

操作手册

multiWin pro



技术服务

耶拿分析仪器（上海）有限公司
上海市钦州北路1122号91号楼10层
电话：021-54261978
传真：021-54261977
电子邮件：info@analytik-jena.com.cn



为了正确、安全地使用本产品，请遵循说明。保留此操作手册以备将来参考。

一般信息

<http://www.analytik-jena.com.cn>

文件编号

/

版本

E (10/2025)

技术文件

Analytik Jena GmbH+Co. KG

© Copyright 2025, Analytik Jena GmbH+Co. KG

目录

1 软件一览	7
1.1 为您量身打造的 TOCnology	7
1.2 数据保护信息	9
2 安装	10
2.1 安装软件	10
2.2 Windows 用户账户的访问权限	10
2.3 使用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块安装软件	10
2.3.1 确保数据完整性	10
2.3.2 安装数据库和 CDM 服务	11
2.3.3 配置 Windows 服务	15
2.3.4 安装软件 multiWin pro 软件	16
2.4 设置 LDAP 连接	17
2.5 更新软件	18
2.6 管理数据库	19
3 启动和退出软件	23
3.1 首次启动和设置软件	23
3.2 首次使用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块启动和配置软件	25
3.3 重新初始化与 CDM 服务的连接	28
3.4 启动该软件	29
3.5 将软件切换到待机状态	30
3.6 退出软件	30
4 软件接口	32
4.1 菜单栏	32
4.2 工具栏	33
4.3 设备面板	34
4.4 对话窗口	35
4.5 搜索和过滤器	36
4.6 分组组织	37
5 程序 菜单	39
5.1 配置软件设置	39
5.1.1 定义关闭软件时的行为	41
5.1.2 定义输入样本信息和输出结果的单位和小数位数	41
5.1.3 定义导出和报告设置	43
5.1.4 建立与外部工作管理系统的数据库交换	45
5.1.5 自动生成出口和报告	46
5.1.6 为手动导入序列定义数据字段	46
5.2 管理用户	47
5.2.1 用户和用户角色	47
5.2.2 访问权限	49
5.2.3 编辑用户	50
5.2.4 配置密码规则和自动注销	51
5.3 更改密码	52

6	方法菜单	53
6.1	方法 窗口	53
6.2	可编辑的方法参数	54
6.3	创建新方法	57
6.4	编辑方法	58
6.5	将校准与方法关联起来	58
6.6	复制方法	59
6.7	导入或导出方法	59
6.8	打印和保存方法报告	59
7	测量 菜单	61
7.1	样品类型	61
7.1.1	样品	61
7.1.2	校准	61
7.1.3	日系数	62
7.1.4	QC 标准	62
7.1.5	制备用水空白值	62
7.1.6	试剂空白值	63
7.1.7	稀释剂空白值	63
7.1.8	清除空白值	64
7.1.9	舟空白值	64
7.2	添加新序列 窗口	65
7.2.1	序列表	67
7.2.2	自定义序列表	69
7.3	序列 窗口	70
7.4	校准向导	71
7.5	使用手动进样创建序列和测量	73
7.6	创建序列并使用自动进样进行测量	74
7.7	导入和导出样品数据	76
7.8	自定义序列中的方法设置	77
7.9	取消测量后继续测量序列	79
7.10	编辑和测量已保存的序列	80
7.11	进行 NPOC 测量	81
7.12	测量和编辑空白	83
7.13	进行校准	85
7.14	进行固体校准	87
7.15	重新测量或添加校准标准	88
7.16	确定日系数	89
7.17	自动或智能稀释样品	90
7.17.1	自动稀释	90
7.17.2	智能稀释	93
7.18	智能减少样品体积	94
8	校准菜单	96
8.1	校准 窗口	96
8.2	查看校准	98

8.3	编辑校准	98
8.4	打印和保存校准报告	99
9	结果详情 菜单	100
9.1	结果表 窗口	100
9.2	结果表 窗口	101
9.2.1	概述 表格	102
9.2.2	自定义 概述	102
9.2.3	详细信息	103
9.3	创建新的结果表	106
9.4	查看结果	107
9.5	编辑结果	107
9.6	浏览已编辑结果的版本	108
9.7	计算所选结果的平均值	109
9.8	导入和导出结果	109
9.9	打印和保存结果报告	110
10	仪器 菜单	112
10.1	进样器校准 窗口	112
10.2	仪器 窗口	113
10.3	单一控制步骤 窗口	116
10.4	仪器组件测试 窗口	117
10.5	调整自动进样器	117
10.6	创建新设备配置	118
10.7	更改设备配置中的空白	118
10.8	设置维护间隔并在维护后重置注射计数器	119
11	查看 菜单	120
11.1	定制工具栏	120
12	帮助 菜单	122
13	FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块 :	123
13.1	FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块中的用户管理	123
13.1.1	用户和用户角色	123
13.1.2	访问权限	125
13.1.3	编辑用户	126
13.1.4	配置密码规则和自动注销	128
13.1.5	密码丢失时恢复管理员	128
13.2	查看、打印或导出审计追踪	128
13.2.1	自定义审计追踪	130
13.3	在审计追踪中添加手动输入项	131
13.4	电子签名	132
13.5	数据管理	133
13.6	系统适用性测试 (SST)	133
13.6.1	进行系统适用性测试 (SST)	133
13.6.2	创建 SST	134
13.6.3	在 SSTs 窗口中查看系统适用性测试结果	135
13.6.4	概述 表格	136

13.6.5 详细信息 详细视图	137
13.6.6 查看、打印和保存 SST 报告.....	138

1 软件一览

Analytik Jena 开发了 multiWin pro 软件，用于控制分析仪进行总参数分析。
该软件可与 Windows 10/11 操作系统配合使用。

软件版本

本手册中的信息基于软件版本 1.4。

支持的设备

此软件支持当前所有多 N/C 型号的设备控制和数据评估：

- multi N/C 2300
- multi N/C 2300 duo
- multi N/C 2300 N
- multi N/C 3300
- multi N/C 3300 duo
- multi N/C 3300 HS
- multi N/C 4300 UV

此外，该软件还可以控制软件版本 multiWin 4.10 的上一代设备：

- multi N/C 2100S（所有型号，序列号 N5-1059/AR 或更高）
- multi N/C 3100（所有型号，序列号 N3-1157/AR 或更高）
- multi N/C pharma HT（序列号 N2-0553/AR 或更高）
- multi N/C UV HS（序列号 N6-0801/AR 或更高）
- multi N/C pharma UV（序列号 N6-0801/AR 或更高）

本手册说明

本手册使用以下印刷标记：

- 软件术语用粗体字标出。
- 菜单项以竖线"|"分隔，例如：**帮助**|**内容**。
- 操作软件的工作步骤用"▶"标出。

1.1 为您量身打造的 TOCnology

通过 multiWin pro 软件，您可以测定环境、农业、化工和制药业的液体和固体样品中的 TOC 和 TN_b 总参数。

该软件可控制分析仪及其附件，进行测量并自动评估测量结果。

观看视频，了解该软件：

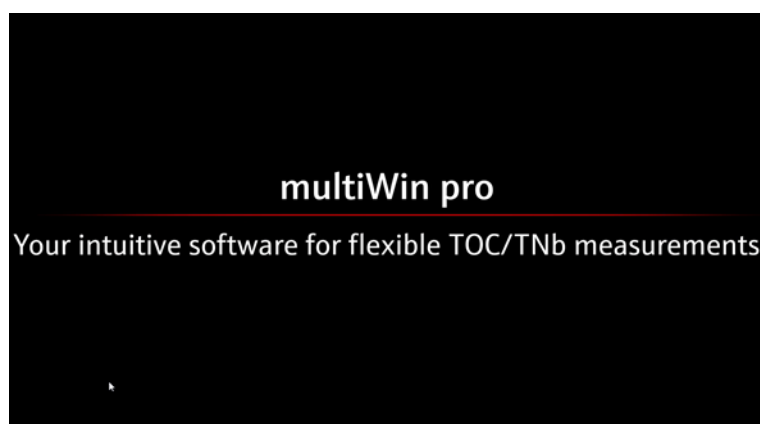


图 1 multiWin pro 软件（有关视频，请参阅软件帮助）

可供选择的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块可提供全面的数据完整性，符合 21 CFR Part 11 的药物指南。

通过视频了解软件的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块：



图 2 带有 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块的软件（有关视频，请参阅软件帮助）。

设备控制	<p>软件界面左侧的三个折叠式设备面板可随时显示设备的当前状态和重要设备信息。仪器控制 面板上的按钮可快速访问重要的菜单命令，如初始化或待机。</p> <p>这些功能和其他控制设备的功能可在仪器菜单中找到。您可以在此调整自动进样器或创建和编辑设备配置。</p>
方法	<p>软件将测量设置归纳为方法。您可以在方法菜单和相应的方法窗口中管理方法和创建新方法。</p>
测量	<p>在序列菜单中，您可以创建和管理用于分析样品、校准、空白和日常因子的序列。在相应的添加新序列窗口中开始测量，并在屏幕上记录当前的测量结果。</p>
校准	<p>您可以在校准菜单和相关的校准窗口中管理和编辑已执行的校准。</p>
测量结果	<p>您可以通过结果详情菜单管理测量结果。结果表窗口显示可加载的所有结果表的概览。</p> <p>加载结果表后，将打开结果表窗口，您可以在此查看和编辑测量结果。这里提供报告和导出功能。</p>
空白值	<p>所用试剂或样品舟的空白具有重要作用，尤其是在药品纯度控制或环境领域。因此，您可以在序列中记录各种空白或手动输入空白。软件会自动从所有后续测量结果中减去测量空白。</p>
日系数	<p>该分析系统可长期提供可重复的结果。因此无需每天重复校准。通过测量日系数，软件可让您选择使用一种或多种标准溶液检查校准情况，并在规定的范围内进行校正。</p>
系统适用性测试 (SST)	<p>系统适用性测试 (SST) 是 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块的一部分，可确保制药行业 TOC 测定的质量。SST 比较了易氧化物质和难氧化物质的分析结果。软件会自动评估 SST，并将结果显示在结果详情 SSTs菜单中。</p>
用户管理	<p>可在程序 用户管理中找到用户管理。在用户管理窗口中，可以管理已创建的用户及其密码和访问权限，您可以通过分配不同的用户角色来单独分配这些权限。</p>
审计追踪	<p>审计追踪是 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块的一部分，用于分析质量保证。您可以在程序 显示审计跟踪菜单中找到审计追踪。在审计追踪中，软件会记录重要事件，如设备的调试和报废、进行的测量和发生的错误。</p>

1.2 数据保护信息

本软件使用样本名称，并允许选择有关样本的信息（注释）。样本名称是特定样本检测结果的标识符。特别是在临床环境中，样本名称可用于将检测结果指定至接受检测的人。应尽可能减少个人数据，以确保任何人都无法从样本名称或可选注释中获取个人信息。不得使用姓名、社会保险号、身份证号、出生日期或其他个人属性等直接标识符。实验室的数据控制者有责任遵守适用的数据保护法律和义务。

作为客户支持、故障排除和投诉调查等服务相关活动的一部分，耶拿分析仪器有限公司可能会要求共享包含测量结果（包括样品名称或注释）的文件。

2 安装

2.1 安装软件

如果分析系统不带电脑，则必须在外部电脑上安装控制和分析软件。要求硬盘至少有用于 ≥64 GB 的空间。

安装过程中，程序的所有模块都在保存在程序目录中。初始化文件（.ini 文件）、数据库和用户文件保存在 *C:\ProgramData\Analytik-Jena* 文件夹中的程序文件中。Windows 系统文件中没有任何条目。

安装软件

- ▶ 打开电脑，等待 Windows 启动。以 Windows 管理员身份登录。
- ▶ 将软件光盘插入 CD-ROM 驱动器。
- ▶ 浏览到 *multiWin pro installer* 文件夹。双击 *multiWinProSetup_win32.exe* 文件，开始安装。
 - ✓ 软件已安装。除了 *C:\ProgramData\Analytik-Jena\multiWinPro* 目录中的程序文件外，还在桌面上创建了一个软件图标，并在 Windows 开始菜单中创建了条目。

2.2 Windows 用户账户的访问权限

如果电脑不只是以管理员权限在本地使用，则需要更改软件安装后创建的任何 Windows 用户账户对程序数据的访问权限。

- ▶ 作为 Windows 管理员，安装 multiWin pro 后授予创建的新 Windows 用户对 *C:\ProgramData\Analytik-Jena* 文件夹的读/写访问权限。

2.3 使用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块安装软件

可选软件模块可保护电子记录并确保数据的机密性。为此，软件模块使用中央 CDM 服务，在公司本地内部网络中安装 CDM 服务器或 DBMS（数据库管理系统），并在测量站电脑上安装 CDM 客户端。CDM 代表中央数据管理。CDM 服务和客户端通过 RESTful API 接口进行加密通信。另外，如果只有一个客户端，也可以在本地电脑上安装 CDM 服务器。

安装步骤如下：

- 在公司内部网络的服务器或数据库管理系统上安装 PostgreSQL 16 数据库。此数据库用于永久、无差错地存储大量数据，并根据需要提供数据。
- 安装 CDM 服务并将其配置为 Windows 服务，以便 CDM 服务在服务器启动时自动启动
- 在客户端电脑上安装 multiWin pro 软件。

在公司内部网络的服务器或虚拟电脑上安装时，确保数据库、CDM 服务和客户端之间通过定义的端口进行通信。这些端口可由您的 IT 部门自由配置。确保相关电脑上的端口已启用。

