

# dbLabCal

## Bedienungsanleitung



**dbLabCal**  
The LIMS for bioanalytics

- Verwaltung der analytischen Ergebnisse
  - Datenimport von HPLC,GC+LC/MS-MS,Immunoassays
- Berechnungen und statistische Auswertungen
- Akzeptanzkriterienüberwachung
- Chromatographische Auswertungen
- QC, QA, ES nach CRF21 Part11, Audit Trail

*Copyright © 1994-2015 Milan Vagaday*

**Inhaltsverzeichnis:**

<b>EINLEITUNG .....</b>	<b>4</b>
AUFGABEN DES PROGRAMMS .....	6
ARBEITSWEISE .....	7
ZUGRIFFSRECHTE .....	8
NAMENSKONVENTIONEN .....	9
<b>BEDIENUNG .....</b>	<b>11</b>
ALLGEMEIN .....	11
<i>Tasten und Maus</i> .....	11
LOGIN .....	14
MENÜ PROJEKT .....	15
<i>Neu</i> .....	15
<i>Laden...</i> .....	18
<i>Editieren...</i> .....	20
<i>Menü Einstellungen</i> .....	21
Druck/Export Optionen .....	21
Graphik .....	23
Zahlenformat .....	23
SUB-Format .....	24
Zeit-Format .....	24
<LOQ-Format .....	24
Nicht korrekte SUB-Ergebnisse-Format .....	24
Akzeptanz-Kriterien .....	25
Ausgabe-Texte .....	27
Zielverzeichnis setzen .....	28
Standard-Spaltenbreite! .....	28
<i>Analyt</i> .....	29
<i>Regressionsmodell, Wichtung, Messgröße</i> .....	29
<i>Audit Trail und Elektronische Unterschrift</i> .....	30
<i>Drucken...</i> .....	31
<i>Export...</i> .....	33
<i>Status eines Projekts ändern</i> .....	35
<i>Ergebnisse für HoLaRo... / Ergebnisse für BI...</i> .....	36
<i>Ergebnisse in ASCII File!</i> .....	36
<i>Exit</i> .....	36
MENÜ ERGEBNISSE .....	37
<i>Statistiken</i> .....	38
<i>Probanden</i> .....	40
<i>Validierungsproben</i> .....	44
<i>Wiederholer</i> .....	50
Zu wiederholende Proben .....	50
Wiederholte Proben .....	51
Incurred Samples .....	55
<i>Ausgeschlossene Werte</i> .....	56
<i>Daten der Analysen</i> .....	56
MENÜ SEQUENZ .....	56
<i>Import File</i> .....	57
<i>Import aus Empower2</i> .....	60
<i>Laden...</i> .....	61
<i>Drucken...</i> .....	62
<i>Export...</i> .....	63
<i>Sequenzstatus ändern</i> .....	64

MENÜ ANSICHT.....	65
<i>CAL, QC's, Probanden und Validierungsproben...</i> .....	65
<i>Liste</i> .....	67
Probenbezeichnungen editieren.....	68
Chromatogramm-Flags editieren .....	69
MENÜ CHROMATOGRAPHIE.....	71
MENÜ DB.....	76
MENÜ EXTRA.....	83
<b>TIPPS UND TRICKS .....</b>	<b>84</b>
<b>FEHLER UND FEHLERMELDUNGEN.....</b>	<b>90</b>
<b>ANHANG 1: HOLARO- BZW. BI- ASCII-FILES.....</b>	<b>91</b>
<b>ANHANG 2: LC-MS/MS (ANALYST) .....</b>	<b>94</b>
<b>ANHANG 3: EMPOWER2 .....</b>	<b>95</b>
<b>ANHANG 4: XCALIBUR.....</b>	<b>97</b>
<b>ANHANG 5: SOFTMAX PRO .....</b>	<b>98</b>
<b>ANHANG 6: MAGELLAN (ELISA READER) .....</b>	<b>100</b>
<b>ANHANG 7: ACCESS2 .....</b>	<b>101</b>
<b>ANHANG 8: ISE .....</b>	<b>102</b>
<b>ANHANG 9: ICP-MS ELAN .....</b>	<b>103</b>
<b>ANHANG 10: ICP-HPLC-MS CHROMERA .....</b>	<b>108</b>
<b>ANHANG 11: FACS .....</b>	<b>109</b>
<b>ANHANG 12: SEARCHLIGHT .....</b>	<b>109</b>
<b>ANHANG 13: MESOSCALE (MSD) .....</b>	<b>110</b>
<b>ANHANG 14: CALCULATION OF WEIGHTED LINEAR REGRESSION .....</b>	<b>111</b>
<b>ANHANG 15: FLOWCHART: ERGEBNISSE AUS MEHRFACHMESSUNG (LANG&amp;BOLTON) .....</b>	<b>112</b>
<b>ANHANG 16: FLOWCHART: ERGEBNISSE AUS MEHRFACHMESSUNG (HOLARO).....</b>	<b>113</b>

## **Einleitung**

Die Aufgabe von DBLABCAL ist die Verwaltung von analytischen Daten und Ergebnissen die während einer bioanalytischen Untersuchung zum Beispiel im Rahmen einer Bioverfügbarkeits- oder einer Bioequivalenz-Studie erhalten werden.

Es können die verschiedensten analytischen Methoden (HPLC, LC/MS, GC/MS, ELISA, ISE usw.) und/oder analytischen Instrumente eingesetzt werden.

Technisch gesehen ist DBLABCAL-Client die Schnittstelle zu einer Datenbank, in der die Angaben zu analytischen Projekten, zu den Sequenzen der Projekte und schließlich alle Daten der einzelnen Chromatogramme/Messungen gespeichert sind. DBLABCAL schickt die Befehle oder Fragen des Benutzer, die er über die einzelnen Menü-Punkte wählt, an die Datenbank und zeigt/druckt/exportiert die Antworten der Datenbank und zwar formatiert und sinnvoll angeordnet. Darüber hinaus unterstützt DBLABCAL den Benutzer über mit der Vielzahl an Plausibilitätstests.

Die Daten werden sequenzweise, in der Regel über ein ASCII-File, in die Datenbank importiert.

DBLABCAL prüft die Daten auf etwaige Unregelmäßigkeiten und gibt Hinweise zu bestimmten Sachverhalten. Die eingebaute User-Verwaltung regelt die Zugriffe auf die Daten. Ein Benutzer kann nur Aktionen ausführen, zu denen er die entsprechenden Rechte besitzt. Weiterhin werden nur die zum bestimmten Zeitpunkt "sinnvollen" Aktionen erlaubt.

Alle Aktionen (Befehle) des Benutzers, die die Daten/Ergebnisse eines Projekts modifizieren, werden im Audit Trail dokumentiert. DBLABCAL ist voll CFR21Part11 kompatibel.

Es sei anzumerken, dass es nicht möglich ist, mit DBLABCAL die einzelnen Werte wie Retentionszeit, Peakhöhe, Peakfläche und berechnete Konzentration zu verändern.

Eine weitere Aufgabe von DBLABCAL ist es, basierend auf den gespeicherten analytischen Daten, auch Management-Informationen zu liefern. Man kann z.B. den Status aller Projekte, die Anzahl der gemessenen Proben im bestimmten Zeitraum in einer Abteilung usw. abfragen.

Die Bedingung für die Arbeit mit der Datenbank ist, dass man bestimmte Regeln bei der Namengebung der Proben einhalten muss. Dafür stehen alle Daten der Projekte sofort und fehlerfrei zur weiteren Bearbeitung (z.B. biometrische Auswertung, Export in andere Programme um Berichte zu schreiben oder weitergehende statistische Auswertungen durchzuführen usw...) bereit.

Die vorliegende Version von DBLABCAL arbeitet mit allen Oracle Datenbanken zusammen. Getestet wurden alle Versionen von 8i bis 11gR2 sowie die XE-Versionen.

DBLABCAL kann in zwei beliebigen Sprachen arbeiten. Man kann zwischen den beiden Sprachen jederzeit hin- und herschalten. Außerdem können vom Administrator alle Beschriftungen, Meldungen, Texte und Systemtexte jederzeit geändert und angepasst werden.

In dieser Bedienungsanleitung werden nur die wichtigsten Punkte erwähnt. Es kann zu Situationen kommen, auf die das Programm mit Meldungen oder Fragen an den Benutzer reagieren wird, die hier nicht explizit beschrieben wurden.

*Anmerkung:*

*Im Text werden Begriffe wie Besucher, Analytiker, Prüfleiter usw... benutzt. Gemeint sind damit natürlich auch alle Besucherinnen, Analytikerinnen, Prüfleiterinnen usw..*

## **Aufgaben des Programms**

Die wichtigsten Aufgaben von DBLABCAL kann man folgendermaßen zusammenfassen:

### **Verwaltung:**

- Verwaltung der Projekte
- Verwaltung der Zugriffsrechte
- Anzeige, Druck und Export der Ergebnisse eines Projektes
- Export der Probandenergebnisse in ASCII-Dateien zur weiteren Bearbeitung
- Freigabe der Ergebnisse (Database lock)

- Import von (meistens chromatographischen) Daten einer Sequenz
- Anzeige, Druck und Export der Daten einzelner Sequenzen
- Freigabe einzelner Sequenzen (Batch lock)

- Editieren der Probenamen
- Freigabe einzelner Chromatogramme (Chromatogram lock)

- Langzeitstabilitätsplanung

### **Berechnungen:**

- Kalibrierungskurven
- Konzentrationen von unbekanntem Proben  
(QC's, Probandenproben, Validierungsproben usw...)
- Statistische Auswertungen der Ergebnisse

### **Überwachung aller Ergebnisse auf Korrektheit**

- Überprüfung der Ergebnisse auf Korrektheit
- Überprüfung der Sequenzdaten auf Erfüllung der Akzeptanzkriterien

### **Analyse der Chromatographie-Daten**

- Anzeige der Retentionszeiten, Peakbreiten usw. für alle Chromatogramme der Projekte
  - z.B. für die Überprüfung der Richtigkeit der Integration, Peakzuordnung, usw...
  - Selektion spezieller Daten aus der Datenbank
    - z.B. Peakflächen aller QCs zum Nachweis der Stabilität während der Dauer der Messungen...

### **Audit Trail / Elektronische Unterschrift**

### **Management Informationen**

## Arbeitsweise

Die Arbeit mit DBLABCAL wird in der Regel folgendermaßen ablaufen:

	Person	Aktion	Bemerkung
<b>VOR DER MESSUNG DER PROBEN</b>			
1	BPI/Study Director (Analytiker)	Neues Projekt in dbLABCAL definieren	Definieren von Projektcode, Kommentar, Zugriffsrechte, Analyt-, IS-Name(n), Matrix, Messgröße, Modell, Wichtung, Konzentrationseinheit(en), usw.  see page 15
<b>WÄHREND DER MESSUNG DER PROBEN</b>			
2	Analytiker	Sequenz messen	Schreiben der Sequenzlisten Messen
3	Analytiker	VOR dem Export nach dbLabCal Chromatogramme checken (entweder auf den Papierausdrucken oder in der Chromatographie-SW)	Retentionszeiten, Peakflächen, -höhen, -breiten für Analyt(e) und IS überprüfen, eventuell auf den Chromatogrammen die Akzeptanz der Chromatogramme (Flag) vermerken
4	Analytiker	Export-Datei erzeugen (*.asc, *.lca, *.xls, *.seq, *.csv...)	mit Programmen die auf die jeweilige Chromatographie-Software spezialisiert sind
5	Analytiker	Export-Datei nach dbLABCAL importieren	  see page 57
6	Analytiker	Chromatogramm-Flags setzen  <i>Freigabe 'Chromatogramm'</i>	entsprechend der Vermerke auf den Chromatogrammen  see page 67
7	Analytiker	Status der Sequenz setzen  <i>Freigabe 'Sequenz'</i>	Hiermit werden die Schritte 6 und 7 dokumentiert  see page 64
8	BPI/Study Director	Review dbLabCal -Daten<->Chromatogramme	bei Änderungen Analytiker informieren bei Bedarf W/C-Flag setzen
solange gemessen wird, weiter bei 2			
<b>NACH DER MESSUNG DER PROBEN</b>			
9	Analytiker	Projektstatus auf 'beendet' setzen  <i>Freigabe 'Projekt'</i>	  see page 35
10	BPI/Study Director	Projektstatus auf 'freigegeben' setzen (it also locks all batches, batches remain locked even after project status is reset) <i>Freigabe 'Projekt'</i>	  see page 35
11	QC-Check	QC-Check der dbLabCal Projekt-, Sequenz- und Chromatogrammdaten	Letzter Check auf Konsistenz mit dem Prüfplan und mit den Daten der Messsysteme
12	QM/QA	QA-Durchführung und Dokumentation des QA in dbLabCal	
13	user	Daten aus dbLabCal weiterverwenden/exportieren usw...	für weitere Dokumentation und Berichte

Die Freigabe der Daten erfolgt in drei Stufen:

- Freigabe der einzelnen Chromatogramme (Flag),
- Freigabe der einzelnen Sequenzen (Sequenz-Status), "batch lock"
- Freigabe des gesamten Projekts (Projekt-Status), "project lock"

## Zugriffsrechte

Jedem der Benutzer werden vom Administrator Rechte zugewiesen. Es gibt folgende Stufen der Berechtigungen:

ReadOnly	keine Berechtigung zur Bearbeitung der Daten
Analytiker	Berechtigung zur Bearbeitung der Daten für eigene Projekte
PL / BPI	Prüfleiter / Principal Investigator-Berechtigung für eigene Projekte
QC/QA	darf (nur) QC dokumentieren, sonst wie ReadOnly
Abt.leiter	PL/BPI-Berechtigung für alle Projekte der Abteilung
Administrator	PL/BPI -Berechtigung für alle Projekte

Aktion	ReadOnly	Analytiker	PL/BPI	QC/QA	Bemerkung
Neues Projekt definieren		+	+		
Angaben zum Projekt editieren		+	+		wenn Projekt "freigegeben" nur neue Analyten eintragen
Vergabe von Zugriffsrechten			+		
Modell, Wichtung, Messgröße ändern		+	+		wenn Projekttyp "Validierung"
Akzeptanzkriterien ändern			+		wenn Projekt nicht "freigegeben"
Einstellungen und Ausgabertexte ändern	(+)	+	+		ReadOnly-User nur für sich, d.h. für die aktuelle Sitzung, Speichern nicht möglich
Drucken und Export in andere Programme	+	+	+	+	
Projekt beenden		+	+		
Projekt freigeben, Freigabe zurücknehmen			+		
Export der Daten in ASCII			+		wenn Projekt "freigegeben"
Sequenz importieren		+	+		wenn Projekt nicht "freigegeben"
Messplatz, Sequenznummer, Startdatum ändern		+	+		Analytiker nur wenn Projekt-Status „gestartet“ PL nur wenn Projekt-Status <>„freigegeben“
Sequenz-Status ändern		+	+		Analytiker nur wenn Projekt-Status „gestartet“ <u>und</u> Akzeptanzkriterien erfüllt
Auswahl der zu berichtenden Ergebnisse (Wiederholer)		+	+		Analytiker nur wenn Projekt-Status „gestartet“
Chrm-Flag ändern		+	+		Analytiker wenn Sequenz-Status noch nicht gesetzt
Probenbezeichnung ändern		+	+		Analytiker wenn Sequenz-Status noch nicht gesetzt
QC-Check, QA				+	wenn Projekt "freigegeben"

+ : erlaubt

## Namenskonventionen

### Sequenzen:

Der Name einer Sequenzdatei (ASCII-File zum Import in DBLABCAL) kann beliebig sein. Die folgenden File-Extensions sollten allerdings benutzt werden, um das (interne) Format des ASCII-Files zu beschreiben.

Extension	*.lca	Daten erzeugt von Analyst
	*.xls	Daten erzeugt von Xcalibur, LabX, MultiLab Pilot, SearchLight
	*.rep	Daten erzeugt von Elan-ICP
	*.csv	Daten erzeugt von Access2, FACS, Mesoscale (MSD)
	*.asc	Daten erzeugt von Magellan (ELISA)
	*.txt	Daten erzeugt von Softmax Pro

Ein ASCII-Filename besteht sinnvollerweise z.B. aus 2 beliebigen Buchstaben und 2 Zahlen, die die Sequenznummer definieren, z.B. aa01.seq, mn17.sqd, xy99.man, de5an01.lcm und de5an02.lcm usw.

### Proben:

Probenart	Kodierung	Weitere Angaben			Beispiel
Kontrollprobe	<b>K-REF</b>	keine			<b>K-REF</b>
Standards	<b>CAL</b>	Sollkonzentration			<b>CAL</b> 1.0 ng/mL <b>CAL</b> 10.0 ng/mL <b>CAL</b> 10.0/25.0 ng/mL
QC's	<b>QCS</b>	Sollkonzentration			<b>QCS</b> 15.0 ng/mL <b>QCS</b> 150 ng/mL <b>QCS</b> 150/450 ng/mL
unbekannte Proben	<b>SUB</b>	Nummer, Durchgang, Entnahmezeit (ALLE EINGABEN MÜSSEN ZAHLEN SEIN!)			<b>SUB01DG01TP</b> 2d4h30m <b>SUB15DG02TP</b> 2.5h <b>SUB99DG03TP</b> 5
		Bezeichnung (Text)			<b>SUB</b> 123456 <b>SUB</b> MD44_F01
Validierungs-Proben	<b>VAL</b>	Sollkonzentration			
		"Matrix"-Gruppe *)	"Temp"-Gruppe *)	Dauer	
	<b>E</b> Extrakte <b>N</b> Matrix <b>P</b> Auftauzyklen <b>A</b> z.B. Vollblut <b>B</b> frei	<b>R</b> Raumtemp. <b>K</b> Kühlschrank <b>G</b> Gefrierschrank <b>T</b> Tiefkühltruhe	Angaben in h oder _d_h_m		<b>VAL ER</b> 24 10 <b>VAL ET</b> 4d 10/50/100 <b>VAL PR</b> 8w 150 ng/mL <b>VAL BT</b> 2h 10
	<b>QCS</b>	Sollkonzentration, Dilution-Faktor (df)			<b>QCS</b> 1000 ng/mL df vorher in der Integrations-Software

\*) Die Buchstaben der "Matrix"-Gruppe bzw. der "Temp"-Gruppe werden in der Regel (aus historischen Gründen) so eingesetzt, wie in der Tabelle aufgeführt. Es ist aber möglich einer bestimmten "Matrix"-/ "Temp"-Kombination eine beliebige Bedeutung / VAL-Probengruppe zuzuweisen. So kann z.B. eine Probe **VAL AT** 2h xxx pg/mL zu Gruppe „Validierungsproben Plasma Stabilisiert mit X im Eiswasser während Probengewinnung“ o.ä. gehören.

Für CAL, QCS und VAL-Proben werden nach einem oder mehreren Leerzeichen auch die nominellen Konzentrationen eingetragen. Wenn mehrere Analyten mit unterschiedlichen nominellen Konzentrationen in einer CAL, QCS oder VAL-Probe enthalten sind, sollten die nominellen Konzentrationen in der Reihenfolge der Retentionszeiten, getrennt mit '/', eingetragen werden.

Z.B. CAL 500 ng/mL, VAL NG48 10/20/20 ng/mL, QCS 5/10 ng/mL usw. Wenn alle Analyten die gleichen nominellen Konzentrationen haben, reicht es aus, die nominellen Konzentrationen nur einmal einzutragen.

**Beim Import aus Empower2, Analyst und Xcalibur verwendet DBLABCAL die nominellen Konzentrationen aus der Chromatographie-Software direkt. DBLABCAL benutzt die im Probenamen eingegebenen Konzentrationen nur, wenn es an den entsprechenden Stellen in Empower2/Analyst/Xcalibur keine Daten finden konnte.**

Im Falle der SUB-Proben ist es wichtig, sich vor dem Start der Messungen zu überlegen, ob die Proben mit **SUBxxxxDGxxTPxxx** oder nur **SUBxxxxx** zu benennen sind, da beide Modi gemischt in einem Projekt nicht möglich sind. Man kann zwar zwischen SUBxxxxDGxxTPxxx oder SUBxxxxx –Anzeige der SUB-Proben wählen, die möglicherweise fehlenden Durchgang- und/oder Zeit-Angaben müsste man gegebenenfalls aber nachtragen.

Die SUBxxxxDGxxTPxxx -Schreibweise ist nur angebracht, wenn es sich bei den Proben tatsächlich um Proben mit "echten" Durchgängen und Zeitpunkten handelt (z.B. aus einer Bioequivalenz-Studie).

Wird z.B. eine Phase II - oder Tox-Studie bearbeitet, kodiert man die Probenbezeichnung so, dass die Ergebnisse in ERGEBNISSE | PROBANDEN in der gewünschten Reihenfolge erscheinen und sich gegebenenfalls (z.B. in Excel) einfach nachbearbeiten lassen.

**Die Ergebnisse (SUB-Proben) sind alphabetisch sortiert, d.h auch Zahlen werden alphabetisch sortiert. D.h. 0, 1, 10, 11, 2, 222, 3 usw. Will man doch auch Zahlen in SUBxxxxx benutzen, muss man z.B. 0001, 0002, ..., 0010, 0011, ... 0900, usw. schreiben.**

Man könnte z.B. eine Probe von einer weiblichen Ratte-Nr. 118, Dosierung 10 mg/kg i.v. gewonnen am Tag 7, 12 Stunden wie folgt bezeichnen: **SUBIV\_D010\_F\_D07H12\_NR0118** (oder kurz z.B. **SUBI\_010\_F\_07\_12\_118**). Die Ergebnisse erscheinen dann sortiert nach Dosierungsart, Dosierung, Geschlecht, Zeit und Tiernummer. Wäre es erforderlich, die Ergebnisse zuerst nach Geschlecht und dann nach Dosierung getrennt zu berichten würde man die Proben bezeichnen: **SUBF\_IV\_D010\_D07H12\_NR0118**. Das Trennzeichen '\_' ist sinnvoll, da man damit die Lesbarkeit verbessert, und die einzelnen Informationen später z.B. in Excel leicht mit SUCHEN UND ERSETZEN extrahieren und dann in separate Spalten schreiben kann.

Entscheidend für die Namengebung ist, wie man die Ergebnisse später noch bearbeiten und am Ende berichten muss.

## Bedienung

### Allgemein

#### Tasten und Maus

Sowohl Tasten- als auch Mausbedienung entspricht der Windows-Konvention.

Menüs, Verfügbarkeit bestimmter Befehle usw... passen sich dynamisch an die aktuellen Daten und an die Zugriffsrechte des Benutzers an. Außerdem werden bestimmte Menüs und Befehle gesperrt, falls ihre Benutzung zu dem jeweiligen Zeitpunkt nicht sinnvoll oder nicht erlaubt ist.

Immer wenn auf dem Bildschirm die Schaltflächen Ok und ABBRECHEN zu sehen sind, kann man die Tasten ENTER und ESCAPE benutzen.

Auch die Arbeit mit der Maus ist, wie in Windows üblich, d.h.:

linke Maustaste: Klick: Auswahl

Doppelklick: Auswahl mit Bestätigung (OK)

rechte Maustaste: Klick: Auswahlmenü / Kontextmenü, wenn verfügbar

Manche Eingaben sind auch von verschiedenen Stellen möglich. So lässt sich z.B.

Kommentar zum Projekt über Menü PROJEKT | NEU... bzw. PROJEKT | EDITIEREN... oder durch Doppelklick auf KOMMENTAR ZUM PROJEKT eingeben.

The screenshot shows the main interface of dbLabCal V3. At the top, there's a menu bar with options like Study, Results, Batch, Batch Data, Chromatography, db, Language, Audit Info, and Extra. The main area is divided into several sections:
 

- Study:** HA107, SPONSORCODE, Analyte: Analyte1 / plasma, Model: y=a+bx
- Sequence:** 1, 9 / Analyte01, extracted: 11.03.1998, started: 11.03.1998 04:51, finished: 11.03.1998 14:08, calculated: 11.03.1998 14:49. Parameters: a = 0.00145, b = 0.01318, r² = 0.99394.
- Batch List:** A table with columns: file/sampleID, name, analyte, rt, area, HI, r(f), area(s), HI(s), p.h.r., d(f), ng/mL, dev [%], flag, comment. It shows two rows of data for Analyte1 and Analyte2.

The 'Edit Study' dialog box contains the following fields and a table:
 

- Study Code: HA107
- Sponsor Code: SPONSORCODE
- Comment: Analyte1 and Analyte2 in Human Plasma
- Department: HPLC
- Study Director: V3-ValStudyC
- Analyst: Analyst02
- Copy settings from:  \_DEF - template project with default settings

grp	Analyte	Int.Std	Matrix	Status	Method	Readgs	Model	Wghting	Unit	Study	sub-name	+flag	Samples
+	Analyte1	IS	plasma	started	HPLC-FL	p.h.r.	y=a+bx	1/x	ng/mL	Routine	sub/period/time	Y	512
+	Analyte2	IS	plasma	started	HPLC-FL	p.h.r.	y=a+bx	1/x	ng/mL	Routine	sub/period/time	Y	512

Folgende Tasten/Tastenkombinationen erleichtern die Bedienung von DBLABCAL:

ENTER/ESCAPE	Default-Tasten für Klick auf die Schaltfläche Ok bzw. Abbrechen
STRG+EINFG oder STRG+C SHFT+EINFG oder STRG+V	Neben dem menü-gesteuerten Export (siehe weiter unten) ist es jederzeit möglich (die markierten) Daten und/oder Graphik aus dem aktiven Fenster über die Zwischenablage in alle Windows -Programme zu exportieren.(wie in Windows generell üblich)
STRG+L, +P, +E	Laden, Drucken, Export des Projekts, bzw. der aktuellen Sequenz
STRG- +/- (NUM.TASTATUR)	Vorwärts / Rückwärts - Laden (Blättern) der Sequenzen (siehe Seite 28)
SHFT+STRG+C, +Q, +V, +S, +K, +D	Probentyp-Filter an/aus
SHFT+STRG+R	erzwingt Neuberechnung der aktuellen Sequenz
STRG-R	in Ansicht-Sequenzliste (un)markiert die selektierten Zeilen als Random Repeats“ (Incurred Samples). Incurred Samples werden immer mit gelbem Hintergrund gezeigt
SHIFT halten während der Änderung der Konzentrationsseinheit in PROJEKT   EDITIEREN...	die nominellen Konzentrationen der bis jetzt gemessenen Kalibrierungs-, QC- und Validierungsproben werden entsprechend der neuen Konzentrationsseinheit umgerechnet. (Faktor 1000, 1 000 000 etc.)
STRG halten während der Änderung der Konzentrationsseinheit, Messgröße, Regressionsmodell in PROJEKT   EDITIEREN...	die Änderungen werden nur für den aktuellen Analyten gesetzt und nicht für alle Analyten aus dem gleichen Chromatogramm (Standardverhalten ist alle Analyten aus einem Chromatogramm gleich zu behandeln)
STRG halten während des Programm-Starts...	PROJEKT-LADEN-DIALOG WIRD IN JEDEM FALL ANGEZEIGT
STRG halten während des Klicks auf Usernamen (Statuszeile, rechts)...	Login-Dialog wird angezeigt
STRG halten während der Chromatogramm-Flag Änderung...	Chromatogramm-Flag wird sofort für alle Analyten des Chromatogramms geändert
STRG halten während des Doppelklicks auf einen Wert in den Ergebnis-Tabellen (oder STRG+G ) oder auf Chromatographie- Graphik	dbLabCal „springt“ in die Sequenz und zu den Daten des zugehörigen Chromatogramms mit ESCAPE springt man zurück zu der vorherigen Ansicht
STRG drücken vor bestimmten Aktionen gibt dem Prüfleiter etwas mehr Freiheiten als normalerweise üblich: z.B.: vor der Wahl der 'Wiederholer' (die sogenannte 'Prüfleiter-Sonderwunsch-Taste')	

## Bildschirm

Titelleiste: zeigt die aktuellen Angaben zu:

Programmname Version - Projektcode / Name des Analyten /

Sequenznummer

Menüs:

Statuszeile: In der Statuszeile werden angezeigt:

links: Anzeige des Fortschritts oder Uhrzeit

mitte: - Meldungen über die aktuellen Aktionen des Programms

- Erklärungen über die Bedeutung der Felder unter dem Mauszeiger und

- Hinweise zu möglichen Aktionen des Benutzers

- Name der aktuellen Datenbank

rechts: Name des aktuellen Benutzers

Zwischen den Menüs und der Statuszeile ist der Bildschirm hierarchisch in drei Bereiche eingeteilt:

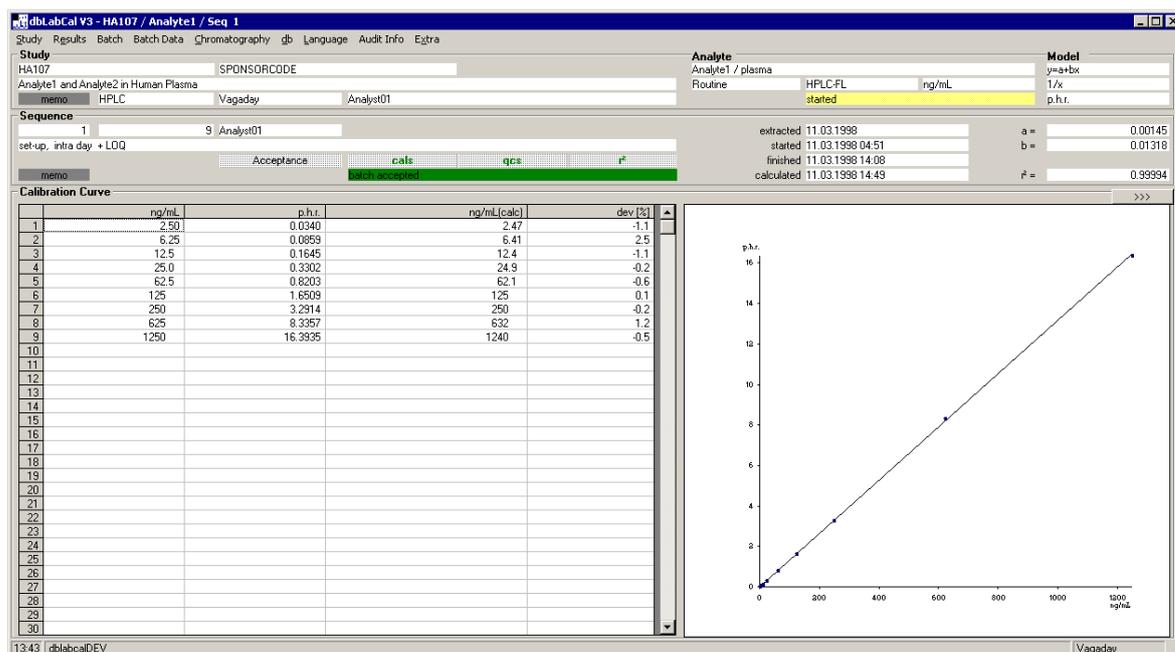
oben: Angaben zum aktuellen Projekt und zum Analyten

mitte: Angaben zur aktuellen Sequenz  
(falls Sequenzdaten-Ansicht gewählt wurde)

unten: Daten der aktuellen Sequenz in der gewählten Ansicht  
oder die Daten(Ergebnisse) des aktuellen Projekts

In die MEMO-Felder kann man verschiedene Bemerkungen, Notizen zu den Ergebnissen oder den einzelnen Sequenzen schreiben. Man kann sie sehr gut auch für Nachrichtenaustausch nutzen. Steht irgendetwas in den MEMO's, sind sie grün, ansonsten dunkelgrau.

Manchmal ist die Schaltfläche  zu sehen. Nach Klick auf diese Schaltfläche wird ein Dialog mit weiteren, für die aktuelle Anzeige möglichen Einstellungen angezeigt.



**Study**  
HA107  
Analyte1 and Analyte2 in Human Plasma  
memo HPLC Vagaday Analyst01

**Analyte**  
Analyte1 / plasma  
Routine HPLC-FL ng/mL  
started

**Model**  
y=a+bx  
1/x  
p.h.r.

**Sequence**  
1 9 Analyst01  
set-up, intra day + LOQ  
memo Acceptance cals qcs r²  
batch accepted

extracted 11.03.1998  
started 11.03.1998 04:51  
finished 11.03.1998 14:08  
calculated 11.03.1998 14:49

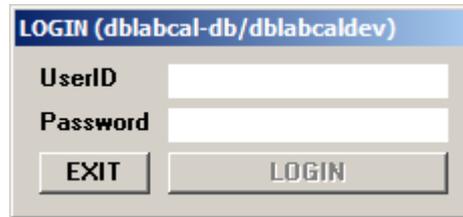
a = 0.00145  
b = 0.01318  
r² = 0.99994

	ng/mL	p.h.r.	ng/mL(calc)	dev [%]
1	2.50	0.0340	2.47	-1.1
2	6.25	0.0859	6.41	2.5
3	12.5	0.1645	12.4	-1.1
4	25.0	0.3302	24.9	-0.2
5	62.5	0.8203	62.1	-0.6
6	125	1.6509	125	0.1
7	250	3.2914	250	-0.2
8	625	8.3357	532	1.2
9	1250	16.3935	1240	-0.5
10				
11				
12				
13				
14				
15				
16				
17				
18				
19				
20				
21				
22				
23				
24				
25				
26				
27				
28				
29				
30				

13:43 dblabcalDEV Vagaday

## Login

Bei Start erscheint immer der folgende Login-Dialog.

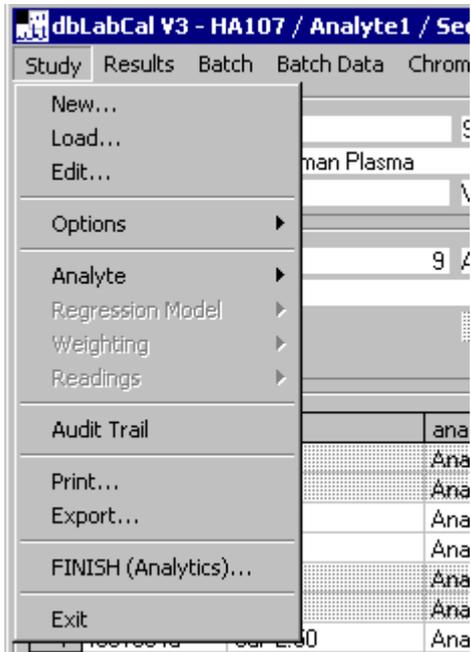


The image shows a standard Windows-style dialog box. The title bar is blue with white text that reads "LOGIN (dblabcal-db/dblabcaldev)". The main area of the dialog is white with a thin grey border. It contains two labels, "UserID" and "Password", each followed by a white rectangular input field. Below the input fields, there are two buttons: "EXIT" on the left and "LOGIN" on the right. Both buttons have a grey background and white text.

Damit kann man sich in DBLABCAL mit eigenem Account einloggen während am Rechner im Windows/Netz ein anderer Benutzer angemeldet ist. Aus Sicherheitsgründen wird der angemeldete Benutzer automatisch ausgeloggt, wenn über einen bestimmten Zeitraum keine Aktion erfolgt.

