, você pode copiar, mover e formatar ferramentas incorporadas, assim como com qualquer outra função.

4. Como Usar Funções Internas da Planilha

A função será especificada na célula da mesma forma que se especifica uma fórmula ou qualquer outra entrada, com algumas orientações adicionais.

• Digite o nome da função. A Planilha reconhece a string como função. Os nomes das funções são abreviações que indicam o uso da função. Por exemplo, ABS calcula o valor absoluto, ROUND arredonda para o número especificado de casas decimais e AVG calcula a média de uma lista de argumentos. Os nomes de função podem ser precedidos de um sinal '@', mas isso não é obrigatório.

Depois de digitar o nome da função, especifique argumentos entre parênteses. A maioria das funções usa um ou mais argumentos para definir a tarefa a ser realizada. Por exemplo, a função @AVG estabelece uma média entre os valores de dois ou mais argumentos. A função @LENGTH retorna o comprimento de um argumento que seja uma string de caracteres.

• Use apenas os argumentos exigidos pela função, na ordem exata especificada na sintaxe da função. Se você especificar outros argumentos ou inseri-los na ordem errada, a Planilha interpretará equivocadamente o significado ou retornará uma mensagem de erro.

• Todos os nomes de função neste capítulo são digitados em maiúsculas, mas você pode inseri-los em maiúsculas ou minúsculas em suas entradas.

4.1 Argumentos

Argumentos especificam os valores que a função deve usar nos cálculos. O número de argumentos, seus tipos e formatos variam de uma função para outra. Argumentos costumam ser valores numéricos, referências à célula ou ao intervalo, ou valores de string. A maioria das funções tem pelo menos um argumento; algumas não tem nenhum.

O gráfico a seguir mostra tipos diferentes de argumentos usados em funções da Planilha.

Exemplo de argumento

Valor numérico 123

Endereço de uma célula A10

Endereço de um intervalo F9..F99

Valor de string ``Relatório trimestral''

4.2 Como usar operadores com funções

O resultado de uma função depende da ordem em que Planilha trata os cálculos. Consulte o capítulo Cálculos para obter mais informações sobre operadores e a precedência.

4.3 Referências à célula calculada

Várias funções da Planilha, como @CELLREF e @RANGERE, retornam um resultado em que ele próprio é uma referência da célula ou de intervalo. Trata-se de uma facilidade eficiente,

embora deva ser usada com cuidado porque a Planilha não pode levar essas referências indiretas em conta durante a determinação da ordem de recálculo. O mesmo cuidado se aplica a expressões de restrição usadas em funções estatísticas condicionais. Em regra geral, células referenciadas indiretamente por uma função não são recalculadas automaticamente. A Planilha fornece uma construção especial para forçar um recálculo, conhecido como uma dependência explícita.

Como a Planilha não recalcula a planilha, a menos que dependências explícitas tenham sido alteradas, talvez seja necessário forçar o recálculo, caso altere o valor de uma célula referenciada apenas indiretamente por meio de uma função.

Por exemplo, suponhamos que você queira contabilizar valores numéricos no intervalo C3..J100 que está dentro dos limites especificados nas células A1 e A2. A fórmula da Planilha para calcular isso é

@CCOUNT(C3..J100,#A1 && #<A2)

Essa fórmula contabilizará corretamente os valores numéricos no intervalo C3..J100. No entanto, caso você altere o valor em A1, a Planilha não recalculará automaticamente o resultado, pois A1 é referenciado apenas indiretamente por meio da expressão de restrição.

- Para forçar a Planilha a recalcular toda a planilha, você deve chamar o comando Recalc(). Você também deve adicionar o menu Recalcular ao aplicativo que chama Recalc().
- Force a Planilha a fazer um recálculo parcial em relação a essa célula, editá-la e acrescentar um espaço em branco, além de pressionar a tecla [Retornar] na célula que contém a fórmula @CCOUNT.
- Você também pode usar dependências explícitas para evitar a limitação descrita acima, caso tenha inserido a fórmula abaixo no formulário

@CCOUNT(C3..J100,#A1 && #<A2)\A1\A2

A Planilha levaria em conta as dependências em A1 e A2, atualizando a planilha conforme o esperado.

- Outra abordagem é criar a string de condição com uma expressão que referencia diretamente as células. Por exemplo,

@CCOUNT(C3..J100, @STRCAT("#",A1,"&_A dependência explícita é descrita mais detalhadamente na seção Dependência explícita.

5. Mensagens da Erro de Planilha

A Planilha verifica a existência de diversos erros. Dependendo do tipo de erro, a mensagem de erro mais recente é exibida nas células afetadas, na linha de mensagem ou dentro da caixa de diálogo mensagem da Planilha.

5.1 Tipos de erro

5.1.1 Erros em funções

Os erros que ocorrem dentro de funções são informados com o nome da função na qual o erro ocorreu.

5.1.2 Erros de sintaxe da fórmula

Esses erros ocorrem apenas quando você está digitando uma fórmula. Quando você concluir a digitação, a Planilha tentará ler a fórmula e convertê-la em uma representação interna. Caso não consiga fazer isso, ela continuará exibindo a fórmula errada, passará ao ``modo de edição'', colocará o cursor do texto no início do texto com dificuldade de análise e exibirá a mensagem de erro.

O problema deve ser corrigido para que a Planilha possa continuar.

5.1.3 Erros de avaliação da fórmula

O erro de avaliação da fórmula ocorre quando a Planilha lê uma fórmula e a converte na representação de fórmula interna, mas não consegue avaliar a fórmula e produzir uma fórmula de string ou numérica correta. Em alguns casos, a fórmula foi inserida incorretamente, por exemplo, está ausente um operando ou parênteses. Em outros casos, ocorreu um erro em decorrência do cálculo não poder ser tratado corretamente pelo hardware de ponto flutuante do computador, ou há uma condição de erro em uma célula ou intervalo referenciada no contexto da fórmula. Erros também podem ocorrer na avaliação de funções internas da Planilha.

5.2 Resumo das Mensagens de Erro

argumento deve ser um inteiro

@FACT aprovou um argumento não inteiro.

argumento não é uma célula nem um intervalo

@@ aprovou um argumento que não é célula, tampouco um intervalo.

argumento fora do intervalo

Um argumento para uma função não está dentro do intervalo correto da função e dos demais argumentos.

argumentos devem ser numéricos

A função exige argumentos numéricos, que podem ser valores literais, fórmulas, as quais retornam valores numéricos ou referências à células que contêm valores numéricos.

argumentos devem ser positivos

Os argumentos desta função devem ser todos valores positivos.

não é possível analisar string de condição

A Planilha encontrou uma expressão condicional formada incorretamente.

não é possível encontrar interpolação

Falha no @INTERP2D ou @INTERP3D em encontrar valores interpolados.

série do fluxo de caixa deve ser um intervalo

@NPV e @MIRR exigem que a série do fluxo de caixa seja um intervalo, o que deve representar uma coluna ou linha única.

série do fluxo de caixa deve ser coluna ou linha única

@NPV e @MIRR exigem que a série do fluxo de caixa seja um intervalo, o que deve representar uma coluna ou linha única.

operando de célula contém condição de erro

Uma célula, referenciada na célula na qual ocorre o erro, contém uma condição de erro.

referência da célula fora de intervalo

Uma referência da célula foi feita fora do intervalo A1..FAN32767

matriz de coeficiente tem colunas dependentes lineares

A existência de uma solução exclusiva para um problema de mínimos quadrados lineares (@LLS), Ax=b, exige que as colunas de A sejam independentes linearmente.

deslocamento da coluna fora de intervalo

O terceiro argumento para a função @VLOOKUP especifica um desvio menor que 0 ou maior que a largura do intervalo especificado no segundo argumento.

verificação de restrição incompatível com ``Conforme necessário''

Verificação de restrição não é compatível quando o recálculo está definido como ``Conforme necessário''.

contém um indicador de erro

Uma célula em um ou mais dos intervalos de dados de um gráfico contém uma condição de erro. A condição de erro deve ser resolvida para que a Planilha possa preencher o gráfico.

não foi possível encontrar a raiz real

@IRR não pôde encontrar a raiz real. Isso sugere que os dados fornecidos a @IRR devem estar errados.

contagem menor que zero

Usuário passou um argumento negativo para uma função que exige uma contagem, por exemplo, com @LEFT, é impossível usar os -2 caracteres à esquerda de uma string.

tamanho do conjunto de dados deve ser = 3

@LINFIT e @LINCOEF exigem um conjunto de dados igual a 3 ou maior.

tamanho do conjunto de dados deve ser = grau polinomial + 2

@PLS, @POLYFIT e @POLYCOEF exigem que o tamanho do conjunto de dados seja maior ou igual ao grau polinomial + 2.

série de datas deve ser coluna ou linha única

@XIRR e @XNPV exigem que o argumento D (série de datas) seja uma coluna ou linha única.

casas decimais fora de intervalo

@STRING usa somente um argumento de casa decimal entre 0 e 15.

graus de liberdade devem ser iguais a 0

@F e @T exigem graus de liberdade maiores que zero, pois ``graus de liberdade'' são indefinidos matematicamente como zero ou menos.

dimensão deve ser de potencial 2

@FFT e @INVFFT exigem matrizes cujas dimensões sejam potências de dois. As funções relativamente mais lentas @DFT e @INVDFT, respectivamente, são funções equivalentes que não têm esse requisito.

dividir por zero

Foi feita uma tentativa de divisão por zero. Observe que a Planilha considera células que estão vazias ou contêm strings de texto com o valor zero no contexto de um cálculo numérico.

não aceita argumentos

Várias funções de Planilha, inclusive @PI, @TRUE, @FALSE, @RAND e @GRAND, não aceitam alguns argumentos.

domínio é -1 < x < 1

@ATANH aceita apenas argumentos entre -1 e 1, exclusivamente.

domínio é -1 < = x < 1

@ACOS e @ASIN usam apenas argumentos entre -1 e 1, inclusive.

domínio é 0 <= x < = 170

@FACT aceita apenas argumentos entre 0 e 170, inclusive. (Maioria das plataformas)

domínio é 0 <= x < = 33

@FACT aceita apenas argumentos entre 0 e 33, inclusive. (Plataformas VAX)

domínio é x 0

@LN, @LOG2, @LOG, @GAMMA e @LNGAMMA usam apenas argumentos maiores que zero.

domínio é x = 1

@ACOSH usa apenas argumentos maiores ou iguais a 1.