2.3.1 确保数据完整性

以下措施可保证 CDM 服务的数据完整性。这些措施由用户或其信息技术（IT）部门负责实施。

客户端与 CDM 服务之间的连接是通过单个定义端口使用 TCP 通信协议建立的。安全连接使用自己的证书，并通过 HTTPS 对通信进行加密。

请注意以下几点：

- 防止其他电脑访问数据库和数据库端口。
- 不要为服务器设置拥有所有访问权限的管理账户。
- 限制访问数据库管理系统的计算机。不要在这些计算机上创建任何角色账户，也不要让这些计算机上的任何角色账户处于活动状态。
- 为维护任务设置自定义数据库用户。在分配权限时，请注意技术人员不一定拥有写入或删除权限。
- 安排系统维护时间，并向用户通报。如果没有 CDM，FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块无法确保软件中的数据完整性。如果数据库没有启动和连接，CDM 服务就无法运行。
- 通过 pgAdmin 4 软件中的导出功能，定期并在每次更新前备份数据库。通过备份测试恢复数据。
- 建议：如果将审计追踪等单个表外包到单独的数据库区域（称为 "TableSpaces"），就能保护它们免受故障影响。
- 监控服务器或数据库管理系统的可用硬盘空间。

2.3.2 安装数据库和 CDM 服务

- ▶ 解压安装 CD 上的 *cdm-service-setup-xxxx-complete.zip* zip 文件夹。（xxxx 是版本的占位符）。
- ▶ 打开 Output 文件夹。双击设置文件 *cdmServiceSetup.exe*，然后使用向导安装 PostgreSQL 16 数据库。

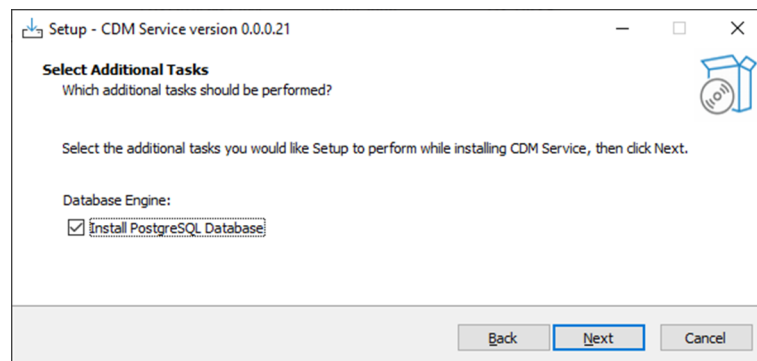


图 3 使用向导安装数据库

- ▶ 选择安装组件时，停用 **Stack Builder** 选项。
 - ✓ 数据库已安装。这可能需要几分钟。

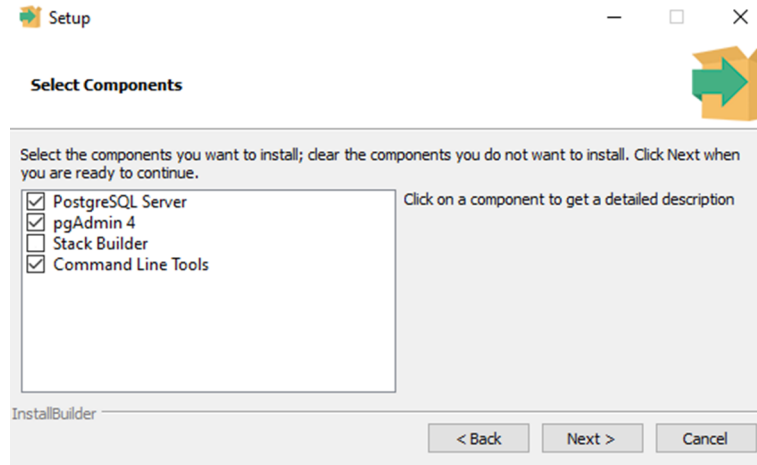


图 4 删除 "StackBuilder" 上的复选标记

▶ 在向导中创建数据库密码并安全存储。

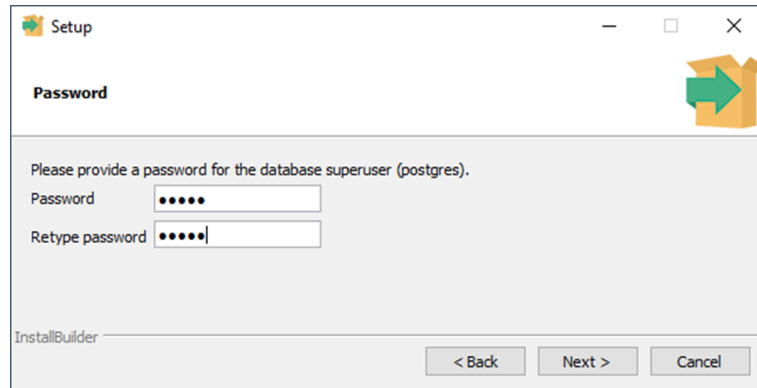


图 5 设置数据库密码

▶ 输入 **Port 5432** 作为网络地址，或根据公司网络指定不同的端口。

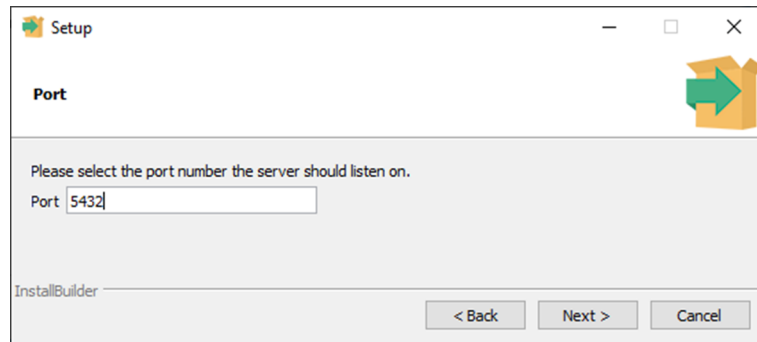


图 6 输入网络地址

▶ 语言和地区设置可在 **Locale** 下拉菜单中定义。选择 **Default locale** 项。

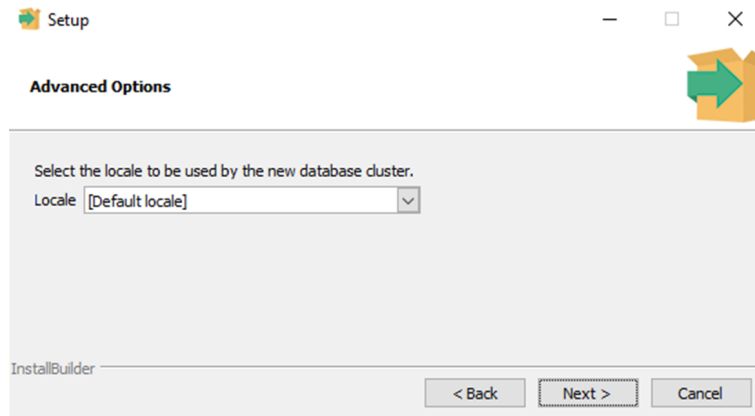


图 7 将语言和地区设置设为默认本地语言。

- ▶ 安装数据库后，向导将显示数据库连接信息窗口。现在启动 pgAdmin 4 软件以创建数据库文件。
为此，单击 Windows 图标打开所有已安装程序的列表，然后导航到 *PostgreSQL 16* 文件夹。
或：在 Windows 搜索栏中输入搜索词 **pgAdmin 4**。

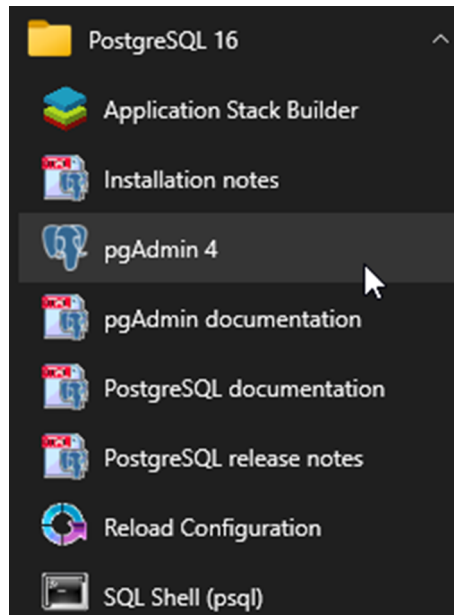


图 8 启动 pgAdmin 4 软件

- ▶ 在对象资源管理器（左侧）的 pgAdmin 4 软件中，导航到 **Server | PostgreSQL 16**。
- ▶ 在 **连接至服务器** 窗口中输入您之前创建的密码以建立连接。

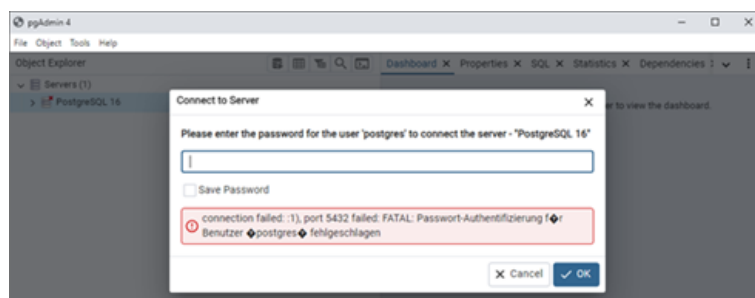


图 9 输入数据库密码

- ▶ 在软件中创建 **cdmserver** 数据库。为此，请打开对象资源管理器中 **PostgreSQL 16 | Databases** 下的上下文菜单，并选择命令 **Create | Database**。

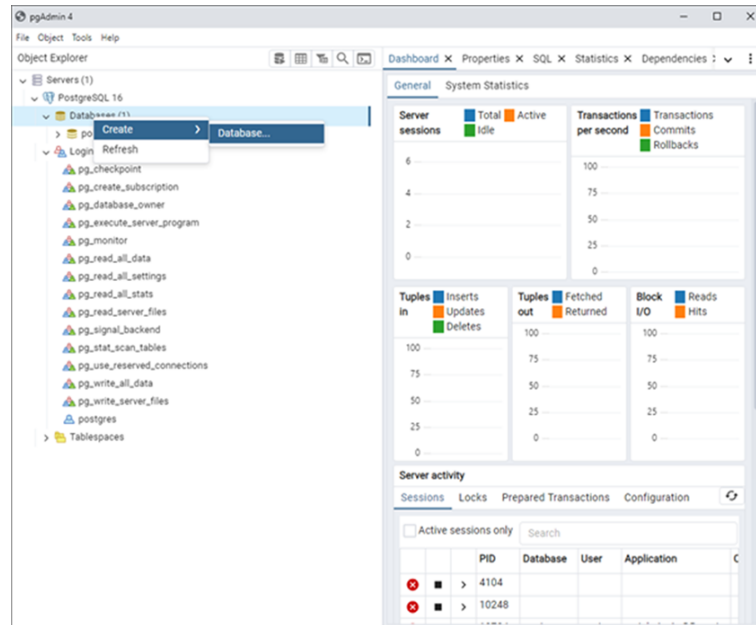


图 10 创建 cdmserver 数据库

- ▶ 在 **创建 - 数据库** 窗口中，在数据库字段中输入 **cdmserver** 作为名称。
- ▶ 单击 **保存** 按钮保存 **cdmserver** 数据库。
- ▶ 关闭 pgAdmin 4 软件。
 - ✓ 您已创建 **cdmserver** PostgreSQL 16 数据库。
- ▶ 在向导的 **数据库连接信息** 窗口中，单击 **下一步**，检查与数据库的连接。端口、用户名、密码和数据库的值是在安装过程中分配的。
 - ✓ 如果数据库已连接，则会出现以下信息：**配置已保存**。

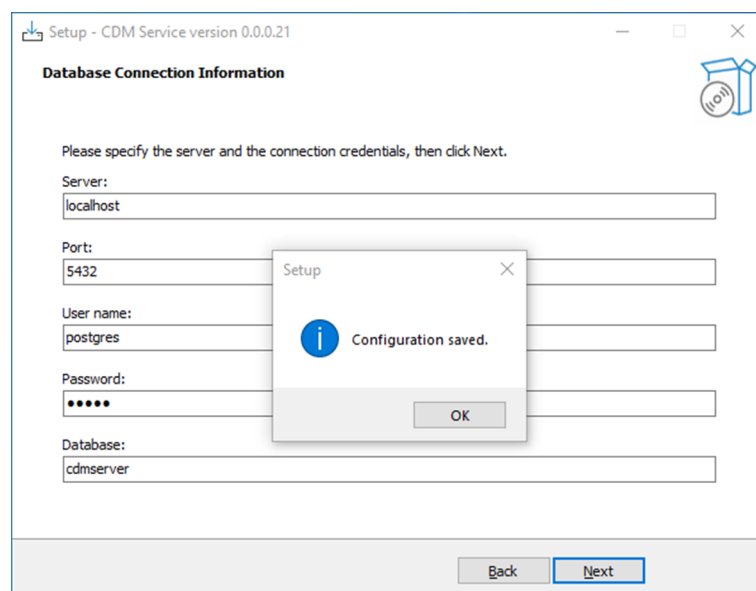


图 11 检查数据库连接

- ▶ 如果连接数据库失败，首先在 pgAdmin 4 软件中创建数据库文件。请参见上面的说明。
- ▶ 点击 **OK** 确认信息。然后再次点击 **下一步**。

- ▶ 数据库安装完成后，安装程序会解压 CDM 服务。默认情况下，安装程序会将 CDM 服务解压缩到 `C:/ProgramFiles (x86)/CDM Service` 目录中。在最后一步中，向导将执行校验和测试以验证安装是否成功。

