

Agilent OpenLAB CDS
ChemStation 版本

概念和工作流程



Agilent Technologies

注意

© 安捷伦科技有限公司，2010–2011，2012

根据美国和国际版权法，未经安捷伦公司书面许可，本书内容不得以任何形式复制（包括电子存储修改或翻译）。

手册部件号

M8301-97013

版本

06/2012

Germany 印刷

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

如果体外诊断系统已在相关权威机构注册并符合相关法规，本产品可用作其组件之一。否则只可用于常规实验室。

软件版本

本指南适用于安捷伦 OpenLAB CDS
ChemStation 版本 C.01.04 版。

Microsoft® 是 Microsoft Corporation 在美国的注册商标。

声明

本书内容如有改变，恕不另行通知。安捷伦科技公司对本材料，及由此引出的任何商务和特种用途不承担责任。安捷伦科技公司对本手册中可能有的错误或与装置、性能及材料使用有关内容而带来的意外伤害和问题不负任何责任。如果安捷伦与用户对本书中的警告术语有不同的书面协议，这些术语与本书中的警告术语冲突，则以协议中的警告术语为准。

技术许可

本书对硬件和/或软件的介绍已获得特许，未经许可，不得使用或复制。

权力限制说明

如果软件用于某一美国政府基本合同或次级合同，软件的使用将作为下列情况之一被许可：按照法案 DFAR 252.227-7014（1995年6月）确定的“商业计算机软件”；或者按照法案 FAR 2.101 (a) 确定的“商业条款”；或者按照法案 FAR 52.227-19（1987年6月）确定的“限制计算机软件”；或者任何相当机构法规或合同条款。软件的使用，复制或解密受安捷伦科技标准商业许可条款的管理，美国政府的非 DOD 部门和机构将获得不比法案 FAR 52.227-19 (c) (1-2)（1987年6月）大的权利。美国政府的用户将获得不比法案 FAR 52.227-14 (c) (1-2)（1987年6月）或 DFAR 252.227-7015 (b) (2)（1995年11月）确定的限制权利大的权利，这一原则适用于任何技术数据。

安全警告

小心

小心提示表示危险。提醒您
在操作过程中注意，如果执行不当，将影响产品或丢失重要数据。不要忽视**小心提示**。

警告

警告提示表示危险。提醒您
在操作过程中注意，如果执行不当，将导致人身伤害或死亡。不要忽视**警告提示**。

内容提要 ...

本指南介绍安捷伦 OpenLAB CDS ChemStation 版本的各种概念。在下文中，ChemStation 一词始终是指 Agilent OpenLAB CDS ChemStation 版本。

在本手册中，将说明如何高效地使用 OpenLAB CDS ChemStation 版本 C.01.04 中的数据采集、分析和报告功能来提高实验室的生产率。

1 OpenLAB CDS ChemStation 版本 的基本概念

本章介绍 ChemStation 的操作原理，包括远程控制、图形界面和 ChemStation 视图。

2 使用方法

方法是 ChemStation 的重要组成部分，本章将详细介绍相关概念。

3 数据采集

本章介绍了数据采集过程。

4 自动分析 / 序列

本章介绍了自动分析的概念。它阐述了在 ChemStation 中如何使用序列，运行系列时会发生什么以及如何自定义序列。

5 运行队列和队列计划

6 数据分析和查看概念

本章概述了数据分析和数据查看选项。在 OpenLAB CDS ChemStation 版本 中，这些选项位于两个单独的视图中。

7 校正

本章介绍校正的概念。

8 报告

本章介绍了智能报告和经典报告的概念。

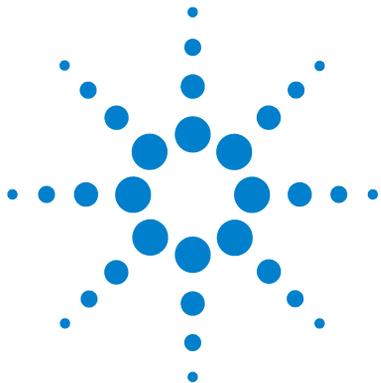
9 CE 特有的概念和功能

本章只与使用 ChemStation 控制 CE 仪器有关。

目录

1	OpenLAB CDS ChemStation 版本的基本概念	7
	术语和缩写	8
	简介	8
	远程仪器控制	9
	关于 ChemStation 软件	11
	ChemStation 数据结构	26
2	使用方法	29
	什么是方法?	30
	方法组件	31
	方法类型	33
	创建方法	35
	编辑方法	36
	管理方法	39
	运行方法时将发生什么?	42
3	数据采集	47
	什么是数据采集?	48
	在线监视器	50
	日志	51
	状态信息	52
4	自动分析 / 序列	55
	什么是自动分析?	57
	什么是序列和序列模板?	58
	序列参数	59
	序列表	60
	序列的建立 (序列和序列模板)	61
	简易序列	62
	使用序列 (序列和序列模板)	66
	序列日志文件	75
	序列运行时会发生什么?	76

序列数据文件结构	78
后序列操作	86
自动重新校正	87
重新校正详述	88
序列类型	90
5 运行队列和队列计划	103
支持的工作流程	104
使用运行队列	106
使用队列计划	108
6 数据分析和查看概念	109
数据分析	110
查看	121
7 校正	125
术语定义	126
校正类型	127
校正表	133
峰加和	134
未知样品	135
重新校正	136
8 报告	139
报告是什么?	140
经典和智能报告	141
智能报告	142
经典报告	149
9 CE 特有的概念和功能	159
方法和运行控制视图中的 CE Agilent ChemStation 特定功能	160
峰顶类型	163
校正类型	164
CE-MSD	165
适用于不同 CE 模式的方法子目录	166



1

OpenLAB CDS ChemStation 版本的基本概念

术语和缩写	8
简介	8
远程仪器控制	9
关于 ChemStation 软件	11
操作系统	11
中央数据存储	11
方法和序列	11
系统配置	12
方法下载选项	12
数据模型	12
文件命名规则	13
软件的用户界面	16
数据采集	18
数据分析	18
报告	20
实用程序和兼容性	21
自定义	21
自动分析	21
运行队列和队列计划	23
良好的实验室规范	23
ChemStation 数据结构	26
ChemStation 数据结构	26

本章介绍 ChemStation 的操作原理，包括远程控制、图形界面和 ChemStation 视图。



术语和缩写

表 1 本文档中使用的术语和缩写

术语	描述
ChemStation	OpenLAB CDS ChemStation 版本
EZChrom	OpenLAB CDS EZChrom 版本
Data Store	OpenLAB Data Store
ECM	OpenLAB 企业内容管理器
RC .Net	RapidControl .Net 接口

简介

Agilent OpenLAB 是一种实验室软件，可提供开放结构以及可重复使用的标准化界面。在科学数据生命周期的每个阶段，都有不同的 OpenLAB 解决方案与之对应：

- 色谱数据系统 (CDS)
OpenLAB CDS 分为 EZChrom 和 ChemStation 两个版本。本手册介绍 ChemStation 版本。
- 企业内容管理器 (ECM)
- 实验室电子记事本 (ELN)

OpenLAB CDS 对安捷伦的 LC、GC、CE、CE-MS 和 LC-MSD 仪器提供全面的仪器控制。它提供了一系列工具，允许用户使用多技术、多供应商仪器控制系统执行数据采集、分析和解释。该色谱软件从 OpenLAB 控制面板启动；在此控制面板中可访问 OpenLAB Shared Services 提供的所有功能。

远程仪器控制

在分布式系统配置下，可从连接到 OpenLAB Shared Services 服务器的任何 OpenLAB 控制面板中配置和启动 ChemStation 仪器。

启动仪器

若要配置或启动仪器，可使用 OpenLAB 控制面板中的**配置仪器**、**启动**和**离线启动**按钮。与在独立工作站或网络工作站配置中一样，“仪器配置”对话框在本地 PC 上运行。但在分布式系统配置下，ChemStation 应用程序本身在安捷伦仪器控制 (AIC) 机器上运行，您可以通过到 AIC 机器的远程桌面连接访问该应用程序。

远程 ChemStation 窗口与 OpenLab 控制面板均独立显示；启动仪器后，可关闭控制面板并继续使用该仪器。此外，还可以使用不同的登录凭证在同一个客户端上运行 OpenLAB 控制面板的多个实例。每个凭证将被传送给从相应 OpenLAB 控制面板启动的仪器。

通过包含仪器名称和 AIC 名称的窗口标题，可识别在远程 AIC 机器上运行的仪器。

断开会话连接

在 AIC 上运行的仪器独立于用来打开远程桌面连接的客户端。即使客户端断开连接（例如因网络故障而断开），仪器上运行的序列可继续运行而不受影响。若要在网络恢复后重新控制该仪器，只需再次单击**启动**或**离线启动**按钮即可。

若要特意断开连接，请单击“**关闭**”按钮或选择“**文件**” > “**退出**”。“**关闭**”对话框额外提供了“**断开连接**”按钮。通过断开连接，可断开远程桌面连接，同时让仪器继续处于运行状态。

注意

您可以断开远程桌面连接而让序列保持运行。

若要重新连接到该仪器，只需在 OpenLab 控制面板中再次单击**启动**或**离线启动**按钮即可。您可以从连接到 OpenLAB Shared Services 服务器的任意 OpenLAB 控制面板中重新建立连接。

1 OpenLAB CDS ChemStation 版本的基本概念

远程仪器控制

无论是单击**离线启动**重新连接到在线仪器，还是单击“启动”重新连接到离线仪器，都将显示两个仪器窗口，一个用于在线仪器，另一个用于离线仪器。

接管会话

通过在另一台 PC 上的 OpenLAB 控制面板中单击**启动**或**离线启动**按钮，可接管现有会话：

- 如果您从 PC 1 上的 OpenLAB 控制面板启动了某台仪器，随后使用相同的用户凭证登录 PC 2 上的 OpenLAB 控制面板并从中启动同一台仪器，则会直接接管现有会话，您在 PC 1 上启动的所有项目都将继续在 PC 2 上运行。

注意

如果新用户和之前的用户使用相同的凭证，则不会显示任何警告。

- 如果其他用户通过另一台 PC 上的 OpenLAB 控制面板启动了该仪器，并且您有“**接管 ChemStation 远程会话**”权限，您也可以接管该会话。在此情况下，该用户将收到一条消息，指出您将要接管该会话。一旦该用户确认此消息，其 PC 上的仪器窗口将关闭，而您的 PC 上将打开相应的仪器窗口。该用户会收到一条消息，指出哪位用户接管了会话。

在线仪器和离线仪器包括在同一会话中，因此始终会一同转移。如果某在线仪器和离线仪器已在一个会话中启动，则接管操作会转移对两台仪器的控制权，而不论单击的是**启动**还是**离线启动**按钮。无论是单击**离线启动**且会话只包含在线仪器，还是单击“启动”且会话中只包含离线仪器，都将显示两个仪器窗口，一个用于在线仪器，另一个用于离线仪器。

关于 ChemStation 软件

操作系统

ChemStation C.01.04 要求 Microsoft Windows XP Professional SP3、Windows Vista Business SP2 或 Windows 7 操作系统。

ChemStation 控制图功能需要使用 Microsoft Excel。

中央数据存储

中央数据存储系统可保存所有种类的电子数据，而与其专用数据格式无关。ChemStation 原始数据（以及其他人工可读文档，例如工作簿）与元数据存储在一起；这样就能非常轻松地检索数据。ChemStation 方法、序列模板、报告模板和数据文件（序列和单次运行）可以上传到中央数据存储，并可以在需要时下载到 ChemStation。

安捷伦为中央数据存储提供两套系统：

- OpenLAB Data Store，可与 OpenLAB CDS 一起进行一体化安装。为不超过 15 台仪器的小实验室设计。
- OpenLAB ECM，作为独立产品供应。为超过 15 台仪器的实验室设计。

有关结合使用 ChemStation 与中央数据存储的概念的详细信息，请参见《Agilent OpenLAB CDS ChemStation 版本与中央数据存储概念指南》。

方法和序列

分析方法详细介绍了如何进行某个特定的分离，包括用于仪器控制、数据采集及评估（包括积分、定量和报告）的所有参数。可以将系统设置为使用不同的方法来采集多个样品的数据。此类操作的控制文件称为序列，其中包含各个样品的信息、对相应方法的引用以及自动重新校正说明。有关方法和序列的详细信息，请参阅“第 55 页的自动分析 / 序列”和在线帮助系统。

系统配置

仪器系统的配置可以通过 OpenLAB 控制面板启动配置编辑器程序来完成。该程序允许您为 ChemStation 软件定义仪器、仪器的 GPIB 或 LAN 地址、数据目录、序列和方法以及初始屏幕大小。此外，您还可以激活或禁用智能报告和 3D 光谱评估，也可以定义方法下载选项。

方法下载选项

如果从上一个仪器会话中最后选择的方法与当前仪器设置不同，可通过方法下载选项定义 ChemStation 的行为。您可以选择以下选项：

- “将方法下载到仪器”

将最后一次选择的方法下载到仪器。仪器设置将被覆盖 此行为对应于 ChemStation C.01.03 版或更低版本。

- “从仪器上传方法”

仪器设置上传到最后一次选择的方法中。该方法将被标记为已修改。

- “从仪器新建方法”

仪器设置上传到新创建的 ChemStation 方法中。

- “总是要求客户选择所需的选项。”

在 ChemStation 启动时会显示一个对话框，您可以从中选择上述选项。在此对话框中，您还可以比较每个模块的设置与最后一次选择的方法中的设置。

比较它们的差异时，您可以显示完整的设置列表，也可以仅显示差异。

注意

此对话框仅评估使用 RC.Net 驱动程序的仪器的设置。它不会评估包含使用经典驱动程序的仪器的设置。

数据模型

ChemStation 软件是围绕基于内存结构（称为寄存器）的数据模型而设计的。寄存器为多功能结构，可以保存二维（如时间 / 强度）和三维（如时间 / 强度 / 波长）信息的分析数据和信息。

ChemStation 提供了一系列命令和功能，用于构建、扩展、提取和编辑（不会更改原始数据）寄存器。有关详细信息，请参见 ChemStation “帮助” > “命令” 下的在线参考资料。

文件命名规则

文件名和令牌

在大部分输入路径名或文件名的 ChemStation 对话框中，可以使用令牌动态地生成合适的名称。根据在指定的对话框中设置的文件名或路径名，会有不同的令牌可用。在下列屏幕中，使用多个令牌作为示例。

文件名控件的外观如下：



路径名控件的外观如下：



在每个相应的对话框中，还将另外显示所得的文件名或路径名。

对于这类字段，您可以选择下列选项：

- 添加静态文本。
- 单击箭头按钮（▶）以从列表中选择令牌。
按下箭头键以从列表中选择令牌。
- 右键单击其中一个已经使用的令牌，以将其替换为从列表选择的令牌。

1 OpenLAB CDS ChemStation 版本的基本概念

关于 ChemStation 软件

- 单击 X 按钮以删除字段中当前的内容。
- 单击带三个点的按钮 (...) 以浏览所需的路径。

命名规则

ChemStation 使用下列规则来创建和处理文件与目录的有效名称：

文件或目录名称中不得包含以下字符：

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

在文件名或目录名称中使用这些字符，会导致在 ChemStation 中调用文件时出现问题。此外，如果安装文件夹中包含这些字符，则离线处理副本将无法启动。如果安装文件夹中包含字符 %，将无法正常使用某些 Chemstation 快捷方式。

此外，还要遵循以下规则：

表 2 受限制的字符

ChemStation 参数	“字符”
方法文件名：	不允许 % 和 .（小数点）
数据子目录和序列子目录：	[] + = ; , .（小数点）和空格不允许包括在内
序列中的数据文件名	不允许包含空格

不能将以下保留的设备名用作文件名：

- CON、PRN、AUX、NUL
- COMx（其中 x 是一个从 1 到 9 的数字）
- LPT1x（其中 x 是一个从 1 到 9 的数字）

也不能在这些名称后附加扩展名（例如 Nul.txt）。

注意

使用英文、日文和中文版操作系统来检验命名规则。安捷伦无法对其他非英文版操作系统提供支持声明。

ChemStation 文件名和子目录的最大长度

下表列出了 Agilent ChemStation 对文件名和子目录的说明：

表 3 ChemStation 文件名和子目录的最大长度

数据文件 / 子目录 / 路径	最大输入长度	自动附加	示例
单个样品的数据文件名	60	.D	Demodad.d
序列中带有前缀 / 计数器的数据文件名	15	.D	longname000001.d
方法 序列 超级序列 谱库 自定义报告模板	40	. M . S . HYP . UVL . FRP	def_lc.m def_lc.s def_lc.hyp demodad.uvl areapct.frp
数据文件子目录	40		demo (在样品信息中)
数据序列子目录	40		demo (在序列参数中)
结果集命名	40		test_date_time (使用序列首选项创建)
数据路径 方法路径 序列路径 超级序列路径 谱库路径 自定义报告模板路径	100	100	c:\chem32\1\data c:\chem32\1\methods c:\chem32\1\sequence c:\chem32\1\hyper c:\chem32\1\speclib c:\chem32\1\repstyle

所有 ChemStation 工作日志都以扩展格式报告系统消息，并将信息字符串打印到多行。某些报告（例如序列报告）可能会将文件名截断以将所有信息放入报告模板。

软件的用户界面

ChemStation 的用户界面被设计成多个视图，这些视图根据分析任务的不同将软件功能分组。所有软件配置中均包含以下标准视图：

- 用于控制和采集仪器数据的“方法和运行控制”视图，
- 用于重新处理已采集的数据的“数据分析”视图，
- 用于通过特定的报告模板对数据进行评估的“查看”视图，
- 设计特定报告格式的“报告布局”视图，

如果订购了其他数据处理模块或者用于仪器诊断和验证过程的软件功能，也会显示其他视图。如果要使仪器操作人员从一个易于使用且已预配置的表中运行样品，则可以使用“ChemStation 助手”视图。

浏览窗格中包含浏览按键，使用此按键可以在 ChemStation 视图和基于树状的 ChemStation 资源管理器之间快速切换。ChemStation 资源管理器的内容取决于视图，从中可以访问不同的 ChemStation 元素。

每个视图由一组标准用户要素（包括菜单和工具栏）组成。通过标准工具栏可以很快地获得某些常用的系统说明信息，例如方法和序列。另外，“方法和运行控制”视图还包含一个系统状态栏、一个样品信息区域（可配置用于单次运行或自动运行）和一个适用于 GC、CE 和 LC 配置的图解式仪器界面图。图解式仪器界面视图使用热点来快速获得每个分析过程的仪器参数和动画显示分析过程中的运行状态。不需要图解式仪器视图时可以将其关闭，以节省内存和其他 Windows 资源。

如果安装了相应模块，“数据分析”视图可以将标准工具栏扩展为特定的数据分析模式，包括重新计算、数据再处理、积分、校正、报告、标注、信号比较及其他专用模式。每种单独的数据分析模式均有相应的模式专用工具组来支持。

若可为仪器选择“智能报表”，则“评估”视图可用。该视图可以灵活的方式对数据进行评估。针对评估操作可以选择任意的数据文件组合，并针对所选的数据应用任何的现有报告模板。所选择的报告模板可定义数据显示的方式，以及生成报告所包含的信息类型。工具栏提供用于打印和导出生成报告的相关功能。

“报告布局”视图用于定义特定的报告模板的布局或报告样式。该任务同样需用一组专用工具栏来实现。视图中显示的“报告模板”编辑器的类型取决于为仪器配置的报告类型。提供“标准报表”或“智能报表”供使用（参见“第 139 页的报告”）。

浏览窗格

位于所有 ChemStation 视图左侧的浏览窗格，用于加速对许多主要 ChemStation 元素的访问，并实现视图之间的快速切换。浏览窗格包含基于树状的 ChemStation 资源管理器和一个可配置的按钮区域，它还包括一个自动隐藏功能以减少 ChemStation 工作空间的占用，并提供一些标准功能（例如调整浏览按钮区域的大小和重排浏览按钮区域）。

浏览按钮

浏览按钮使您可以通过单击特定的浏览按钮来切换化学工作站视图。可以将“浏览按钮”部分最小化、展开和重排。

ChemStation 资源管理器

浏览窗格的内容取决于视图。对于“方法和运行控制”、“数据分析”、“评估”和“报告布局”，ChemStation 资源管理器可有于浏览不同的 ChemStation 元素。默认情况下，这些数据、方法和序列的元素由配置编辑器的设置决定。有关方法、序列和数据位置的新节点可以使用“视图”菜单的“首选项”来指定。

表 4 浏览窗格项目

浏览按钮	ChemStation 资源管理器元素
方法和运行控制	序列模板 / 主方法，结果集方法
数据分析	数据 / 主方法，结果集方法
查看	数据 / 报告模板
报告布局	经典报告：主方法 智能报告：报告模板
认证 (LC 和 LC/MS)	验证视图特定的快捷方式
诊断 (LC 和 LC/MS)	诊断视图特定的快捷方式
调谐 (LC/MS)	调谐视图特定的快捷方式

数据采集

如果软件为可见视窗式和图标式，随着运行时间的进行，可以在监视器上持续监视仪器的状态并且状态会持续更新。分析过程中发生的各种事务，包括所有错误以及分析开始和结束时仪器的条件等，均记录在系统的工作日志中，从中提取的内容将随每个数据文件一起保存。

液相色谱的流量、温度、压力和溶剂成分等仪器条件可能会记录并保存在每个数据文件中。可以显示并打印这些仪器参数，以检测各项分析的质量。所记录的参数的准确性取决于技术以及所配置的仪器的功能。

所有常规数据采集 - 单个样品以及序列运行 - 首先添加到运行队列，然后再从此处启动。有关详细信息，请参见“第 104 页的支持的工作流程”。

实际上，可能需要一个或多个显示窗口来监视仪器实时采集的数据。数据将以实际检测单位（例如：毫吸光度单位 [mAU]、伏特 [V]、温度或巴 [bar]）进行显示。每个窗口均可显示多个叠加的色谱 / 电泳图谱信号或仪器参数（例如压力）。系统可能会调整并记住默认显示设置，这样，用户就可以将他们自己的首选设置设定为仪器的默认设置。您可以缩放窗口，并且可以使用光标来随时显示任一点的特定信号响应值。

在分析过程中，可以通过离线副本使用 ChemStation 的全部功能。运行采集时，将无法访问仪器在线会话的数据分析部分，必须在离线副本中进行数据检查。

如果用户希望在完成分析之前就开始处理数据，可以使用快照功能。快照必须在仪器会话的离线副本中使用，这样就可以立即用于数据检查。

信号及状态信息窗口（包括图解式仪器界面视图的组件）的设置将会自动保存。

有关数据采集的详细信息，请参见“第 47 页的数据采集”及在线帮助系统。

数据分析

数据分析 — 显示

“数据分析”视图通过以下数据分析功能的任务分组对标准工具栏进行了扩展：重新计算、数据再处理、积分、校正、报告、标注和信号比较工具组。可以进行下列主要的图形化操作：

- 当调用色谱图 / 电泳图谱时，可以选择显示单信号还是多信号，
- 不同样品的色谱图 / 电泳图谱的叠加，

- 从一个色谱图 / 电泳图谱中减去另一个色谱图 / 电泳图谱，
- 以图形方式垂直及水平排列信号，以便进行直观比较，
- 倒置或镜像处理信号，以便进行直观比较，
- 显示特定积分峰的扩展峰性能特征，
- 图形缩放和滚动功能，
- 调整显示属性，包括对峰起止符、基线、轴线、保留 / 迁移时间及化合物名称的选择（用户也可选择保留时间和化合物标签的字体、调整显示的大小和方向、选择叠加显示还是单独显示以及选择缩放因子），
- 根据已配置仪器的功能，色谱图 / 电泳图谱显示可以包含仪器参数的图形叠加，
- 通过选择字体、大小、文本旋转及颜色，可以将用户定义的标注以交互方式添加到显示中（定义标注后，可以通过图形方式来移动、编辑或删除这些标注），
- 以图元文件和位图格式将显示复制到 Windows 剪贴板上，
- 使用**挑选模式**功能以检测器单位来显示各数据点的值，
- 将时间 / 强度数字化点导出到 Microsoft Windows 剪贴板上。

数据分析 — 积分

ChemStation 积分器算法是新一代产品的第二次修订版，旨在提高耐用性、可靠性和使用的方便性。

数据分析 - 定量

ChemStation 的数据分析视图的校正模式可以同时显示：

- 信号或通过当前化合物的保留 / 迁移时间窗口的指示正被校准的信号，
- 内含各种校正参数的校正表，以及
- 被校正的化合物的校正曲线。

所有校正模式窗口均相互链接，这样，一个窗口中的变化将自动反映到其他所有窗口中。这种模式允许以图形方式选择和修改校正数据。

定量计算用峰面积或峰高进行，计算方法包括百分比法、归一化百分比法、外标法、外标百分比法、内标法及内标百分比法。校正可以是多级的，并且包括多个内标物。校正历史记录会自动保存，并可用于确定重新校正计算的权重。

有关校正及定量的信息，请参见“第 125 页的校正”。

数据分析 – 批处理浏览

“数据分析”视图中包含以下两组附加工具组：

- 导航表
- 批处理浏览

导航表提供了几项主要的图形操作：

- 标准表配置功能（例如排序、拖放选项、列选择、项目分组）以指定首选的导航表配置
- 鼠标右键单击功能，以调用信号、叠加信号、导出数据、打印报告
- 通过展开导航表中的行来检查信号的详细信息
- 检查信号并使用特定的方法创建 ChemStation 报告

可以在批处理检查过程中执行以下主要的图形操作：

- 定义（校准的）数据文件的自动或手动检查和重新处理
- 校准表的重新校准
- 检查已校准方法的化合物表
- 创建特定的批处理报告

数据分析 – 重新计算

重新计算模式包含的功能可用于快速生成“导航表”中任意数据子集的结果或报告。可以为任意选择的数据子集组合轻松生成结果，而无论最初采集样品时使用的序列如何。用户可以使用任意方法完成重新计算。使用的方法将复制到单独的数据文件（DA.M）中。重新计算期间不会完成任何校正操作。

数据分析 – 重新处理

重新处理数据模式包含的功能可用于重新处理一个完整的序列，通过序列表中定义的方法和根据校正样品的结果来计算样品结果。

报告

若为仪器启用了“智能报告”，则“评估”视图激活，在“报告布局”视图中显示“智能报告”的“报告模板编辑器”。

通过启用的“智能报告”，可以使用“智能报告”模板和“经典报告”模板创建“单次进样报告”和“序列摘要报告”。若具有相应的权限，则可以创建“智能报告”的报告模板。

通过禁用“智能报告”，可以仅使用“经典报告”模板来创建“单次进样报告”和“序列摘要报告”。若具有相应的权限，则可以创建“经典报告”的报告模板。

实用程序和兼容性

ChemStation 可以采用分析仪器协会 (AIA) 的 1.0 版 (1992 版权所有) andi (分析数据交换) 色谱格式来导入和导出数据文件。遵循级别一 (样品信息和信号数据) 时支持数据导入，遵循级别二 (样品信息、信号数据及积分结果) 时支持数据导出。

ChemStation 包括的一些命令和功能既支持 Microsoft Windows 平台在用作 DDE 客户端时的动态数据交换 (DDE) 标准，也支持该平台在用作 DDE 服务器时的动态数据交换标准。这些命令包括建立及终止连接的命令、双向传输信息的命令和执行远程功能的命令。

自定义

ChemStation 可通过强大的命令集合加以自定义。可以将这些命令分组以自动执行特定的功能，例如称为宏的组。编写宏的用户可以定义他们自己的变量，将宏构建为条件结构或循环结构，执行物理 I/O 操作 (包括文件处理及用户交互)，嵌套宏和日程表并且与 MS-DOS 或 Microsoft Windows 其他应用程序进行数据交换。

有关自定义的详细信息，请参见 ChemStation “帮助” > “命令” 下的在线参考资料。

自动分析

ChemStation 可计划并执行单个样品和多方法序列。

可以将序列参数集定义为使用自动生成的文件或按顺序编号的文件 (带有用户定义的最多十五个字符的前缀)。用户可选择运行完整分析序列或仅进行数据重新

处理的序列，可选择分析完毕或出现错误时运行的特定关闭的系列命令之一或用户制定的宏指令。

在类似电子表格的用户界面中建立序列表或要运行的分析列表，用户可以在其中指定瓶号和样品名称、样品类型、分析方法、样品定量参数（包括样品量、乘积因子和稀释因子、校正设定、数据交换参数 LIMSID 和重复进样的次数）。根据配置的仪器和模块，用户还可以访问更多字段，例如，如果安捷伦 1100/1200 LC 系统包含馏分收集器，则序列表中将会显示“馏分开始”列。序列表外观可以由用户配置。用户可以在表中的各个单元格之间移动，并且可以复制、剪切或粘贴单个单元格、整个行或一系列行以快速高效地建立序列。