``Período Final'' deve ser = 1

@CUMIPMT e @CUMPRINC exigem que o argumento E (período final) seja maior que ou igual a 1.

``Período Final'' deve ser = ``Período Inicial''

@CUMIPMT, @CUMPRINC e @VDB exigem que o argumento E (período final) seja maior que ou igual S (período inicial).

terminando linha com

****

\ é um introdutor de sequência de escape, que deve ser seguido de outro caractere para interpretação, mas a string foi encerrada prematuramente.

encerrando a linha com um comando sobrescrito

Durante exibição de texto no contexto de gráfico, ^ é um introdutor sobrescrito. Assim como y^2 significa ``y ao quadrado''. Essa mensagem ocorre quando ^ ocorre ao final da string.

encerrando linha com comando sobrescrito

Durante exibição de texto no contexto de gráfico, `_' é um introdutor sobrescrito. Assim como y_2 significa ``y subscrito 2''. Essa mensagem ocorre quando `_' ocorre ao final da string.

erro em expressão regular

Ocorreu um erro durante análise da expressão regular usada em uma operação de pesquisa ou extração, ou durante a execução de @REGEX ou @MATCH.

espera-se o lado direito de um intervalo aqui

A referência de intervalo externo é ausente.

deve localizar [*algo*] aqui

Houve um erro de análise. O cursor será colocado na janela de edição no modo de edição. Leia a documentação da função e corrija o erro.

esperando uma função

Há algo errado com a fórmula inserida na linha de edição. O analisador estava esperando encontrar um nome da função no ponto indicado pela posição do cursor.

esperando um operando

Há algo errado com a fórmula inserida na linha de edição. O analisador estava esperando encontrar um nome da função no ponto indicado pela posição do cursor.

esperando um operador

Há algo errado com a fórmula inserida na linha de edição. O analisador estava esperando encontrar um nome da função no ponto indicado pela posição do cursor.

operandos externos

Há algo errado com a fórmula inserida na linha de edição. O analisador estava esperando encontrar um nome da função no ponto indicado pela posição do cursor.

F deve ser = 0

O terceiro argumento de @F deve ser maior ou igual a 0.

primeiro argumento deve ser numérico

@NPV e @CHOOSE exigem que o primeiro argumento seja numérico.

exceção flutuante

Ocorreu uma exceção de hardware aritmética de ponto flutuante durante o cálculo da função ou expressão. Isso significa que os cálculos resultaram em um número fora do intervalo que o hardware do computador é capaz de representar.

algo inesperado foi encontrado aqui

A Planilha encontrou algo que não compreende em uma expressão.

``Fração'' deve ser = 1

@DOLLARDE e @DOLLARFR exigem que o argumento F (fração) seja maior que e igual a 1.

``Frequência'' deve ser 1, 2 ou 4

O argumento Frequência (número do pagamento de cupom por ano) em funções financeiras está limitado a uma das opções a seguir: 1, 2 ou 4

função não instalada

Este erro ocorre quando a Planilha encontra um ``@'' seguido de um nome da função que não a reconhece como uma das funções internas, ou uma das instalada por um programa de conexão.

transbordamento da pilha de funções

Esse erro ocorre quando as funções são aninhadas muito profundamente. A Planilha é compatível com o aninhamento de funções em até 50 níveis de profundidade.

número hexadecimal maior que 32 bits

A Planilha não pode converter uma string hexadecimal em um número caso a string hexadecimal tenha mais que 8 caracteres, o que se converte em 32 bits na representação binária interna.

Exceção Flutuante IEEE (Infinidade ou NaN)

Esse erro significa que a fórmula resultou em um cálculo que não pôde ser feito corretamente pelo hardware do ponto flutuante padrão IEEE do computador. É bem provável que isso signifique que o cálculo produziria um resultado intermediário ou final fora do intervalo +/-1.8e308.

referência da célula ou intervalo ilegais

Isso acontece quando uma cópia ou operação de movimento resulta em uma referência de célula ou intervalo fora do intervalo A1..FAN32767.

operando ilegal do ``operador''``

Esse erro ocorre quando um ou ambos os operandos do ``operador'' especificado não são válidos. É bem provável que um nome de intervalo tenha sido usado como um operando em uma expressão aritmética.

tipo de argumento incorreto

Um ou mais argumentos da função são incompatíveis com o tipo de argumento exigido pelas funções.

tipo de coeficiente incorreto

Na função de avaliação polinomial (@POLY), um ou mais coeficientes polinomiais não são numéricos.

dimensões incorretas

Várias funções de matriz e ferramentas incorporadas da Planilha têm determinados requisitos quanto a dimensões dos argumentos de matriz. Verifique o manual de referência, caso não tenha certeza quanto a esses requisitos.

dimensões de matriz incompatíveis

Na multiplicação de matrizes (@MMUL), o número de colunas da primeira matriz deve ser igual ao número de linhas na segunda matriz.

dimensões de intervalo incompatíveis

As funções de produto final da Planilha (@DOT) exigem vetores de mesmo tamanho. Elas também calcularão a soma de produtos de dois intervalos com dimensões iguais.

coluna de índice contém célula vazia

A primeira coluna da tabela de pesquisa referenciada por @VLOOKUP não deve conter células vazias.

índice fora de intervalo

Em @FIND, o terceiro argumento talvez não tenha o comprimento maior do que o segundo argumento. Em @MID, o segundo argumento talvez não tenha o comprimento maior do que o primeiro argumento.

linha de índice contém célula vazia

A primeira linha da tabela de pesquisa referenciada por @HLOOKUP não deve conter células vazias.

parâmetro de inteiro fora de intervalo

Um parâmetro de inteiro maior que 4294967296 ou menor que -2147483649 foi inserido.

taxa de juros deve ser 0

@EFFECT e @NOMINAL exigem que o argumento R (taxa de juros) seja maior que 0.

programação de juros deve ser uma única coluna ou linha

O argumento R (matriz de taxas de juros) em @FVSCHEDULE deve ser uma única coluna ou linha.

referência da célula inválida

O usuário tentou acessar uma célula com uma linha negativa, zero ou maior que 32767, ou com uma coluna negativa ou maior que FAN ou 4095.

data inválida

A Planilha não pôde compreender o formato de data. Os valores de data devem estar no intervalo 1-73.050, representando as datas 1º de janeiro de 1900 até 31 de dezembro de 2099, respectivamente. Esse erro também pode ocorrer quando os valores de ano, mês e dia passados para @DATE não representam uma data real dentro desse intervalo (31 de fevereiro de 1950 ou 1º de janeiro de 2589, por exemplo).

base de contagem de dias inválida

A base de contagem de dias em funções financeiras deve ser uma das seguintes opções: 0 (30/360), 1 (real/real), 2 (real/360) ou 3 (real/365)

referência de intervalo inválida

O usuário tentou fazer uma referência de intervalo que referencia células além do intervalo da planilha; ou seja, uma linha negativa, zero ou maior que 32767, ou uma coluna negativa ou maior que FAN, ou 4095.

tabela inválida

A tabela dos pontos de referência em @INTERP2D ou @INTERP3D contém valores não numéricos ou células em branco.

hora inválida

A Planilha não pode analisar uma hora fornecida pelo usuário. Valores de hora são valores fracionários de 0 a 1, representando frações de um período de 24 horas.

Ao interpretar um número como um valor de data/hora, a Planilha interpreta a parte inteira do número como a data e a parte fracionária como a hora nessa data. Um valor negativo é inválido. Além disso, a função @TIME deve ter argumentos no intervalo de 0-23 horas, 0-59 minutos e 0-59 segundos. Qualquer outro valor é inválido.

cálculo iterativo incompatível com ``Conforme necessário''

Para evitar loop infinito, cálculos iterativos (auto-referências) não são compatíveis quando o método de recálculo é ``Conforme necessário''. Para usar cálculos iterativos, o usuário deve escolher recálculo manual.

menos de 2 argumentos

@POLY exige 2 ou mais argumentos.

``Vida'' e ``Período'' devem ser inteiros

@DDB exige que argumentos ``Vida'' e ``Período'', argumentos 3 e 4, respectivamente, sejam inteiros.

``Vida'' deve ser 0

@SLN e @SYD exigem que ``Vida'' seja maior que 0.

falha na pesquisa ao produzir uma correspondência

@HLOOKUP ou @VLOOKUP deixou de produzir uma correspondência. Isso deve acontecer apenas com uma pesquisa alfabética.

``Limite inferior'' deve ser = 0

O argumento L (limite inferior) deve ser maior ou igual a 0 em @ERF e @ERFC.

magnitude grande demais

@NUMTOHEX exige um argumento entre 2147483646 e -2147483647, inclusive.

matriz é singular

É matematicamente impossível inverter uma matriz singular.

matriz deve ser quadrada

É impossível inverter, tirar a raiz latente ou usar o determinante de uma matriz não quadrada.

``Tipo de Correspondência'' deve ser 0 para correspondência de string

O argumento T (tipo de correspondência) deve ser 0 caso o argumento V (valor a ser correspondido) seja texto em @MATCH.

matriz deve ser simétrica

@EIGEN exige uma matriz simétrica.

módulos divididos por zero

Mod 0 é uma operação indefinida.

deve conter de -15 a +15 locais

@ROUND não podem arredondar para mais de 15 casas decimais em qualquer um dos lados.

deve ter ``Custo'' = ``Salvação'' = 0

@DDB, @SLN, @SYD, @DB e @VDB exigem que o argumento ``Custo'' seja maior ou igual ao argumento ``Salvação'', que deve ser maior igual a 0.

deve emitir < primeiro cupom < vencimento

Os valores de argumento I (data de emissão), FC (data do primeiro cupom) e M (data de vencimento) devem atender à seguinte condição: I < FC < M

deve emitir < último cupom < vencimento

Os valores de argumento I (data de emissão), LC (data do último cupom) e M (data de vencimento) devem atender à seguinte condição: I < LC < M

deve ter ``Vida'' = ``Período'' = 1

@DDB, @DB e @VDB exigem que o argumento ``Vida'' seja maior ou igual ao argumento ``Período'', que deve ser maior igual a 1.

devem ter N 0, K 0 e N < K

Os argumentos N (número de objetos dos quais se escolhe) e K (Número de objetos a serem escolhidos) em @PERMUT devem seguir esta condição: N0, K0 e N <K.

necessita ao menos 2 valores de fluxo de caixa

Um único ponto de dados não é o suficiente para uma série do fluxo de caixa; são necessários dois. O cálculo da taxa interna de devolução (@IRR) é indefinida apenas para um valor.

nenhum número duplicado encontrado

@MODE não pode encontrar o número mais frequente pois todos os números são exibidos apenas uma vez na lista de argumentos.

nenhuma correspondência encontrada

@MATCH não encontrou uma correspondência.

dígitos não hexadecimais em string

@HEXTONUM exige que o argumento seja uma string que contenha apenas dígitos hexadecimais, 0-9 e a-f.

operando não numérico

Uma expressão de algum tipo tem um operando não numérico em que um operando numérico é necessário, o que torna o resultado da expressão indefinido.

valor não numérico em ...

