




hi|chromet

Software to evaluate Integration Methods
in Chromatography

Short Guide

So wird's gemacht

1. Start von hi-chromet

Nach der Installation von *hi-chromet* klicken Sie auf den Button von *hi-chromet*  auf Ihrem Desktop oder gehen Sie über Start → Alle Programme → Hi-Analysis auf *hi-chromet*. Es öffnet sich das Startfenster von *hi-chromet*.

Hier haben Sie unter Zuhilfenahme der Button A und B die Möglichkeit die Sprache von *hi-chromet* von Deutsch (A) auf Englisch (B) zu wechseln.



Klicken Sie zum Starten von *hi-chromet* auf den unteren Button. Es öffnet sich 2.

2. Import der benötigten Rohdaten

Um die zu importierenden Daten auszulesen, benötigt *hi-chromet* die Information, mit welchem CDS (Chromatographie-Daten-System) Sie arbeiten. Daher erscheint als erstes das Auswahlfenster mit der Abfrage Ihres verwendeten CDSs.

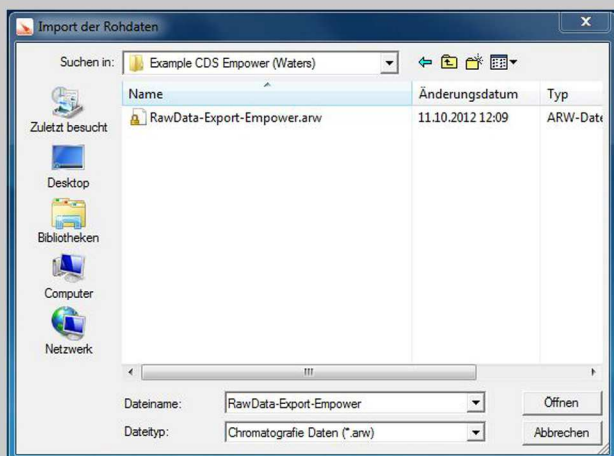
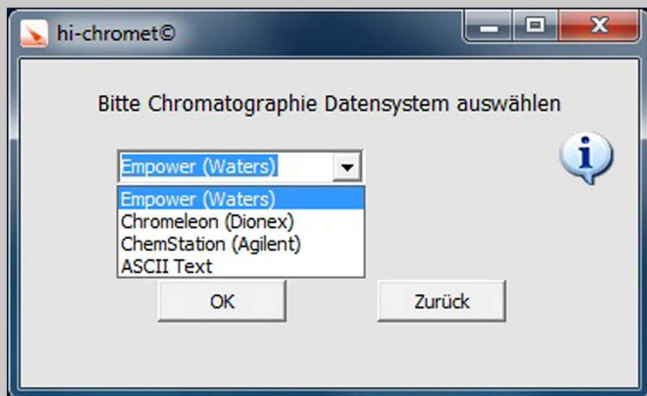
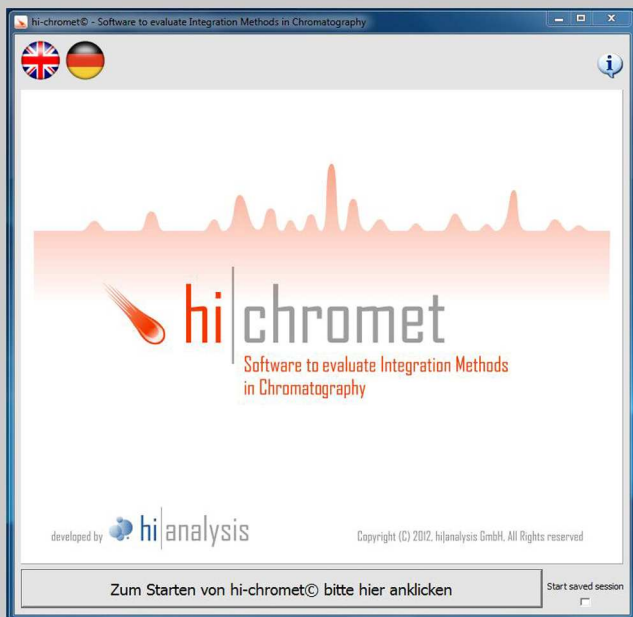
Bitte wählen Sie das CDS aus, das Sie verwenden bzw. aus dem die zu importierenden Daten stammen und drücken Sie OK. Es öffnet sich 3.

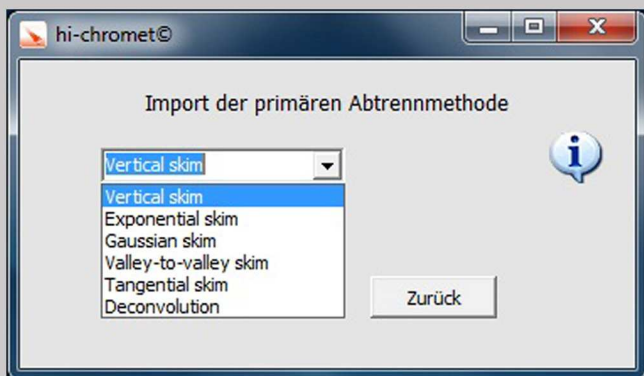
3. Import der Rohdaten

Nach Auswahl des CDS werden die Rohdaten importiert. Dazu öffnet sich nach dem Auswahlfenster mit der Abfrage Ihres verwendeten CDSs ein Importfenster mit einer Dateisuche.