在序列表中样品可能会被识别为未知、校正、空白或对照样品类型。样品类型确定了样品的所有特定的样品数据评估方式：

- 根据方法说明评估和报告未知样品。
- 使用校正样品按下述方法重新校正方法的定量组分。
- 空白样品用于评估《欧洲药典》定义的特定峰的参比信号。您可以在自定义报告中打印信噪比。请参阅《参考指南》以了解关于计算和必填数据字段的详细信息。
- 按照方法中定义的每种组分的限制评估对照样品。如果结果超出任何指定的参数范围，序列执行将中断。

可以将校正样品定义为简单、循环或区间循环校正。简单重新校正意味着每次在序列中定义了一个校正样品时就进行一次重新校正。循环重新校正意味着在分析一系列未知样品期间，将按定义的间隔进行循环重新校正。在插入一系列未知样品时，将分析两次校正设置。未知样品的定量报告将使用两次校正集的平均校正表值来计算。

部分序列功能使用户可以查看序列执行的顺序，还可以选择单个样品条目来重新运行或重新处理。获得允许重新评估数据时，用户可指定是使用原有样品定量计算数据，还是序列样品表中输入的最新数据来进行数据重新处理。

可以暂停序列以使用其他方法运行单次进样优先样品，然后重新开始，而不会影响自动分析。可以在序列执行期间将样品添加到序列表中。

序列表和部分序列表都可以打印。

有关序列的详细信息，请参见“第 55 页的自动分析 / 序列”和在线帮助系统。

运行队列和队列计划

通过运行队列，可依次自动运行多个单样品或序列。添加到队列中的第一项在数据系统准备就绪时即可开始，除非从队列中暂停。您可以根据简易序列模板或经典 ChemStation 序列添加单个样品或序列，也可以暂停队列。另外，每个“运行方法”或“运行序列”命令也会自动向运行队列添加一项，并在队列中自动启动该项。

使用队列计划，您可以准备一系列单个样品或序列，并将计划保存到文件系统。要启动这些计划的样品和序列，只需打开计划并将其添加到序列队列即可。通过此功能，可以启动时间很长的任务，例如通宵作业或周末作业。

有关详细信息，请参见“第 104 页的支持的工作流程”。

良好的实验室规范

ChemStation 是根据国际公认的设计和开发标准而开发的，具有许多专为辅助用户在规管环境下操作而设计的功能。这些功能涉及整个方法说明及验证各方法是否符合其预期的用途，检测系统的操作，并确保数据的可跟踪性、原始性和真实性。

开发过程

各软件包文档中包括的认证书记录了软件开发以及作为开发周期的一部分的测试步骤。开发过程已注册 ISO 9001 质量标准。

方法说明及使用

- 综合方法 — 将完整的仪器和数据分析说明存储在一起。方法中包含对各化合物范围的说明，在检测时，超出校正范围的定量计算结果将不被采用。
- 方法变更历史记录使验证方法的用户可以自动记录方法是如何改变及何时改变的。用户可以选择在变更历史记录中添加原因注释。变更历史记录将作为方法的一部分以二进制格式自动被保存。为避免对记录的未授权访问，可通过用户访问模式对其进行保护，如下所述。可以查看和打印变更历史记录。
- 如“数据分析定量”部分所述，可以根据每个方法中的各个化合物指定许多色谱/电泳图谱和系统性能参数的限制。超出这些参数范围的结果将用于控制自动序列的执行，如“自动分析”部分所述。在相应的分析报告中对其进行了说明。

- 系统性能或适用性报告（请参阅上述“报告”部分）提供了详细的分离质量分析。

在 OpenLAB 共享服务中可以设置各种角色和权限。“ChemStation 管理员”、“ChemStation 实验室管理员”、“ChemStation 分析员”和“ChemStation 操作员”预配置角色是运行环境的角色基础。

方法耐用性

序列总结报告（请参阅“第 141 页的经典和智能报告”）提供了耐用性测试方法的途径。对于经典报告，用户选定标准的扩展格式报告是一种趋势图报告，可用于确定实际的操作限制。对于智能报告，可以创建自己的序列摘要报告模板，其中包括带极限的趋势图。然后，可以将这些限制与方法结合，以确保在对照样品的分析过程中按说明执行方法。

系统操作

ChemStation 验证工具包（标准软件的一部分）可自动检查软件安装的正确性及数据评估部分的运行是否正确，方法是：将执行测试时生成的结果与预先记录的已知值进行比较。认证工具包允许用户定义自己的数据文件和方法作为测试的基础。

数据的可追踪性、原始性及质量

运行时日志可提供整个系统的运行情况日志。还可以记录任何不正常的事件（例如运行中的错误或参数变更），以及每次分析前和分析后的仪器条件。相关日志副本将随各个数据文件一起保存。

每次分析过程中的实际仪器条件（例如压力、流量和温度）也将被记录（如果所配置的仪器支持该功能）。随后，这些数据可以与色谱图 / 电泳图谱一起以图形方式显示，由此显示该特定分析过程中的实际仪器条件，并包含在报告中。

随数据文件一起保存的方法将记录分析时所用的实际方法，并且允许将来完全重建所报告的全部数据。所有分析步骤完成时将保存方法。

所有报告均包含时间戳记和可跟踪页码（采用第 x 页，共 y 页分页格式）。用户可以选择每个报告的详细级别，包括从简单的总结报告到完整的系统细节。

GLP 保存寄存器文件（指定为方法配置的一部分）将所有的原始数据（包括样品信息、数据分析方法、色谱 / 电泳图谱信号、仪器条件、积分和定量结果、报告数据和运行日志）保存为受校验和保护的二进制文件。该文件是不可编辑的二进制格式文件，可确保结果的原始性。该文件包括修订模式，用来指示数据是否已重新处理过。

可以在序列表中定义对照样品类型，当仪器在无人看管的情况下运行时，可以使用这些类型针对质量对照样品结果来自动检测仪器的性能。如果出现超出用户指定的可接受范围的结果，将停止仪器的自动执行。

ChemStation 数据结构

无需创建专有文件夹

此数据结构对应于 ChemStation B.01.03 版和更早版本中使用的数据结构。序列、方法和生成的数据文件与结果都保存在单独、固定的指定位置。例如，在序列中方法通过名称来引用，用户需负责维护方法、序列和数据文件的完整性。因此，长期的数据归档和结果复制就成了艰巨的任务。用户必须为色谱图、结果和相关方法创建文件；不仅常规实验室是这种情况，非常规实验室（例如环境实验室）的某些领域也是如此。若未创建结果集，则只能通过打印报告中的所有内容完成文档创建。

但是，有时用户可能希望如同在 ChemStation B.01.03 或更早版本中那样保存数据，并根据相应工作流程工作：

- 在方法的开发期间，采集和数据分析只用一种方法较为方便，这样将来的采集和已采集数据的重新分析都可以自动使用更改。
- 为较早版本设计的 ChemStation 系统上自定义的宏解决方案可能会要求根据旧的数据组织模式存储数据、方法或序列。
- 如果运行 ChemStation C.01.04 的实验室中还有其他运行 ChemStation B.01.03 或更早版本的系统存在，则在所有系统上使用相同的数据组织模式可能更方便。

需要创建专有文件夹

为了加强数据文件与方法之间的关联，ChemStation B.02.01 版引入了结果集（当时又称为序列容器）。如果使用中央数据存储系统（OpenLAB ECM 或 OpenLAB Data Store），将会把整个结果集（序列 / 方法 / 数据文件 / 报告模板）作为一个实体传输到中央存储库。

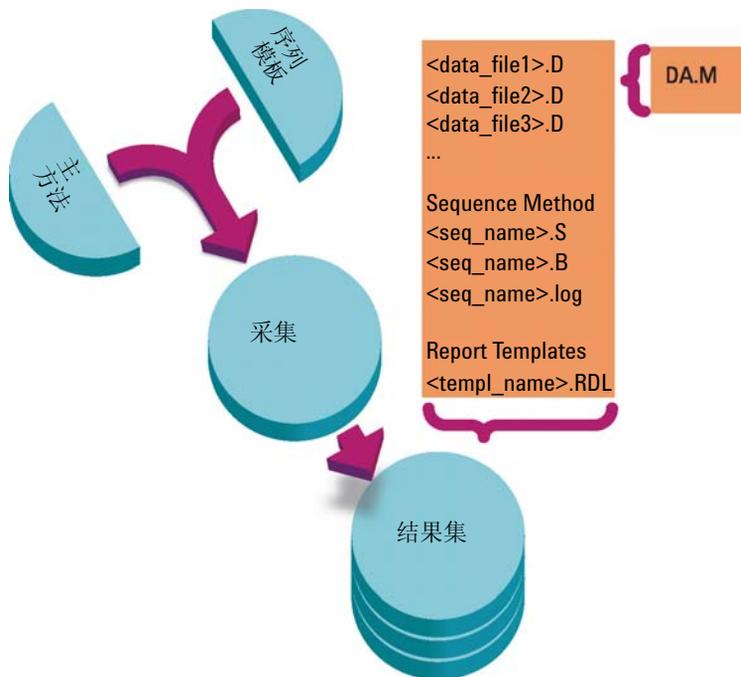


图 1 启用专有文件夹创建功能时的序列采集

文件夹 **Chem32\1\methods** 中的方法作为主方法。这些方法在采集和数据分析期间保持不变。

类似地，文件夹 **Chem32\1\sequence** 中的序列用作序列模板，可用于多次重新运行序列（但不进行数据再处理）。

文件夹 **Chem32\repstyle** 中的报告模板作为开发自己使用的报告模板的基础。

数据的存储模式取决于采集的是单次运行数据还是序列数据：

- 1 执行序列时，在指定的子目录自动创建名称唯一的新文件夹（“**结果集**”）。运行单个样品时，数据文件 (*.d) 将写入指定子目录。
- 2 对于序列数据，执行的序列模板 (*.s) 和所有涉及的方法 (*.m) 都会复制到结果集中。方法的副本叫做“**序列方法**”，以区别于原始主方法。若使用“**智能报告**”，则将所有涉及的报告模板 (*.rdl) 也复制到结果集中。

所有和序列相关的任务（例如：采集和数据分析）都在序列和方法的副本上执行。因此，序列模板和主方法会保持不变，以便将来进行其他序列操作。

序列采集过程中对序列所作的任何更改（例如：向序列表添加行）都将在结果集的序列文件副本上执行。序列模板将保留不变。

类似地，方法中的任何更改（例如：运行校正时校正表的更新）都会反映在序列方法中，而不是主方法中。

执行序列时，生成的所有数据文件 (*.d) 和对应的批处理文件 (*.b) 及序列日志文件 (*.log) 都会存储到序列数据文件夹中。

3 每个数据文件都包含用于创建运行的方法副本。其中会存储以下方法信息：

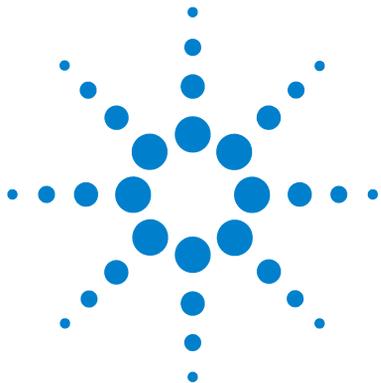
- 采集参数保存在 ACQ.TXT 中，可确保保留每个特定数据文件的原始方法参数。参数可以使用“方法” > “查看方法”命令来查看和打印。
- 在完成数据分析部分后，整个方法（包括数据分析参数）将保存为 DA.M。

使用结果集具有诸多优势：

- 序列数据不会被覆盖。每次序列采集都会将结果数据文件以唯一名称保存在自己的结果集中。
- 利用结果集概念，可以存储数据以及数据分析所需的所有必需信息：序列文件、所有方法的副本，如果使用“智能报告”，还有序列使用的报告模板的副本。这些方法可通过序列特定的输入更改，而不影响原始主方法。因此，结果集概念加强了序列的意义，即作为结果生成的数据文件和方法的集合。
- 通过导航表，可在“数据分析”视图中实现数据重新计算和数据再处理。
- 结果集概念为与中央数据存储系统进行的数据交换提供最佳的前提条件。

启用或关闭创建专有文件夹

为了能像在 B.02.01 版本之前的 ChemStation 中那样使用数据存储概念，“首选项”对话框的“序列”选项卡包含有“数据存储”部分。通过它，可以选择“专有文件夹创建启用”和“专有文件夹创建关闭”（参见“第 78 页的“首选项”-“序列”选项卡”）。缺省情况下将选中“专有文件夹创建启用”。“专有文件夹创建启用”会启用上一章中介绍的数据存储概念。



2 使用方法

什么是方法?	30
方法组件	31
方法类型	33
主方法	33
序列方法	33
数据文件方法	33
创建方法	35
编辑方法	36
编辑方法组件	36
编辑方法	36
在线模式下编辑方法	38
离线模式下编辑方法	38
管理方法	39
ChemStation 资源管理器的方法树状图	39
更新主方法	39
更新方法	40
运行方法时将发生什么?	42
方法运行总结	42
预运行命令或宏 (运行时选项表)	44
数据采集 (运行时选项表)	44
数据分析 (运行时选项表)	44
自定义数据分析	45
保存 GLP 数据	45
后运行命令或宏	46
将方法的副本与数据一起保存	46
将方法副本作为 DA.M 与数据一起保存 (ChemStation 缺省设置)	46

方法是 ChemStation 的重要组成部分，本章将详细介绍相关概念。



2 使用方法

什么是方法？

什么是方法？

方法包括所有数据采集和数据分析的参数，以及分析某些特定样品所需的预运行和后运行参数。

可用的方法 (*.m) 文件显示在 ChemStation 资源管理器中。要快速、轻松地浏览方法，可以使用“**首选项**”对话框的“**路径**”选项卡将其他方法位置添加到 ChemStation 资源管理器选择树中。

方法组件

方法通过包含最多四十个字母数字字符的名称来识别。文件名始终带有 .M 扩展名以将其识别为方法。方法以目录的形式进行存储，这些目录包含与方法的组件相关的单独文件。

每个方法由四部分构成：

- 方法信息，
- 仪器控制，
- 数据分析，
- 运行时选项表。

方法信息

本节用于定义关于方法的说明信息。

仪器控制

定义控制仪器或其组件的参数。对于 LC 仪器，参数（例如流动相组成、流速、进样量、检测器波长等）用于控制泵、进样器和检测器。对于 GC 仪器，参数（例如进样口温度、进样口压力、填充柱流量设置等）用于控制仪器。

数据分析

定义控制数据处理的参数。

- 信号细节
定义信号及其用于数据评估的特性。
- 积分事件
定义色谱图 / 电泳图谱在指定的保留 / 迁移时间发生的定时事件。这些定时事件可用于更改信号的积分方式。
- 峰识别
定义色谱图 / 电泳图谱中与峰识别相关联的数据处理参数。
- 峰定量

定义影响定量计算的数据处理参数，这些参数决定对应于每个峰的样品组分的含量和浓度。

- **校正及重新校正**

定义影响校正及校正频率的数据处理参数。

- **自定义字段**

定义可用于方法的样品或化合物相关自定义字段的属性。自定义字段可用于向样品或样品化合物添加自定义信息。

- **报告**

使用经典报告：定义运行之后所打印报告的格式。

使用智能报告：指定运行之后用于生成报告的报告模板。

运行时选项表

定义方法运行时应该执行方法中的哪些部分。

运行时选项表可用于：

- 采集、保存和处理数据以生成报告，
- 仅执行方法的一部分，
- 采集并保存数据，但不对数据进行分析，
- 重新分析现有的数据文件，
- 使用自己的宏进行数据分析、运行前后的数据处理，以及
- 将分析结果保存在寄存器中以用于 GLP。

方法类型

存在多种不同的方法类型。根据存储位置不同，可以将方法作为主方法使用，作为序列结果集中的引用，或者在数据采集期间作为使用设置的实际记录。

主方法

这些方法保存在计算机磁盘上。存储方法的名称最多包含四十个字母数字字符，后跟扩展名 *.M。主方法目录可在“首选项”中配置（参见“第 48 页的路径选择”）。

主方法存储在方法子目录中，可以在 ChemStation 资源管理器的某个“方法”节点中找到，并且不与任何结果集直接关联。

序列方法

序列运行时（使用选项“专有文件夹创建启用”，请参见“第 78 页的“首选项”-“序列”选项卡”），序列使用的所有主方法的副本均与序列数据文件一起存储在结果集中。这些方法直接链接到序列，并还会在对序列进行数据再处理时使用。缺省情况下，对这些方法所做的更改不会自动传播给主方法。只要启动序列运行或暂停后继续序列运行，所做的更改即会生效。在重新处理序列以及生成任何报告时，这些更改还会传送到数据文件方法 (DA.M)。

数据文件方法

数据分析方法的副本 - 数据文件方法 DA.M - 与数据文件一起保存。

数据文件方法 DA.M 在每次生成结果（数据采集、重新计算或报告生成）后自动更新。当您在最终结果模式下重新计算结果时，ChemStation 也会调用此方法（请参见“第 113 页的在上次结果模式下重新计算”）。

2 使用方法

方法类型

方法可以与结果文件（run.m）一起存储。这种情况下，可以使用运行时选项表的“**将方法与数据一起保存**”选项，将方法目录作为一个子目录存储在数据文件目录中。

在 ChemStation 资源管理器中，可以通过双击方法项实现轻松地调用主方法或序列方法。

创建方法

创建新方法即意味着修改主方法或序列方法，并保存修改。用户可以覆盖现有的方法，或者将方法另存为新的主方法。请注意：更改方法时，只有保存所做的更改后，磁盘版本才会更改。

您可以选择如何创建方法。您可以创建一个方法来执行一部分或所有分析。例如，您可以创建一个仅执行数据采集的方法。当准备分析数据并生成报告时，可以修改该方法来执行相关数据处理任务。

注意

不可删除默认方法（DEF_LC.M、DEF_CE.M 或 DEF_GC.M）。这些方法文件用作创建新方法的模板。

编辑方法

您可以使用“方法”菜单中的“编辑完整方法”项目来编辑已经存在的方法。每个方法对话框都会给你提示，最后，您可以保存编辑过的方法。编辑过程如下：

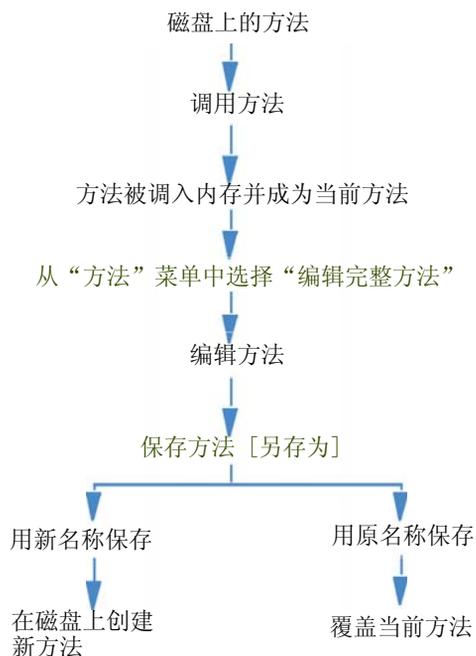


图 2 编辑方法

编辑方法组件

每个方法由四部分构成，每部分均可单独进行编辑。

以下详细介绍部分有些涉及特定的对话框，有些只作概括说明。

- 方法信息包含：
 - 关于方法的文字性说明。

- 仪器控制取决于配置。例如，可能包含：
 - 柱温箱参数，
 - 进样器参数，以及
 - 检测器参数。
- 数据分析包含：
 - 信号细节，
 - 积分参数，
 - 定量参数，
 - 校正参数，
 - 自定义字段设置参数，以及
 - 报告参数。
- 运行时选项表包含：
 - 要执行的方法部分。

文件夹

方法由保存在方法目录 (*.M) 中的一组文件构成。

缺省情况下，主方法存储在 Chem32\1\METHODS 下。通过首选项设置可为主方法添加其他路径。序列方法存储在结果集中，数据文件方法作为 DA.M 存储在数据文件子目录中。

文件

带有 .MTH 扩展名的方法文件包含参数集，并以 UNICODE 格式存在。INFO.MTH 文件由方法控制参数构成。

包含仪器参数的方法文件具有相关分析模块的名称。例如：

表 5 方法文件示例

HPCE1.MTH	包含用于毛细管电泳的采集方法。
ADC1.MTH	包含安捷伦 35900 采集方法。如果配置了两台相同的仪器，则方法文件被分别称作 ADC1.MTH 和 ADC2.MTH。

表 5 方法文件示例

DAMETHOD.REG	用于数据评估。
LALS1.REG	如果配置了典型的模块 LC 系统，则包含 Agilent 1100/1200 系列自动进样器的参数。用于其他 Agilent 1100/1200 系列模块的方法文件遵循相同的命名规则 Lxxx1.reg，其中 xxx 为模块的缩写。
AgilentSamplerDriver 1.RapidControl.xxx.xml	如果配置了模块 LC 系统，则包含 Agilent 1100/1200 系列自动进样器的参数。参数的各个部分显示多个 .xml 文件（用文件名的 xxx 部分表示）。其他模块也可以使用类似的 .xml 文件。

在线模式下编辑方法

当在线 ChemStation 处于空闲状态时，可以编辑序列方法的所有部分。当序列正在运行时，可以编辑所有采集参数以及部分数据分析参数（如“设定报告”下的设置）。

所做的更改将被保存，且对于当前的运行和所有包含相同方法的后续序列行立即生效。这意味着还可以在序列暂停或部分序列期间更改方法。

离线模式下编辑方法

用户可以在离线的 ChemStation 中编辑序列方法，而该方法可用于在线 ChemStation 的运行中。在此情况下，可在离线会话中编辑数据分析部分。一旦在离线会话中保存更改，则更改的 DA 设置将用于在线会话中当前序列运行的下一次“数据分析”。

有关校正的方法更新将忽略。此外，历史记录不会合并；这意味着，当方法在离线会话中运行时，可以从在线会话和离线会话中更改它，但方法的审计跟踪仅包含在离线 ChemStation 中所做的更改。

注意

如果在线和离线 ChemStation 调用了同一方法，则在序列运行期间只能以离线方式编辑方法。如果在线 ChemStation 处于空闲状态，将无法在离线 ChemStation 中编辑方法。

管理方法

ChemStation 资源管理器的方法树状图

ChemStation 资源管理器的方法树状图由两部分构成。上半部分显示当前调用的结果集中包含的方法。下半部分显示主方法目录中的方法，可以使用“首选项”对话框进行配置。



图 3 方法导航树状图

当前调用的方法始终以粗体显示。

通过拖放操作可以轻松地将主方法复制到序列方法。整个方法（DA 参数和 ACQ 参数）将会复制到结果集中。

更新主方法

“更新主方法”选项通过 ChemStation 资源管理器的“方法”菜单和序列方法的上下文菜单提供。使用该功能，可以更新创建序列时引用的主方法。前提是主方法仍存在于主方法目录中（主方法必须与序列方法的名称相同）。

注意

值得注意的是：该功能只更新目标方法的数据分析参数，覆盖所有的数据分析参数。除了数据分析参数外，源方法的“审计跟踪”也会覆盖目标方法的“审计跟踪”。

还可以对序列参数进行配置，以在每次序列采集或数据重新处理期间自动执行该功能。有关详细信息，请参见“第 68 页的主方法的自动更新”。

更新方法

使用“更新方法”对话框（参见下图），可以将方法从主方法目录复制到结果集中，反之亦然。若将主方法复制到结果集中，整个方法都将复制（DA 参数和 ACQ 参数）。若通过将序列方法复制到主方法目录中来更新主方法，则只能更新主方法的 DA 参数。

通过 ChemStation 资源管理器的“方法” > “更新方法”菜单或序列方法的上下文菜单打开该对话框。

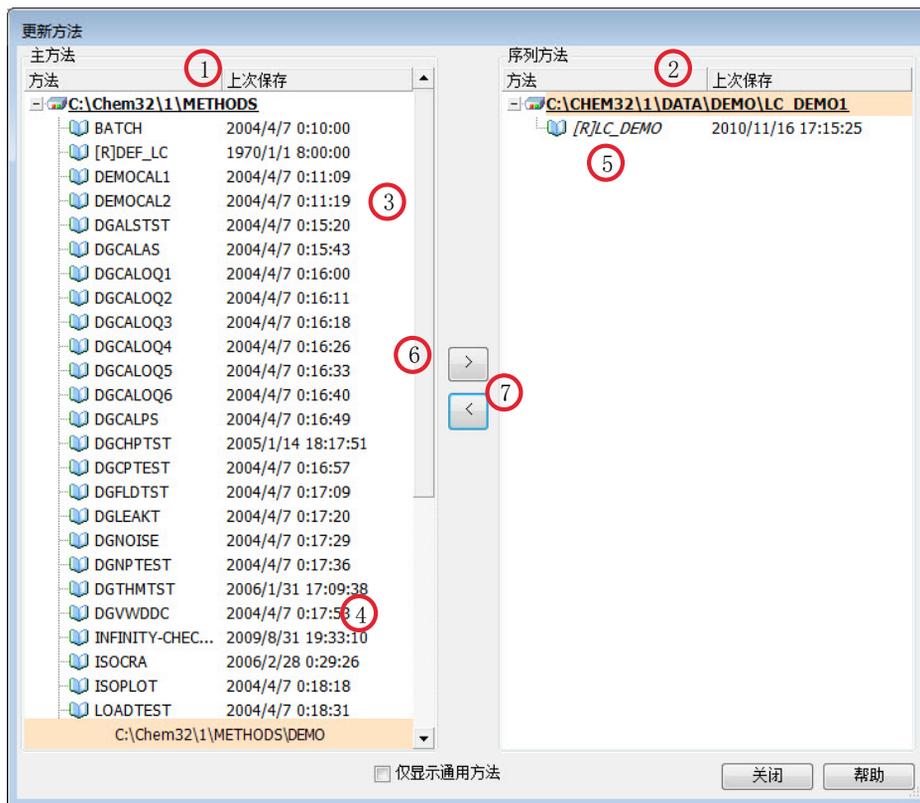


图 4 “更新方法”对话框

- 1 在左侧，您会看到所有主方法目录中的方法（如“首选项”中所配置）。
- 2 在右侧，您会看到当前调用的结果集中的方法。

- 3 对于每个方法，您会看到上次保存该方法的日期。日期的工具提示显示方法的上一历史记录条目。
- 4 方法也可以存储在主方法目录的子文件夹中。
- 5 只读方法具有 [R] 前缀。当前调用的序列方法以斜体显示。
- 6 通用于序列结果集和主方法池的方法以粗体显示。方法仅按名称匹配；如果方法名称存在于多个池中，则会将每个实例视为通用。
- 7 您可以通过使用拖放操作或通过使用 “<” 和 “>” 按钮，在主方法池和序列结果集之间复制方法。您无法覆盖标记为只读的方法。

2 使用方法

运行方法时将发生什么？

运行方法时将发生什么？

当运行开始时，“运行时选项表”对话框将指定方法中要执行的部分。

运行时选项表分为八个部分：

- 预运行命令或宏，
- 数据采集，
- 标准数据分析，
- 第二个信号的分析方法（仅限于 GC），
- 自定义数据分析，
- 保存 GLP 数据，
- 后运行命令或宏，以及
- 将方法副本与数据一起保存（RUN.M）。