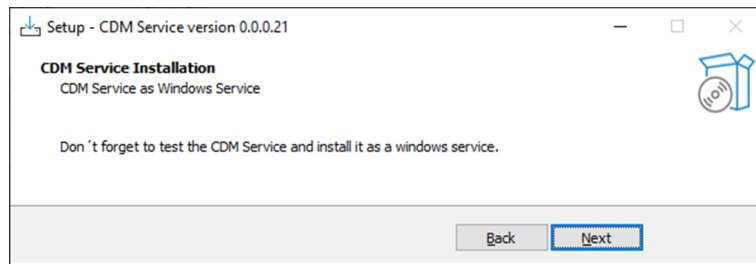


图 12 安装 CDM 服务

2.3.3 配置 Windows 服务

- ▶ 安装 Windows 服务。在 Windows 搜索栏中输入搜索词 **Command Prompt** 或 **cmd** 并以管理员身份启动 **Command Prompt** 程序。
- ▶ 输入 `cd c:\Program Files (x86)\CDM Service`，导航到 CDM 目录。`cdmservice-xxx-x86_64.exe` 在命令行中输入 `/install`。将 `-xxx-` 替换为版本号。
 - ✓ 如果安装成功，命令提示符程序会显示以下文本：**Service Part11 CDM installed successfully.**
- ▶ 在 Windows 搜索栏中输入搜索词 **services**。以管理员身份打开 Windows 服务。

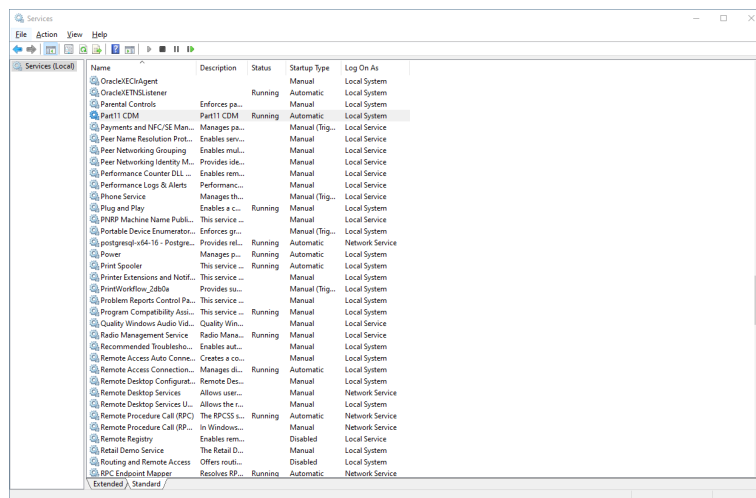


图 13 将 CDM 服务配置为 Windows 服务

- ▶ 双击打开 **Part11 CDM** 服务的属性。
- ▶ 安装服务后，将启动类型从手动改为自动。为此，请从常规选项卡的启动类型下拉菜单中选择自动。

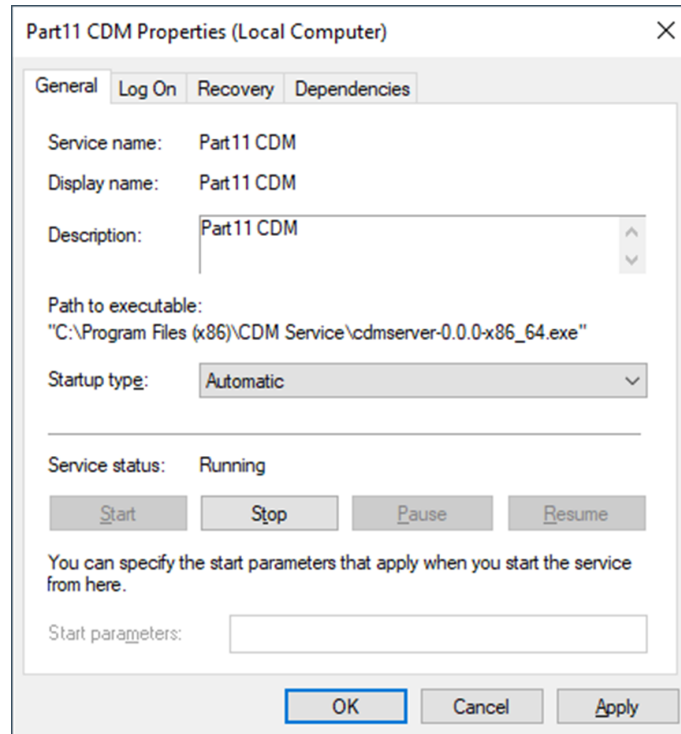


图 14 Windows 服务属性

- ▶ 单击开始以开始服务。
- ▶ 单击应用保存更改。
 - ✓ 您已将 CDM 服务配置为 Windows 服务。现在，CDM 服务会在系统启动时自动启动。
- ▶ 测试 CDM 服务。
- ▶ 打开浏览器，输入 **https://localhost:8443/** 地址。如果未选择Port 8443，请更改服务器端口。
 - ✓ 服务运行时，可以看到以下一行：**CDM 服务 vxxx** (数字 -xxx 的长序列表示服务的版本)。

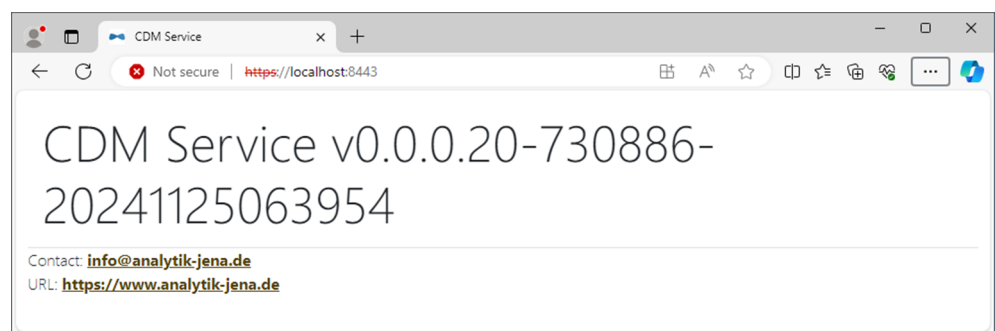


图 15 将 CDM 服务作为 Windows 服务进行测试时的浏览器显示问题

- ▶ 随后可在 *C:\Program Files (x86)\CDM Service\cdmserver-xxx-x86_64.cfg*文件中调整数据库的连接设置。

2.3.4 安装软件 multiWin pro 软件

您只能在客户端而非服务器上安装 multiWin pro 软件。
安装完成后，首次启动软件时需要设置与 CDM 服务的连接。

安装软件

- ▶ 打开电脑，等待 Windows 启动。以 Windows 管理员身份登录。
- ▶ 将软件光盘插入 CD-ROM 驱动器。
- ▶ 浏览到 *multiWin pro installer* 文件夹。双击 *multiWinProSetup_win32.exe* 文件，开始安装。
 - ✓ 软件已安装。除了 *C:\ProgramData\Analytik-Jena\multiWinPro* 目录中的程序文件外，还在桌面上创建了一个软件图标，并在 Windows 开始菜单中创建了条目。

另见

- 📖 首次使用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块启动和配置软件 [▶ 25]

2.4 设置 LDAP 连接

可选的 DA 21 CFR 第 11 部分合规性模块提供了使用 LDAP 连接到现有 Active Directory 域服务的选项。活动目录允许使用外部管理的用户账户（如 Windows 登录数据）登录。

如果 LDAP/Active Directory 用于配置外部用户，则必须通过输入至少以下行来调整文件 *C:\Program Files (x86)\CDM Service\cdmservice-xxx-x86_64.cfg*：（xxx 是版本的占位符）。

```
property spring ldap.enable=true
property management.health.ldap.enabled=true
property spring.ldap.urls.0=ldap://{...}
property spring.ldap.authentication={...}
property spring.ldap.userDnPattern=uid={0},{...}
```

使用 SSL 加密 LDAP 时，必须添加/更改以下参数：

```
property spring.ldap.urls.0=ldaps://{...}
property spring.ssl.bundle.pem.ldap.truststore.certificate={...}
```

必须调整占位符 {...}，见表：

PropertyKey	示例	标准	备注
spring.ldap.enable	真假	假	激活/禁用 LDAP 扩展名
management.health.ldap.enabled	真假	假	在 CDM 服务器的正常状态显示中添加 LDAP 可用性测试，所有客户端都会更改。
spring.ldap.urls.0	ldap://localhost:8889	-	目标服务器地址。 ldap = 无 SSL 加密 ldaps = 使用 SSL 加密
spring.ldap.authentication	简单 ntlm kerberos		设置要使用的加密方法。所有变体均可与 ldaps 结合使用。 简单 = 不加密 ntlm = NTLM 加密 kerberos = Kerberos 加密
java.security.krb5.conf	./cert/krb5.ini		Kerberos 配置文件的路径
spring.ldap.username	用户		LDAP 服务器用户

PropertyKey	示例	标准	备注
property spring.ldap.password	密密码		LDAP 服务器密码
spring.ldap.userDnPattern	uid={0},ou=people,dc=en		目录信息树中的搜索路径
spring.ldap.userSearchBase	ou=people,dc=company		代替 .userDnPattern 使用 用法和值取决于 AD 配置。
spring.ldap.userSearchFilter	(sAMAccountName={0})		
spring.ssl.bundle.pem.ldap.truststore.certificate	certificate/ pubkey.pem		包含 LDAP 目标服务器公钥的证书文件 (.pem 或 .p12) 的绝对路径或相对路径

这里描述的 LDAP/AD 配置涵盖了大多数典型的 LDAP 配置。但是，可能会有一些例外情况是目前的实施方案所不包括的。

配置完成后，必须在 multiWin pro 的用户管理中创建每个外部用户。必须为外部用户激活 **用户为外部** 选项。

另见

▣ 用户和用户角色 [▶ 123]

2.5 更新软件

如果有软件更新，请联系 Analytik Jena 客户服务部门。客户服务部将为您提供新的安装文件。

- ▶ 双击安装文件，启动软件更新。
 - ✓ 新软件版本已安装。旧版本会自动卸载。初始化文件 (.ini 文件)、数据库和用户文件将被保留。
- ▶ 如果数据库模式已更改，软件会在您首次启动软件时指导您迁移数据库：
- ▶ 出现提示时，创建旧数据库的备份。
- ▶ 按照说明迁移旧数据库。
 - ✓ 软件会显示数据迁移的结果。
- ▶ 如果您在更新时购买了新的软件许可证，软件会提示您在首次启动软件时输入新的许可证。输入许可证。
- ▶ 如果软件未提示输入新许可证，请先输入旧许可证。
- ▶ 使用 **帮助 | 授权** 菜单选项打开 **许可证管理** 窗口。
- ▶ 在 **许可码** 框中输入新的许可证代码。
- ▶ 单击 **检查按钮** 检查许可证。
- ▶ 单击 **关闭按钮** 关闭窗口。
- ▶ 重新启动软件以应用新许可证。
 - ✓ 您已执行软件更新。

软件更新可能还需要对分析仪本身进行固件更新。与客户服务中心讨论是否可以在客户服务中心的支持下自行更新固件，或者是否需要上门服务。

2.6 管理数据库

如果安装了 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块，则可以提供的 pgAdmin 4 软件管理数据库。

- 您可以创建数据库的备份。
- 您可以删除数据库（不建议）。
- 您可以从备份中恢复数据库。

您在安装软件时定义了数据库的访问数据。

创建数据库备份

（带有 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）

- ▶ 关闭 multiWin pro 软件。
- ▶ 启动 pgAdmin 4 软件

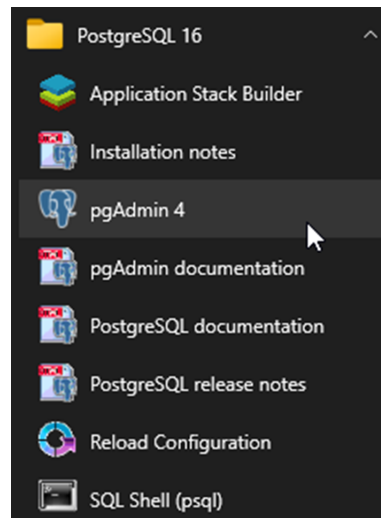


图 16 启动 pgAdmin 4 软件

- ▶ 在对象资源管理器（左侧）的 pgAdmin 4 软件中，导航到 **Servers | PostgreSQL 16 | Databases | cdmserver**。

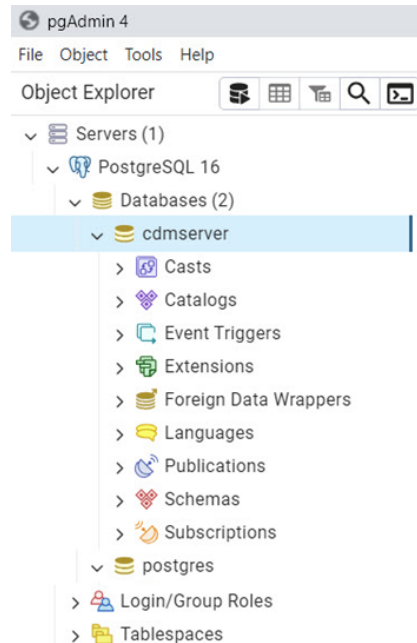


图 17 在对象资源管理器中选择数据库

- ▶ 如果需要，请在对话框中输入安装时设置的数据库密码。
- ▶ 在对象资源管理器中，右键单击 **cdmserver** 打开上下文菜单，然后选择 **Backup** 命令。