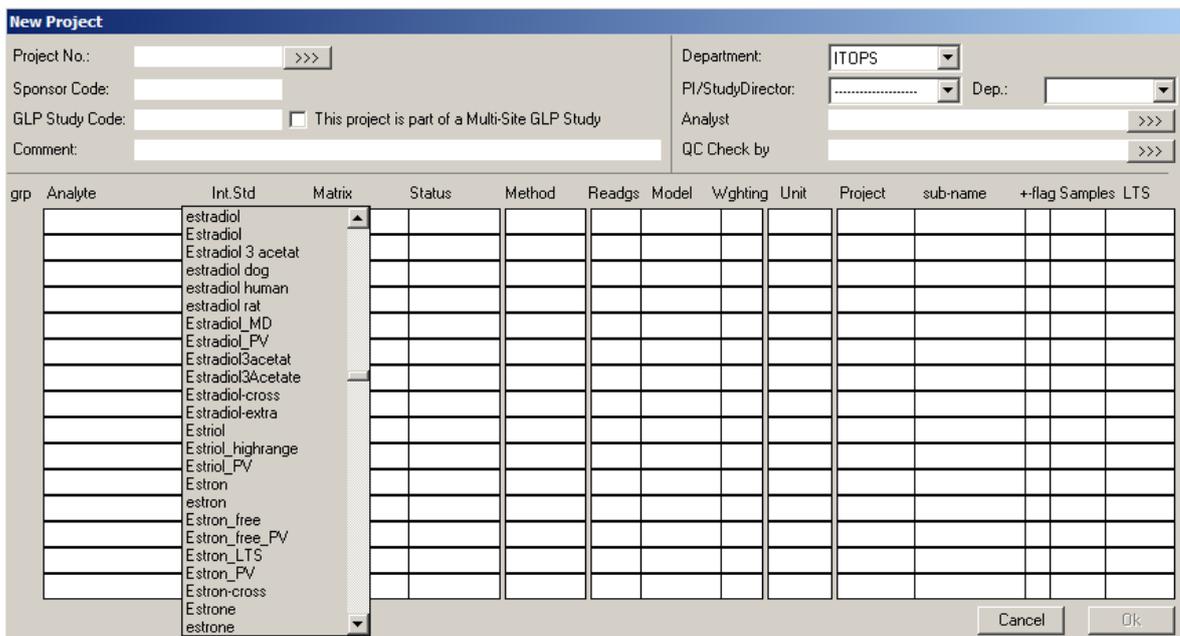
## Menü Projekt

Hier werden die Projekte verwaltet.



## Neu...

Es erscheint ein neuer Dialog, in dem man alle notwendigen Angaben zu einem neuen Projekt eingibt:



- Projektkode

*Standardmässig ist ein Projektkode nur einmal (pro Abteilung) in der Datenbank vorgesehen. Manchmal kann es aber vorteilhaft sein, ein Projekt aufzuteilen in z.B. einen Validierungs- und Routineteil oder nach Matrix usw... In diesem Fall kann der Abteilungsleiter ein Projekt mit schon vorhandenem Projektkode in der Datenbank nochmal anlegen.*

- GLP - Kode für Projekt

- Sponsor - Kode für Projekt

- Kommentar zum Projekt - üblicherweise steht hier der/die Analyt(en) und die Matrix

- Abteilung, Analytiker und Prüfleiter

- Namen der Analyten, die in dem aktuellen Projekt gemessen werden zusammen mit weiteren Details wie Projektart, analytische Methode, Matrix, Messgröße, Konzentrationseinheit, Modell, Wichtung und, falls benutzt, Namen des internen Standards, sowie Entscheidung, ob das Programm bei den Chromatogrammen von predose-Proben den '+'-Flag setzen soll oder nicht. (Näheres zu den Flags siehe Menü ANSICHT | LISTE, siehe Seite 67)

Falls es sich um ein Routine-Projekt handelt, muss man die benutzte SUB-Bezeichnungsmethode wählen und in der letzten Spalte auch die Anzahl der zu messenden Proben eingeben.

Falls Langzeitstabilitätsuntersuchungen vorgesehen sind muss man (Validierungsprojekt) in der letzten Spalte den Zeitraum für die geplante Langzeitstabilität wählen.

Nach Klick auf  neben PROJEKT-NR. kann man komplette Analytendaten aus anderen Projekten kopieren. Dabei werden auch alle Einstellungen (entspricht allen Angaben in den Untermenüs PROJEKT | EINSTELLUNGEN) aus dem anderen Projekt kopiert.

Falls mehrere Analyten in einem Projekt gemessen werden, ist es nicht notwendig, dass alle Analyten in einem Chromatogramm gemessen werden. Es ist möglich, dass z.B. Analyt X und die Metaboliten 1, 2 und 3 im Plasma in einem 'Lauf' gemessen werden und ausserdem noch Analyt X im Urin und vielleicht noch Analyt X (total) im Urin zu dem Projekt XY001 gehören. In diesem Fall würden 6 Analyt-Einträge eingegeben.

*Allerdings hat es sich als sinnvoll herausgestellt, falls mehrere chromatographische Systeme und/oder unterschiedliche Matrices zu einem Projekt gehören, für jedes chromatographische System und/oder Matrix in DBLABCAL ein eigenes Projekt anzulegen.*

Nach Doppelklick im Textfeld ANALYT oder INT.STD erscheint eine Liste aller in der Datenbank gespeicherten Substanznamen. Durch einen Doppelklick auf den Namen einer Substanz in der Liste kann dieser auch für das neue Projekt übernommen werden. Es ist praktisch, für mögliche Auswertungen über die 'Projektgrenzen' hinaus, dass die gleichen Substanzen in verschiedenen Projekten exakt den gleichen Namen besitzen

Wenn ein Analyt eingegeben wird, werden für die Felder Int.Standard, Matrix, Messgröße, Modell, Wichtung usw. automatisch die Inhalte der vorherigen Zeile übernommen.

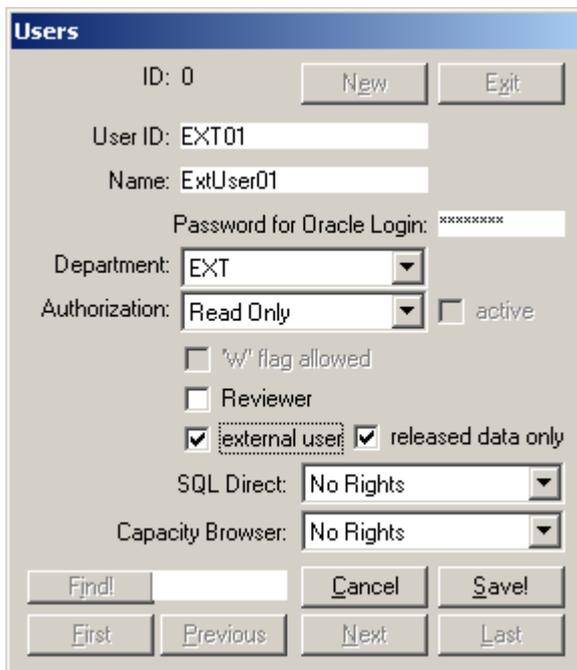
Der Prüfleiter und Analytiker können nach Klick auf in  der Liste der Analytiker bis zu 10 Analytiker benennen (markieren mit SHIFT oder STRG-Taste), die gleichzeitig Zugriffsrechte auf das neu angelegte Projekt bekommen sollen.

Weiterhin können bis zu 10 Personen (die die „Analytiker“-Rolle besitzen) als QC-Checker ausgewählt werden. Analytiker und QC-Checker müssen in einem Projekt unterschiedliche Personen sein.

Falls der Administrator den externen Zugriff erlaubt, kann der Benutzer hier definieren ob ein externer Benutzer ein Zugriff auf die Projektdaten bekommt.



Externer Benutzer muß zuerst in dbLabCal auf die gleiche Art wie ein „interner“ Benutzer definiert werden. Siehe db users Dialog auf Seite 81. Dafür wird nur die Checkbox „external user“ aktiviert. Ein externer Benutzer kann Zugriff auf alle oder nur auf die freigegebenen Daten des Projekts bekommen.



*Das Programm überprüft (generell!) alle Benutzereingaben auf Plausibilität und korrigiert nicht plausible Eingaben automatisch. Wenn Sie z.B. als Messgröße 'p.a.r.' wählen, ohne vorher Int. Standard einzugeben, wird die Messgröße automatisch auf 'area' korrigiert. Es ist auch nicht möglich, mit OK den Dialog zu schließen, wenn noch nicht alle erforderlichen Angaben eingegeben wurden.*

**Laden...**

Es erscheint ein neuer Dialog, in dem die Projekte, nach dem Projektkode sortiert, aufgelistet sind.

Mit 'Filter' kann man bestimmen, welche Projekte in dem Projekt-Laden-Dialog angezeigt werden sollen.

Jeder Benutzer sieht nur die eigenen Projekte. In der Liste unterhalb der Projekte werden alle zugehörigen Analyten, zusammen mit dem Status der Bearbeitung, angezeigt. Der Benutzer kann nach der Wahl des Projektes und des Analyten durch Klick auf Ok die Daten laden, oder sofort mit einem Doppelklick auf das Projekt oder auf den Analyten.

*Schnellzugriff auf Dialog : Doppelklick irgendwo innerhalb des Bildschirmbereichs 'Projekt'.*

Der Dialog PROJEKT LADEN erscheint auch beim Start der Programms, falls beim letzten Beenden des Programms keine automatische Anzeige der letzten Projektdaten gewählt wurde. (Siehe Abschnitt EXIT.)

Hält man während des Programmstarts die STRG-Taste gedrückt, wird der PROJEKT LADEN-Dialog auf jeden Fall angezeigt.

Hält man beim Öffnen des Dialogs weiter die STRG-Taste gedrückt, wird der PROJEKT LADEN-Dialog im ReadOnly-Modus angezeigt. D.h. die so geladenen Projekte können nicht verändert werden.

Project	Comment	Project Type	changed	Sponsor Code	GLP-Code
GA323	5-ASA / Ac-5-ASA in Human Plasma and Faeces	Routine	06-Aug-1998		BA
HA107	Ac-5-ASA / 5-ASA	Routine	27-Mrz-1998	98-0435-001-L1	BA
KA001	5-ASA and Ac-5-ASA re-validation in urine	Validation	15-Mrz-2004		BA
KA018	5-ASA/N-Acetyl-5-ASA in Plasma and Urine	Routine	09-Aug-2000	CRO-00-15	BA
KA448	5-ASA and Ac-5-ASA in plasma	Routine	15-Mrz-2001	CRO-PK-00-42	BA
KA448	5-ASA and Ac-5-ASA in urine	Routine	23-Apr-2001	CRO-PK-00-42	BA
LA131	5-ASA/Ac-5-ASA	Routine	10-Okt-2001		BA
MA188	5-ASA / Ac-5-ASA in human plasma	Routine	11-Jun-2002	PPL-559	BA
NA540	5-ASA and Ac-5-ASA in human plasma/urine	Routine	13-Okt-2004		BA
NA556	5-ASA and Ac-5-ASA in human plasma/urine	Routine	26-Apr-2011	IA358/CLAV-P-03	BA
QA435	5-ASA and Ac-5-ASA in human plasma	Routine	14-Mai-2007	TP0315	BA
TX021	5-ASA/Ac-5-ASA in Humanplasma	Validation	16-Jul-2009		BA

Analyte	Matrix	Status	Method	Project Type	Filter
Ac-5-ASA	plasma	data released	HPLC-FL	Routine	all
5-ASA	plasma	data released	HPLC-FL	Routine	last week last month

all	all	Ac-5-ASA
defined	QC in-progress	
started	QC-ed	
finished	QA-ed	
data released		
archived		
Cancel		Ok

Nach Klick auf Ok werden die Daten für das gewählte Projekt und den Analyten geladen. Falls schon ein anderer Benutzer das gewählte Projekt bearbeitet, ist rechts neben dem Analyten-Namen der Name des Benutzers sichtbar. Die geladenen Daten des Projekts können in diesem Fall allerdings nicht bearbeiten werden.

**Daten eines Projekts können zur gleichen Zeit nur von einem Benutzer geändert werden. Die anderen Benutzer befinden sich im 'ReadOnly-Modus.**

Falls der berechnete Benutzer die Daten des Projekts in irgendeiner Weise geändert hat, erhalten die anderen Benutzer eine Meldung. Nach Doppelklick auf den Hinweis **New Data!** wird auch ihre Anzeige aktualisiert.

## Editieren...

Es erscheint der gleiche Dialog, wie im Menü PROJEKT | NEU.

Hier ist es möglich einige Angaben zum Projekt nachträglich zu ändern, wie z.B. Sponsor-Kode, Kommentar usw. Der Prüfleiter darf auch den Projektkode ändern.

Es ist auch **erlaubt** den/die **Namen des/der Analyten**, wie auch die **Matrix zu ändern** - die Zugehörigkeit der bis jetzt erfassten Daten bleibt natürlich unangetastet - oder weitere, neue Analyten in das Projekt einzutragen. Weiterhin ist es erlaubt schon eingetragene Analyten aus der Liste zu löschen, solange der Analyt-Status 'angelegt' ist.

Falls man die Messgröße, das Regressionsmodell und die Wichtung ändert, wird nach dem Schliessen des Dialogs das gesamte Projekt mit den neuen Einstellungen neu berechnet. Die Änderung von Messgröße, Regressionsmodell und Wichtung wird automatisch/standardmäßig für alle Analyten, die in einem Chromatogramm gemessen wurden, übernommen.

Die Zeilen für alle Analyten, die in einem Chromatogramm mit dem aktuellen Analyten (der aktuelle Analyt steht in der Titelleiste und oben im Bereich der Projektdaten) gemessen wurden, haben einen weissen Hintergrund, die anderen Zeilen sind grau.

Die Entscheidung, ob DBLABCAL den '+'-Flag setzen soll oder nicht, kann ebenfalls geändert werden. Nach dem Schließen des Dialogs wird in diesem Fall das gesamte Projekt neu berechnet.

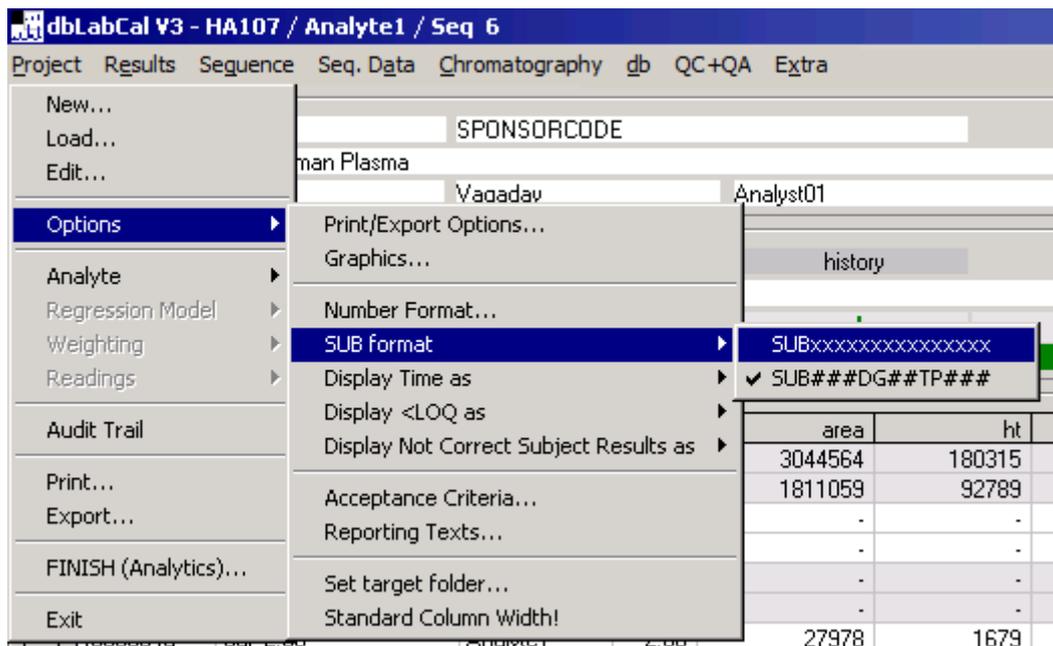
Man kann auch die Konzentrationseinheit ändern. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten. Entweder wird nur die Konzentrationseinheit (Beschriftung) geändert oder, wenn gleichzeitig mit der Wahl der neuen Konzentrationseinheit die SHIFT - Taste gedrückt wird, ist es möglich auch die nominellen Konzentrationen der bis jetzt gemessenen Kalibrierungs-, QC- und Validierungsproben entsprechend der neuen Konzentrationseinheit umzurechnen.

Die Änderungen der Konzentrationseinheit, Messgröße, Regressionsmodell usw., werden standardmäßig gleichzeitig für alle Analyten, die in einem Chromatogramm gemessen wurden, übernommen. Wenn man die STRG-Taste bei der Änderung gedrückt hält, wird die Einstellung nur für den gewählten Analyten geändert.

Wegen SHIFT und STRG-Taste, siehe auch Seite 12.

Alle Einstellungen (Einstellungen unter Menü Project | Settings) können aus einem existierenden Projekt kopiert werden.

## Menü Einstellungen



Über die einzelnen Punkte des Menüs werden verschiedene, für das aktuelle Projekt gültige Einstellungen gewählt.

Akzeptanz-Kriterien darf nur der Prüfleiter ändern. Analytiker und ReadOnly-User können sie nur einsehen. Alle anderen Einstellungen dürfen Analytiker und ReadOnly-User ändern. Die ReadOnly-User-Änderungen werden allerdings nicht gespeichert und gelten folglich nur während der aktuellen Sitzung.

Alle Einstellungen (alle Einträge in Projekt ->Einstellungen-Untermenüs) können aus einem vorhandenen Projekt im Dialog Projekt/Neu... , Projekt/Editieren... kopiert werden.

Alle Einstellungen (Einstellungen unter Menü Project | Settings) können aus einem existierenden Projekt kopiert werden.

### **Druck/Export Optionen...**

Über die Druck/Export Optionen... kann das Aussehen (und der Inhalt) der zu druckenden oder zu exportierenden Daten beeinflusst werden. Man kann z.B. verhindern, dass der Projektkode und der Sponsorkode oder die Namen der Analytiker, die die Sequenz(en) gemessen haben, gedruckt werden. Das Aussehen des Ausdrucks kann ebenfalls variiert werden (Rahmen..., Header grau...).

Über MAX.SPALTEN (LIST OF DATA) wird beim Druck der Probandenergebnisse im LIST OF DATA-Format die Anzahl der Spalten/Seite eingestellt, um das Erscheinungsbild aller Seitenausdrucke zu vereinheitlichen. Hat man z.B. 30 Probanden gemessen, wären 10 oder 15 (oder auch 6... ausprobieren...), gute Einstellungen.

Probandenergebnisse im STANDARD-Format werden üblicherweise mit 2 Spalten/Seite gedruckt - das spart Papier und ist manchmal übersichtlicher. Wenn aber einige Kommentare zu den Ergebnissen etwas länger sind und beim Ausdruck bis in die nächste Spalte reichen, sollte man mit NUR 1 SPALTE (SUB, STANDARD) lieber einspaltig drucken.

**Print/Export Options**

Printer: PDFCreator (Ne01:)

Font:  
 Arial Narrow 9  
 Study Code XY123  
 Line Spacing: 1.1

Page Setup:  
 portrait  landscape  
 Page Width [cm]: 17.0  
 left: 2.0 top: 2.0  
 right: 2.0 bottom: 1.0

Columns:  
 Max. Columns (List of Data): 12  
 Max. Columns (CAL, QC, VAL): 12  
 1 Column only (SUB, Standard)

Border (Tables/Graphics)  full  
 Header Shaded  bold  
 use dec.tabstops in Word tables

Column Widths:  
 Study: col 1 2 3 4  
 [cm] 2.1 9.2 3.0 2.7  
 Seq.: col 1 2 3 4 5 6  
 [cm] 2.1 7.3 1.9 3.0 0.8 1.9

Compact Presentation

Cancel Apply Apply and Save

Mit den Einstellungen von Ränder, Schriftart, Schriftgröße und Zeilenabstand kann man das Aussehen der DBLABCAL-Ausdrucke an den Bericht anpassen. Man kann mit diesen Einstellungen "spielen", um für sich die optimalen herauszufinden.

Über HEADER COLUMN WIDTHS kann man das Aussehen (Spaltenbreiten) des Projekt- und/oder Sequenz-Headers beim Ausdruck und beim formatierten Export nach MS Word beeinflussen. Für den formatierten Export nach MS Word kann man auch die zu benutzende Seitenbreite festlegen. Wird Page Width geändert, werden die einzelnen Spaltenbreiten auf die neue Seitenbreite normiert.

## Graphik...

Standardmäßig passt DBLABCAL die Skalierung aller Abbildungen an die aktuellen Daten an. Wenn gewünscht, kann man alle oder auch nur einige der Achsengrößen fest einstellen. Diese Einstellungen werden für alle Analyten aus einem Chromatogramm übernommen, falls sie nicht schon vorher individuell festgelegt wurden. Das heißt, die Skalierung kann für alle Analyten aus einem Chromatogramm gleich sein, muss es aber nicht.

**Graphic Options**

Calibration Curve

X max  auto

Y max  auto

QC Samples

X max  auto

Y min - Y max  auto 15

Subject Samples

X min - X max  auto

Y max  auto

Cancel Ok

*Schnellzugriff: Doppelklick auf die Graphik.*

## Zahlenformat...

Man kann für jede Größe entweder Anzahl der Dezimalstellen oder Anzahl der signifikanten Stellen wählen. Diese Einstellungen gelten für alle Analyten aus einem Chromatogramm.

**Number Format**

	Decimal Digits	Signif. Digits
Concentration		3
Time	2	
Dilution Factor	1	
Statistics [%]	1	
Retention Time	2	
Peak Area	0	
Peak Height	0	
Readings	4	
a	5	
b	5	
c	5	
r	5	
reassays diff%	0	
ISR diff%	1	

Cancel Apply

*Schnellzugriff für Anzahl der Dezimalstellen: Rechte Maustaste in der jeweiligen Kopfzeile in ANSICHT.*

### **SUB-Format...**

Für die Anzeige von SUB-Proben kann zwischen den beiden Möglichkeiten SUBxxxxxxx und SUB###DG###TP### gewählt werden.

### **Zeit-Format**

Zeitangaben (bei SUB- und VAL-Proben) erfolgen entweder in Stunden (h), in „\_d\_h\_m“- oder in „hh:mm“- Format (50.5h = 2d2h30m = 50:30)

### **<LOQ-Format**

<LOQ	in Ausgabe-Texte-Dialog definierter Text ('<LOQ')
<LOQ (NUMERISCH)	Statt <LOQ steht in den Ergebnissen der LOQ als Wert unter Berücksichtigung des jeweiligen Dilution-Faktors. Z.B. wenn bei DF=1 der LOQ gleich 0.5 ist: <0.5, oder bei DF=2 entsprechend <1.0, oder bei DF=0.5: <0.25 usw.
WERT	die gefundene Konzentration wird angezeigt

### **Nicht korrekte SUB-Ergebnisse-Format**

Für die Anzeige von nicht korrekten SUB-Proben kann zwischen den drei Möglichkeiten:

- Ergebnis nur Rot
- Ergebnis Rot markiert mit X
- Ergebnis als Text „n.correct“ oder „n.report“

## Akzeptanz-Kriterien...

Folgende Abbildung zeigt die möglichen Standardwerte für die Akzeptanz der einzelnen Sequenzen. Sollen für die aktuelle Projekte andere Akzeptanz-Kriterien gelten, werden sie hier eingetragen. Von der Art des aktuellen Projects und von der gewählten Regressionsmethode hängt es ab welche Kriterien gesetzt werden können. Z.B.:

oder

Nach einer Änderung werden alle Sequenzen des Projekts überprüft, ob sie die neuen Akzeptanzkriterien erfüllen. Falls für mindestens einen Analyten die neuen Akzeptanzkriterien nicht erfüllt werden, wird an die entsprechende Sequenznummer bei der Anzeige ein Ausrufezeichen '!' angehängt. In der Sequenz-Ansicht wird die Erfüllung der einzelnen Akzeptanzkriterien (grün: ok, rot: nicht ok) angezeigt. Weitere Details sind im Audit Trail zu sehen.

Verwandt mit den Akzeptanzkriterien ist auch das automatische Setzen der A/E bzw. des S-Flags.

Diese Funktion ist mit „off“ ausgeschaltet, oder man wählt den entsprechenden Prozentwert. DBLABCAL überprüft alle Proben auf Einhaltung dieses Kriteriums und setzt dann den Chromatogramm-Flag entsprechend der gewählten Bedingung automatisch.

Wenn das automatische Setzen des Flags wieder auf „off“ gesetzt wird nachdem es „an“ war, werden die aktuellen Flags NICHT geändert.

Acceptance Criteria		Standards	QCs
Max. deviation from nom. conc. at LOQ / LQC		20 %	15 %
Max. deviation from nom. conc. (remaining CALs/QCs)		15 %	15 %
Min. number of used and accepted values		6	4
			1
Set flag to # (all samples except CAL)if CV >		20 %	
Set flag for QCs/VALs to E if deviation higher than		reset!	
Set flag for SUBs to S if IS not within mean(CAL) ±		reset!	S
Set flag for QCS to S if IS not within mean(CAL) ±		off	S
<p>⚡ At least 1 QCs at the same concentration must fit acceptance criterion!</p> <p>⚡ All A flags will be set automatically to J!</p> <p>⚡ All S flags will be set automatically to J!</p>			
		Cancel	Ok

Erst wenn „reset!“ gewählt wird, werden alle A/E bzw. S-Flags zurück auf Y/J gesetzt.

*Schnellzugriff: Doppelklick auf Akzeptanzstatus-Darstellung im Sequenzbereich.*

**Ausgabe-Texte...**

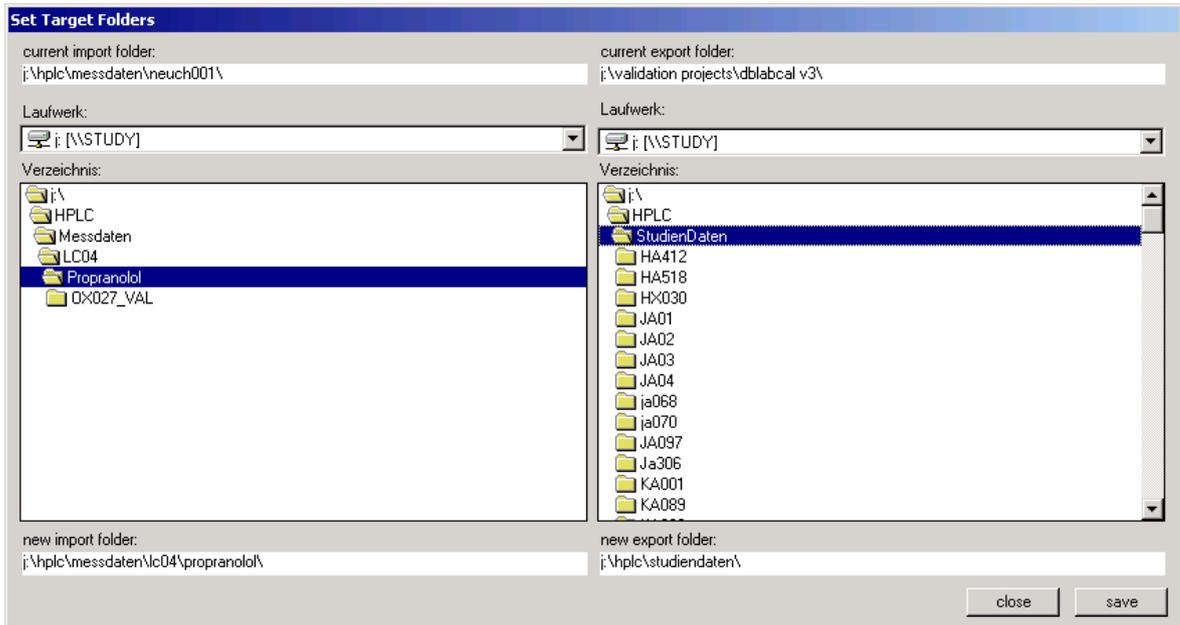
Um die Ausgabe der verschiedenen Texte des aktuellen Projekts anzupassen, kann der folgende Dialog aufgerufen werden.

Reporting Texts			
<b>General Texts:</b>	<b>Results:</b>		<b>Validation Samples</b>
Sequence batch	Sample destroyed during sampl.preparation destroyed		Default label Used label
Subject sub	No correct result available n.correct		NR: Matrix/Room Temperature NR: Matrix/Room Temperature
Period per	No sample NOS		NK: Matrix/Refrigerator (5±3°C) NK: Matrix/Refrigerator (5±3°C)
Time time	Not analyzed NOA		NG: Matrix/Freezer (-20±5°C) NG: Matrix/Freezer (-20±5°C)
Dilution Factor dil.f	Nothing is reported NOR		NT: Matrix/Deep Freezer (-77±5°C) NT: Matrix/Deep Freezer (-77±5°C)
	Sequence not accepted batch failed		ER: Extracts/Room Temperature ER: Extracts/Room Temperature
	Insufficient sample amount for re-assay insuff.s		EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C) EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C)
	Conc. Below the Quantification Limit <LOQ		EG: Extracts/Freezer (-20±5°C) EG: Extracts/Freezer (-20±5°C)
			ET: Extracts/Deep Freezer (-77±5°C) ET: Extracts/Deep Freezer (-77±5°C)
<b>Statistics:</b>			
Standard deviation sd			PR: Validation Samples PR: Validation Samples
Coefficient of variation cv [%]			PK: Validation Samples PK: Validation Samples
Range range			PG: Pools (freeze/thaw) PG: Pools (freeze/thaw)
Deviation of the means bias [%]			PT: Validation Samples PT: Validation Samples
Deviation of the results dev [%]			AR: Other Matrix AR: Other Matrix
Rel.deviation from 0-Value (Stability) rel [%]			AK: Validation Samples AK: Validation Samples
			AG: Validation Samples AG: Validation Samples
			AT: Validation Samples AT: Validation Samples
			BR: Validation Samples BR: Validation Samples
			BK: Validation Samples BK: Validation Samples
			BG: Validation Samples BG: Validation Samples
			BT: Validation Samples BT: Validation Samples
<b>Explanation for CAL, QC and VAL flags:</b>			
N N: not used for statistical evaluation due to chromatographic error			
S S: not used for statistical evaluation due to not accepted IS			
E A: not used for statistical evaluation due to deviation from nominal conc > _1_ %			
D D: destroyed during sample preparation			
X -: not measured			

Cancel Ok

*Der Platzhalter \_1\_ wird beim Ausdruck/Export mit dem gültigen Wert ersetzt. Es ist der Wert, der für die unterste Funktion der Akzeptanz-Kriterien gewählt wurde, oder wenn die diese Akzeptanz-Bedingung abgeschaltet ist, der/die entsprechenden Werte für LOQ und unterster QC (siehe vorherige Seite).*

**Zielverzeichnis setzen...**



Das Programm setzt voraus, dass die Daten in einer Verzeichnisstruktur

*Beispiel*

Oberverzeichnis	i:\unit01\	Inhalt (Beispiel)
Projekt1		XX001
Sequenz1		SP01 Chromatogramme 1. Sequenz in Plasma
Sequenz2		SP02 Chromatogramme 2. Sequenz in Plasma
Sequenz3		SU01 Chromatogramme 1. Sequenz in Urin
usw..		
Projekt2		XX002
Sequenz1		AB01
Sequenz2		AB02
usw..		
Projekt3		XX003
usw..		

organisiert sind und versucht z.B. beim Sequenzimport oder Datenexport sofort das benötigte Verzeichnis anzuwählen.

*Diese Verzeichnisstruktur ist keine Bedingung für DBLABCAL, sie erleichtert aber die Arbeit erheblich...Eine gute Verzeichnisstruktur und Namenskonvention ist generell sehr zu empfehlen.*

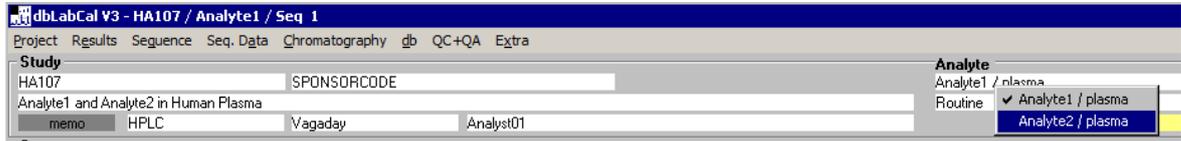
**Standard-Spaltenbreite!**

In den Tabellen kann man die Spaltenbreiten je nach Bedarf (mit der Maus) ändern. Mit Klick auf diesen Menüpunkt werden die ursprünglichen Spaltenbreiten wiederhergestellt.

## Analyt

Dieser Menüpunkt ist nur sichtbar, wenn in einem Projekt mehr als ein Analyt gemessen wurde.

Die Projektdaten des gewählten Analyten werden geladen.



*Schnellzugriff: Klick mit der rechten Maustaste über dem Namen des Analyten.*

## Regressionsmodell, Wichtung, Messgröße

Auf diese Menüpunkte hat man Zugriff nur wenn das Projekt eine Validierung ist. Nach dem Ändern von Messgröße, Wichtung bzw. Regressionsmodell werden die Daten des gesamten Projekts entsprechend den neuen Einstellungen neu berechnet.

**Diese Änderungen betreffen automatisch alle Analyten, die im gleichen Chromatogramm gemessen wurden! Will man die Parameter nur für einen der Analyten ändern, muss man das über PROJEKT | EDITIEREN... tun**

Über diese Menüpunkte ist es möglich nur jeweils ein Parameter zu ändern. Will oder muss man gleichzeitig mehrere Parameter ändern, ist es sinnvoller dies über PROJEKT | EDITIEREN... zu tun - siehe Seite 20. Dann wird das gesamte Projekt nur einmal umgerechnet, und nicht wie sonst, nach jeder Einzeländerung.

Schnellzugriff: Klick mit der rechten Maustaste über den entsprechenden Bezeichnungen.

*Ist es mal wünschenswert auch in einer „Routine“ die Regressionsmodell, Wichtung oder Messgröße zu ändern, muss man vorher den Projekttyp von 'Routine' auf 'Validierung' ändern. (Über PROJEKT | EDITIEREN... oder Klick mit der rechten Maustaste auf die Projekt-Typ-Bezeichnung.)*

## Audit Trail und Elektronische Unterschrift

Folgende Aktionen des Benutzers werden zusammen mit Datum, Uhrzeit und Namen im Audit Trail festgehalten:

In bestimmten Fällen wird die elektronische Unterschrift für die Aktion verlangt und ebenfalls im Audit Trail dokumentiert.

Aktion	Elektronische Unterschrift <b>(ES)</b> erforderlich
Neues Projekt definieren	
Projekt-Angaben editieren,	<b>X</b>
Zugriffsrechte vergeben	<b>X</b>
Regressionsmodell, Wichtung , Messgröße ändern	
Akzeptanzkriterien ändern	<b>X</b>
Daten (Sequenz) importieren	
Sequenz neu berechnen Sequenz-Akzeptanzkriterien überprüfen	
Status der Sequenz ändern	<b>X</b> nur wenn Sequenz ausgeschlossen wird oder ausgeschlossen war
Messplatz- oder Sequenznummer ändern	<b>X</b>
Startdatum der Sequenz ändern	<b>X</b>
Probenamen ändern	<b>X</b> nur wenn Sequenzstatus in der Zwischenzeit gesetzt wurde
Chromatogramm-Flag ändern	
Die zu berichtenden Messergebnisse aus Mehrfachmessungen auswählen	
Status des Projekts ändern	<b>X</b> nur wenn Freigabe zurückgenommen wird
QC Start und Ende QA Ende	<b>X</b> (QC Ende)
Eingabe einer elektronischen Unterschrift	N/A

## Drucken...

Die Ergebnisse der Projekte lassen sich jederzeit ausdrucken. Für die Dokumentation ist es allerdings sinnvoll nur Ausdrücke von freigegebenen Projekten zu benutzen.