运行某方法时，将执行“运行时选项表”对话框中定义的方法的指定部分。

方法运行总结

以下列表显示了当“运行时选项表”中的所有部分都被选定时方法运行的流程：

1 预运行命令宏

分析开始前执行某一任务。

2 数据采集

执行进样器程序。

进样。

采集原始数据。

保存数据。

3 将方法的副本与数据一起保存（RUN.M） - 运行时选项表可选

4 数据分析（处理数据）

调用数据文件。

积分数据文件。
识别及定量峰。
检索光谱库（如果可用）。
检查峰纯度（如果可用）。
保存方法（DA.M）的副本并打印报告。

5 自定义数据分析

执行您的宏。

6 保存 GLP 数据

保存二进制记录于 GLPSave.Reg 中

7 后运行命令宏

分析完成后执行某项任务，例如，生成一个自定义报告。

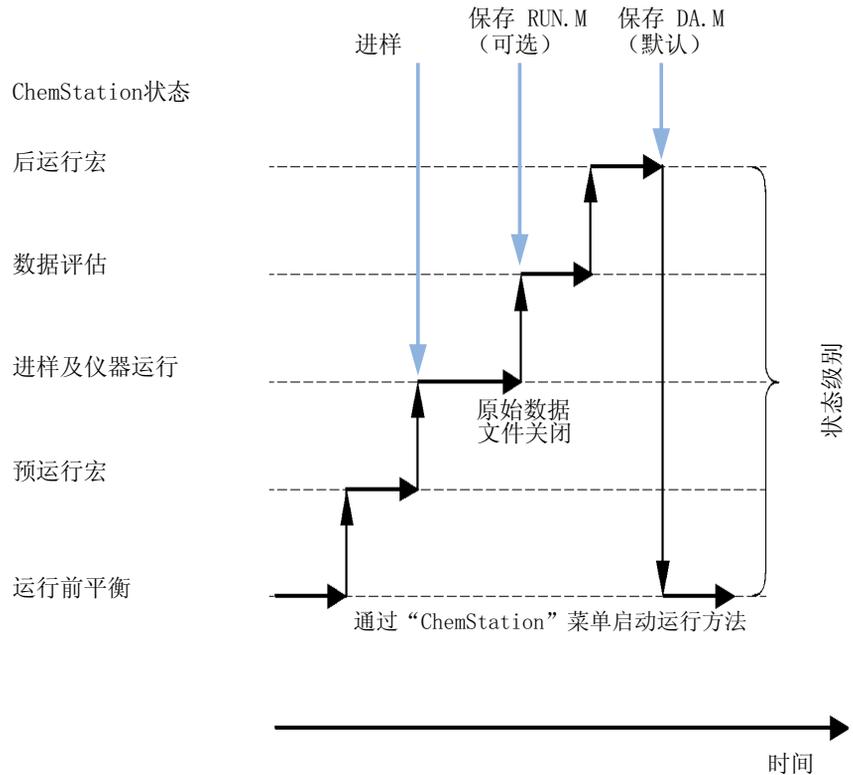


图 5 方法运行

2 使用方法

运行方法时将发生什么？

下图显示 ChemStation 在方法运行期间的状态概览，其中“运行时选项表”的所有部分均已选定。

注意

对于“禁用专有文件夹创建”模式，不会生成 DA.M。有关详细信息，请参见“第 78 页的“首选项”-“序列”选项卡”。

预运行命令或宏（运行时选项表）

如果指定了一个预运行命令或宏，则该命令或宏会在分析开始前执行。这部分通常用于结合其他软件包来自定义系统。

数据采集（运行时选项表）

- 将所有参数设置为在当前方法中指定的初始条件。
- 如果指定了进样程序，则将从当前定义的瓶进样。
- 监视器窗口将显示分析的进度，包括色谱 / 电泳图谱信息和光谱数据（如果可用）。
- 采集数据并将其保存在数据文件中。
- 数据采集完成时，当前执行方法的采集参数缺省将保存为数据文件的 ACQ.txt。

数据分析（运行时选项表）

停止时间一到，即结束分析，所有原始数据都贮存在计算机硬盘中。保存所有原始数据后，将开始软件的数据分析部分。

积分

- 信号中的色谱图 / 电泳图谱对象将按照“积分事件”对话框中指定的设置积分。
- 确定峰的起点、峰顶、保留 / 迁移时间及峰的终点。
- 在每个峰下定义基线以确定最终峰高及峰面积。

- 积分结果被创建为“积分结果”列表。

峰的识别及定量计算

- 利用保留 / 迁移时间，软件对照校正表中的已知组份来识别峰。
- 软件利用峰高或峰面积，通过在“校正表”中指定的校正参数来计算每个被检测的组分的含量。

光谱库检索（仅适用于 LC 3D、CE、CE/MS 和 LC/MS 系统的 ChemStation，可通过标准报告获得）。

对于具有紫外可见光谱的所有峰，可以进行预定义的光谱库的自动检索，并根据紫外可见光谱识别样品中的组分。有关详细信息，请参见了解您的光谱软件。

峰纯度检测（仅适用于 LC 3D、CE、CE/MS 和 LC/MS 系统的 ChemStation）

对于具有紫外可见光谱的峰，您可以计算该峰的纯度因子并将其保存在记录中。如果在指定自动谱库检索时选取了“检查纯度”框，或选择了适当的报告类型，则峰纯度将在每次分析结束时作为方法的一部分自动被确定。有关详细信息，请参见了解您的光谱软件。

打印报告

运行中对组分进行了定性及定量分析，生成报告。

自定义数据分析

使您可以运行自定义的宏来评价分析数据。

保存 GLP 数据

将二进制记录 GLPSave.Reg 随数据分析方法一起保存在缺省的数据文件子目录中。这一功能是为帮助验证数据的原始性和各个分析的质量而设计的。

GLPSave.Reg 二进制文件包含不可编辑的、受校验和保护的记录文件中的以下信息：

2 使用方法

运行方法时将发生什么？

- 主要仪器设置点（可以通过图形方式检查），
- 色谱或电泳谱信号
- 积分结果，
- 定量结果，
- 数据分析方法，以及
- 工作日志。

仅当在运行时选项表中通过选取复选框激活“保存 GLP 数据”功能时，这些数据才会被保存。在 ChemStation 的“数据分析”菜单中只能查看 GLP 数据，但不能对它们进行编辑。

后运行命令或宏

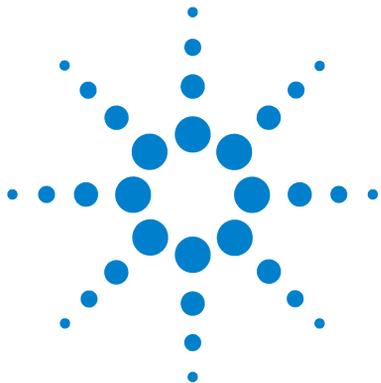
如果指定了后运行命令或宏，则将在数据处理完成后执行该命令或宏，例如，将数据复制到磁盘以进行数据备份。

将方法的副本与数据一起保存

仅当在“运行时选项表”中激活了“将方法与数据一起保存”时，才会在数据采集完成后执行该操作。它会将用于采集的方法复制到数据目录中，名称为 RUN.M。RUN.M 包含 DA 和 ACQ 参数。它是只读的，因此为您提供了一种可以在以后重构分析的方法（即使在这期间该方法已更改）。您可以看到方法中或选定参数中的更改对分析产生的影响，有助于对方法进行优化。

将方法副本作为 DA.M 与数据一起保存（ChemStation 缺省设置）

无论在运行时选项表中标记了哪些项目，都会将已执行方法的副本作为 DA.M 与数据文件中的报告一起保存。当标准数据分析部分完成或在“数据分析”视图中创建报告时，就会执行上述操作。只有在报告设置中至少指定了一个报告目标，才会创建 DA.M。



3 数据采集

什么是数据采集?	48
在线监视器	50
在线信号监视器	50
在线光谱监视器	50
日志	51
状态信息	52
ChemStation 状态	52
状态栏	52
系统视图	52

本章介绍了数据采集过程。



3 数据采集

什么是数据采集？

什么是数据采集？

在数据采集过程中，分析仪器所采集的所有信号都会在检测器中从模拟信号转换为数字信号。数字信号会以电子方式传输到 ChemStation，并存储在信号数据文件中。

路径选择

从化学工作站 B.02.01 开始，您可以利用单次运行和序列的灵活数据存储来指定不同的保存位置，而无需重新配置。使用“视图”菜单的“首选项”对话框中的“路径”选项卡，除了默认路径 C:\chem32\x\DATA（其中 x 是仪器编号）之外，还可以添加多个路径。用“添加”和“删除”按钮可以方便地删除现有路径，您也可以导航选定位置并将新位置的路径添加到“首选项”中。不能从列表中删除默认路径，但可以在“配置编辑器”中更改它。

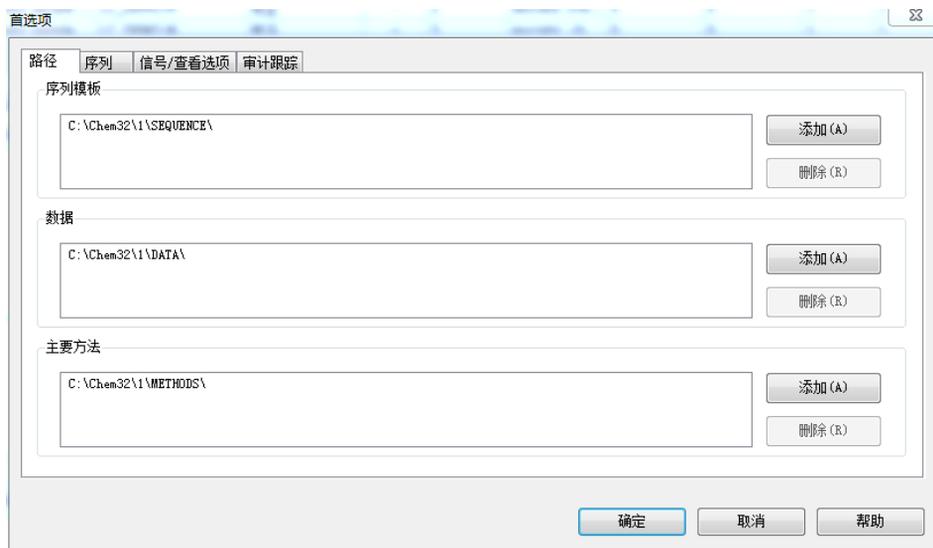


图 6 “首选项”对话框中的“路径”选项卡

然后，在执行运行时，就可以在“样品信息”和“序列参数”对话框中对所有新指定的数据路径进行选择。

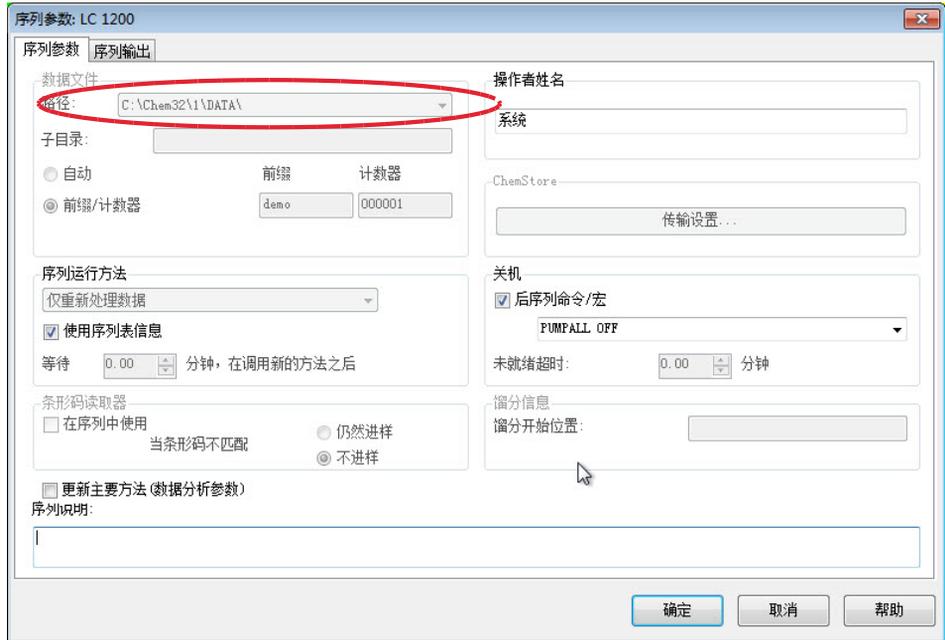


图 7 “序列参数”对话框中的数据路径选择

在线监视器

在线监视器有两种类型，即在线信号监视器和在线光谱监视器。

在线信号监视器

在线信号监视器允许您监视多种信号，如果关联的仪器支持，还将在同一窗口中显示仪器的性能图。您可以很方便地选择要查看的信号，并可调整时间轴和吸收轴。对于支持这种功能的检测器，会有一个平衡按钮。

通过在窗口中移动十字光标，可以在消息行中显示绝对的信号响应值。

在线光谱监视器

在线光谱监视器可显示作为波长的函数的吸收值。您可以调整所显示的波长范围和吸收值刻度。

日志

工作日志显示了由分析系统所生成的消息。这些消息可以是来自模块的错误消息、系统消息或事件消息。不管这些事件是否显示，工作日志都将记录这些事件。要获得有关工作日志中的事件的详细信息，请在相应的行上双击显示说明性的帮助文本。

状态信息

ChemStation 状态

“ChemStation 状态”窗口显示 ChemStation 软件的状态总结。

当单个分析正在运行时：

- “ChemStation 状态”窗口的第一行将显示进行中的运行状态，
- 状态窗口的第二行将显示当前方法的状态，
- 第三行上将显示原始数据文件名与实际运行时间（以分钟为单位）。对于 GC 仪器，该行还将显示前后进样器的文件。

“仪器状态”窗口提供了有关仪器模块及检测器的状态信息。这些信息显示了各组分的状态并在适当时显示当前的状况，例如压力、梯度和流量数据。

状态栏

ChemStation 系统的图形用户界面由“方法和运行控制”视图中的工具栏和状态栏组成。状态栏由系统状态字段和有关当前调用的方法和序列的信息构成。如果调用方法和序列后对其进行了修改，则将用黄色齿轮进行标记。对于适用于 LC 的安捷伦 1100/1200 系列模块，黄色 EMF 符号可以提醒用户某些消耗品（例如灯）的使用已超过设置的使用限制。

系统视图

如果配置的分析仪器（例如，适用于 LC 的安捷伦 1200 Infinity 系列模块或安捷伦 6890 系列 GC）支持，您可以显示 ChemStation 系统的图形系统视图。这使您可以快速检查系统状态。从“方法和运行控制”视图的“视图”菜单中选择“系统视图”项目可以激活系统视图。它是 ChemStation 系统的图形化表示。每个组件均用一个图标来表示，并用下面所述颜色编码显示当前状态。

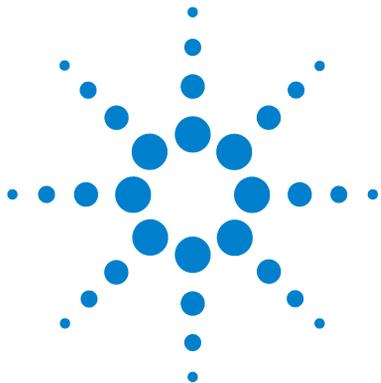
表 6 用于指示模块或仪器状态的颜色

颜色	“ 状态 ”
深灰色	脱机
浅灰色	待机（例如，关闭灯）
黄色	未就绪
绿色	就绪
紫色	前运行，后运行
蓝色	运行
红色	错误

另外，您还可以显示实际参数设置的列表。除了浏览状态外，系统视图还允许快速访问每个系统组件的设置参数的对话框。

有关系统视图的详细信息，请参见在线帮助系统的仪器部分。

3 数据采集 状态信息



4 自动分析 / 序列

什么是自动分析?	57
什么是序列和序列模板?	58
序列参数	59
序列表	60
序列的建立 (序列和序列模板)	61
使用序列表编辑器	61
使用 “插入样品瓶范围” 按钮	61
使用 “追加行” 按钮	61
使用 “自定义字段” 按钮	61
简易序列	62
概述	62
使用 “简易序列” 选项卡 (序列)	63
使用 “简易序列 设置” 选项卡 (模板)	64
使用序列 (序列和序列模板)	66
序列中的数据收集	66
单次运行的数据收集	68
主方法的自动更新	68
优选样品	69
含对照样品的序列分析	69
含空白参考样品的序列分析	70
序列暂停	71
停止序列	71
序列中断	71
部分序列运行	71
创建自我组装的结果集	74
序列日志文件	75
序列运行时会发生什么?	76



4 自动分析 / 序列 状态信息

序列数据文件结构	78
“首选项” - “序列”选项卡	78
专有文件夹创建启用情况下的数据文件结构	81
序列中数据文件的命名	82
序列中的自动数据文件命名	83
手动输入数据文件名	83
结果集迁移	84
后序列操作	86
未就绪超时（仅适用于 LC 及 CE）	86
等待时间（仅适用于 LC 及 CE）	86
自动重新校正	87
重新校正详述	88
序列表中的重新校正参数	88
序列类型	90
简明校准序列	90
循环单级校准序列	90
循环多级校正序列	90
简明及循环混合校正	93
带区间循环的循环校正序列	95
使用含相同浓度的多个标准样品的循环重新校准序列	99

本章介绍了自动分析的概念。它阐述了在 ChemStation 中如何使用序列，运行系列时会发生什么以及如何自定义序列。

什么是自动分析？

自动分析是对多次进样进行自动分析。

ChemStation 软件的序列部分允许用户进行自动采样、数据处理和生成报告。

什么是序列和序列模板？

序列是自动进行样品分析的一系列指令。使用序列可对每个样品自动进样，并可根椐为该样品指定的方法采集和分析数据。序列中的每个样品瓶都可以使用不同的分析方法来进行分析，由此，可使用色谱 / 电泳图谱条件和评价参数的不同设置。

ChemStation 引入了两种数据存储方式，您可以选择适合您工作流程的数据存储方式。这些方式会影响序列的使用：

- “ 专有文件夹创建启用 ”
- “ 专有文件夹创建关闭 ”

为样品数据的一致性采用 “ 专有文件夹创建启用 ”，会将序列用作 “ 序列模板 ”，序列模板可用于多次运行采集；但是，在 “ 数据分析 ” 中序列模板不能用于数据重新处理。运行序列模板时，将创建包含所有相关文件的一个结果集。如果重复使用序列模板，则每次重新使用时都创建一个新的结果集

选择 “ 专有文件夹创建关闭 ” 会将所有数据保存在一个目录中。序列 *.s 文件不用作序列模板，因此，如果用户没有更改数据目录，重新执行序列会覆盖现有数据。

在 ChemStation 资源管理器中可以看见可用的序列 / 序列模板 (*.s)。要快速、轻松地浏览方法，可以使用 “ 首选项 ” 对话框的 “ 路径 ” 选项卡将其他序列 / 序列模板添加到 ChemStation 资源管理器选择树状图中。

序列参数

“序列参数”对话框包含序列中所有样品瓶通用的信息。使用该对话框可以：

- 使用“路径”组合框选择数据目录，并
- 选择特定的“方法和运行”参数部分确定序列如何进行。

例如，您可以选择下列任何一项：

- 执行运行时选项表；
- 只做采集，或
- 仅进行重新处理 - 针对使用 ChemStation B.01.03 版之前的版本采集的数据
- 针对采用选项“专有文件夹创建关闭”采集的数据。

注意

使用 ChemStation B.01.03 版及以前的版本采集，或者使用选项“专有文件夹创建开启”采集的序列数据，需要使用“方法和运行控制”视图中的“重新处理”选项进行重新处理。

使用 ChemStation B.02.01 版和更高版本采集的序列数据，需要使用“数据分析浏览表”中的“重新处理”选项进行重新处理。

如果选择了“重新处理”选项，用户可以选择使用样品开始分析时设定的样品数据，或通过激活“使用序列表信息”复选框，在序列表中输入新的数据来使用更新后的样品数据：

- 指定使用“关闭”参数设定序列完成后会发生的情况，
- 设定序列中是否使用条形码，以假定系统已装有条形码读取器时，如何处理条形码不匹配的情况。

序列表

序列表决定使用何种方法分析样品瓶，并将要分析的样品瓶排序。该表也包含每种样品的信息，如样品名，定量参数及重新校正参数等。

进样器组框可用于支持双进样的仪器 (GC)，选择“前”或“后”将显示序列表中的行以及进样器目前的运行状态。

关于本表中各项的详细说明及保存在方法中的信息是如何相互影响的，请参阅帮助部分。

序列的建立（序列和序列模板）

使用序列表确定样品，方法及样品瓶在序列中的运行。序列表列出序列中每一样品运行的次序，所用瓶号，方法及校准信息等。

使用序列表编辑器

如果要更改序列表的视图和内容，可以单击序列表右下角的“配置表”打开序列表编辑器。序列表编辑器将打开并允许您指定是否显示序列表中的某一列。此外，还可以定义每个序列表的列宽。根据所安装的软件包，还将添加其他列字段。例如，如果安装了 LC/MS，将添加“目标质量”字段。

使用“插入样品瓶范围”按钮

如果用同一方法分析许多样品，请用插入样品瓶范围功能将这些样品快速输入到序列表中，该功能可以复制方法名称、样品瓶范围和每个样品瓶进样次数，如果需要确定样品量、内标含量、乘积因子和稀释因子，也使用此功能。然后系统将该范围内的各样品瓶信息输入到序列表中。

使用“追加行”按钮

要想在序列表末尾添加新的空白行，请选择“追加行”按钮。

使用“自定义字段”按钮

如果已在序列表所使用的方法中设置自定义字段，请选择“自定义字段”按钮，以便编辑各样品（样品相关自定义字段）或样品方法中各化合物（化合物相关自定义字段）的自定义字段值。

简易序列

概述

“简易序列”是一个用于快捷地从模板中设置序列的用户界面。模板指定用户应当查看或编辑的参数。校正设置显示序列概览，它具有易于使用的拖放界面，用于指定校正类型和样品位置。借助“简易序列”，可以将多个序列提交到要在数据系统上运行的运行队列中。

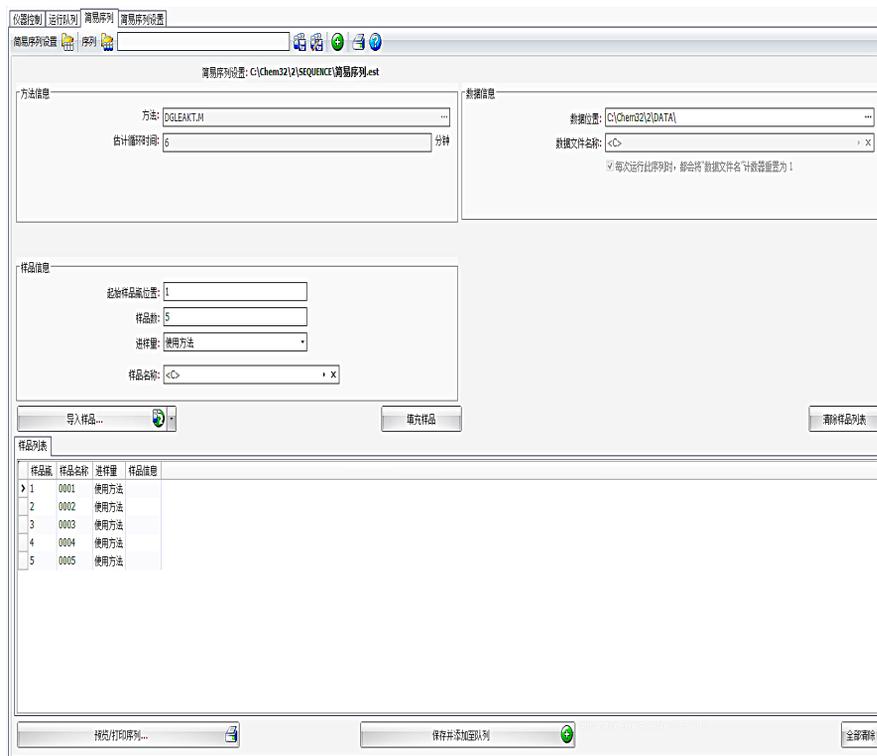


图 8 “简易序列”选项卡

使用 “ 简易序列 ” 选项卡 （序列）

“ 简易序列 ” 选项卡用于根据在 “ 简易序列 ” 设置中创建的模板来创建序列。也可以导入另存为 CSV 格式的样品。

定义序列

- 1 从 “ 简易序列 ” 选项卡，通过单击 “ 打开轻松设置序列 ” 图标来打开模板。
- 2 若有必要，请进行更新。更新可以包括样品瓶位置、循环样品瓶位置、数据或序列位置。可用于编辑的参数取决于模板配置。
- 3 如果预填充的样品与新样品位置不匹配，请单击 “ 填充样品 ” 重新填充表。
- 4 单击 “ 预览 / 打印序列 ... ” 预览序列
- 5 保存序列。

注記

只要序列在队列中的状态为 “ 等待 ”，均可对其进行编辑。

- 6 单击 “ 保存并添加到队列 ” 将序列提交到序列队列。

导入样品数据

样品数据集可以导入到 “ 简易序列设置 ”。导入样品前，必须正确设置并格式化 CSV 文件。有关如何创建 CSV 样品数据文件的更多信息，请参考在线帮助。

- 1 从 “ 简易序列 ” 选项卡，通过单击 “ 调用简易序列 ” 按钮来打开模板。
- 2 单击 “ 导入样品 ... ”
- 3 选择要导入的 CSV 文件。
所有有效字段均已导入。

注意

要将样品数据导入到 “ 后样品列表 ”，请确保选中并显示 “ 后样品列表 ”，然后再按 “ 导入样品 ” 按钮。

- 4 检查样品列表来验证字段。

使用 “ 简易序列 设置 ” 选项卡 （模板）

“ 简易序列 设置 ” 用于创建作为序列创建基础的模板。有两个面板：样品和校正。“ 样品 ” 面板指定方法、样品、数据和序列信息。模板也用于指定隐藏的或只读的参数。“ 校正 ” 面板提供配置和查看校正运行的图形界面。它具有易于拖放的界面，用于指定校正类型（循环校正和区间循环校正）和样品位置。

创建 “ 简易序列 ” 模板：

- 1 从 “ 简易序列 设置 ” 选项卡，选择 “ 样品 ” 面板。打开现有模板或新建模板。
- 2 选择 “ 方法 ”。如果方法的进样源为 “ 两个 ”，将显示双进样选项。后信号可以指定有后分析方法。方法是模板唯一必需的参数。
- 3 根据需要输入样品运行的估计持续时间（分钟）。此时间等于从一个样品开始运行到下一个样品开始运行的时间。此参数用于估计序列的总预期持续时间。如果您不想使用 “ 估计循环时间 ” 功能，请将此字段留空。
- 4 指定 “ 开始样品瓶位置 ”、“ 样品数量 ” 和 “ 样品名称 ”。
- 5 选择 “ 数据位置 ”
- 6 选择 “ 序列位置 ” 并指定 “ 序列名称 ”。
- 7 为模板输入任何注释。
- 8 指定哪些参数为隐藏或只读的。输入 “ 进样 / 样品瓶 ”、“ 样品量 ”、“ 内标量 ” 和 “ 进样量 ” 等的默认值。这有助于最大程度地降低在 “ 简易序列 ” 选项卡中创建序列时的出错几率。
- 9 保存模板。

定义校正：

模板中所用的方法应已校正到所需级别。

- 1 从 “ 简易序列 设置 ” 选项卡，选择 “ 校正 ” 面板
- 2 从 “ 校正模式 ” 下拉列表中选择 “ 循环 ”、“ 区间循环 ” 或 “ 简单校正 ”。
- 3 “ 序列视图 ” 包含以下几部分：
 - “ 序列开始 ”

- “ 区间循环 / 循环 ”
 - “ 样品 / 进样 ”
 - “ 序列结束 ”
- 4 在序列的 “ 样品 ” 区域，根据样品量或进样量设置 “ 校正间隔 ”。
 - 5 将图标从 “ 样品类型 ” 区域拖动到 “ 序列视图 ” 部分，以此设置 “ 样品类型 ”、“ 空白 ”、“ 调谐液 ” 或 “ 质控样品 ”。
 - 6 设置每个样品类型的参数，并设置为 “ 隐藏 ” 或 “ 只读 ”。
 - 7 在 “ 简易序列 ” 概览中验证校正模式。
 - 8 保存模板。

使用序列（序列和序列模板）

通过“序列”菜单访问和建立序列（序列和序列模板）。可以使用与创建和保存方法相同的方式来创建和保存序列。保存序列时，将创建一个扩展名为 .S 的文件。如果要再次编辑或使用该序列，例如，您可以通过使用“序列”菜单中的“调用序列”项来访问该序列。