Hier wählen Sie die gewünschten Rohdaten in dem exportierenden Format des jeweiligen CDSs aus.

Bei Klicken auf den Button „Öffnen“ wird das ausgewählte Chromatogramm importiert und es öffnet sich 4.

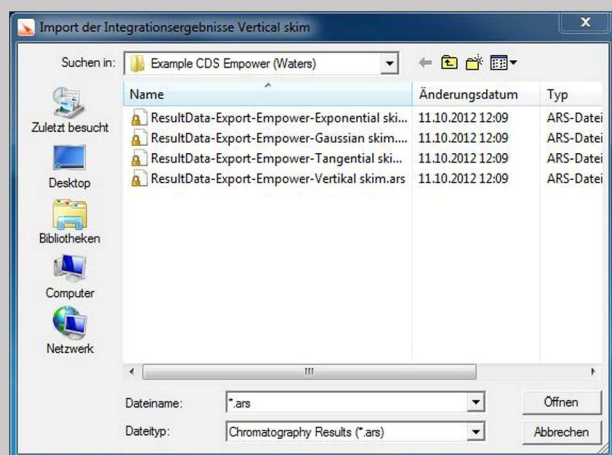




4. Import der Resultdaten

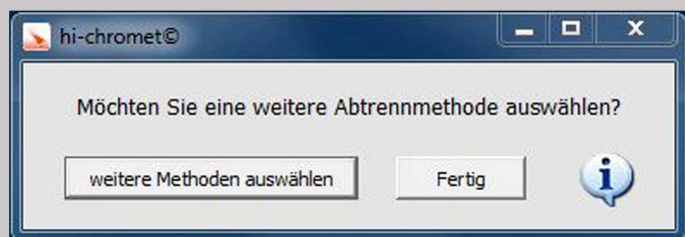
Es werden als erstes die Resultdaten Ihrer Auswertung mit der primären Abtrennmethode in *hi-chromet* importiert.

Verwenden Sie beispielsweise bevorzugt die vertikale Abtrennmethode, wählen Sie aus der angegebenen Liste diese Abtrennmethode aus und klicken Sie OK. Es öffnet sich 5.



5. Import der Integrationsergebnisse

Öffnen Sie die Datei über das Importfenster mit Dateisuche. Achten Sie darauf, dass die ausgewählte Datei der Ergebnisse aus der Auswertung mit der jeweiligen Abtrennmethode, die angegeben wurde, übereinstimmt. Es öffnet sich 6.

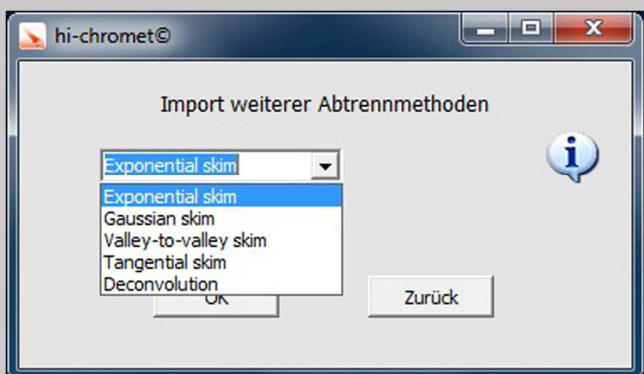


6. Auswahl weiterer Abtrennmethoden

Nun ist Ihre primäre Abtrennmethode importiert.

Liegt Ihr Fokus auf der Beurteilung einer **Abtrennmethode**, können Sie mit der Bearbeitung in *hi-chromet* über Klick auf Fertig im Auswahlfenster starten. Es öffnet sich 9.

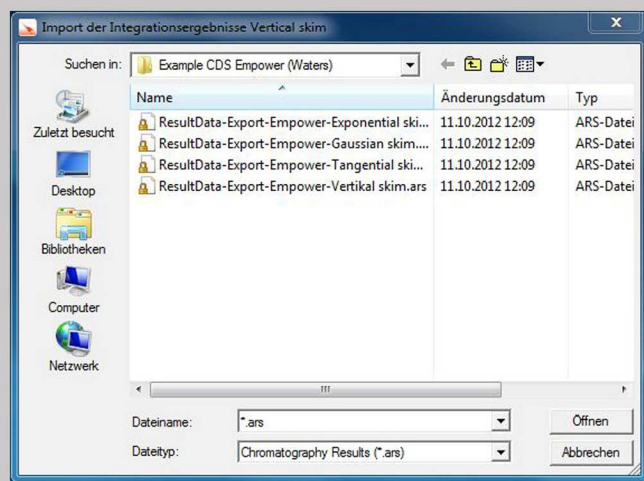
Ist Ihr Ziel **verschiedene Abtrennmethoden zu vergleichen** und damit eine Aussage über die Güte, sowie Empfehlungen zu Ihrer Integration zu erhalten, klicken Sie bitte auf „weitere Methoden auswählen“. Es öffnet sich 7.