Falls im Projekt mehrere Analyten (in einem Chromatogramm) gemessen wurden, hat man die Möglichkeit, die gewählten Daten entweder nur für den aktuellen Analyten oder für alle Analyten (aus einem Chromatogramm) gleichzeitig auszudrucken.

Gemeinsam für alle Analyten sind, falls die Analyten in einem Chromatogramm gemessen wurden:

- SEQUENZLISTE
- PROBANDEN (nur im STANDARD – Format, nicht LIST OF DATA – Format)
- ZU WIEDERHOLENDE PROBEN
- WIEDERHOLTE PROBEN
- INCURRED SAMPLES
- AUSGESCHLOSSENE CALS, QCs UND VALS
- AUSGESCHLOSSENE CHROMATOGRAMME
- AUSGESCHLOSSENE SEQUENZEN
- DATEN DER ANALYSEN
- AUDIT TRAIL

**Print**

Printer: PDFCreator (Ne01:)

Subject Samples Results

Standard from: [dropdown]

List of Data to: [dropdown]

existing only

Statistics: Calibration Curves

Statistics: Regression Parameters

Statistics: Quality Control Samples

Samples to be Re-Analysed

Re-Assayed Samples

Incurred Samples

Not Used CALs, QCs and VALs

Not Used Sequences

Not Used Chromatograms

Date of Analyses

Hints

Audit Trail

Table of Contents/Memo

Validation Samples

NR: Matrix/Room Temperature

NK: Matrix/Refrigerator (5±3°C)

NG: Matrix/Freezer (-20±5°C)

NT: Matrix/Deep Freezer (-75±15°C)

ER: Extracts/Room Temperature

EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C)

EG: Extracts/Freezer (-20±5°C)

ET: Extracts/Deep Freezer (-75±15°C)

PR: Validation Samples

PK: Validation Samples

PG: Pools (freeze/thaw)

PT: Validation Samples

AR: Other Matrix

AK: Validation Samples

AG: Validation Samples

AT: Validation Samples

BR: Validation Samples

BK: Validation Samples

BG: Validation Samples

BT: Validation Samples

QCs, DF<>1

Select All  print log

Print/Export Options...

Cancel Ok

Probanden werden in dem gewählten Format der Anzeige (Standard, List of Data, alle oder nur gemessene Proben) gedruckt.

Wenn man das Anzeige-Format "Standard" wählt, kann man die einzelnen Probanden indem man den ersten und den letzten Probanden wählt.

Mit SELECT ALL können alle Optionen gewählt , oder mit STRG- SELECT ALL, alle Optionen abgewählt werden.

Das Aussehen der Ausdrücke, wie z.B. Schriftart, Schrittgröße, Ränder, Schattierung usw., kann über das Menü PROJEKT | EINSTELLUNGEN | DRUCK/EXPORT-OPTIONEN oder hier im Drucken-Dialog variiert werden.

Der aktuelle Drucker wird angezeigt und kann bei Bedarf geändert werden.

Die Details zum Audit Trail werden gekürzt, damit sie auf eine Druckseite passen. Zur vollständigen Ansicht der Details kann man Audit Trail über die Zwischenablage z.B. nach Word oder Excel exportieren und von dort ausdrucken.

Wenn PRINT LOG gewählt wurde, wird am Ende des Druckauftrages noch ein Inhaltsverzeichnis des aktuellen Druckauftrages mit Angaben zu den den gedruckten Seitennummern gedruckt. Print log halt!

**Export...**

Es erscheint fast der gleiche Dialog, wie beim Drucken. MS Word muss nicht vorher gestartet werden da DBLABCAL Word bei Bedarf automatisch startet.

Die Daten können formatiert, d.h. die Tabellen werden gleich mit Rahmen, Schattierung und richtigen Spaltenbreiten geschrieben, exportiert werden. Die Ergebnisse sollten nach Word am Ende des Dokuments, oder noch besser in ein eigenes Dokument, exportiert werden, da beim Export die Schriftart und Größe für das Word-Dokument von der aktuellen Cursorposition bis zum Ende des Dokuments möglicherweise geändert wird (entsprechend den Einstellungen in DBLABCAL).

Format der exportierten Daten, falls formatiert exportiert werden soll, wie z.B. Schriftart, Schriftgröße, Ränder, Spaltenbreiten, Schattierung usw., kann über das Menü PROJEKT | EINSTELLUNGEN | DRUCK/EXPORT-OPTIONEN oder hier im Export-Dialog variiert werden.

Probanden werden in dem gewählten Format der Anzeige (Standard, Standard nur gemessene Proben bzw. List of Data) exportiert.

*Weiterhin kann man jederzeit die kompletten, aktuell angezeigten, oder nur die markierten Daten über die Windows-Zwischenablage (Tasten STRG-C oder STRG-EINFG, oder Klick mit der rechten Maustaste bei markierten Daten) in andere Programme exportieren.*

## Status eines Projekts ändern

Ein Projekt, genauer gesagt ein Analyt in einem Projekt, kann einen der folgenden Status' besitzen:

Status	Bemerkung	wird gesetzt...
<b>angelegt</b>	Projekt wurde vom Analytiker oder Prüfleiter angelegt, noch keine Daten importiert	automatisch beim Anlegen des Projekts
<b>gestartet</b>	Daten wurden für mindestens einen Analyten importiert	automatisch beim Import der 1.Sequenz
<b>beendet</b>	alle chromatographische Messungen beendet	vom Analytiker oder Prüfleiter
<b>freigegeben</b>	alle Chromatogramme und Sequenzen akzeptiert, zu berichtende Ergebnisse gewählt - alle Projektdaten "locked"	vom Prüfleiter
<b>archiviert</b>	Status wie 'freigegeben', die Projekte werden im Laden-Dialog angezeigt nur wenn Filter „archiv“ gewählt wird	vom Administrator

Mit dem Setzen des Projekt-Status' auf '**beendet**' bestätigt der **Analytiker**, dass alle Sequenzen des Projekts importiert und alle Chromatogramme des Projekts (mit dem entsprechenden Flag) von ihm akzeptiert wurden. Erst nachdem der Analytiker das Projekt 'beendet' hat, kann der Prüfleiter die Projektdaten freigeben.

Mit dem Setzen des Projekt-Status' auf '**freigegeben**' schließt der **Prüfleiter** die Datenbank. Es sind keine Änderungen der Projektdaten mehr möglich. Während des Freigabe-Vorgangs werden die Projektergebnisse noch mal geprüft. Falls z.B. noch keine zu berichtenden Werte aus Mehrfachmessung gewählt wurden, wird der Freigabe-Vorgang abgebrochen.

### ***Während der Freigabe werden alle Sequenzen automatisch gelockt!***

Projekt-Status '**archiviert**' setzt der **Administrator** (z.B. im Auftrag des Archivverantwortlichen). Der lesende Zugriff bleibt auch für die archivierten Projekte erhalten. Die Projektberechtigten können die Daten jederzeit einsehen, drucken und exportieren.

### **Änderung des Projekt-Status' ist eine Aktion mit sehr weitreichenden Konsequenzen !**

Nachdem ein Projekt freigegeben wurde, kann es

Status	Bemerkung	wird gesetzt...
...	QC noch nicht gestartet	
<b>QC in progress...</b>	QC von einem der „QC“ gestartet	automatisch beim 1. Speichern der QC-Kommentare
<b>QC in beendet</b>	QC von einem der „QC“ beendet	vom QC-User
<b>QA beendet</b>	Nur zu Dokumentation, keine weiteren Details zu QA in dbLabCal	vom Reviewer mit QA-Berechtigung

### **Ergebnisse für HoLaRo... / Ergebnisse für BI...**

Dieser Menüpunkt ist nur sichtbar wenn im Projekt unbekannte Proben (SUB) gemessen wurden, das Projekt freigegeben ist und diese Option vom Administrator freigeschaltet wurde. Hiermit werden die Ergebnisse in eine spezielle ASCII-Datei geschrieben. Zuerst erscheint ein Dialog in dem die zu exportierenden Daten bearbeitet werden können. Detaillierte Beschreibung dazu erfolgt im Anhang 1.

### **Ergebnisse in ASCII File!**

Dieser Menüpunkt ist nur sichtbar wenn im Projekt unbekannte Proben (SUB) gemessen wurden und das Projekt freigegeben ist. Hiermit werden die Ergebnisse in ASCII Datei(en) geschrieben, die z.B. für die biometrische Auswertungen eingesetzt werden können. Die Benennung der Dateien und die Zuordnung zu den Analyten werden vom Programm vorgenommen und im Anschluss an den Exportvorgang angezeigt und in Audit Trail geschrieben. Der Dateiname wird gebildet aus dem Projektkode, Namen des Analyten und aus der Matrix (Beispiele HA107\_ANALYT8\_PLASMA.BIO, HA107\_ANALYT8\_PLASMA-02.BIO , RT001\_SUBSTANZX\_SERUM.BIO, usw.). Bei Bedarf wird noch eine laufende Nummer angehängt, die automatisch immer um 1 erhöht wird, wenn schon eine gleichnamige Datei im Verzeichnis existiert.

Die Dateien werden in den gewählten Export-Verzeichnis, siehe Seite 28, geschrieben.

Das Format der ASCII-Dateien ist fest definiert und in der Programmdokumentation beschrieben.

### **Exit**

Beendet das Programm. Dabei wird gefragt, ob die aktuellen Daten beim nächsten Start automatisch geladen werden sollen.

## Menü Ergebnisse

Zeigt die Ergebnisse des aktuellen Projekts für den gewählten Analyten und, falls vorhanden, Hinweise der Datenbank z.B. über mögliche Unstimmigkeiten in den Daten, Überschreitungen der Grenzwerte von Kalibrierungs-, QC- und/oder Validierungsproben, noch nicht getätigte Auswahl der zu berichtenden Werte aus wiederholten Messungen usw...

The screenshot shows the 'dbLabCal V3 - NX023 / DAD / Seq 3' window. The 'Results' menu is open, showing options like 'Statistics: Calibration Curves', 'Statistics: Regression Parameters', 'Statistics: Quality Control Samples', 'Subject Samples Results', and 'Validation Samples'. The 'Validation Samples' option is selected, displaying a list of sample types and their storage conditions:

- NR: Matrix/Room Temperature
- NK: Matrix/Refrigerator (5±3°C)
- NG: Matrix/Freezer (-20±5°C)
- NT: Matrix/Deep Freezer (-75±15°C)
- ER: Extracts/Room Temperature
- EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C)
- EG: Extracts/Freezer (-20±5°C)
- ET: Extracts/Deep Freezer (-75±15°C)
- PR: Validation Samples
- PK: Validation Samples
- PG: Pools (freeze/thaw)
- PT: Validation Samples
- AR: Other Matrix
- AK: Validation Samples
- AG: Validation Samples
- AT: Validation Samples
- BR: Validation Samples
- BK: Validation Samples
- BG: Validation Samples
- BT: Validation Samples
- QCs, DF <>1

The background shows a table with columns for 'cv [%]' and 'bias [%]' and rows numbered 1 to 23.

**Wenn ein Projekt/Analyt geladen wird, ist es empfehlenswert sich zuerst die Hinweise der Datenbank anzuschauen.**

*Die Hinweise zu Validierungsproben können aus technischen Gründen erst angezeigt werden, nachdem sich der Analytiker die Daten wenigstens einmal angeschaut hat.*

---

**Statistiken**

...zeigen die Ergebnisse der statistischen Auswertungen von Kalibrierungs- und Qualitätskontrollproben.

Folgende Größen werden berechnet: Mittelwert (mean), Standardabweichung (sd) sowie Variationskoeffizient (cv) und Bias in %:

$$mean = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

$$sd = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} \quad ; n > 2 \qquad range = |x_1 - x_2| \quad ; n = 2$$

$$cv[\%] = 100 \frac{sd}{mean} \quad ; n > 2 \qquad cv[\%] = n/a (range/mean) \quad ; n = 2$$

$$bias[\%] = 100 \frac{calc.conc - nom.conc}{nom.conc}$$

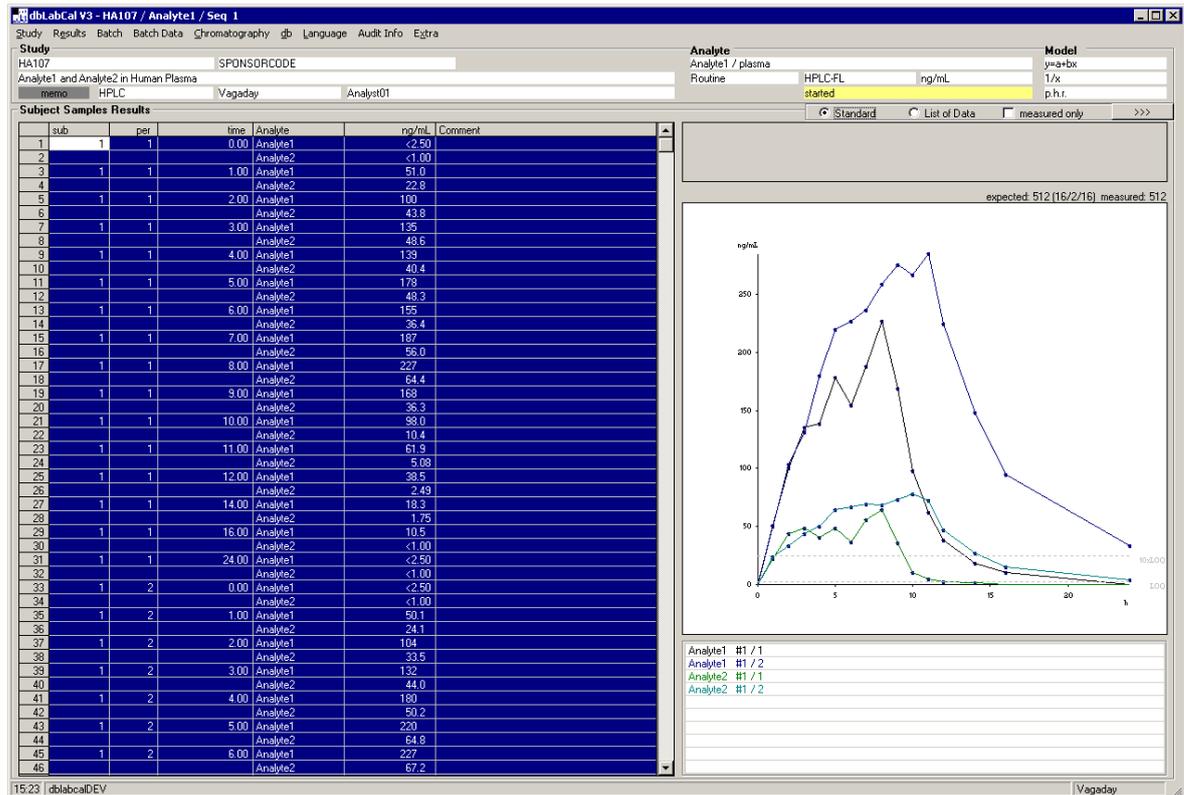
Wenn das Programm eine (und nur eine) Sequenz findet, in der die Anzahl der Wiederholungen grösser ist, als in allen anderen Sequenzen, werden zusätzlich auch die Ergebnisse der 'intra-day' Statistik für diese Sequenz berechnet und angezeigt.

Falls bei Qualitätskontrollproben ein oder mehrere Werte mit A/E-Flag aus der Statistik ausgeschlossen wurden, wird von dbLabCal automatisch noch eine Statistik inklusive dieser Werte berechnet.



## Probanden

Die Ergebnisse der Probanden lassen sich auf vier verschiedene Arten anzeigen (Standard, Standard/nur gemessene, List of Data, List of Data/nur gemessene). Bei den Standardanzeigen lassen sich die Ergebnisse auch graphisch darstellen. Die Skalierung der Achsen erfolgt automatisch, oder man wählt für die aktuellen Analyten feste Grenzen über Menü EINSTELLUNGEN | GRAPHIK... oder Doppelklick auf das Bild.



In der Abbildung werden die Daten aus den markierten Zeilen angezeigt. Sinnvollerweise wählt man einen Probanden mit Klick auf die linke obere Ecke der Probandentabelle. Dann erscheint eine Liste mit allen Probanden des Projekts. Nach der Wahl eines Probanden (oder „all“ als den letzten Eintrag) werden alle Ergebnisse des/der Probanden markiert und die Graphik angezeigt. Dann blättert man probandenweise mit den Tasten BILD↑ oder BILD↓ oder durchgangsweise mit SHFT-BILD↑ oder SHFT-BILD↓, durch.

Die Farben der Punkte haben folgende Bedeutung:

blau Wert Ok

violett Wert Ok, soll aber wiederholt werden (W -Flag)

grün Wert ist ein Ergebnis von wiederholten Messungen

rot Wert ist nicht korrekt (weitere Informationen in ZU WIEDERHOLENDE PROBEN und/oder HINWEISE)

Den einzelnen Durchgängen werden auch unterschiedliche Farben der Linien zugeordnet: schwarz:1.Durchgang, blau:2.Durchgang, grün:3.Durchgang, magenta:4.Durchgang, usw... Die Zuordnung der Farben zu den Durchgängen ist unter der Graphik sichtbar.

*Die graphische Darstellung kann durch Drücken der Tasten 1-9 an der numerischen Tastatur variiert werden. Tasten 1-9:Punktgröße, Liniendicke; bei gleichzeitig gedrückten CTRL-Taste werden auch die Linienfarben geändert.*

Mit der Darstellung der Konzentrations-Zeitverläufe kann man schnell überblicken, ob schon alle zu berichtenden Werte in Ordnung sind, bzw. ob es irgendwelche 'nicht plausible Ergebnisse' gibt.

Weitere Hilfe um die Korrektheit der vorhandenen Ergebnisse zu überblicken ist die Anzahl der erwarteten und gemessenen Proben. (Das Programm errechnet aus allen ihm bis jetzt bekannten Probanden, Durchgängen und Abnahmezeiten die Anzahl der Proben, die es erwartet.) Kann sich der Analytiker die Differenz zwischen erwarteten und gemessenen Proben nicht erklären, wurden wahrscheinlich eine/mehrere Probandenproben falsch benannt. Diese kann man dann sehr schnell finden, wenn man, wie oben beschrieben, die Probanden "durchblättert".

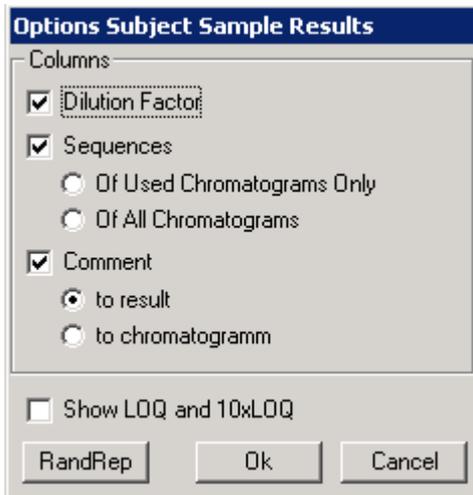
Fehlende Proben und Proben bei denen der Analytiker kein Wert berichten kann (oder will) werden, falls vorhanden, in einer kleinen Tabelle nochmals zusammengefasst und angezeigt. Probanden-Proben mit dem 'X'-Flag werden auch als 'missing bzw. NOS' angezeigt, falls sie nur einmal gemessen wurden.

Nach Doppelklick in der Spalte 'Kommentar' kann man zu jeder gemessenen Probe eine Bemerkung schreiben. Hier könnten zusätzliche Angaben zu den Proben, wie z.B. Kodierung des Sponsors u.ä. stehen.

Das Programm zeigt jedes Mal zusätzlich zum Kommentar, was der Analytiker geschrieben hat, den sogenannten 'internen Kommentar' an. In der Abbildung heisst es z.B.: die erste Probe war Ok, die Probe wurde zweimal gemessen und als zu berichtender Wert wurde der Mittelwert der beiden Messungen gewählt. Man kann den 'internen Kommentar' übernehmen oder auch löschen. (Beim nächsten Öffnen des Kommentars wird er trotzdem wieder angezeigt).

Ok (mw 1+2 von 2)

Über  kann man bei der Standardanzeige zusätzlich zu jedem Probandenergebnis den benutzten Dilution-Faktor und die Nummer(n) der Sequenz(en), in der/denen die Probe(n) gemessen wurden, anzeigen lassen.



### Dilution Faktor

In einer zusätzlichen Spalte wird auch der benutzte Dilution-Faktor angezeigt. Bei mehrmals gemessenen Proben ebenfalls, wenn alle 'Wiederholer' mit dem gleichen Dilution-Faktor gemessen wurden. Wenn die 'Wiederholer' mit unterschiedlichen Dilution-Faktoren gemessen wurden, ist hier keine Angabe möglich.

### Sequenzen nur für benutzte Chromatogramme

In einer zusätzlichen Spalte wird/werden die Nummer(n) der Sequenz(en), in der/den die für das Endergebnis benutzten Proben gemessen wurden, angezeigt.

### Sequenzen für alle Chromatogramme

In einer zusätzlichen Spalte wird/werden die Nummer(n) der Sequenz(en) angezeigt, in der/den die unbekannte Probe gemessen wurden, auch wenn die Konzentrationswerte nicht in das Endergebnis einfließen.

### Kommentar

Kommentarspalte wird ein- bzw. ausgeblendet.

### LOQ und 10xLOQ anzeigen

Bei der graphischen Darstellung der Ergebnisse werden Hilfslinien für die Quantifizierungsgrenze und das 10-fache der Quantifizierungsgrenze gezeichnet.

Bei der 'List of Data'-Anzeige werden in der Statuszeile weitere Informationen zur Probe unter dem Tabellen-Cursor angezeigt.

## RandRep

Nach dem Klick auf den RandRep-Button erscheint ein Dialog, in dem die „Random Repeats“ aus den bis zu diesem Zeitpunkt gemessenen Proben (und selektierten Zeilen) zufällig ausgewählt werden. In der Spalte „Reserve“ sind zusätzliche 10 Proben markiert, die benutzt werden sollen, falls die ursprünglich ausgewählten „Random Repeats“ z.B. wegen nicht ausreichendem Probenvolumen nicht nochmal gemessen werden können. Diese Liste kann ausgedruckt werden.

Random Repeats					
	Reserve	sub	per	time	Comment
1		1	1	2.50	
2		1	1	3.00	
3	R9	1	2	0.50	
4		1	2	2.00	
5		1	2	2.50	
6	R2	1	2	24.00	
7		2	1	0.50	
8		2	1	7.00	
9		2	2	0.50	
10		3	1	0.00	
11		3	1	3.50	
12		4	1	16.00	
13		4	2	0.00	
14		4	2	1.00	
15		4	2	2.50	
16		4	2	3.00	
17		4	2	10.00	
18		6	1	3.00	
19		6	2	3.50	
20	R1	6	2	6.00	
21	R10	7	1	2.00	
22		7	2	0.50	
23		7	2	2.00	
24		7	2	16.00	
25		7	2	240.00	
26		8	1	2.00	
27	R7	8	1	8.00	
28		8	2	2.00	
29		8	2	12.00	
30		9	1	0.50	
31		9	1	1.00	
32		9	1	3.00	
33	R6	9	1	7.00	
34		9	1	12.00	

Print    \\Aaidepawel\IT\_LJ1300N\_02\_S (Ne03:)    10 % (97 + 10)    Close

Alle Random Repeats werden – wenn sie vom Benutzer (STRG+R) gewählt wurden - in ERGEBNISSE PROBANDEN, ERGEBNISSE WIEDERHOLTE PROBEN und in der Sequenzliste gelb markiert.

## Validierungsproben

Es gibt 20 „Bildschirme“ für die Validierungsproben die beliebig für die Auswertung unterschiedlicher Stabilitäts- und Selektivitätsuntersuchungen benutzt werden können.

Die Gruppierung erfolgt über die Probenbezeichnung. Die Bildschirm-Gruppe wird mit der Buchstabenkombination (NR, NK,...EK...PT...AG...BG, BT) zugewiesen. Die „nominelle Konzentration“ in der Probenbezeichnung bestimmt die Spalte und die „Zeit“ die Gruppe innerhalb des Bildschirms.

Die Zuordnung der 0-Werte zu den einzelnen Arten der Stabilitätsproben erfolgt folgendermaßen:

- Gibt es nur einen Satz von Stabilitäts-0-Werten wird er automatisch allen vorhandenen Kombinationen „Matrix-Temperatur“ zugewiesen.
- Gibt es zu einer Kombination „Matrix/Temperatur“ ein oder mehrere Sätze von Stabilitäts-0-Werten mit der gleichen Kombination „Matrix/Temperatur“, werden sie zusammen angezeigt.

Time	Sequence	600	1100
1	0h	4	-
2		-	1060
3		-	1080
4		-	1090
5		-	1100
6	mean	-	1080
7	sd	-	19.5
8	cv [%]	-	1.8
9	bias [%]	-	-1.5
10	rel [%]	-	100.0
11	30m	4	-
12		-	1100
13		-	1130
14		-	1110
15		-	1130
16	mean	-	1120
17	sd	-	16.7
18	cv [%]	-	1.5
19	bias [%]	-	1.5
20	rel [%]	-	103.1
21	0h	6	558
22		-	558
23		-	535
24		-	560
25	mean	-	553
26	sd	-	12.0
27	cv [%]	-	2.2
28	bias [%]	-	-7.9
29	rel [%]	-	100.0
30	30m	6	538
31		-	537
32		-	533
33		-	534
34	mean	-	536
35	sd	-	2.65
36	cv [%]	-	0.5
37	bias [%]	-	-10.7
38	rel [%]	-	96.9

Dabei wird automatisch immer der „nächste“ Satz von Stabilitäts-0-Werten als 100% gesetzt und die relative Abweichung der Stabilitätswerte in Prozent, bezogen auf diesen Stabilitäts-0-Satz berechnet.

Wenn es zu einer Kombination „Matrix/Temperatur“ keinen entsprechenden Satz von Stabilitäts-0-Werten gibt, kann der Analytiker über die Schaltfläche  die Zuweisung der 0-Werte manuell vornehmen.

Default label	Used label	<input type="checkbox"/> Use stability 0 set of...	calculate with
NR: Matrix/Room Temperature	NR: Matrix (RT) protected from light	<input checked="" type="checkbox"/> NR: Matrix (RT) protected from light (Seq. 2)	calc. conc. <input checked="" type="checkbox"/>
NK: Matrix/Room Temperature	NK: Matrix/Room Temperature (stabilisiert)		
NG: Matrix/Freezer (-20±5°C)	NG: Matrix/Freezer (-20±5°C)		
NT: Matrix/Deep Freezer (-75±15°C)	NT: Matrix (RT) unprotected from light	<input checked="" type="checkbox"/> NR: Matrix (RT) protected from light (Seq. 2)	calc. conc. <input checked="" type="checkbox"/>
ER: Extracts/Room Temperature	ER: Extracts (RT) protected from light	<input checked="" type="checkbox"/> NR: Matrix (RT) protected from light (Seq. 2)	calc. conc. <input checked="" type="checkbox"/>
EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C)	EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C)		
EG: Extracts/Autosampler (ca.10°C)	EG: Extracts/Autosampler (ca.10°C)		
ET: Extracts/other conditions...light	ET: Extracts (RT) unprotected from light	<input checked="" type="checkbox"/> NR: Matrix (RT) protected from light (Seq. 2)	calc. conc. <input checked="" type="checkbox"/>
PR: Selectivity/Matrix test (use area)	PR: Selectivity/Matrix test (use area)		
PK: VAL-Samples free	PK: VAL-Samples free		
PG: Freeze/Thaw	PG: Freeze/Thaw	<input checked="" type="checkbox"/> NR: Matrix (RT) protected from light (Seq. 2)	calc. conc. <input checked="" type="checkbox"/>
PT: VAL samples free	PT: VAL samples free		
AR: Whole Blood (during sample collection)	AR: Whole Blood (during sample collection)	<input checked="" type="checkbox"/> AK: Stock Solutions Analyte (use area) (Seq. 5)	area <input checked="" type="checkbox"/>
AK: Stock Solutions Analyte (use area)	AK: Stock Solutions Analyte (use area)	<input checked="" type="checkbox"/> AK: Stock Solutions Analyte (use area) (Seq. 5)	area <input checked="" type="checkbox"/>
AG: Working Solutions Analyte (use area)	AG: Working Solutions Analyte (use area)	<input checked="" type="checkbox"/> AG: Working Solutions Analyte (use area) (Seq. 5)	area <input checked="" type="checkbox"/>
AT: VAL samples free (0-er)	AT: VAL samples free (0-er)	<input checked="" type="checkbox"/> AK: Stock Solutions Analyte (use area) (Seq. 5)	area <input checked="" type="checkbox"/>
BR: Carry-over (use area)	BR: Carry-over (use area)		area <input checked="" type="checkbox"/>
BK: Stock solution IS (use area)	BK: Stock solution IS (use area)	<input checked="" type="checkbox"/> BK: Stock solution IS (use area) (Seq. 5)	area <input checked="" type="checkbox"/>
BG: Working solution IS (use area)	BG: Working solution IS (use area)		
BT: VAL samples free (0-er)	BT: VAL samples free (0-er)	<input checked="" type="checkbox"/> BK: Stock solution IS (use area) (Seq. 5)	area <input checked="" type="checkbox"/>

Show and print deviations from nominal conc.  
 use deviation from nominal concentration only

Buttons:

Für den Fall, dass man andere Stabilitätsbedingungen oder andere Matrices (z.B. Analyt-Lösungen...) untersuchen muss, kann man die Standardbeschriftungen für die verschiedenen Arten der Validierungsproben ändern (Beispiele: „Plasma Stabilisiert / -80°C“, „Analyt Lsg in MeOH/ 5°C“).

Wird ein Text in der Spalte „Benutzte Beschriftung“ gelöscht, werden wieder die Standardbeschriftungen benutzt. Hier kann auch „Andere Matrix“ genauer benannt werden, z.B. in „Vollblut/Probenaufarbeitung“, was in der Regel der Fall ist.

Außerdem kann man festlegen, ob Abweichungen vom Sollwert angezeigt werden sollen und/oder ob die Auswertung der Stabilitätsdaten über die für den Analyten benutzte Messgröße (p.h.r. oder p.a.r.) oder über die Peakhöhe und/oder Peakfläche (auch nur für den Internen Standard!) direkt erfolgen soll, oder ob die Abweichung von der nominellen Konzentration statt der Abweichung von dem 0-Wert angegeben werden soll.

## Validierungsproben, Spezialfall: Matrix-Test

Schritt 1: Im folgenden Beispiel wurden 6 verschiedene Matrizes auf Interferenzen am LOQ getestet. Dazu werden die Blank-Matrizes jeweils 2x, die LOQ jeweils 6x injiziert.

Mit der letzten (unsichtbaren) Stelle für die Konzentration wird die Spalte in der Ergebnistabelle bestimmt.

memo		
Sequence List		
	file/sampleID	name
33	id_00017	w.b.
35	id_00018	val pr 1 0.10001
37	id_00019	val pr 1 0.10002
39	id_00020	val pr 1 0.10003
41		10004
43		10005
45	id_00021	val pr 1 0.10006
47	id_00024	val pr 1 0.10001
49	id_00025	val pr 1 0.10002
51	id_00026	val pr 1 0.10003
53	id_00027	val pr 1 0.10004
55	id_00028	val pr 1 0.10005
57	id_00029	val pr 1 0.10006
59	id_00030	val pr 0 0.10001
61	id_00031	val pr 0 0.10001
63	id_00032	val pr 0 0.10001
65	id_00033	val pr 0 0.10001
67		0001
69		0001
71	id_00036	val pr 0 0.10002
73	id_00037	val pr 0 0.10002
75	id_00038	val pr 0 0.10002
77	id_00039	val pr 0 0.10002
79	id_00040	val pr 0 0.10002
81	id_00041	val pr 0 0.10002
83	id_00042	val pr 0 0.10003
85	id_00043	val pr 0 0.10003
87	id_00044	val pr 0 0.10003
89	id_00045	val pr 0 0.10003
91	id_00046	val pr 0 0.10003
93	id_00047	val pr 0 0.10003
95	id_00048	val pr 0 0.10004
97	id_00049	val pr 0 0.10004
99	id_00050	val pr 0 0.10004
101	id_00051	val pr 0 0.10004
103	id_00052	val pr 0 0.10004
105	id_00053	val pr 0 0.10004
107	id_00054	val pr 0 0.10005
109	id_00055	val pr 0 0.10005
111	id_00056	val pr 0 0.10005
113	id_00057	val pr 0 0.10005
115	id_00058	val pr 0 0.10005
117	id_00059	val pr 0 0.10005
119	id_00060	val pr 0 0.10006
121	id_00061	val pr 0 0.10006
123	id_00062	val pr 0 0.10006
125	id_00063	val pr 0 0.10006
127	id_00064	val pr 0 0.10006
129	id_00065	val pr 0 0.10006
131	id_00066	...

BLANKS

LOQS

Schritt 2: In Option Val Samples muss der Text „matrix“ enthalten sein, als „calculate with“ muss „area“ gewählt sein.