序列中的数据采集

为了运行序列，必须有适当的预定义方法。这些方法就是以上所述的主方法。主方法和序列模板通常在 ChemStation 的“方法和运行控制”视图中使用。因此，在“方法和运行控制”视图中，可通过 ChemStation 资源管理器访问主方法和序列模板。

序列模板会在序列表中引用这些方法。

就像前面解释过的，用序列模板 <sequence_name>.S 运行序列并使用主方法 <method_name>.M 时，将创建一个新文件夹（“结果集”），其中包含序列运行所生成的所有文件。

该文件夹的位置由“序列参数”对话框中的设置确定；该文件夹的命名由“首选项”对话框的“序列”选项卡确定。缺省情况下，名称为 <SeqName> <Date> <Time>，但是可以使用令牌配置，也可以手动输入任何名称。有关使用令牌的详细信息，请参阅“第 13 页的文件名和令牌”。可以使用以下令牌：

- “当前日期”
- “当前时间”
- “用户名”
- “仪器名称”
- “序列名称”
- “计数器”
- “计算机名”

如果“名称模式”没有为结果集生成具有唯一性的名称，ChemStation 将附加上一个计数，以确保其唯一性。

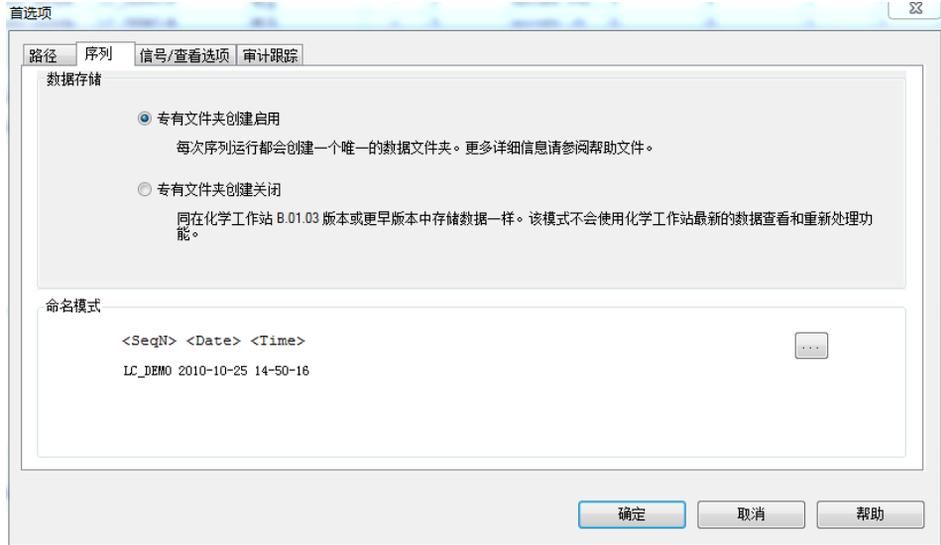


图 9 “首选项”对话框 / “序列”选项卡

采集序列开始时，将从主方法文件夹把序列表中指定的方法复制到结果集中。此外将创建该序列的一个副本，和序列日志、批处理 (*.b) 文件一起放在结果集中。所有方法更新（例如，校正表的更新）都将写入结果集中的该序列方法。如果使用智能报告，您在“序列参数”或“方法属性”中选择的报告模板也会复制到结果集中。此时，所有必需文件都可用于将来数据查看和数据重新处理，而不受其他序列运行时对主方法或序列模板所作更改的影响。

采集期间，数据文件将存储到结果集中。在每个数据文件 (*.D) 内，会为这次特定运行保存序列方法的副本。文件 ACQ.txt 包含序列方法的采集参数，保存了采集特定数据文件时方法的状态。文件夹 DA.M 包含序列方法中使用的数据分析参数的副本。

如果序列文件夹中保存了这些文件，则可以在不改变主方法或序列模板的情况下执行数据查看和数据重新处理操作。如果需要，也可以将方法更改再次保存到主方法中。

注意

结果集必须总是包含所有数据文件的完整集合 (*.D)。如果删除了部分数据文件，将结果集上传到中央数据存储将会导致问题。如果需要缩短序列，从缩减的序列行集创建自我组装的结果集（请参阅“第 74 页的创建自我组装的结果集”）。

单次运行的数据采集

对于单次运行，数据文件直接保存到各自的子目录中。因为一个单次运行只使用一个方法，该方法无需复制到子目录中；所有操作都将直接用主方法来执行。完成方法的采集部分之后，采集参数的副本将保存到文件 ACQ.txt 中。执行主方法的数据分析部分之后，数据分析参数的副本保存到数据文件目录 (DA.M) 中。

主方法的自动更新

借助此功能，ChemStation 自动更新您复制到结果集中的主方法的数据分析参数。例如，在通过重新校正重新处理序列后，可以使用此功能更新主方法的校正表。

可以在“**序列参数**”对话框（参加下图）中激活此功能。在采集期间，ChemStation 更新结果集中所有序列方法的主方法的数据分析参数。

在重新处理序列后，主方法的数据分析参数也会更新。前提条件是主方法仍存在于主方法目录中（主方法必须与序列方法的名称相同）。

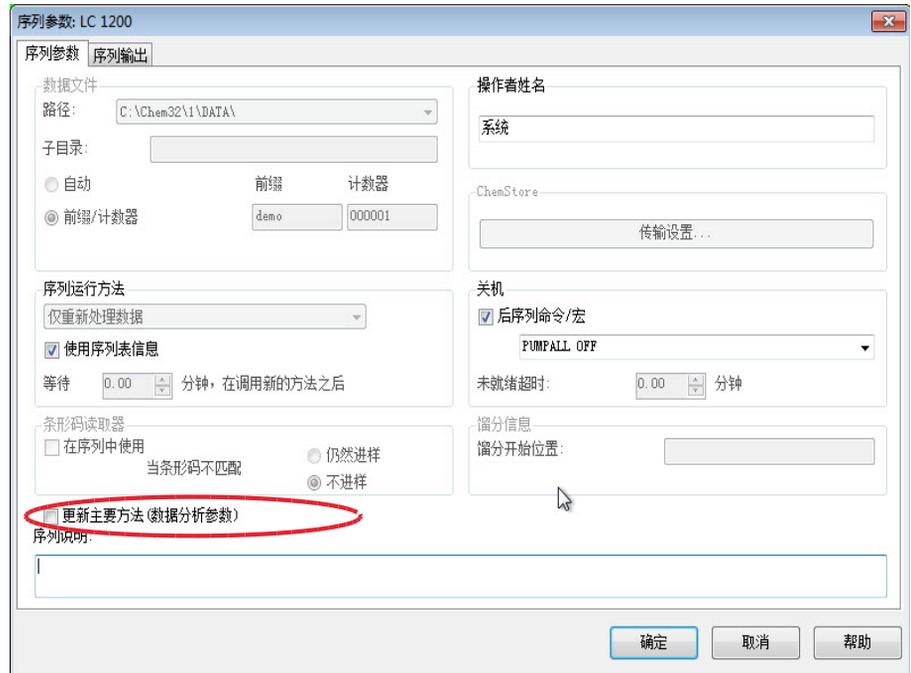


图 10 “序列参数”对话框中的“更新主方法”选项

注意

由于此功能会降低性能，因此如果您的序列包含成百上千个方法，则不建议使用此功能。

优选样品

在当前方法完成后，可将运行中的序列暂停，序列暂停后，可使用同样方法或其他方法来分析需优先分析的样品，需优先分析的样品分析完毕后，仍可从暂停处开始继续分析。

含对照样品的序列分析

可以在序列表的“样品类型”字段中指定对照样品。用于分析对照样品的方法必须包含校正表，该表说明了化合物中某一对照样品的范围。如果超出了您指定

4 自动分析 / 序列

使用序列（序列和序列模板）

的质控样品限值，序列将停止并在工作日志中写入一条消息。如果您使用的是 ChemStation 报告格式之一，则质控样品限值还将打印在为这些分析生成的报告上。有关如何确定包含对照样品的序列的详细信息，请参见联机帮助的“方法”部分。

含空白参考样品的序列分析

《欧洲药典》规定必须使用参比信号来评估信噪比。您可以为相应的样品选择“空白”样品类型，以在序列表中指定参考数据文件。

如果使用多个参考文件，这些文件的顺序极为重要。ChemStation 使用一个参考文件进行所有的连续运行，直到在序列表中指定了新参考文件。空白样品的参考文件充当其自身的参考。下面的概述显示包含两个空白样品的序列示例：

表 7 包含空白样品的序列示例

	样品	数据文件	参考文件
1	Sample1	DF01.D	
2	Blank1	DF02.D	DF02.D
3	Sample2	DF03.D	DF02.D
4	Sample3	DF04.D	DF02.D
5	Blank2	DF05.D	DF05.D
6	Sample4	DF06.D	DF05.D
7	Sample5	DF07.D	DF05.D

请参阅《参考指南》以了解关于信噪比计算的详细信息。

序列暂停

在序列暂停前将完成当前活动的运行，

序列分析暂停时，不可更改序列表文件名及数据文件名。在序列表中，您只能更改未执行的序列行，或当前序列行中的瓶号，您可以添加、删除和更改用于今后分析的序列行。

例如，为了增加一批新的样品，可能需要对运行中的序列进行编辑。您可以将此样品编入序列中，当 ChemStation 处理完当前运行的序列行中的样品后，即会对此样品进行处理。

停止序列

当前活动的运行将立即终止。但是，仍将为此次运行执行数据分析。序列停止后不能恢复。

如果要在停止序列之前完成当前运行，请暂停序列，等待运行完成，然后停止序列。

序列中断

中断功能可立即停止当前分析。不执行数据分析。

部分序列运行

部分采集的结果集选择

如果使用“专有文件夹创建启用”（请参阅“第 78 页的“首选项”-“序列”选项卡”），则可以从下列部分序列采集选项中进行选择：

- 将部分序列采集到新的结果集中

或

- 将部分序列采集到已有结果集中。

从部分序列执行将数据采集到已有结果集中，在以下场合可能有用：

4 自动分析 / 序列

使用序列（序列和序列模板）

- 必须覆盖一个数据文件（或若干数据文件），例如因为第一个位置使用了错误的样品瓶。
- 第一个位置只执行了序列的第一部分，必须通过执行部分序列来添加缺少的样品。序列采集期间发生仪器故障时，可能会出现这种情况。
- 采集已有行后，向序列模板添加了其他的行。其他的运行将添加到已有数据中。

因此，当您从“序列”菜单中选择“部分序列”时，将出现一个对话框，其中提供了从列表选择现有结果集还是创建新结果集的选项。

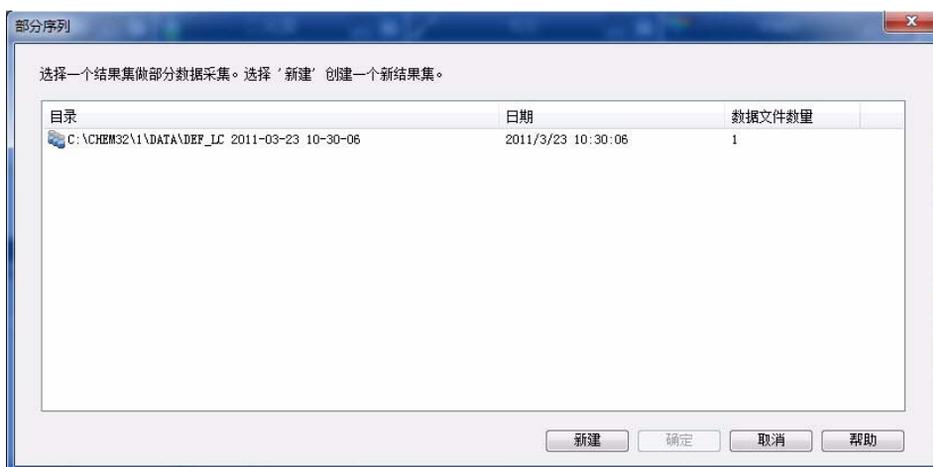


图 11 “部分序列”对话框

但是，为了保持结果集的一致性（这样就可以在“数据分析”中对其进行完全的数据重新处理），只提供了那些满足某些条件的结果集，以供部分采集之用：

- 序列模板（源序列）的名称和结果集（目标序列）中序列 *.S 文件的名称相同。
- 对序列文件而言，数据路径和子目录都必须相同。
- 源序列中的序列行数必须等于或多于目标序列中的序列行数。
- 对目标序列中的每一行，样品类型和进样次数必须等于源序列的对应行中的值。
- 对两个序列文件，数据文件命名方案必须相同。

单击“确定”（用于选择一个现有结果集）或“新建”（用于创建一个新的结果集）退出该对话框后，您可选择要在部分序列过程中执行的序列行。

部分序列采集的序列行选择

系统将显示“部分序列”对话框，用户可从表中选择所需样品进行分析。此对话框的打开与“专有文件夹创建”设置无关。

“部分序列”对话框的一行代表一次运行。每次运行中，需给出瓶号、方法、数据文件及样品名等。另外，有关序列表的编码信息及所有校正样品均显示在 Seq Tbl 及 Calib:RF:RT 列中。有关这些代码的说明，请参见在线帮助。

选择“打印”按键可打印部分序列。

通过“为选择的运行进行自动更新”选项，可以用对应的主方法来更新选定运行中使用的所有序列方法。

通过“手动更新...”可打开“更新方法”对话框，您可以在该对话框中手动同步主方法与序列模板中使用的方法。

例如，“部分序列”对话框可能类似如下所示。您可以标记特定样品以进行处理。

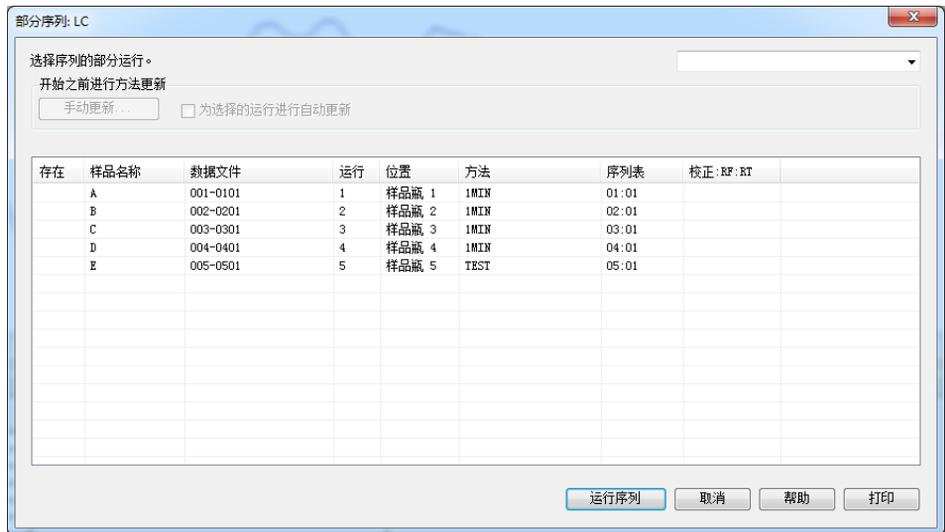


图 12 “部分序列”对话框

创建自我组装的结果集

使用“数据分析”视图中的“序列” > “创建新结果集”命令，您可以从导航表中目前显示的数据创建新的自我组装的结果集。自我组装的结果集在下面列举的情形中很有用：

- 您要组合单个样品、序列或两者的组合，以使用指定的方法重新处理它们。
- 您要缩短序列。

组装新结果集

- 1 将所需的数据文件添加到导航表中。
- 2 在导航表中，选择要在新结果集中包含的所有数据文件。
- 3 选择“序列” > “创建新结果集”以打开“创建新结果集”对话框。
- 4 选择要与新结果集关联的方法。
- 5 为新结果集指定文件夹。
- 6 对样品进行排序。

输出数据文件的名称自动更新。如果需要，可以使用  (“恢复初始顺序”) 按钮恢复样品的初始顺序。

请注意，空白文件的位置与《欧洲药典》中定义的信噪比的评估相关。另请参见“第 70 页的含空白参考样品的序列分析”。

- 7 确认设置以将数据文件列表组装到指定文件夹的结果集中。

序列日志文件

序列日志文件用于显示序列运行中所发生的各种情况。如果序列是在无值守的情况下运行或在夜间运行，识别错误发生的时间将非常有用。工作日志文件名一律使用 .log 作为扩展名。工作日志文件位于保存序列数据的目录中。

序列运行时会发生什么？

用 “ 专有文件夹创建启用 ” 启动序列

系统将根据序列参数中的路径定义和序列首选项设置来创建一个结果集。序列模板 *.s、属于该特定序列的序列表中定义的所有方法都将复制到结果集。如果使用智能报告，方法或序列模板中定义的所有报告模板 *.rdl 也会复制到结果集中。采集期间系统将继续使用这些文件。启动序列时，相应序列行的方法将从此结果集调用到化学工作站中。

用 “ 专有文件夹创建关闭 ” 启动序列

启动序列时，系统将调用序列 *.s 文件，根据序列表中的条目将相应的序列行方法调用到化学工作站中。和第二种数据存储模式 “ 专有文件夹创建启用 ” 相比，它不会创建结果集。序列和方法将保留在其主目录中。

执行序列期间接下来执行的步骤：

对执行的每个序列行都将重复以下步骤：

- 如果装有自动进样器，ChemStation 软件首先根据瓶列中输入的编号将样品装入自动进样器中。
- 将使用方法参数调用仪器。
- 执行预运行宏。
- 进样（自动或手动）。
- 此数据是必需的。
- 运行方法数据评估，积分、定量及报告结果，以及所有用户指定的宏。使用 “ 专有文件夹创建启用 ” 模式时，系统在运行中将多保存一个方法：DA.M。
- 执行后运行宏。
- 在整个过程中，ChemStation 会实时跟踪序列的进度，并生成一个序列日志文件。

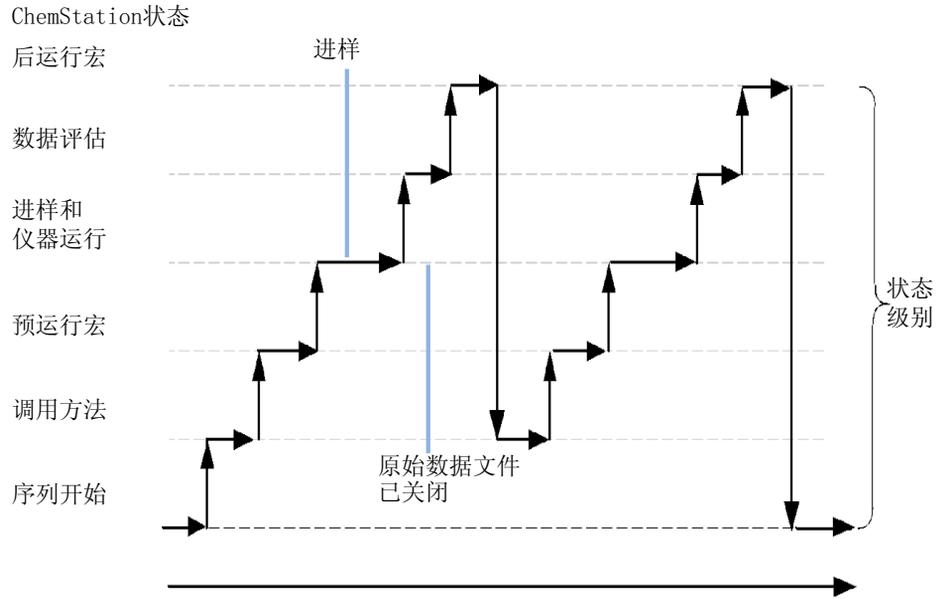


图 13 序列状态

序列数据文件结构

“首选项” – “序列” 选项卡

在在线会话中的“序列”选项卡上，用户可选择两种不同的数据存储模式。这些模式定义了如何在 ChemStation 中存储序列数据。

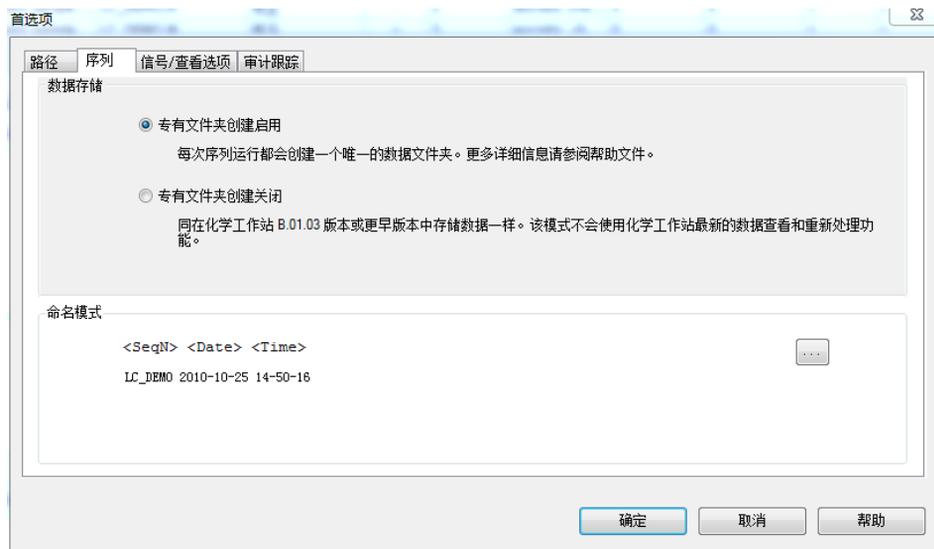


图 14 “首选项”对话框 / “序列”选项卡

注意

在“专有文件夹创建启用”和“专有文件夹创建关闭”之间切换只影响将来的采集，但不会改变已采集数据的数据组织。

注意

强烈建议您开始工作时就决定使用何种模式，不要在两者之间切换。如果 ChemStation 连接到中央数据存储系统，则不能切换到“专有文件夹创建关闭”。

专有文件夹创建启用

在这种数据存储模式中，在原始数据和方法之间有健全而永久的链接。每个数据文件（无论是在序列中采集的，还是作为单次运行采集）均具有一个指向用于数据分析的方法的链接。

序列数据存储在有唯一结果集名称的结果集中。您可以在“**首选项**”对话框的“**序列**”选项卡中指定这些结果集的命名规则（名称模式）。如果不指定名称模式，则使用默认的序列名称模式。“**序列**”选项卡只能用于数据采集，因此仅用于在线系统。

序列名称模式可以包含不同的部分。系统为结果集创建名称，该名称根据您选择的序列名称模式部分而定。所有属于这个特定序列的数据文件、方法、序列工作日志、<sequence_name>.s 文件以及 <sequence_name>.b 文件均存储在该结果集中。该结果集将在启动该序列时创建。

序列 (*.s) 文件可以用作序列模板，此概念允许您多次运行任意序列文件，而无需覆盖现有数据或更改序列参数。如果序列名称模式中既没有使用计数器，也没有使用时间，则系统将自动引入一个计数器，以避免覆盖数据。对于第二个、第三个及以后所有使用同一序列模板的序列，将在结果集名称中添加计数器。

专有文件夹创建关闭

在这种数据存储模式中，方法名称是数据文件和用于采集、处理它的方法之间的唯一链接。不会有方法副本和序列或数据文件一起保存；如果更改了方法或者用该方法的名称创建了新方法，则该序列将无法精确复制。序列数据文件根据“**序列参数**”对话框的“数据文件”组中指定的参数存储；该模式中禁用“**首选项**”对话框“**序列**”选项卡中的序列命名工具。该数据存储模式与 ChemStation B.02.01 版之前的数据存储模式相同，因此无法充分利用 ChemStation “**数据分析**”视图中的最新的数据浏览 / 数据重新处理功能。

注意

用“**专有文件夹创建关闭**”选项采集的序列数据必须用“**方法和运行控制**”视图中的重新处理选项进行重新处理。

注意

如果结合使用 ChemStation 与中央数据存储，必须启用首选项模式“**专有文件夹创建**”。使用中央数据存储时，禁用“**专有文件夹创建关闭**”选项。

选择“**专有文件夹创建关闭**”对数据存储有以下影响：

4 自动分析 / 序列

序列数据文件结构

- 序列数据不会采集到结果集中，而是直接进入“序列参数”中指定的子目录（请参阅“第 59 页的序列参数”）。因此，序列命名模式在“首选项”对话框的“序列”选项卡上呈灰色显示。
- 这意味着两次或更多次序列采集的数据可能会采集到同一子目录中。
- 序列方法 (.M) 或序列文件的副本 (.S) 不会随数据保存，只会保存序列日志文件和批处理文件 (.B)。这意味着只有“首选项”对话框（请参阅“第 48 页的路径选择”）指定路径中的方法和序列可用。它们必须同时用于采集、数据浏览和数据重新处理。对于特定于序列或数据文件的方法更改，只能通过用不同名称保存方法来存储。否则，这些更改也会应用到采集方法。
- 当“专有文件夹创建关闭”情况下采集的序列加载到导航表中时，“数据分析”视图中的重新处理模式不可用（“第 80 页的图 15”）。“专有文件夹创建关闭”情况下采集的序列只能用“序列参数”中的“仅重新处理”选项在“方法和运行控制”视图进行重新处理（“第 81 页的图 16”）。



行	重叠	进样	量	样品名称	样品类型	校正级别	样品信息	ISTD 含量	样品量
1			1.5	Isocratic Std. 1	校正	1		0	0
2			1.5	Isocratic Std. 1	校正	1		0	0
3			1.5	Isocratic Std. 1	质控样品			0	0
4			1.6	Isocratic Std. 2	样品			0	0
5			1.7	Isocratic Std. 3	样品			0	0

图 15 “专有文件夹创建”关闭情况下采集的序列的导航表

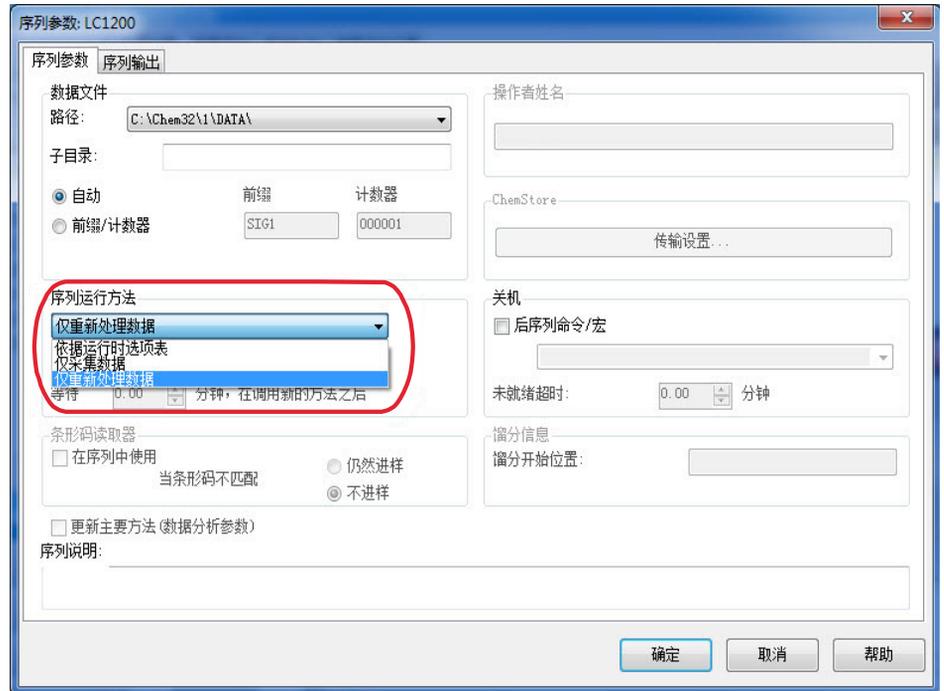


图 16 对在“专有文件夹创建”关闭情况下采集的序列数据进行的数据重新处理

专有文件夹创建启用情况下的数据文件结构

在原始数据与方法之间有一个强大的链接，如下图所示。

4 自动分析 / 序列

序列数据文件结构

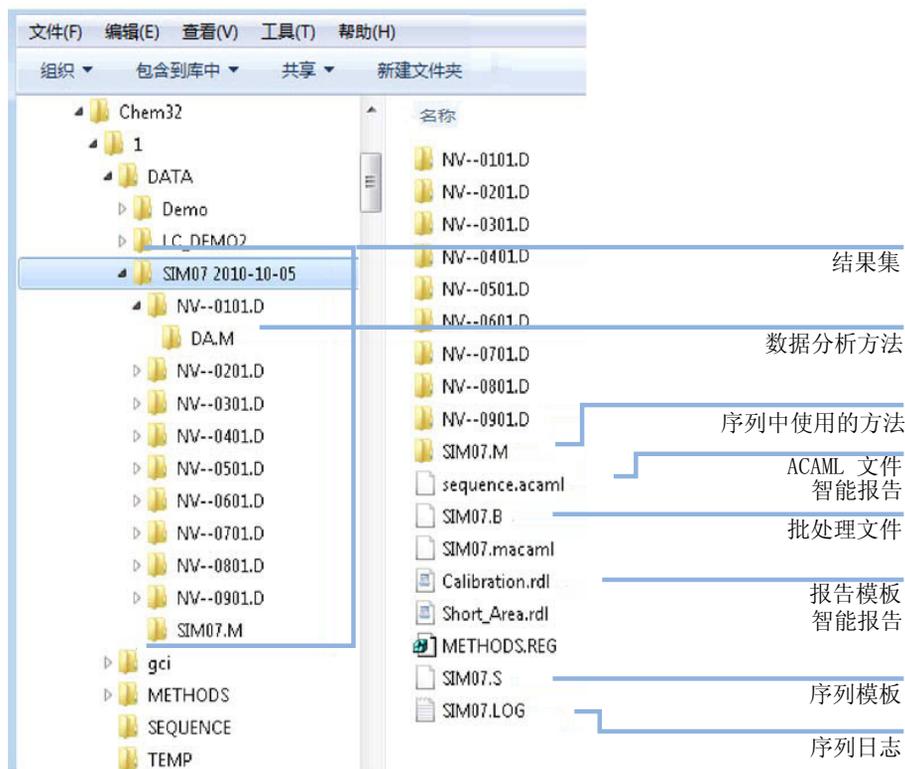


图 17 序列数据文件结构（专有文件夹创建启用）

注意

结果集必须总是包含所有数据文件的完整集合 (*.D)。如果删除了部分数据文件，将结果集上传到中央数据存储将会导致问题。如果需要缩短序列，从缩减的序列行集创建自我组装的结果集（请参阅“第 74 页的创建自我组装的结果集”）。