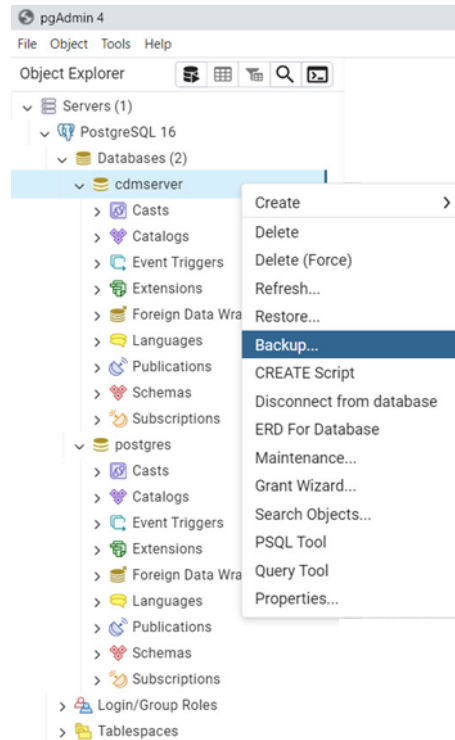


图 18 开始备份

- ▶ 在 **Backup (Database:cdmserver)** 窗口中，单击 **Filename** 下的文件夹图标，选择存储目录并指定文件名。

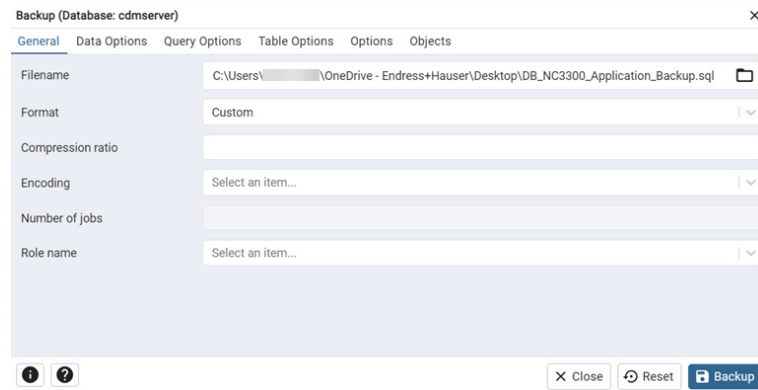


图 19 定义文件名并选择存储目录

- ▶ 单击 **Backup** 按钮。
 - ✓ pgAdmin 4 软件会在指定目录下创建一个 SQL 文件作为数据库备份。如果成功，将显示以下绿色信息。

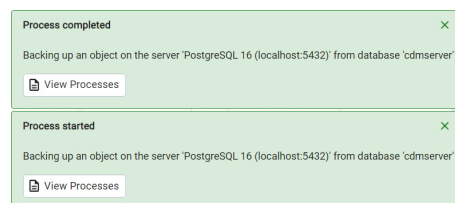


图 20 成功备份后的信息

恢复数据库

如果删除了 **cdmserver** 数据库或重新安装了 PostgreSQL 数据库软件，则必须还原数据库。

- ▶ 启动 pgAdmin 4 软件
- ▶ 在对象资源管理器（左侧）的 pgAdmin 4 软件中，导航到 **Server | PostgreSQL 16 | Databases**。
- ▶ 右键单击 **Databases** 打开上下文菜单，然后选择 **Create | Database** 命令。
- ▶ 在 **创建 - 数据库** 窗口中，在数据库字段中输入 **cdmserver** 作为名称。
- ▶ 单击 **保存** 按钮保存 **cdmserver** 数据库。

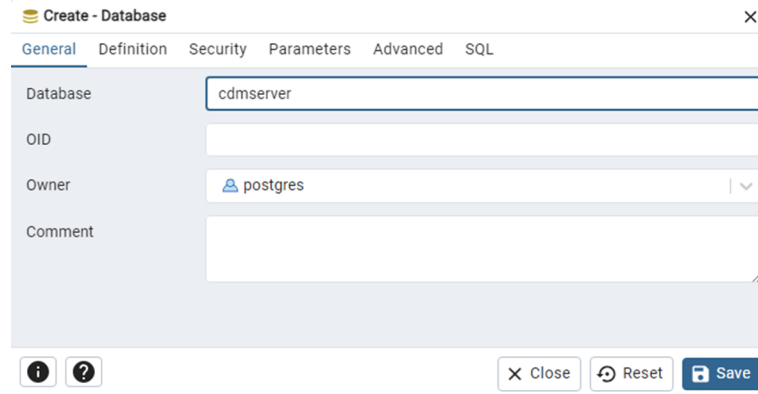


图 21 创建 cdmserver 数据库

加载备份

- ▶ 在对象资源管理器中，右键单击 **cdmserver** 打开上下文菜单，然后选择 **Restore** 命令。

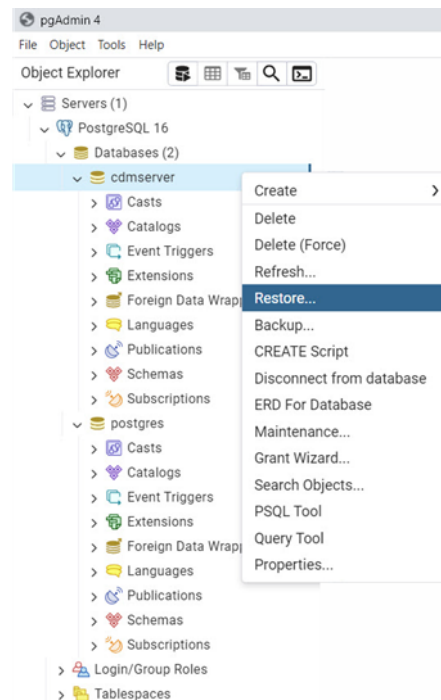


图 22 恢复数据库

- ▶ 在 **Restore (Database:cdmserver)** 窗口中，选择 **Filename** 下的备份文件。
- ▶ 在窗口中，导航至 **查询选项** 选项卡，并激活 **还原前清理** 选项。
- ▶ 单击 **恢复** 按钮恢复数据库。
 - ✓ pgAdmin 4 软件从备份文件恢复数据库。如果成功，将显示以下绿色信息。

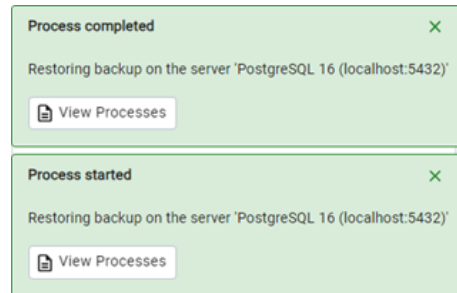


图 23 成功恢复数据库后的信息

- ▶ 如果恢复失败，请重复该过程。

管理标准软件数据库

在本地安装标准软件时，您可以在 Windows 资源管理器的 **ProgramData** 目录中找到数据库。

创建数据库备份：

- ▶ 退出 multiWin pro 软件。
- ▶ 将 MULTIWINPRODB.FDB 文件保存在 *C:\ProgramData\Analytik-Jena\multiWinPro\db* 目录中。
- ▶ 如果要重新安装 multiWin pro 软件，还要将 multiWinPro.ini 文件保存到 *C:\ProgramData\Analytik-Jena\multiWinPro* 目录中。某些程序设置保存在 ini 文件中。

恢复数据库：

如果重新安装 multiWin pro 软件，请在首次启动软件之前复制备份文件。

- ▶ 将 MULTIWINPRODB.FDB 文件以及（如需要）multiWinPro.ini 文件复制到上述目录。

i 注意！文件必须使用这些名称，否则软件将无法识别这些文件。

3 启动和退出软件

3.1 首次启动和设置软件

安装软件后，您需要获得许可证。首次启动软件时，请勿以 Windows 管理员身份登录 Windows。

然后首次登录软件。为此，软件中预设了一名管理员，用户名和密码为 **Admin**。首次登录后更改密码。除了用户和设备管理权限外，管理员只有非常有限的权限。您可以设置用户管理。

首次启动软件时，您还可以定义设备配置。软件会根据设备配置调整设备设置以及方法和序列的选择选项。

您可以配置跨软件设置并初始化设备系统。

- ▶ 打开电脑电源。
- ▶ 按照分析仪操作手册的说明打开气源。为此，打开实验室气源减压器上的阀门。
- ▶ 打开分析系统的组件。最后，在电源开关处打开分析仪。当准备好运行时，前门的状态 LED 呈绿色亮起。
- ▶ 使用 Windows 启动命令 **启动 | multiWinPro** 或双击桌面上的软件图标启动软件。

软件许可

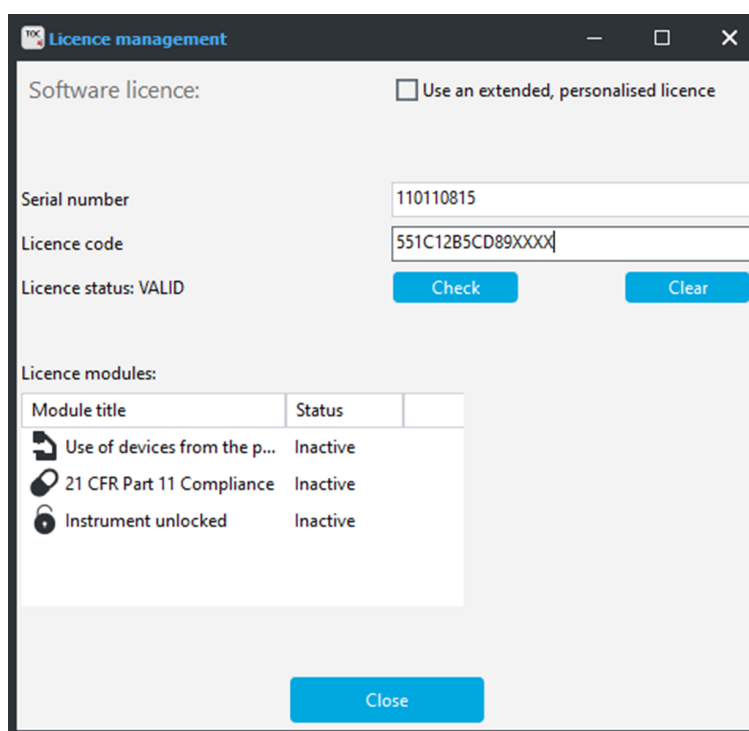


图 24 许可证管理窗口

- ▶ 软件启动后，在许可证管理窗口中输入序列号和许可证代码，以获得软件许可证。
许可证代码将通过电子邮件发送给您。设备文档中还包含一份许可证数据表，上面有标准软件的许可证代码。
- ▶ 单击 **检查** 按钮，检查许可证状态：许可证状态：有效。检查表中的许可软件模块。
- ▶ 单击关闭按钮关闭窗口。

首次登录

- ▶ 在登录窗口中输入用户名和密码。用 **确定**。用户名 **Admin** 和密码 **Admin** 确认输入。

设定设备配置

- ▶ 在**仪器配置** 窗口中设置设备配置。
- ▶ 在**仪器名称**中命名设备配置。默认名称为：NewDevice_Timestamp
- ▶ 在**序列号**：中，软件会在授权时自动输入序列号。检查序列号。
- ▶ 在**COM 通道**：的下拉菜单中选择分析仪接口。如有必要，请在 Windows 设备管理器中检查 COM 端口。
- ▶ 在**仪器类型**下拉菜单中选择设备型号。
- ▶ 为**进样器类型**：和**样品盘尺寸**：选择自动进样器和样品盘。
- ▶ 如果您购买了多个自动进样器或样品盘：首次启动软件后，可在菜单项**仪器 | 仪器**中创建额外的设备配置（例如用于固体测量）或更改现有设备配置。
- ▶ 从**炉类型**：下拉菜单中选择 UV 反应器、内部炉或外部炉：。

下拉菜单	选项
炉类型：	内部垂直 选项 选择通过高温氧化进行液体测量
	UV 反应器 选项 选择通过 UV 氧化进行液体测量
	内部水平 选项 选择内部固体模块进行固体测量
	外部水平 选项 选择通过外部固体模块进行手动或自动固体测量

- ▶ 在**C 传感器**：和**N 传感器**：下拉菜单中选择检测器。
- ▶ 从**样品瓶尺寸 (mL)**:下拉菜单中选择样品瓶的容量。该软件会相应地调整死体积。或者，您可以在**死体积 (mL)**:中调整死体积。
- ▶ 单击**确定**按钮保存设备配置。

设置用户管理

- ▶ 您可以继续使用默认管理员。首次登录后，请在**程序 | 修改密码**中更改管理员密码。
- ▶ 使用**程序 | 用户管理**设置用户管理。
至少创建一个可以创建方法、执行测量和分析的用户。**实验室技术员** 和**中级用户** 用户角色适合于此任务。

进行跨软件设置

- ▶ 在**程序 | 设置**中定义跨软件设置，如软件界面语言。
- ▶ 在**程序 | 设置** 中定义软件启动时分析系统的初始化设置和关闭分析系统的例行程序。
- ▶ 作为具有适当访问权限的用户，在**方法** 菜单中创建一个初始方法。
- ▶ 单击**默认方法**部分中的**选择默认**，将该方法设为**程序 | 设置**中的默认方法。



注意

只有定义了默认方法，才能成功进行分析系统的初始化。

- 点击**软件设置** 窗口中的**选择默认**，选择默认方法。

初始化分析系统

- ▶ 单击 **仪器控制** 面板中的**初始化仪器**按钮，作为具有适当权限的用户初始化分析系统。
✓ 软件初始化分析系统并激活已创建的设备配置作为默认配置。