**Options Validation Samples**

Default label	Used label	Use stability 0 set of...	calculate with
NR: Matrix/Room Temperature	NR: Matrix/Room Temperature		
NK: Matrix/Refrigerator (5±3°C)	NK: Matrix/Refrigerator (5±3°C)		
NG: Matrix/Freezer (-20±5°C)	NG: Matrix/Freezer (-20±5°C)		
NT: Matrix/Deep Freezer (-77±5°C)	NT: Matrix/Deep Freezer (-77±5°C)		
ER: Extracts/Room Temperature	ER: Extracts/Autosampler (10°C)	ER: Extracts/Autosampler (10°C) (Seq. 3)	area
EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C)	EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C)		
EG: Extracts/Freezer (-20±5°C)	EG: Extracts/Freezer (-20±5°C)		
ET: Extracts/Deep Freezer (-77±5°C)	ET: Extracts/Deep Freezer (-77±5°C)		
PR: Validation Samples	PR: Selectivity/Matrix Test	PR: Selectivity/Matrix Test (Seq. 3)	area
PK: Validation Samples	PK: Validation Samples		
PG: Pools (freeze/thaw)	PG: Pools (freeze/thaw)		
PT: Validation Samples	PT: Validation Samples		
AR: Other Matrix	AR: Reliability	AR: Reliability (Seq. 2)	calc. conc.
AK: Validation Samples	AK: Specificity_without Glucuronides	AK: Specificity_without Glucuronides(Seq. 2)	calc. conc.
AG: Validation Samples	AG: Specificity_with 100ng/mL Y130	AG: Specificity_with 100ng/mL Y13(Seq. 2)	calc. conc.
AT: Validation Samples	AT: Validation Samples		
BR: Validation Samples	BR: Carry-over		area
BK: Validation Samples	BK: Validation Samples		
BG: Validation Samples	BG: Validation Samples		
BT: Validation Samples	BT: Validation Samples		

Show and print deviations from nominal conc.  
 use deviation from nominal concentration only

Cancel Ok

Ergebnis:

dbLabCal V3 - QA639 / Seq. 1

Project Results Sequence Seq. Data Chromatography db QC+QA Extra

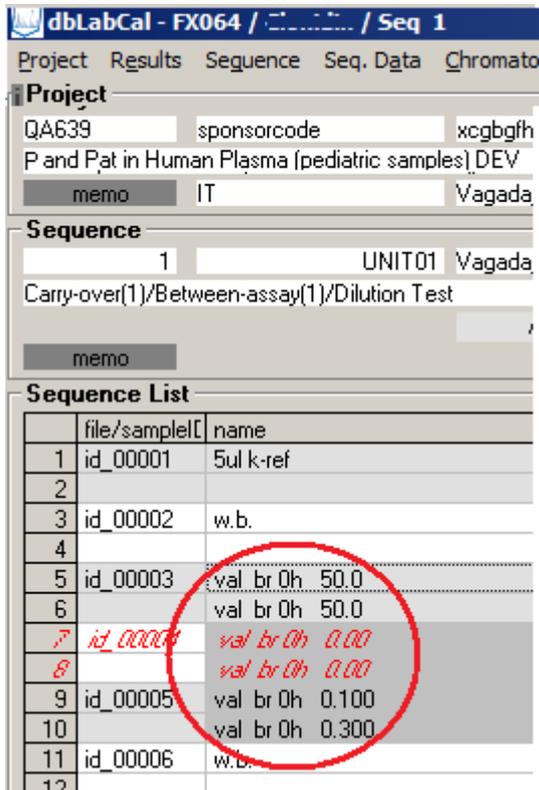
Project QA639 sponsorcode xcgbghbfghv This project is part of a Multi-Site GLP Study  
 Pe and Pat in Human Plasma (pediatric samples) DEV Validation  
 memo IT Vagaday Vagaday

**Validation Samples PR: Selectivity/Matrix Test ( peak area )**

#	Sequence	0.100	0.100	0.100	0.100	0.100	0.100
1	LOG 3 *	12255	12276	11869	16510	13189	11392
2		13031	12127	11652	15333	12721	12248
3		12238	12125	11732	14959	13577	11234
4		12936	11331	12030	15392	12795	11223
5		12766	11781	11911	14284	14101	11777
6		12632	12027	12132	15384	12872	12228
7	mean	12643	11945	11888	15310	13209	11684
8	sd	336	342	179	725	539	474
9	cv [%]	2.66	2.87	1.51	4.73	4.08	4.06
10		-	-	-	-	-	-
11	rel [%]	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00	100.00
12	BLANK 3 *	836	1120	553	3375	1650	997
13		432	558	397	2385	1522	766
14	mean	634	839	475	2880	1586	881
15	range	404	562	155	990	128	231
16	range [%]	63.66	67.06	32.72	34.37	8.07	26.26
17		-	-	-	-	-	-
18	rel [%]	5.01	7.02	4.00	18.81	12.01	7.54
19							
20							

## Validierungsproben, Spezialfall: Carry-Over-Test

Schritt 1: Im folgenden Beispiel wurden in insgesamt 6 Sequenzen die „Carry-Over“-Proben ULQ->BLANK->LOQ injiziert. (Möglich wäre auch ULQ->BLANK-> BLANK->LOQ...)



dbLabCal - FX064 / ..... / Seq 1

Project Results Sequence Seq. Data Chromato

**Project**

QA639 sponsorcode xcgbgfh  
P and Pat in Human Plasma (pediatric samples) DEV  
memo IT Vagada

**Sequence**

1 UNIT01 Vagada  
Carry-over(1)/Between-assay(1)/Dilution Test  
memo

**Sequence List**

	file/sampleID	name
1	id_00001	5ul k-ref
2		
3	id_00002	w.b.
4		
5	id_00003	val br 0h 50.0
6		val br 0h 50.0
7	<del>id_00004</del>	<del>val br 0h 0.00</del>
8		val br 0h 0.00
9	id_00005	val br 0h 0.100
10		val br 0h 0.300
11	id_00006	w.b.
12		

Schritt 2: In Option Val Samples muss der Text „carry“ und „over“enthalten sein, als „calculate with“muss „area“ gewählt sein.

**Options Validation Samples**

Default label	Used label	Use stability 0 set of...	calculate with	
NR: Matrix/Room Temperature	NR: Matrix/Room Temperature			<input type="checkbox"/>
NK: Matrix/Refrigerator (5±3°C)	NK: Matrix/Refrigerator (5±3°C)			<input type="checkbox"/>
NG: Matrix/Freezer (-20±5°C)	NG: Matrix/Freezer (-20±5°C)			<input type="checkbox"/>
NT: Matrix/Deep Freezer (-77±5°C)	NT: Matrix/Deep Freezer (-77±5°C)			<input type="checkbox"/>
ER: Extracts/Room Temperature	ER: Extracts/Autosampler (10°C)	ER: Extracts/Autosampler (10°C) (Seq. 3)	area	<input checked="" type="checkbox"/>
EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C)	EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C)			<input type="checkbox"/>
EG: Extracts/Freezer (-20±5°C)	EG: Extracts/Freezer (-20±5°C)			<input type="checkbox"/>
ET: Extracts/Deep Freezer (-77±5°C)	ET: Extracts/Deep Freezer (-77±5°C)			<input type="checkbox"/>
PR: Validation Samples	PR: Selectivity/Matrix Test	PR: Selectivity/Matrix Test (Seq. 3)	area	<input type="checkbox"/>
PK: Validation Samples	PK: Validation Samples			<input type="checkbox"/>
PG: Pools (freeze/thaw)	PG: Pools (freeze/thaw)			<input type="checkbox"/>
PT: Validation Samples	PT: Validation Samples			<input type="checkbox"/>
AR: Other Matrix	AR: Reliability	AR: Reliability (Seq. 2)	calc. conc.	<input checked="" type="checkbox"/>
AK: Validation Samples	AK: Specificity_without Glucuronides	AK: Specificity_without Glucuronides(Seq. 2)	calc. conc.	<input checked="" type="checkbox"/>
AG: Validation Samples	AG: Specificity_with 100ng/mL Y130	AG: Specificity_with 100ng/mL Y13(Seq. 2)	calc. conc.	<input checked="" type="checkbox"/>
AT: Validation Samples	AT: Validation Samples			<input type="checkbox"/>
BR: Validation Samples	<b>BR: Carry-over</b>		<b>area</b>	<input checked="" type="checkbox"/>
BK: Validation Samples	BK: Validation Samples			<input type="checkbox"/>
BG: Validation Samples	BG: Validation Samples			<input type="checkbox"/>
BT: Validation Samples	BT: Validation Samples			<input type="checkbox"/>

Show and print deviations from nominal conc.  
 use deviation from nominal concentration only

Cancel Ok

Ergebnis:

dbLabCal V3 - QA639 / / / Seq. 2

Project Results Sequence Seq. Data Chromatography db QC+QA Extra

**Project**  
 QA639 sponsorcode xcgbgfhbfgvh This project is part of a Multi-Site GLP Study  
 Pe and Pat in Human Plasma (pediatric samples) DEV  
 memo IT Vagaday Vagaday

**Validation Samples BR: Carry-over ( peak area )**

	Sequence	0.00	0.100	50.0
1	1 *	1230	11661	5615080
2	2 *	3076	6363	3452020
3	3 *	2398	10808	5449620
4	4 *	2919	12486	5173020
5	5 *	2102	13416	5841030
6	mean	2345	10947	5106154
7	sd	736	2739	956249
8	cv [%]	31.40	25.02	18.73
9	blank in % LOQ	21.42	-	-
10	blank in % UOQ	0.05	-	-
11				
12				
13				

## Wiederholer

### Zu wiederholende Proben

In ZU WIEDERHOLENDE PROBEN werden alle Probandenproben (Chromatogramme) angezeigt, deren Flag gleich 'N', 'W/R', 'D', 'V', '<', '>' oder '+' ist und die noch nicht wiederholt wurden. Dabei werden alle Chromatogramme aufgelistet, in denen der Flag eines der Analyten im Chromatogramm die obengenannte Bedingung erfüllt. Proben mit dem 'X'-Flag werden ignoriert.

sub	per	time	Analyte	ng/mL (calc)	dil	Seq	Details
1	1	12.00	Analyte1	38.5	1.0	4	DepMan: chromatogr. error
2	1	9.00	Analyte2	72.9	1.0	4	DepMan: internal standard area/height not accepted
3							
4							
5							
6							
7							

In der Spalte 'Details' steht die 'wörtliche Übersetzung' des jeweiligen Chromatogramm-Flags, und der Name des Analytikers (bei Flag: 'N', 'W/R') oder DBLABCAL (bei Flag: '<', '>', '+').

Der Analytiker sollte, wenn er ein Chromatogramm-Flag in ANSICHT | LISTE geändert hat, in der Spalte 'comment' auch eine genauere Begründung anzugeben. Dieses Kommentar zum Chromatogramm wird, wie z.B. in der obigen Abbildung zu sehen ist, in der Spalte 'Details' auch angezeigt.

In der letzten Spalte kann der Analytiker mit Doppelklick die angezeigte zu wiederholende Probe akzeptieren und damit bestätigen, dass sie doch nicht wiederholt werden muss. Das geht natürlich nur, wenn DBLABCAL den „zu wiederholen“-Flag gesetzt hat und nicht der Analytiker selbst.

## Wiederholte Proben

WIEDERHOLTE PROBEN zeigt nur die "Standard"- Wiederholer ohne incurred samples.

Falls Proben sowohl wegen "Standard"-Wiederholer (flag N, R, D, >, <...) als auch für ISR mehrfach gemessen wurden, werden sie in beiden Listen (RE-ASSAYED SAMPLES und INCURRED SAMPLES) mit entsprechender Hintergrundfarbe (gelb, weiss) angezeigt

In wird bei der Wahl des zu berichtenden Ergebnisses die prozentuale Abweichung der Wiederholer berücksichtigt. Sie wird für die einzelnen Messergebnisse, (Reihenfolge: 1.-2. | 2.-3. | 3.-1. Messung) ausgedrückt in Prozent des jeweiligen Mittelwertes in der letzten Spalte angezeigt. (Siehe auch OPTIONEN WIEDERHOLER) Wenn die Einzelwerte voneinander um mehr, als im Dialog OPTIONEN WIEDERHOLER vorgegeben, abweichen, ist es nicht möglich, den Mittelwert als zu berichtenden Wert zu wählen. (na ja, die Prüfleiter-Sonderwunsch-Taste...)

sub	per	time	1st meas.	Seq.	flag	2nd meas.	Seq.	flag	3rd meas.	Seq.	flag	reported	Choice	Analyte	d(%)
1	5	1	12.00	305	6	R	308	11	Y	-	-	306	M12	Analyte1	1H
2				50.7	6	R	51.0	11	Y	-	-	50.8	M12	Analyte2	0H
3	5	1	14.00	341	6	R	333	11	Y	-	-	337	M12	Analyte1	2H
4				83.1	6	R	80.6	11	Y	-	-	81.8	M12	Analyte2	3H
5	5	1	16.00	442	6	R	423	11	Y	-	-	432	M12	Analyte1	4H
6				111	6	R	104	11	Y	-	-	107	M12	Analyte2	5H
7	5	1	24.00	242	6	R	247	11	Y	-	-	244	M12	Analyte1	2H
8				43.2	6	R	44.2	11	Y	-	-	43.7	M12	Analyte2	2H
9	7	1	16.00	308	7	R	283	11	Y	-	-	295	M12	Analyte2	2H
10				43.7	7	R	40.1	11	Y	-	-	41.9	M12	Analyte1	2H
11	7	1	24.00	522	7	R	498	11	Y	-	-	510	M12	Analyte1	2H
12				75.6	7	R	71.3	11	Y	-	-	73.5	M12	Analyte2	2H
13	9	1	16.00	194	8	R	172	11	Y	-	-	183	M12	Analyte1	6H
14				48.7	8	R	42.0	11	Y	-	-	45.4	M12	Analyte2	15H
15	9	1	24.00	371	8	R	347	11	Y	-	-	359	M12	Analyte1	7H
16				120	8	R	111	11	Y	-	-	116	M12	Analyte2	8H
17	14	2	11.00	145	10	R	146	11	Y	-	-	146	M12	Analyte1	1H
18				21.4	10	R	21.6	11	Y	-	-	21.5	M12	Analyte1	1H
19	14	2	12.00	164	10	R	167	11	Y	-	-	166	M12	Analyte1	2H
20				26.6	10	R	27.1	11	Y	-	-	26.9	M12	Analyte2	2H
21	14	2	14.00	253	10	R	255	11	Y	-	-	254	M12	Analyte1	1H

Der Analytiker wählt mit der rechten Maustaste in der Spalte 'Wahl' den zu berichtenden Wert aus den Mehrfachmessungen. Vom DBLABCAL werden nur die sinnvollen Möglichkeiten angeboten. In dem Falls es nur eine Möglichkeit für die Wahl des zu berichtenden Wertes gibt (z.B. 1. Messung=Flag 'N', '>', '<', 'D' usw., 2.Messung=Flag 'J/Y'), wird auch nur diese eine angeboten. Es ist darum empfehlenswert, da es einige Klicks spart, zuerst die zu berichtenden Werte **automatisch** eintragen zu lassen (siehe weiter unten).

Man hat auch die Möglichkeit **kein** Wert zu berichten. In diesem Fall sollte in der Spalte 'Kommentar' in ERGEBNISSE | PROBANDEN der Grund angegeben werden.

Die Incurred Samples werden in einer separaten Liste/Ansicht angezeigt. Die Arbeitsweise ist identisch.

Nach der Wahl des zu berichtenden Wertes steht in der Spalte 'Wahl' ein Kürzel. In der folgenden Tabelle ist die Bedeutung des Kürzels erklärt:

Kürzel	Bedeutung
1	<b>berichtet wird das Ergebnis der ersten Messung</b> - keine korrekte zweite (oder dritte) Messung
2a	<b>berichtet wird das Ergebnis der zweiten Messung</b> - keine korrekte erste (und dritte) Messung vorhanden - keine verlässliche erste Messung vorhanden - erste Messung oberhalb des kalibrierten Bereichs - erste Messung unterhalb des verkleinerten kalibrierten Bereichs
2b	
2c	
2d	
3	<b>berichtet wird das Ergebnis der dritten – neunten Messung</b> - keine korrekte erste und zweite Messung vorhanden
M12	<b>berichtet wird der Mittelwert von zwei/drei/vier Messungen</b> - erste Messung mit der zweiten bestätigt *) - erste Messung mit der dritten bestätigt *) - zweite Messung mit der dritten bestätigt *) - erste und zweite Messung mit der dritten bestätigt *) usw. M14 M24 M34 M124 M134 M234 M1234
M13	
M23	
M123	
M14	
M24	
M34	
M124	
M134	
M234	
M1234	

\*) Differenz der Einzelmessungen ist kleiner als in OPTIONEN WIEDERHOLER – Dialog gewählter Wert

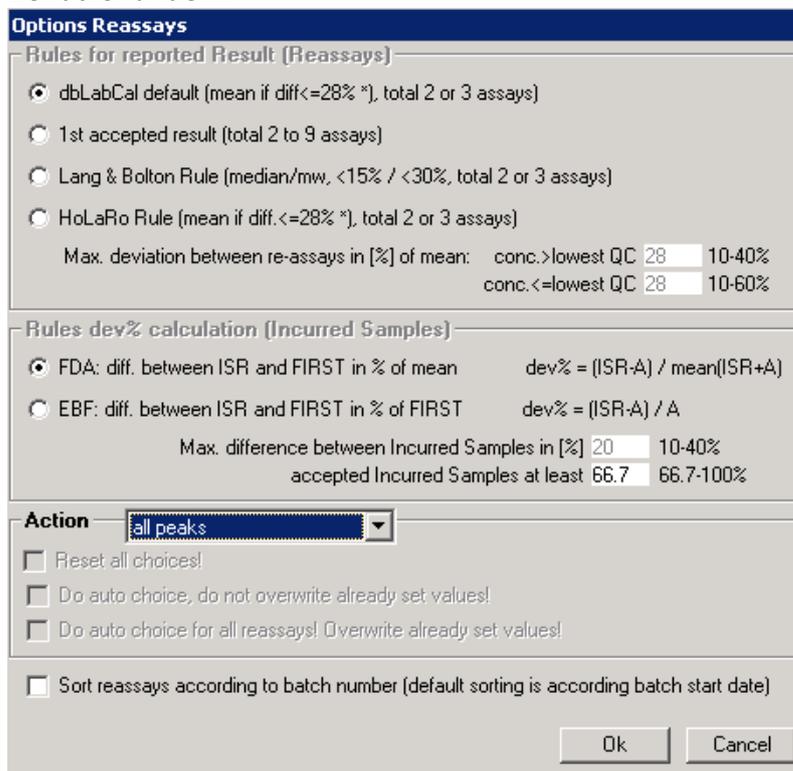
Wenn das erste Untermenü gewählt wurde, oder die Wahl entsprechend Lang&Bolton erfolgte, steht in der Spalte 'Wahl' keines der obengenannten Kürzel, sondern nur welches Ergebnis berichtet wird (1.Wert, 2.Wert, mw1+2, mw123 usw.)

Nach Klick auf  erscheint der folgende Dialog: Hier kann der Prüfleiter die Regel bestimmen. Möglich sind:

- Standard ist die dbLabCal-Regel (bestätigter MW, ansonsten eine weitere Messung...)
- der erste akzeptierte Wert wird berichtet
- nach Lang/Bolton Regel  
(J.R.Lang and S.Bolton, J.Pharm.Biomed.Anal. **9**, 357-361 (1991), siehe auch Anh. 14)
- nach HoLaRo-Regel, siehe auch Anh. 15

Der Prüfleiter kann hier die maximale prozentuale Abweichung der Einzelmessungen von ihrem Mittelwert festlegen. Man kann für 2 „Konzentrationsbereiche“ ( $\leq$  unterster QC,  $>$ unterster QC) verschiedene akzeptierte Abweichungen festlegen. Wenn ein Ergebnis kleiner oder gleich dem untersten QC ist wird das entsprechende Kriterium angewandt. Beide Kriterien werden standardmäßig beim Definieren eines neuen Projekts auf 28% gesetzt.

Die Art, wie die Chromatogramm-Flags in der Tabelle angezeigt werden, kann jeder Benutzer ändern.



Im unteren Teil des Dialogs wird die automatische Wahl der Ergebnisse gesteuert. Dabei werden entweder **alle** 'Wiederholer' automatisch gewählt (unterste Checkbox) oder nur die, die vom Analytiker noch nicht gesetzt wurden (mittlere Checkbox).

Wenn die schon gesetzten Wiederholer von dbLabCal überschrieben werden sollen, wird auch die vom Analytiker inzwischen gefällte Wahl überschrieben - oder gelöscht, falls vom Programm keine eindeutige Wahl getroffen werden kann.

Wenn von der mehrmals gemessenen Proben nur ein "gültiges" Ergebnis vorliegt, wird dieses auch automatisch berichtet.

Bei der dbLabCal-Standardregel wird als Kriterium für die Wahl des zu berichtendes Wertes aus zwei/drei gültigen Messungen (Chromatogramm-Flag: J, W/R) die Differenz der jeweiligen Werte ausgedrückt in Prozent ihres Mittelwertes herangezogen. Ist die Differenz kleiner als der in OPTIONEN WIEDERHOLER gewählter Wert, wird der Mittelwert gebildet, ansonsten erfolgt keine automatische Wahl.

Bei der 1Wert-Regel wird die erste gültige Messung (Chromatogramm-Flag: J, 0, W/R) berichtet.

Die Flussdiagramme für die Wahl nach Lang&Bolton- bzw. HoLaRo-Regel sind im Anhang abgebildet.

Falls mehr als die maximal erlaubte Anzahl der Messungen (3, 4 oder max.9) registriert wurden (siehe HINWEISE), muss der Analytiker/Prüfleiter entscheiden, welche 3, 4 bzw. 9 Chromatogramme ausgewertet werden sollen. Die restlichen Chromatogramme sollten umbenannt werden (z.B. in DIV).

Mehrfachmessungen, in denen alle Konzentrationen <LOQ lagen, werden hier übersichtshalber auch angezeigt. Wenn alle LOQ's (unter Berücksichtigung des Dilution-Faktors) gleich waren, wird als zu berichtender Wert automatisch <LOQ gewählt und lässt sich auch nicht ändern. Falls die LOQ's unter Berücksichtigung des Dilution-Faktors unterschiedlich sind, muss der Analytiker entscheiden, welcher LOQ-Wert zu berichten ist.

Die Zelle ist grau markiert, wenn eine Wahl nicht erlaubt ist. Das kann sein, wenn alle Konzentrationen <LOQ sind, oder wenn ein User mit größeren Rechten die Wahl getroffen hat. Der Name des Users wird automatisch in ToolTip angezeigt.

In ToolTip wird sowohl in ZU WIEDERHOLENDE PROBEN als auch in WIEDERHOLTE PROBEN der Filename des Chromatogramms unter dem Mauszeiger angezeigt. Damit kann das jeweilige Chromatogramm bei Bedarf schnell in DBLABCAL oder in der Dokumentation gefunden werden. Siehe auch Seite 12 wegen STRG-Doppelklick

## Incurred Samples

In dieser Liste werden nur die Ergebnisse der Mehrfachmessungen für ISR angezeigt.

*Falls Proben sowohl wegen "Standard"-Wiederholer (flag N, R, D, >, <...) als auch für ISR mehrfach gemessen wurden, werden sie in beiden Listen (RE-ASSAYED SAMPLES und INCURRED SAMPLES) mit entsprechender Hintergrundfarbe (gelb, weiss) angezeigt*

**Options Reassays**

Rules for reported Result (Reassays)

- dbLabCal default (mean if diff<=28% \*), total 2 or 3 assays
- 1st accepted result (total 2 to 9 assays)
- Lang & Bolton Rule (median/mw, <15% / <30%, total 2 or 3 assays)
- HoLaRo Rule (mean if diff.<=28% \*), total 2 or 3 assays

Max. deviation between re-assays in [%] of mean: conc.>lowest QC 28 10-40%  
 conc.<=lowest QC 28 10-60%

Rules dev% calculation (Incurred Samples)

- FDA: diff. between ISR and FIRST in % of mean dev% = (ISR-A) / mean(ISR+A)
- EBF: diff. between ISR and FIRST in % of FIRST dev% = (ISR-A) / A

Max. difference between Incurred Samples in [%] 20 10-40%  
 accepted Incurred Samples at least 66.7 66.7-100%

Action: all peaks

- Reset all choices!
- Do auto choice, do not overwrite already set values!
- Do auto choice for all reassays! Overwrite already set values!
- Sort reassays according to batch number (default sorting is according batch start date)

Ok Cancel

Im mittleren Teil des Dialogs werden die Akzeptanzkriterien für die Incurred Samples eingegeben. Die akzeptierte Abweichung bei den Incurred Samples ist in der Regel eine andere als bei den „Standard-Wiederholern“ (20% bzw. 28%)  
 Weiterhin überprüft dbLabCal auch ob die Mindestanzahl ( in der Regel 2/3 der Incurred Samples müssen <20% sein) der akzeptierten Incurred Samples erreicht wurde.

Standardmäßig ist „max.difference“ auf 20% (keine Dezimalstellen!) gesetzt. Sollte die prozentuale Differenz mit (mehr) Dezimalstellen angezeigt und berücksichtigt werden, gibt man statt „20“ die Zahl mit entsprechender Dezimalstellenanzahl, z. B. „20.0“ oder „15.00“ usw. Siehe auch Einstellungen->Zahlenformat.

## Ausgeschlossene Werte

Hier stehen alle

- AUSGESCHLOSSENEN CAL'S UND QC'S UND VAL'S,  
d.h. Kalibrierungs-, QC- oder Validierungsproben mit Flag 'N' oder 'A/E',
- AUSGESCHLOSSENE SEQUENZEN  
(Status SEQUENZ NICHT AKZEPTIERT oder AUSGESCHLOSSEN) und
- AUSGESCHLOSSENE CHROMATOGRAMME ('X'-Flag).

## Daten der Analysen

Im Menüpunkt DATEN DER ANALYSEN wird der zeitliche Ablauf der Projektdurchführung angezeigt. Hier kann man die Daten der Extraktion, Start und Ende der Messung der Sequenzen sowie der Kommentar zu jeder Sequenz editieren.

Auch die Messplatz- und Sequenznummern können hier geändert werden.

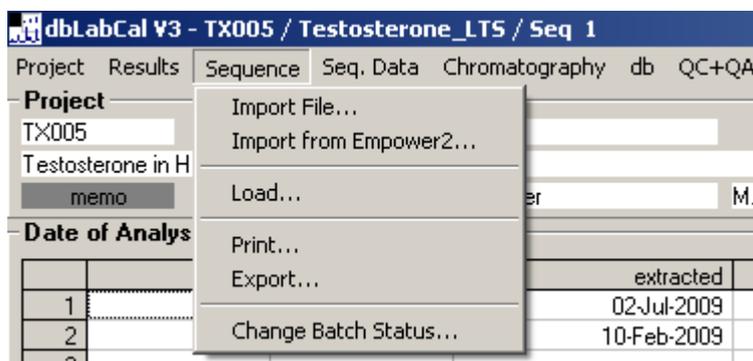
*Im Kommentar sollte man sinnvollerweise angeben, welche Proben in der Sequenz gemessen wurden, z.B. 'Proband 5 und 6', Cal/QC-Set Nummern, 'Stabilität 48h' usw., und nicht die Sequenznummer.*

Falls ein Projekt an mehreren Messplätzen gemessen wurde kann man nach dem Klick auf  die Sortierreihenfolge (zuerst nach Sequenz- und dann nach Messplatznummer, oder umgekehrt) festlegen.

DBLABCAL versteht auch Datumsangaben wie z.B. „heute, gestern, vorgestern, vor x Tagen, Montag (oder Mo), Dienstag (Di)“ usw. und das auch in Englisch und an allen Stellen im Programm, an denen Datumsangaben möglich sind.

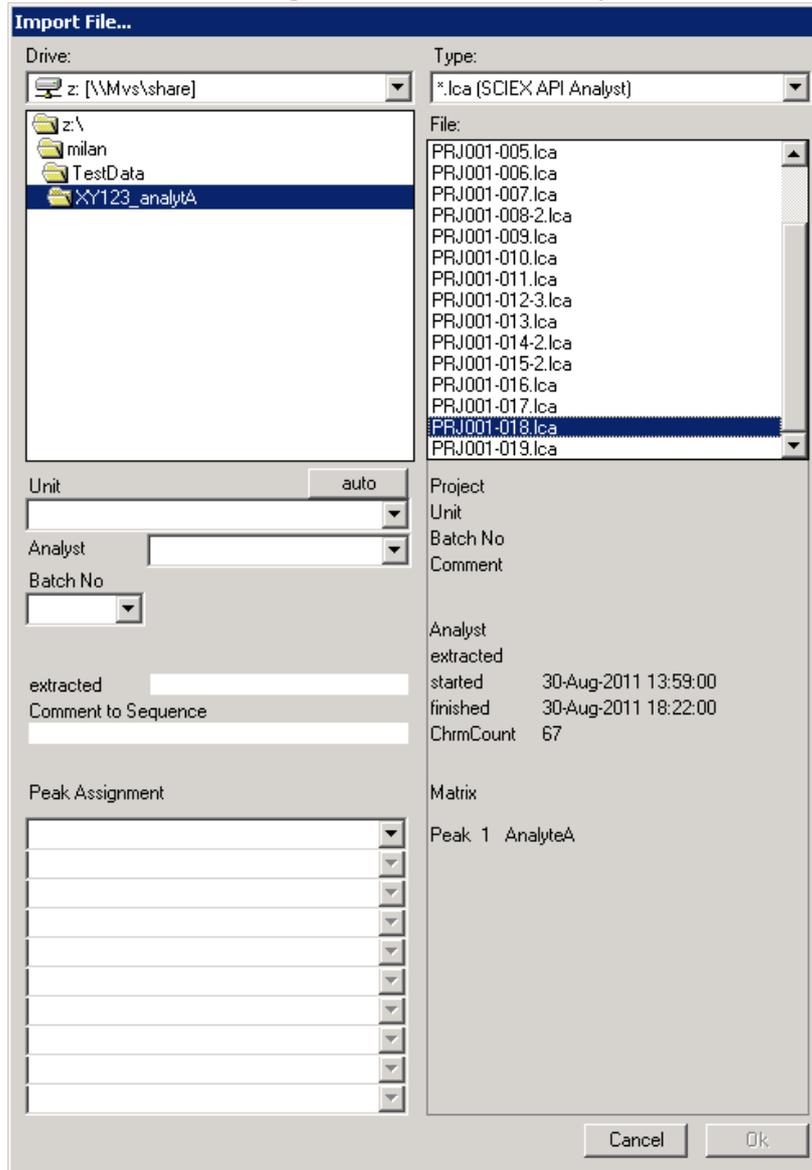
## Menü Sequenz

Über das Menü Sequenz werden die Sequenzen und Daten der Sequenzen verwaltet.

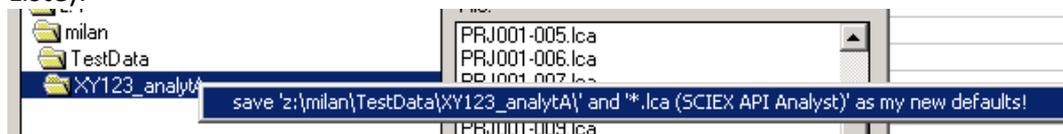


## Import File...

Es erscheint ein Dialog, in dem man die zu importierende Datei wählen kann.



Benutzer kann den aktuell gewählten Pfad speichern (rechte Maustaste auf die Pfad-Liste):



Aktuell gewähltes Verzeichnis wird nach einem erfolgreichen Import von dbLabCal automatisch gespeichert.

Nach einem Klick auf den Dateinamen erscheinen im rechten unteren Teil alle verfügbaren Informationen zum Inhalt der Datei.

Vor dem Import einer Sequenz wird zuerst ein Dialog mit dem Inhalt der zu importierenden Datei angezeigt.

Import Check											
	file/sampleID	name	analyte	rt	area	ht	rt(is)	area(is)	ht(is)	dil.f	flag
1	sh1001	k.ref. 20µl	Analyte1	2.41	493726	38059	2.68	535978	38989	1.	Y
1	sh1001	k.ref. 20µl	Analyte2	2.68	428920	31263	2.68	535978	38989	1.	Y
2	sh1002	w.b.	Analyte1	0	0	0	0	0	0	1.	Y
2	sh1002	w.b.	Analyte2	0	0	0	0	0	0	1.	Y
3	sh1003	blank o. i.s.	Analyte1	0	0	0	0	0	0	1.	Y
3	sh1003	blank o. i.s.	Analyte2	0	0	0	0	0	0	1.	Y
4	sh1004	blank m. i.s.	Analyte1	0	0	0	2.71	42152	2994	1.	Y
4	sh1004	blank m. i.s.	Analyte2	0	0	0	2.71	42152	2994	1.	Y
5	sh1005	cal 0.250	Analyte1	2.53	1231	101	2.8	42613	3264	1.	Y
5	sh1005	cal 0.250	Analyte2	2.77	1095	83	2.8	42613	3264	1.	Y
6	sh1006	cal 0.250	Analyte1	2.47	1182	90	2.74	42494	3109	1.	Y
6	sh1006	cal 0.250	Analyte2	2.74	954	71	2.74	42494	3109	1.	Y
7	sh1007	cal 1.00	Analyte1	2.47	4417	337	2.74	42405	3175	1.	Y
7	sh1007	cal 1.00	Analyte2	2.74	3606	270	2.74	42405	3175	1.	Y
8	sh1008	cal 1.00	Analyte1	2.5	5125	411	2.77	51159	3872	1.	Y
8	sh1008	cal 1.00	Analyte2	2.77	4610	327	2.77	51159	3872	1.	Y
9	sh1009	cal 2.50	Analyte1	2.47	13680	1044	2.74	49265	3678	1.	Y
9	sh1009	cal 2.50	Analyte2	2.74	11563	858	2.74	49265	3678	1.	Y
10	sh1010	cal 2.50	Analyte1	2.47	12969	998	2.74	48420	3641	1.	Y
10	sh1010	cal 2.50	Analyte2	2.74	11140	825	2.74	48420	3641	1.	Y
11	sh1011	cal 10.0	Analyte1	2.47	58137	4463	2.74	53476	3997	1.	Y
11	sh1011	cal 10.0	Analyte2	2.77	49491	3662	2.74	53476	3997	1.	Y
12	sh1012	cal 10.0	Analyte1	2.47	49646	3746	2.74	45241	3353	1.	Y
12	sh1012	cal 10.0	Analyte2	2.74	41458	3034	2.74	45241	3353	1.	Y
13	sh1013	cal 25.0	Analyte1	2.47	135269	10258	2.77	44775	3308	1.	Y
13	sh1013	cal 25.0	Analyte2	2.77	111572	8482	2.77	44775	3308	1.	Y

In der ersten Spalte kann man gezielt noch einzelne Chromatogramme von dem Import ausschließen.

Wenn mehrere Analyten in einem Chromatogramm gemessen wurden, kann man mit Doppelklick in Spalte 'analyt' die Anzeige auf nur einen Analyten reduzieren. Nach erneutem Doppelklick in Spalte 'analyt' werden wieder alle Analyten wieder angezeigt.

Import Check											
	file/sampleID	name	analyte	rt	area	ht	rt(is)	area(is)	ht(is)	dil.f	flag
1	sh1001	k.ref. 20µl	Analyte2	2.68	428920	31263	2.68	535978	38989	1.	Y
2	sh1002	w.b.	Analyte2	0	0	0	0	0	0	1.	Y
3	sh1003	blank o. i.s.	Analyte2	0	0	0	0	0	0	1.	Y
4	sh1004	blank m. i.s.	Analyte2	0	0	0	2.71	42152	2994	1.	Y
5	sh1005	cal 0.250	Analyte2	2.77	1095	83	2.8	42613	3264	1.	Y
6	sh1006	cal 0.250	Analyte2	2.74	954	71	2.74	42494	3109	1.	Y
7	sh1007	cal 1.00	Analyte2	2.74	3606	270	2.74	42405	3175	1.	Y
8	sh1008	cal 1.00	Analyte2	2.77	4610	327	2.77	51159	3872	1.	Y
9	sh1009	cal 2.50	Analyte2	2.74	11563	858	2.74	49265	3678	1.	Y
10	sh1010	cal 2.50	Analyte2	2.74	11140	825	2.74	48420	3641	1.	Y
11	sh1011	cal 10.0	Analyte2	2.77	49491	3662	2.74	53476	3997	1.	Y
12	sh1012	cal 10.0	Analyte2	2.74	41458	3034	2.74	45241	3353	1.	Y
13	sh1013	cal 25.0	Analyte2	2.77	111572	8482	2.77	44775	3308	1.	Y
14	sh1014	cal 25.0	Analyte2	2.77	96750	7264	2.74	39214	2641	1.	Y
15	sh1015	cal 100	Analyte2	2.77	422737	31247	2.77	44943	3272	1.	Y
16	sh1016	cal 100	Analyte2	2.77	358738	26598	2.77	37186	2717	1.	Y
17	sh1017	cal 250	Analyte2	2.77	874303	62431	2.77	39686	2838	1.	Y
18	sh1018	cal 250	Analyte2	2.89	748625	50667	2.89	31794	2402	1.	Y
19	sh1019	w.b.	Analyte2	0	0	0	0	0	0	1.	Y
20	sh1020	qcs 0.250	Analyte2	2.8	780	58	2.8	32111	2338	1.	Y
21	sh1021	qcs 0.250	Analyte2	2.77	800	58	2.77	33669	2430	1.	Y
22	sh1022	qcs 0.750	Analyte2	2.8	2515	171	2.8	35030	2472	1.	Y
23	sh1023	qcs 0.750	Analyte2	2.89	2260	123	2.89	32080	2175	1.	Y
24	sh1024	qcs 20.0	Analyte2	2.8	58225	3907	2.8	30924	2095	1.	Y
25	sh1025	qcs 20.0	Analyte2	2.92	61753	3670	2.89	32453	2189	1.	Y
26	sh1026	qcs 200	Analyte2	2.77	57394	4539	2.77	31549	2033	1.	Y

Nach dem Klick auf die Schaltfläche AUTO werden die Angaben zur Sequenz von DBLABCAL soweit möglich, automatisch ausgefüllt/vorgeschlagen. Der Analytiker muss in diesem Dialog sorgfältig die Angaben überprüfen. Er wird dabei von DBLABCAL unterstützt indem Ok erst erlaubt wird, wenn alle Angaben vollständig und sinnvoll sind.