序列中数据文件的命名

下列方法可用于序列中数据文件的命名：

- 自动，
- 手动，或
- 前缀 / 计数器。

序列中的自动数据文件命名

样品瓶

例如，017-0103.D

其中：

- 前三个数字为瓶号，如，017。
- 液相色谱及毛细管电泳中，第四个数字是一个分隔用的连字符（-）；在气相色谱中，第四个数字为 F（前面）或 B（后面）。
- 第五和第六个数字表示序列行，用于定义所使用的方法，例如，01 表示第一个序列行。
- 第七和第八个数字表示由方法确定的该瓶的进样号，例如，03 表示第三个进样。

空白运行

例如，NV--0499.D

其中：

- NV 表示无瓶。
- - 为分隔连字符。
- 0499 为序列行 4 的第 99 次空运行。

手动输入数据文件名

序列表中有一列名为“数据文件”。当不包含内容时，使用序列参数中指定的数据文件命名方案（自动或前缀 - 计数器）来创建数据文件名。如果在“数据文件”列中输入了任何文本，ChemStation 就会将此文本作为运行的数据文件名。

如果在具有手动数据文件名的行中为每个样品瓶指定了多次进样，ChemStation 将自动截断用户输入的文件名后面的字符，然后附加进样号。这样可防止多次进样中反复使用同一个文件名。

使用前缀 / 计数器命名数据文件

如果使用前缀 / 计数器来命名数据文件，ChemStation 将为每次分析生成一个名称。对于支持双信号分析的仪器（例如 GC），ChemStation 将为每个信号生成一个名称。

序列设置程序允许对前缀 / 计数器使用长文件名。由前缀 / 计数器定义的数据文件名最多可以包含十五个字符，加上 .d 扩展名，总共可以包含十七个字符。

以下规则适用于前缀 / 计数器字段：

- 计数器本身最多可包含 6 个字符
- 如果前缀提供的字符少于九个，计数器将自动扩展到 6 位数
- 计数器中给定的数值是要进行增量的初始数

表 8 文件名

前缀	计数器	文件名中的结果
long	000001	long000001
longname	000001	longname000001
testwithalongna	1	testwithalongna1

结果集迁移

ChemStation 提供了将非结果集数据迁移为结果集格式的工具。要成功执行这一任务，需要原始序列文件仍处于可用状态。其必须包含所有必需的序列行，并遵循原始数据文件命名方案，才能对序列的所有数据文件进行数据重新处理。此外，序列表“方法”列中的所有方法都必须可用。

执行迁移，

从“数据分析”视图的“序列”菜单中启动“结果集迁移”。



图 18 结果集迁移

填写以下必填字段：

“**选择序列模板**”：选择包含与要迁移的数据集匹配的序列文件的序列文件 (*.S)。

“**选择方法路径**”：选择序列表要引用的方法所在的目录。

“**选择数据源**”：选择包含要迁移的数据文件的目录。

“**选择目标目录**”：指定要创建的结果集的路径和名称。可以选择现有文件夹，也可以创建新文件夹。

填写了所有字段后，就可以启动迁移了。

将执行以下步骤：

- 创建结果集目录。
- 序列模板将会复制到结果集。该序列模板还将转换为能在“**数据分析**”视图中对数据文件进行数据重新处理的状态。
- 序列表所引用的方法会从指定的方法路径复制到结果集文件夹中。
- 数据文件、序列日志和批处理文件会从数据源目录复制到目标目录中。
- 根据序列表中的信息，对应方法的副本作为 DA.M 复制到每个数据文件中。

结果集迁移完成后，会在“**信息和警告**”字段中显示成功消息。否则，警告消息会显示迁移期间的所有问题。您可以通过双击警告消息来获得警告的详细信息。

后序列操作

您可以指定，如果序列完成正常执行过程或 ChemStation 在序列运行期间遇到错误，将执行何种操作。若要对 LC 操作进行指定，请激活“序列参数”对话框中的“序列运行后命令 / 宏”复选框并作出如下选择之一：

- 将系统设置为在泵和灯关闭时进入 STANDBY 状态。
- 将系统设置为在所有灯都关闭时进入 LAMPOFF 状态（仅适用于 LC 和 CE）。
- 将系统设置为在所有泵都关闭时进入 PUMPOFF 状态（仅适用于 LC 和 CE）。
- 使用缺省的 SHUTDOWN 宏或修改 SHUTDOWN.MAC 以确定具体操作。

例如，您可能需要在序列完成后关闭系统。使用其他关闭宏，可将流量设置为零或者慢慢减少流量。

在“序列参数”中，通过将自定义宏名称添加到“序列运行后命令 / 宏”字段并选中该框，可指定要运行的自定义宏。

未就绪超时（仅适用于 LC 及 CE）

“序列参数”中的“未就绪超时”是指系统等待仪器准备就绪的时间长度，超过该时间后系统将关闭。

等待时间（仅适用于 LC 及 CE）

“序列参数”允许用户指定调用方法后到使用该方法进样前的静置时间。在使用新的分析条件时，该时间用于层析柱 / 毛细管的重新平衡。

自动重新校正

当运行条件发生变化时，通常需要进行校正，例如，在更改色谱柱或毛细管后。自动重新校正通常在一系列分析工作开始时进行，或者在序列分析过程中的某一时刻进行，以补偿影响分析性能的因素。

有两种自动序列重新校正：

- 简明校正序列，或
- 循环校正序列。

使用首选项模式“专有文件夹创建启用”的重新校正

执行重新校准时，所用方法的校准表将根据定义的方法设置更新。如果用数据存储模式“专有文件夹创建启用”，则重新校正的方法在结果集中可用。序列方法的校准表将在这一过程中更新。此外，单个数据文件的 DA.M 方法包含用于创建结果的已更新校准。

使用首选项模式“专有文件夹创建禁用”的重新校正

执行重新校准时，所用方法的校准表将根据定义的方法设置更新。如果用数据存储模式“专有文件夹创建禁用”，则主方法的校正表将在重新校正时更新。

重新校正详述

序列的重新校正参数将直接输入到序列表中。这些参数确定方法是怎样被重新校准的。

序列表中的重新校正参数

响应因子及保留 / 迁移时间可用多种方法更新。对校准表进行重新校准时，将在数据分析中使用校准级别、更新响应因子及更新保留 / 迁移时间等指令。

当在样品表的“样品类型”列中输入“校准”时，下列各栏也就可以编辑了：

- 校准级别
- 更新保留时间
- 更新响应因子
- 间隔

此表显示了可输入到各列中的值。

表 9 序列表中的重新校准参数

校准级别	更新保留时间	更新响应因子	间隔
校准表级数 (1-999)	不更新	不更新	循环重新校准间隔数 (1-999)
	平均	平均	空白样品
	替换	替换	
		区间循环校准	
		偏差 %	

该表显示了序列表中包含重新校准参数及可输入值的各列。

不更新

不改变响应因子或保留 / 迁移时间。

替换

用当前值取代原来的保留 / 迁移时间或响应因子（面积或峰高）。对于重新校准中未发现的峰，响应因子不变。

平均

基于原有校准运行将各峰的保留 / 迁移时间及响应因子（峰面积或峰高）值平均，并对所有平均值进行再校准。如果在其中一次重新校准中有峰丢失，该峰的平均响应因子也不会受到影响。

区间循环校准

样品通过进样前校准和进样后校准来进行区间循环校准。当后区间循环校准的最后一个标样运行之后，将进行评估。即进行数据处理，所得校准数据将取代原有数据。将后区间循环校准的校准数据平均后填入校准表。

间隔

间隔决定序列的校准频率。校准频率决定下一个标样进样前的进样次数。分析开始时，将进行一次校准并将结果（响应因子）输入到校准表中。这些结果将用于后续的定量计算。在完成规定进样次数后，将再做校准，并将结果输入校准表，以取代原有结果。

偏差 %

偏差 % 计算方法使您可以将分析时得到的响应因子与手动输入到校正表的响应因子进行对比。然后对表中的所有校正峰应用偏差 % 方法。您可以识别几个内标，它们的实测响应因子将用于计算其他峰的新响应因子。您可以确定用来对校正表中每个峰进行偏差 % 计算的内标。

序列类型

以下是序列类型：

- 简明校正序列，
- 简名单级校正序列，
- 循环多级校正序列，
- 在序列中简明及循环混合校正，以及
- 区间循环校正序列。

简明校准序列

该类校准按用户在序列表中设定的间隔数来进行重新校准。

在简明校准序列中，标准样品输入到序列时，并不将间隔数输入到校准表中。系统将对序列表中的每个校正样品条目进行一次重新校准。

循环单级校准序列

该序列类型在序列中，以固定间隔使用同瓶标准样品。

序列表中输入的间隔数决定了怎样做重新校准，例如，间隔值为 2 表示在序列中每隔两个样品正进行一次重新校准。

循环多级校正序列

这种类型用不同标准样品来对多级校正方法进行重新校正。

下面这个例子介绍了使用由方法 A 和方法 B 构成的双方法序列来分析两组样品。两种方法均为多级校正方法，它们将根据规定的间隔自动进行重新校正。

针对每种方法，序列表均包含三个条目：

- 两个校正级别：
 - 序列行 1 和序列行 2 使用方法 A。
 - 序列行 8 和序列行 9 使用方法 B。
- 样品的五个条目：
 - 序列行 3 至序列行 7 使用方法 A。
 - 序列行 10 至序列行 14 使用方法 B。

校正由序列重新校正表中的重新校正间隔条目以固定间隔指定。

- 每隔两个样品后以方法 A 做一次重新校正。
- 每隔三个样品后以方法 B 做一次重新校正。

下面是一个删减过的序列表，简单作一说明。

表 10 方法 A 和方法 B 的序列表

行	瓶	方法名称	进样次数 / 瓶	样品类型	校正级别	更新响应因子	更新保留时间	间隔
1	1	方法 A	1	校正	1	平均值	不更新	2
2	2	方法 A	1	校正	2	平均值	不更新	2
3	10	方法 A	1					
4	11	方法 A	1					
5	12	方法 A	1					
6	13	方法 A	1					
7	14	方法 A	1					
8	3	方法 B	1	校正	1	平均值	不更新	3
9	5	方法 B	2	校正	2	平均值	不更新	3
10	20	方法 B	1					
11	21	方法 B	1					
12	22	方法 B	1					
13	23	方法 B	1					
14	24	方法 B	1					

方法 A 的分析次序

方法 A 是双方法序列的第一部分。

表 11 方法 A 的分析次序

进样号	方法	瓶	操作
1	方法 A	1	校正级别 1 和报告
2	方法 A	2	校正级别 2 和报告
3	方法 A	10	样品分析和报告
4	方法 A	11	样品分析和报告
5	方法 A	1	校正级别 1 和报告
6	方法 A	2	校正级别 2 和报告
7	方法 A	12	样品分析和报告
8	方法 A	13	样品分析和报告
9	方法 A	1	校正级别 1 和报告
10	方法 A	2	校正级别 2 和报告
11	方法 A	14	样品分析和报告

方法 B 的分析次序

方法 B 是双方法序列的第二部分。方法 B 与方法 A 的不同之处在于，校正级别为 2 时，每个样品瓶将进样两次。间隔条目设置为 3。

表 12 方法 B 的分析次序

进样号	方法	瓶	操作
12	方法 B	3	校正级别 1 和报告
13	方法 B	5	校正级别 2 和报告
14	方法 B	5	校正级别 2 和报告
15	方法 B	20	样品分析和报告
16	方法 B	21	样品分析和报告

表 12 方法 B 的分析次序

进样号	方法	瓶	操作
17	方法 B	22	样品分析和报告
18	方法 B	3	校正级别 1 和报告
19	方法 B	5	校正级别 2 和报告
20	方法 B	5	校正级别 2 和报告
21	方法 B	23	样品分析和报告
22	方法 B	24	样品分析和报告

请注意，可以在设置序列表后使用部分序列查看运行次序预览，从而获得“第 92 页的表 11”和“第 92 页的表 12”中显示的结果。

简明及循环混合校正

该序列类型可以在同一序列中包括简明校正和循环校正。

这一特性允许用户在序列开始时对方法全面进行重新校正（**简明重新校正**），然后在序列中更新校正（**循环重新校正**）。

- 必须为序列表中每一校正级别指定两个校正行。一行用于简明重新校正条目，另一行用于循环重新校正条目。
- 序列表中的每一校正行都必须有输入，所有循环再校正瓶必须在简明再校正及样品输入前出现。

示例

下面的序列表阐明了名为 SimpReg 的单级校正方法。为简便起见，已作删减。

4 自动分析 / 序列

序列类型

表 13 用于 SIMPREG 的序列表

行	瓶	方法名称	进样次数 / 瓶	样品类型	校正级别	更新响应因子	更新保留时间	间隔
1	1	SimpReg	1	校正	1	平均值	平均值	3
2	1	SimpReg	1	校正	1	替换	替换	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

单级校正有两个条目：

- 第一个校正行用于同一级，但对校正参数求平均值。间隔条目指定每隔三个样品执行一次重新校正。
- 第二个条目取代所有的重新校正参数，即执行一次全面重新校正，它没有重新校正间隔值。

序列表 序列表由七行组成。第一行指定循环重新校正样品。第二行指定显式重新校正，该校正仅在序列开始时运行一次。第三至第七行是要分析的样品。

条目输入序列表的次序很重要。所有指定循环校正的循环重新校正瓶条目必须出现在样品条目或方法的任何显式重新校正条目之前。

SimpReg 分析次序

下表描述 SimpReg 方法的分析次序。

表 14 SimpReg 分析次序

序列行	进样号	方法	瓶	操作
2	1	SimpReg	1	简单校正
1	2	SimpReg	1	常规校正
3	3	SimpReg	2	样品分析

表 14 SimpReg 分析次序

序列行	进样号	方法	瓶	操作
3	4	SimpReg	3	样品分析
4	5	SimpReg	4	样品分析
5	6	SimpReg	1	常规校正
6	7	SimpReg	5	样品分析
7	8	SimpReg	6	样品分析

带区间循环的循环校正序列

在区间循环校正序列中，通过将当前的校正结果与以前的校正结果平均，生成用于计算未知定量结果的校正表。新建校正表能更准确地反映样品分析时的仪器响应情况。

示例

考虑下列情况：

- 仪器响应漂移。
- 规定相同的两组分混合物进样三次，
- 三次进样中，两次规定为校正样品，一次规定为样品。
- 第一次和第三次进样为校正样品。
- 第二次进样为样品。

要获取第二次进样（样品）的精确定量结果，必须在两个校正样品之间进行内插，请参阅该图。该过程即为区间循环校正。

4 自动分析 / 序列

序列类型

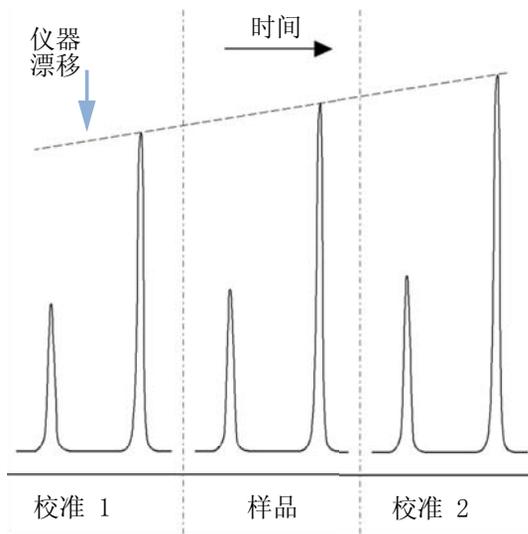


图 19 区间循环校正

区间循环校准序列操作

- 分析第一个校准瓶。
- 分析样品瓶。
- 分析下一个标准样品。
- 通过使用新的响应因子替换现有的响应因子并将后面的校准运行的平均值放入一个新的校准表中，以此生成校准表。
- 对样品数据文件进行评估，得到报告结果。
- 若分析样较多，序列返回到第二步。

示例

本部分介绍了一个区间循环校正序列示例，它由一种名为 Brack.M 的方法构成。Brack.M 方法是一种使用循环校正的两级内标方法。

序列表 为了简化说明，Brack.M 序列表（下页）已作删减。该表共有七行。前两行说明每级的重新校正条件，其余几行说明要分析的样品。

Brack.M 方法序列表的详细说明如下：

- “更新响应因子”列中的“区间循环校正”条目，指定用校正样品对样品进行区间循环校正。
- “更新保留 / 迁移时间”列中的替换条目，指定保留 / 迁移时间的替换项。
- “重新校正间隔”列中的条目 3，指定每三个样品进行一次重新校正。

表 15 BRACK-M 序列表

行	瓶	方法名称	进样次数 / 瓶	样品类型	校正级别	更新响应因子	更新保留时间	间隔
1	1	BRACK-M	2	校正	1	区间循环校正	替换	3
2	2	BRACK-M	2	校正	2	区间循环校正	替换	3
3	10	BRACK-M	1					
4	11	BRACK-M	1					
5	12	BRACK-M	1					
6	13	BRACK-M	1					
7	14	BRACK-M	1					

4 自动分析 / 序列

序列类型

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

Where A = average
R = replace

图 20 区间循环校正序列分析次序

使用含相同浓度的多个标准样品的循环重新校准序列

使用“小循环”校准样品瓶的循环重新校准序列

当运行一个很大的序列并进行循环重新校准时，由于一定样品进样后就会自动进行重新校准过程，因此有可能在序列进行中校准样品瓶被取空。ChemStation 的序列表提供了一个方法，即运用一系列含相同浓度的标样的样品瓶，叫做一个小循环方式。

这样，一个大序列可以设为经过了一定间隔后，使用多个校准样作为同一级作自动重新校准，而每个校准样品瓶假定同样的范围。

通过定义适当数量的校准样品瓶，您甚至还可以确保每个校准样品瓶只使用一次。对于每次重新校准都需要使用新的校准样品瓶的情况，这是一个重要的要求，其原因包括：分析物在隔垫被刺破后蒸发或者在与钢针接触后开始降级。下面将进一步说明如何设定 ChemStation 序列表去满足这些要求。

确定每级的校准样品瓶的总数，可以先估计整个序列中标准的用法。

对每一校准级建一个独立的循环重新校准行。设定相同校准级的行必须相邻，且设定的瓶位置也须相邻，为所有校准行设相同的重新校准间隔，例如，如果您的序列每隔 6 次进样后需要进行一次重新校准，请将重新校准间隔设为 6。

表 16 每级定义为 3 个样品瓶的循环重新校准序列

瓶号	样品名称	样品类型	方法名称	进样次数	级别	更新保留时间	更新响应因子	间隔
1	Cal1a	校正	MethodA	1	1	平均	平均	6
2	Cal1b	校正	MethodA	1	1	平均	平均	6
3	Cal1c	校正	MethodA	1	1	平均	平均	6
5	Cal2a	校正	MethodA	1	2	平均	平均	6
6	Cal2b	校正	MethodA	1	2	平均	平均	6
7	Cal2c	校正	MethodA	1	2	平均	平均	6
10	Sample10	样品	MethodA	6				
11	Sample11	样品	MethodA	6				
12	Sample12	样品	MethodA	6				

4 自动分析 / 序列

序列类型

表 16 每级定义为 3 个样品瓶的循环重新校准序列

瓶号	样品名称	样品类型	方法名称	进样次数	级别	更新保留时间	更新响应因子	间隔
13	Sample13	样品	MethodA	6				
14	Sample14	样品	MethodA	6				

执行次序为：

- 瓶 1 (Ca11a)
- 瓶 5 (Ca12a)
- 瓶 10 进样 6 次 (Sample10)
- 瓶 2 (Ca11b)
- 瓶 6 (Ca12b)
- 瓶 11 进样 6 次 (Sample11)
- 瓶 3 (Ca11c)
- 瓶 7 (Ca12c)
- 瓶 12 进样 6 次 (Sample12)
- 瓶 1 (Ca11a)
- 瓶 5 (Ca12a)
- 瓶 13 进样 6 次 (Sample13)
- 瓶 2 (Ca11b)
- 瓶 6 (Ca12b)
- 等

每次使用不同样品瓶的循环再校准

为保证每个标样瓶仅使用一次，序列必须设有足够的不同标样瓶，这样才能不应用前面例子中小循环次序。例如，如果该序列将处理 80 个样品瓶，要求每隔 10 个样品进行一次重新校准，那么序列表中每一级必须包含 $80/10 + 1 = 9$ 校准行。

如同前面例子一样，标样行必须相邻，瓶的位置也须相邻。

使用不同瓶来开始和结束区间的区间序列

区间循环校准序列同样具有该功能。通过定义适当的校准样品瓶瓶数范围，可以定义一个区间循环校准序列，从而可以使用不同的校准样品瓶来开始和结束区间循环校准。这种情况，一样须标样行相邻且标样瓶位置也相邻。

是否以小循环模式使用区间循环校准样品瓶，以及是否仅将区间循环校准样品瓶用于单个进样，完全取决于每一级的校准样品瓶的总数以及序列所要求的重新校准次数。

下面示例定义了 3 个被区间循环校准的样品进样。开始区间循环校准与结束区间循环校准使用不同的校准样品瓶。每次进样后都要求进行重新校准，因此重新校准间隔必须为 1。每一级的校准行数为样品数加 1。

表 17 使用不同的样品瓶来开始和结束区间循环校准

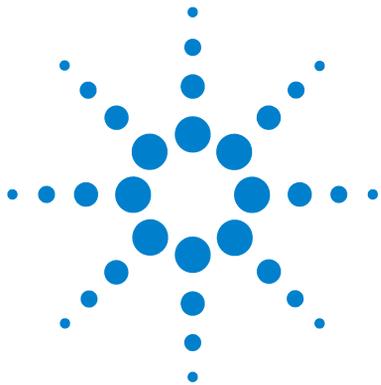
瓶号	样品名称	样品类型	方法名称	进样次数	级别	更新保留时间	更新响应因子	间隔
1	Calla	校正	MethodA	1	1	Brkt	Brkt	1
2	Callb	校正	MethodA	1	1	Brkt	Brkt	1
3	Callc	校正	MethodA	1	1	Brkt	Brkt	1
4	Calld	校正	MethodA	1	1	Brkt	Brkt	1
10	Sample10	样品	MethodA	1				
11	Sample11	样品	MethodA	1				
12	Sample12	样品	MethodA	1				

序列运行次序为：

- 瓶 1 (Calla)，开始区间循环校准 1
- 瓶 10 (Sample10)
- 瓶 2 (Callb)，结束区间循环校准 1 和开始区间循环校准 2
- 瓶 11 (Sample11)
- 瓶 3 (Callc)，结束区间循环校准 2 和开始区间循环校准 3
- 瓶 12 (Sample12)
- 瓶 4 (Calld)，结束区间循环校准 3

4 自动分析 / 序列

序列类型



5 运行队列和队列计划

支持的工作流程	104
使用运行队列	106
运行队列中的单个样品	107
运行队列中的序列	107
运行队列中的暂停	107
使用队列计划	108



支持的工作流程

运行队列控制 ChemStation 中的所有运行：

- 只要使用“RunControl” > “运行方法”或“RunControl” > “运行序列”命令来运行方法或序列，该项就首先添加到运行队列，然后再从此处自动启动。如果运行队列目前已暂停，该项将会添加到队列前部，后跟可队列的暂停。这样，仪器在运行完成后将恢复暂停状态。
- 通过运行队列，还可以使用附加的参数计划一系列样品和序列。您可以使用“运行控制” > “队列方法...”或“运行控制” > “序列队列...”命令将样品或序列添加到队列。通过运行队列，您可以自动进行长时间的操作，例如通宵作业或周末作业。除了样品和序列，您还可以计划暂停。在这些暂停中，ChemStation 显示自定义的消息，并等待用户确认。

通过队列计划，可以事先准备队列计划并在此后随时将其添加到运行队列。

支持下面的工作流程：

- 运行单个样品
- 运行单个序列
- 排列单个样品
- 排列单个序列
 - a 选择经典 ChemStation 序列模板或简易序列模板
 - b 编辑或查看序列表
 - c 编辑或查看序列参数
 - d 保存设置
 - e 向队列中添加序列
- 更改运行队列
- 准备队列计划
- 向运行队列中添加预定义的序列集
 - a 选择队列计划
 - b 向运行队列中添加计划

在历史队列中，总是可以查看在当前仪器上已执行了哪些运行。

运行队列和队列计划仅可用于“方法和运行控制”视图中的在线 ChemStation 会话。

使用运行队列

“运行队列”位于“仪器控制”选项卡或“运行队列”选项卡中。在“仪器控制”选项卡中，您可以使用“视图”>“运行队列”命令显示或隐藏“运行队列”。

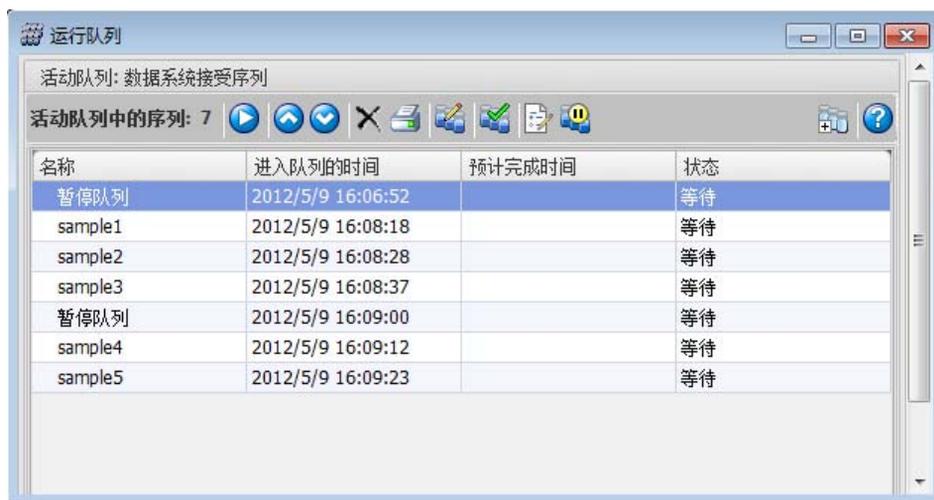


图 21 “运行队列”对话框

您可以将项目添加到队列的前部或后部。只要队列中的项目的状态为等待，就可以更改该项目的执行顺序和属性。根据激活的队列选项，队列中的第一项在数据系统就绪时启动或在恢复队列后启动。