- ▶ 等待预热阶段完成。
采用高温氧化的型号的预热阶段：30 min，采用 UV 氧化的型号的预热阶段：15 min
- ▶ 在仪器状态面板中检查设备状态。
- ▶ 如果仪器状态面板中的组件以彩色显示，则分析系统在预热阶段后尚未准备好进行测量。如果是，请开始故障排除。
- ▶ 用于 NPOC 测量：在分析仪上设置 NPOC 吹出流量。
为此，请使用菜单选项 **仪器 | 单一控制步骤 | 吹扫** 激活吹扫流。在“NPOC”针阀处设置气体流量。检查仪器状态面板中的吹扫：显示：
- ▶ 在首次测量前和每次转换后调整自动进样器。为此，请通过菜单命令 **仪器 | 进样器校准** 打开进样器校准窗口。
 - ✓ 分析系统已准备好进行测量。

另见

- 📖 更改密码 [▶ 52]
- 📖 编辑用户 [▶ 50]
- 📖 配置软件设置 [▶ 39]
- 📖 调整自动进样器 [▶ 117]

3.2 首次使用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块启动和配置软件

安装软件后，您需要获得许可证。首次启动软件时，请勿以 Windows 管理员身份登录 Windows。

设置与 CDM 服务的连接。为此，请使用先前创建的第一个用户，用户名为 **initialcdmsetupuser**，密码为 **admin**。第一个用户在软件中没有任何权限。在初始化连接时，设置第一个具有管理员权限的用户。

然后用新创建的用户首次登录软件。除了用户和设备管理权限外，管理员只有非常有限的权限。提示：因此，应在软件首次启动时在用户管理中配置其他用户。

首次启动软件时，您还可以定义设备配置。软件会根据设备配置调整设备设置以及方法和序列的选择选项。

您可以配置跨软件设置并初始化设备系统。

- ▶ 打开电脑电源。
- ▶ 按照分析仪操作手册的说明打开气源。为此，打开实验室气源减压器上的阀门。
- ▶ 打开分析系统的组件。最后，在电源开关处打开分析仪。当准备好运行时，前门的状态 LED 呈绿色亮起。
- ▶ 使用 Windows 启动命令 **启动 | multiWinPro** 或双击桌面上的软件图标启动软件。

软件许可

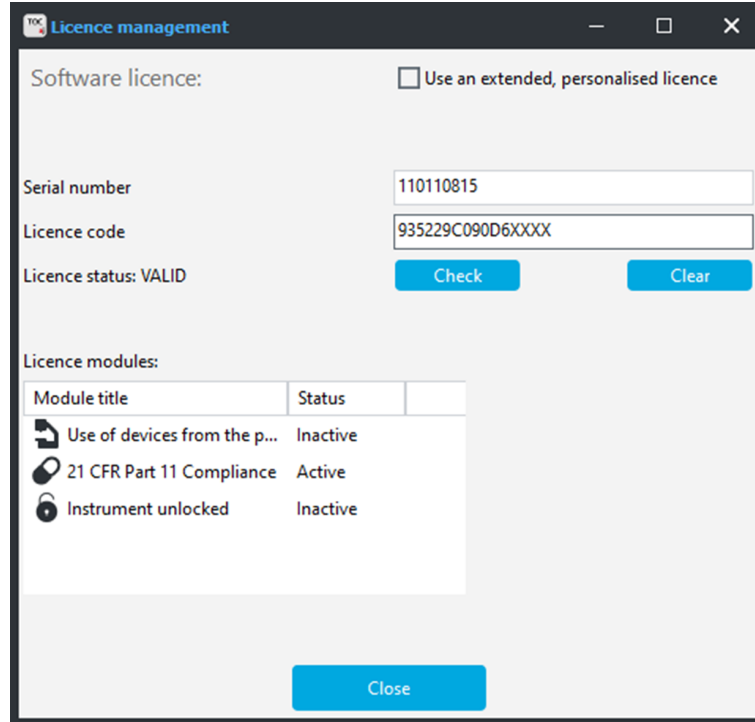


图 25 许可证管理窗口

- ▶ 软件启动后，在许可证管理窗口中输入序列号和许可证代码，以获得软件许可证。
许可证代码将通过电子邮件发送给您。设备文档中还包含一份许可证数据表，上面有标准软件的许可证代码。

i 注意！使用电子邮件中的许可证代码。

- ▶ 单击 **检查** 按钮，检查许可证状态：许可证状态：有效
检查表中的许可软件模块。符合 **21 CFR Part 11** 模块必须处于激活状态。
- ▶ 单击**关闭**按钮关闭窗口。

设置与 CDM 服务的连接

- ▶ 软件将打开**选择 CDM 连接** 窗口。

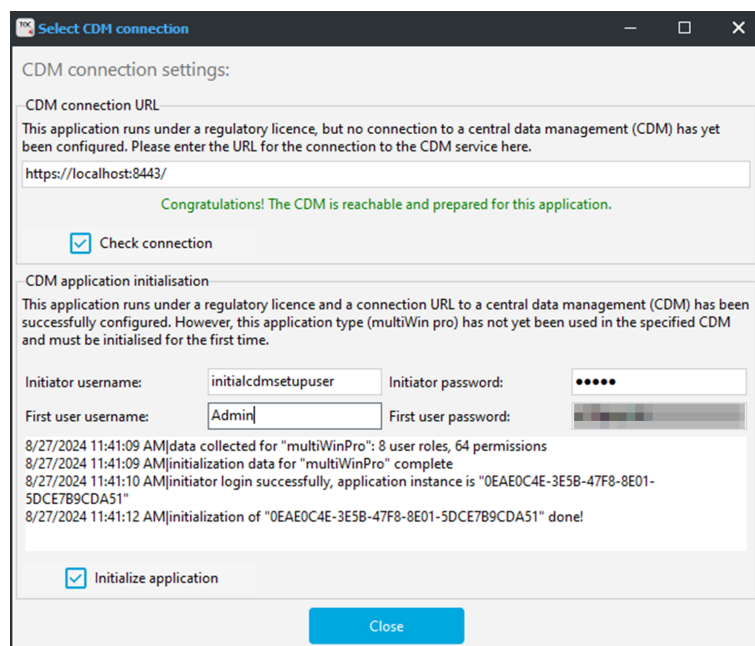


图 26 选择 CDM 连接窗口

- ▶ 在**CDM 连接 URL** 输入本地网络中 CDM 服务器的互联网地址。
 - 如果 CDM 服务器安装在本地电脑上，请输入以下地址：
https://localhost:8443/
如有必要，请更改默认端口。
 - 如果使用中央 CDM 服务器，请输入本地网络上服务器的地址。
- ▶ 单击**检查连接**。
- ▶ 在**CDM 应用程序初始化** 区域，输入之前创建的初始用户，用户名为 **initialcdmsetupuser**，并输入密码 **admin**。
- ▶ 在**第一个用户的用户名**：中：为具有管理员权限的第一个用户定义一个用户名，例如 Admin。
- ▶ 单击**初始化应用**。
 - ✓ 软件会设置与 CDM 服务的连接，并自动为第一个用户分配初始密码。
- ▶ 按 **Ctrl + C** 将初始密码复制到剪贴板。
- ▶ 单击**关闭按钮**关闭窗口。



注意

没有初始密码，软件无法启动

在配置 CDM 服务连接的同时，创建第一个用户。没有初始密码就无法登录软件 multiWin pro 软件。

- 使用 **Ctrl + C** 将第一个用户的初始密码复制到剪贴板或记下来。

首次登录

- ▶ 在登录窗口中输入用户名和密码。单击**确定** 以确认输入的数据。使用第一个用户及其初始密码来完成此操作。
- ▶ 软件提示时，在**修改密码** 窗口中更改密码。

设定设备配置

- ▶ 在**仪器配置** 窗口中设置设备配置。
- ▶ 在**仪器名称**中命名设备配置。默认名称为：NewDevice_Timestamp
- ▶ 在**序列号**：中，软件会在授权时自动输入序列号。检查序列号。
- ▶ 在**COM 通道**：的下拉菜单中选择分析仪接口。如有必要，请在 Windows 设备管理器中检查 COM 端口。
- ▶ 在**仪器类型**下拉菜单中选择设备型号。
- ▶ 为**进样器类型**：和**样品盘尺寸**：选择自动进样器和样品盘。
- ▶ 如果您购买了多个自动进样器或样品盘：首次启动软件后，可在菜单项**仪器|仪器**中创建额外的设备配置（例如用于固体测量）或更改现有设备配置。
- ▶ 从**炉类型**：下拉菜单中选择 UV 反应器、内部炉或外部炉：。

下拉菜单	选项
炉类型：	内部垂直 选项 选择通过高温氧化进行液体测量 UV 反应器 选项 选择通过 UV 氧化进行液体测量 内部水平 选项 选择内部固体模块进行固体测量 外部水平 选项 选择通过外部固体模块进行手动或自动固体测量

- ▶ 在**C 传感器**：和**N 传感器**：下拉菜单中选择检测器。

- ▶ 从**样品瓶尺寸 (mL)**:下拉菜单中选择样品瓶的容量。该软件会相应地调整死体积。或者，您可以在**死体积 (mL)**:中调整死体积。
 - ▶ 单击**确定**按钮保存设备配置。
- 设置用户管理
- ▶ 使用**程序 | 用户管理**设置用户管理。
至少创建一个可以创建方法、执行测量和分析的用户。**实验室技术员**和**中级用户**用户角色适合于此任务。
 - ▶ 从**用户**表中选择第一个用户 **initialcdmsetupuser**。单击**激活**按钮禁用此用户。
- 进行跨软件设置
- ▶ 在**程序 | 设置**中定义跨软件设置，如软件界面语言。
 - ▶ 在**程序 | 设置**中定义软件启动时分析系统的初始化设置和关闭分析系统的例行程序。
 - ▶ 作为具有适当访问权限的用户，在**方法**菜单中创建一个初始方法。
 - ▶ 单击**默认方法**部分的**选择默认**，将该方法设为**程序 | 设置**中的默认方法。



注意

只有定义了默认方法，才能成功进行分析系统的初始化。

- 点击**软件设置**窗口中的**选择默认**，选择默认方法。

初始化分析系统

- ▶ 单击**仪器控制**面板中的**初始化仪器**按钮，作为具有适当权限的用户初始化分析系统。
 - ✓ 软件初始化分析系统并激活已创建的设备配置作为默认配置。
- ▶ 等待预热阶段完成。
采用高温氧化的型号的预热阶段：30 min，采用 UV 氧化的型号的预热阶段：15 min
- ▶ 在**仪器状态**面板中检查设备状态。
- ▶ 如果**仪器状态**面板中的组件以彩色显示，则分析系统在预热阶段后尚未准备好进行测量。如果是，请开始故障排除。
- ▶ 用于 NPOC 测量：在分析仪上设置 NPOC 吹出流量。
为此，请使用菜单选项**仪器 | 单一控制步骤 | 吹扫**激活吹扫流。在“NPOC”针阀处设置气体流量。检查**仪器状态**面板中的吹扫：显示：
- ▶ 在首次测量前和每次转换后调整自动进样器。为此，请通过菜单命令**仪器 | 进样器校准**打开**进样器校准**窗口。
 - ✓ 分析系统已准备好进行测量。

另见

- ▣ FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块中的用户管理 [▶ 123]
- ▣ 配置软件设置 [▶ 39]
- ▣ 调整自动进样器 [▶ 117]

3.3 重新初始化与 CDM 服务的连接

更新软件和数据库结构后，软件可能会要求您在首次启动程序时重新初始化与 CDM 服务的连接。

- ▶ 更新后重新启动 multiWin pro 软件。

- ✓ multiWin pro 软件将打开 **选择 CDM 连接** 窗口。
服务器地址已输入 **CDM 连接 URL** 区域。
 - ▶ **单击检查连接。**
 - ✓ 本软件显示下列消息：**CDM URL 可以访问，但该应用程序未知。**
 - ▶ 在**CDM 应用程序初始化** area under **发起人用户名：**和**发起人密码：**中，输入之前创建的初始用户，用户名为 **initialcdmsetupuser**，并输入密码 **admin**。
 - ▶ 在**第一个用户的用户名：**中，输入具有管理员权限的现有用户的用户名，例如 Admin。
 - ▶ **单击初始化应用。**
 - ✓ 软件重新初始化与 CDM 服务的连接。软件不会为现有用户分配新的初始密码。可以使用现有密码。
 - ▶ 如果重新初始化成功，单击**关闭按钮**关闭窗口。
 - ▶ 在登录窗口中输入用户名和密码。单击**确定**以确认输入的数据。使用您具有管理员权限的用户完成此操作。
 - ▶ 如果连接未正确建立，请查看日志文件中的错误，请参阅菜单命令 **帮助|日志**。
- i** 注意！如果软件在正在进行的测量期间失去与 CDM 服务的连接，则上次测量的数据可能会丢失。审计跟踪记录了连接的丢失。

3.4 启动该软件

- ▶ 使用 Windows 启动命令 **启动|multiWinPro** 或双击桌面上的软件图标启动软件。
- ▶ 在登录窗口中输入用户名和密码。单击**确定**以确认输入的数据。
- ▶ 通过菜单命令**仪器|仪器**查看和检查设备配置。根据需要调整或更改设备配置。单击**设为默认按钮**或双击，激活所需的设备配置。
- ▶ 单击 **仪器控制** 面板中的**初始化仪器按钮**来初始化分析系统。
如果您激活 **程序|设置** 中的**启动时自动初始化** 选项，软件启动时软件将自动初始化分析系统。
 - ✓ 软件初始化分析系统，打开气体流量开关并激活标准配置。对于采用高温氧化的设备，软件会将设备加热到默认方法中指定的炉温。（**程序|设置|默认方法** 中的默认方法）
- ▶ 等待预热阶段完成。
采用高温氧化的型号的预热阶段：30 min，采用 UV 氧化的型号的预热阶段：15 min
- ▶ 如果**仪器状态**面板中的组件以彩色显示，则分析系统在预热阶段后尚未准备好进行测量。如果是，请开始故障排除。
- ▶ 每次修改后调整自动进样器。为此，请使用菜单选项**仪器|进样器校准**打开**进样器校准**窗口。
 - ✓ 分析系统已准备好进行测量。