Entidades aritméticas ou alfabéticas indefinidas.

argumentos insuficientes para funcionar

Usuário inseriu poucos argumentos para a função.

``Número'' não está na lista de referência

O número a ser classificado não está na lista de referência em @RANK.

número [grande|pequeno] demais

O número está no ou além do limite da capacidade do computador de se expressar, sendo tratado como se estivesse minimamente dentro do limite.

número de períodos compostos deve ser =1

@EFFECT e @NOMINAL exigem que o argumento C (número de períodos compostos) seja maior ou igual a 1.

um argumento deve ser diferente de zero

@ATAN2 exige que um dos argumentos seja diferente de zero.

operando contém condição de erro

Alguma célula referenciada pelo operando está em uma condição de erro, ou contém uma referência a uma célula que está em condição de erro etc.

operando igual a 0

@HMEAN não usa argumentos cujo valor seja 0.

operando maior que 32 bits

Os números inteiros na Planilha não podem usar mais de 32 bits para serem expressos. Isso restringe inteiros ao intervalo entre 2147483647 e -2147483648, ou 4294967295 a zero, dependendo do operando ser apenas positivo ou negativo.

operando menor ou igual a 0

@GMEAN não usa argumentos iguais a 0 ou negativos.

operando fora de intervalo

@CHAR usa somente inteiros entre 1 e 255

operandos ``&'' devem ser do mesmo tipo

O operador ``&'' atende a um propósito duplo: caso os operandos sejam numéricos, ele realiza uma operação AND bitwise; caso o operando seja de strings de texto, ele concatena as duas strings. Caso o operando não seja numérico nem de strings, esse erro ocorre.

operandos ``..'' devem ser referência da célula

O operador .. pode unir somente duas referência de célula para criar um intervalo. Ele não pode unir inteiros para criar um intervalo de inteiros, ou fazer qualquer outra coisa.

``Pagamento'' e ``FV'' devem ter o mesmo sinal

@TERM exige que Pagamento e Valor Futuro tenham o mesmo sinal.

Pagamento`` deve ser diferente de zero

@TERM exige que o Pagamento seja diferente de zero.

``Período'' deve ser = 0

@SYD exige que Período seja maior ou igual a 0.

``Período'' deve ser um inteiro 0

@FV, @PMT, @PV e @RATE exigem que Período seja um inteiro maior que 0.

grau polinomial deve estar entre 1 e 10

@PLS, @POLYFIT e @POLYCOEF exigem que o grau polinomial esteja entre 1 e 10.

tamanho amostra em pool menor que 3

@TTEST2EV exige que um tamanho amostra em pool maior que 2 seja definido matematicamente.

preenchimento menor que 1

@CVAR, @CSTD, @SSE, @VAR e @STD exigem que um preenchimento seja maior que ou igual a 1.

``PV'' e ``FV'' devem ser diferentes de zero

@CTERM e @RATE exigem que Valores Presente e Futuros sejam diferentes de zero, por definição.

``PV'' e ``FV'' devem ter o mesmo sinal

@CTERM e @RATE exigem que Valores Presentes e Futuros tenham o mesmo sinal.

intervalos devem ter as mesmas dimensões

@PTTEST e @CORR exigem que ambos os argumentos sejam intervalos de dimensões iguais, porque funcionam com pares de valores, um para cada intervalo.

``Taxa'' deve ser maior que -1

@CTERM, @FV, @PMT, @PV, @TERM, @NPV, @XNPV e @XIRR exigem que o argumento Taxa seja maior que -1.

``Taxa'' deve ser diferente de zero

@CTERM exige que o argumento Taxa seja diferente de zero.

taxa encontrada é inferior a -1

@IRR encontrou uma taxa inferior a -1 depois de realizar o máximo de iterações.

recursão profunda demais

Esse erro ocorrerá se a Planilha encontrar ``uma string de condição dentro de uma string de condição''. Por exemplo, isso acontece com uma fórmula estatística

condicional cuja string de condição chama outra função estatística condicional que, por sua vez, contém uma string de condição própria.

resultado da expressão é um intervalo

Algumas funções da Planilha, como @CELLREF e @RANGEREF, retornam referências de célula ou intervalo como resultado. Referências de célula e intervalo não podem ser o resultado final de uma fórmula.

string resultante longa demais

Uma string gerada por uma fórmula é longa demais (maior que 512 caracteres).

deslocamento da linha fora de intervalo

O terceiro argumento para a função @HLOOKUP especifica um desvio menor que 0 ou maior que a profundidade do intervalo especificado no segundo argumento.

amostra ausente no par

Os dois intervalos de entrada do t-test comparado (@PTTEST) e das funções de correlação produto/momento Pearson (@CORR) contém valores comparados. Caso um valor seja exibido em uma determinada posição no primeiro intervalo, deve também haver um valor na posição correspondente do segundo intervalo.

tamanho amostra menor que 2

@CVARS, @CSTDS, @VARS, @STDS, @TTEST, @PTTEST, @TTEST2UV e @FTEST exigem um tamanho amostra maior que 1.

procurando lista NULA

procurando lista com uma função NULA.

seletor fora de intervalo

O primeiro argumento de @CHOOSE deve ser 0 ou mais, e menor igual ao número do resto dos argumentos - 1.

data de liquidação deve ser < data de vencimento

Data de liquidação deve ser anterior à data de vencimento em funções financeiras.

data de liquidação deve ser = data de emissão

Data de liquidação não deve ser anterior à data de emissão.

mostrando lista NULA

mostrando lista com uma função NULA

``Período Inicial'' deve ser = 1

@CUMIPMT e @CUMPRINC exigem que o argumento S (período inicial) seja maior ou igual a 1.

data inicial deve estar no início de ``Datas''

O número no argumento D (datas) não deve preceder a data inicial em @XIRR e @XNPV.

substring mais comprida que string

@FIND não pode localizar uma instância da string do padrão dentro de uma string de destino mais curta, pois é impossível incorporar uma string em outra menor que ela própria.

substring não encontrada

@FIND não pôde localizar uma instância da string do padrão na string de destino.

transbordamento de buffer de token

Este erro pode ocorrer apenas quando uma fórmula é inserida, e é mais complexa do que a Planilha aceita. A Planilha pode aceitar até 200 operadores, números, chamadas de função e strings de texto em uma única fórmula, o que é mais do que qualquer pessoa pode lidar.

poucos argumentos

A função exige mais argumentos.

argumentos demais para função

O usuário forneceu muitos argumentos para a função. Nenhuma função pode usar mais que 100 argumentos.

argumentos demais

@NOT não usa apenas um argumento, diferentemente do restante das funções lógicas digitais. @ROW e @COL usam 1 argumento, @ANNOTATE usa de 3 a 5.

Letra do tesouro não deve estar pendente há mais de 1 ano

O período entre a data de liquidação e a data de vencimento de uma letra de tesouro não deve exceder um ano.

não é possível analisar o filtro de extração

Ocorre quando você está realizando uma operação de extração e especifica uma expressão booleana inválida; por exemplo, #==/5.

não foi possível analisar a condição de pesquisa

Ocorre quando você está realizando uma pesquisa numérica e especifica uma expressão booleana inválida, por exemplo, #==/5

nome simbólico indefinido

Esse erro ocorre quando a Planilha encontra um intervalo simbólico ou referência da célula que não foi definido. Para usar um nome simbólico e se referir a uma célula ou intervalo, você deve primeiro defini-lo usando o comando SetRangeName.

ponto de interrogação inesperado

A Planilha oferece suporte a expressões de condição compatíveis com a linguagem C, que usam o par de operadores ``?'' e ``:''. Caso um desses operadores seja exibido sem o outro, ocorrerá um erro.

nome não resolvido na expressão

Um nome que não é uma função válida ou intervalo nomeado foi usado na expressão.

``Limite superior'' deve ser = 0

O argumento U (limite superior) deve ser maior ou igual a 0 em @ERF.

séries de ``valores'' e ``datas'' devem ter a mesma dimensão

@XIRR e @XNPV exigem que o argumento V (série do fluxo de caixa) e o argumento D (série de datas) tenham a mesma dimensão.

``Valores'' devem ter pelo menos um fluxo de entrada e um de saída

@MIRR exige que o intervalo de valores contenha pelo menos uma entrada (valor positivo) ou um pagamento (valor negativo)

número errado de argumentos

O número de argumentos passados para a função está incorreto. Consulte o manual de referência para determinar o número correto de argumentos esperados pela função.

Cálculos internos

Os cálculos internos são disponibilizados sem precisar configurar nenhum parâmetro personalizado e são sempre calculados.