运行队列支持单个样品、简易序列模板和经典 ChemStation 序列。只有属于直接从仪器启动的部分排序、优先样品和运行的项目才无法添加到运行队列。

有关简易序列的详细信息，请参阅在线帮助系统。在线帮助中提供了“简易序列设置”教程。

运行队列中的单个样品

要向队列中添加单个样品，使用菜单“运行控制” > “队列方法...”。您可以修改“队列方法”对话框中的所有参数。

运行队列中的序列

要向队列中添加序列，使用菜单“运行控制” > “排列序列...”。您可以修改序列表和序列参数，而不更改当前加载的序列。在最终排列序列之前，将会弹出对话框，供您将序列添加到队列中，或将其保存为新序列模板。

“结束队列序列”对话框还包含复选框“完成后删除临时序列模板”。ChemStation 总是在临时文件夹中保留一份队列序列模板的副本。此临时序列模板将用于从队列运行序列。由于相同的序列可使用不同的参数排列多次，因此 ChemStation 需要为每个队列项保留一份独立的副本。

根据复选框的状态，队列继续下一项时将保留或删除此临时序列模板。根据“专有文件夹创建”的设置，缺省情况下可选中或清除此复选框（请参阅“第 78 页的“首选项” - “序列”选项卡”）：

- “专有文件夹创建关闭”：

“完成后删除临时序列模板”复选框在缺省情况下为清除状态。

如果您要重新处理数据，将需要使用序列模版，因此建议保留一份此文件的副本。缺省情况下，此文件保存在 Chem32\\SEQUENCE。

- “专有文件夹创建启用”：

“完成后删除临时序列模板”复选框在缺省情况下为选中。

重新处理数据需要的所有信息可从结果集中获得，因此不需要复制临时序列模板。但是，如果选中此复选框，缺省情况下将在“Chem32\\TEMP\AESEQ”中保留一份副本。

运行队列中的暂停

要向队列中添加暂停，在运行队列工具栏中单击“向队列添加暂停”。在这些暂停中，ChemStation 显示自定义的消息，并等待用户确认。

使用队列计划

通过队列计划，您可以准备排好顺序的序列集（简易序列模板 *.es 或经典 ChemStation 序列模板 *.s）或暂停。整个队列计划都可以添加到运行队列的后部或前部。

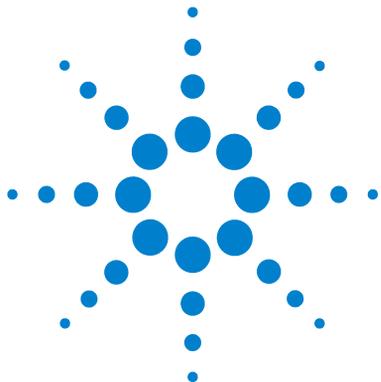
队列计划另存为 *.qpl 文件。您可以在“方法和运行控制”视图中通过菜单“运行控制”>“队列计划...”打开队列计划程序。



图 22 队列计划

在运行队列中，添加暂停时，您可以在“详细信息”列中提供自己的消息。当序列队列到达暂停时，ChemStation 停下，并显示指定的消息。用户必须先确认此消息，队列才能继续。

有关用户界面的详细信息，请参阅在线帮助系统。



6 数据分析和查看概念

数据分析	110
重新计算模式	112
重新处理模式	114
更新方法	117
用于数据分析的报告查看器	117
查看	121
智能报告的要求	121
数据文件选择	121
报告模板选择	122
报告预览	122
可能的查看 workflows	123

本章概述了数据分析和数据查看选项。在 OpenLAB CDS ChemStation 版本 中，这些选项位于两个单独的视图中。



数据分析

一旦采集了数据，则可以在“化学工作站数据分析”视图中对数据进行分析。选择化学工作站资源管理器的“数据”选项卡时，可通过双击相应的符号来调用某序列的所有运行或特定文件夹中的所有单次运行。相应的数据集随即会出现在导航表中。

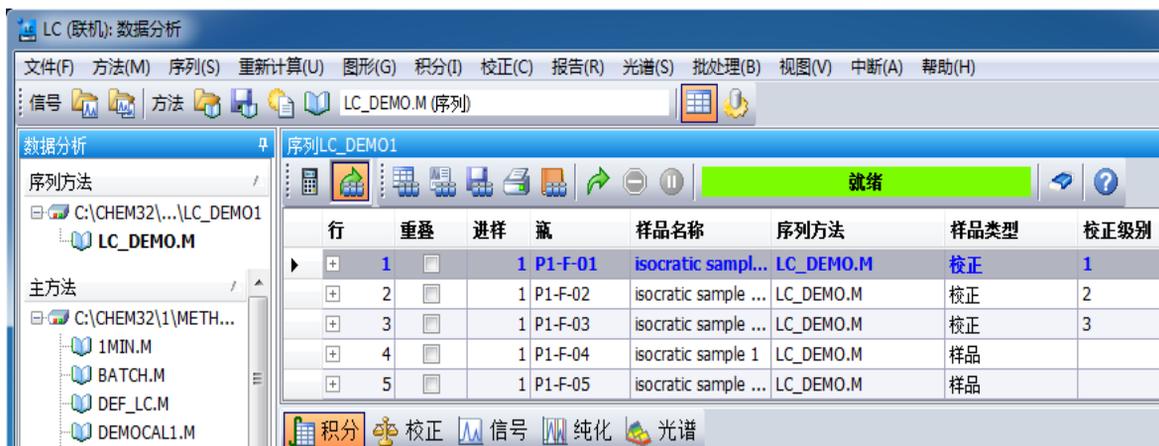


图 23 从 ChemStation 资源管理器将序列调入导航表

导航表的主要部分由数据集的所有运行的列表组成。通过双击导航表中的相关行，可将运行调入化学工作站内存中。此外，右键单击某次运行也会出现几个选项，例如，从文件调用或重叠特定信号、导出数据或者查看采集方法参数。

对于序列运行，始终使用在采集或重新处理期间使用的序列方法调用。对于单次运行，使用上次在化学工作站中调用的主要方法对其进行调用。

使用化学工作站，您可以指定从导航表调用数据文件时自动执行的默认操作。这包括数据分析任务，如在调用或打印每个单次进样后直接对色谱图进行积分。请参见下图。



图 24 “首选项”对话框的“信号/查看选项”选项卡

注意

“首选项”对话框中“信号/查看选项”选项卡上的“调用信号选项”下的功能只能在从导航表调用数据文件时应用。使用“文件”菜单中的“调用信号”或主工具栏中的相应图标时，不会应用这些设置，例如，不会调用任何方法。

您可以在以下两种数据分析模式之间选择：重新计算模式和重新处理模式。通过“视图”菜单（“视图” > “重新计算模式”、“视图” > “重新处理模式”）或通过工具组（见下图），可以访问这些模式。



图 25 选择重新计算模式和重新处理模式

对于每种模式，该工具组包含一些特定功能。以下各部分介绍了这两种模式及其各自的功能。在“首选项”对话框的“信号/查看选项”选项卡中，可以选择调用结果集时应默认激活哪种模式。

重新计算模式

调用运行后，即可查看它，即调整数据分析参数、对信号进行积分并最终打印报告。在这种情况下，将运行作为单次运行分析，而不要考虑序列上下文，也不必使用序列表功能。此数据分析类型的导航表提供下图中显示的工具组。



图 26 导航表的重新计算工具组

使用这套工具组，您可以跳到导航表的开头或末尾、步进到下次或上次运行、在运行之间自动步进、停止自动步进、使用特定方法重新计算运行，或清除导航表。

重新计算就是对每次运行都执行一次分析。只分析导航表中显示的运行。如果将过滤器应用到导航表，则只会重新计算实际显示在该表中的那些运行。此外，还会考虑导航表的排序。

您可以在诸如下面的工作流程中使用重新计算：

- 您想要使用结果集中当前没有的不同方法（例如，未用于采集的主要方法）查看结果集的数据文件，原因是，您的工作流程使用单独的采集和数据分析方法。
- 您已经编辑了一种序列方法并且仅想使用此方法查看特定的运行，以便检查这些参数应用到不同运行的效果。

使用特定方法重新计算

默认情况下，重新计算始终使用与数据文件一起调用的方法。对于序列运行，这是序列方法。对于单次运行，这是上次调用的主要方法。

使用此功能，可以通过特定的主要方法重新计算导航表中显示的运行。在“**使用方法重新计算**”对话框中指定所需的主要方法（见下图）。如果所选择的主要方法使用智能报告（见“[第 139 页的报告](#)”），则还可以指定将用于单次进样报告的报告模板。



图 27 “使用方法重新计算”对话框

“浏览主路径中的方法”对话框和“浏览主路径中的模板”对话框提供了您在“首选项”中指定的所有文件位置。

注意

在早期版本的 ChemStation 中，您能够通过选择工具栏中的“使用当前方法”、“使用来自数据文件中的方法”或“使用序列方法”，使用特定方法来重新计算。

如果选中“使用参比”复选框，则可以选择包含参比信号的数据文件。ChemStation 使用此信号来计算《欧洲药典》定义的信噪比。下拉列表提供您在当前会话中可以使用的数据文件。通过“浏览”按钮，可以选择还出现在导航表中的任何数据文件。如果要使用不同的参比文件，必须首先将其添加到导航表中。

新参比将覆盖原有的参比，并且从现在开始将用于每个报告中的信噪比计算。如果选中“使用参比”复选框，但是不选择任何文件，将对所有重新计算的数据文件清除参考，从现在开始不再计算信噪比的值。

在上次结果模式下重新计算

在此模式下，将会针对每次运行调用数据文件方法 (DA.M)，而不是调用序列方法。此方法曾用于执行上次的数据分析（在采集、重新处理或重新计算期间）。因此，即使序列方法与此同时也发生改变，您也可以使用最初使用的方法重新生成上次结果。

工具栏中的方法名称显示 DA.M，这表示已调用该数据文件方法。此外，将鼠标指针移到该字段上时，会有一条工具提示显示该方法的完整路径和名称。

注意

DA.M 通常是只读的。此方法不能手动调用，而只能由 ChemStation 在“最终结果”模式下进行重新计算时调用。您可以编辑它，但不能进行手动保存。如果您生成报告，则系统需要先保存方法。在这种情况下，系统会警告您将要创建新结果。如果确认，ChemStation 将使用当前设置更新 DA.M。

重新处理模式

分析数据的另一种方式是对整个序列进行“数据重新处理”。与重新计算不同，数据重新处理将在序列上下文重新分析所有运行，即，运行校正时将更新序列方法的校正表，并且乘积因子、数量等可在序列表中改变。

结果集包含进行重新处理所需的全部文件：数据文件、序列文件的副本、所有序列方法以及原来随采集一起使用的所有报告模板。因此，为了对序列进行数据重新处理，只需将它调入导航表并选择重新处理工具组。

如果需要将序列方法的更改传播到相应的主方法以作为所有未来采集运行的输入，则可以使用“更新主方法”功能方便地实现这一点（请参见“第 39 页的更新主方法”）。

每当您重新处理数据文件时，DA.M 都会自动更新。

为了进行重新处理，导航表提供了以下工具组：



图 28 导航表的序列重新处理工具组

通过此工具组，您可以编辑序列列表、编辑序列参数、保存当前序列、打印当前序列、显示或隐藏序列工作日志、查看保存的序列总结报告文件、开始序列重新处理、停止序列或暂停序列。

请注意，导航表中的重新处理图标仅对 ChemStation B.02.01 和更高版本生成的结果集可用。无法针对单次运行数据、在 B.02.01 之前生成的数据以及在“专有文件夹创建”处于关闭状态时采集的数据访问“数据分析”中的重新处理（请参见“第 78 页的“首选项”-“序列”选项卡”）。这类序列需要在“方法和运行控制”中进行重新处理，将序列参数“序列运行方法”定义为“仅重新处理”。对于使用 ChemStation B.02.01 和更高版本生成的序列，“方法和运行控制”中的重新处理选项已删除，导航表将重新处理作为“数据分析任务”来提供。

另一种替代方法是将这种样品或序列添加到新的自我装配的结果集中。此外，您还要分配序列方法，并且可以在之后重新处理整个序列（请参见“第 117 页的自我组装的结果集”）。

关于重新处理，请注意以下规则：

- 将结果集调入导航表中时，ChemStation 还会自动调用位于该结果集中的序列文件 (*.S)。该序列文件包含与属于该结果集的任何数据文件相关的所有序列行。
- 所有操作都针对序列方法执行。如果要应用更改过的分析参数，必须更改序列方法。
- 在重新处理期间，批处理文件 (*.b)、序列 / 单次运行日志 (*.log) 和导航表都会更新。每个已处理数据文件的单个数据分析方法 (DA.M) 都将由序列方法所覆盖。
- 如果要将其中一个主要方法目录中的新方法添加到序列表中，请首先使用 ChemStation 资源管理器将主要方法复制到结果集中。然后，您可以在序列表中选择新的序列方法。在序列表中不能添加或删除行。
- 在“序列参数”对话框中，只能更改序列注释和序列表使用信息。其他所有字段都必须在数据采集期间设置，否则不会应用于重新处理。

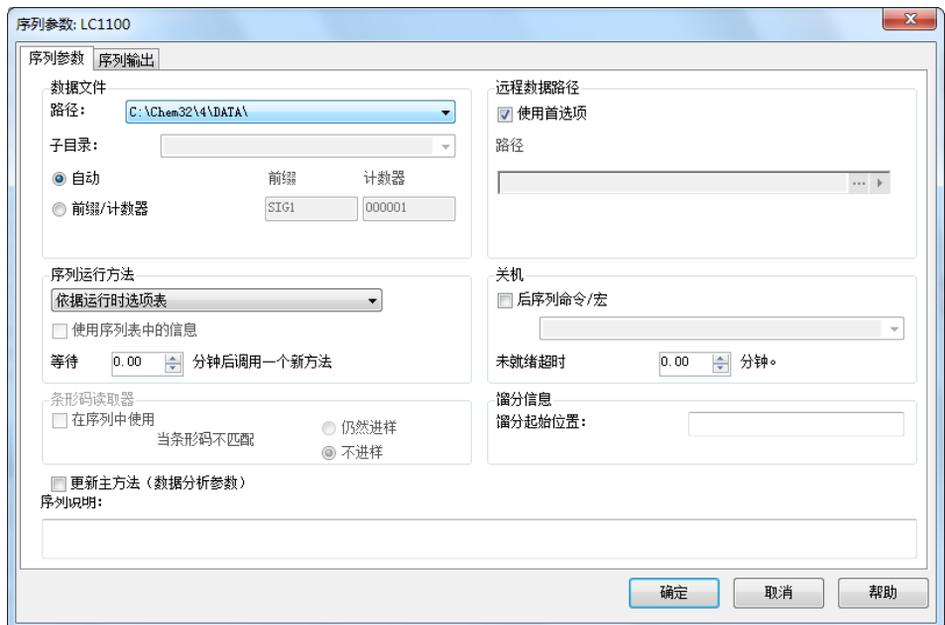


图 29 数据分析中的序列参数

手动积分事件的处理

手动积分事件（例如，手动绘制的基线）比定时积分事件更针对数据文件。如果色谱图很复杂，最好能用这些事件进行重新处理。

因此，在 ChemStation B.04.01 及更高版本中，可将手动积分事件直接存储在数据文件中，而不是方法中。每次查看或重新处理数据文件，都会自动应用数据文件中的这些手动积分事件。将会在浏览表的相应列中标记包含手动积分事件的运行。

除了用于绘制基线和手动删除峰的工具外，用户界面上还有其他工具可供用于：

- 将当前显示的色谱图的手动积分事件保存到数据文件中；
- 删除当前显示的色谱图中的所有事件；
- 撤消上一个手动积分事件（在该事件未保存的情况下，此功能不可用）。

如果用户在导航表中浏览数据期间继续查看下一个数据文件，则 ChemStation 会检查所有未保存的手动积分事件并询问用户是否希望保存这些事件。

在导航表中查看数据期间，存储在数据文件中的手动积分事件不会影响以“**批处理**”模式进行查看期间存储的手动积分事件。对于数据文件中的手动积分事件，上述两种查看方法完全不同。

在低于 B.04.01 的 ChemStation 版本中，手动积分事件只能存储在方法中。在 ChemStation B.04.01 版中，此工作流程仍可使用。“**数据分析**”视图中的“**积分**”菜单提供了以下项，以便处理存储在方法中的手动积分事件：

“**更新方法中的手动积分事件**”：将新抽取的手动积分事件保存到方法中。

“**应用方法中的手动积分事件**”：将当前保存在方法中的手动积分事件应用到当前调用的数据文件。

“**删除方法中的手动积分事件**”：从方法中删除手动积分事件。

要将保存在方法中的手动积分事件存储到数据文件中，需应用方法中的相应事件，然后将结果存储到数据文件中。根据需要，可以删除方法中的事件。

如果选中了方法的“**积分事件表**”的“**手动积分事件**”复选框，则调用使用了此方法的数据文件时将始终应用这一方法的手动积分事件。如果数据文件包含其他手动积分事件，那么会使用该数据文件中的这些事件。选中“**手动积分事件**”复选框时，永远不会要求用户将事件保存到数据文件中。

自我组装的结果集

在“数据分析”视图中，导航表显示所调用的单次运行或序列的内容。您可以调用、卸载数据文件或将其添加到导航表中。使用“序列 > 创建新结果集”命令，可以根据当前显示在导航表中的数据创建新的自我组装的结果集（请参见“第 74 页的组装新结果集”）。然后，可以以处理自动创建的结果集的方式重新处理自我组装的结果集。

卸载当前数据集

使用导航表的上下文菜单中的“卸载当前数据集”命令，可以将导航表恢复为最初的空白状态，就像刚启动 ChemStation 后导航表所处的状态。如果存在未保存的数据，则系统会提示您保存它。

删除选定的数据文件

使用导航表的上下文菜单中的“删除所选数据文件”命令，可以删除导航表中的选定行。这会删除导航表中的引用，而不会将实际数据文件从文件系统上已调用的结果集或单次运行中删除。只能删除已添加 / 重叠的文件的引用。

更新方法

在“数据分析”视图中，提供了多个选项来在主要方法目录和结果集之间复制方法。有关详细信息，请参见“第 39 页的管理方法”。

用于数据分析的报告查看器

根据配置，ChemStation 在特定时间点自动将单次进样报告和序列总结报告保存到文件系统。通过报告查看器，可以方便地查看保存的报告文件，以检查来自数据采集、重新处理或重新计算的结果。



图 30 报告查看器

使用报告查看器具有以下优点:

- 您可以从 ChemStation 直接打开报告文件，而不需要在文件系统中搜索文件。
- 每个报告都将在单独的浮动窗口中打开。因此，您可以并排显示窗口以方便地比较不同的报告。
- 您可以使用全屏模式查看报告文件。
- 您可以使用 Adobe Reader 的功能查看 .pdf 报告。
- 您可以在 .txt 报告以及 .pdf 报告中搜索具体的文本。
- 在重新处理序列时，您不需要等到整个序列的重新处理过程结束。您可以打开已经完成的序列样品的已保存报告文件。

启动报告查看器

您可以通过菜单、通过工具栏图标或通过导航表的上下文菜单打开报告查看器。提供不同的项目，用于序列总结报告和单次进样报告。

查看单次进样报告：

- 选择菜单 “ 报告 ” > “ 查看报告文件 ” 以查看报告文件或加载的信号文件。
- 从导航表的指定样品的上下文菜单选择 “ 查看保存的报告文件 ” 命令。通过此命令，您可以加载报告文件或任何信号的文件，即使该文件当前未加载。
- 从工作区工具栏中单击 “ 查看保存的报告文件 ” 图标以查看报告文件或加载的信号文件。



查看序列总结报告：

- 选择菜单 “ 序列 ” > “ 查看总结报告文件 ”。
- 从导航工具栏（重新处理模式下）单击 “ 查看保存的序列总结报告文件 ” 图标。



配置报告查看器窗口

您可以对报告查看器多个方面的行为进行配置。所有这些设置都可以通过报告查看器窗口中的 “ 选项 ” 按钮访问。

您可以定义同时打开的报告查看器窗口的最大数量。这些窗口将循环重复使用。如果查看的报告文件数量超过报告查看器窗口的最大数量，第一个打开的窗口将最先更改显示内容。

注意

如果不需要比较多个报告，建议将报告查看器窗口的数量限制为 1。

在比较多个报告时，调整报告查看器窗口的标题栏也很有用。显示序列总结报告、序列样品的单次进样报告或单次运行的单次进样报告的报告查看器窗口可使用多种标记。这些标记可帮助您区分每个报告查看器窗口。

报告查看器窗口总是显示在 ChemStation 应用程序顶部。为了同时使用 ChemStation 和报告查看器，您可以调整两个窗口的大小并重新定位，以便于同时查看两个窗口。关闭 ChemStation 时，将保存窗口的大小和位置。下次启动 ChemStation 时，再次使用同样的设置。

使用报告查看器

您可以在下面列举的工作流程中使用报告查看器：

- 您设置方法和序列以将 PDF 报告保存到文件系统。完成序列运行后，您在报告查看器中直接从 ChemStation 打开报告文件（序列总结报告或单次进样报告）。使用 Adobe Reader 功能（例如，缩放或搜索）详细检查报告。
- 您从中央数据存储下载已经包含报告文件的序列。
 - 为查看最终结果，您在导航表中选择相关的样品并在报告查看器中直接从 ChemStation 打开报告。
 - 如有必要，您可以更改方法并重新处理序列。在重新处理过程中，您开始查看已经完成的样品的报告。

在报告查看器中，您可以从左上角的列表中同时选择旧报告和新报告。您可以通过列表条目中显示的创建日期区分报告。根据传输设置，数据（包括新报告文件）在重新处理完成后可自动上传到中央数据存储。
- 您运行仅保存了 TXT 报告文件的序列。您也可以在报告查看器中检查这些报告文件。
- 您可以按照不同的报告格式或模板审核同一序列样品的不同报告。

首先，您使用扩展性能报告创建序列。您可以运行或重新处理此序列以获得报告文件。如果您对此报告中显示的结果感到满意，则可以更改序列方法以创建更短的报告（例如，选择不同的报告模板或经典报告格式“简短”）。然后，您可以重新处理此序列以获得更短的报告。使用报告查看器查看报告时，您可以从左上角的列表中选择不同的报告以进行切换。每个文件的创建日期都显示为列表条目的一部分。

查看

在 Agilent OpenLAB CDS ChemStation 版本 中，提供了一个新视图，该视图涵盖数据分析的清除数据查看工作流程。在此“查看”视图中，您可以为整个序列、某个序列的一部分，或者不同序列或单个样品中选定的任何数据文件生成报告。

在“查看”视图中，请勿调用任何方法，也勿在重新计算或重新处理期间创建任何新结果。在“查看”视图中生成的报告仅会显示已经计算的结果。

您可以选择一个报告模板并将其应用到所选择的特定数据文件。所选择的模板和数据文件组合决定所生成的报告的输出。

注意

仅当在 OpenLAB 控制面板的“仪器配置”中激活了智能报告时，“查看”视图才可用。

智能报告的要求

ChemStation C.01.04 以智能报告使用的特定格式 (*.ACAML) 生成结果数据。如果您要针对使用 ChemStation 版本 A 或 B 采集的数据创建报告，必须先使用 ChemStation C.01.04 生成结果（例如，在“数据分析”视图中重新计算数据或生成单次进样报告）。如果结果未采用所需的格式提供，则查看视图中的已生成报告不会包含任何数据。

数据文件选择

您可以通过从 ChemStation 资源管理器的导航树中调用序列或单次运行来选择所需的数据文件。之后，所有可用数据文件均会显示在导航表中。在导航表中，选择要在报告中查看其结果的特定数据文件。

调用数据文件

您可以从整个序列或“单次运行”文件夹调用所有数据文件。在 ChemStation 资源管理器的“数据”选项卡上，您可以双击序列或使用上下文菜单中的“调用”命令来调用所包括的全部数据文件。

调用数据文件时，会在显示新数据文件之前自动清除导航表。因此，您可以为单个样品报告 或序列总结报告 准备数据。

添加数据文件

如果您要比较不同序列中的结果，可以先调用一个序列，然后添加来自另一序列的所需数据文件。在 ChemStation 资源管理器的“数据”选项卡中，使用上下文菜单中的“添加数据文件...”命令，只将特定的数据文件添加到已调用的选项中。将会打开一个对话框，您可以在该对话框中选择所需的数据文件。

添加数据文件时，导航表会将数据文件追加到已经调用的数据文件的列表中。因此，您可以准备数据，例如，为跨序列报告 准备。

选择用于报告的数据文件

导航表显示来自您在 ChemStation 资源管理器中双击的序列或单个样品集合的所有数据文件。在导航表中，您可以选择要为其创建报告的那些数据文件。生成报告时，仅包括所选行。

报告模板选择

您可以从 ChemStation 资源管理器的“报告模板”选项卡中选择所需的报告模板。导航树将在 `chem32/repstyle` 目录中显示所有报告模板。

报告预览

生成的报告始终由数据选择和报告模板决定。因此，一旦您选择了一个或多个数据文件并调用了报告模板，则 ChemStation 会生成相应的报告并显示报告预览。

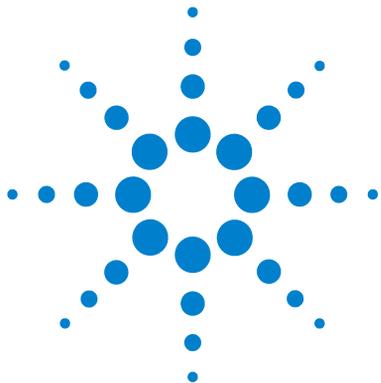
您可以将报告发送到打印机或将其另存为文件（PDF、XLS、DOC 或 TXT）。如果使用中央数据存储系统，还可以直接将报告上传到中央存储库。

可能的查看工作流程

您可以在诸如下面的工作流程中使用“查看”视图：

- 调用一个序列并选择该序列的所有数据文件。调用报告模板并生成**序列总结报告**。
- 生成序列总结报告之后，请调用其他报告模板。使用**不同的报告布局**查看相同的数据。
- 调用一个序列，并且仅选择一部分数据文件。调用一个报告模板并且**仅为该序列的一部分**生成序列总结报告。
- 调用一部分数据文件之后，添加其他数据文件（来自序列或来自单个样品的集合）。调用一个报告模板并生成**跨样品或跨序列报告**。

6 数据分析和查看概念 查看



7 校正

术语定义	126
校正类型	127
单级校正	127
多级校正	128
校正范围	129
校准曲线拟合	130
原点处理	130
校正表	133
峰加和	134
未知样品	135
重新校正	136
什么是再校准？	136
为什么要再校准？	136
手动重新校正	136
使用峰加和的再校准	137
再校正的方法	137
未确认峰的重新校正	137

本章介绍校正的概念。



校正类型

ChemStation 提供了两种校正类型，即单级校正和多级校正。

单级校正

“第 127 页的图 31”中显示的校正曲线含有一个点，即为一个级别。对于单级校正曲线，假定目标样品的工作浓度范围内的检测器响应值为线性值。给定组分峰的响应因子为通过该点及原点的校正曲线斜率的倒数。单级校正的一个缺点是，对样品浓度的检测器响应值被假定为线性值，并且通过浓度与响应值对照图的原点。这种校正并不总是正确的，而且可能导致不精确的结果。