另见

- 创建新设备配置 [▶ 118]

3.5 将软件切换到待机状态

将分析系统切换到待机状态以备测量中断 ≥ 30 min，例如在评估测量结果时或过夜。

在待机模式下，软件会关闭气流。对于具有高温氧化功能的型号，软件会将炉温降至待机温度。对于具有 UV 氧化功能的型号，软件会关闭 UV 灯。

- ▶ 选择**仪器 | 待机** 菜单选项。
 - ✓ 该软件保持打开状态。分析系统将进入待机模式。
- ▶ 或：在**仪器控制面板**中，单击**仪器待机或关闭**按钮。
 - 选择 **待机** 选项。
对于具有高温氧化功能的型号，以 (°C) 为单位设置待机温度。
 - 勾选**反向冲洗** 复选框，在进入待机模式前冲洗样品通路。遵守分析仪操作手册中的冲洗说明。
 - 按**确定** 关闭对话框。
 - ✓ 该软件保持打开状态。分析系统将进入待机模式。

启用**关闭行为 | 始终询问**设置时的其他选项：

- ▶ 选择**程序 | 关闭** 菜单选项。在**待机** 对话框中，选择**待机** 选项。
- ▶ 或：使用 **×** 图标（右上角）关闭软件。在**待机** 对话框中，选择**待机** 选项。

另见

- ▣ 定义关闭软件时的行为 [▶ 41]

3.6 退出软件

在长时间不使用之前，例如在周末或休假期间，关闭分析系统电源。

软件关闭供气并抽空 TIC 冷凝水容器。对于具有 UV 氧化功能的型号，软件会关闭 UV 灯。在具有高温氧化功能的型号中，炉温降至室温。

- ▶ 选择**程序 | 关闭** 菜单选项。
- ▶ 或：使用 **×** 图标（右上角）关闭软件。
- ▶ 或：选择**仪器 | 关闭** 菜单选项。
- ▶ 或：在**仪器控制面板**中，单击**仪器待机或关闭**按钮。
- ▶ 选择 **关闭** 选项。
 - 勾选 **反向冲洗** 复选框，在关闭之前冲洗样品通路。遵守分析仪操作手册中的冲洗说明。
 - 按**确定** 关闭对话框。
 - ✓ 选择选项 1 和 2 时，软件关闭。如果选择了选项 3 和 4，软件将保持打开状态。
 - ✓ 分析系统关闭。现在，您可以关闭分析系统组件的电源开关。

测量结束时待机/关闭

在序列结束时，您可以自动关闭分析系统或将其置于待机状态。例如，它们可以在隔夜测量时节省气体和耗电量。

- ▶ 使用**测量 | 添加新序列**菜单选项创建新的序列。
- ▶ 待机：在序列结束时，使用**添加控制步骤**按钮来设置**仪器待机**控制步骤。在**步骤属性**面板中设置待机温度。

- ▶ 如有必要，使用**唤醒**控制步骤，使分析系统准备好在所需时间再次运行。
- ▶ 关闭：在序列末尾设置控制步骤**仪器关闭**。

另见

- ▣ 定义关闭软件时的行为 [▶ 41]

4 软件接口



提示

此软件经过优化，可在分辨率为 1920 x 1080 px 的 24 in 全高清屏幕（个人电脑）或 14 in 全高清屏幕（笔记本电脑）上显示。在较小的屏幕上，可能无法显示所有菜单。

- 如果无法完全显示菜单，请在 Windows 设置中降低屏幕分辨率。

元素	描述
菜单栏（顶部）	带有菜单命令的菜单，可用于访问所有程序功能
工具栏（顶部）	重要菜单命令图标 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 将鼠标悬停在图标上时，会显示工具提示。 ▪ 如果需要，可通过查看查看 定制 定制工具栏。
对话框（中间）	对话框可详细显示和编辑重要的程序功能 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 通过菜单命令打开窗口这些窗口在软件界面上以选项卡的形式排列。 ▪ 要解除锁定，请按住鼠标按钮并拖动标签，或在上下文菜单中选择断开停靠。 ▪ 使用重命名视图 和关闭视图 命令（在上下文菜单中）来重命名或关闭窗口。
折叠式设备面板（左侧）	三个折叠式面板： <ul style="list-style-type: none"> ▪ 仪器控制 面板可快速访问设备控制 ▪ 用于显示设备状态的 仪器状态 面板 ▪ 用于显示更多设备和软件信息的 仪器信息 面板
状态栏（底部）	显示的信息： <ul style="list-style-type: none"> ▪ 登录的用户 ▪ 设备状态 ▪ 日期和时间 ▪ 非活动时间后自动退出前的剩余时间 ▪ 数据库中的数据量（MiB）或 CDM 服务器地址 ▪ 软件版本

菜单命令是否激活取决于用户的访问权限。您可以在程序 | 用户管理 中设置访问权限。

另见

定制工具栏 [▶ 120]

4.1 菜单栏

菜单栏中的菜单集中了主要的程序功能。许多菜单命令会打开对话框，以便详细显示和编辑附加功能。

菜单	菜单功能
程序	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 进行整个系统范围的设置，如语言 ▪ 创建和管理用户 ▪ 更改用户或在自动退出后重新登录 ▪ 锁定软件，防止非法访问 ▪ 更改密码 ▪ 查看审计追踪并在审计追踪中添加手动条目（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）

菜单	菜单功能
	<ul style="list-style-type: none"> 退出软件
方法	管理方法和创建新方法
测量	<ul style="list-style-type: none"> 创建用于测量样品、校准、空白、日系数、QC 标准和系统适用性测试的序列（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）并开始测量 管理已保存序列
校准	查看和编辑执行的校准
结果详情	<ul style="list-style-type: none"> 管理结果表并加载选定的结果表，以查看和编辑测量结果 查看系统适用性测试 (SST) 结果（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）
仪器	<ul style="list-style-type: none"> 初始化设备，将其切换至待机或关闭 在测量暂停时关闭并重新打开气流 调整自动进样器 创建和管理设备配置 在测量序列之外手动控制设备，例如为设备维护做准备 在咨询客户服务部门后，对设备组件中的控制阀和组件进行单独测试，并为检测器检索特定于传感器的数据。
查看	<ul style="list-style-type: none"> 排列对话框 定制工具栏 打开服务模式（受密码保护）
帮助	<ul style="list-style-type: none"> 打开软件帮助 通过电子邮件联系客户服务 管理软件模块的许可证 查看软件版本、版权信息和联系方式 打开包含日志文件的文件夹，进行错误分析




4.2 工具栏

常用菜单命令的图标被安排在工具栏中，作为扩展菜单导航。将鼠标悬停在图标上时，会显示工具提示。

点击图标可打开一个对话框，详细显示和编辑更多程序功能。

您可以通过 **查看 | 定制** 来定制工具栏。

工具栏布局

图标	选择菜单命令	描述
	设置	打开软件设置窗口。
	固体进样器原始位置	对于自动固体测量，移动固体自动进样器的舟传送带，让样品舟填充第一个位置。
	固体进样器下个位置	继续移动舟传送带，用固体样品填充更多位置。

4.3 设备面板

您可以通过左侧的三个折叠面板控制设备、查看设备状态和设备信息。

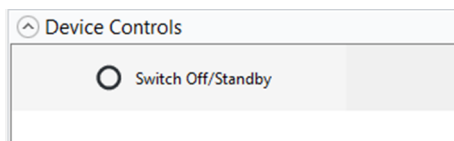


图 27 仪器控制 面板

面板	描述
仪器控制	通过按钮控制设备 <ul style="list-style-type: none"> 初始化仪器：初始化设备 仪器待机或关闭：将设备切换到待机状态或关闭设备

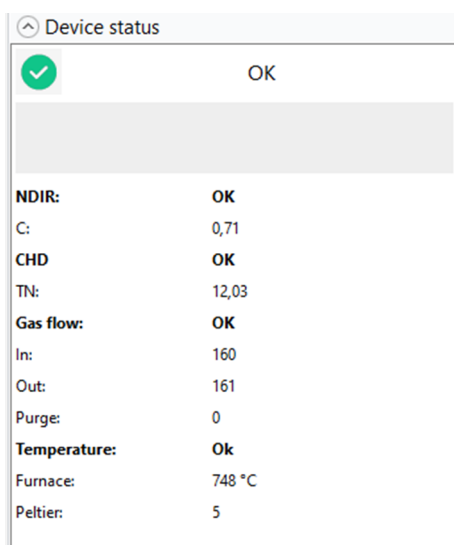


图 28 仪器状态 面板

面板	描述
仪器状态	检测运行准备状态和状态错误 查看各个组件的当前状态： <ul style="list-style-type: none"> 检测模块 (NDIR、CLD、ChD) 气流 (输入、输出、吹扫) 温度 (炉、Peltier 冷却) UV 灯的状态 (适用于具有 UV 氧化功能的设备)

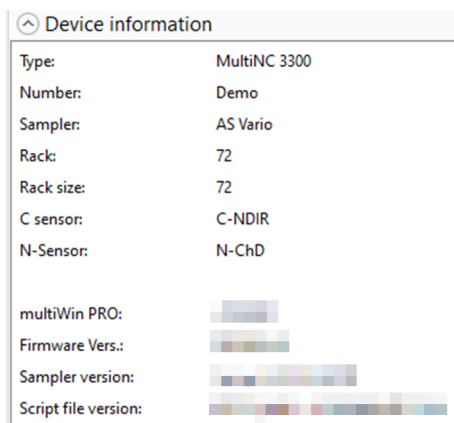


图 29 仪器信息 面板

面板	描述
仪器信息	查看有关设备、连接配件、软件和固件版本的信息 提示：准备好信息，以便在需要维修时提供给客户服务部门！

4.4 对话框

使用菜单栏或工具栏中的菜单命令打开对话框。这些窗口在软件界面上以选项卡的形式排列。

- 要解除锁定，请按住鼠标按钮并拖动标签，双击或在右键菜单中选择**断开停靠**。
- 使用**关闭视图**（在上下文菜单中）关闭窗口。
- 使用**重命名视图** 重命名窗口。

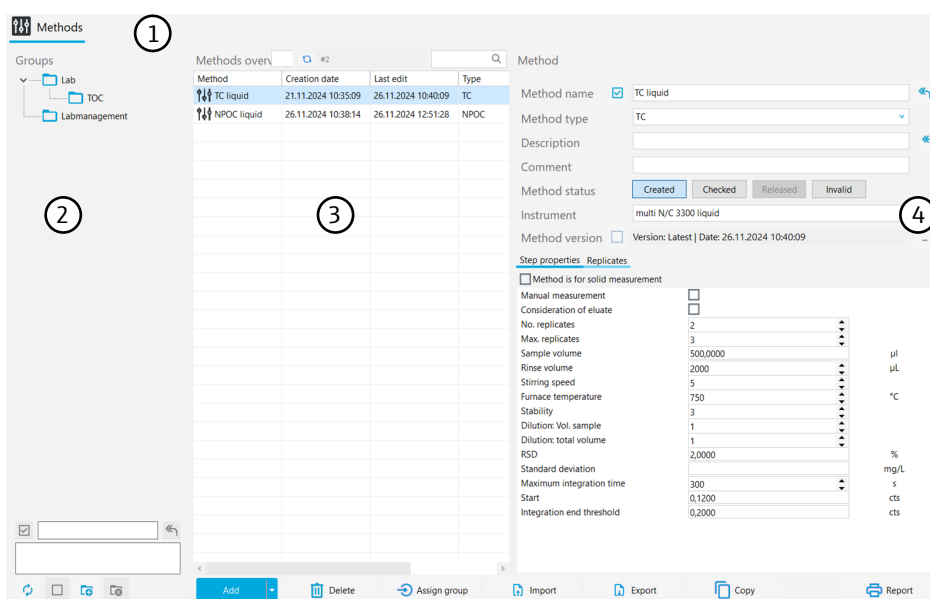


图 30 方法 对话框

方法、序列、校准、结果表和 SSTs 具有类似的结构。这些窗口用于管理方法、序列、校准和结果表。

面积	描述
标签栏 (1)	打开窗口的选项卡
组管理 (2)	利用目录结构进行组管理
表格概览 (3)	方法、序列、校准和结果表管理，带搜索功能
详细视图 (4)	带编辑选项的选定要素详细视图

您可以更改区域和列的宽度。

- ▶ 将鼠标光标放在边界上，使 图标显示出来。
- ▶ 将区域或列拖动到所需宽度。

表格概览

表格概览显示所有已保存的内容（方法、序列、校准、结果表）。

- 如果在**群组** 区域选择一个组，表格概览只会显示该组的要素。点击 或 图标，就可以显示所有要素，与目录结构无关。
- 您可以在搜索栏（带 图标）中输入搜索条件，搜索表格概览。