7. Import einer weiteren Abtrennmethode

Möchten Sie Abtrennmethoden vergleichen und haben „weitere Methoden auswählen“ geklickt, erscheint die Auswahl der Abtrennmethoden. Wählen Sie hier jeweils die gewünschte Abtrennmethode aus. Es öffnet sich 8.

Die jeweils schon ausgewählte Abtrennmethode erscheint bei erneuter Auswahl nicht mehr.

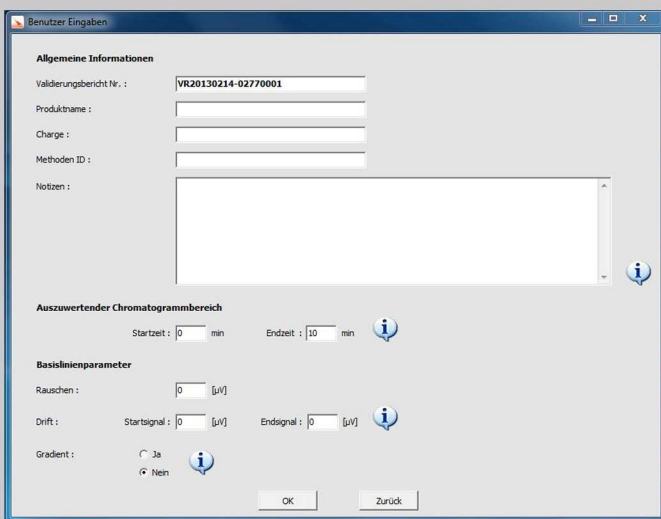


8. Auswahl weiterer Resultdaten

Es handelt sich hierbei um das identische Auswahl-fenster wie bei 5. Bitte wählen Sie hier die Datei zu Ihrer ausgewählten Abtrennmethode.

Achten Sie darauf, dass die ausgewählte Datei der Ergebnisse aus der Auswertung mit der jeweiligen Abtrennmethode, die angegeben wurde, übereinstimmt.

Im Anschluss haben Sie die Möglichkeit eine weitere Abtrennmethode zu importieren (s.6). Jedoch öffnet sich 9, wenn Sie auf Fertig klicken.

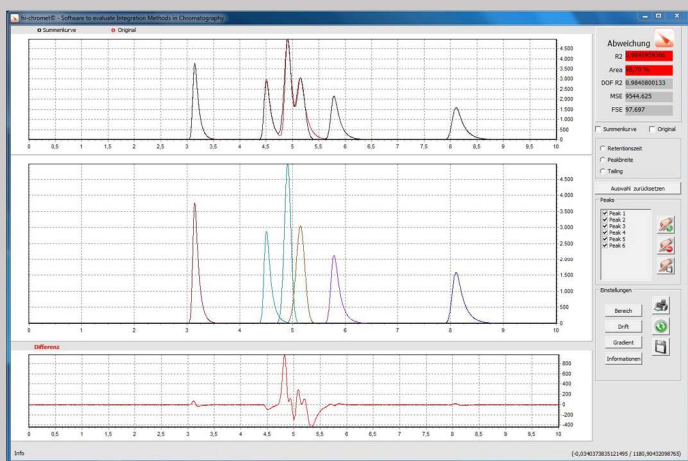


9. Eingabe Methodendetails

Im Eingabefenster „Benutzer Eingaben“ können Sie allgemeine Informationen zu Ihrer Methode, eine Eingrenzung des zu evaluierenden Bereichs des Chromatogramms sowie chromatogrammspezifische Parameter der Basislinie, wie das Rauschen, eine Drift oder mögliche Gradientenverläufe abbilden.

Die Validierungsbericht-Nr. wird einmalig automatisch vergeben. Genauere Erklärungen zu den Basislinienparametern folgen ab 19.

Mit OK öffnet sich 10.

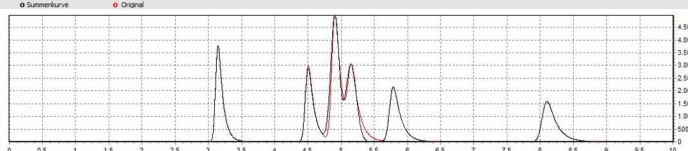


10. hi-chromet Bearbeitungsfenster

Mittels der importierten Daten erstellt *hi-chromet* eine Chromatogrammsimulation. Das gesamte Bearbeitungsfenster ist, wie links gezeigt, aufgebaut.

Auf der linken Seite im Bearbeitungsfenster befinden sich drei untereinanderstehende Diagramme.