**Es ist wichtig, dass alle Dateien für die Analyten, die in einem Chromatogramm gemessen wurden beim ersten Mal auch zusammen in dbLabCal importiert werden, damit diese Information (=Peaks zusammen in einem Chromatogramm gemessen) auch in dbLabCal ankommt!**

Bei allen folgenden Sequenzimporten, erlaubt DBLABCAL den Import nur wenn die Peakanzahl korrekt ist.

**Es ist fast unmöglich, eine Sequenz in ein 'falsches' Projekt zu importieren.**

## Import aus Empower2...

Falls auf einem Client sowohl Empower2 als auch dbLabCal installiert sind, und der Administrator dies freigeschaltet hat, besteht die Möglichkeit, Daten aus Empower2 direkt zu importieren.

In diesem Dialog loggt sich der User direkt in die Empower2-Datenbank ein, wählt ein Project, ein oder mehrere Sample Sets und daraus die Results. Nach Ergänzung der fehlenden Daten (Schaltfläche AUTO) werden die selektierten Results (+) nach dbLabCal importiert.

Database: **NEUEMP2** | UserID/PWD: **vagadaym / \*\*\*\*\*** | login | Projects: **TA348\_Acyclovir** | Launch Empower

Show Sample Sets for selected Project: 1 sample set(s) selected

SampleSetName	SampleSetStartDate	SampleSetFinishDate	SystemName
3 + run17_unit03	24-Oct-2009 06:11:33	25-Oct-2009 05:42:15	MP03
4 run18_unit07	23-Oct-2009 21:25:20	24-Oct-2009 23:07:44	MP07
5 run16_unit03	23-Oct-2009 05:40:51	24-Oct-2009 06:11:32	MP03
6 run15_unit07	22-Oct-2009 19:41:58	23-Oct-2009 21:25:19	MP07
7 run14_unit03	22-Oct-2009 07:44:45	23-Oct-2009 01:27:26	MP03
8 run13_unit07	21-Oct-2009 19:43:38	22-Oct-2009 19:41:57	MP07
9 run12_unit03	21-Oct-2009 06:40:23	22-Oct-2009 07:44:44	MP03
10 run11_unit07	20-Oct-2009 18:00:17	21-Oct-2009 19:43:37	MP07
11 run10_unit03	20-Oct-2009 06:24:10	21-Oct-2009 06:40:22	MP03

Show latest Results for selected Sample Sets: 90 chrm(s) selected

Vial	SType	Info_Sub	Period	STime	Term	Matri	Dilution	DateAcquired	ResultId
1 +	1	k-ref					1,0000	24-Oct-2009 06:28:27	7754
2 +	2	w.b.					1,0000	24-Oct-2009 06:44:49	7674
3 +	3	blank					1,0000	24-Oct-2009 07:01:11	7675
4 +	4	blank + IS					1,0000	24-Oct-2009 07:17:31	7676
5 +	5	cal	10.0 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 07:33:50	7672
6 +	6	cal	20.0 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 07:50:10	7664
7 +	7	cal	40.0 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 08:06:32	7665
8 +	8	cal	80.0 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 08:22:52	7666
9 +	9	cal	100 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 08:39:12	7667
10 +	10	cal	200 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 08:55:33	7668
11 +	11	cal	400 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 09:11:53	7669
12 +	12	cal	800 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 09:28:13	7670
13 +	13	cal	1000 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 09:44:34	7671
14 +	14	w.b.					1,0000	24-Oct-2009 10:00:54	7677
15 +	15	sub	23	1	0h		1,0000	24-Oct-2009 10:17:14	7755
16 +	16	sub	23	1	0.5h		1,0000	24-Oct-2009 10:33:33	7756
17 +	17	sub	23	1	1.0h		1,0000	24-Oct-2009 10:49:54	7757
18 +	18	sub	23	1	1.5h		1,0000	24-Oct-2009 11:06:14	7681
19 +	19	sub	23	1	2.0h		1,0000	24-Oct-2009 11:22:34	7758
20 +	20	sub	23	1	2.5h		1,0000	24-Oct-2009 11:38:54	7759
21 +	21	sub	23	1	3.0h		1,0000	24-Oct-2009 11:55:15	7760
22 +	22	sub	23	1	3.5h		1,0000	24-Oct-2009 12:11:34	7761
23 +	23	sub	23	1	4.0h		1,0000	24-Oct-2009 12:27:54	7762
24 +	24	sub	23	1	5.0h		1,0000	24-Oct-2009 12:44:14	7763
25 +	25	sub	23	1	6.0h		1,0000	24-Oct-2009 13:00:34	7764
26 +	26	sub	23	1	8.0h		1,0000	24-Oct-2009 13:16:54	7765
27 +	27	sub	23	1	10h		1,0000	24-Oct-2009 13:33:14	7766
28 +	28	sub	23	1	12h		1,0000	24-Oct-2009 13:49:37	7767
29 +	29	sub	23	1	16h		1,0000	24-Oct-2009 14:05:59	7768
30 +	30	sub	23	1	24h		1,0000	24-Oct-2009 14:22:20	7693
31 +	31	w.b.					1,0000	24-Oct-2009 14:38:40	7694
32 +	32	sub	23	2	0h		1,0000	24-Oct-2009 14:55:00	7769
33 +	33	sub	23	2	0.5h		1,0000	24-Oct-2009 15:11:20	7770

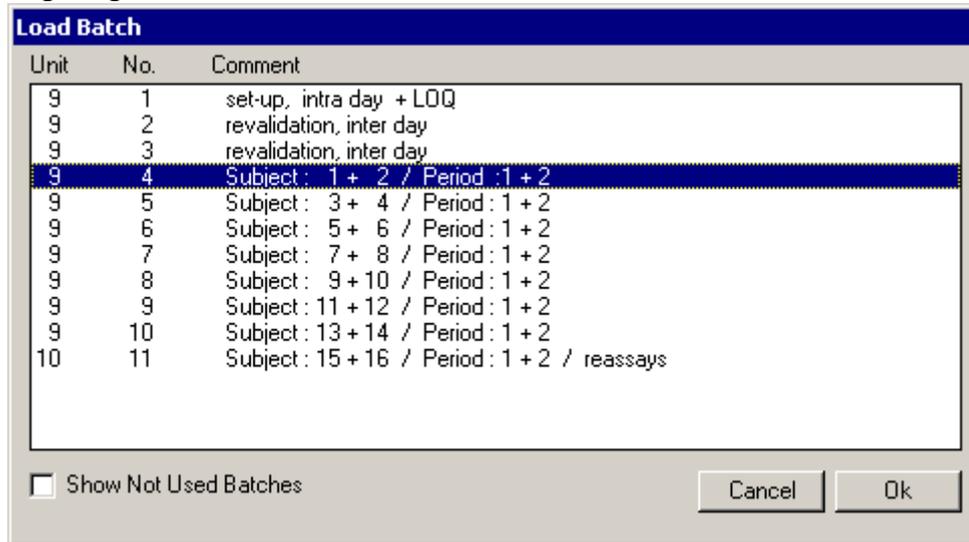
Unit: auto | Project: TA348\_Acyclovir  
 MP03 HPLC MP03 | Unit: MP03  
 Analyst: Wick | Batch No: | Comment: |  
 Batch No: 17 |  overwrite  
 Confirm to overwrite batch!  
 status - batch status not set yet  
 extracted: | Analyst extracted: |  
 started: 24-10-2009 06:28:00 | finished: 25-10-2009 05:26:00 |  
 Comment to Sequence: | ChrmCount: 89  
 sample set name=run17\_unit03 (id 7078)  
 Peak Assignment: Acyclovir / Plasma | Peak 1 Acyclovir

Cancel OK

Mit LAUNCH EMPOWER kann man das gewählte Project in Empower2 öffnen wenn Empower auf dem PC installiert wurde.

**Laden...**

Eine Liste aller Sequenzen des aktuellen Projekts (und für den aktuellen Analyten) wird angezeigt.



Die Sequenzen sind nach Messplatz- und Sequenz-Nummer sortiert.

Hinter der Sequenznummer steht (manchmal) ein Zeichen, das den Status der Sequenz anzeigt:

- \* Status unbestimmt
- Sequenz akzeptiert
- N Sequenz nicht akzeptiert
- X Sequenz ausgeschlossen
- D Sequenz als gelöscht markiert (überschrieben)
- L Sequenz wurde vom PI gesperrt.  
*oder Projekt wurde inzwischen freigegeben und später wieder die Freigabe zurückgenommen. Denn während der Projekt-Freigabe werden die Sequenzen (automatisch) gesperrt (Lock)*

Ein Ausrufezeichen (!) hinter der Sequenznummer zeigt an, das bei (mindestens) einem Analyten die für das aktuelle Projekt gültigen Akzeptanzkriterien nicht erfüllt wurden.

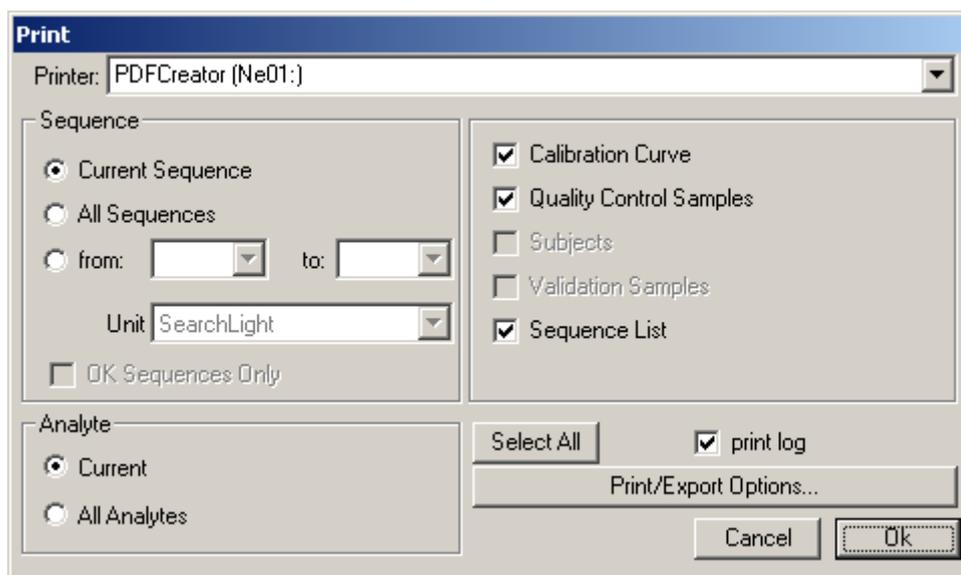
Die Anzeige von überschriebenen und ausgeschlossenen Sequenzen kann man mit der Option NICHT BENUTZTE SEQUENZEN ANZEIGEN aktivieren.

*Schnellzugriff: Doppelklick irgendwo innerhalb des Bildschirmbereichs 'Sequenz'.*

*Die nächste, oder vorherige Sequenz kann man auch mit "Blättern" (Tasten STRG – + oder STRG –; PLUS/MINUS-Tasten auf der numerischen Tastatur - in einer Sequenz-Ansicht) oder mit Klick auf  direkt laden, ohne zuerst der Dialog SEQUENZ LADEN... öffnen zu müssen.*

## Drucken...

Man kann Daten der aktuellen Sequenz oder auch alle anderen Sequenzen ohne Rücksicht auf ihren Status drucken. Für die Dokumentation ist es allerdings sinnvoll, nur Ausdrücke von Sequenzen mit dem Projekt-Status **freigegeben** zu benutzen. Falls im Projekt mehrere Analyten in einem Chromatogramm gemessen wurden, hat man die Möglichkeit, die gewählten Daten entweder nur für den aktuellen Analyten oder für alle Analyten, die zusammen mit dem aktuellen Analyten in einem Chromatogramm gemessen wurden, gleichzeitig auszudrucken.



*Für die Dokumentation der Sequenzdaten reichen vollkommen die Ausdrücke von Kalibrierungs- und Qualitätskontrollproben sowie die komplette Sequenzliste. Die Daten zu Probanden- bzw. Validierungsproben werden auf den Ausdrücken der Ergebnisse des Projekts dokumentiert.*

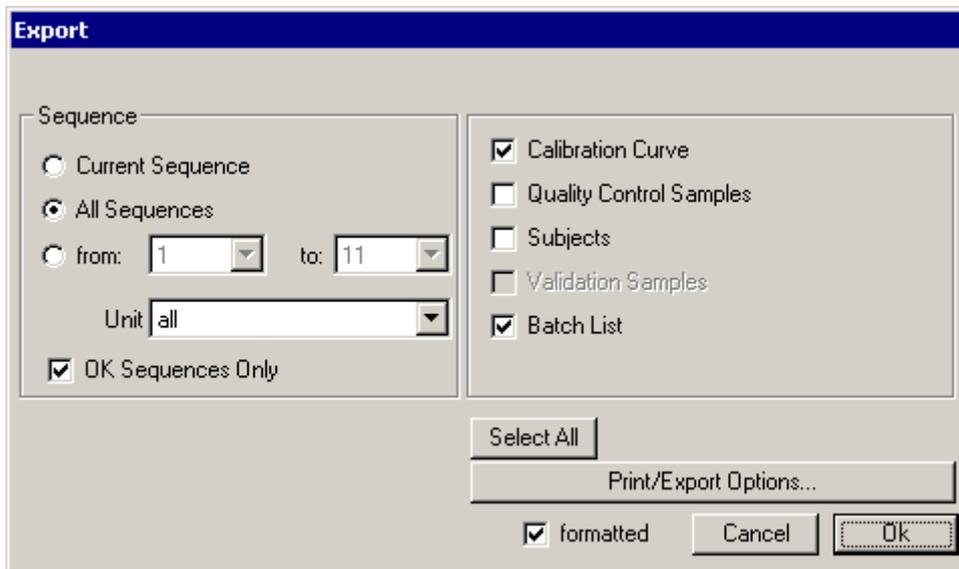
Mit SELECT ALL können alle Optionen gewählt, oder mit STRG-SELECT ALL, alle Optionen abgewählt werden.

Das Aussehen der Ausdrücke, wie z.B. Schriftart, Schriftgröße, Ränder, Schattierung usw., kann über das Menü PROJEKT | EINSTELLUNGEN | DRUCK/EXPORT-OPTIONEN oder hier im Drucken-Dialog variiert werden.

Der aktuelle Drucker wird angezeigt und kann bei Bedarf geändert werden.

**Export...**

Man geht analog vor wie bei SEQUENZ | DRUCKEN. Man kann Daten nur für den aktuellen Analyten exportieren.

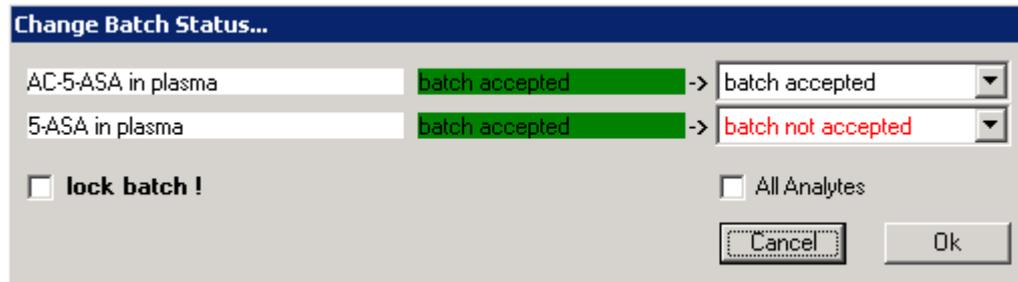


Weiterhin kann man jederzeit die kompletten, aktuell angezeigten, oder nur die markierten Daten über die Windows-Zwischenablage (Tasten STRG-C oder STRG-EINFG, oder Klick mit der rechten Maustaste bei markierten Daten) in andere Programme exportieren.

## Sequenzstatus ändern...

Der Sequenzstatus kann für jeden Analyten der Sequenz separat gesetzt werden. D.h. man kann die Daten der Sequenz für einen Analyten akzeptieren, während die Daten des/der anderen Analyten nicht benutzt werden, falls die Daten dieser Analyten die Akzeptanzkriterien nicht erfüllt haben.

Die Statusänderung von oder nach SEQUENZ AUSGESCHLOSSEN wird immer für alle Analyten vorgenommen.



	Text	Bemerkung	wird gesetzt...
*	Status unbestimmt !	Nach dem Import bekommt jede Sequenz automatisch den Status '*'	automatisch
(J)	Sequenz akzeptiert	Kann vom Analytiker gesetzt werden, wenn die Sequenz die <b>Akzeptanzkriterien</b> erfüllt hat. Prüfleiter kann es (theoretisch) setzen auch wenn die Akzeptanzkriterien nicht erfüllt wurden	vom Analytiker oder Prüfleiter
N	Sequenz nicht akzeptiert	Wird gesetzt wenn die Sequenz nicht die gültigen <b>Akzeptanzkriterien</b> erfüllt. Die in dieser Sequenz gemessenen Probandenproben werden in ZU WIEDERHOLENDE PROBEN angezeigt	vom Analytiker oder Prüfleiter
X	Sequenz ausgeschlossen	z.B. die "system set-up"-Sequenz oder eine Sequenz, die aus anderen Gründen nicht ausgewertet wurde... Bei der Auswertung wird diese Sequenz ignoriert	vom Analytiker oder Prüfleiter
D	Sequenz gelöscht	Eine Sequenz mit der gleichen Messplatz- <b>und</b> Sequenznummer wurde importiert. Bei der Auswertung wird diese Sequenz ignoriert	Automatisch
L	Sequenz gelockt	Projekt-Freigabe wurde zurückgenommen. Die während der Freigabe automatisch gesperrten Sequenzen bleiben aber weiterhin gesperrt. Prüfleiter muss sie bei Bedarf explizit entsperren	Automatisch oder Prüfleiter

**Änderung des Sequenz-Status' ist eine Aktion mit weitreichenden Konsequenzen!**  
(Zumindest für den Analytiker...)

Beim Setzen des Sequenz-Status auf SEQUENZ AKZEPTIERT überprüft DBLABCAL, ob die Kalibrierungskurve, QC-Proben und  $r^2$  die aktuellen Akzeptanzkriterien erfüllten. Wenn die Akzeptanzkriterien nicht erfüllt wurden, wird die Freigabe der Sequenz abgebrochen. Nur noch der Prüfleiter darf solche Sequenz auf SEQUENZ AKZEPTIERT setzen.

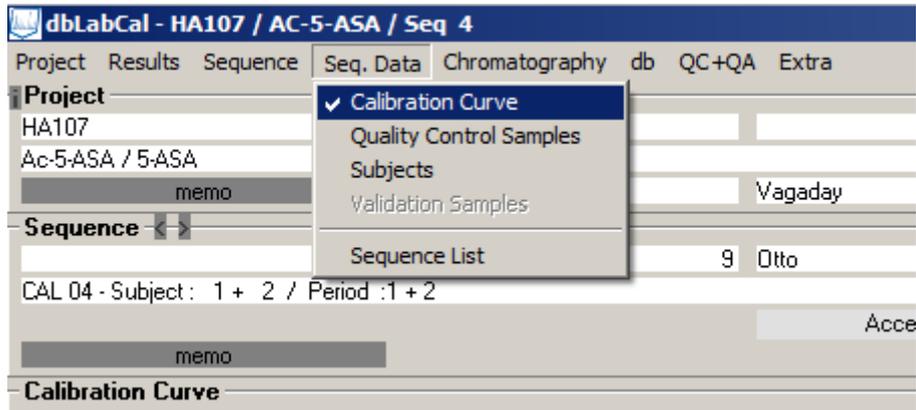
*Schnellzugriff: rechte Maustaste über Status...*

Nachdem der Sequenzstatus gesetzt wurde, kann die Sequenz auch gesperrt werden.  
(Während der Projekt-Freigabe werden alle Sequenzen (automatisch) gesperrt)

## Menü Ansicht

Zeigt verschiedene Ansichten der Daten der aktuellen Sequenz.

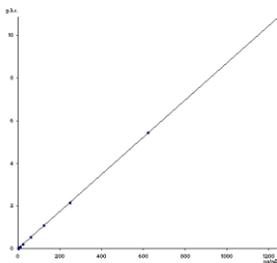
### CAL, QC's, Probanden und Validierungsproben...



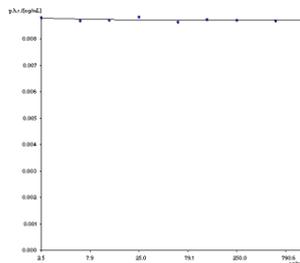
Man kann sich die Kalibrierungskurve bzw. Qualitätskontrollproben der aktuellen Sequenz mit Graphik anzeigen lassen. Rote Punkte bedeuten, dass die Abweichung von der Sollkonzentration grösser ist als in Menü PROJEKT | EINSTELLUNGEN | AKZEPTANZ-KRITERIEN vorgegeben.

Klickt man auf die Abbildung während man die STRG-Taste gedrückt hält, wird die Kalibrierungskurve nacheinander auf drei unterschiedliche Arten angezeigt:

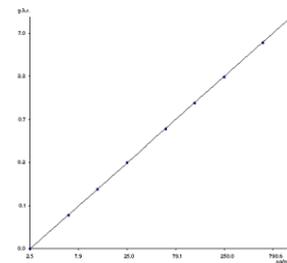
x: Konzentration  
y: Messgröße



x: Konzentration, logarithmisch  
y: Messgröße / Konzentration



x: Konzentration, logarithmisch  
y: Messgröße, logarithmisch



Es ist möglich, sich die in der aktuellen Sequenz gemessenen Probanden- bzw. Validierungsproben anzuschauen.

*Es besteht ein Unterschied zwischen den hier angezeigten Probanden- bzw. Validierungsproben und denen aus dem Menü ERGEBNISSE. Im Menü ERGEBNISSE (des Projekts) werden die zu berichtenden Werte (Wiederholer ausgewertet, Flag nur 'J/Y', usw...) zusammengefasst, im Menü ANSICHT (der Sequenzdaten) nur die in der aktuellen Sequenz gemessenen Werte, ohne Rücksicht auf Wiederholer oder Flags und Proben die in den anderen Sequenzen gemessen wurden...*

Bei der Probandenansicht besteht, wie auch in ERGEBNISSE | PROBANDEN die Möglichkeit, die Werte auch graphisch darstellen zu lassen. Die rote Farbe der Punkte bedeutet hier nur, dass der Flag nicht 'J/Y' ist.

*Man kann die Anzeige der Probandenergebnisse einer Sequenz dazu nutzen, sich diese nach dem Import der Sequenz anzuschauen, um sofort die z.B. 'nicht plausiblen Ergebnisse' zu erkennen und gegebenenfalls die 'W/R'-Flags zu setzen.*

Im Menü ERGEBNISSE | DATEN DER ANALYSEN hat man die Möglichkeit, Messplatz-, Sequenznummer, Kommentar, Extraktionsdatum und Datum und Zeit von Start und Ende der Sequenzen zu editieren.

Die Angabe über den Start der Sequenz hat eine große Bedeutung, da danach in einer Validierung der Satz der 0-Werte für die Stabilitätsuntersuchungen und für Probanden-Ergebnisse die Reihenfolge der wiederholten Messungen festgelegt wird.

Weiterhin kann man in der ANSICHT schnell durch Drücken der rechten Maustaste über der ersten (grauen) Zeile der Tabelle die Anzahl der Dezimalstellen für die Darstellung der Werte in der betreffenden Spalte ändern. Falls man die Anzahl der signifikanten Stellen ändern will, muss man dies über das Menü PROJEKT | EINSTELLUNGEN | ZAHLENFORMAT tun.

Liste

Komplette Liste der Chromatographie-Daten der aktuellen Sequenz für alle Analyten, die in einem Chromatogramm gemessen wurden, wird angezeigt und zwar in der Reihenfolge wie sie gemessen wurden.

Solange der Status der Sequenz unbestimmt ist, lassen sich die Probenbezeichnung und Chromatogramm-Flags vom Analytiker ändern.

dbLabCal - HA107 / AC-5-ASA / Seq 4														
Project Results Sequence Seq. Data Chromatography QC+QA										Analyte		Model		
HA107										AC-5-ASA / plasma		y=a+bx		
Ac-5-ASA / 5-ASA										Routine HPLC-FL		ng/mL		1/x
memo BA Vagaday Otto										...		HPLC-FL		p.h.r.
Sequence										extracted 15-Mrz-1998		a =		0.00001
CAL 04 - Subject : 1 + 2 / Period :1+2										started 16-Mrz-1998 07:47		b =		0.00984
memo Acceptance										finished 17-Mrz-1998 08:25		r <sup>2</sup> =		0.99999
memo batch accepted										calculated 17-Mrz-1998 10:04		p =		0.99999
Sequence List														
file/sample	name	analyte	rt	area	ht	rt(is)	area(is)	ht(is)	p.h.r.	dil f	ng/mL	dev [%]	flag	comment
1 ro04001a	sss	AC-5-ASA	2.77	3458351	202247	6.98	1951732	82112	2.4631	1.0	250		J	
2		5-ASA	4.98	2045394	101459				1.2356		100		J	
3 ro04002a	w.b.	AC-5-ASA	-	-	-	-	-	-	-	1.0	-		J	
4		5-ASA	-	-	-	-	-	-	-		-		J	
5 ro04003a	Blank	AC-5-ASA	-	-	-	6.97	1991341	84158	0.0000	1.0	-0.000523		J	
6		5-ASA	-	-	-	-	-	-	0.0000		0.00632		J	
7 ro04004a	cal 2.50	AC-5-ASA	2.76	33704	2024	6.95	1954948	82708	0.0245	1.0	2.49	-0.5	J	
8		5-ASA	4.95	19973	1017				0.0123		1.00	0.4	J	
9 ro04005a	cal 6.25	AC-5-ASA	2.77	79998	4782	6.96	1845852	78083	0.0612	1.0	6.23	-0.4	J	
10		5-ASA	4.96	47587	2426				0.0311		2.53	1.0	J	
11 ro04006a	cal 12.5	AC-5-ASA	2.77	184540	10203	6.93	1959039	83035	0.1229	1.0	12.5	-0.1	J	
12		5-ASA	4.96	98803	5086				0.0613		4.97	-0.5	J	
13 ro04007a	cal 25.0	AC-5-ASA	2.76	367361	21137	6.95	1993394	84423	0.2504	1.0	25.5	1.8	J	
14		5-ASA	4.96	202287	10349				0.1226		9.95	-0.5	J	
15 ro04008a	cal 62.5	AC-5-ASA	2.75	872066	51750	6.89	1995195	84562	0.6120	1.0	62.2	-0.4	J	
16		5-ASA	4.94	494858	25753				0.3045		24.7	-1.2	J	
17 ro04009a	cal 125	AC-5-ASA	2.75	1787784	104513	6.97	2032549	86689	1.2197	1.0	124	-0.8	J	
18		5-ASA	4.96	1045971	52640				0.6143		49.8	-0.3	J	
19 ro04010a	cal 250	AC-5-ASA	2.75	2751271	162216	6.94	1535522	65686	2.4696	1.0	251	0.4	J	
20		5-ASA	4.96	1631033	81657				1.2431		101	0.8	J	
21 ro04011a	cal 625	AC-5-ASA	2.75	7625330	448198	6.94	1719869	72917	6.1467	1.0	625	0.0	J	
22		5-ASA	4.95	4571734	226421				3.1052		252	0.7	J	
23 ro04012a	cal 1250	AC-5-ASA	2.77	8873399	520831	6.95	1017799	42367	12.2933	1.0	1250	0.0	J	
24		5-ASA	4.95	5279346	260023				6.1375		498	-0.4	J	
25 ro04013a	w.b.	AC-5-ASA	-	-	-	-	-	-	-	1.0	-		J	
26		5-ASA	-	-	-	-	-	-	-		-		J	
27 ro04014a	# 1 / 1 / 0.00h	AC-5-ASA	-	-	-	6.95	2253300	95300	0.0000	1.0	-0.000523		0	
28		5-ASA	-	-	-	-	-	-	0.0000		0.00632		0	
29 ro04015a	# 1 / 1 / 1.00h	AC-5-ASA	2.75	697857	41275	6.95	1939366	82346	0.5012	1.0	51.0		J	

Wenn mehrere Analyten in einem Chromatogramm gemessen wurden, kann man mit Doppelklick in Spalte 'analyt' die Anzeige (um eine bessere Übersicht zu bekommen) nur auf einen Analyten reduzieren. Nach erneutem Doppelklick in Spalte 'analyt' werden Daten für alle Analyten wieder angezeigt.

The screenshot shows the dbLabCal software interface. At the top, there are tabs for Project, Results, Sequence, Seq. Data, Chromatography, and QC+QA. The main window displays a chromatogram with a peak at 12.5 minutes. Below the chromatogram, there is a 'Sequence List' table with columns for file/sample name, analyte, rt, area, ht, rfs, area[s], ht[s], p.h.r., dil.f, ng/mL, dev [%], flag, and comment. The table contains 45 rows of data for various samples and standards.

file/sample name	analyte	rt	area	ht	rfs	area[s]	ht[s]	p.h.r.	dil.f	ng/mL	dev [%]	flag	comment	
1 ro04001a	sss	AC-5-ASA	2.77	3458351	202247	6.98	1951732	82112	2.4631	1.0	250	J		
3 ro04002a	w.b.	AC-5-ASA	-	-	-	-	-	-	1.0	-	-	J		
5 ro04003a	Blank	AC-5-ASA	-	-	6.97	1991341	84158	0.0000	1.0	-0.000523	-	J		
7 ro04004a	cal 2.50	AC-5-ASA	2.76	33704	2024	6.95	1954948	82708	0.0245	1.0	2.49	-0.5	J	
9 ro04005a	cal 6.25	AC-5-ASA	2.77	79998	4782	6.96	1845852	78083	0.0612	1.0	6.23	-0.4	J	
11 ro04006a	cal 12.5	AC-5-ASA	2.77	184540	10203	6.93	1959039	83035	0.1229	1.0	12.5	-0.1	J	
13 ro04007a	cal 25.0	AC-5-ASA	2.76	367361	21137	6.95	1993394	84423	0.2504	1.0	25.5	1.8	J	
15 ro04008a	cal 62.5	AC-5-ASA	2.75	872066	51790	6.89	1995195	84562	0.6120	1.0	62.2	-0.4	J	
17 ro04009a	cal 125	AC-5-ASA	2.75	1787784	104513	6.97	2032549	86689	1.2197	1.0	124	-0.8	J	
19 ro04010a	cal 250	AC-5-ASA	2.75	2751271	162216	6.94	1536522	65686	2.4696	1.0	251	0.4	J	
21 ro04011a	cal 625	AC-5-ASA	2.75	7625330	448198	6.94	1719859	72917	6.1467	1.0	625	0.0	J	
23 ro04012a	cal 1250	AC-5-ASA	2.77	8873399	520831	6.95	1017799	42967	12.2333	1.0	1250	0.0	J	
25 ro04013a	w.b.	AC-5-ASA	-	-	-	-	-	-	1.0	-	-	J		
27 ro04014a	# 1 / 1 / 0.00h	AC-5-ASA	-	-	-	6.95	2253300	95900	0.0000	1.0	-0.000523	0	J	
29 ro04015a	# 1 / 1 / 1.00h	AC-5-ASA	2.75	697857	41275	6.95	1939366	82346	0.5012	1.0	51.0	J		
31 ro04016a	# 1 / 1 / 2.00h	AC-5-ASA	2.77	1326328	79377	6.97	1889993	80661	0.9841	1.0	100	J		
33 ro04017a	# 1 / 1 / 3.00h	AC-5-ASA	2.76	2146983	127207	6.97	2250208	95536	1.3315	1.0	135	J		
35 ro04018a	# 1 / 1 / 4.00h	AC-5-ASA	2.77	2259997	134718	6.99	2319572	98761	1.3641	1.0	139	J		
37 ro04019a	# 1 / 1 / 5.00h	AC-5-ASA	2.76	2653472	158542	6.98	2130515	90555	1.7508	1.0	178	J		
39 ro04020a	# 1 / 1 / 6.00h	AC-5-ASA	2.77	2315585	138637	6.99	2139429	91203	1.5201	1.0	155	J		
41 ro04021a	# 1 / 1 / 7.00h	AC-5-ASA	2.76	2663665	158818	6.98	2031510	86135	1.8438	1.0	187	J		
43 ro04022a	# 1 / 1 / 8.00h	AC-5-ASA	2.77	2899913	173513	7.00	1832325	77826	2.2295	1.0	227	J		
45 ro04023a	# 1 / 1 / 9.00h	AC-5-ASA	2.76	2481021	148016	6.98	2106563	89324	1.6571	1.0	168	J		

### Probenbezeichnungen editieren

Nach Doppelklick (oder ENTER) in der Spalte 'name' erscheint ein Dialog, in dem man die neue Probenbezeichnung eingeben kann. Die Zeitangaben erfolgen im Format " \_\_d\_\_h\_\_m". Angaben wie z.B. 2w, 1d2h30m, 5d10m, 20m, 1d usw. sind gültig. Falls hinter der Zahl kein Buchstabe steht, wird ein h angenommen.

Wenn man ALLE ZEITEN VON... wählt, werden alle Zeitangaben für alle SUB-Proben auf den neuen Wert geändert. In dem Beispiel in der Abbildung heisst es: alle SUB-Proben für der aktuellen Analyten im Projekt, die bis jetzt die Zeit von 1d(24h) haben, bekommen die Zeit 1d1h zugewiesen.

The 'Sample Identity' dialog box shows a table with columns for Line No., Smpl Type, Subject, Period, Time, and Dil.Factor. The current row is 33, SUB, 1, 1, 3, 1.0. Below the table, there is a dropdown menu for 'SUB' and a checkbox labeled 'change all times from 3 to 1d12h!'. There are 'Cancel' and 'Ok' buttons at the bottom right.

Line No.	Smpl Type	Subject	Period	Time	Dil.Factor
33	SUB	1	1	3	1.0

change all times from 3 to 1d12h!

Mit STRG-Anfangsbuchstabe der Probenart kann die Probenart schneller geändert werden.

STRG-C ändert die Probenart auf CAL, STRG-Q auf QC, STRG-V auf VAL, STRG-S auf SUB usw.

### Chromatogramm-Flags editieren

Die Chromatogramm-Flags zeigen die Akzeptanz der Ergebnisse eines bestimmten Analyten in einem Chromatogramm. Sie können direkt über Tastatur in der Spalte eingetippt werden (es werden nur die für die aktuelle Probenart gültige Eingaben akzeptiert), oder man kann mit Doppelklick die möglichen Flags 'durchblättern', oder man setzt die Flags über das Kontextmenü (rechte Maustaste). Fall mehrere Analyten in einem Chromatogramm gemessen wurden, kann man die Flags für alle Analyten des betreffenden Chromatogramms gleichzeitig ändern indem man die STRG-Taste während des Flag-Änderns gedrückt hält. Wenn der neue oder alte Flag 'D' ist, wird er sowieso für alle Analyten des betreffenden Chromatogramms gesetzt (logisch!).