Teste de ruído 6-Sigma	Peso da Calib	Valores do padrão interno	Placas/Medidor
Relação Sinal/Ruído 6-Sigma	Médias de calibração	Cálculo do relatório padrão interno	Ajuste ponto a ponto
Cálculo do Relatório de % da Área	Cálculos de curva de calibração	Padrão interno versus Padrão externo e normalização	Ajuste quadrático
Definição do Fator de Resposta de Área/Valor	Curvas de calibração	Padrões internos	Retenção relativa (seletividade)
Método de cálculo de Área/Altura	Fator de capacidade (k')	Cálculo de Farmacopeia Japonesa (JP)	Relatar "Zero" nas Concentrações do Padrão Interno
Cálculo de ASTM LOD (Limite de detecção)	Ajuste cúbico	Ajuste linear	Definição do fator de resposta
ASTM LOQ (Limite de	Método de cálculo	Operações de Matriz	Suavização de

quantificação)	DAB (Farmacopeia alemã)		Savitsky-Golay
Cálculos de ruído ASTM	Determinação de concentrações de picos não calibrados	Cálculo de Mínimos Quadrados Modificados	Escalas
Proporção Sinal/Ruído ASTM	Teste de desvio para adequação do sistema	Teste de ruído (ruído rms)	Método de cálculo USP (Farmacopeia Norte-Americana)
Cálculo automático de média	Método de cálculo EMG (Gaussiano Exponencial Modificado)	Cálculo do relatório de normalização	Peso e escalas
FR médio	Curvas de Calibração Padrão Externas	Centroide do Pico	Método de Pesagem (Peso LSQ)
Cálculos de verificação da linha de base	Cálculo do relatório padrão externo	Cálculos de desempenho	

Teste de ruído 6-Sigma

O ruído 6-Sigma é o desvio padrão do sinal derivado de n medições multiplicado por 6, definido com base no segmento de tempo escolhido. A equação usa uma linha regressão linear, em vez da medição média, para eliminar qualquer desvio nos cálculos de ruído.

$$6 \times \left[\frac{\sum_{i=1}^{n} \left(E_i - f(E_i) \right)^2}{n-1} \right]^{1/2}$$

No caso, *Ei* é um ponto de dados e $f(E_i)$ é o ponto na linha regressão linear de todos os pontos de dados.

As n medições são feitas entre os limites de tempo especificados.

Relação Sinal/Ruído 6-Sigma

Para calcular a relação S/R, o ruído 6-Sigma é calculado em intervalos de 30 segundos desde o ponto de dados imediatamente anterior à linha de base do pico (o ponto de "Início" da integração). O cálculo avança em intervalos de 30 segundos até encontrar o ponto de "Parada" da integração de outro pico. São usados somente intervalos de 30 segundos nos cálculos. Intervalos inferiores a 30 segundos não são considerados.

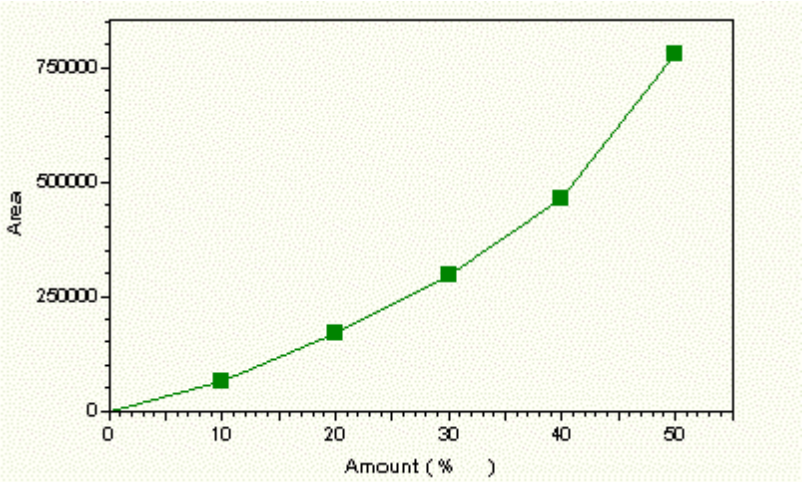
A média de todos os cálculos de ruído é dividida pela a altura medida do pico de interesse para determinar o valor da relação Sinal/Ruído.

Cálculo do Relatório de % da Área

$$\text{Area\%} = \frac{\text{Area of peak} \ * \ 100}{\text{Sum of all peak areas}}$$

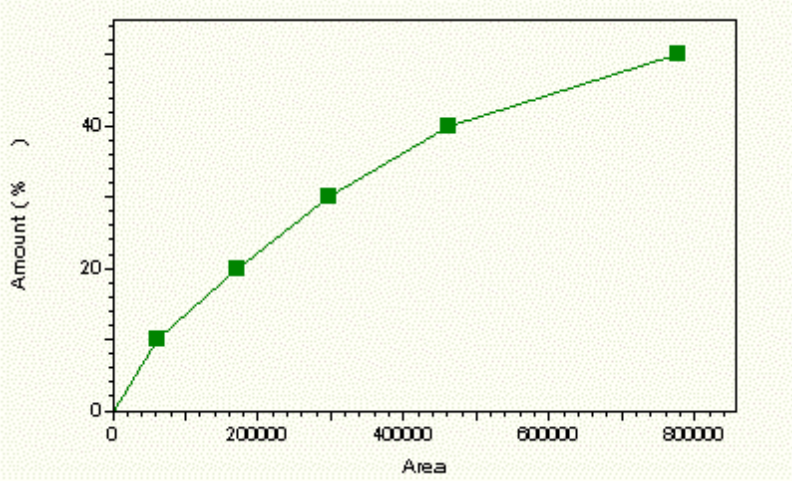
Definição do Fator de Resposta de Área/Valor

Se você escolher Área/Valor para sua definição do fator de resposta, a curva de calibração (que pode ser exibida em Examinar calibração) é definida com y = quantidade e x = área ou altura. (Para calibrações de padrão interno, y = proporção da quantidade e x = proporção de área ou altura.) Um exemplo de curva de calibração usando definição de fator de resposta de Área/Valor é fornecido abaixo.



Curva de calibração com definição do fator de resposta de Área/Valor

Se você escolher Valor/Área para sua definição do fator de resposta, a curva de calibração (que pode ser exibida em Examinar calibração) é definida com y = área ou altura e x = quantidade. (Para calibrações de padrão interno, y = razão da área ou altura e x = razão da quantidade.) Um exemplo de curva de calibração usando definição de fator de resposta de Valor/Área é fornecido abaixo.



Curva de calibração com definição do fator de resposta de Valor/Área

Método de cálculo de Área/Altura

Pratos teóricos

$$N = 16 \times \left[\frac{t}{W} \right]^2$$

Onde

N = pratos teóricos

t = Tempo de retenção do componente

W = Largura da base do pico do componente

W = 4 x σ

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \times \left[\frac{A}{H} \right]$$

$$= 0.399 \times \left[\frac{A}{H} \right]$$

Onde

A = Área de pico

H = Altura de pico

Assimetria de pico (Fator de distorção)

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

Onde

T = Assimetria de pico ou fator de distorção

$W_{0,05}$ = Distância entre a borda dianteira e a borda traseira do pico, medida em um ponto situado a 5% da altura do pico a partir da linha de base

f = Distância entre o máximo do pico e sua borda dianteira em uma posição situada a 5% da altura do pico

Para assimetria de pico em 10%, os valores de W e *f* são medidos a 10% da altura do pico.

Resolução

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

Onde

***R* = Resolução entre um pico de interesse (pico 2) e o pico imediatamente anterior (pico 1).**

t_2 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção do pico 2.

t_1 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção do pico 1.

W_2 = Largura da base do pico 2 do componente

W_1 = Largura da base do pico 1 do componente

Cálculo de ASTM LOD (Limite de detecção)

Esse é um resultado por pico. A finalidade de um parâmetro LOD é determinar se o pico que está sendo avaliado está dentro dos limites de detecção determinados anteriormente, de maneira experimental, para o método em questão.

$$SN_M = H / N_D$$

$$LOD = C * SN / SN_M$$

Onde

SR: Proporção S/R para LOD especificada na tabela de picos

SN_M: Razão S/R calculada

H = Altura do pico

N_D: Nível de ruído medido

C: Resultado de concentração do pico sendo avaliado.

Nota: O ruído de um pico é calculado com base no primeiro segmento de 30 segundos da linha de base antes do início do pico. A linha de base depois de um pico não é usada no cálculos de ruído deste.

ASTM LOQ (Limite de quantificação)

Esse é um resultado por pico e deve ser calculado e incluído no relatório como tal. A finalidade de um parâmetro LOQ é determinar se o pico sendo avaliado está dentro dos limites de quantificação determinados anteriormente, de maneira experimental, para o método em questão.

$$SN = H / N_D$$

$$LOQ = C * SN / SN_M$$

Onde

SN: Razão S/R para o LOQ especificado na tabela de picos

SN_M: Razão S/R calculada

H = Altura do pico na concentração C

N_D: Nível de ruído medido

C: Resultado de concentração do pico sendo avaliado.

Nota: O ruído de um pico é calculado com base no primeiro segmento de 30 segundos da linha de base antes do início do pico. A linha de base depois de um pico não é usada no cálculos de ruído deste.

Cálculos de ruído ASTM

Como nos cálculos de ruído 6-Sigma, é calculado o mínimo quadrado linear que melhor se encaixe no intervalo de tempo escolhido (janela de 30 segundos para "curto" ou janela de 60 segundos para "longo"). O valor do ruído é calculado usando as maiores diferenças positivas e negativas entre os pontos reais e os pontos calculados, como é mostrado a seguir:

$$Ruído = (E_i - f(E_i))_{máx} - (E_i - f(E_i))_{mín}$$

Onde:

E_i = ponto de dados individual

f (E_i) = ponto de dados calculado usando a fórmula LSQ

Nota: Para cálculos "Com escala", os resultados serão relatados como unidades do detector com escala ao invés de microvolts.

Proporção Sinal/Ruído ASTM

Como no 6-Sigma, esse ruído é calculado em intervalos de 30 segundos. A média de todos os cálculos de ruído é dividida pela a altura do pico de interesse para determinar o valor da relação Sinal/Ruído.

Cálculo automático de média

Se o cálculo automático de média estiver ativado em seu método (em Propriedades do método), o cálculo da média ocorrerá em todos os picos designados com o indicador WtAverage na tabela de picos. As replicatas continuarão a ser salvas no método até que um novo nível seja calibrado para o método. Quando um novo nível for encontrado, as replicatas para o nível anterior serão limpas e a média nesse ponto será salva no método como "Última área".

Se você quiser replicar áreas a serem salvas continuamente no método, independentemente de ser ou não encontrado um novo nível, desative o cálculo automático de média. Nesse caso, você deverá indicar onde o cálculo da média será efetuado em sua sequência designando "Média das replicatas" no tipo de corrida da amostra.