Auf der rechten Seite befinden sich Datenfenster und Auswahlfenster zur Bearbeitung.



11. Oberes Diagramm

Im oberen Diagramm, auf der linken Seite des Bearbeitungsfensters, erscheint in rot das originale Chromatogramm aus dem Import der Rohdaten. In schwarz erscheint die Summenkurve der Simulation. Diese ergibt sich aus der Summe aller Einzelpeaks sowie der Basisliniensimulation wie Rauschen, Drift und Gradienten.

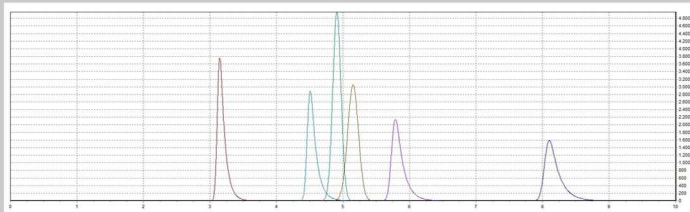


Abb. 1

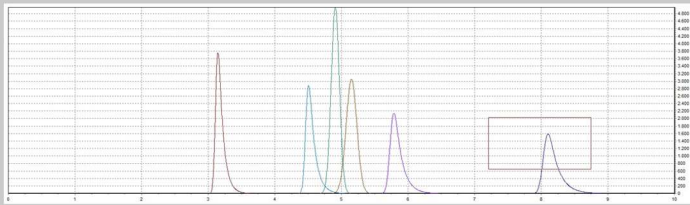


Abb. 2

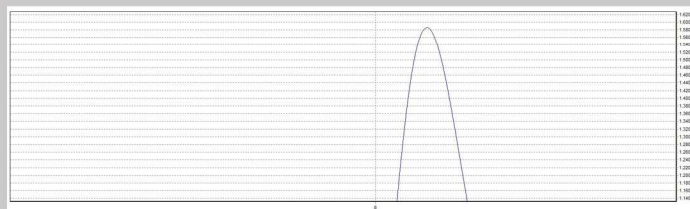


Abb. 3

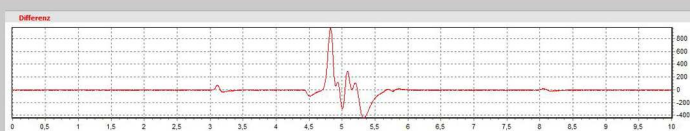
12. Mittleres Diagramm

Die Anpassung wird über das mittlere Diagramm vorgenommen (Abb. 1). Hier sind die Einzelpeaks, aus denen die Summenkurve besteht, einzeln dargestellt. Durch die Verschiebung der Einzelpeaks in der Retentionszeit, Höhe, Breite und Tailing sowie über die Veränderung der Basislinienparameter wird die Simulationskurve (schwarz) an das Original-Chromatogramm (rot) angepasst. Mit 15 können Sie diese im mittleren Diagramm ein- und ausschalten.

Ziel ist die Anpassung der Einzelpeaks im mittleren Diagramm, so dass die schwarze Summenkurve im Idealfall mit dem Original-Chromatogramm übereinstimmt.

Zoom:

Im mittleren Diagramm haben Sie die Möglichkeit in das Diagramm näher hinein zu zoomen, indem Sie mit der linken Maustaste einen Kasten um den gewünschten Zoombereich ziehen (s. Abb. 2 zu Abb. 3) und die linke Maustaste wieder loslassen. Um wieder heraus zu zoomen, ziehen Sie einen Kasten auf die linke Seite. Mit dem Mousrad haben Sie die Möglichkeit im Diagramm nach oben und unten zu scrollen.




13. Differenz-Diagramm

Das untere Diagramm zeigt graphisch die Differenz zwischen Chromatogrammsimulation und Original-Chromatogramm. Hiermit können Sie sehr schnell erkennen, wo die größten Abweichungen zwischen Chromatogrammsimulation und Original-Chromatogramm liegen.

14. Abweichungsparameter

Die Abweichungsparameter zeigen Ihnen an, wie gut die Anpassung der Chromatogrammsimulation [Summenkurve (schwarz)] aktuell an das originale Chromatogramm (rot) ist. Dort wird überprüft, ob die Übereinstimmung innerhalb festgelegter Grenzen liegt. Die jeweiligen Werte werden mit rot bei zu großer Abweichung und, grün innerhalb der gewünschten Genauigkeit, gekennzeichnet. Ziel ist es, die Anpassung der Einzelpeaks so vorzunehmen, dass alle festgelegten Abweichungsparameter in grün gekennzeichnet sind.

Abweichung 	
R2	0.9840959386
Area	98,70 %
DOF R2	0.9840800133
MSE	9544.625
FSE	97.697

15. Einschalten von Original- und Summenkurve

Über die Aktivierungsfelder können Sie sich durch das Setzen eines Häkchens die Summenkurve und/oder das Original-Chromatogramm im mittleren Diagramm anzeigen lassen oder durch das Entfernen des Häkchens die Anzeige wieder ausschalten.