表格概览包括以下信息：

- 要素名称（方法、序列、校准、结果表、SST 报告）



- 创建和最后更改日期
- 更多特定要素的信息，如校准测量参数（TC、NPOC、TN 等）

您可以使用按钮在表格概览中创建新要素。您可以对要素进行分组、导入、导出或删除（仅限标准软件）。您不能编辑表格中的要素。

详细视图

详细视图显示概览中所选要素的详细信息。您可以在详细视图中编辑要素。

按钮

按钮	描述
添加	添加新要素
加载	在序列窗口和结果表 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 加载已保存的序列以便进一步处理 ▪ 加载结果表，用于查看和编辑测量结果
删除	从表格中删除选定要素（标准软件）
存档	以后：对数据库中的要素进行存档（与 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块一起使用），该功能目前仍处于灰色状态
分配组	通过选择组窗口将所选要素分配到组中
导入	以 .XML 文件格式导入要素
导出	导出选定要素 默认导出文件夹： <i>C:/ProgramData/Analytik-Jena/MultiWinPro/export</i> 文件格式：.XML，也用于结果 .CSV
复制	在方法窗口中复制选定的方法
报告	在方法、校准和 SSTs 窗口中，为选定要素生成报告
	继续加载要素，例如在更新时（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）
	取消加载要素（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）

另见

- ▣ 方法窗口 [▶ 53]
- ▣ 序列窗口 [▶ 70]
- ▣ 校准窗口 [▶ 96]
- ▣ 结果表窗口 [▶ 100]

4.5 搜索和过滤器

搜索


您可以在对话框中搜索表格概览。

- ▶ 在表格概览上方的搜索栏中输入搜索词。
 - ✓ 软件限制显示点击次数。
- ▶ 删除搜索词以显示完整概览。

过滤

您可以根据各种标准过滤方法和结果。

利用可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块，您还可以根据校准和系统适用性测试 (SST) 的签署状态对其进行过滤。

- ▶ 要过滤结果，请单击对话框中表格概览上方的  图标。
- ▶ 从下拉菜单中选择过滤标准。

- ▶ 在下拉菜单中，在**按时间筛选** 旁边的日历中指定所需的时间段。
 - ✓ 软件限制显示点击次数。
- ▶ 通过删除过滤条件或选择**全部** 或输入 +，删除单个过滤器。

另见

- 📖 方法 窗口 [▶ 53]
- 📖 结果表 窗口 [▶ 101]

4.6 分组组织

您可以分组整理方法、序列、校准、结果表和 SST 报告。为此，可以创建一个包含组和子组的目录结构。所有窗口都使用相同的目录结构。

删除组

您可以在标准软件中删除组。



注意

数据丢失的风险

删除组时，标准软件会删除组中包含的所有子组、方法、序列、校准和测量结果。

- 软件会显示安全警告，以防止无意中丢失数据。
- 删除组之前，请检查所有窗口的内容。

如果不想删除数据，而是想将其存档，可以创建一个名为“存档”的组。将不再需要的数据移至“存档”组。

在 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块中，数据受到保护，不会被删除。因此，您只能删除不包含任何数据的空组。

群组 区域

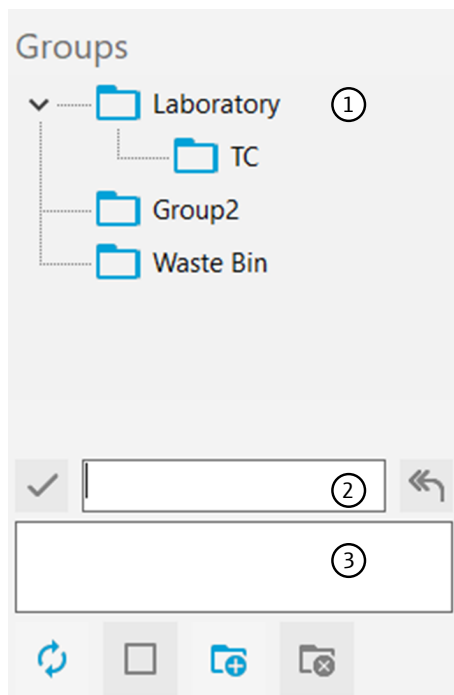







图 31 群组 区域

要素	描述
目录结构 (1)	点击  图标展开或折叠目录树
组名输入字段 (2)	定义组名
评论输入字段 (3)	为组输入评论

图标



图标	描述
	保存条目
	重置条目
	刷新视图
	清除组选择 或者，点击灰色区域取消选择该组。
	添加组
	删除组及所有子组和包含的要素 标准软件中的确认提示可防止数据意外丢失。

创建新组

- ▶ 创建一个新的主组：
 - 确保没有预选的组。要清除任何选择，请单击  图标或单击灰色区域。
- ▶ 创建新的子组：
 - 选择目录结构中的主组。
 - ✓ 选中的组会用  图标标出。
- ▶ 单击  图标以创建新组。默认名称为：“组 + 编号”。
- ▶ 在输入字段中更改组名。（可选）添加评论。
- ▶ 单击  图标保存条目。
 - ✓ 您已在所需的目录结构级别创建了一个新组。

分组组织

您可以将方法、序列、校准、结果表、系统适用性测试 (SST) 和设备配置分组，以便更好地概览。

- ▶ 在创建新要素之前，用  图标或单击灰色区域清除 **群组** 区域中的选择。（如果预选了组，起初将无法在概览中看到新要素）。
- ▶ 从概览表中选择一个要素。
- ▶ 单击 **分配组**。
- ▶ 在 **选择组** 窗口中，浏览到目录结构中需要的组。
 - ✓ 所选组别会以  图标标出，并显示在输入框中。
- ▶ 用 **确定** 确认分配。
 - i** 注意！将要素分配到组时，软件会删除要素的签署状态。
 - ✓ 软件会将要素分配到选定的组中。

5 程序菜单

您可以在程序菜单中定义整个系统的设置。

在程序菜单中

- 使用**设置**菜单命令打开**软件设置**窗口，在此可以定义语言、默认设置和导出路径。
- 按**用户管理**打开用户管理。
- 按**更改用户**更改用户。避免在测量运行时更换用户，因为新用户将成为测量的创建者。
- 按**锁定用户**可锁定要处理的程序。您必须重新登录才能继续处理。
- 使用**修改密码**更改密码。
- 使用FDA 21 CFR Part 11 Compliance模块，使用**显示审计跟踪**菜单命令打开审计追踪，记录重要事件和错误。按**手动添加审计跟踪条目**可在审计线索中添加手动条目。
- 按**关闭**退出软件。

5.1 配置软件设置

您可以在**软件设置**窗口中定义语言等整个系统的设置。

请通过菜单命令**程序 | 设置**打开**软件设置**窗口。

- 大多数整个系统的设置都在**常见**选项卡上配置。
- 使用**单位和精度**选项卡定义结果输出的尺寸。
- 在**存储、导出和报告**选项卡上，可以定义方法、结果和序列的导出目录。您可以为CSV导出和CSV导入定义数据字段和分隔符。您可以激活测量结果的自动导出功能，并在测量结束时生成报告。

常见选项卡

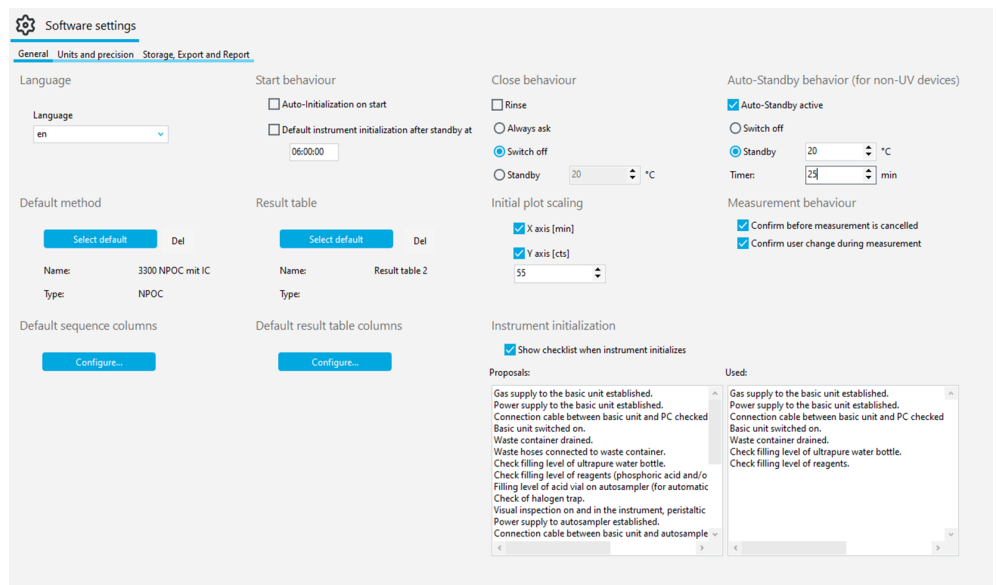


图 32 软件设置窗口、常见选项卡

面积	描述
语言	从下拉菜单中选择软件界面语言 更改语言后，单击 重新启动应用程序 重新启动软件，以便应用新语言
开始行为	定义软件启动时设备的行为

面积	描述
	<p>启动时自动初始化 在软件启动时自动初始化设备并激活默认设备配置</p> <p>待机后的默认仪器初始化： 设置一天中自动初始化设备的时间，例如早上 07:00:00 开始工作前不久。分析系统必须事先处于待机状态。 自动设备初始化每天只能进行一次。</p>
关闭行为	<p>定义关闭软件时的行为</p> <p>反向冲洗 第一步冲洗样品通路</p> <p>始终询问 退出软件时始终显示提示</p> <p>关闭 退出软件时关闭分析系统</p> <p>待机 待机退出软件时将分析系统切换到待机状态 设置待机温度</p>
自动待机行为 (适用于非紫外线设备)	<p>设置非活动时间后自动待机或关机的例行程序 自动待机处于激活状态 启用自动待机/关机</p> <p>关闭 非活动时关闭分析系统</p> <p>待机 当分析系统不活动时将其切换到待机状态 设置待机温度</p> <p>使用次数 设置不活动的持续时间 (分钟)，之后软件会自动将分析系统切换到待机状态或关闭。 软件不会将正在进行的测量算作非活动时间。</p>
默认方法	<p>点击选择默认，选择程序启动时加载的默认方法</p> <p>点击c (按钮旁边) 清除预设方法</p> <p>软件会在名称：和类型：中显示方法名称和方法类型。</p>
结果表	<p>单击选择默认 并选择默认结果表</p> <p>点击c (按钮旁边) 清除预设结果表</p> <p>如果不在序列中选择其他结果表，软件会自动将测量结果保存在默认结果表中。</p>
初始绘图缩放	<p>设置显示当前测量曲线</p> <p>X 轴 [min] 在测量开始时激活 X 轴缩放功能</p> <p>Y 轴 [cts] 设置测量开始时 Y 轴的缩放比例 如果数值太小，软件会在测量开始时显示很大的基线噪音。 如果该值太高，则无法检测到信号。</p>
测量行为	<p>指定如果测量中止或用户在测量过程中更改，软件是否显示确认提示</p> <p>取消测量前确认 在取消测量时显示确认提示</p> <p>在测量过程中确认用户更改 如果用户在测量过程中更改，则显示确认提示</p>
预设序列列	<p>点击 配置之后，设置序列列表的布局</p>
预设结果表列	<p>点击 配置后，设置结果表格的布局</p>

面积	描述
仪器初始化	<p>激活和设计检查清单，为设备启动提供检查点</p> <p>仪器初始化时显示检查清单</p> <p>激活检查表，软件启动时可逐个处理和确认检查点</p> <p>建议：列表框 带有建议的清单</p> <p>已使用：列表框 带检查点的检查列表</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ 使用复制和粘贴从建议：列表框中转移检查点 ▪ 或：在列表框中输入检查点，以创建自己的检查点 ▪ 或：从列表框中删除检查点



注意

只有定义了默认方法，才能成功进行分析系统的初始化。

- 点击**软件设置**窗口中的**选择默认**，选择默认方法。

另见

- ▣ 自定义序列列表 [▶ 69]
- ▣ 自定义概述 [▶ 102]

5.1.1 定义关闭软件时的行为

在**程序|设置**中，您可以定义软件关闭时分析系统的行为方式。您可以在关机或待机选项之间选择。

配置

- ▶ 选择**程序|设置**菜单选项。
- ▶ 定义在**关闭行为**状态下关闭分析系统的例行程序。
- ▶ 勾选**反向冲洗**复选框，以便在关闭或待机前冲洗样品通路。
- ▶ 通过单选按钮选择一个选项：
 - **始终询问**：软件关闭时会显示提示。
 - **关闭**：关闭软件时，关闭分析系统。
 - **待机**：软件关闭后，将分析系统切换到待机状态。
对于具有高温氧化功能的型号，以(°C)为单位设置待机温度。
- ▶ 如果分析系统应自动切换到待机状态或在非活动时间后关闭，请勾选**自动待机行为(适用于非紫外线设备)**中的**自动待机处于激活状态**复选框。
- ▶ 通过单选按钮选择一个选项：
 - **关闭**：非活动时关闭分析系统。
 - **待机**：非活动时将分析系统切换到待机状态。
对于具有高温氧化功能的型号，以(°C)为单位设置待机温度。
 - 在**使用次数**中以分钟为单位设置非活动时间。
 - ✓ 您已经定义了关闭分析系统和自动待机的例行程序。

5.1.2 定义输入样本信息和输出结果的单位和小数位

在**单位和精度**选项卡上的**软件设置**窗口中，您可以为示例信息和结果输出的尺寸。这些设置适用于所有软件。

选项	描述
浓度	定义浓度的单位和小数位数
数量	定义绝对质量、体积和面积的单位和小数位数
标准差	定义标准偏差的单位和小数位数
按体积	定义体积相关单位和小数位的规格
按质量	定义质量相关单位和小数位的规格
按面积	确定与面积相关的单位和小数位的规格，例如用于检查擦拭消毒抹布的规格

在序列, 结果详情、结果概览表 和报告 区域, 您可以为序列、结果概览、结果表和报告中的结果输出配置不同的默认设置。序列 区域中的设置也适用于序列表中样本信息的输入。