#### Analytiker-Flags

Flag	CAL/QCS	VAL	SUB/EQC	Erklärung
J/Y	+	+	+	alles Ok
N	+	+	+	chromatographischer Fehler (z.B. Peakinterferenzen...), Geräte-Fehler <b>Muss wiederholt werden</b> (bei SUB)
S	+	+	+	chromatographisch Ok interner Standard nicht akzeptiert (IS Peak zu klein/zu gross) <b>Muss wiederholt werden</b> (bei SUB)
X	+	+	+	Chromatogramm wird nicht berücksichtigt. In Comment-Spalte sollte der Grund angegeben werden
D	+	+	+	Probe während der Probenaufarbeitung zerstört oder ein Laborfehler <b>Muss wiederholt werden (nur SUB)</b>
A	+	+		chromatographisch Ok wird für Statistik nicht benutzt, da ausserhalb der Akzeptanzgrenzen,
W			+	chromatographisch Ok, aber Wert nicht plausibel, darum markiert zur Wiederholung <b>Sollte wiederholt werden</b>
C			+	Chromatographisch Ok, aber vom Client für die Wiederholung ausgesucht <b>Muss wiederholt werden</b>
V			+	Eine „dummy“ SUB-Probe wird mit V (Volume) markiert, um zu markieren, dass Messung einer eigentlich gelieferten Probe wegen Probenmangel (empty tube) unmöglich ist <b>Sollte wiederholt werden wenn neue Probelieferung</b>
I			+	Eine „dummy“ SUB-Probe wird mit I (Ignore) markiert, damit sie in Ergebnisse Probanden als „Probe erhalten aber nicht analysiert“ (NOA) berichtet wird <b>Darf nicht wiederholt werden</b>

Bei Chromatogrammen von unbekanntem Proben (SUB), die vom Analytiker mit **J/Y**, und nur bei diesen, akzeptiert wurden, setzt DBLABCAL eigene Chromatogramm-Flags:

**Datenbank-Flags**

Flag	Erklärung
0	chromatographisch Ok, berechnete Konzentration <LOQ
<	berechnete Konzentration kleiner als der unterste CAL-Wert in der aktuellen Sequenz, aber grösser als Projekts-LOQ (kann passieren, wenn der unterste CAL-Wert nicht verwendet wird)
>	berechnete Konzentration grösser als der oberste CAL-Wert in der aktuellen Sequenz
+	berechnete Konzentration grösser als LOQ in einer Predose-Probe (SUB-Probe mit Zeit<=0) gefunden
#	Das Akzeptanzkriterium für den CV-Wert der Doppelbestimmung nicht erfüllt (nur bei ELISA „double assays“)

Alle Chromatogramme, die die Flags N, S, D, W/R, C, <, >, + und # haben, werden automatisch in ZU WIEDERHOLENDE PROBEN aufgelistet.

**Der Analytiker muss nicht, und soll auch nicht, ein Flag auf z.B. 'N' oder 'W/R' setzen, nur weil die Konzentration <LOQ, >ULQ oder >LOQ in einer predose-Probe war...**

Wird Probenbezeichnung oder Chromatogramm-Flag mindestens einmal geändert, sind die entsprechenden Zellen grau unterlegt. Damit kann man sofort erkennen, ob Daten nach dem Import in die dbLabCal-Datenbank geändert wurden.

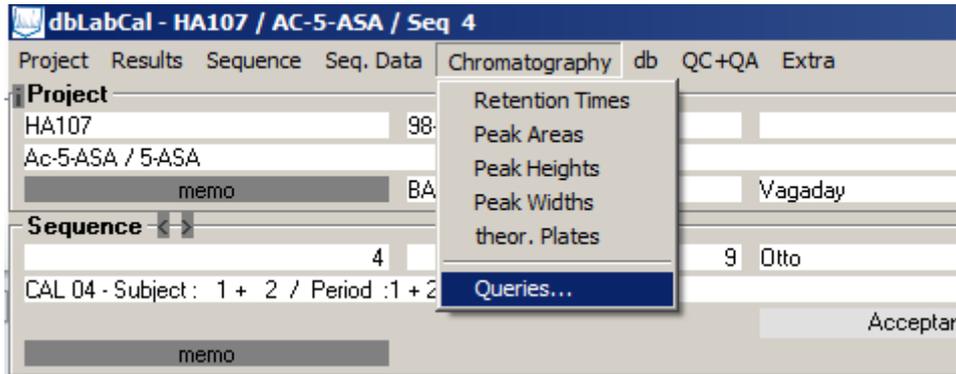
Nachdem Daten zur Sequenz (Messplatz, Sequenz-Nummer usw.) geändert wurden ist es ebenfalls möglich mit SHOW HISTORY (rechte Maustaste) sich das Audit Trail selektiv anzeigen zu lassen.

The screenshot displays the dbLabCal V3 interface. At the top, there are menu options like 'Study', 'Results', 'Batch', 'Batch Data', 'Chromatography', 'db', 'Language', 'Audit Info', and 'Extra'. Below this, there are fields for 'Study' (HA107), 'SPONSORCODE', 'Analyte' (Analyte1 / plasma), and 'Model' (yes=box). A 'Sequence' section shows '4' and '9' with 'history' and 'extracted 15.03.1998'.

The main data table has columns: file/sampleID, name, analyte, rt, area, ht, rt(s), area(s), ht(s), p.h.r., dil, ng/mL, dev [%], flag, comment. Rows 37-63 are visible, with row 57 highlighted in red.

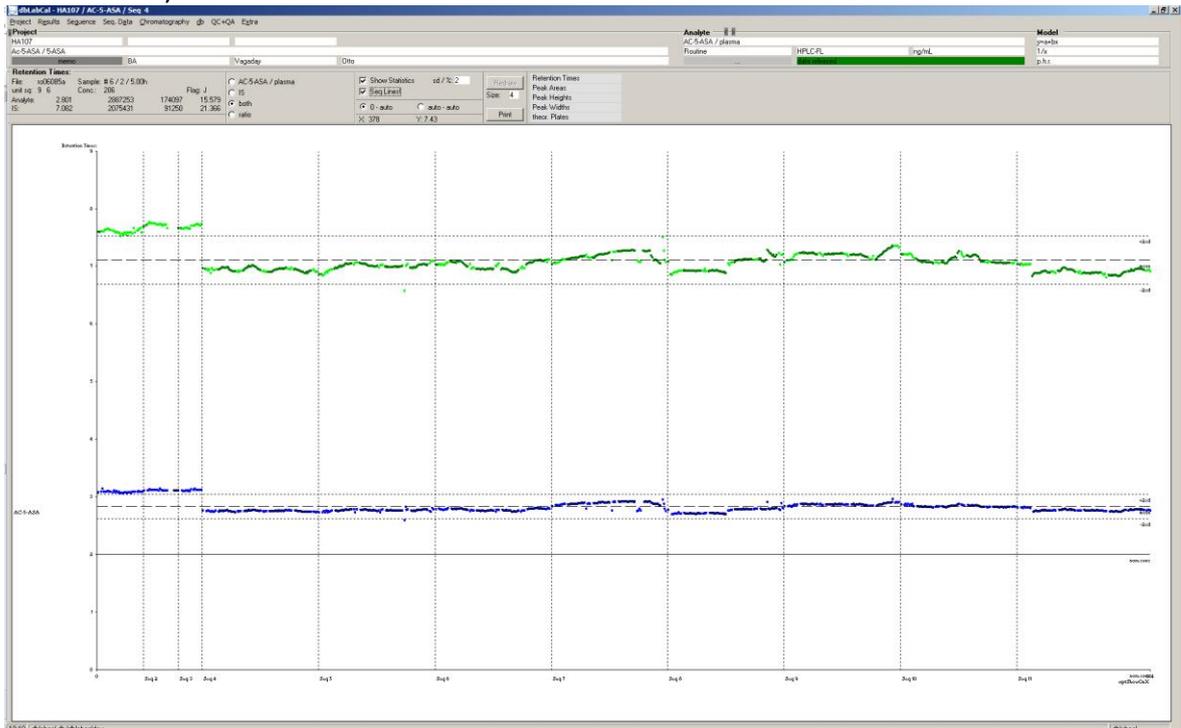
The 'Batch List' window is open over row 57, showing a detailed audit trail for that entry. It includes fields for 'memo', 'batch accepted', 'calcs', 'qcs', and 'r'. The audit trail shows a list of changes with checkboxes for 'Y OK', 'N chrm.error', 'S irregularity of I.S. area/height', 'E flag (excluded)', 'R to be reassayed (not reliable)', 'C to be reassayed (clients request)', 'D sample destroyed', 'V insuff. sample volume', and 'X chrm. excluded'. A 'show history!' button is at the bottom of the window.

## Menü Chromatographie



Man kann sich Retentionszeiten, Peakflächen, Peakhöhen, Peakbreiten oder theoretische Trennstufenzahlen des aktuellen Analyten und des internen Standards (falls vorhanden), anzeigen lassen.

Sinn und Nutzen dieser Auswertungen besteht vor allem darin, dass man 'auf einen Blick' überprüfen kann, ob die Integrationssoftware die Peakzuordnung korrekt vorgenommen hat (Retentionszeit, relative Retentionszeit) und ob die Basislinie korrekt gelegt wurde (Peakbreiten, theor. Trennstufen werden aus dem Verhältnis der Peakfläche/ Peakhöhe berechnet...).



Bewegt man die Maus über der Abbildung, werden automatisch Angaben, in der Reihenfolge Retentionszeit, Peakfläche, Peakhöhe und Peakbreite, zu den Proben 'unterhalb' der aktuellen Mausposition angezeigt.

Mit STRG-Doppelklick kann man zu dem Chromatogramm „springen“.

**Speziell...**

Hier besteht die Möglichkeit, für die chromatographische Auswertung nur bestimmte Probenarten und/oder Konzentrationen heranzuziehen; sich die Daten für alle Peaks des Chromatogramms (nicht nur der aktuelle Analyt) anzeigen zu lassen, usw...

**Chromatography/Queries**

y-Axes:

- Retention Times
- Peak Areas
- Peak Heights**
- Peak Widths
- theor. Plates
- Concentration

Peak(s):

- Analyte1 / plasma
- Analyte2 / plasma (is)**
- Internal Standard

Sample Type(s):

- CAL
- QCS**
- SUB
- SSS
- VAL (ER: Extracts/Room Temperature)
- VAL (EK: Extracts/Refrigerator (5±3°C))
- VAL (EG: Extracts/Freezer (-20±5°C))
- VAL (ET: Extracts/Deep Freezer (-77±5°C))
- VAL (NR: Matrix/Room Temperature)
- VAL (NK: Matrix/Refrigerator (5±3°C))
- VAL (NG: Matrix/Freezer (-20±5°C))
- VAL (NT: Matrix/Deep Freezer (-77±5°C))
- VAL (PR: Validation Samples)
- VAL (PK: Validation Samples)
- VAL (PG: Pools (freeze/thaw))
- VAL (PT: Validation Samples)
- VAL (BR: Validation Samples)
- VAL (BK: Validation Samples)
- VAL (BG: Validation Samples)
- VAL (BT: Validation Samples)
- VAL (AR: Other Matrix)
- VAL (AK: Validation Samples)
- VAL (AG: Validation Samples)
- VAL (AT: Validation Samples)

Nominal Conc.:

- 2.50
- 5.00
- 50.0
- 500**
- 1000
- 1.00
- 2.00
- 20.0
- 200
- 400

x-Axes:

- no.
- Retention Times
- Peak Areas
- Peak Heights
- Peak Widths
- theor. Plates
- Concentration

Conc.>LOQ only

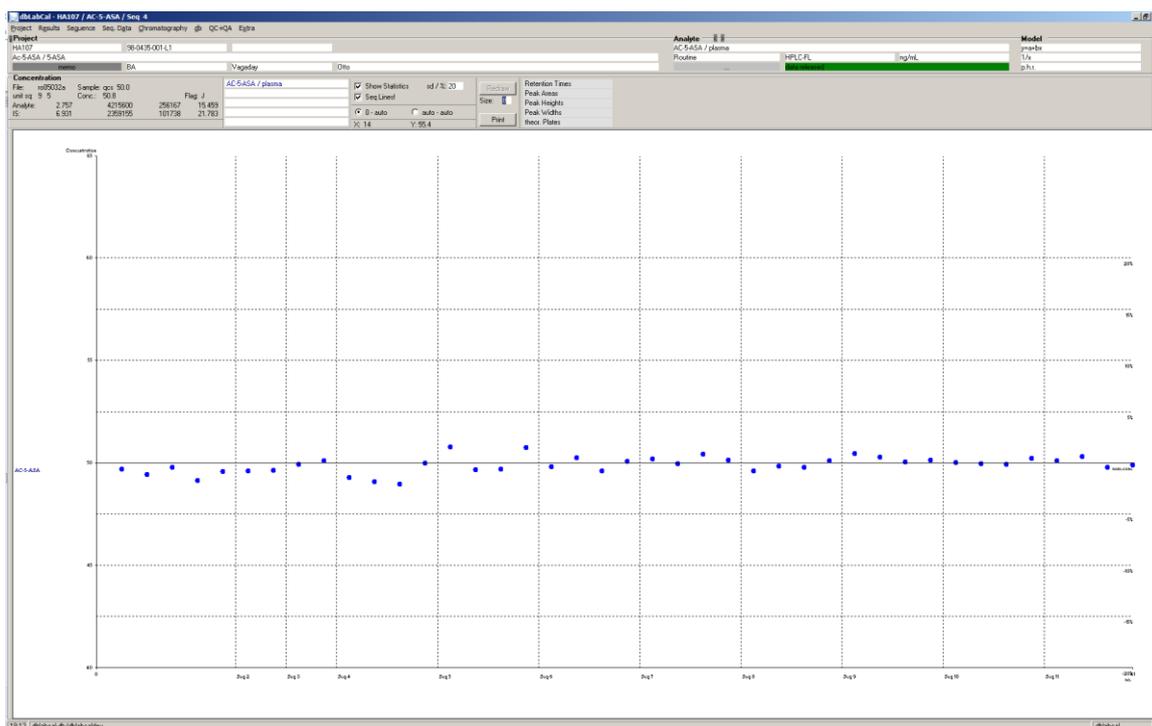
Ratio Analyte/IS

Cancel Ok

Wenn Daten für mehrere Peaks angezeigt werden sollen, ist als x-Achse nur die laufende Chromatogramm-Nummer (nr.) erlaubt.

Wenn  Conc.>LOQ only gewählt wird, werden nur Daten von Chromatogrammen mit berechneter Konzentration, die grösser als LOQ ist, angezeigt. Mit  Ratio Analyte/IS wird die Größe der y-Achse relativ zu der des internen Standards berechnet und angezeigt. Aus Peakfläche wird p.a.r., aus Peakhöhe p.h.r...

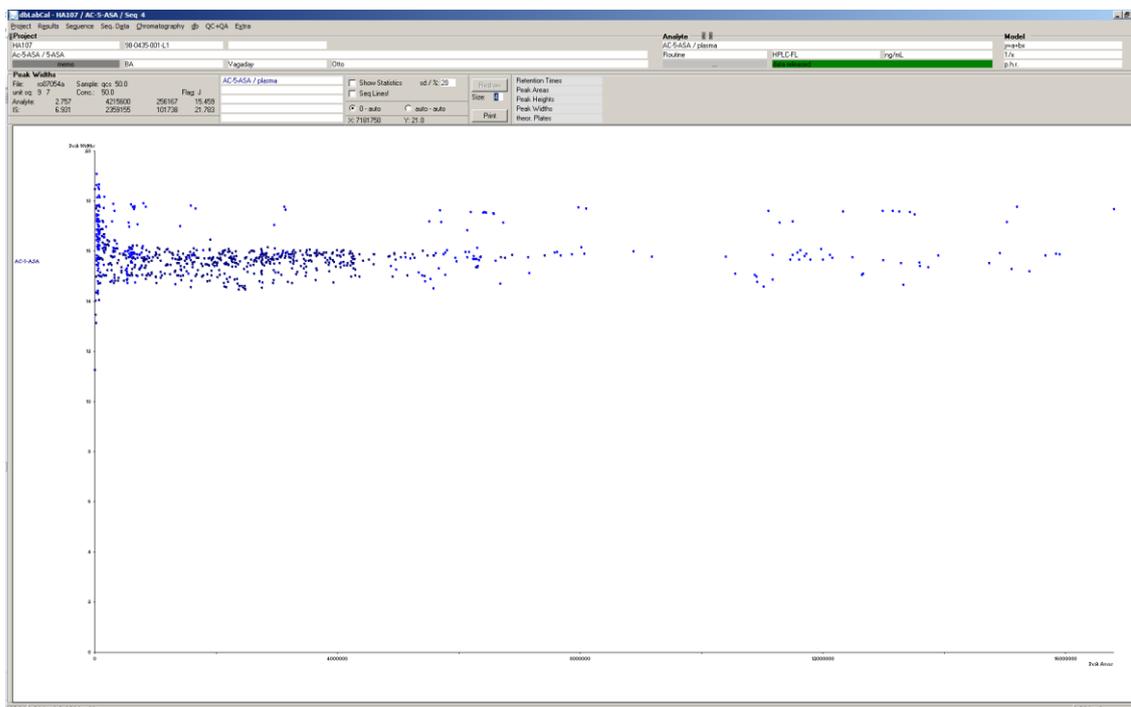
Wird in SD / % eine Zahl  $\geq 5$  eingegeben (siehe nächste Seite), wird statt des Mittelwertes und der gewählten Standardabweichung die Sollkonzentration und die entsprechenden %-Linien angezeigt.



Oft ist es sinnvoll, sich die Peakbreite in Abhängigkeit von der Peakhöhe oder Peakfläche anzeigen zu lassen.

Würde man in der folgenden Abbildung Peakbreite von z.B. 18 bei einem Peak mit der Höhe von z.B.

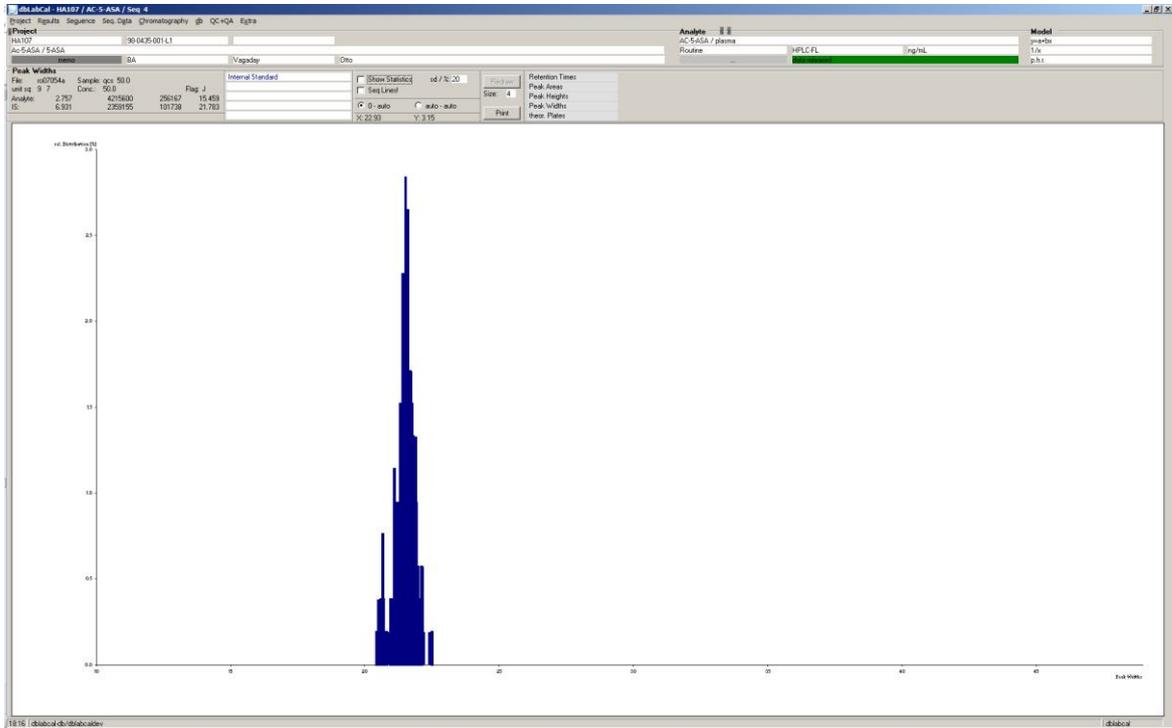
300 000 finden, sollte man sich das zugehörige Chromatogramm genauer anschauen. Bei kleinen Peaks wäre eine Peakbreite von 18 durchaus akzeptabel.



Export der Daten, die der graphischen Darstellung zugrunde liegen, ist auch möglich. Auf diese Weise kann man aus der Datenbank auch diese ‚speziellen Daten‘ exportieren.

Man kann zusätzlich auch verschiedene und oft sehr interessante Korrelationen (z.B. zwischen Peakbreite und Konzentration, oder Peakhöhe und Peakfläche usw. anzeigen, drucken und exportieren.

Schließlich kann, falls man für die x- und y-Achse die gleichen Größen wählt, die prozentuale Verteilungsdichte der Daten angezeigt werden.



Mit STRG-EINFG oder STRG-C kann man die **Graphiken** oder auch die darunterliegenden **Daten** in die Windows-Zwischenablage kopieren.

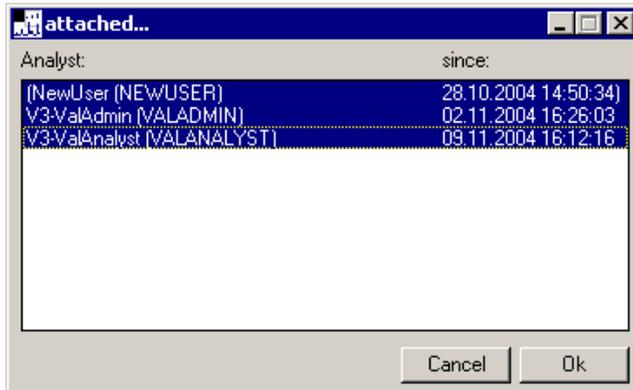
## Menü db

db	QC+QA
	Capacity Browser...
	Long Term Stability Planning
	Attached Users...
	New Password...
	SQL Direct...
	New Admin Password...
	Re-Login required after minutes...
	System AuditTrail
	Edit departments...
	Edit users...
	Edit company/site name...
	Edit database system texts ...
	Edit messages/captions/menus etc...
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow *.lca import (Analyst)
	Force *.rdb for *.lca import
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow Empower2 direct import
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow *.xls import (Xcalibur)
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow *.rep import (ICP-MS)
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow *.asc import (Magellan)
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow *.csv import (access2)
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow *.xls import (SearchLight)
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow *.xls import (LabX)
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow *.xls import (Chromera)
	Allow *.txt import (SoftMax Pro)
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow export to BI ASCII file
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow export to HoLaRo ASCII file
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow HoLaRo reassay rule
	Allow External access
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow Not analyzed flag (NOA)
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow Range [%] display
	Allow 2 Languages
	Lock QC/QA items editing
	Allow regression model $y=a+bx+cx^2$
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow no calc. model ( $y = x$ )
<input checked="" type="checkbox"/>	Allow regression model $y=a+b.log(x)$
	Allow $1/y$ and $1/y^2$ weghtings
	Max. length of study code...
	Max. sequences...
	Max. lines for results...
	Max. nominal conc. for validation/stability samples...
	Max. chrmdata entries/project (results auto load)...

Die meisten Einträge (die ab der ersten Linie) sind nur dem DBLABCAL-Administrator zugänglich. Die Administration von dbLabCal kann von hier erledigt werden.

## angemeldet sind...

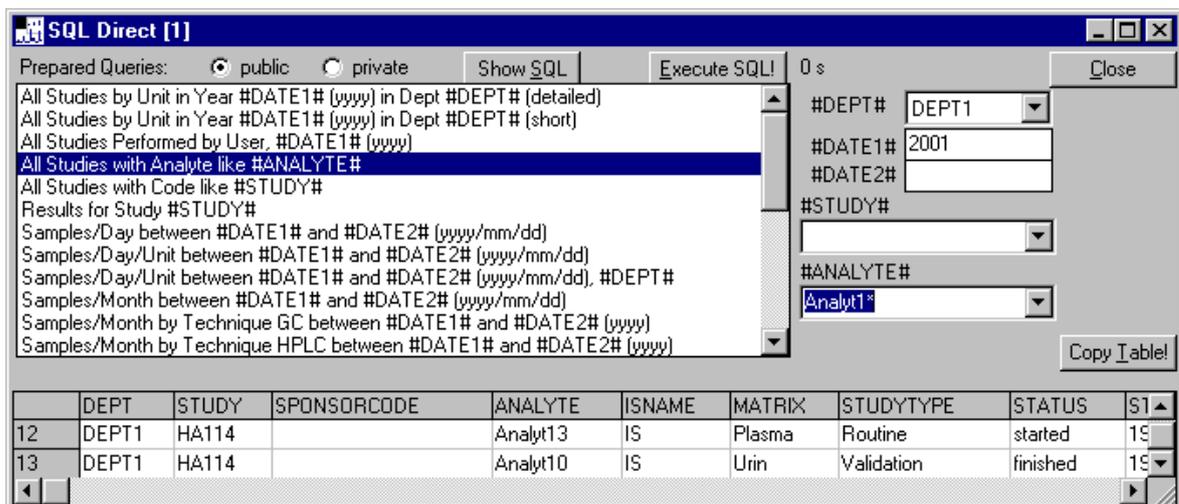
Dieses Menü ist ab Abteilungsleiter aufwärts sichtbar. Damit besteht für den Abteilungsleiter die Möglichkeit, die Benutzer abzumelden (durch ‚Wegklicken‘ des Namen), die aufgrund eines unkorrekten Verlassens des Programms immer noch in der Datenbank angemeldet sind und damit die Bearbeitung der Projektdaten durch andere Benutzer blockieren könnten.



## SQL Direct...

Über dieses Menü kann man zusätzliche Informationen aus der Datenbank gewinnen. Z.B. Status aller Projekte in der Datenbank, Anzahl der gemessenen Proben in einem bestimmten Zeitraum, mit einer bestimmten analytischen Methode usw. Wie schon in der Überschrift angedeutet, werden dabei ad-hoc SQL-Abfragen an die Datenbank abgeschickt. Es sind zwar nur SELECT-Abfragen möglich, diese können aber auch, wenn sie "ungünstig" formuliert sind, die Datenbank doch ziemlich belasten. Deswegen können (und sollen) vom Administrator den einzelnen Benutzern explizit die Zugriffsrechte auf SQL DIRECT erteilt werden. Um eigene SQL-Abfragen kreieren zu können, müssen die berechtigten Benutzer natürlich neben SQL auch die Struktur der DBLABCAL-Datenbank gut kennen.

Einige SQL-Abfragen sind schon nach der Installation vordefiniert und für jeden Benutzer mit Zugriffsberechtigung zugänglich.



Man kann bis zu vier SQL Direct – Dialoge gleichzeitig öffnen.

## Capacity Browser

Der berechtigte Benutzer hat hier einen Überblick über die Ausnutzung der einzelnen Messplätze (Kapazitätsauslastung) und über die Anzahl der gemessenen Proben pro Tag oder pro Monat

## Long Term Stability Planning

Dieser Dialog dient der Planung der Stabilitätsexperimente und ist auch eine Übersicht aller vorhandenen Stabilitätsergebnisse.

Alle Ergebnisse werden von dbLabCal automatisch gepflegt. D.h. wenn entsprechende VAL-Proben importiert/umbenannt wurden, erscheinen die entsprechenden Ergebnisse in dieser Tabelle automatisch.

Code	Project	Analyte	Matrix	Project Type	Analyte Statu	Months Plan	Due Date	Reminder	Val0 Done	LTS Done	Condition	Result	Comment	finished	
1	BA294	MFA in Serum	MFA	Serum	Validation	data releaser	1		15.07.2002	02.10.2002	MATRIX / GS	5.2		NO	
2	BA598	Langzeitstab	15-Keto-PGE0	Plasma	Validation	started	1		11.06.2002	09.06.1999	MATRIX / TK	6.5		NO	
3		Langzeitstab	PGE0	Plasma	Validation	started	1		11.06.2002	09.06.1999	MATRIX / TK	6.5		NO	
4		Langzeitstab	PGE1	Plasma	Validation	started	1		11.06.2002	09.06.1999	MATRIX / TK	6.5		NO	
5	EA004	Amlodipine in	Amlodipine	Plasma	Validation	data releaser	1		08.01.2002		MATRIX / GS	73.0		NO	
6	EX011	Amoxicillin in	Amoxicillin	Plasma	Validation	data releaser	1		05.03.2001	05.03.2001	MATRIX / TK	2.8		NO	
7	FX037	Clavulanic Ai	Clavulanic Acid	Plasma	Validation	data releaser	1		06.03.2001	06.03.2001	MATRIX / TK	2.8		NO	
8	FX064	Interday	Clonidine1997LTS	Plasma	Validation	data releaser	1			12.06.1997	MATRIX / GS	3.0		NO	
9	GA329	4-Oxo-/iso-/	4-oxo-Isotretinoin	Plasma	Routine	data releaser	1		01.12.1998	09.02.1999	MATRIX / GS	2.4		NO	
10		4-Oxo-/iso-/	Isotretinoin	Plasma	Routine	data releaser	1		01.12.1998	09.02.1999	MATRIX / GS	2.4		NO	
11		4-Oxo-/iso-/	Tretinoin	Plasma	Routine	data releaser	1		01.12.1998	09.02.1999	MATRIX / GS	2.4		NO	
12	GA497	Timethoprim	Sulfamethoxazol	Plasma	Routine	data releaser	1		02.09.1998	15.10.1999	MATRIX / TK	13.6		NO	
13		Timethoprim	Timethoprim	Plasma	Routine	data releaser	1		02.09.1998	15.10.1999	MATRIX / TK	13.6		NO	
14		Timethoprim	Sulfamethoxazol	Urin	Routine	data releaser	1		15.09.1998	15.11.1999	MATRIX / GS	14.5		NO	
15		Timethoprim	Timethoprim	Urin	Routine	data releaser	1		09.09.1998	25.10.1999	MATRIX / GS	13.7		NO	
16	GA526	Methimazole	Methimazole	Plasma	Validation	data releaser	1		22.05.1998	26.09.1998	MATRIX / TK	4.3		NO	
17	GA638	Revalidation	Ro 1-9561_Dog	dog plasma	Validation	data releaser	1		12.03.1998	07.09.1998	MATRIX / GS	5.4		NO	
18		Revalidation	Ro 1-9583_Dog	dog plasma	Validation	data releaser	1		12.03.1998	07.09.1998	MATRIX / GS	5.4		NO	
19		Revalidation	Ro 1-9561_Rat	rat plasma	Validation	data releaser	1		06.03.1998	08.09.1998	MATRIX / GS	6.1		NO	
20		Revalidation	Ro 1-9583_Rat	rat plasma	Validation	data releaser	1		06.03.1998	08.09.1998	MATRIX / GS	6.1		NO	
21	GA671	Metabolite M	M-19	Plasma	Validation	data releaser	1		22.04.1998	22.09.1998	MATRIX / GS	5.3		NO	
22	GA702	VALSARTAN	Valsartan_V	Plasma	Validation	data releaser	1		13.10.1998	12.01.1999	MATRIX / GS	3.3		NO	
23	Gx004	Busprone in	1-PP	Plasma	Validation	started	1			13.03.2002	MATRIX / GS	39.6		NO	
24		Busprone in	Busprione	Plasma	Validation	started	1			13.03.2002	MATRIX / GS	39.6		NO	
25	Gx006	LZST CE frei	Delta9-9-DHE	Plasma	Validation	data releaser	1			18.10.2002	MATRIX / GS	6.3		NO	
26		LZST CE frei	Equilin	Plasma	Validation	data releaser	1			18.10.2002	MATRIX / GS	6.3		NO	
27		LZST CE frei	Edron	Plasma	Validation	data releaser	1			18.10.2002	MATRIX / GS	6.3		NO	
28	Gx010	Loratadine/D	Descarboethoxyloa.	Plasma	Validation	data releaser	1			04.01.2000	EXTR / RT	1.1		NO	
29		Loratadine/D	Loratadine	Plasma	Validation	data releaser	1			04.01.2000	EXTR / RT	1.1		NO	
30	Gx020	Testosteron I	Testosteron	Plasma	Validation	data releaser	1			13.05.2003	19.05.2003	EXTR / RT	10.3		NO
31	Gx039	Gemfibrozil in	Gemfibrozil	Plasma	Validation	data releaser	1			11.01.2007	11.01.2007	MATRIX / GS	3.1		NO
32	Gx047	Validierung C	CPA	Plasma	Validation	data releaser	1			29.05.1998	29.05.1998	MATRIX / GS	8.2		NO
33	Gx048	Etronsulfate	Estron	Plasma	Validation	data releaser	1			10.03.1998	10.03.1998	MATRIX / GS	1.1		NO
34	HA058	Peindopril/P	Peindopril	Plasma	Validation	data releaser	1			27.04.1998	17.06.1998	MATRIX / GS	1.7		NO
35		Peindopril/P	Peindoprilat	Plasma	Validation	data releaser	1			27.04.1998	17.06.1998	MATRIX / GS	1.7		NO

## Language

Sichtbar nur wenn vom Administrator freigeschaltet.

Hier kann man jederzeit zwischen den beiden vordefinierten Sprachen hin- und herschalten. Dabei werden die Daten des aktuellen Projekts neu geladen und in der neu gewählten Sprache angezeigt.

## Neues Passwort...

Der Benutzer kann hier sein Oracle-Passwort jederzeit ändern.

*Die folgenden Menüeinträge sind nur dem DBLABCAL-Administrator zugänglich*

**New Admin Password...**

Der Administrator kann hier sein Oracle-Passwort jederzeit ändern.

**Re-Login required after minutes...**

Wenn in DBLABCAL ein anderer Benutzer eingeloggt ist als am Rechner/im Netz, und über den Zeitraum von hier eingestellten Minuten keine Aktion in DBLABCAL erfolgt, wird aus Sicherheitsgründen der in DBLABCAL angemeldete Benutzer automatisch ausgeloggt.

**Edit company/site name...**

Der Name der Firma und/oder Niederlassung, wie er auf den DBLABCAL-Ausdrücken erscheinen soll, wird hier eingegeben.



**Edit users...**

The screenshot shows a 'Users' dialog box with the following fields and controls:

- ID: 254 (with 'New' and 'Exit' buttons)
- User ID: VALANALYST (with an 'account' checkbox)
- Name: VAL-Analyst (with a 'locked' checkbox)
- Password for Oracle Login: (empty text field)
- Department: VALDEPT (dropdown menu)
- Authorization: Analyst (dropdown menu) with an 'active' checkbox
- 'W' flag allowed
- QA-Reviewer
- external user  released data only
- SQL Direct: Select Query Only (dropdown menu)
- Capacity Browser: Own Department (dropdown menu)
- Buttons: Find!, Cancel, Save!, First, Previous, Next, Last

Wenn der User ein Analytiker ist ACTIVE aktiviert. Damit ist sichergestellt, dass dieser Analytiker während des Editierens eines Projekts, oder beim Import der Sequenzen in den Analytiker-Listen angezeigt wird. In DBLABCAL werden keine User (und auch keine Abteilungen) gelöscht. Sollte ein User nicht mit DBLABCAL arbeiten, wird nur ACTIVE zurückgesetzt bzw. der Login auf die Datenbank wird von dem Datenbank-Administrator deaktiviert

UserID ist der Username mit dem man sich im Netz einloggt. Name erscheint in dbLabCal in den Analytiker-Listen und in der Statuszeile. Zugriffsberechtigungsstufen sind: ReadOnly-User, Analyst/Analytiker, Study Director/Prüfleiter, Dept.Manager/Abteilungsleiter und Administrator/Admin. Mit SQL Direct wird bestimmt, ob der User das Menü SQL-Direkt überhaupt sieht und ob er auch SQL-Abfragen schreiben kann. ‚R/W‘ flag allowed ist für User mit der Zugriffsberechtigungsstufe vom Prüfleiter aufwärts immer erlaubt.