Dies ermöglicht Ihnen die genaue Feinanpassung der Summenkurve an das Original-Chromatogramm.

16. Verschiebung

Diese Auswahl dient der Verschiebung der Einzelpeaks.

Retentionszeit: Muss der Peak in Retentionszeit oder Höhe angepasst werden, können Sie über Aktivierung dieses Feldes und Klick auf die Peakspitze des Einzelpeaks, den Sie ändern wollen, an die gewünschte Stelle verschieben. Ziehen Sie die Maus an die gewünschte Stelle und lassen diese dann los.

Peakbreite: Muss der Peak in der Peakbreite angepasst werden, können Sie über Aktivierung dieses Feldes und Klick auf den Einzelpeak diesen auf die gewünschte Breite verschieben. Beim ersten Klick erscheint ein X an der linken Peakseite.

Tailing: Muss der Peak in der Steigung der Peakhinterseite angepasst werden, können Sie über Aktivierung dieses Feldes und Klick auf den Einzelpeak diesen auf die gewünschte Stelle verschieben. Beim ersten Klick erscheint ein X auf der rechten Peakseite.

Durch den unteren Button „Auswahl zurücksetzen“ haben Sie die Möglichkeit die vorherige Auswahl wieder zu korrigieren, falls Sie sich nachträglich entscheiden sollten, einen anderen Parameter ändern zu wollen.

☐ Summenkurve ☐ Original

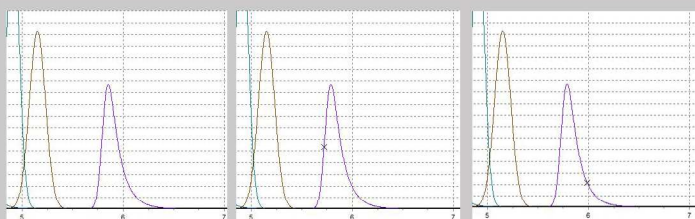
☐ Retentionszeit

☐ Peakbreite

☐ Tailing

Auswahl zurücksetzen

vor der Verschiebung

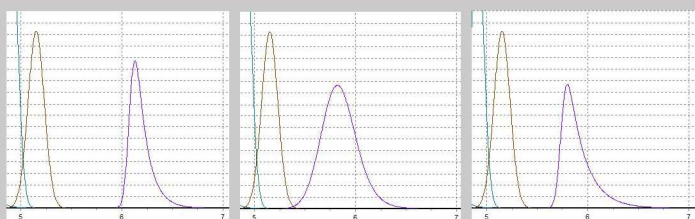


Retentionszeit

Peakbreite

Tailing

nach der Verschiebung



Retentionszeit

Peakbreite

Tailing

Peaks

- ☒ Peak 1
- ☒ Peak 2
- ☒ Peak 3
- ☒ Peak 4
- ☒ Peak 5
- ☒ Peak 6



17. Peak Übersicht

In diesem Fenster werden die einzelnen Peaks des Chromatogramms angezeigt, die durch Klicken ein- und auszublenden sind.

Durch Betätigung der Symbole auf der rechten Seite hat man die Möglichkeit, neue Peaks hinzuzufügen, Peaks zu löschen oder die Peakdaten der Einzelpeaks im csv-Format zu exportieren.



Peak hinzufügen



Peak löschen



Peakdaten der Einzelpeaks im csv-Format exportieren

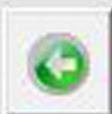
Einstellungen

Bereich

Drift

Gradient

Informationen



18. Einstellungen

In den Einstellungen haben Sie die Möglichkeit den auszuwertenden Chromatogrammbereich (s.19), den Drift (s.20) und den Gradient einzustellen (s.21). Die im Eingabefenster Methodendetails gegebenenfalls vorgegebenen Parameter können optimiert, überprüft oder korrigiert werden.

Ebenfalls ist es möglich über den Punkt „Informationen“ die Benutzereingaben nochmals zu bearbeiten.



Report anzeigen/ausdrucken (s.26)



auf Originalzustand zurücksetzen



speichern



Verschiebung rückgängig machen

19. Auszuwertenden Chromatogrammbereich einstellen

Mit *hi-chromet* haben Sie die Möglichkeit nur einen bestimmten Bereich Ihres Chromatogramms zu evaluieren. Hierzu geben Sie im Eingabefeld „Auswahl Chromatogrammbereich“ den Startzeitpunkt und den Endzeitpunkt Ihres zu evaluierenden Bereichs ein.