FR médio

Quando o tipo de ajuste FR médio é selecionado, a inclinação da linha de calibração entre cada ponto de calibração e zero é calculada independentemente. Em seguida, é calculada a média desses valores (os fatores de resposta ou FRs) para produzir um valor de FR médio. O FR médio então é utilizado para calcular a quantidade não corrigida do componente desconhecido da seguinte maneira:

$$\text{CompDesconhecido} = (\text{FR médio}) * \text{ÁreaDesconhecida}$$

Onde:

CompDesconhecido = Área/FR se o fator de resposta estiver definido para Área/Valor

CompDesconhecido = Área * FR se o fator de resposta estiver definido para Valor/Área

A inclinação de cada linha de calibração é calculada da seguinte maneira:

$$C_u = a\,Y$$

Para um padrão externo e normalização:

C_u = Quantidade não corrigida (com fator de escala aplicado, ou seja, 1/x se aplicável)

a = Inclinação do segmento da linha de calibração

Y = Valor da área ou da altura no eixo Y

Para um padrão interno:

C_u = Razão da quantidade não corrigida

a = Inclinação do segmento da linha de calibração

$$Y = \frac{\text{Component Area or Height}}{\text{Internal Standard Area or Height}}$$

Cálculos de verificação da linha de base

O cálculo a seguir é usado para determinar o desvio da linha de base na verificação da linha de base.

$$Drift = \left(\frac{N\sum xy - \sum x \sum y}{N\sum x^2 - \left(\sum x\right)^2} \right) * 60$$

N = Número de pontos

x = Valores X (em minutos)

y = Valores Y

Para cálculos de ruído, consulte os tópicos Cálculos de ruído ASTM e Teste de ruído, dependendo da opção escolhida. Para verificação da linha de base, a seleção Longo do ruído ASTM é ajustada para usar unidades Y medidas pelo detector em vez de microvolts.

Peso da Calib

Você pode designar um "Peso da calib" na tabela de picos para a média das replicatas com o método Última área. Observe que um peso da calib de 100 faz com que o último valor de área seja ignorado.

Uma média ponderada é calculada usando a equação a seguir

$$A_w = \left(x_c * W\right) + \left[x_0 * \left(1 - W\right)\right]$$

onde

A_w é o resultado da média ponderada

X_c é a média verdadeira das replicatas (caso existam) com área/altura da corrida atual

W é o peso da calib / 100

Xo é a "Última área" do método

Uma média ponderada é calculada para o exemplo de método a seguir da seguinte maneira:

"Última área" do método	100
Área da corrida atual	101

Replicação 1	104
Replicação 2	100
Replicação 3	102

Usando um peso da calib de 60, a média ponderada torna-se:

[(101 +104 + 100 + 102)/4] * .6 + [100 * (1 - .6)]

Especifique um fator de peso de 50 para atribuir peso igual à média da "última Área" e às novas replicações de calibração.

NOTA: Para calibrações de padrão interno, cada replicação representa uma proporção da área/altura do componente com a área/altura do padrão interno.

Médias de calibração

Os sinais de calibração Substituir/Peso Médio na tabela de picos permitem selecionar se a área de calibração será calculada pela média com replicatas anteriores (última área). Em geral, quando Substituir é selecionado, a área de calibração atual substitui qualquer área de calibração ou ponderada existente no método. Quando Peso Médio é selecionado, as replicatas são calculadas pela média e, em seguida, ponderadas com base no último valor de área (se aplicável).

Para calibrações de padrão externo:

Quando Peso Médio é selecionado, as replicatas de área/altura de pico atual são calculadas pela média. Quando Substituir é selecionado, cada corrida de calibração substitui o valor anterior no método.

Para calibrações de padrão interno:

Quando Peso Médio é selecionado, são calculadas inicialmente as proporções de replicação individuais e em seguida a média das razões é extraída. Quando Substituir é selecionado, cada corrida de calibração substitui o valor anterior no método.

Por exemplo, para uma área de componentes de calibração U e sua área de componente de padrão interno associada I, a proporção média Y para três replicatas é calculada da seguinte maneira:

Área de replicação de padrão interno (I_n)	**Área de replicação de componente (U_n)**
I1 = 100	U1 = 210
I2 = 99	U2 = 215
I3 = 104	U3 = 212

Proporção 1 = 210 / 100 = 2,1

v 2 = 215 / 99 = 2,172

Proporção 3 = 212 / 104 = 2,039

Y = Proporção Média = 2,104

Nota: Na janela Examinar calibração do pico, se você eliminar uma replicata da curva de calibração de um pico de padrão interno realçando-a com o mouse, as replicatas associadas dos picos que usem esse padrão interno serão ignoradas ao calcular a proporção média.

Quando participam da média, as replicatas de cada nível do pico são salvas no método até serem limpas. A Replicação 1 é a mais recente.

Cálculos de curva de calibração

A calibração de um método resulta na criação de uma "curva de calibração" para cada componente calibrado. A equação da curva de calibração é especificada pelo tipo de "ajuste" selecionado na tabela de picos, pela definição do fator de resposta do método, pelo fato de tratar-se de uma calibração de padrão interno ou externo, pelo fator de escala selecionada e pelo sistema de pesos selecionado.

A "Quantia não corrigida" é a quantidade (ou razão da quantidade) de um componente representado por uma determinada resposta (ou razão de resposta). O termo "Quantidade não corrigida" é usado porque fatores como quantidade da amostra e fatores de multiplicação não foram aplicados.

O "Fator de resposta" de um componente é calculado a partir da curva de calibração. Ele pode ser informado como Valor/Área ou Área/Valor. Isso é selecionado como parte da guia Método/Propriedades.

Nota: Quando uma calibração contém replicatas, suas médias são calculadas antes do cálculo de ajuste.

Curvas de calibração

Uma curva de calibração relaciona a quantidade do componente à resposta do detector (ou, para uma calibração do padrão interno, a proporção da quantidade à proporção de área ou altura). O software ajusta uma curva aos pontos de calibração de acordo com o tipo de ajuste, escalas e fatores de peso selecionados pelo usuário. A curva de calibração resultante é usada para calcular as concentrações de componentes em amostras desconhecidas e geralmente é definida por um cálculo de mínimos quadrados

$$y = f(x)$$

onde f = ponto a ponto

linear (com ou sem forçar através de zero)

quadrático (com ou sem forçar através de zero)

cúbico (com ou sem forçar através de zero)

ajuste de FR médio

Fator de capacidade (k')

$$k' = \frac{t_2}{t_a} - 1$$

Onde

k' **= Fator de capacidade**

t_2 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção

t_a = Tempo de retenção de um componente inerte não retido pela coluna, obtido a partir de "Tempo de pico sem retenção" na seção Opções de desempenho do método.

Ajuste cúbico

Um ajuste cúbico de calibração usa um cálculo de mínimos quadrados para determinar o melhor ajuste da curva para uma série de pontos de calibração. Um mínimo de quatro pontos de calibração é necessário para determinar um ajuste cúbico. A equação para calcular a quantidade não corrigida é:

$$Y = aX^3 + bX^2 + cX + d$$

Para padrão externo:

Y = Quantidade não corrigida (Com fator de escala aplicado, ou seja, 1/x se aplicável)

a = Coeficiente da curva de calibração

b = Coeficiente da curva de calibração

c = Coeficiente da curva de calibração

d = Interseção do eixo Y

X = área ou altura de componentes

Para um padrão interno:

Y = Proporção da quantidade não corrigida

a = Coeficiente da curva de calibração

b = Coeficiente da curva de calibração

c = Coeficiente da curva de calibração

d = Interseção do eixo Y

X = Área ou Altura de Componentes

Área ou altura do padrão interno

Método de cálculo DAB (Farmacopeia alemã)

NOTA: Essa equação de cálculo também é conhecida como BP (Farmacopia britânica), EP (Farmacopia europeia) ou ASTM.

Pratos teóricos

$$N = 5.54 \times \left[\frac{t}{W_{0.5}}\right]^2$$

Onde

N = Pratos teóricos

t = Tempo de retenção do componente

$W_{0,5}$ = Largura do pico na posição de 50 % da altura do pico

Assimetria de pico (Fator de distorção)

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

Onde

T = Assimetria de pico ou fator de distorção

$W_{0,05}$ = Distância entre a borda dianteira e a borda traseira do pico, medida em um ponto situado a 5 % da altura do pico a partir da linha de base

f = Distância entre o máximo do pico e sua borda dianteira do pico em uma posição situada a 5 % da altura do pico

Para assimetria de pico em 10 %, os valores de W e *f* são medidos a 10 % da altura do pico.

Resolução

$$R = 1.18 \times \frac{(t_2 - t_1)}{W_{0.5} + W_{p05}}$$

Onde

R = Resolução entre um pico de interesse (pico 2) e o pico imediatamente anterior (pico 1).

t_2 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção do pico 2.

t_1 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção do pico 1.

$W_{0,5}$ = Largura do pico do componente a 50 % da altura do pico.

$W_{p0,5}$ = Largura do pico do componente anterior a 50 % da altura do pico.

Determinação de concentrações de picos não calibrados

Você pode relatar concentrações de picos descalibrados criando um grupo de intervalo descalibrado e designando um fator de resposta manual a esse intervalo na tabela do grupo. Tendo feito isso, qualquer pico sem calibração que caia nesse intervalo terá sua concentração calculada usando esse fator de resposta e será incluído em um relatório de corridas que tem "picos não nomeados" selecionado. Observe que é possível definir quantos intervalos descalibrados forem desejados para um determinado método.

Teste de desvio para adequação do sistema

O teste de desvio mede as alteração de tensão em um dado período de tempo.

$$\frac{y2 - y1}{x2 - x1}$$

Onde

y_2 = tensão na hora x_2 (hora de início do teste de desvio em minutos)

y_1 = tensão na hora x_1 (hora de parada do teste de desvio em minutos)

Nota: No SS420x, a tensão está em µv.