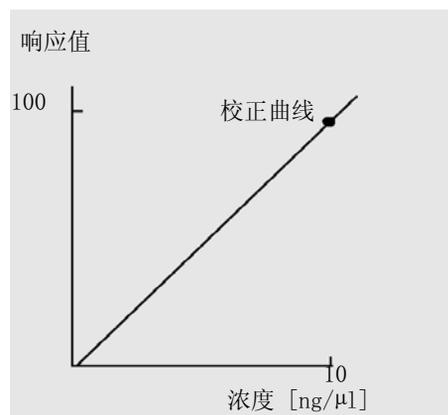


图 31 单级校正曲线

为了获得准确的定量结果，校正曲线应至少具有两种级别。这些级别应涵盖期望在未知样品中找到的含量。

7 校正

校正类型

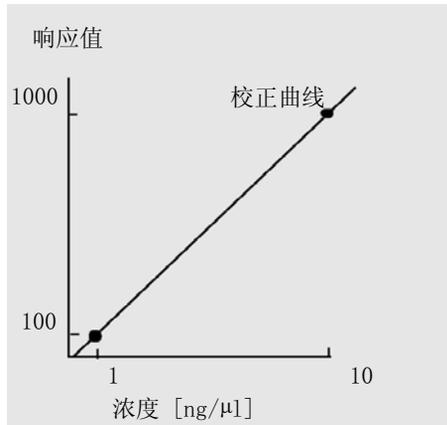


图 32 两级校正曲线

例如，如果要对某一化合物进行定量，并且未知样品的期望含量在 1 - 10 ng/μl 之间，则校正曲线至少应具有“第 128 页的图 32”中所示的两个级别。

含量极限值

ChemStation 允许您根据各组分的绝对含量来定义有效定量范围。

多级校正

当假定某组分显示线性响应值或者确定线性校正范围不够准确时，可以使用多级校正。每个校正级别与具有特定组分浓度的校正样品相对应。应当准备好校正样品，使得各组分的浓度能在未知样品预期的浓度范围内变化。这种方法允许检测器响应值随浓度而变化，并相应地计算出响应因子。

此多级校正曲线具有三种级别，并显示了通过原点的线性拟合。这种通过原点的线性拟合方法与单点方法校正相似。假定检测器对浓度的响应值为线性值。两种校正类型的区别在于，在线性拟合情况下，检测器响应斜率可由通过多个点的最佳拟合确定，一个点对应一种级别。

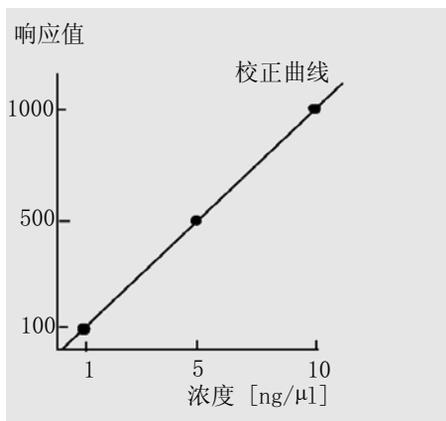


图 33 带有三种级别的多级校正曲线

对应的校正表是用于生成此曲线的信息表，它看上去与“第 129 页的表 18”中所示的表类似。

表 18 校正表

级别	含量 (ng/μl)	响应值 (面积)
1	1	100
2	5	500
3	10	1000

在上例中，用于生成三种级别的校正样品分别被标识为 1、2 和 3。

校正范围

每个多级校正在校正样品中所使用的浓度范围内都是有效的。尤其是当校正曲线为非线性值时，校正曲线的外插法最多只是一种近似。可以在“化合物细节表”对话框中定义每个化合物的有效校正范围。化合物的每个条目可用下限和上限来表示。如果超出这些限制，将在报告中进行标注。

校准曲线拟合

可以将多种曲线拟合计算方式与多级校准配合使用。

- 分段线性
- 线性
- 对数
- 幂
- 指数
- 平方
- 立方
- 平均（响应值 / 含量）

非线性拟合

在某些情况下，检测器对样品浓度变化的响应值是非线性值。对于这些类型的分析，不适合使用线性回归校准方法，而应使用多级校准计算。

原点处理

在绘制响应曲线时，有四种方法来处理原点：

- 忽略原点，
- 包含原点，
- 强制过原点，
- 连接原点。

要在校正曲线中包含强制过原点，可以将校正点以原点为对称中心从第一象限映射到第三象限。使用所有点进行回归计算可确保得到的校正曲线经过原点。在“第 131 页的图 34”中也对此进行了说明。

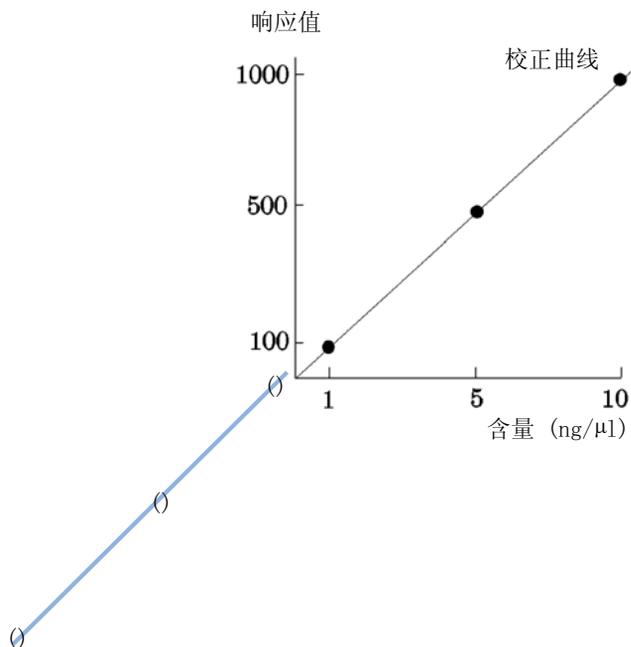


图 34 强制包含原点

有关校正曲线拟合和原点处理的详细信息，请参阅[在线帮助文件](#)。

校正点加权值

在设置缺省校正曲线时，您可以指定用于生成曲线的各校正点的相对加权值（或重要性）。

可以选择下列加权选项：

权重	说明
均等	曲线中的所有校正点都具有相同的权重。
线性（含量）	含量为 x 的校正点具有归一到最小含量的加权值 $1/x$ ，以使最大加权因子为 1。通过用最小含量乘以加权值来实现归一化。例如，含量为 x 的校正点的权重是 $(1/x) \times a$ ，其中 a 是以校正标准制备的校正化合物的最小含量。如果包括原点，其加权值为其他校正点的平均加权值。

7 校正

校正类型

权重	说明
线性（响应值）	响应值为 y 的校正点具有归一到最小响应值的加权值 $1/y$ ，以使最大加权因子为 1。通过用最小响应值乘以加权值来实现归一化。例如，含量为 y 的校正点的权重是 $(1/y) \times b$ ，其中 b 是与以校正标准制备的校正化合物的最小含量相应的响应值。 如果包括原点，其加权值为其他校正点的平均加权值。
平方（含量）	含量为 x 的校正点具有归一到最小含量的加权值 $1/x^2$ ，以使最大加权因子为 1。通过用最小含量乘以加权值来实现归一化。例如，含量为 x 的校正点的权重是 $(1/x^2) \times a^2$ ，其中 a 是以校正标准制备的校正化合物的最小含量。
平方（响应值）	响应值为 y 的校正点具有归一到最小响应值的加权值 $1/y^2$ ，以使最大加权因子为 1。通过用最小响应值乘以加权值来实现归一化。例如，响应值为 y 的校正点的权重是 $(1/y^2) \times b^2$ ，其中 b 是与以校正标准制备的校正化合物的最小含量相应的响应值。
校正次数	根据点的重新校正次数来对校正点进行加权。无需归一化。

例如，可以将平方校正点加权值用来调整校正点中的扩展。它确保校正点更接近原点，这通常使检测更准确，获得比远离原点可能扩展的校正点更高的加权值。

您可以根据方法的需要，决定使用哪一种校正点加权值。

校正表

依据您所选择的计算过程，校正表指定将峰面积或峰高转换为您所选择的单位。校正表中列出从校正运行中得到的保留 / 迁移时间。这些保留 / 迁移时间与样品运行中峰的保留 / 迁移时间作比较。若匹配，则认为样品峰与校正表中的峰代表相同组份。在分析或产生报告的过程中，用输入的第一个峰含量来计算为报告选用的计算过程的含量。创建一个校正表所需信息的类型和多少随所需计算过程的不同而不同。

创建一个校正表需要以下信息：

- 每个校正混合物组份峰的保留 / 迁移时间，
- 用于制作校正混合物的各组分的含量，用同一单位表示。

峰加和

峰加和表专为石化和制药行业的某些特定应用而设计，并通过以下功能提高了应用的性能：

- 将落在一个用户设定范围内的峰的面积加和。
- 将某个范围内峰的面积加和，并用乘积因子来计算。
- 对所有具有相同名称的峰的面积进行加和

峰加和表与标准校正表相似，但又略有不同。与校正表一样，峰加和表也与当前方法相关联。

注意

创建峰加和表之前，必须创建用于分析的校正表。

未知样品

未知样品是指含有要定量的化合物未知含量的的样品。

要查明未知样品中化合物的含量，您必须：

- 创建该化合物的校正曲线，
- 进样能整除的未知样品，并用与校正样品完全相同的方法运行分析，
- 从信号中确定响应值，即由化合物的未知含量产生的峰面积或峰高，
- 用校正曲线计算未知样品中的化合物含量。

例如，如果未知样品中的峰面积为 500，则通过使用“第 135 页的图 35”中显示的校正曲线，就可以确定未知样品的含量为 5 ng/μl。

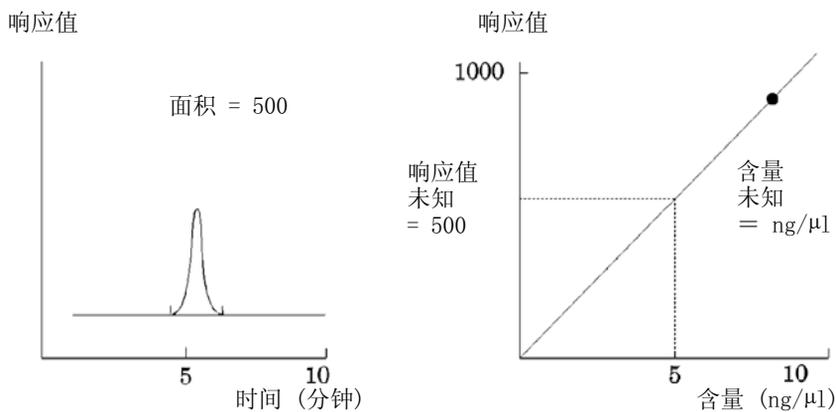


图 35 未知样品的信号和校正曲线

重新校正

什么是再校准？

重新校准是更新校准曲线的级别时所进行的过程。重新校准时，您所运行的其他样品应含有与原始样品相同的校准化合物，最重要的是，这些化合物的含量也必须相同。运行校准样品时，可获得更新的响应因子及保留 / 迁移时间，您也可选择对多个校准运行后得出的响应因子进行平均，以使响应因子加权相同。

为什么要再校准？

由于色谱的变化，大多数的校准都具有有限的寿命。重新校准对维持分析的精确度很有必要。例如，当需要对包含咖啡因的样品进行定量时，假定您已经为所使用的化合物咖啡因创建了校准表。有时需要更换层析柱 / 毛细管。尽管更换的层析柱 / 毛细管的型号完全相同，但并不能保证更换后的层析柱 / 毛细管与第一次建立咖啡因校准表时的层析柱 / 毛细管行为完全一致。因此，在使用新的层析柱 / 毛细管分析所含咖啡因量未知的样品时，为保证一致性，必须对校准表中的级别进行再校准。这样做可以确保在相同的系统条件下对分析的样品进行定量。

手动重新校正

您可以在“新校正表”对话框中使用“手动设定”选项按钮来手动输入峰校正信息并且归一化校正表。通常，通过运行一个校正标准混合物，创建一个校正表并输入所有被校正峰的含量以获得响应因子来产生一个新的校正方法。这样做对某些应用来说可能效率会很低，在石化行业种的应用就是一个例子，在这些应用中，同样的化合物已被分析了许多年并且各种化合物和检测器的响应因子都是现成的。

您可以通过在校正表中输入峰和它们的响应因子，使用含有至少一个响应参考峰的标准对方法进行重新校正，并选择偏差百分比更新来手动创建校正表。

要参考特定峰来计算保留时间比，可以将此峰设置为保留时间比参比峰。然后，所有 RT 比参考号相同的峰都将参考此峰。

使用峰加和的再校准

执行重新校准时，将在进行实际重新校准之前更新方法的“峰加和表”中的保留 / 迁移时间范围。以此方式执行峰加和重新校准可以确保将偏差应用到时间计算中。

再校正的方法

在 ChemStation 软件中，有两种重新校正方式。您可以在自动分析序列中进行交互式重新校正或自动重新校正。交互式重新校正是在进样一个或多个校正样品后，用 ChemStation 软件直接进行重新校正过程。自动校正使用一个序列，在序列中指定重新校正发生的时间，软件会自动进行重新校正。有关更多信息，请参阅“第 87 页的自动重新校正”。

有关如何使用该软件执行重新校正的信息，请参阅帮助系统的“方法”部分。

未确认峰的重新校正

可以通过三种方式对未确认峰进行重新校正。

“无需重新校正”

如果校正表中有一个峰在积分结果中不能被识别，校正将被中断。如果这种情况发生在序列中，则序列也同样被中断。

“部分重新校正”

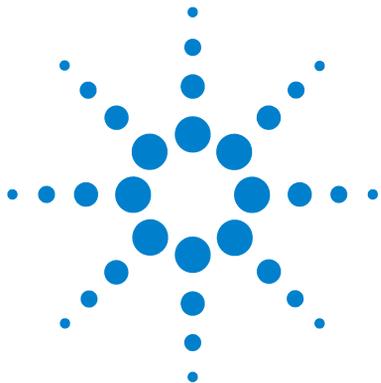
此方式仅适用于已识别峰的重新校正。如果峰丢失，校正不会中断，但报告中会标注峰丢失。

“所有保留 / 迁移时间的重新校准”

该方法通过使用已知峰的保留 / 迁移时间，可对所有已知峰或未确认峰的保留时间 / 迁移时间进行再校正，对于未识别出的峰，没有更新的响应因子。

7 校正

重新校正



8 报告

报告是什么?	140
经典和智能报告	141
智能报告	142
智能报告的优势	142
用于智能报告的报告模板编辑器 (RTE)	142
报告模板的存储	145
已生成报告的存储	147
中央数据存储中的报告模板	148
经典报告	149
报告结果	149
定量结果	150
报告自定义字段值	150
报告类型	151
其他报告样式参数	152
序列总结报告	153
报告文件格式	156

本章介绍了智能报告和经典报告的概念。



报告是什么？

报告包括所分析样品的定量和定性的信息。报告可以直接打印、在屏幕上显示，或作为电子文件保存起来。报告可包括运行中所测峰的信息及所采集的信号图。

用途各异的报告

您可以在数据采集期间和数据查看期间指定具有不同用途的报告：

- **序列总结报告** 是在“**序列参数**”对话框的“**序列输出**”选项卡中定义的。此报告由 ChemStation 在完成序列采集或序列重新处理操作之后自动创建。
- **单次进样报告** 是在“**指定报告**”对话框中定义的。此报告是在序列采集或序列重新处理期间为单个样品创建的。

利用智能报告，您可以为不同的报告类型创建模板，具体取决于报告的用途。有关详细信息，请参见“[第 142 页的报告类型](#)”。

报告目标

可将报告发送至下列目标：

- “**屏幕**”
报告（包括文本和图形）显示在报告预览窗口中的屏幕上，并且可以从该屏幕进行打印。
- “**打印机**”
将含有文本及图形的报告在当前所选的打印机上打印出来。
- “**文件**”
报告将保存到文件中，例如 Adobe PDF 文件。

经典和智能报告

经典和智能报告

使用 Agilent OpenLAB CDS，可以选择要使用的报告类型：在以前的 ChemStation 版本中使用的**经典报告**，或者提供强大的标准化报告定义语言和改进的查看功能的**智能报告**。以下各节介绍了两种类型的报告。

激活智能报告的结果

如果您要使用智能报告，则需要在 OpenLAB 控制面板的“仪器配置”中启用智能报告。

激活智能报告会对 ChemStation 产生下列影响：

- “**报告布局**”视图显示用于智能报告的报告模板编辑器。
- “**查看**”视图显示。
- 在“**序列参数**”对话框中，您可以在经典报告和智能报告之间进行选择。
- 在“**指定报告**”对话框中，您可以在经典报告和智能报告之间进行选择。

智能报告

智能报告的优势

智能报告具有如下优点：

- 可以使用“查看”视图。
- 经典报告中的一些设置和一些对话框中可用的多数功能现已成为报告模板的一部分。您可以使用“报告版面设计”视图（它包含适用于智能报告的新“报告模板编辑器”）创建或编辑报告模板。报告模板编辑器具有多种强大功能：
 - 通过选择对应的数据字段，访问 ChemStation 生成的所有结果数据。
 - 为了能够使用数据字段进行计算，您可以创建自己的表达式。可以使用所有有效的 Microsoft Visual Basic 表达式。
 - 在使用 ChemStation 自定义字段进行计算的地方创建表达式。
 - 结果标记：您可以为高亮显示的特定结果根据其值来创建表达式。
 - 页面摘要：报告模板编辑器提供预配置的报告项目，即所谓的《页面摘要》，您可以通过拖放操作将其插入到报告模板中。
- 您可以使用报告模板文档工具来创建报告模板说明。
- 您可以报告《欧洲药典》定义的以下值（峰谷比也可用于经典报告；如需必填字段的详细信息，请参阅《《参考指南》》）：
 - 信噪比
 - 相对保留值
 - 相对保留时间

用于智能报告的报告模板编辑器（RTE）

报告类型

您可以创建不同类型的报告。根据报告类型，报告模板中提供不同的数据字段，并且将以不同的方式为报告条目分组。

可用的报告类型包括

- “ 单次进样 ”

生成的报告针对当前数据范围的每次进样单独显示模板中的报告条目。您可以按进样显示数据，但无法将一个表或矩阵中不同进样的结果进行比较。

- “ 单个序列总结 ”

生成的报告针对当前数据范围中的每个序列单独显示模板中的报告条目。您可以将一个表或矩阵中不同进样的结果进行比较，但不能比较不同序列的结果。

- “ 交叉序列总结 ”

使用此报告类型，不会自动对数据进行分组。因此，您必须更加关注报告条目的分组，但却会因此而能够创建报告条目来对不同序列中的数据进行比较。

模板格式

所有报告模板均基于报告定义语言 (RDL)，该语言是 Microsoft 提供的标准化 XML 格式。

要创建报告模板，您可以使用报告模板编辑器 (RTE) 或 Microsoft SQL Server Business Intelligence Development Studio (BI Studio)：

- RTE 提供了易于使用的界面来帮助您通过几个步骤创建报告模板。它支持所有类型的报告条目以及大多数相应的配置选项。

使用 RTE，您无法编辑使用 BI Studio 创建的模板。如果您需要在 RTE 中编辑此类模板，请询问 Agilent 客户服务部门。

- BI Studio 提供了全套的功能。但是，如果要使用 BI Studio，要求具备模板开发的高级知识。有关更多信息，请参见《《G4635-90007 报告模板设计手册》》。本手册附带 OpenLAB ECM 智能报告工具。请与 Agilent 联系以获取本手册的副本。本手册还详细介绍了随 OpenLAB ECM 智能报告工具一起提供的 Agilent 报告模板。这些模板是专门为了在 BI Studio 中使用而设计的，包含 RTE 所不包含的大多数高级功能。

在 BI Studio 中，您可以编辑任何报告模板，无论该模板是使用 RTE 创建的还是使用 BI Studio 创建的。

数据字段

您可以访问 ChemStation 在采集期间生成的所有结果数据。对于每个值，您可以选择用于存储该值的相应数据字段。您可以根据自己的要求排列报告模板中的数据字段。可用的数据字段分为以下类别：

- 序列
- 样品
- 进样
- 信号
- 化合物
- 峰
- 校正曲线
- 仪器
- 文件
- 项目

报告条目

您可以向报告模板中添加各种报告条目，具体取决于您的要求。对于每个报告条目，您可以配置多项属性，如字体格式、背景颜色、表达式，等等。可用的报告条目包括：

- 文本字段
- 数据字段
- 表格
- 矩阵
- 合成组
- 图像
- 色谱图
- 校正曲线
- 光谱
- 图表
- 方法信息

页面摘要

报告模板编辑器提供页面摘要、多个预先配置的报告条目或报告条目组，您可以通过拖放操作将其插入到报告模板中。

这些页面摘要可以是诸如以下项：用于确保化合物结果或系统适用性的预配置表、用于单信号图或多信号图的色谱图，或者用于确保校正准确性或保留时间稳定性的控制图表。您可以使用页面摘要作为起始点并根据您的要求调整它们。

自定义计算

在报告模板编辑器中，您可以显示由 ChemStation 生成的数据字段值，也可以针对不同的用途计算新值。您可以使用现有的数据字段创建表达式，也可以使用自定义字段创建。

您可以将值存储为变量并从模板中的后续报告条目访问这些变量。

报告模板编辑器提供了表达式编辑器来帮助您创建有效的表达式。所有表达式都基于 Microsoft Visual Basic。

条件格式

您可以为字段或单元配置某些特定属性，具体取决于表达式的值。例如，如果显示化合物含量，则您可以在该含量超过某个特定值时创建红色背景条件。

演示数据

在“报告布局”视图中开发新的报告模板时，ChemStation 会提供当您编辑或预览模板时显示在报告模板编辑器中的演示数据。演示数据与当前在“数据分析”视图的导航表中选择的数据集（序列或单次运行）相对应。如果您为序列总结报告开发模板，则需要先在“数据分析”视图中调用一个序列并选择一部分样品。如果您为单次进样报告开发模板，则当您在数据分析视图中仅选择一个样品时，就够该模板使用了。

报告模板的存储

ChemStation 提供了多个预定义的报告模板。这些默认模板位于目录 `chem32\repstyle` 中。

对于序列，用于序列总结报告和单次进样报告的报告模板在结果集中与序列方法位于同一级别上。序列的数据文件级别未存储任何报告模板。

对于单个样品，报告模板位于数据文件中。

浏览模板对话框

如果您在“序列参数”对话框或“指定报告”对话框中浏览报告模板，则可以将默认模板目录中的模板与结果集中的模板同步。

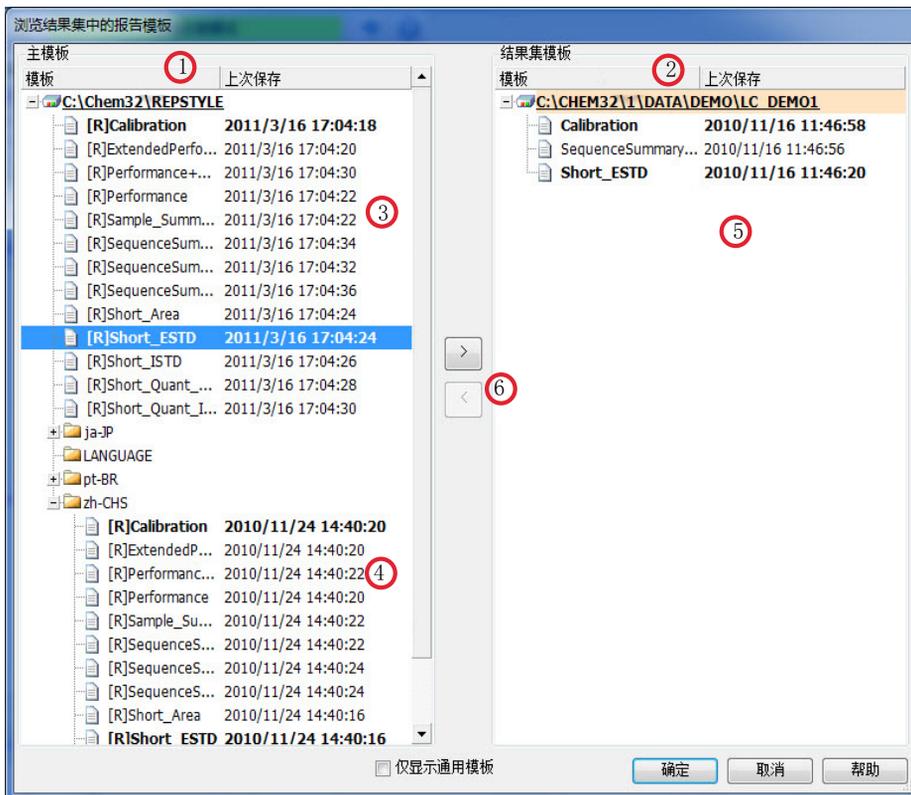


图 36 “浏览结果集中的报告模板”对话框

- 1 在左侧，您会看到默认模板目录（chem32/repstyle）中的模板。
- 2 在右侧，您会看到当前调用的结果集中的模板。
- 3 对于每个模板，您会看到上次保存该模板的日期。日期的工具提示显示模板的上一历史记录条目。
- 4 模板也可以存储在 chem32/repstyle 的子文件夹中。
- 5 结果集和默认方法目录的共有模板以粗体显示。模板仅按名称匹配。

- 6 您可以通过使用拖放操作或通过使用 > 按钮，将模板从默认模板目录复制到结果集。

专有文件夹创建关闭时的数据文件管理

使用“专有文件夹创建关闭”选项时，始终会从默认模板目录（chem32\repstyle）引用序列总结报告和单次进样报告的模板。

已生成报告的存储

单次进样报告的文件命名

在“指定报告”对话框中为单次进样报告提供文件名时，可以使用下列字段：

- <Date> 当前日期
- <Time> 当前时间
- <SeqN> 序列文件名（对于单个样品，将为“_”）
- <Cont> 结果集的名称（对于单个样品，将为“_”）
- <SamN> 样品名称
- <Lims> LimsID
- <InjD> 进样日期和时间
- <File> 数据文件名
- <SLoc> 样品位置

序列总结报告的文件命名

当您在“序列参数”对话框的“序列输出”选项卡中为序列总结报告提供文件名时，可以使用下列字段：

- <Date> 当前日期
- <Time> 当前时间
- <SeqN> 序列文件名
- <Cont> 结果集的名称

中央数据存储中的报告模板

如果您使用中央数据存储系统，则会将报告模板视为独立的文档类型。您可以将模板上传到中央数据存储、从中央数据存储下载模板，或使用中央数据存储中的最新版本更新所有本地报告模板。

经典报告

报告结果

可有两种类型的报告：

- 未校准检测器响应情况的未校准报告，
- 样品各组成部分的不同响应已校准的校准报告。

未校正报告

未校正报告包括“峰面积百分比”报告和“峰高百分比”报告。一般情况下这些报告为校正报告作准备。当化合物的含量与其所产生单位面积或峰高一致的话，则该报告为最终报告。

校正报告

校准报告校准了检测器针对不同的化合物响应的差异，未知样品必须与校准样品的运行条件相同。用校准样品的积分数据可建立校准表。这是生成报告时所用的保留 / 迁移时间、含量、响应因子的列表。校准报告以内标和外标这两种校准方法为基础。

外标法报告

外标法报告以用户所选单位列出结果，或以各化合物占全部化合物中的百分比来列出结果。外标法要求对标准样与未知样的相对进样体积有精确了解。外标法的可靠性受不同样品的各种可变因素及进样重复性的限制。

内标法报告

外标法的局限性可用内标法来克服。将已知量的内标物（不必是相同量）加入标准样及未知样中，各化合物的响应值除以内标物的响应值，得到响应率。以响应率与含量之比所作的校准曲线可用于报告结果的计算，用这种方法，可消除同样影响所有化合物的进样体积的疏忽错误及色谱图 / 电泳图谱系统中的微小更改。内标法报告所列结果的单位由用户所定。

控制图表报告

控制图表报告对已校正的特定化合物多次运行后的单一结果进行跟踪。“控制图表”功能在 ChemStation 运行后安装。使用该功能的方法在每次运行后将跟踪的结果传递到 Microsoft Excel 工作表中。随后，此功能将使用 Excel 打印报告。

定量结果

报告类型可通过所用计算方法的名称来标识，例如，内标法报告。各种形式简单说明如下。有关每种报告的计算，“第 150 页的定量结果”中已给出。

“面积百分比”是最简单的报告类型，它无需数据校准，因为不对样品组分的检测器响应差异进行修正。在生成与其他报告选项一起使用的校准表时，面积百分比特别有用。这种类型适用于样品组分的检测器响应无明显不同的分析。

“峰高百分比”报告类似于面积百分比报告，只不过它计算的是峰高而不是峰面积。

“归一化法”报告中，以各组分占有所有组分的百分比来报告组分。在计算百分比之前，用检测器响应因子对峰进行修正。

“外标法”以用户选择的单位生成每种物质的实际含量的报告。实际含量由预先建立的校准表来计算。使用外标法必须知道标准样的进样量。

“外标百分比”生成的报告反映每种物质的相对含量占进样样品的百分比。实际含量由预先建立的校准表来计算。使用外标法必须知道标准样的进样量。

“ISTD”生成每种物质的实际含量的报告。用已有校准曲线计算组分含量。在分析样和标准混合物中使用内标法时，不必考虑进样体量多少，而且可以对运行中的仪器变化进行修正。