Benutzer Eingaben Auszuwertender Chromatogrammbereich

Begrenzen Sie den auszuwertenden Chromatogrammbereich

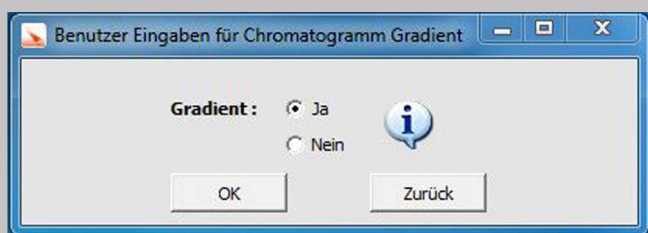
Startzeit : 0 min Endzeit : 10 min

OK Zurück



20. Drift einstellen

Mit *hi-chromet* können Sie ein Rauschen simulieren. Hierzu geben Sie im Eingabefeld „Rauschen“ den Wert Ihres Rauschens, d.h. die Amplitude (der Ausschlag) Ihres Rauschens aus dem Original-Chromatogramm ein. Um eine Drift, d.h. einen linearen Basislinienanstieg über das gesamte Chromatogramm vorzugeben, können Sie unter dem Punkt „Drift“ die jeweiligen Start- und Endsignale eingeben.



21. Gradient einstellen

Liegt in Ihrem Original-Chromatogramm ein Gradient der Basislinie vor, so können Sie hier mit der Auswahl eines geeigneten Gradienten beginnen, indem Sie OK wählen. Es öffnet sich 22.



22. Auswahl Gradientenform

Wenn Sie OK gewählt haben, erscheint ein Fenster, indem Sie die Auswahl zwischen „Linearer Stufenverlauf“ und „Kurvenverlauf“ haben.

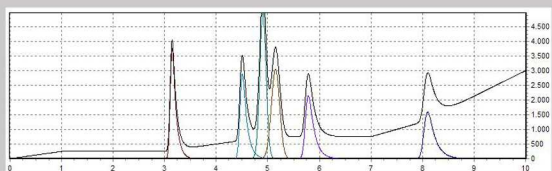


Abb.1

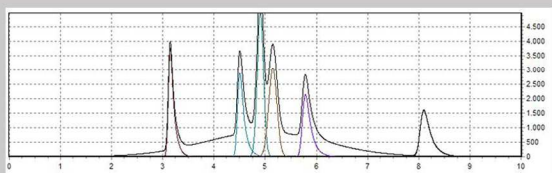
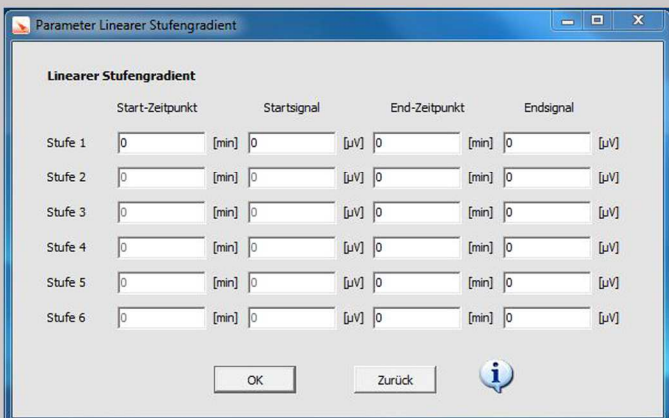


Abb.2

Unter „Linearer Stufenverlauf“ versteht man eine Veränderung der Basislinie, die sich im Gegensatz zur Basislinien Drift nicht über das Chromatogramm bzw. den Chromatogrammbereich konstant erstreckt (s. Abb.1). Haben Sie „Linearer Stufenverlauf“ gewählt öffnet sich 23.

Der Kurvenverlauf stellt eine Veränderung der Basislinie als Kurve da (s. Abb.2). Bei der Auswahl „Kurvenverlauf“ öffnet sich 24.



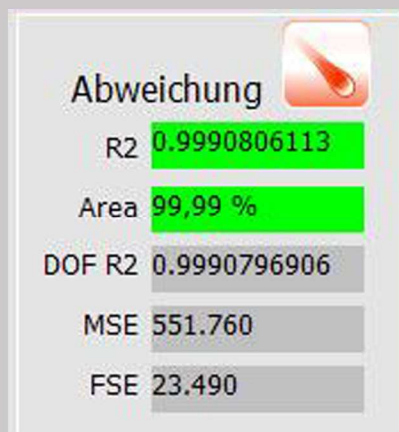
23. Linearer Stufengradient

Haben Sie „Linearer Stufenverlauf“ ausgewählt, so gelangen Sie zum Eingabefeld der Parameter der linearen Stufen. Diese Parameter können Sie aus Ihrem Original-Chromatogramm ablesen und ggf. optimieren.



24. Kurven Gradient


Wählen Sie „Kurvenverlauf“, so gelangen Sie zum Eingabefeld der Parameter des Kurven-Gradients. Diese Parameter können Sie aus Ihrem Original-Chromatogramm ablesen und ggf. optimieren.



25. Abschluss der Anpassung

War Ihre Anpassung der Simulation erfolgreich und alle Abweichungsparameter erscheinen in der Farbe Grün, so ist die Bearbeitung abgeschlossen.



Mit Klick auf  gelangen Sie zum Validierungsbericht. Es öffnet sich 26.