Método de cálculo EMG (Gaussiano Exponencial Modificado)

Pratos teóricos

$$41.7 \times \frac{\left[\frac{t}{W0.1}\right]^2}{\frac{b0.1}{a0.1} + 1.25}$$

Onde

N = Número de pratos teóricos

t = Tempo de retenção do componente

$W_{0,1}$ = Largura do pico na posição de 10 % da altura do pico

$a_{0,1}$ = Largura da primeira metade (do início ao topo) do pico na posição de 10 % altura do pico

$b_{0,1}$ = Largura da segunda metade (do topo ao final) do pico na posição de 10 % altura do pico

Assimetria de pico (Fator de distorção)

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

Onde

***T* = Assimetria de pico ou fator de distorção**

$W_{0,05}$ = Distância entre a borda dianteira e a borda traseira do pico, medida em um ponto situado a 5 % da altura do pico a partir da linha de base

f = Distância entre o máximo do pico e sua borda dianteira em uma posição situada a 5 % da altura do pico

Para assimetria de pico em 10 %, os valores de W e *f* são medidos a 10 % da altura do pico.

Resolução

$$R = 2.15 \times \frac{(t_2 - t_1)}{W_{0.1} + W_{p0.1}}$$

Onde

***R* = Resolução entre um pico de interesse (pico 2) e o pico imediatamente anterior (pico 1).**

t_2 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção do pico 2.

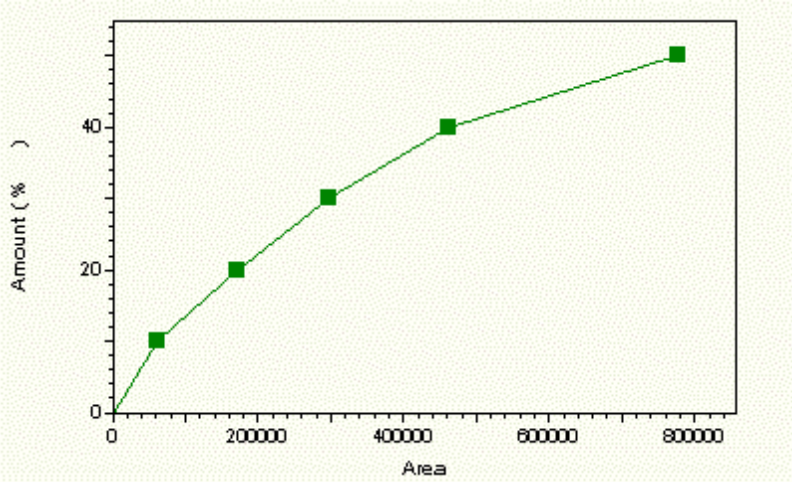
t_1 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção do pico 1.

$W_{0,1}$ = Largura do pico na posição de 10 % da altura do pico

$W_{p0,1}$ = Largura do pico anterior na posição de 10 % da altura do pico

Curvas de Calibração Padrão Externas

No exemplo a seguir, para uma curva de padrão externo e de normalização, a quantidade do componente é plotada no eixo Y e a área de componentes é plotada no eixo X (definição do fator de resposta QuantidadeÁrea):



Curva de calibração de padrão externo

A curva de calibração externa (para definição do fator de resposta Área/Valor) é calculada como:

$$Amtcal = f\ (Areacal)$$

Onde:

f = a equação dos pontos de calibração de acordo com o tipo de ajuste selecionado (linear, quadrático, ponto a ponto, etc.)

Amtcal = a quantidade do padrão de calibração

Areacal = a área do padrão de calibração

Portanto, o desconhecido é determinado por:

$$Amtunk(u) = f\ (Area\ unk)$$

Onde:

Amtunk(u) = a quantidade não corrigida do componente desconhecido

f = equação dos pontos de calibração de acordo com o tipo de ajuste selecionado

Areaunk = a área do componente desconhecido

Para calcular a concentração da amostra desconhecida:

$$Conc = \frac{Amt_{unk(u)}}{SampleAmt_u} \times MF$$

Onde:

Conc = a concentração (nas mesmas unidades usadas para a calibração) do analito de interesse desconhecido

Amtunk(u) = a quantidade não corrigida do componente desconhecido

Quant Amostra$_u$= a quantidade da amostra desconhecida obtida na tabela de sequências ou na caixa de diálogo de Corrida única

MF = fatores de multiplicação e diluição aplicados = $M_1*M_2*M_3/D_1*D_2*D_3$ para a amostra desconhecida

Cálculo do relatório padrão externo

$$Conc = \frac{C_u}{Samp.\ Amt.} * MF$$

Onde:

Conc = Quantidade corrigida do componente.

C_u= Valor da quantidade na curva de calibração para uma área desconhecida específica

Quant.Am = Quantidade da amostra

MF = fatores de multiplicação e diluição aplicados = $M_1*M_2*M_3/D_1*D_2*D_3$

Valores do padrão interno

Os valores do padrão interno para qualquer corrida de calibração sempre são extraídos da tabela de picos do método. Qualquer valor do Valor do padrão interno na tabela de sequências ou na caixa de diálogo Aquisição de corrida única, para uma corrida de calibração, é ignorado.

Para uma corrida desconhecida, o Valor do padrão interno é especificado na caixa de diálogo Aquisição de corrida única ou na tabela de sequências. Esse valor é usado como um multiplicador no cálculo da concentração desconhecida.

Cálculo do relatório padrão interno

$$Conc = \frac{C_u}{(Sample\ Amt.)} * ISTD_u * MF$$

Onde:

Conc = Quantidade corrigida do componente

PIu = Valor do padrão interno

Quant.Am = Quantidade da amostra

MF = fatores de multiplicação e diluição aplicados = $M_1*M_2*M_3/D_1*D_2*D_3$

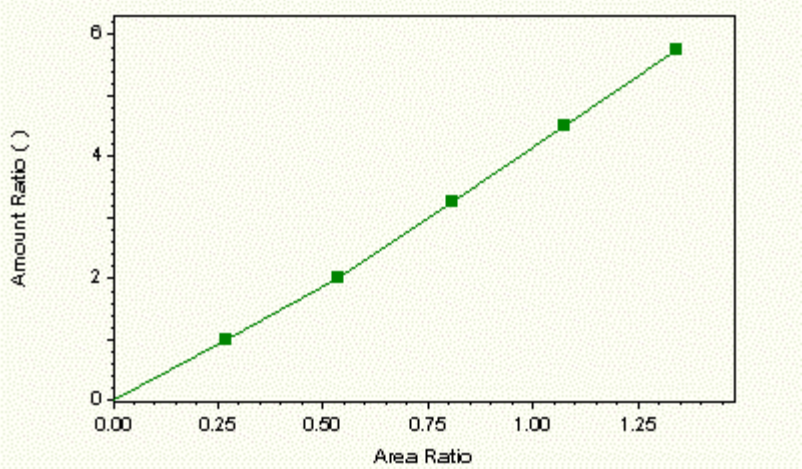
C_u = Proporção da quantidade extraída da curva de calibração para a razão área/altura fornecida

Padrão interno versus Padrão externo e normalização

A plotagem das curvas de calibração do padrão externo e normalização difere da plotagem das curvas de calibração de padrão interno. Isso acontece porque as quantidades e respostas na calibração do padrão interno representam as proporções do componente de padrão interno para as quantidades e respostas dos componentes calibrados.

Padrões internos

Neste exemplo de cálculo do padrão interno, a **razão** da quantidade do componente para o valor do padrão interno é plotada no eixo Y e a **proporção** da área de componentes para a área do padrão interno é plotada no eixo X (definição do fator de resposta Quantidade/Área):



Curva de calibração do padrão interno

A calibração é calculada como:

Amt RatioISCal = f (Area RatioISCal)

Onde:

Amt RatioISCal = proporção da quantidade do padrão de calibração

f = equação dos pontos de calibração de acordo com o tipo de ajuste selecionado

Area RatioISCal = proporção de área do padrão de calibração

Portanto, o desconhecido é determinado por:

Amt Ratiounk(u) = f (Area Ratiounk)

Onde:

Amt Ratiounk(U) = a proporção da quantidade não corrigida do componente desconhecido

f = equação dos pontos de calibração de acordo com o tipo de ajuste selecionado

Area Ratiounk = a proporção de área do componente desconhecido

A concentração da amostra desconhecida é calculada por:

$$Conc_u = \frac{Amt_{IS}}{SampleAmt_u} \times MF \times AmtRatio_{unk}$$

Onde:

$Conc_u$ = Concentração (nas mesmas unidades usadas para a calibração) do analito de interesse.

Amt_{IS} = Valor do padrão interno

$SampleAmt_u$ = Quantidade da amostra desconhecida a partir da sequência ou no início de uma corrida única

MF = fatores de multiplicação e diluição aplicados = $M_1*M_2*M_3/D_1*D_2*D_3$ para a amostra desconhecida

$AmtRatio_{Unk}$ = Valor da razão da quantidade extraído da curva de calibração em determinada proporção de área para a amostra desconhecida

Cálculo de Farmacopeia Japonesa (JP), 15ª Edição

Estas equações são para cálculos de JP, 15a Edição.

Pratos teóricos

$$N = 5.54 \times \left[\frac{t}{W_{0.5}}\right]^2$$

Onde

N = Pratos teóricos

t = Tempo de retenção do componente

$W_{0,5}$ = Largura do pico na posição de 50% da altura do pico

Assimetria de pico (Fator de distorção)

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

Onde

T = Assimetria de pico ou fator de distorção

$W_{0,05}$ = Distância entre a borda dianteira e a borda traseira do pico, medida em um ponto situado a 5% da altura do pico a partir da linha de base

f = Distância entre o máximo do pico e sua borda dianteira em uma posição situada a 5% da altura do pico

Para assimetria de pico em 10%, os valores de W e *f* são medidos a 10% da altura do pico.

Resolução

$$R = 1.18 \times \frac{(t_2 - t_1)}{W_{0.5} + W_{p05}}$$

Onde

R = Resolução entre um pico de interesse (pico 2) e o pico imediatamente anterior (pico 1).

t_2 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção do pico 2.

t_1 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção do pico 1.

$W_{0,5}$ = Largura do pico do componente a 50% da altura do pico.

$W_{p0,5}$ = Largura do pico do componente anterior a 50% da altura do pico.