„QA-Reviewer“ ist ein „read-only“-User mit der Berechtigung im QC/QA-Dialog den erfolgten QA zu dokumentieren.

Die account und locked – Checkboxes zeigen ob der aktuelle User einen Oracle-Account hat und ob dieser gelockt ist.

**Edit messages/captions/menus etc...**

The screenshot shows the 'Messages' dialog box. At the top, there is a title bar 'Messages'. Below it, the 'ID' is set to 10. There are input fields for 'GoTo ID!' and 'Find!', and an 'Exit' button. The 'Description' field contains the text 'Abbrechen'. Below this, there are two language-specific entries: 'german: Abbrechen' and 'english: Cancel'. At the bottom, there are several navigation buttons: 'Cancel', 'Save!', 'First', 'Previous', 'Next', and 'Last'.

Alle Programm-Texte, Beschriftungen usw. lassen sich hier ändern/anpassen. Die Änderungen sind für den Administrator sofort, für die anderen User nach DBLABCAL-Neustart sichtbar.

**Edit database system texts...**

The screenshot shows the 'System Text' dialog box. At the top, there is a title bar 'System Text'. Below it, the 'ID' is set to 1. There are input fields for 'GoTo ID!' and 'Find!', and an 'Exit' button. The 'Description' field contains the text 'Calibration sample'. Below this, there are two language-specific entries: 'german: CAL' and 'english: CAL'. At the bottom, there are several navigation buttons: 'Cancel', 'Save!', 'First', 'Previous', 'Next', and 'Last'.

Hier werden definiert die Probentyp-Bezeichnung (CAL, QCS, SUB, usw.), Kürzel für Matrix und Temperatur (EXTR, RT, GS, usw.), Kodierung der Chromatogramm-Flags, Kodierung des Sequenz-Status',Projekt-Typs, Sequenztyps, Messgrößen, Audit Trail- Texte usw. Die Änderungen sind nach DBLABCAL-Neustart sichtbar.

### **Allow...**

Hier wird die Sichtbarkeit der jeweiligen Menü-Punkte und damit der nutzbare Funktionsumfang von DBLABCAL festgelegt.

### **Max...**

Die Datenbank-Limits werden hier bei Bedarf erhöht.

### **Menü Extra**

Dieses Menü kann sichtbar sein, falls der Administrator es eingerichtet hat. Über dieses Menü ist es möglich, beliebige andere Programme, die auch eine Erweiterung von DBLABCAL sein können, zu starten. Das Extra-Menü spart einige Klicks...

Eine Beschreibung des Zwecks und der Handhabung solcher Extra-Programme muss separat erfolgen.

## **Tipps und Tricks**

Es sei hier nochmals auf die Umstellung in der Arbeitsweise mit der analytischen Daten vom 'Papier'- oder 'Excel'-Büro auf die Datenbank hingewiesen. Die wichtigsten Punkte sind:

### **Vergabe von Probenbezeichnungen**

diese muss wohl überlegt sein, da die Ergebnisse mit den Probenbezeichnungen 'fest verbunden' sind. Man kann zwar die Probenbezeichnungen auch in der Datenbank nachträglich ändern (Sequenzstatus, Audit Trail), dies ist jedoch eine mühsame Prozedur, die jedesmal eine komplette Neuberechnung der Sequenzdaten und Aktualisierung der Projektergebnisse nach sich zieht.

### **Setzen von Chromatogramm-Flags, Sequenz- bzw. Projekt-Status**

Chromatogramm-Flags, Sequenz- bzw. Projektstatus sind mindestens genauso wichtig wie die analytischen Werte und haben eine genau definierte Bedeutung und Konsequenzen.

Die Daten, die aus der Datenbank herauskommen sind weiterhin genauso richtig oder falsch wie die Daten, die hineinkommen. Da man auch die 'nicht ganz korrekten' Daten schnell weitergeben kann, ist es sehr wichtig, dass die Rohdaten, die in die Datenbank gelangen, 100%-ig gecheckt sind.

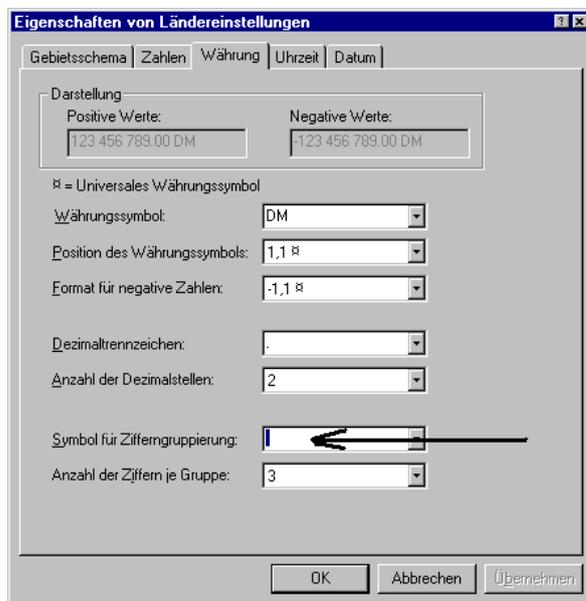
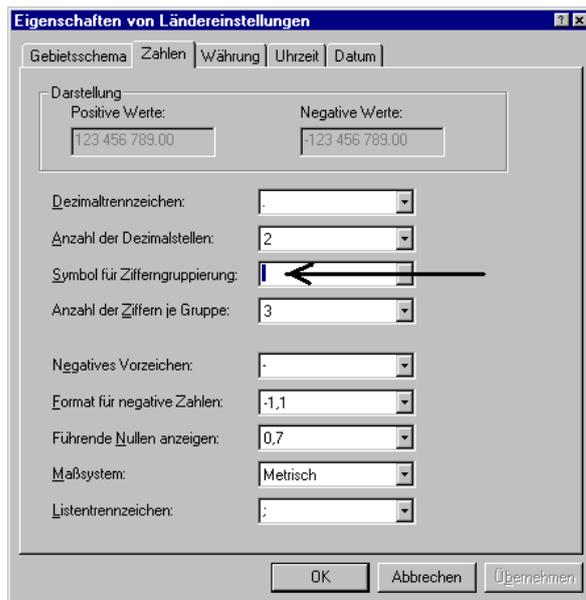
Die Daten gehen folgenden Weg vom Messplatz bis zum Bericht:

- 1) Erzeugen der Chromatogramme (**Rohdaten**) am Messplatz  
EMPOWER2, ANALYST...
- 2) Zusammenfassen der Ergebnisse der Chromatogramme einer Sequenz in einer ASCII-Datei  
EXPORT-OPTION DER CHROMATOGRAPHIE-SOFTWARE
- 3) Bei Bedarf, Kopieren der ASCII-Datei auf den Server
- 4) **Import** der seq/man/sqd/ASCII-Datei in die Datenbank  
Ab hier haben die ASCII-Dateien ihre Aufgabe erfüllt. Sie können gelöscht werden, da sie in der Datenbank gespeichert sind (Audit Trail).
- 5) Export der Daten von der Datenbank in Bericht  
DBLABCAL, WORD, EXCEL

## Die Zahlen sind „unrealistisch hoch“

dbLabCal V3 kann bei manchen Windows-Versionen Probleme mit der Zahlendarstellung haben, wenn im Zahlen/Währungsformat beide Zeichen (Punkt und Komma) gewählt sind.

Zur Behebung: im Arbeitsplatz – Systemsteuerung – Ländereinstellungen Zahlen und Währungsformat überprüfen. Es hilft, wenn als Zeichen für die Zifferngruppierung das Leerzeichen gewählt wird.



### **Man muss ein in die Datenbank importiertes Chromatogramm re-integrieren**

Da die Daten in die Datenbank sequenzweise importiert werden, zieht jede Änderung der Daten eines Chromatogramms die gesamte "Import"-Prozedur nach sich, das heißt:

Falls man erst in der Datenbank merkt (?!), das die Integrationssoftware die Peakzuordnung oder die Basislinie nicht korrekt vorgenommen hat, muss man:

- 1) mit der Integrationssoftware den Chromatogramm (manuell) re-integrieren
- 2) sicherstellen, dass die neuen Ergebnisse gespeichert sind
- 3) die neue Export-Datei in die Datenbank importieren  
Falls die ursprüngliche Sequenz noch den Status 'unbestimmt' hat, ist es kein Problem; falls der Status der ursprünglichen 'Sequenz akzeptiert' ist, muss man ihn vorher auf 'Sequenz ausschliessen' setzen, da eine 'akzeptierte' Sequenz nicht überschrieben werden darf

### **Das Programm meldet: "Das Projekt wird von XYZ bearbeitet"**

XYZ hat sich nicht oder konnte sich nicht in der Datenbank abmelden.

XYZ soll das betreffende Projekt laden und wieder verlassen, indem er/sie ein anderes Projekt wählt oder das Programm beendet.

Außerdem hat der Prüfleiter die Möglichkeit (DB | ANGEMELDET SIND...) den Benutzer durch „ent-selektieren“ und OK abzumelden.

### **In einer „Routine“ die Messgröße bzw. die Wichtung ändern**

Die Änderung von Messgröße bzw. die Wichtung ist nur in einer „Validierung“ erlaubt. Darum muss man zuerst die Projektart auf 'Validierung' ändern. Dann kann man z.B. über Menü PROJEKT | WICHTUNG oder PROJEKT | MESSGRÖßE usw. die neue Wahl treffen. Alle Daten für alle Analyten die in einem Chromatogramm gemessen wurden, werden entsprechend den neuen Einstellungen umgerechnet. Anschließend sollte man nicht vergessen die Projektart zurück auf „Routine“ zu ändern.

*Weitere Bedeutung hat die Wahl der Projektart (Routine oder Validierung) nicht.*

### **Probandenproben müssen zweimal gemessen werden (z.B. Bestimmung der Proteinbindung)**

Damit das Programm die zweifach gemessenen Proben nicht als Wiederholer ausgibt, muss man die Proben unterschiedlich benennen. Am besten man ändert den Durchgang. Z.B.:

Proband 1	Durchgang 1	4.00 h	Plasma
Proband 1	Durchgang 2	4.00 h	Plasma
Proband 1	Durchgang 3	4.00 h	eigentlich Durchgang 1, Puffer
Proband 1	Durchgang 4	4.00 h	eigentlich Durchgang 2, Puffer

### **Man möchte Sequenzen drucken, am Drucker kommt aber Nichts an**

Dies ist möglich, wenn die Sequenzen noch den unbestimmten Status besitzen und man hat vergessen, die Option NUR 'OK' SEQUENZEN abzuschalten.

### **Abbildung mit Probanden-Konzentrationsverlauf drucken**

Das Drucken von Probanden-Konzentrationsverlauf ist in DBLABCAL nicht vorgesehen. Man kann aber die Abbildung in ein anderes Programm exportieren und von da aus drucken.

- 1) STRG-EINFG (oder STRG-C) drücken, ABBILDUNG wählen, oder rechte Maustaste über der Abbildung
- 2) in das Zielprogramm wechseln
- 3) im Edit-Menü des Zielprogramms EINFÜGEN oder PASTE oder etwas Ähnliches wählen oder SHIFT-EINFG (oder STRG-V) drücken

Man kann natürlich auch eine eigene Darstellung des Konzentrationsverlaufs erzeugen, indem man die (markierten) Daten aus DBLABCAL z.B. nach Excel exportiert.

### **Daten in einer ASCII-Datei speichern**

Eine ASCII-Datei mit TAB's als Trennzeichen wird am einfachsten mit Hilfe von Windows Notepad folgendermaßen erzeugt:

- 1) Daten nach Notepad exportieren - entweder mit STRG-EINFG (oder STRG-C), oder rechte Maustaste bei markierten Daten
- 2) Im Notepad im Bearbeiten/Edit-Menü EINFÜGEN/PASTE wählen, oder SHIFT-EINFG (oder STRG-V) drücken
- 3) Datei speichern

### **in Probanden erscheinen manche Zeiten zweimal, mal mit 'missing', mal mit Wert...**

Dies passiert, wenn einigen (eine einzige reicht auch schon!) Proben, nur geringfügig unterschiedliche Zeiten zugewiesen wurden. Man hat z.B. einmal die Probe bezeichnet SUBxxDGxxTP 0.17h und später vielleicht SUBxxDGxxTP 10m. Da 0.17h eigentlich 10.2min sind, unterscheidet DBLABCAL zwischen den beiden Zeiten, obwohl (gerundet) jedes Mal 10m (oder 0.17h) angezeigt werden. In diesem Fall ändert man für eine SUB-Probe mit Zeit 0.17h die Zeit auf 10m, und wählt in dem Dialog PROBENBEZEICHNUNG (siehe Seite 67) ALLE ZEITEN VON...

### **Nach der Wahl der Ergebnisse der Validierungsproben erscheint die Meldung: "Keine Validierungs-0-Werte gefunden..., Probenbezeichnungen und/oder Datumsangaben überprüfen..."**

Gemeint ist damit genau das, was in der Meldung steht. Meistens fehlt in der Datenbank die Information über den Datum "Start der Sequenz". Man kann den fehlenden Datum am besten in ERGEBNISSE | DATEN DER ANALYSEN ergänzen. Sind in der Datenbank alle Daten zum Start der Sequenz vorhanden, bleibt noch die Möglichkeit, dass in den Probenbezeichnungen für die Validierungs-0-Werte z.B. die Information über Matrix und/oder Temperatur fehlt. Man sollte die entsprechende Sequenz(en) laden und die Probenbezeichnungen überprüfen und korrigieren.

**In einem Projekt sind (die gleichen) Analyten in verschiedenen Matrices definiert. In einer Sequenz wurden Proben mit verschiedenen Matrices gleichzeitig gemessen. DBLABCAL erlaubt aber nur einen sequenzweisen Import in ein bestimmtes Paar Analyt/Matrix, definiert für ein Projekt**

Die Zuordnung der Analyten wird zuerst in das erste Paar Analyt/Matrix vorgenommen und die gleiche Datei nochmal importiert, wobei jetzt die Zuordnung in das nächste Paar Analyt/Matrix vorgenommen wird usw. In der Datenbank werden dann die Chromatogramm-Flags der Chromatogramme mit der 'anderen' Matrix auf 'X' gesetzt – oder umbenannt (DIV).

*Es ist viel komplizierter dies zu beschreiben als es einfach zu tun. Darum ein Beispiel:*

Im Projekt sind definiert:

- Analyt1 in Rattenplasma
- Analyt1 in Hundeplasma

In der Sequenz wurden gemessen:

- Kalibrierungskurve (Analyt1 in Wasauchimmer)
- 50 Proben von Analyt1 in Rattenplasma
- 10 Proben von Analyt1 in Hundeplasma

- Beim Import ...
- der Benutzer wählt 'Analyt1 in Rattenplasma'
- nachdem die Sequenz importiert wurde, setzt der Benutzer die Chromatogramm-Flags der 10 Chromatogramme von Analyt1 in Hundeplasma auf 'X' – oder nennt sie um in DIV.
  
- Die Sequenz-Datei wird noch einmal importiert.
- diesmal wählt der Benutzer 'Analyt1 in Hundeplasma'
- die Chromatogramm-Flags der 50 Chromatogramme von Analyt1 in Rattenplasma werden jetzt auf 'X' gesetzt - oder man nennt sie um in DIV.
- fertig

### **Grenzen des Programms**

Die Grenzen des Programms sind so gewählt, dass die überwiegende Mehrzahl der Projekte bearbeitet werden kann und gleichzeitig die Ressource-Anforderungen an den PC nicht unnötig groß sind.

Die Programmgrenzen sind in einer Tabelle der Datenbank eingetragen und können nur vom Administrator geändert werden. Sollte es während der Bearbeitung eines Projekts zur Überschreitung der Programmgrenzen kommen, wird eine entsprechende Meldung ausgegeben.

## **Fehler und Fehlermeldungen**

Neben einer Vielzahl von Fragen, Hinweisen und Sicherheitsabfragen gibt es drei verschiedene Arten von Fehlermeldungen:

- 1) In der Meldung steht deutlich wo und was passierte.  
Z.B.: "Beim Zeichnen der Punkte ist ein Fehler aufgetreten...", oder "Probleme mit OLE. Aktion abgebrochen...". Diese Fehlerart ist eigentlich nicht kritisch, obwohl "irgendwas" mit den Daten nicht stimmt.
- 2) Die Meldung fängt mit "Unerwarteter Fehler..." an.  
Das ist schon schlimmer. Das Programm bleibt zwar standhaft aber es ist nicht mehr sicher, wie lange noch. Alle "Unerwarteter Fehler" werden wenn technisch möglich, in der Datenbank festgehalten, so dass der Administrator die notwendigen Informationen erhält. Man sollte ihn natürlich über das Auftreten eines Fehlers informieren.
- 3) Kurze und knappe englische Fehlermeldung.  
Das heißt, nach dem Klick auf OK ist das Programm weg!  
Dies dürfte sehr selten passieren. Wahrscheinlichster Grund für solche Fehlermeldung sind ernsthafte Probleme mit der Hardware oder Software (Betriebssystem). Den Rechner neu booten und nochmal versuchen.  
Falls die Fehlermeldung reproduzierbar ist, bitte folgende Angaben festhalten und an den Programmierer weitergeben:  
Projekt, Analyt, Sequenz und die letzte Aktion.  
Da es aber äußerst unwahrscheinlich ist, dass der Grund für einen solchen Fall im Programm zu suchen ist :-), sollte man auf jeden Fall zuerst überprüfen, ob (und falls es zutrifft) nicht der Server für kurze Zeit nicht zur Verfügung war, oder ob man nicht einen defekten Rechner besitzt... es gibt tausend andere gute Gründe. Ansonsten hilft nur, den Daumen zu drücken, dass der Programmierer den Bug schnell beseitigen kann.

**Anhang 1: HoLaRo- bzw. BI- ASCII-Files**

Dieser Menüpunkt ist nur sichtbar, wenn dies der Administrator auch erlaubt hat und das Projekt freigegeben ist.

HoLaRo-ASCII bzw. BI-ASCII sind ein von der Fa. Hoffman-LaRoche bzw. Boehringer-Ingelheim genau definierte ASCII-Formate zum Transfer von analytischen Ergebnissen. Mit dem folgenden Dialog kann man Dateien mit diesem ASCII-Format generieren.

Projekt laden, Menü Projekt-> Ergebnisse für BI... wählen

The screenshot shows the 'Ergebnisse für BI...' menu option selected. Below the menu, a table displays analytical results with columns for concentration (pg/mL), dilution (dil.f), sequence (Seq.), and comments (Kommentar).

pg/mL	dil.f	Seq.	Kommentar
<2.50	1.0	5	
<2.50	1.0	6	
<2.50	1.0	5	
<2.50	1.0	5	
6.34	1.0	5	
<2.50	1.0	5	
<2.50	1.0	5	
3.75	1.0	10	
<2.50	1.0	5	
25.7	1.0	5	
7.95	1.0	5	
2.68	1.0	5	
<2.50	1.0	10	
<2.50	1.0	5	
32.9	1.0	5	
11.4	1.0	5	
5.43	1.0	5	

HoLaRo-Dialog:

The dialog box 'Export in HoLaRo-Datei...' contains a table with the following columns: STUDY\_ID, PATIENT\_ID, SAMPLE\_ID, SAMPLE\_NO, ANALDATE, ANALYTE\_MEASURED, and SPECIMEN\_TYPE. The table is currently empty. At the bottom, there are buttons for 'Abbrechen', 'Import db', 'Import ASCII', and 'HoLaRo schreiben!'. A file path 'h:\hplc\_std\ha107\ha107hlr.txt' is entered in the text field.

BI-Dialog:

Mit IMPORT DB können zuerst die in DBLABCAL vorhandenen Daten in die Tabelle geladen. Es ist ebenfalls möglich Daten aus einer ASCII-Datei mit IMPORT ASCII (Text mit TABs getrennt) zu laden. Die Daten können in dem obigen Dialog (oder auch in Excel) editiert werden. Dazu kann man die Daten jederzeit über die Zwischenablage (oder eine ASCII-Datei) zwischen Excel und DBLABCAL austauschen. Der Name und Pfad der Datei(en) kann man entweder direkt oder über '...' eingeben.

dbLabCal lädt „so gut es geht“ die in der Datenbank gespeicherten Daten.

„so gut es geht“ heißt:

**BI:**

<i>dbLabCal</i>	<i>BI-ASCII-File-Spalte</i>
<i>Proband</i>	<i>PTNO</i>
<i>Durchgang</i>	<i>ACTEVENT</i>
<i>Zeit</i>	<i>PTM und PTMSP</i>

**HoLaRo:**

<i>dbLabCal</i>	<i>HoLaRo-ASCII-File-Spalte</i>
<i>subPATIENT_ID_SAMPLE_ID_SAMPLENO</i>	<i>PATIENT_ID</i>
<i>subPATIENT_ID</i>	
<i>subPATIENT_IDdg1tpSAMPLENO</i>	
<i>Durchgang : N/A</i>	<i>SAMPLE_ID</i>
<i>Zeit : N/A</i>	<i>SAMPLENO</i>

**Ab diesem Moment ist es möglich, jeden Wert in dem Export-Dialog zu ändern. (NUR in dem Export-Dialog, nicht in der Datenbank selbst)**

Meistens ist es notwendig, die vorliegenden Daten entsprechend dem DTA anzupassen.

Das geht sehr einfach, schnell und sicher mit folgenden Tastenkombinationen.

Eine ZELLE editieren

- Doppelklick oder ENTER in Zelle -> Zelle wird geöffnet/editierbar
- ENTER in geöffneter Zelle -> Zelle wird geschlossen, neuer Inhalt
- ESCAPE in geöffneter Zelle -> Zelle wird geschlossen, keine Änderung

SUCHEN&ERSETZEN

- CTRL-D in geöffneter Zelle -> alle Zellen unterhalb werden mit dem aktuellen Inhalt gefüllt.
- SHIFT-CTRL-D in geöffneter Zelle -> alle leeren Zellen unterhalb werden mit dem akt. Inhalt gefüllt.
- CTRL-R in geöffneter Zelle -> gleiche Inhalte (wie Original in der aktuellen Zelle)  
aller Zellen unterhalb werden mit dem aktuellen Inhalt ersetzt.

ZEILEN editieren

- DEL / INS (Zelle geschlossen) -> ganze Zeile wird gelöscht / neue leere Zeile wird eingefügt
- CTRL-C / CTRL -INS / Rechte Maus + Copy mit markierten Zellen -> Kopieren in die Zwischenablage
- CTRL-V oder SHIFT-INS -> Kopieren aus der Zwischenablage

Oft muss noch eine manuelle Ergänzung der Accession number mit PTNO, ACTEVENT, PTM etc. aus separat gelieferten Excel files erfolgen.

Es ist möglich, zu diesem Zweck die Daten zwischen dem dbLabCal-Export-Dialog und Excel über die Zwischenablage auszutauschen.

Filename entsprechend DTA wählen.

Mit HOLA RO SCHREIBEN! bzw. BI SCHREIBEN! wird schließlich die Datei in dem jeweiligen ASCII-Format erzeugt.

**Anhang 2: LC-MS/MS (Analyst)**

Aus der PE SCIEX Software ANALYST (Analyst Versionen 1.1-1.6.2 wurden getestet) werden die Daten wie folgt exportiert.

Nach der Messung wird im ANALYST der QUANTITATION WIZARD unter QUANTITATE gestartet. Nachdem im Wizard das Sequenzfile (\*.wiff) und die Chromatogramme ausgewählt wurden, wird die RESULTS TABLE angezeigt.

In dieser RESULTS TABLE **müssen** folgende Spalten definiert sein (falls noch nicht erledigt...).

<b>Sample Name</b>	Analyte Peak Name	Analyte Concentration	...
...	Analyte Retention Time	Analyte Peak Area	Analyte Peak Height
...	IS Retention Time	IS Peak Area	IS Peak Height
...	Acquisition Date	Sample ID	Dilution Factor

**Die erste Spalte muss** SAMPLE NAME sein - sie wird im Analyst standardmäßig als erste Spalte angezeigt.

Die Reihenfolge der anderen Spalten ist beliebig. In der RESULT TABLE dürfen auch zusätzliche Spalten definiert sein.

**Die Tabelle muss nach Chromatogrammen sortiert sein - d.h. in der Reihenfolge der Messung.**

Nach Wahl von EXPORT... im FILE... –Menü wird nach Namen für die zu exportierende ASCII Datei gefragt. Gewählt werden sollte ein Name, der aus z.B. zwei beliebigen Buchstaben und maximal drei Zahlen (=Sequenznummer) besteht. Als Dateierweiterung sollte \*.LCA gewählt werden. Dadurch ‚weiß‘ DBLABCAL, dass es sich bei der Datei um eine vom Analyst generierte ASCII-Datei handelt. (Beispiel: sq01.lca, we7.lca, ab115.lca...)

Sollte im Analyst kein Sample ID definiert worden sein, wird der Filename/Sample ID für die einzelnen Proben beim DBLABCAL-Import aus den ersten 5 Zeichen des Namens der lca-Datei und der Vial Position gebildet.

Import der lca-Datei erfolgt in DBLABCAL über dbLabCal-Menü SEQUENZ IMPORT...

**Anhang 3: Empower2**

Um Daten aus Empower2 exportieren zu können, müssen die folgenden Custom Fields definiert sein:

- SType: Art der Probe, siehe untere Tabelle
- Info\_Sub: Probandnummer oder Konzentration der CAL oder QC und VAL Proben
- Period: Durchgangsnummer
- STime: Abnahmezeit bei Probanden oder Lagerdauer bei Validierungs/Stabilitätsproben
- Matrix: Angabe der Matrix-Gruppe bei Validierungs/Stabilitätsproben
- Temp: Angabe der Temperatur-Gruppe bei Validierungs/Stabilitätsproben

Empower2-Namenskonvention

SType	Info_Sub	Period	STime	Matrix	Temp
cal	nom. Konzentration *)				
qc	nom. Konzentration				
sub	Nummer oder Bezeichnung	Durchgang	Abnahmezeit in h oder _d_h_m		
val	nom. Konzentration		Dauer in h oder _d_h_m	E Extrakte N Matrix P Auftauzyklen A Vollblut B (frei)	R (RT) K (KS) G (GS) T (TK)
blank	z.B. mit oder ohne IS oder Batch-Nummer, usw.				
diverse	Bezeichnung				
k-ref					
w.b.					

\*) es wird zuerst versucht, die nominelle Konzentration für CAL-Proben aus dem Empower Field „Amount“ zu holen. Falls Amount in Empower nicht benutzt wurde, werden die nominellen Konzentrationen aus Info\_Sub herausgelesen.

Bei SUB gibt es zwei Möglichkeiten für die Kombination von den Feldern Info\_Sub, Period und STime.

Entweder

werden Info\_Sub, Period als Zahlen und STime in Stunden oder \_d\_h\_m eingegeben, dann versteht dbLabCal die Eingaben als „Proband/Durchgang/Zeit“

oder

wenn (auch nur) eine Eingabe keine Zahl (\_d\_h\_m bei STime) ist versteht dbLabCal die Eingaben als „Proband“ wobei die Felder Info\_Sub, Period als und STime mit einem Unterstrich verbunden werden.

Außer dem Feld Sample Name oder den Custom Fields muss noch Vial, Dilution, und (selbstverständlich) die Retentionszeiten, Peakflächen und Peakhöhen exportiert werden.

Der Import aus Empower2 erfolgt direkt mithilfe des dbLabCal's Dialog „Import from Empower2...“. (Es wird keine ASCII-Datei exportiert oder importiert.)

Der Benutzer gibt sein Empower2-Passwort ein und logt sich in Empower2 mit dem Klick auf den Button **LOGIN** ein. Falls solches Projekt in Empower2 das in dbLabCal geladene Projekt existiert wird es in der Dropdownbox **PROJECTS** gleich ausgewählt.

Nach der Wahl des/der SampleSets, der zu importierenden Chromatogramme, Ergänzung der restlichen Sequenzinformationen und Klick auf **OK** werden die Daten ins dbLabCal importiert.

**Import from Empower2...**

Database: NEUEMP2 | UserID/PWD: vagadaym / \*\*\*\*\* | login | Projects: TA348\_Acyclovir | Launch Empower

Show Sample Sets for selected Project: 1 sample set(s) selected

SampleSetName	SampleSetStartDate	SampleSetFinishDate	SystemName
run17_unit03	24-Oct-2009 06:11:33	25-Oct-2009 05:42:15	MP03
run18_unit07	23-Oct-2009 21:25:20	24-Oct-2009 23:07:44	MP07
run16_unit03	23-Oct-2009 05:40:51	24-Oct-2009 06:11:32	MP03
run15_unit07	22-Oct-2009 19:41:58	23-Oct-2009 21:25:19	MP07
run14_unit03	22-Oct-2009 07:44:45	23-Oct-2009 01:27:26	MP03
run13_unit07	21-Oct-2009 19:43:38	22-Oct-2009 19:41:57	MP07
run12_unit03	21-Oct-2009 06:40:23	22-Oct-2009 07:44:44	MP03
run11_unit07	20-Oct-2009 18:00:17	21-Oct-2009 19:43:37	MP07
run10_unit03	20-Oct-2009 06:24:10	21-Oct-2009 06:40:22	MP03

Show latest Results for selected Sample Sets: 90 chrm(s) selected

Vial	SType	Info_Sub	Period	STime	Temp	Matr	Dilution	DateAcquired	Resultid
1	1	k-ref					1,0000	24-Oct-2009 06:28:27	7754
2	2	w.b.					1,0000	24-Oct-2009 06:44:49	7674
3	3	blank					1,0000	24-Oct-2009 07:01:11	7675
4	4	blank + IS					1,0000	24-Oct-2009 07:17:31	7676
5	5	cal	10.0 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 07:33:50	7672
6	6	cal	20.0 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 07:50:10	7664
7	7	cal	40.0 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 08:06:32	7665
8	8	cal	80.0 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 08:22:52	7666
9	9	cal	100 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 08:39:12	7667
10	10	cal	200 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 08:55:33	7668
11	11	cal	400 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 09:11:53	7669
12	12	cal	800 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 09:28:13	7670
13	13	cal	1000 ng/mL				1,0000	24-Oct-2009 09:44:34	7671
14	14	w.b.					1,0000	24-Oct-2009 10:00:54	7677
15	15	sub	23	1	0h		1,0000	24-Oct-2009 10:17:14	7755
16	16	sub	23	1	0.5h		1,0000	24-Oct-2009 10:33:33	7756
17	17	sub	23	1	1.0h		1,0000	24-Oct-2009 10:49:54	7757
18	18	sub	23	1	1.5h		1,0000	24-Oct-2009 11:06:14	7681
19	19	sub	23	1	2.0h		1,0000	24-Oct-2009 11:22:34	7758
20	20	sub	23	1	2.5h		1,0000	24-Oct-2009 11:38:54	7759
21	21	sub	23	1	3.0h		1,0000	24-Oct-2009 11:55:15	7760
22	22	sub	23	1	3.5h		1,0000	24-Oct-2009 12:11:34	7761
23	23	sub	23	1	4.0h		1,0000	24-Oct-2009 12:27:54	7762
24	24	sub	23	1	5.0h		1,0000	24-Oct-2009 12:44:14	7763
25	25	sub	23	1	6.0h		1,0000	24-Oct-2009 13:00:34	7764
26	26	sub	23	1	8.0h		1,0000	24-Oct-2009 13:16:54	7765
27	27	sub	23	1	10h		1,0000	24-Oct-2009 13:33:14	7766
28	28	sub	23	1	12h		1,0000	24-Oct-2009 13:49:37	7767
29	29	sub	23	1	16h		1,0000	24-Oct-2009 14:05:59	7768
30	30	sub	23	1	24h		1,0000	24-Oct-2009 14:22:20	7693
31	31	w.b.					1,0000	24-Oct-2009 14:38:40	7694
32	32	sub	23	2	0h		1,0000	24-Oct-2009 14:55:00	7769
33	33	sub	23	2	0.5h		1,0000	24-Oct-2009 15:11:20	7770

Unit: MP03 HPLC MP03 | Project: TA348\_Acyclovir

Analyst: Wick | Batch No: | Comment: | Peak 1: Acyclovir

Batch No: 17 |  overwrite

Confirm to overwrite batch status - batch status not set yet

extracted: 24-10-2009 06:28:00 | finished: 25-10-2009 05:26:00 | ChrmCount: 89

Comment to Sequence: sample set name=run17\_unit03 (id 7078)

Peak Assignment: Acyclovir / Plasma

Buttons: Cancel, OK

#### **Anhang 4: Xcalibur**

Nach der Messung wird im Xcalibur (Version 1.4 wurde getestet) der QUANBROWSER gestartet. Man lädt im QUANBROWSER das ausgewertete Sequenzfile (\*.sld) aus dem Datenverzeichnis (z.Z.: c:\Xcalibur\data\PROJEKT\SEQ\ )

Im QuanBrowsers FILE-Menü wählt man EXPORT DATA TO EXCEL und dann EXPORT LONG EXCEL REPORT.

Gewählt werden sollte ein Name, der aus z.B. zwei beliebigen Buchstaben und maximal drei Zahlen (=Sequenznummer) besteht. Als Dateierweiterung ist \*.xls vorgegeben.

Import der xls-Datei erfolgt in DBLABCAL über dbLabCal-Menü SEQUENZ IMPORT...