26. Report - Kopfzeile/ Allgemeine Informationen


In der Kopfzeile des Validierungsberichts befindet sich die Validierungsberichtsnummer. Die Validierungsberichtsnummer wird einmalig vergeben.


Nachfolgend werden die von Ihnen eingegebenen allgemeinen Informationen berichtet.



27. Report - Abweichungsparameter

Die erste Seite befasst sich zusätzlich zu den allgemeinen Informationen mit der Simulation und deren Parameter. Hinter den jeweiligen Abweichungsparametern wird die Übereinstimmung mit den geforderten Genauigkeiten angezeigt.

Ein  bedeutet, dass der Wert innerhalb der geforderten Genauigkeit liegt.

Bei  ist dies nicht der Fall. Die geforderten Grenzen werden hinter dem Symbol angezeigt. Im Anschluss folgen die jeweiligen Simulationsparameter.

	Peak 1	Peak 2	Peak 3	Peak 4	Peak 5	Peak 6					
tR	3.15	4.51	4.91	5.16	5.79	8.10					
Breite	0.30	0.36	0.38	0.45	0.46	0.58					
Area	30012	28292.97	50863.49	32907.55	26152	24345					
Höhe	3759.51	2973.45	4921.59	2751.61	2137.56	1585.55					
t/Sigmo	1.75	1.74	1.58	1.72	1.73	1.81					

28. Report - Simulationsparameter der Einzelpeaks

Die tabellarische Aufstellung liefert die jeweiligen Parameter der Simulation der Einzelpeaks. Hier werden Ihnen die jeweiligen Peakparameter wie die Retentionszeit, die Peakbreite in 5%, die Peakfläche, die Peakhöhe sowie die Asymmetrie in 5% angezeigt.

Integrationsparameter:

Area	Peak 1	Peak 2	Peak 3	Peak 4	Peak 5	Peak 6					
Simulation	30012	28293	50863	32908	26152	24345					
Vertical skim	30012	27435	45438	36703	26152	24345					
Deviation	0.00 %	-3.03 %	-10.67 %	11.53 %	0.00 %	0.00 %					
Exponential skim	29670	27065	54118	26354	24401	23494					
Deviation	-1.14 %	-4.34 %	6.40 %	-19.92 %	-6.70 %	-3.50 %					
Gaussian skim	29799	27380	52143	29536	25302	23797					
Deviation	-0.71 %	-3.23 %	2.52 %	-10.25 %	-3.25 %	-2.25 %					
Tangential skim	29799	27380	52143	29536	25302	23797					
Deviation	-0.71 %	-3.23 %	2.52 %	-10.25 %	-3.25 %	-2.25 %					

Height	Peak 1	Peak 2	Peak 3	Peak 4	Peak 5	Peak 6					
Simulation	3750	2973	4922	2752	2138	1589					
Vertical skim	3746	2964	4907	3050	2105	1580					
Deviation	-0.01 %	0.35 %	0.92 %	10.84 %	0.82 %	-0.29 %					
Exponential skim	3738	2970	4942	2429	2102	1569					
Deviation	-0.07 %	-0.22 %	0.41 %	-11.72 %	-1.20 %	-1.04 %					
Gaussian skim	3746	2963	4961	2600	2139	1576					
Deviation	-0.08 %	0.32 %	0.80 %	-5.56 %	0.07 %	-0.60 %					
Tangential skim	3746	2963	4961	2600	2139	1576					
Deviation	-0.08 %	0.32 %	0.80 %	-5.56 %	0.07 %	-0.60 %					

IS	Peak 1	Peak 2	Peak 3	Peak 4	Peak 5	Peak 6					
Simulation	3.147	4.507	4.910	5.187	5.790	8.103					
Vertical skim	3.144	4.506	4.907	5.180	5.788	8.102					
Deviation	-0.021 %	-0.015 %	-0.061 %	-0.129 %	-0.036 %	-0.016 %					
Exponential skim	3.144	4.506	4.907	5.181	5.788	8.102					
Deviation	-0.021 %	-0.015 %	-0.061 %	-0.110 %	-0.036 %	-0.016 %					
Gaussian skim	3.144	4.506	4.907	5.186	5.788	8.102					
Deviation	-0.021 %	-0.015 %	-0.061 %	-0.013 %	-0.036 %	-0.016 %					
Tangential skim	3.144	4.506	4.907	5.186	5.788	8.102					
Deviation	-0.021 %	-0.015 %	-0.061 %	-0.013 %	-0.036 %	-0.016 %					

29. Report - Integrationsparameter

In der Tabelle „Integrationsparameter“ werden die Simulationsdaten mit den Ergebnissen aus den jeweiligen Abtrennmethoden verglichen. Diese sind jeweils unterteilt in die Auswertung der Fläche, die Höhe und die Retentionszeit.