Ajuste linear

Um ajuste linear de calibração determina a melhor linha (regressão linear) para uma série de pontos de calibração. É necessário um mínimo de dois pontos de calibração para determinar um ajuste linear. A equação para calcular a quantidade não corrigida é:

Y = a X + b

Para definição do fator de resposta de Área / Valor,

Padrão externo:

Y = Área ou altura de componentes

a = inclinação da linha de calibração

X = Quantidade não corrigida (com fator de escala aplicado, ou seja, 1/x se aplicável)

b = Interseção da linha de calibração no eixo Y

Padrão interno:
a = inclinação da linha de calibração

X = Proporção da quantidade não corrigida

b = Interseção da linha de calibração no eixo Y

Para definição do fator de resposta de Valor / Área,

Padrão externo:

Y = Quantidade não corrigida (com fator de escala aplicado, ou seja, 1/x se aplicável)

a = inclinação da linha de calibração

X = área ou altura de componentes

b = Interseção da linha de calibração no eixo Y

Padrão interno:

Y = Proporção da quantidade não corrigida

a = inclinação da linha de calibração

b = Interseção da linha de calibração no eixo Y

Operações de Matriz

O exemplo a seguir ilustra as operações de matriz usadas para determinar coeficientes de curva para ajustes de curva de calibração quadrática.

A equação da curva de calibração quadrática é

$$Y = ax^z + bx + c$$

Para uma série de pares de valor/área (x, y) representando pontos de calibração (ou pontos de calibração médios)

(x_1, y_1) $(x_{2, y2})$ (x3, y3).....(xnyn)

Esses pontos produzem "n" equações quadráticas, que podem ser resolvidas para os coeficientes a, b e c escrevendo as equações em notação de matriz da seguinte maneira.

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^2 & x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_n^2 & x_n & 1 \end{bmatrix} \bullet \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$$

ou

Y = M • Z

Para garantir uma matriz quadrada, a equação é multiplicada por M^T para tornar-se

$$M^T Y = M^T M Z$$

onde M^T é matriz **M** transposta

$$\begin{bmatrix} x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

em seguida

$$Z = \left(M^T M\right)^{-1} M^T Y$$

Se a curva for forçada através de zero, então c=0, e **M** torna-se uma matriz de 2 colunas que é resolvida para os coeficientes a e b.

Cálculo de Mínimos Quadrados Modificados

As fórmula modificada de mínimos quadrados a seguir é usada para determinar os coeficientes da curva de calibração para ajustes lineares:

$$\begin{vmatrix} a \\ b \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sum WX & \sum W \\ \sum WX^2 & \sum WX \end{vmatrix}^{-1} \times \begin{vmatrix} \sum WY \\ \sum WXY \end{vmatrix}$$

Onde:

a = inclinação da linha de calibração

b = interseção da linha de calibração no eixo Y

W é o termo de ponderação = 1/x ou $1/X^2$

onde X = Resposta ou quantidade. Isso é selecionado como o "método de ponderação" na tabela de picos.

Para cálculos de padrão Interno, X é a razão da quantidade não corrigida do componente de interesse na amostra de calibração Cu.

Y é a área relativa corrigida = área de pico/área do padrão interno

Para cálculos de padrão externo, X é a razão da quantidade não corrigida do componente de interesse na amostra de calibração Cu.

Y é a área relativa corrigida = área de pico

O cálculo de mínimos quadrados modificados pode ser estendido para ajustes de ordem mais alta. Por exemplo, a seguinte fórmula é usada para determinar os coeficientes da curva de calibração para ajustes quadráticos ponderados:

$$\begin{vmatrix} a \\ b \\ c \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sum WX^2 & \sum WX & \sum W \\ \sum WX^3 & \sum WX^2 & \sum WX \\ \sum WX^4 & \sum WX^3 & \sum WX^2 \end{vmatrix}^{-1} x \begin{vmatrix} \sum WY \\ \sum WXY \\ \sum WX^2Y \end{vmatrix}$$

A seguinte fórmula é usada para determinar o valor de R ao quadrado em uma série de valores:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \hat{Y}_i\right)^2}{\sum_{i=1}^{n} \left(Y_i - \overline{Y}\right)^2}$$

Onde

$\hat{Y}$ é uma ordenada da linha dos mínimos quadrados.

$$\overline{Y} = \frac{\sum Y}{n}$$

Y_i é o valor observado de Y.

Teste de ruído (ruído rms)

O ruído rms é o desvio padrão do sinal derivado de *n* medições, definido pelo segmento de tempo escolhido.

$$\text{ruído rms} = \left[\frac{\sum_{i=1}^{n} \left(E_i - \overline{E}\right)^2}{n-1} \right]^{1/2}$$

Onde E_I = medições individuais de tensão

e E bar = a média de n medições.

Cálculo do relatório de normalização

$$\text{Conc} = \frac{\text{Cu} * 100}{\text{Sum of Cu for named peaks} + \text{Sum}_{CR}}$$

Onde:

Conc = Quantidade corrigida do componente

Cu = Quantidade não corrigida do componente

Sum_{CR} = Soma de grupos de intervalo calibrado

Centroide do Pico

O centroide do pico é a posição do pico em que 50% da área foi atingida. Esse cálculo está disponível para cálculo, anotação e exportação.

$$x_c = \frac{\int x \, dA}{A}$$

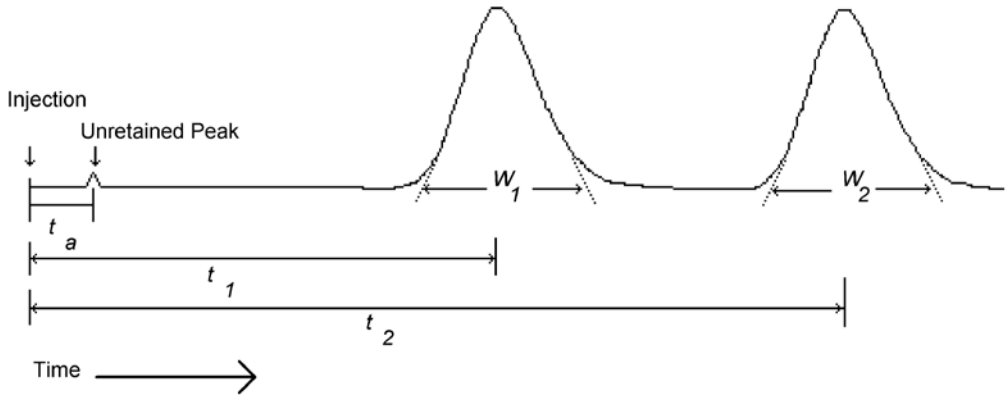
Cálculos de desempenho

Os seguintes valores são calculados e podem ser usados para avaliar o desempenho geral do sistema:

- Retenção relativa
- Pratos teóricos
- Fator de capacidade
- Resolução
- Assimetria de pico
- Placas por metro

Esses valores podem ser incluídos em um relatório personalizado.

O diagrama a seguir mostra os parâmetros usados para calcular esses valores de desempenho do sistema para a separação de dois componentes cromatográficos.



Separação de dois componentes cromatográficos

Nota: Para calcular com precisão os valores de adequação, a frequência de amostragem (definida em configuração de aquisição) deve ser definida para fornecer pelo menos 20 pontos de dados no pico de interesse mais estreito.

Placas/Medidor

$$N = \frac{\mathrm{n}}{\mathrm{L}}$$

Onde

N = Pratos por metro

N = Pratos teóricos na coluna

L = Comprimento da coluna em metros. Esse valor é extraído da seção **Opções de desempenho** do método.

Ajuste ponto a ponto

Um ajuste de calibração ponto a ponto conecta uma série de pontos de calibração com linhas. O resultado dos cálculos ponto a ponto é o mesmo independentemente da definição do fator de resposta. A equação para calcular a quantidade não corrigida é:

$Y = aX + b$

Para um padrão externo:

Y = Quantidade não corrigida (com fator de escala aplicado, ou seja, 1/x se aplicável)

a = Inclinação do segmento da linha de calibração

X = Valor da área ou da altura no eixo Y

b = Interseção do segmento da linha de calibração no eixo Y

Para um padrão interno:

Y = Proporção da quantidade não corrigida

a = Inclinação do segmento da linha de calibração
X = área ou altura de componentes/área ou altura do padrão interno

b = Interseção do segmento da linha de calibração no eixo Y

NOTA: Para pontos situados além do último ponto de calibração, o segmento da linha entre os dois últimos pontos de calibração é extrapolado. Se o valor for inferior ao ponto de calibração mais baixo, o segmento da linha é construído entre zero e o primeiro ponto de calibração.

Ajuste quadrático

Um ajuste quadrático de calibração determina o melhor ajuste de curva quadrático para uma série de pontos de calibração. É necessário um mínimo de três pontos de calibração para determinar um ajuste quadrático. A equação para calcular a quantidade não corrigida é:

$$Y = aX^2 + bX + c$$

Para definição do fator de resposta de Área/Valor,

Padrão externo:

Y = Quantidade não corrigida (com fator de escala aplicado, ou seja, 1/x se aplicável)

a = Coeficiente da curva de calibração

b = Coeficiente da curva de calibração

c = Intersecção no eixo Y

X = área ou altura de componentes

Padrão interno:

Y = Proporção da quantidade não corrigida

a = Coeficiente da curva de calibração

b = Coeficiente da curva de calibração

c = Intersecção no eixo Y

$$X = \frac{\text{Component Area or Height}}{\text{Internal Standard Area or Height}}$$

Para definição do fator de resposta de Valor / Área,

Padrão externo:

Y = Área ou altura de componentes

a = Coeficiente da curva de calibração

b = Coeficiente da curva de calibração

c = Intersecção no eixo Y

X = Quantidade não corrigida (com fator de escala aplicado, ou seja, 1/x se aplicável)

Padrão interno:

$$Y = \frac{\text{Component Area or Height}}{\text{Internal Standard Area or Height}}$$

a = Coeficiente da curva de calibração

b = Coeficiente da curva de calibração

c = Intersecção no eixo Y

X = Proporção da quantidade não corrigida

Retenção relativa

A retenção relativa será calculada para picos nomeados com picos referência e picos não nomeados detectados que sejam membros de grupos de intervalos calibrados e descalibrados, se um pico de referência for especificado. O pico de referência especificado no grupo é usado para calcular a TR Relativa para os picos não nomeados que utilizam a mesma equação dos picos nomeados.

$$\alpha = \frac{t_2 - t_a}{t_1 - t_a}$$

Onde

α = Retenção relativa.

t_2 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção

t_a = Tempo de retenção de um componente inerte não retido pela coluna, obtido a partir do "Tempo de pico sem retenção" na seção **Opções de desempenho** do método.

t_1 = Tempo de retenção a partir do ponto de injeção para pico de referência definido na tabela de picos. Se nenhum pico de referência for encontrado, esse valor se tornará zero.