“内标百分比法”生成的报告反映每种物质的相对含量占进样样品的百分比。在分析样和校准混合物中使用内标法时，不必考虑进样体量多少，而且可以对运行中的仪器变化进行修正。

报告自定义字段值

可将采集方法附加到样品的自定义字段的值添加到报告中。样品自定义字段列于包含常用样品信息的报告表头的结尾处。化合物自定义字段显示在报告结尾处。

报告类型

通过选中“指定报告”对话框中适当的框，可以向任何报告类型添加信号。

可用的报告类型包括：

- “无” - 无文本报告。只有选择了“添加色谱图输出”选项，才会报告色谱图。
- “简短” - 包括所有积分信号的定量文本结果，这些信号在“信号细节”对话框（仅限 LC）或在“信号”对话框（仅限 GC）中设置。在简短报告中，峰宽是积分仪使用较复杂的公式计算得到的： $PW = 0.3(IPRight - ILeft) + 0.7(Area/Height)$ ，其中 PW 为峰宽，Area 为峰面积，Height 为峰高，IPRight 和 ILeft 为拐点。
- “详细” - 包括标题、定量结果和校正曲线。表头存储在方法目录中名为 RPTHEAD.TXT 的文件中。您可以使用文本编辑器更改表头以包含针对某方法的文本。
- “表头” + “简短” - 包括文件表头及定量文本结果。表头存储在方法目录中名为 RPTHEAD.TXT 的文件中。您可以使用文本编辑器更改表头以包含针对某方法的文本。
- “GLP” + “简短” - 包括表头、样品信息、仪器条件、工作日志、信号及定量结果。表头存储在方法目录中名为 RPTHEAD.TXT 的文件中。您可以使用文本编辑器更改表头以包含针对某方法的文本。
- “GLP” + “详细” - 包括表头、样品信息、仪器条件、工作日志、信号、定量结果及校正曲线。表头存储在方法目录中名为 RPTHEAD.TXT 的文件中。您可以使用文本编辑器更改表头以包含针对某方法的文本。
- “全部” - 包括表头、样品信息、仪器条件、工作日志、信号及定量结果。表头存储在方法目录中名为 RPTHEAD.TXT 的文件中。您可以使用文本编辑器更改表头以包含针对某方法的文本。
- “性能” - 根据“系统适用性”菜单的“编辑性能极限值”对话框所指定的极限值生成报告。

对于未校正的方法，报告参数包括峰编号、保留 / 迁移时间、峰面积、峰高、信号描述、半值幅（请参见参考指南中的《实际峰宽 $W_x [min]$ 》）、对称因子、 k' 、柱效（塔板数）和分离度。

对于校正的方法，报告参数包括峰编号、保留 / 迁移时间、化合物名称、含量、信号描述、半值幅、对称因子、 k' 、柱效（塔板数）和分离度。

半峰高计算与积分仪使用的较复杂的峰宽公式不同。柱效和分离度值以此处计算出来的峰宽为基础。报告标题包含所有的方法相关信息，包括仪器、柱/毛细管柱、样品及采集参数。信号图也包含在内。

- “性能” + “噪音” - 将“性能”报告格式与“系统适用性”菜单中的“编辑噪音范围”对话框所定义的噪音范围的噪音计算结合起来。此外，噪声以六倍于标准偏差、峰-峰以及 ASTM 噪声等形式给出。漂移和波动同样已确定。
- “性能” + “扩展” - 生成扩展报告，包括峰性能计算的所有参数以及每个峰的各个图。图包括基线、切线和指定峰高处的峰宽。这种报告类型仅包含校正峰。

除了为“性能”报告格式打印的参数外，还可以确定更多的峰性能参数：峰开始时间和结束时间、斜峰、剩余峰、峰宽、USP 拖尾因子、数据点间的时间间隔、数据点数、统计要素、塔板数、每米塔板数、峰的选择性及分离度都将打印出来。峰宽、塔板数、每米塔板数、选择性及分离度均可通过实际半峰高、 5σ 、切线和拖尾方法来计算（有关详细信息，请参阅参考指南中的《性能测试定义》）。

报告标题包含所有与方法相关信息，如仪器、柱/毛细管柱、样品、采集参数及信号图。有关峰性能参数算法的完整列表，请参见参考指南中的《性能测试定义》以获取详细信息。

光谱报告格式（“简短” + “光谱”、“详细” + “光谱”、“性能” + “谱库检索”）在了解您的光谱模块 中有说明。

在报告格式中添加自定义的报告

您可以将在 ChemStation 的“报告版面”视图中创建的自定义报告模板添加到可用报告格式列表中。

注意

除了性能报告以外，所有报告都列出了积分器使用较复杂的公式计算出来的峰宽（有关峰宽计算的详细信息，请参见参考指南中的《峰宽》）。

其他报告样式参数

峰加和表

峰加和表专为石化和制药行业的某些特定应用程序而设计，可通过以下功能提高这些应用程序的性能：

- 将落在一个用户设定范围内的峰的面积加和。
- 将某个范围内峰的面积加和，并使用单个乘积因子来计算。
- 对所有具有相同名称的峰的面积进行加和

生成报告时，ChemStation 使用峰加和表建立一个峰加和报告，报告印在标准的报告之后，只有归一化报告中用峰加和报告代替标准报告计算。

未校准峰的报告格式

要更改未校准峰的报告格式，请在“设定报告”对话框中选择以下内容之一。

- 如果选定以保留 / 迁移时间排序，将单独在一个表中报告未校准峰，如果选定以信号排序，将在几个独立的表中报告未校准峰。
- 选择“与校准过的峰一起”，将未校准峰与校准峰一起报告。
- 选择“不报告”，将禁止报告未校准峰。

序列总结报告

概述

ChemStation 可以打印多种标准报告，以用于各种样品分析。序列总结报告是报告的另外一种方式，可以计算并报告许多不同分析的参数。这一方法很有用，例如，可用于检测仪器的稳定性及新方法的适用性。

序列总结报告可以包括：

- 标题页；
- 仪器配置，包括仪器版本号及所用分析柱 / 毛细管的详细情况；
- 序列表，说明进行哪些序列自动分析；
- 工作日志，说明序列实际运行情况以及序列中发生的意外事件；
- 方法列表；
- 每个样品的独立报告；
- 基于选定标准对分析进行统计，仅对校正化合物进行统计计算；
- 目录表，包含指向报告详细介绍部分的页码参考。

设置序列总结报告

设置序列总结报告时，您可以选择以下九种类别的任意组合，方法是：激活相应的复选框，再从模板选项中选择报告类型（如果适用）。每个模板均指定了该特定部分在整个序列总结报告中的内容和布局。

您可以选择下列序列总结报告类型之一：

“ 页眉 ”

GLP 模板用大号字母打印 GLP 作为报告的标题页。它还包括日期及签名位置。

“ 配置 ”

如果要在报告中包括仪器配置及分析柱 / 毛细管说明，请选择 “ 配置 ”。

“ 序列表 ”

如果要在报告中包括样品、样品定量参数及方法名称的列表，请选择 “ 序列表 ”。该列表显示系统应该运行的内容。

“ 工作日志 ”

如果需要系统运行的各种分析的列表，包括仪器的运行状况及样品分析过程中发生的各种意外情况，请选择 “ 工作日志 ”。

“ 方法 ”

如果要列出自动分析系列所使用的所有分析方法，请选择 “ 方法 ”。

“ 分析报告 ”

若要根据为方法设置的报告格式生成各个分析报告，请选择 “ 分析报告 ”。

完成每次分析后，可根据为相关方法指定的报告格式打印各个分析报告，以及在 “ 序列总结报告 ” 中指定的报告部分。请参见下面的 “ 序列输出 ”。

“SUILabel 类型 = 应用程序 > 校正运行和样品运行的统计 ”

选择 “ 统计标准样品 ” 将为校正样品生成统计趋势分析。选择 “ 统计分析样品 ” 将生成样品（未知）分析的统计趋势分析。这两个选项均包含 “ 标准统计 ” 和 “ 扩展统计 ” 两种模板格式。“ 扩展统计 ” 以图形方式打印分析

统计趋势，而“标准统计”选项仅打印文本。只有在“序列总结参数”对话框中选择“扩展统计”选项时，才会使用您在“扩展统计中的项目和限量”对话框中所选的选项。

如果在“序列总结参数”对话框中选择“标准统计”选项，则报告的统计项目包括：

- 保留 / 迁移时间；
- 峰面积；
- 峰高；
- 含量；
- 峰宽（取决于报告格式，请参见“第 151 页的报告类型”）
- 对称因子。

当使用多级校正方法时，统计计算不区分序列中的不同校正级别。这意味着，与浓度有关的各项，如面积、峰高、含量（请参见“扩展统计中的项目和限量”对话框）等，都发挥同样的作用，而不考虑校正级别。因此，对于序列中的多级校正方法，“校正运行统计”值是没有用的。

总结

选择“总结”将打印所分析样品系列及所用方法的概述。如果同时选择“总结”选项和其他序列总结选项，则还将包括指向序列总结报告的其他部分的页码。有两种总结格式：

“样品总结”以表格方式列出序列中运行的样品分析的详细内容，以及样品名称、数据文件名、方法及样品瓶号等样品信息。

“化合物总结”以表格形式列出含有各校正化合物或各峰（取决于在方法中指定的报告类型）的基本定量结果的样品分析情况。

序列输出

在“序列输出”对话框中，您可以定义应将序列总结报告打印至何处。

选择“输出到文件”并输入文件名可以将报告打印到指定文件。缺省设置下，数据被保存到 GLPrprt.txt 文件。在双进样的 GC 系统中，数据保存在 GLPrptF.txt 和 GLPrptB.txt 中，以分别用于前进样器和后进样器。

选择“以 PDF 格式输出”可将报告另存为 PDF 文档。报告将命名为 CLPrprt.PDF，并保存在序列文件夹中。

选择“以 HTML 格式输出”将以 HTML 格式打印报告。报告将保存在“序列参数”中所指定的数据目录中的 HTML 目录下。HTML 报告包括一个索引文件 (index.htm) 和至少两个其他文件，即内容文件 (contents.htm) 和每页报告上的 GIF (图形交换格式) 文件 (例如 page1.gif)。若要查看 HTML 报告，请使用浏览器打开索引文件。

选择“输出到打印机”将在系统的打印机上打印报告。打印每次运行的各个报告时，还将激活在每次分析后打印样品报告的功能。在整个序列结束时，除了打印为序列总结报告指定的报告外，还将打印这些样品报告。您可以在“序列输出”对话框中为这些报告指定新的输出方式，也可以使用在各个方法中指定的输出方式。

报告文件格式

可以将报告保存为不同的格式。每种格式均有特定的扩展名。一个报告可以选择多种格式。

- .TXT 报告文本将作为 UNICODE 文本文件打印。
- .EMF 报告的图 (信号或校正曲线) 用 Microsoft Windows 图元文件 (WMF) 格式保存，一个报告可以有多个 .WMF 文件。生成的文件格式符合 Windows 软件开发文档所定义的 Microsoft 标准图元文件格式。这些文件与众多专有软件包所使用的 Aldus Placeable Metafile (APM) 格式兼容。
- .DIF 表格式报告数据以数据交换格式 (DIF) 保存。该格式可用于 Microsoft Windows EXCEL 等电子表格程序。只有“简短”报告类型中包含的信息才会被保存，与所选报告类型无关。
- .CSV 报告格式为逗号分隔值 (CSV) 格式。这是一种非常简单的表格式数据格式，这种格式可用于通用程序和数据库。只有“简短”报告样式中包含的信息才会被保存，与所选报告样式无关。

一个报告可以有多个 .DIF 和 .CSV 文件。对每个报告而言，第一个文件 (例如 REPORT00.CSV) 均包含报告的表头信息。随后的文件包含有表格式结果。

若结果按保留 / 迁移时间分类，则整个表中只有一个文件，例如 REPORT01.CSV。

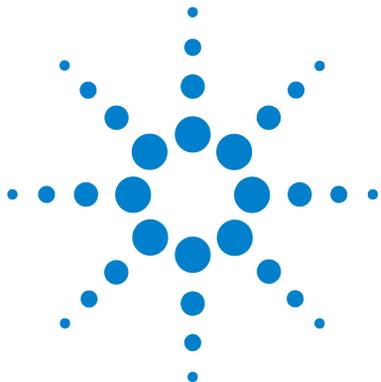
如果结果按信号排序，则每个信号需要一个单独的表。在这种情况下，文件被命名为 Report01.CSV 到 ReportNN.CSV，其中 NN 为信号编号。

- .XLS 报告以 (XLS) 格式输出到 Microsoft Excel 电子表格中。通常需要对数据进行另行处理。

- . PDF 将报告打印为 pdf 文件。ChemStation 设置安装了称为“PDF-XChange 4.0”的 PDF 打印机。仅在重新启动计算机前，才能在“开始”菜单/“设置”/“打印机和传真”中看见该打印机。启动 ChemStation 后，将根据 PDF-XChange 打印机创建另一个名为“ChemStation PDF”的临时打印机。在运行任何 ChemStation 会话时，“ChemStation PDF”都将列在“开始”菜单/“设置”/“打印机和传真”中。“专有 pdf 文件名”选项允许以文件名 <序列容器名称>_<数据文件名称>.pdf 存储独立于报告的 .pdf 报告。

8 报告

经典报告



9

CE 特有的概念和功能

方法和运行控制视图中的 CE Agilent ChemStation 特定功能 160

瓶表 160

方法冲突表 161

序列冲突表 161

方法仿真 162

峰顶类型 163

校正类型 164

基于迁移时间的校正 164

使用迁移率修正进行校正 164

CE-MSD 165

背景扣除 165

适用于不同 CE 模式的方法子目录 166

本章只与使用 ChemStation 控制 CE 仪器有关。



方法和运行控制视图中的 CE Agilent ChemStation 特定功能

瓶表

注意

“瓶表”功能仅在 ChemStation 联机会话中才可用。

“瓶表”是一个表格，它将瓶盘中的瓶与样品关联起来，更重要的是与任务专用瓶（例如缓冲瓶、冲洗瓶、试管清洁瓶和废液瓶）关联起来。“瓶表”已链接至序列表。调用序列时，序列表中的信息将被复制到瓶表中。但是，瓶表条目不会传回序列表中。在“瓶表”中选择“高级”按钮后将显示“瓶表高级设置”对话框。通过该对话框，可以启用“瓶表”和方法或序列之间的冲突警告，以及使用符号名称。您必须选择“启用瓶表检查和警告”以检查“瓶表”与方法或序列之间有无冲突。

调用方法或序列时，将会检查“瓶表”中的瓶分配与方法或序列中的瓶分配是否一致。如果存在任何瓶冲突，您可以使用“冲突”表将其轻松解决。

注意

瓶盘中的位置 49 用于针清洗瓶，位置 50 保留为空以允许返回瓶提升。这些位置在“瓶表”中不可用。

可以使用瓶表的“使用位置”列来支持使用要指定的瓶。“使用位置”字段有五个有效条目：

忽略 未进行一致性检查

方法 方法中引用该瓶

序列 序列表中引用该瓶

系统 这是属于系统配置的一个特殊瓶。“名称”必须是以下符号名称之一：

- “@INLET” 进样口瓶
- “@OUTLET” 出口瓶
- “@FLUSH” 冲洗瓶

- “@WASTE” 废液瓶
- “@clean tubes” 试管清洁瓶
- “@USER X”（其中 X 可以从 1 到 10）序列占位符

使用该选项可以为方法中使用的符号名称指定各自的瓶编号。这使用户可以为序列中每一行的“进样口复位”、“出口复位”、“辅助”、“预处理”、“后处理”等指定不同的瓶。

未使用 在该位置没有瓶

方法冲突表

当调用的方法中定义的瓶与瓶表中定义的瓶存在冲突时，将显示“方法冲突表”。“方法冲突表”分为两部分：左半部分包含“瓶表”的图像；右半部分显示冲突的瓶。

要解决冲突，您可以选择替换（单箭头），或将方法中的瓶移动到“瓶表”中的下一个空闲位置（双箭头）。可以对表中每个冲突的瓶执行此操作。

使用用户定义的瓶（具有符号名称 @User1、@User2 等）时，无法对这些瓶进行冲突测试，因为没有序列信息，将无法确定是否存在冲突。

序列冲突表

设置或调用的序列中定义的瓶与瓶表中定义的瓶存在冲突时，将显示“序列冲突表”。“序列冲突表”分为两部分：左半部分包含“瓶表”的图像；右半部分显示冲突的瓶。

要解决冲突，您可以选择使用“序列表”中的信息覆盖“瓶表”信息，但是如果冲突是由系统条目引起的，则不能覆盖瓶表信息。您可以选择不解决冲突而关闭“序列冲突表”。

使用用户定义的瓶（位于“User1”、“User2”等列中）时，则无法对这些瓶进行冲突测试，因为没有方法信息，将无法确定是否存在冲突。

9 CE 特有的概念和功能

方法和运行控制视图中的 CE Agilent ChemStation 特定功能

方法仿真

可以使用仿真功能来检查方法。在仿真期间，简图将反映方法中会执行的操作，即方法中指定的瓶将显示在提升器中，应用的功率和电压将按实际运行期间的状态显示。仿真所需时间少于运行分析所需的时间，每个步骤大约需要 3 秒。步骤通过 CE 结构图中的变化来定义。

要启动仿真，请调用要仿真的方法，然后从“**仪器**”菜单中选择“**仿真**”。

峰顶类型

与 LC、GC 或 MS 峰不同，CE 峰通常是不对称的。因此，具备选择积分参数的能力非常重要，这些积分参数将在定量结果中产生最高级别的准确性和重现性。

选择“积分”下拉菜单中的“峰顶类型”时，以下峰顶类型可用：

最高点

- 当峰为三角形时选择此项，以及
- 使用不同浓度时选择此项

线性内插

- 当峰为拖尾峰、未分离峰时使用

重心

- 为三角形的峰提供更精确的计算
- 具有相似浓度的样品

高斯拟和

- 当峰为对称峰时使用

校正类型

基于迁移时间的校正

在序列中使用基于迁移时间的校正

序列中可以包含基于迁移时间的校正和重新校正，但是仅支持简明校正和循环重新校正；不支持区间循环重新校正。基于迁移时间的校正没有序列总结报告。

基于迁移时间的校正报告格式

基于迁移时间校正可用的报告格式被限制为“**短报告**”（定量文本结果）和“**完整报告**”（表头、样品信息、仪器条件、日志、定量结果和峰纯度图）。

使用迁移率修正进行校正

缓冲液组成、运行温度或粘度以及毛细管壁吸附的轻微变化将影响电渗流（EOF）并使其不稳定。由此而导致的 EOF 变化可能会使迁移时间的标准偏差变得相当高。通过监测迁移率参考峰的迁移时间并依次显著增加迁移时间的重现性，迁移率校正可以显著降低因运行之间的迁移时间发生改变而产生的影响。

应按以下优先级选择迁移率参考峰：

- 选择具有最大信号的峰
- 选择最孤立的峰
- EOF 标记或内标也可以用作迁移率参考峰
- 放大检索窗口，以便随时查找迁移率参考峰
- 如果有多个峰落在检索窗口中，则自动选择具有最大信号的峰作为迁移率参考峰。

有两种迁移率修正类型：

有效迁移率修正 “有效迁移率修正”使用所有峰的有效迁移率，并要求电压阶升数据和电泳图谱均可使用。此外，使用有效迁移率修正还可以确定所有样品组分的实际有效迁移率。

相对迁移率修正 “相对迁移率修正”可以在缺少电压数据时为所有检测假定一个恒定电压。

CE-MSD

背景扣除

如果您选择了“扣除背景” (BSB) 菜单项，则将从当前电泳图谱的每一个点中扣除最近选择的质谱图。结果数据将与原始数据文件使用相同的名称并保存在同一个目录中；但文件扩展名将改为 .BSB。

新的数据文件将成为当前的数据文件，并显示扣除背景的电泳图谱。已执行背景扣除的数目记录将保存在数据文件表头的“操作者”项中。

如果您查看 BSB 数据的表格式列表，可能会注意到由于数据表示的精度不同而造成的 BSB 数据的差异。

注意

LC/MSD 中的 HELP 文本文件仅引用 LC 参数，而不引用 CE 参数。LC/MSD 软件中的某些可用功能在 CE/MSD 应用程序中不可用或不适用，但是可以在 LC 中使用。“峰匹配”功能不适用于 CE-MS，因此未处于激活状态。在 CE-MS 中，紫外和 MS 检测在分离毛细管的不同有效长度处进行。由于不同有效长度处的分辨率不同，因此不能进行峰匹配。

适用于不同 CE 模式的方法子目录

CE 中的方法取决于选定的 CE 模式。因此，它们存储在方法子目录的不同子目录中：

- CE** 存储适用于 CE 模式的方法
- CEC** 存储适用于 CEC 模式的方法
- CEp** 存储适用于增强型 CE 压力模式的方法
- CEMS** 存储适用于 CE MS 模式的方法。
- CEMSp** 存储适用于增强型 CE MS 压力模式的方法。

索引

- A**
- ACAML 121
 - ACQ. TXT 28
- B**
- 报告模板
 - 报告格式 122
 - BI Studio 143
 - Business Intelligence Development Studio 143
- C**
- 参比信号 22
 - 参比数据文件 113
 - 参考数据文件 70
 - CDS 8
 - ChemStation 8
 - 自定义 21
 - 重新处理 28, 80, 114
- D**
- Da. M 28, 46, 113
 - Data Store 8, 11
 - DOC 122
- E**
- ECM 8, 11
 - ELN 8
 - EZChrom 8
- G**
- GLPSave. Reg 45
 - 与方法一起保存 45
- J**
- 简易序列 62
 - 接管会话 10
 - 接管远程会话 10
- K**
- 空白样品 70
- M**
- 名称模式 66
- O**
- 欧洲药典 22, 70, 74, 113, 142
- P**
- PDF 122, 122
 - 配置 12
- R**
- RDL 143
 - RTE 143
 - 软件概述
 - 系统配置 12
- S**
- 首选项 66, 78
- T**
- TXT 122
- V**
- Visual Basic 142, 145
- X**
- 信噪比 70, 74, 113
 - XLS 122, 122
 - 序列参数 59, 115
 - 序列
 - 重新处理 114
 - 设置 62
- Z**
- 中央数据存储 11
 - 自动分析 21, 55
- 保**
- 保存 GLP 数据 45
 - 保留时间
 - 重新校正 137
- 报**
- 报告 20, 32, 121
 - 单次进样 140
 - 结果标记 142
 - 经典或智能? 141

索引

- 类型 151
 - 目标 140
 - 是什么? 140
 - 文件名 147
 - 序列总结 140
 - 自定义字段 142
 - 报告查看器 117
 - 报告类型
 - 单次进样 143
 - 单个序列 143
 - 交叉序列 143
 - 报告模板
 - 报告条目 144
 - 存储 145
 - 格式 143
 - 浏览 146
 - 默认 122
 - 条件格式 145
 - 页面摘要 142, 145
 - 自定义计算 145
 - 报告模板编辑器 143
 - 报告条目 144
 - 报告预览 122
- ## 表
- 表达式 142, 145
- ## 部
- 部分序列
 - 结果集选择 71
 - 序列行 73
 - 部分重新校正 137
- ## 采
- 采集参数 28
- ## 查
- 查看 121
- ## 待
- 待机状态 86
- ## 单
- 单次进样报告 143
 - 单个序列报告 143
- ## 导
- 导航表 110
 - 删除数据文件 117
 - 卸载数据集 117
- ## 断
- 断开会话连接 9
 - 断开连接 9
- ## 多
- 多级
 - 循环序列 90
- ## 范
- 范围
 - 校正 129
- ## 方
- 方法
 - GLPSave. Reg 45
 - 创建 35
 - 积分 44
 - 库检索 45
 - 离线模式 38
 - 目录 37
 - 使用特定 112
 - 手动更新 39, 73, 40
 - 修改 35
 - 运行总结 42
 - 在线模式 38
 - 状态 53
 - 自动更新 73, 68
 - 组件 31
 - 方法类型
 - 数据文件 33
 - 序列方法 33
 - 主方法 33
 - 方法树状图 39
 - 方法文件
 - 仪器参数 37
 - 方法信息 31
- ## 峰
- 峰
 - 定量 31, 45
 - 识别 31, 45
 - 峰加和表 152
- ## 格
- 格式
 - 报告模板 145
- ## 更
- 更新
 - 方法 68, 40
 - 主方法 39
- ## 工
- 工作流程
 - 查看 123

关

- 关闭
 - 宏 86
 - 系统 86
 - 自动 86

含

- 含量限值 128

宏

- 宏
 - 关闭 86

后

- 后序列操作 86
- 后运行
 - 宏 46
 - 命令 46

化

- 化合物 126
- ChemStation
 - 资源管理器 39

积

- 积分 44
 - 结果表 44
 - 事件 31

监

- 监视器
 - 仪器状态 53

检

- 检测器响应 127

交

- 交叉序列报告 143

结

- 结果标记 142
- 结果集 28
 - 迁移 84
 - 自我组装的 117

经

- 经典报告 20

库

- 库检索 45

良

- 良好的实验室规范 23

路

- 路径 48

模

- 模拟信号 48

目

- 目标
 - 报告 140
- 目录
 - 方法 37
 - 结果集 81

迁

- 迁移
 - 结果集 84

前

- 前缀 84

软

- 软件概述
 - 操作系统 11
 - 方法和序列 11
 - 数据模型 12

上

- 上次结果模式 113

首

- 首选项 48

数

- 数据采集 48
- 数据分析 31, 110
 - 定量 19
 - 批处理浏览 20
 - 重新处理 20
 - 重新计算 20
 - 自定义 45
- 数据路径 49
- 数据字段 143
- 数字信号 48

条

- 条件格式 145

停

- 停止
 - 序列 71

外

- 外插法 129

索引

未

未确认峰
重新校正 137

文

文件名
 单次进样报告 147
 前缀 84
 序列总结报告 147

文件

方法 37

系

系统
 关闭 86

响

响应
 检测器 127

校

校正表
 什么是? 133

校正曲线
 单级 127
 类型 127

校正 32
 点 126
 范围 129
 化合物 126
 级别 126
 循环多级 90
 样品 126

信

信号 48

细节 31

序

序列参数 49
序列模板 58
序列 58
 表 60
 采集 66
 调用 110
 停止 71
 循环校正 90
 暂停 71
 中断 71
序列总结报告
 方法 154
 分析报告 154
 工作日志 154
 配置 154
 输出说明 155
 统计 154
 序列表 154
 样品表 154
 页眉 154
 总结页面 155

颜

颜色编码 53

演

演示数据 145

样

样品
 校正 126

页

页面摘要 142, 145

仪

仪器控制 31
仪器
 状态 53

与

与数据一起保存
 方法副本 46

远

远程控制 9
远程桌面连接 10

运

运行时选项表 32
 保存 GLP 数据 45
 保存方法拷贝 46
 后运行宏 46
 后运行命令 46
 数据采集 44
 数据分析 44

暂

暂停
 序列 71

智

智能报告 20
 激活 141
 数据文件 121
 要求 121
 优点 142
 预览 122

中

中断

序列 71

重

重新处理 20
重新计算 20, 28, 112
 上次结果 113
重新连接 10
部分重新校正
 部分 137
重新校正
 保留时间 137
 完全 137
 未确认峰 137
 自动 87

专

专有文件夹创建 26, 76,
79
 切换开启 / 关闭 78

状

状态
 仪器 53

自

自定义计算 145
自定义字段 32, 142
自定义
 数据分析 45
自动分析
 什么是? 57
自动
 关闭 86
 库检索 45
 重新校正 87
自我组装的结果集 117

内容提要

本指南介绍安捷伦 OpenLAB CDS ChemStation 版本 的各种概念。其目标是帮助用户更好地了解 ChemStation 的工作原理。它包含关于下列主题的信息：

- 基本概念
- 数据采集
- 自动分析 / 序列
- 运行队列和队列计划
- 数据分析和查看概念
- 校正
- 报告
- CE 特有的概念和功能

© Agilent Technologies 2010-2011, 2012

Printed in Germany
06/2012



M8301-97013