Integrationsparameter:

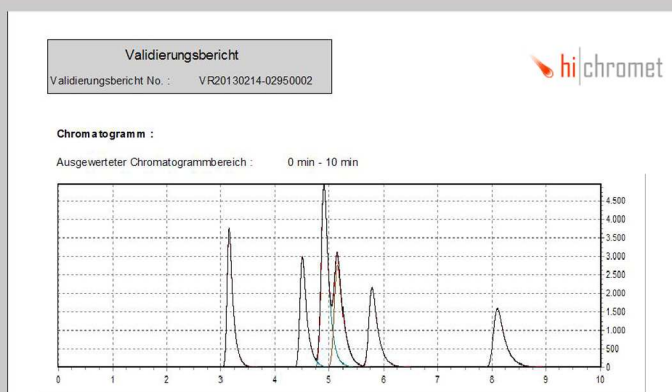
Area	Peak 1	Peak 2	Peak 3	Peak 4	Peak 5	Peak 6					
Simulation	30012	28293	50863	32908	26152	24345					
Vertical skim	30012	27435	45438	36703	26152	24345					
Deviation	0.00 %	-3.03 %	-10.67 %	11.53 %	0.00 %	0.00 %					
Exponential skim	29670	27065	54118	26354	24401	23494					
Deviation	-1.14 %	-4.34 %	6.40 %	-19.92 %	-6.70 %	-3.50 %					
Gaussian skim	29799	27380	52143	29536	25302	23797					
Deviation	-0.71 %	-3.23 %	2.52 %	-10.25 %	-3.25 %	-2.25 %					
Tangential skim	29799	27380	52143	29536	25302	23797					
Deviation	-0.71 %	-3.23 %	2.52 %	-10.25 %	-3.25 %	-2.25 %					

30. Report - Beurteilung und Empfehlung

In der Spalte „Deviation“ unterhalb der jeweiligen Abtrennmethode können Sie die Abweichungen bzw. Fehlerwerte Ihrer jeweiligen Abtrennmethode ablesen. Werden mehr als eine Abtrennmethode importiert, so gibt *hi-chromet* eine Empfehlung, welche Abtrennmethode zum Erreichen des geringsten Fehlerwertes verwendet werden. Die Abweichung der Abtrennmethode wird jeweils pro Einzelpeak als grüne Markierung angezeigt.

31. Report - Chromatogrammvergleich

Unter dem Punkt „Chromatogramm“ wird ein Overlay des Original-Chromatogramms (rot) und die Summenkurve der Simulation (schwarz), bestehend aus den Einzelpeaks (bunt), angezeigt.



Importinformation :

Rohdaten : C:\Programme\Hi-Analysis\Chromet\Testchromatogramme\RawData-Export-Empower\CHROMET1002.arw (45436 Byte(s) 11.10.2012)
Ergebnisdaten : C:\Programme\Hi-Analysis\Chromet\Testchromatogramme\
ResultData-Export-Empower\CHROMET1233-Vertikal.ars (451 Byte(s) 11.10.2012) .
C:\Programme\Hi-Analysis\Chromet\Testchromatogramme\ResultData-Export-Empower\CHROMET1254-Exp.ars (451 Byte(s) 11.10.2012)
C:\Programme\Hi-Analysis\Chromet\Testchromatogramme\ResultData-Export-Empower\CHROMET1245-Gauss.ars (451 Byte(s) 11.10.2012)
C:\Programme\Hi-Analysis\Chromet\Testchromatogramme\ResultData-Export-Empower\CHROMET1245-Gauss.ars (451 Byte(s) 11.10.2012)

Operator :

Reviewer :

Name / Datum / Unterschrift

Name / Datum / Unterschrift

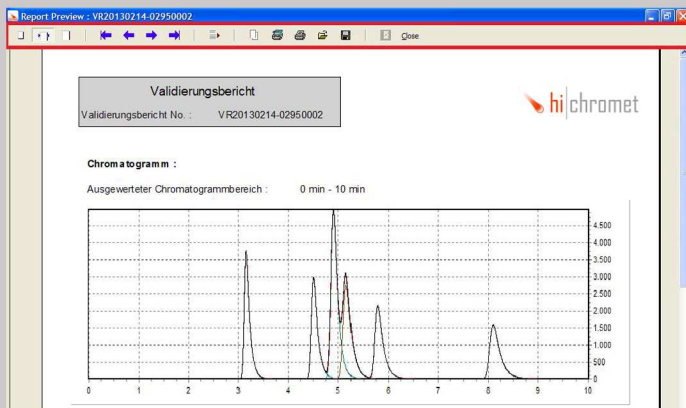
Approver :

Name / Datum / Unterschrift


32. Report - Importinformationen/ Unterschriftenfelder


Im Chromatogrammvergleich werden der Pfad, die Größe und das Erstellungsdatum der zur Auswertung importierten Dateien in *hi-chromet* aufgelistet.

Die Unterschriftenfelder dienen zur Überprüfung der Auswertung nach erfolgreichem Ausdruck, sowie zu deren Freigabe.



33. Report - Speichern/Drucken

Über den Button  können Sie den Report ausdrucken.

Mit dem Button  speichern Sie den Report als PDF-Datei.