Retenção relativa (seletividade)

$$\alpha = \frac{t_2 - t_a}{t_1 - t_a}$$

Onde

α = Retenção relativa.

t_2 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção

t_a = Tempo de retenção de um componente inerte não retido pela coluna, obtido a partir do "Tempo de pico sem retenção" na seção **Opções de desempenho** do método.

t_1 = Tempo de retenção a partir do ponto de injeção para pico de referência definido na tabela de picos. Se nenhum pico de referência for encontrado, esse valor se tornará zero.

Nota: Esse parâmetro é identificado como TR Relativa em relatórios.

Relatar "Zero" nas Concentrações do Padrão Interno

Os componentes de padrão interno sempre têm um valor de FR de 1,00. Normalmente se faz um relatório da concentração dos componentes do padrão interno usando o valor de FR.

Para forçar a concentração do componente do padrão interno a ser informada como zero (e, portanto, não contribuir para os totais de concentração de analitos), digite zero como valor de FR manual para os componentes de padrão interno da tabela de picos.

Definição do fator de resposta

Você pode optar pela definição dos fatores de resposta como **Valor / Área** ou **Área / Valor**. Essa seleção é feita na guia **Propriedades do método > Opções** e aplica-se a todo o método. A curva de calibração e a atribuição de valores x e y diferirão dependendo do fator de resposta criado.

Suavização de Savitsky-Golay

Um filtro digital de 9 pontos é aplicado como um filtro deslizante aos pontos de dados, como é mostrado no exemplo a seguir, com os pontos de dados a1 a a3.

$$\frac{a1f1+a2f2+\ldots a9f9}{norm}, \frac{a2f1+a3f2+\ldots a10f9}{norm}, \frac{a3f1+a4f2+\ldots a11f9}{norm}$$

Onde a1….ax são os pontos de dados, f1…fx são os fatores de filtragem e norm é o fator de normalização. Os fatores de filtragem e de normalização são fornecidos abaixo.

f0: -21

f1: 14

f2: 39

f3: 54

f4: 59

f5: 54

f6: 39

f7: 14

f8: -21

O fator de normalização é 231,0.

Escalas

Esse parâmetro permite aplicar um fator de escala à curva de calibração. Esse fator é aplicado às quantidades especificadas antes que a curva de calibração seja calculada. A finalidade de usar um fator de escala é criar uma relação entre áreas (ou alturas) e quantidades que possa ser aproximada por um ajuste polinomial. É possível aplicar um fator de escala a qualquer tipo de ajuste. As operações de escalas disponíveis são:

Nenhum

1/Valor

ln[Valor]

1/ln[Valor]

sqrt[Concentração]

Valor2

1/Resposta

1/Resposta2

ln[Resposta]

1/ln[Resposta]

sqrt[Resposta]

Resposta2

Log (Concentração)

1/ log (Valor)

log (Resposta)

1/ log (Resposta)

ln (Quantidade)&ln(Resposta)

log(Quantidade)&log(Resposta)

Método de cálculo USP (Farmacopeia Norte-Americana)

Pratos teóricos

$$n = 16\left(\frac{t}{W}\right)^2$$

Onde

n = pratos teóricos

t = Tempo de retenção do componente

W = Largura da base do pico do componente usando o método de tangente.

Assimetria de pico (Fator de distorção)

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

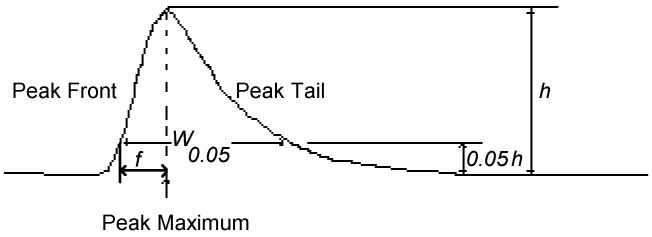
Onde

T = Assimetria de pico ou fator de distorção

$W_{0,05}$ = Distância entre a borda dianteira e a borda traseira do pico, medida em um ponto situado a 5% da altura do pico a partir da linha de base

f = Distância entre o máximo do pico e sua borda dianteira em uma posição situada a 5% da altura do pico

Nota: Para assimetria de pico em 10%, os valores de W e *f* são medidos a 10% da altura do pico.



Pico assimétrico

Resolução

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

Onde

R = Resolução entre um pico de interesse (pico 2) e o pico imediatamente anterior (pico 1).

t_2 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção do pico 2.

t_1 = Tempo de retenção medido a partir do ponto de injeção do pico 1.

W_2 = Largura da base do pico 2 do componente

W_1 = Largura da base do pico 1 do componente

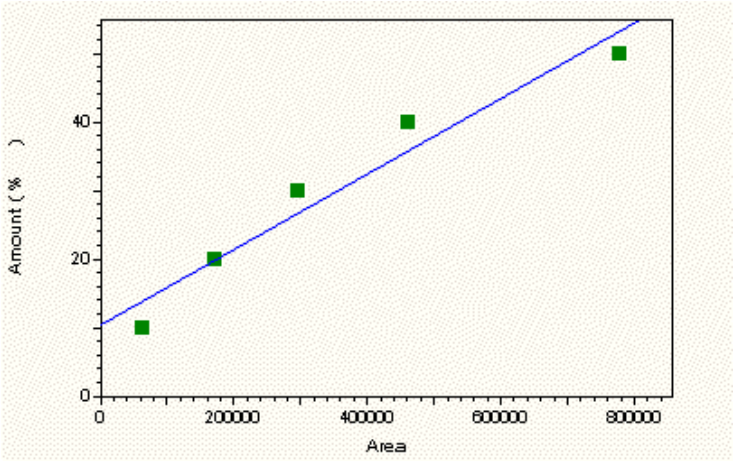
Peso e escalas

Há várias maneiras de calcular médias e médias ponderadas. A tabela a seguir resume as diferenças entre essas opções.

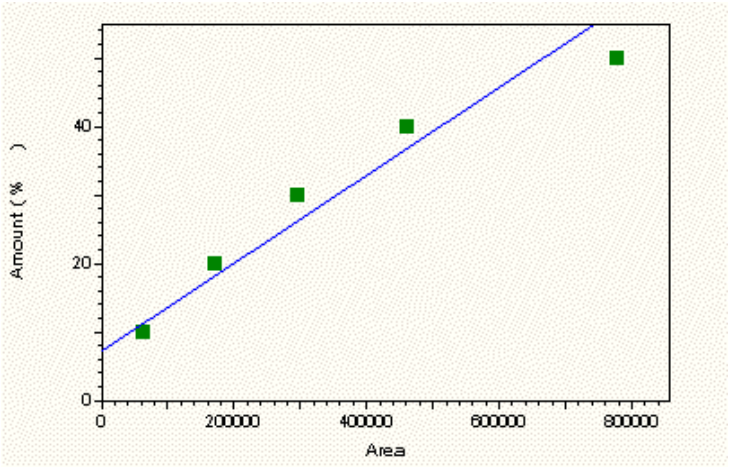
Seleção	Localizada em	Efeito ou uso
Indicador de calib Substituir/Média ponderada	Tabela de picos	Na opção Substituir, cada nova área de calibração substitui a área de calibração anterior no método. Na opção Média ponderada, as replicações são calculadas pela média. A média ponderada usando peso da calib será calculada se o método contiver uma Última área. Se a média automática também estiver ativa, as replicatas de calibração serão limpas quando o nível for recalibrado.
Peso da calib (Valor)	Tabela de picos	Um fator de ponderação usado para calcular uma média de calibração ponderada das replicatas atuais com o método Última Área.
Escalas	Tabela de picos	Aplicada às quantidades antes de criar a curva de calibração de um pico, para estabelecer uma relação entre a área e as quantidades que podem ser aproximadas por um ajuste polinomial.
Método de ponderação	Tabela de picos	Método de ponderação LSQ usado para o cálculo de ajustes de regressão de mínimos quadrados. Geralmente atribui mais importância aos pontos que representam áreas e quantidades menores.

Método de Pesagem (Peso LSQ)

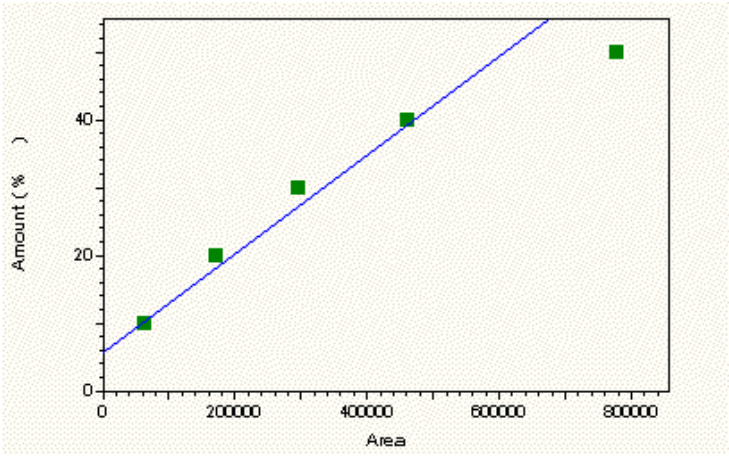
A seleção de um método de ponderação LSQ para ser usado no cálculo de ajustes de regressão de mínimos quadrados, seja 1/x ou $1/x^2$, aumenta a importância atribuída a pequenas concentrações e áreas. O peso LSQ pode ser aplicado somente a ajustes lineares, quadráticos e cúbicos. Alguns exemplos são mostrados abaixo.



Ajuste linear sem ponderação LSQ



Ajuste linear com ponderação LSQ 1/x



Ajuste Linear com Ponderação LSQ $1/x^2$