**Anhang 5: SoftMax Pro**

Create the export file (\*.txt, plain ASCII with TABs) as described in SoftMax Pro.  
File structure should be as in the following example:

COL	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
ROW											
1	##BLOCKS= 4										
2	Group:	DONT	1								
3	Sample	Wells	Sample#	Values	MeanValue						
4	SSS01	A3	1	0.327	0.328						
5		A4		0.328							
6											
7	^End										
8	Group:	SUB	1								
9	Sample	Wells	Sample#	Values	MeanVa	BackCal	Mean Conc.				
10	SUB01DGTP1	D1	1	0.108	0.112	5.78	5.42				
11		D2		0.117			6.14				
12	SUB01DGTP2	D4	2	0.146	0.146	8.45	8.44				
13		E3		0.146			8.46				
14	SUB01DGTP3	D5	3	0.12	0.121	6.45	6.43				
15		D6		0.121			6.47				
16	SUB01DGTP4	D7	4	0.089	0.089	3.96	3.95				
17		D8		0.09			3.97				
18	SUB01DGTP5	D9	5	0.049	0.049	0.71	0.71				
19		D10		0.049			0.71				
20											
21	^End										
22	Group:	QCS	1								
23	Sample	Wells	Concent	Values	MeanVa	BackCal	% Bias	Mean			
24	QCS 15	C1	15	0.225	0.223	14.81	-1.3	14.7			
25		C2		0.222		14.6	-2.6				
26		C7		0.22		14.43	-3.8				
27		C8		0.226		14.89	-0.7				
28	QCS 45	C3	45	0.588	0.585	44.83	-0.4	44.6			
29		C4		0.587		44.76	-0.5				
30		C9		0.573		43.55	-3.2				
31		C10		0.591		45.11	0.3				
32	QCS 80	C5	80	0.961	0.972	77.69	-2.9	78.6			
33		C6		0.992		80.45	0.6				
34		C11		0.97		78.51	-1.9				
35		C12		0.963		77.84	-2.7				
36											
37	^End										
38	Group:	CAL	1								
39	Sample	Wells	Mean Co	Concent	BackCal	Mean Co	Values	MeanV	Std.D	CV%	% bias
40	Cal 5	B1	5.02	5	5.07	5.02	0.103	0.1	0	0.8	1.4
41		B2			4.98		0.102				-0.4
42	Cal 10	B3	9.9	10	9.92	9.9	0.164	0.16	0	0.3	-0.8
43		B4			9.88		0.164				-1.2
44	Cal 25	B5	25.22	25	25.31	25.22	0.354	0.35	0	0.4	1.2
45		B6			25.13		0.352				0.5
46	Cal 50	B7	49.7	50	50.17	49.7	0.65	0.64	0.01	1.2	0.3
47		B8			49.23		0.639				-1.5
48	Cal 75	B9	75.25	75	75.75	75.25	0.94	0.93	0.01	0.8	1
49		B10			74.76		0.929				-0.3
50	cal 100	B11	99.94	100	99.37	99.94	1.195	1.2	0.01	0.7	-0.6
51		B12			100.5		1.207				0.5
52											
53	Smallest standard value:			0.103							
54											
55	Largest standard value:			1.201							
56											
57	^End										

- use dbLabCals naming conventions for the Group name (CAL, QCS, SUB, VAL, SSS, DIV) if you want import data of that group  
(if you don't want to import data from a group, just name the group with some text unknown to dbLabCal)
- use dbLabCals naming conventions for the sample name (CAL, QCS, SUB, VAL, SSS, DIV)

it is sufficient to name the samples only once, if the following row has data of the same sample, as shown above

- define the data columns for each sample type in the softmaxpro.col file in the dbLabCals working folder

softmaxpro.col file – example:

```
[default]
DataColCAL=5
DataColQCS=6
DataColSUB=7
DataColSUBDILF=-1
DataColVAL=6
DataColKON=4
DataColDIV=6
```

- sample name is in the first column for all sample types

The \*.txt file is imported into dbLabCal via menu BATCH IMPORT...

All individual data (not only the mean values!) will be imported.

It means:

- there is NO regression calculation in dbLabCal, and therefore, NO concentration calculation for QCS, SUB, VAL and SSS samples
- the user will have to make choice on final SUB results for ALL samples since for ALL SUB samples at least two individual results were imported.

**Anhang 6: Magellan (ELISA Reader)**

Nach der Messung mit der Magellan Software V 3.11 werden die Messdaten automatisch in ein vorgegebenes Datenexport-Verzeichnis exportiert

(J:\RIA\_STD\MESSDATEN\MAGELLAN\Projekt)

Der Dateiname wird vor der Messung im Software Assistenten **Methode ausführen** (Dialogfeld **Messung**) vergeben; in der Regel enthält er die Studiennummer/Studiencode, die Abkürzung des Analyten, falls in der Studie mehrere Analyten zu messen sind, und die Sequenznummer (z.B. RA999\_AGP\_Run001). Die Dateierweiterung ASC ist vorgegeben  
Der Import der asc-Datei (\*.asc) erfolgt in dbLabCal über das dbLabCal-Menü SEQUENZ IMPORT...

*Wichtig: Der Import der asc-Datei wird von dbLabCal nur erlaubt, wenn für das aktuelle Projekt als Regressionsmodel NO CALC.(DOUBLE ASSAYS) gewählt wurde.*

Beispiel einer asc-Datei:

Definition: 96 Zeilen  
Spalte 1 Position  
Spalte 2 Probenbezeichnung (oder „empty“ falls die Position leer ist)  
Spalten 3,4 nicht benutzt  
Spalten 5-9 Daten

A1	CAL 0.00		0.067	<Min	<Min		
B1	CAL 0.00		0.069	<Min			
C1	CAL 0.313		0.109	<Min	0.3331		6.4218
D1	CAL 0.313		0.121	0.3331			
E1	CAL 0.625		0.223	0.65434	0.62479	6.6885	-0.033407
F1	CAL 0.625		0.203	0.59524			
G1	CAL 1.25		0.449	1.271	1.2499	2.38	-0.0050019
H1	CAL 1.25		0.433	1.2289			
A2	CAL 2.50		0.958	2.474	2.5001	1.4778	0.0048336
B2	CAL 2.50		0.979	2.5262			
C2	CAL 5.00		1.663	5.0925	5.0005	2.6038	0.0094718
D2	CAL 5.00		1.625	4.9084			
E2	CAL 10.0		2.361	10.039	10	0.54452	0.0014085
F2	CAL 10.0		2.354	9.9616			
G2	CAL 20.0		2.759	>Max	18.827		-5.8664
H2	CAL 20.0		2.732	18.827			
A3	QCS 0.750		0.247	0.72357	0.71499	1.6976	-4.668
B3	QCS 0.750		0.241	0.70641			
C3	QCS 7.50		2.273	9.1401	8.6304	8.3535	15.071
D3	QCS 7.50		2.155	8.1206			
E3	QCS 15.0		2.683	16.26	16.599	2.8895	10.662
F3	QCS 15.0		2.699	16.938			
G3	empty						
H3	empty						
A4	QCS 0.750		0.234	0.68627	0.71771	6.1966	-4.3049
B4	QCS 0.750		0.256	0.74916			
C4	QCS 7.50		2.11	7.7737	8.3231	9.3361	10.975
D4	QCS 7.50		2.244	8.8726			
E4	QCS 15.0		2.688	16.461	16.942	4.0176	12.95
F4	QCS 15.0		2.709	17.424			
G4	empty						
H4	empty						
A5	QCS 0.750		0.255	0.74633	0.75622	1.8507	0.82971
B5	QCS 0.750		0.262	0.76612			
C5	QCS 7.50		2.113	7.7962	8.3798	9.8497	11.731
D5	QCS 7.50		2.254	8.9635			
E5	QCS 15.0		2.811	>Max	>Max		>Max
F5	QCS 15.0		2.821	>Max			

## **Anhang 7: Access2**

Nach der Messung einer Sequenz am Access<sup>®</sup>2 werden die Testergebnisse abgerufen, gespeichert und ausgedruckt (Anweisung siehe auch Access<sup>®</sup>2 Immunoassay System „Kurzbedienungsanleitung ab Softwareversion 2.0“). Die gesamte Auswahl zu druckender/speichernder Proben muss hierzu markiert sein. Die Sequenz wird als „Aktuelle Auswahl“ unter Auf Diskette kopieren F6 in das Verzeichnis »C:\Instrument\Data« gespeichert (als Dateierweiterung ist \*.csv vorgegeben!). Der Dateiname sollte die Projekt Nummer, den Parameter und die Sequenznummer enthalten.

Die Datei wird von dem Access2 System-PC in ein vorgegebenes Datenexport-Verzeichnis (z.B.: J:\...\MESSDATEN\ACCESS2\Projekt) exportiert. Das kann mit beliebigen Remote-Tool erfolgen, z.B. mithilfe von Symantec pcAnywhere installiert auf einem separaten PC.

Import der csv-Datei erfolgt in dbLabCal über dbLabCal-Menü Sequenz Import...

### *Wichtig:*

*csv-Datei – Import wird von dbLabCal erlaubt nur wenn für das aktuelle Projekt als Regressionsmodel NO CALC.(DOUBLE ASSAYS) gewählt wurde.*

## **Anhang 8: ISE**

### **MultiLab pilot**

- Im MultiLab pilot „Speicher/Datenbank & Export...“ klicken
- File öffnen (Die Messwerte erscheinen in einer Liste)
- Den Export Button klicken
- Excel format auswählen (.xls)
- xls Speichern (unter J:\MS\_II\Messdaten\MP09\Projekt\)
- die Messwerte (aus dem xls-File in die „Sequenzliste“(J:\MS\_II\Messdaten\MP09\ISE.d01..xlt) kopieren
- „Sequenzliste“ neu unter „J:\MS\_II\Messdaten\MP09\Projekt\“ als db\_Projekt\_SeqNr.xls abspeichern (z.B. db\_TX023\_01.xls)

Import der xls-Datei („Sequenzliste“) erfolgt in DBLABCAL über dbLabCal-Menü SEQUENZ IMPORT...

#### ***Wichtig:***

*xls-Datei – Import wird von dbLabCal erlaubt nur wenn für das aktuelle Projekt als Regressionsmodel LOG.REG gewählt wurde.*

### **LabX Mettler**

*KC specific part for ISE here...example...*

- Click...
  - Save ...
  - ...
- ...

Import der xls-Datei („Sequenzliste“) erfolgt in DBLABCAL über dbLabCal-Menü SEQUENZ IMPORT...

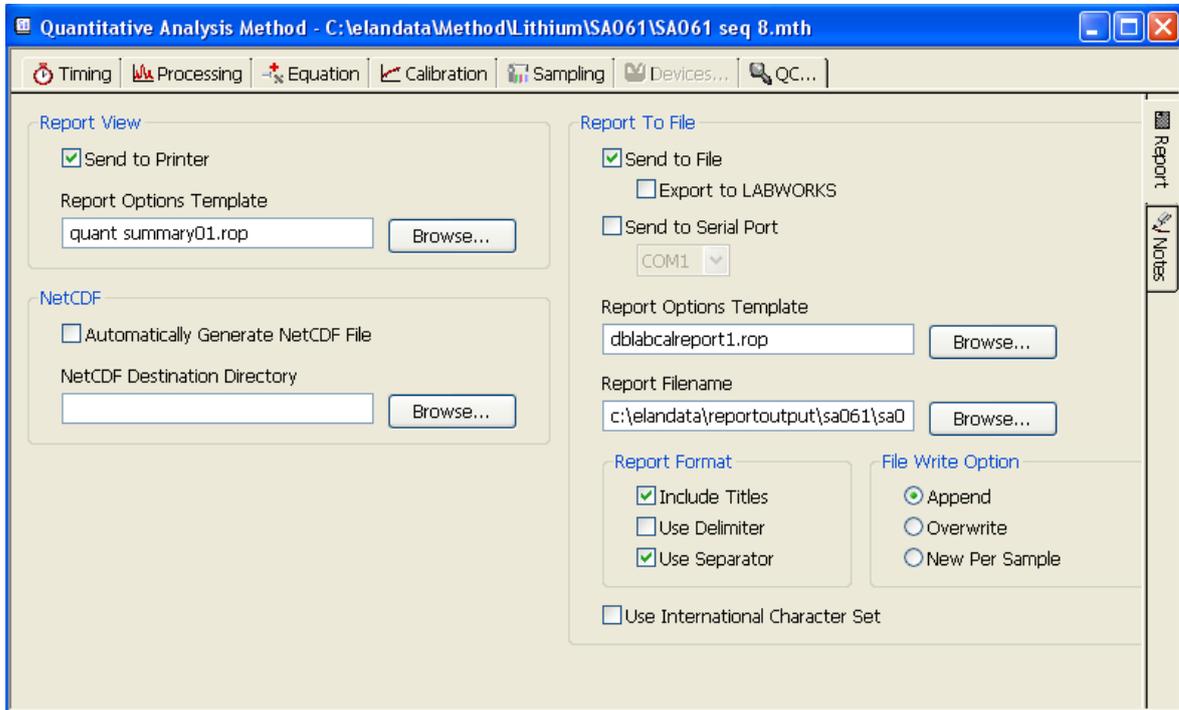
#### ***Wichtig:***

*xls-Datei – Import wird von dbLabCal erlaubt nur wenn für das aktuelle Projekt als Regressionsmodel LOG.REG gewählt wurde.*

## Anhang 9: ICP-MS Elan

### Methode definieren (Icon „Method“ ).

Mit „Report Filename“ wird die eigentliche Export-Datei definiert, die rep-Datei, die nach Ende der Messung in dbLabCal importiert wird.



Hier wird der „Report Option Template“ gewählt. In der rop-Datei sind die Export-Einstellungen definiert.

In der rop-Datei in „Report Option“ folgende Sections gewählt werden:

- Sample Information
- Mean Values

Die Report-Methode wird z.B. als dblelabcalreport.rop gespeichert (Report-Vorlage)

Siehe folgende 2 Abbildungen für Details:

The image displays two screenshots of the 'Report Options' dialog box, showing the configuration of report sections and fields.

**Top Screenshot: Section Configuration**

Available Sections		Selected Sections	
Index	Section Name	Index	Section Title
1	Sample Information	1	Sample Information
2	Replicates	2	Mean Values
3	Mean Values	3	
4	Standard Deviations	4	
5	Relative Std. Dev.	5	
6	Summary	6	
7	Calibration	7	
8	QC Calculated Values	8	
9	QC Out Of Limits	9	
10	QC Action	10	
11	Raw Data	11	
12	Dual Detector Gains	12	

**Bottom Screenshot: Field Configuration**

Available Fields		Selected Columns/Rows	
Index	Field Name	Index	Column Title/ List Header
1	Internal Standard Symbol	1	Internal Standard Symbol
2	Analyte	2	Analyte
3	Mass	3	Mass
4	Measured Intensity Mean	4	Meas. Intens. Mean
5	Blank Intensity	5	Blank Intensity
6	Net Intensity Mean	6	Net Intens. Mean
7	Concentration Mean	7	Conc. Mean
8	Report Unit	8	Report Unit
9	Mode	9	Mode
10		10	
11		11	
12		12	
13		13	
14		14	
15		15	
16		16	
17		17	
18		18	
19		19	
20		20	
21		21	

### Probenliste schreiben (Icon „Sample“).

Hier stehen nur noch alle unbekannten Proben, da die Standards und QCs in der Methode definiert werden.

The screenshot shows the 'Samples' tab in the ELAN software. The interface includes a menu bar (File, Edit, Analysis, Options, Wizard, Window, Help) and a toolbar with icons for Method, Sample, Dataset, Realtime, Interactive, CalbView, RptOption, RptView, Optimize, Tuning, Instrument, Devices, and SmartTune. Below the toolbar are buttons for 'Manual Batch', 'Analyze Batch', 'Sample Template...', 'Summary...', and 'Build Run List...'. The main area is a table with the following columns: Batch Index, A/S Loc., Batch ID, Sample ID, Measurement Action (\*), Method (\*), Description, and Sample Type (\*). The table lists 28 rows of samples, starting with 'doubleblank' and followed by 'wash' and a series of 'sub15dg01tp' samples from 0h to 12h.

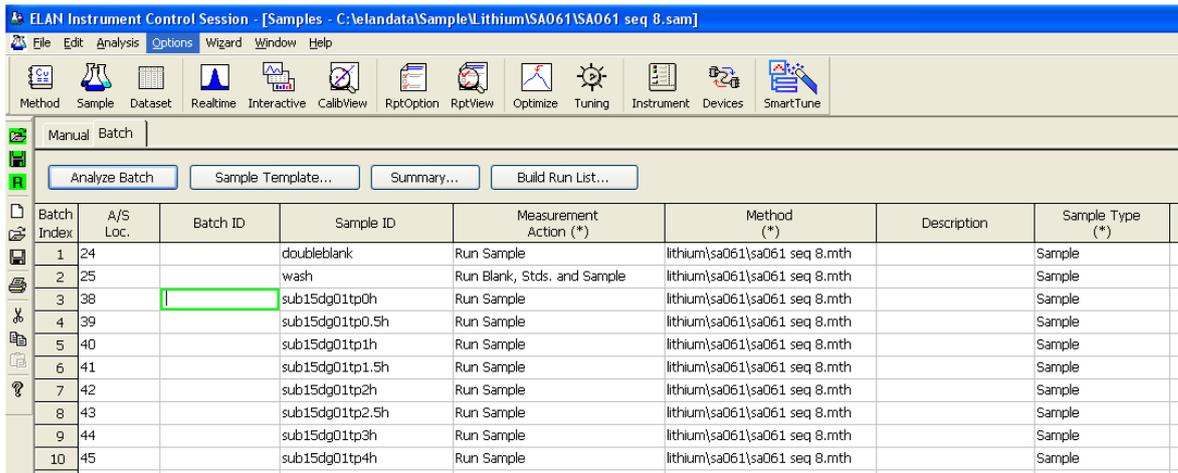
Batch Index	A/S Loc.	Batch ID	Sample ID	Measurement Action (*)	Method (*)	Description	Sample Type (*)
1	24		doubleblank	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
2	25		wash	Run Blank, Stds. and Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
3	38		sub15dg01tp0h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
4	39		sub15dg01tp0.5h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
5	40		sub15dg01tp1h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
6	41		sub15dg01tp1.5h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
7	42		sub15dg01tp2h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
8	43		sub15dg01tp2.5h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
9	44		sub15dg01tp3h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
10	45		sub15dg01tp4h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
11	46		sub15dg01tp5h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
12	47		sub15dg01tp6h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
13	48		sub15dg01tp7h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
14	49		sub15dg01tp8h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
15	50		sub15dg01tp9h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
16	51		sub15dg01tp10h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
17	52		sub15dg01tp12h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
18	53		sub15dg01tp16h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
19	54		sub15dg01tp24h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
20	55		sub15dg01tp48h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
21	56		sub15dg01tp72h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
22	57		sub15dg01tp96h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample
23	58		sub15dg01tp120h	Run Sample	lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample

### Die Datei mit den Ergebnissen „Dataset“ definieren (Icon „Dataset“)

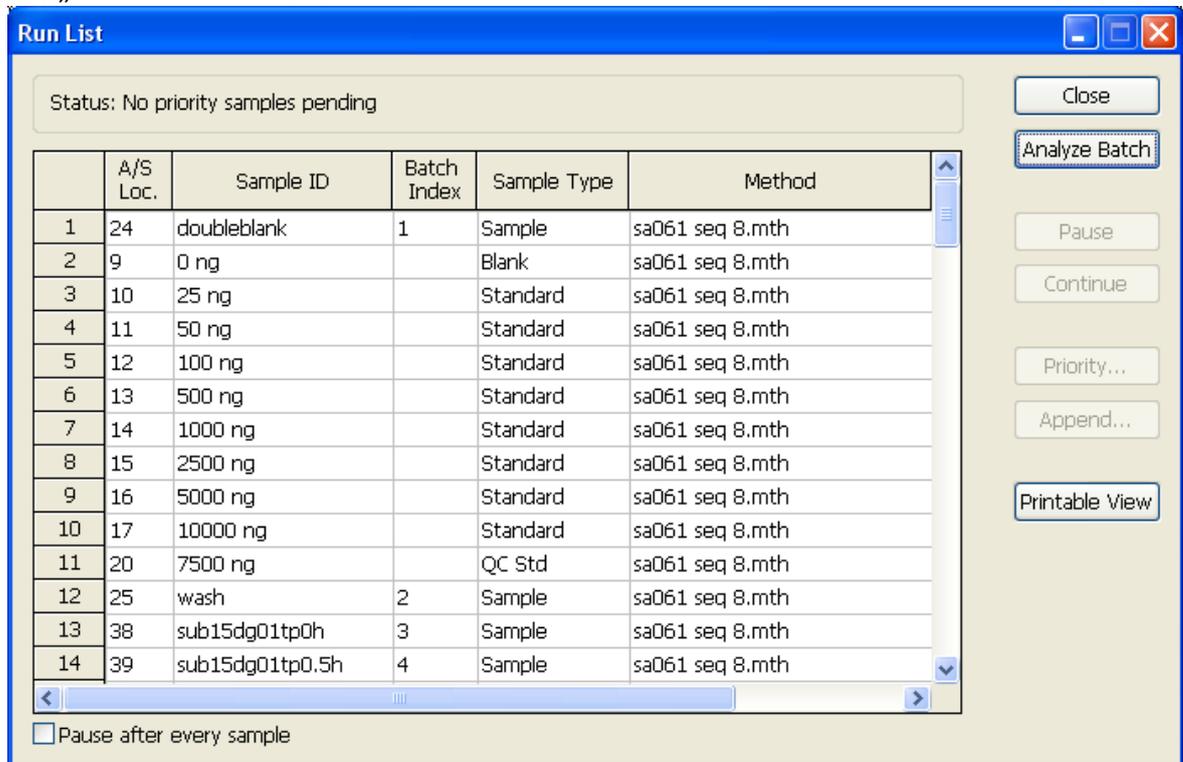
The screenshot shows the 'Dataset' tab in the ELAN software. The interface includes a menu bar (File, Edit, Analysis, Options, Wizard, Window, Help) and a toolbar with icons for Method, Sample, Dataset, Realtime, Interactive, CalbView, RptOption, RptView, Optimize, Tuning, Instrument, Devices, and SmartTune. Below the toolbar are buttons for 'Reprocess', 'Summary Report...', 'Method', and 'Load'. There is a checkbox for 'Use original conditions'. The main area is a table with the following columns: Batch ID, Sample ID, Acquisition Date/Time, Method, Description, Read Type (\*), and Sample File Name. The table lists 21 rows of data, starting with 'doubleblank' and followed by various concentrations of 'ng' (0 ng, 25 ng, 50 ng, 100 ng, 500 ng, 1000 ng, 2500 ng, 5000 ng, 10000 ng, 7500 ng) and 'wash' samples, followed by a series of 'sub15dg01tp' samples from 0h to 5h.

Batch ID	Sample ID	Acquisition Date/Time	Method	Description	Read Type (*)	Sample File Name
1	doubleblank	13-May-2008 7:41:39 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	doubleblank.001
2	0 ng	13-May-2008 7:45:20 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Blank	0 ng.002
3	25 ng	13-May-2008 7:49:00 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Standard #1	25 ng.003
4	50 ng	13-May-2008 7:52:41 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Standard #2	50 ng.004
5	100 ng	13-May-2008 7:56:23 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Standard #3	100 ng.005
6	500 ng	13-May-2008 8:00:05 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Standard #4	500 ng.006
7	1000 ng	13-May-2008 8:03:45 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Standard #5	1000 ng.007
8	2500 ng	13-May-2008 8:07:24 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Standard #6	2500 ng.008
9	5000 ng	13-May-2008 8:11:03 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Standard #7	5000 ng.009
10	10000 ng	13-May-2008 8:14:42 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Standard #8	10000 ng.010
11	7500 ng	13-May-2008 8:18:22 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		QC Std #9	7500 ng.011
12	wash	13-May-2008 8:22:03 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	wash.012
13	sub15dg01tp0h	13-May-2008 8:25:44 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	sub15dg01tp0h.013
14	sub15dg01tp0.5h	13-May-2008 8:29:24 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	sub15dg01tp0.5h.014
15	sub15dg01tp1h	13-May-2008 8:33:05 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	sub15dg01tp1h.015
16	sub15dg01tp1.5h	13-May-2008 8:36:45 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	sub15dg01tp1.5h.016
17	sub15dg01tp2h	13-May-2008 8:40:25 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	sub15dg01tp2h.017
18	sub15dg01tp2.5h	13-May-2008 8:44:05 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	sub15dg01tp2.5h.018
19	sub15dg01tp3h	13-May-2008 8:47:45 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	sub15dg01tp3h.019
20	sub15dg01tp4h	13-May-2008 8:51:25 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	sub15dg01tp4h.020
21	sub15dg01tp5h	13-May-2008 8:55:06 AM	C:\elandata\Method\lithium\sa061\sa061 seq 8.mth		Sample	sub15dg01tp5h.021

Wieder „Sample“ Icon wählen, alles markieren und „Build Run List“-Button klicken



Die „Run List“ ausdrucken.



„Analyze Batch“ – Button klicken. **Messung läuft...**

Nach Ende der Messung sind alle Daten in der rep-Datei.

**Import** der rep-Datei erfolgt in DBLABCAL über dbLabCal-Menü SEQUENZ IMPORT...

Dabei werden als Messwerte die zuerst gefundenen Werte (die erste Spalte von links) importiert: Entweder "MEAS. INTENS. MEAN" oder "NET INTENS. MEAN"

**Anhang 10: ICP-HPLC-MS Chromera****NUR 1 Analyt plus 1 IS möglich**

In Excel „Suchen&Ersetzen „ISName“ mit “ IS “+„ISName“

An der Buchstabenkombination „ IS“ vor dem Elementnamen erkennt dbLabCal, dass es sich um den internen Standard zum Element X handelt.

Sample Name	Sample Description	Injection Number	Vial Number	Sample Type	Standard Name	Group
QCs 1500 ng		1	1	Sample		UA290

Channel	Ret. Time	Component Name	Area	Height
Gd 160	17.14168111		129811.6075	1507.66624
IS Lu 175	19.32693663	Lutetium	1370701.828	10672.56676

QCs 1500 ng		1	2	Sample		UA290
-------------	--	---	---	--------	--	-------

Channel	Ret. Time	Component Name	Area	Height
Gd 160	17.03649412		1236305.684	14069.79958
IS Lu 175	19.3152	Lutetium	1415110.746	10364.69024

QCs 4000 ng		1	3	Sample		UA290
-------------	--	---	---	--------	--	-------

Channel	Ret. Time	Component Name	Area	Height
Gd 160	17.09205576		3432714.392	39252.48262
IS Lu 175	19.3431267	Lutetium	1515799.547	10645.02664

wash		1	4	Sample		UA290
------	--	---	---	--------	--	-------

Channel	Ret. Time	Component Name	Area	Height
Gd 160	17.01013632		28490.2845	331.671417
IS Lu 175	19.17466486	Lutetium	6196.9763	61.08675937

wash		1	5	Sample		UA290
------	--	---	---	--------	--	-------

Channel	Ret. Time	Component Name	Area	Height
Gd 160	17.12721705		12902.0261	157.6733076
IS Lu 175	19.45235138	Lutetium	3814.75719	33.17419784

wash		1	6	Sample		UA290
------	--	---	---	--------	--	-------

USW...

## **Anhang 11: FACS**

Im Programm FlowCytomix Pro 2.3 in der Ansicht EVALUATION RESULTS werden die Ergebnisse in eine csv-Datei exportiert (Schaltfläche GENERATE CSV REPORT).

Import der csv-Datei erfolgt in DBLABCAL über dbLabCal-Menü SEQUENZ IMPORT...

**Wichtig:**

*Da aus FACS nur die berechneten Ergebnisse importiert werden, muss beim Definieren des Projekts als Regressionsmodel „no calc.“ gewählt werden.*

## **Anhang 12: SearchLight**

Die SearchLight-Software erzeugt ein Report im Excel-Format. Die xls-Datei enthält auch die für dbLabCal angepasste Tabelle PG-ML DATA2.

Import der Daten aus der pg-ml Data2 Tabelle erfolgt automatisch wenn die xls-Datei in DBLABCAL über dbLabCal-Menü SEQUENZ IMPORT... ausgewählt wurde.

Sofort nach dem Import der Daten überprüft dbLabCal automatisch die „CV-Akzeptanzkriterien“ (wenn aktiviert, siehe unten...) und setzt bei Bedarf den #-Flag.

**Wichtig:**

*Der Import der xls-Datei wird von dbLabCal nur erlaubt, wenn für das aktuelle Projekt als Regressionsmodel NO CALC.(DOUBLE ASSAYS) gewählt wurde.*

**Anhang 13: Mesoscale (MSD)**

Die MSD Discovery Bench Software erzeugt ein CSV-File mit den Ergebnissen aller Analyten. Die Analytnamen sind in der zweiten Spalte („Assay“) definiert. Ein Beispiel eines CSV-Files ist in der folgenden Abbildung zu sehen.

A2 Well										
A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	
1	Plate *2CC2QAA038%*									
Well	Assay	Sample Group	Sample	Concentration	Dilution	Signal	Mean	Std. Deviation	CV	
3	A03	TNF-? (Human)	Standard	S009	0	206	228	30.40559159	13.3650952	
4	A04	TNF-? (Human)	Standard	S009	0	249	228	30.40559159	13.3650952	
5	H01	TNF-? (Human)	Standard	S008	4	830	824	8.485281374	1.029767157	
6	H02	TNF-? (Human)	Standard	S008	4	818	824	8.485281374	1.029767157	
7	G01	TNF-? (Human)	Standard	S007	10	1418	1351	94.75230868	7.013494351	
8	G02	TNF-? (Human)	Standard	S007	10	1284	1351	94.75230868	7.013494351	

K	L	M	N	O	P	Q
Calc. Concentration	Calc. Conc. Mean	Calc. Conc. Std. Deviation	Calc. Conc. CV	% Recovery	% Recovery Mean	Detection Range
0	0.08504436	0.120270888	141.4213562			Below Fit Curve Range
0.170088721	0.08504436	0.120270888	141.4213562			Below Detection Range
5.391467711	5.342448938	0.069323014	1.297588706	134.7866928	133.5612234	In Detection Range
5.293430164	5.342448938	0.069323014	1.297588706	132.3357541	133.5612234	In Detection Range
10.03301317	9.514880521	0.732750223	7.701097465	100.3301317	95.14880521	In Detection Range
8.996747869	9.514880521	0.732750223	7.701097465	89.96747869	95.14880521	In Detection Range

Nach dem Import erzeugt dbLabCal für jeden Analyten einen separaten Batch in der Datenbank. Das ist der Unterschied zu dem Standardverhalten wenn alle Analyten, die zusammen gemessen werden in einem gemeinsamen Batch gespeichert werden.

**Anhang 14: Calculation of weighted linear regression**

$$y = a + b \cdot x$$

Weighting:

none:  $w_i = 1$

1/X:  $w_i = \frac{1}{x_i}$       1/Y:  $w_i = \frac{1}{y_i}$

1/X<sup>2</sup>:  $w_i = \frac{1}{x_i^2}$       1/Y<sup>2</sup>:  $w_i = \frac{1}{y_i^2}$

$$S_w = \sum_{i=1}^n w_i$$

$$S_x = \sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i$$

$$S_y = \sum_{i=1}^n w_i \cdot y_i$$

$$S_{xy} = \sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i \cdot y_i$$

$$S_{x^2} = \sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i^2$$

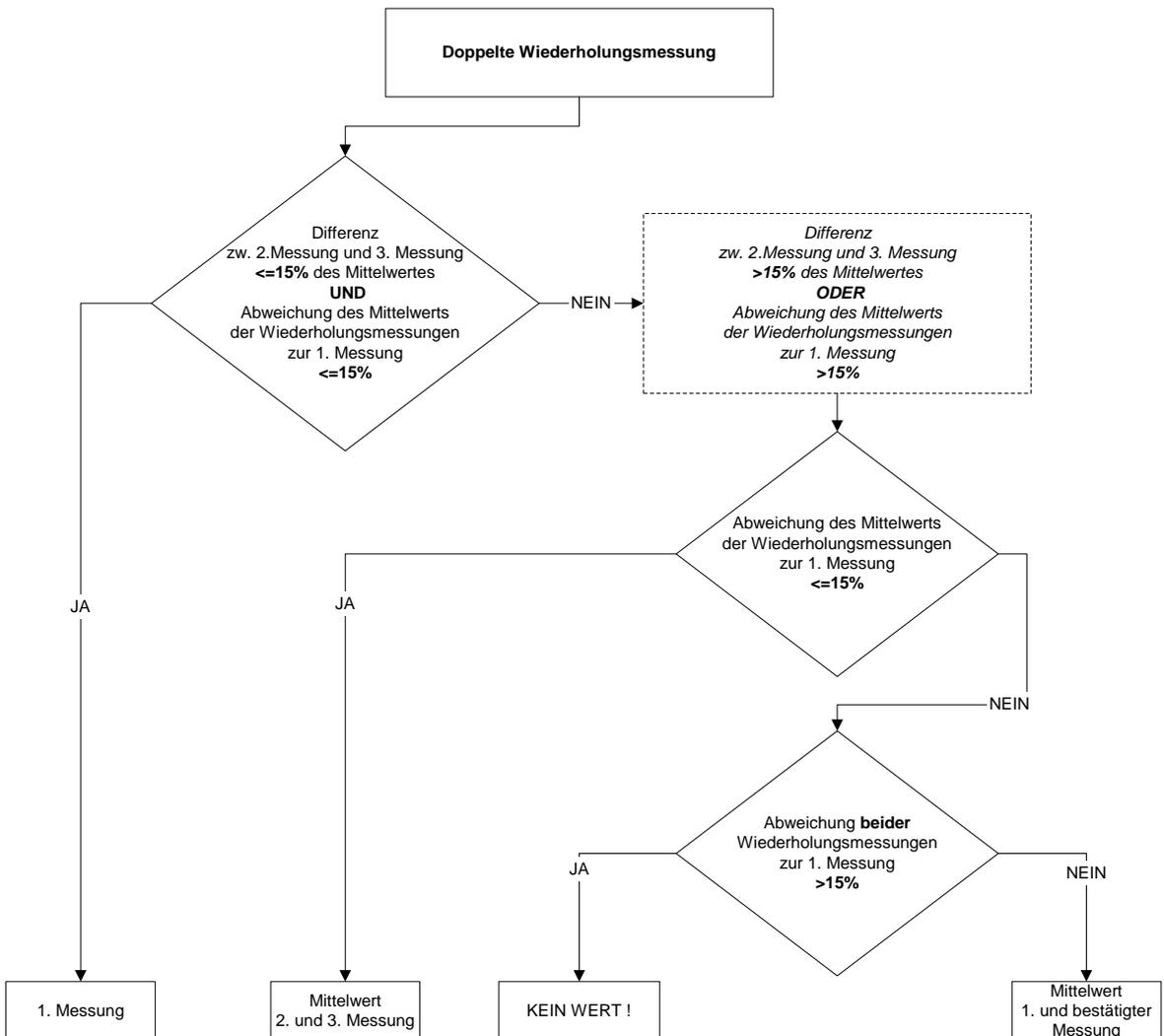
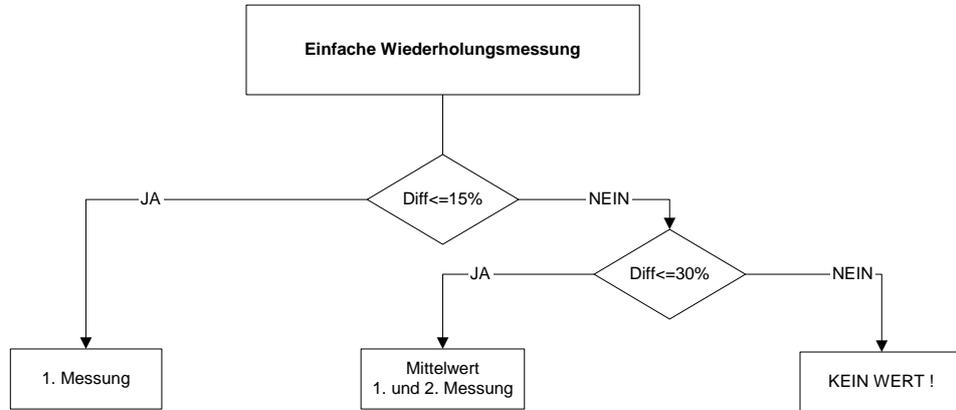
$$S_{y^2} = \sum_{i=1}^n w_i \cdot y_i^2$$

Intercept: 
$$a = \frac{S_y \cdot S_{x^2} - S_x \cdot S_{xy}}{S_w \cdot S_{x^2} - S_x^2}$$

Slope: 
$$b = \frac{S_w \cdot S_{xy} - S_x \cdot S_y}{S_w \cdot S_{x^2} - S_x^2}$$

Determination Coefficient: 
$$r^2 = \frac{(S_w \cdot S_{xy} - S_x \cdot S_y)^2}{(S_w \cdot S_{x^2} - S_x^2) \cdot (S_w \cdot S_{y^2} - S_y^2)}$$

**Anhang 15: Flowchart: Ergebnisse aus Mehrfachmessung (Lang&Bolton)**



**Anhang 16: Flowchart: Ergebnisse aus Mehrfachmessung (HoLaRo)**