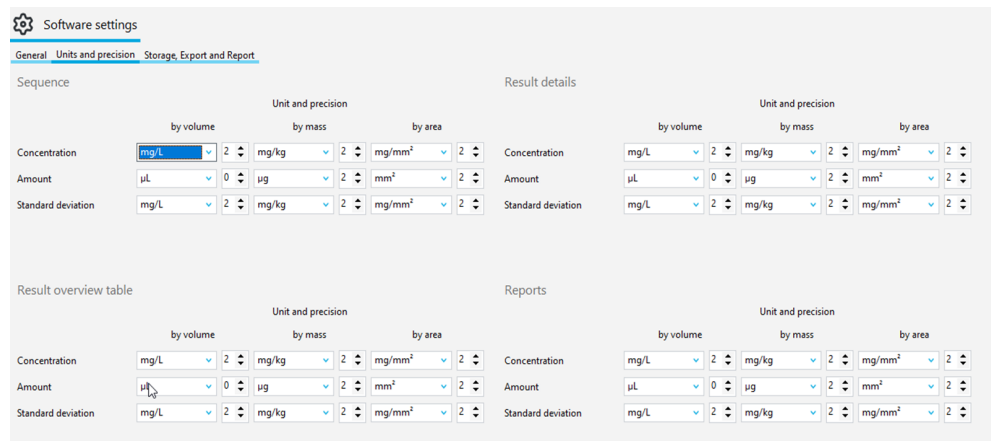


图 33 软件设置 窗口、单位和精度 选项卡

- ▶ 使用菜单命令程序 | 设置 打开软件设置 窗口, 并切换到单位和精度 选项卡。
- ▶ 在序列, 结果详情、结果概览表 和 报告 区域定义单位和小数位 :
 - 浓度的单位和小数位数
 - 绝对质量和体积的单位和小数位数
 - 标准偏差的单位和小数位数

在窗口中调整单位和小数点

您还可以调整各个窗口中的单位和小数位数。这些设置只适用于相应的窗口, 而不适用于所有软件。

自定义结果输出

您还可以在添加新序列 和结果表 窗口中调整结果输出的尺寸。

- ▶ 右键单击序列表或结果表, 打开上下文菜单。
- ▶ 从上下文菜单中选择单位 | 选择输出单元 或调整单位。
- ▶ 在单位和精度 部分更改单位和小数位数。
- ▶ 在结果表 窗口中输出结果 : 在结果详情 选项卡上, 定义结果表的单位和小数位。在结果概览表 选项卡上, 配置详细视图的设置。
- ▶ 单击确定确认您的选择。
- ▶ 单击加载默认单位按钮, 恢复之前在单位和精度 选项卡上的软件设置 窗口中定义的设置。

自定义输入样本信息

在添加新序列 窗口中, 可以使用 单位 | 选择输入单元 命令 (从上下文菜单中) 自定义在步骤属性 和步骤类型属性 属性面板中输入示例信息的单位。

- ▶ 右键单击序列表, 打开上下文菜单。
- ▶ 选择单位 | 选择输入单元 命令。

- ▶ 在单位输入 窗口中，自定义以下样品信息的单位和小数位数：
 - 浓度
 - 数量
 - 样品密度
- ▶ 要转移小数位，请激活相应的 使用数字 复选框。
- ▶ 单击确认按钮确认输入。

5.1.3 定义导出和报告设置

在存储、导出和报告 选项卡上的软件设置 窗口中，定义以下设置：

- 您可以查看并自定义存储和导出目录。
- 您可以在分析过程中定义结果的自动导出。
- 您可以在分析过程中定义报告的自动生成。
- 您可以为 CSV 导出结果和 CSV 导入序列定义数据字段。

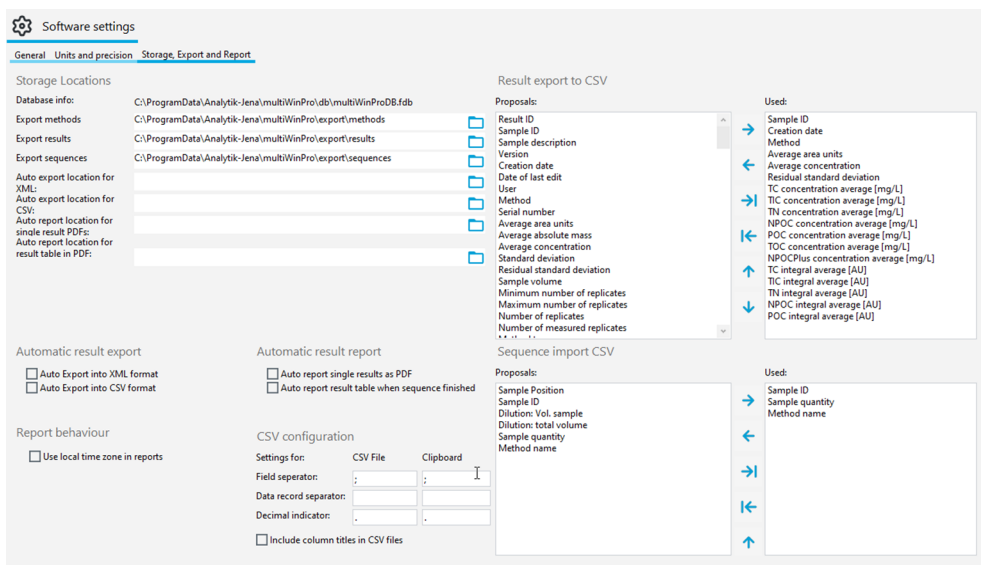


图 34 软件设置 窗口、存储、导出和报告 选项卡

面积	描述
存储位置	<p>数据库信息： 查看数据库的存储位置</p> <p>导出方法、导出结果、导出序列 查看方法、结果和序列的默认导出目录，并点击 </p> <p>XML 的自动导出位置：、CSV 的自动导出位置： 查看以 XML 和 CSV 格式自动导出结果的默认导出目录，并单击 自定义导出目录。</p> <p>单一结果 PDF 的自动报告位置：， PDF 中结果表的自动报告位置： 查看单个测量步骤或序列末尾所有测量步骤的自动生成结果报告的默认存储目录，并点击 进行自定义</p>
结果导出到 CSV	<p>定义 CSV 导出结果的数据字段</p> <p>建议： 列表框 包含可能数据字段的列表</p> <p>已使用 列表框 带有导出数据字段的列表</p>
自动导出结果	在分析过程中自动导出结果

面积	描述
	<p>自动导出为 XML 格式 以 XML 格式自动导出结果</p> <p>自动导出为 CSV 格式 以 CSV 格式自动导出结果</p>
自动结果报告	<p>在分析过程中自动生成 PDF 格式的结果报告</p> <p>自动将单个结果报告为 PDF 测量结束后，自动为每个结果生成报告</p> <p>序列完成时自动报告结果表 在处理序列后自动生成所有结果的报告</p>
序列导入 CSV	为 CSV 序列导入定义数据字段
报告行为	<p>在报告中使用时区 复选框用于在 CSV 导出和 PDF 报告中输出当地时区的时间</p>
CSV配置	<p>定义字段分隔符和小数分隔符</p> <p>CSV 文件 CSV 导出和 CSV 导入的分隔符</p> <p>剪贴板 为从剪贴板导入定义分隔符</p> <p>字段分隔符： 和 数据记录分隔符：（字段分隔符） 允许的分隔符：,;:= ~^, 空格</p> <p>要使用制表符作为列分隔符，请在输入框中输入"\t" 要使用换行符作为行分隔符，请在输入框中输入"\n"。</p> <p>十进制指示器： 允许使用的分隔符：。 ,</p> <p>如果输入了不允许的分隔符，软件会显示错误信息。</p>
复选框 在 CSV 文件中包含列标题	将数据字段名称转入 CSV 导出

CSV 导出和 CSV 导入的数据字段

数据字段（导出/导入）	描述
结果 ID	结果条目的 ID
样本 ID	样品 ID
示例描述	描述
版本	重新处理的版本数量
创建日期	测量时间
上次编辑日期	上次编辑时间
用户	测量期间登录的用户
方法名	方法名
方法	测量方法
序列号	设备序列号
数量	样品体积或样品初始重量
平均面积单位	平均积分 (AU)，无空白校正
平均绝对质量	按空白调整后的平均绝对质量 (µg)
平均浓度	平均浓度 (mg/l)，根据空白进行调整
标准差	标准偏差 (mg/l)
残差标准差	相对标准偏差 (%)
样本量	样品体积
最小平行样数	重复测量的最少次数
最大平行样数	重复测量的最大次数

数据字段 (导出/导入)	描述
平行样数量	准备重复测量或计划测量的次数
测量平行样数量	进行的测量次数
方法类型	方法类型 (TC、NPOC 等)
样品类型	样品类型
样品位置	样品盘上的位置
物理状态	样品的总体状况
稀释：体积样本	稀释比的分子
稀释：总体积	稀释比的分母
目标浓度	目标浓度
备注	备注
结果状态	签署状态
测量状态	测量成功的显示
软件版本	软件版本
固件版本	固件版本
TC 平均浓度 [mg/L] 等	各测量通道的平均浓度
COD 平均值	用 TOC 和 NPOC 方法测定的 COD (化学需氧量)
BOD5 平均值	根据 TOC 和 NPOC 方法测定的 BOD ₅ (生化需氧量)
总蛋白质平均值	根据 TN 方法测定的 TP (总蛋白) 含量
CO2 平均浓度 [ppm]	用 TIC 法测定的二氧化碳浓度
TC 积分平均值 [AU] 等	各测量通道的平均积分
TC 标准差 [mg/L] 等	各测量通道的标准偏差
TC 残差标准差 [%] 等	不同测量通道的相对标准偏差 (%)
TC 平行样 [mg/L] 等	各测量通道的单项测定浓度 软件将所有单个数值汇总在一列中，并用 分隔。
TC 平行样积分 [AU] 等	各个项目的积分 软件将所有单个数值汇总在一列中，并用 分隔。
TC 浓度重复 1 [mg/L] 等	各重复测量和测量通道的浓度
TC 积分重复 1 [AU] 等	各重复测量和测量通道的原始积分

5.1.4 建立与外部工作管理系统的数据库交换

您可以通过数据接口将测量结果以 CSV 格式导出到实验室信息管理系统 (LIMS) 或其他外部程序。

您也可以从 LIMS 或电子表格程序等外部程序手动导入 CSV 格式的序列。

您可以在 **存储、导出和报告** 选项卡上的 **软件设置** 窗口中对此进行设置。

- 在分析过程中设置自动 CSV 导出结果。
- 如果要手动导出结果，只需定义手动 CSV 导出的数据字段即可。
- 定义用于手动导入序列的数据字段。








您可以在 **存储、导出和报告** 区域 **CSV配置** 标签的 **软件设置** 窗口中定义字段分隔符和小数分隔符。

通过自动结果导出功能，软件可在每个测量步骤结束后立即创建导出文件。软件会为每个测量步骤生成单独的导出文件。软件使用结果 ID 作为文件名。


5.1.5 自动生成出口和报告

在**存储、导出和报告**选项卡上的**软件设置**窗口中，配置结果的自动导出。您还可以指定在分析过程中自动生成结果报告。

配置自动导出

- ▶ 使用菜单命令**程序|设置**打开**软件设置**窗口，并切换到**存储、导出和报告**选项卡。
- ▶ 勾选**自动导出结果**区域中的**自动导出为 XML 格式**复选框，以便在分析过程中以 XML 格式自动导出结果。
- ▶ 勾选**自动导出为 CSV 格式**复选框，以自动以 CSV 格式导出结果。
- ▶ 软件会将导出文件保存在**XML 的自动导出位置：**和**CSV 的自动导出位置：**中显示的目录中。如有需要，可点击  图标更改导出目录。
- ▶ 在**结果导出到 CSV**区域，选择用于导出 CSV 结果的数据字段。
- ▶ 选中**已使用：**列表框中的数据字段。如有需要，请更改选择：
- ▶ 选择**已使用：**列表框中的数据字段，并单击图标将其从列表框中移除：并单击  图标将其从列表框中删除。单击  可删除列表框中的所有数据字段。
- ▶ 选择**建议：**列表框中的数据字段，然后单击  以将其转移到**已使用：**列表框中。单击  接受所有数据字段。
- ▶ 单击  和  可更改**已使用：**列表框中数据字段的顺序。
- ▶ 在**CSV配置**区域定义字段分隔符和小数分隔符。
- ▶ 选中在**CSV 文件中包含列标题**复选框，这样数据字段的名称就会转移到 CSV 导出中。
- ▶ 勾选**报告行为**区域中的**在报告中使用时区**复选框，以便在 CSV 导出和 PDF 报告中输出当地时区的时间。
 - ✓ 您已设置了自动结果导出，并为 CSV 导出定义了数据字段。

自动生成报告

- ▶ 使用菜单命令**程序|设置**打开**软件设置**窗口，并切换到**存储、导出和报告**选项卡。
- ▶ 在**自动结果报告**区域中勾选**自动将单个结果报告为 PDF**复选框，即可在分析过程中为每个结果自动生成 PDF 格式的报告。
- ▶ 勾选**序列完成时自动报告结果表**复选框，可在处理序列后自动为所有结果生成 PDF 报告。
- ▶ 勾选**报告行为**区域中的**在报告中使用时区**复选框，以便在 CSV 导出和 PDF 报告中输出当地时区的时间。
- ▶ 软件会将报告保存在**单一结果 PDF 的自动报告位置：**或**PDF 中结果表的自动报告位置：**显示的目录中：如有必要，可点击  图标更改报告目录。
 - ✓ 您在分析过程中配置了自动生成结果报告。

5.1.6 为手动导入序列定义数据字段

在**存储、导出和报告**选项卡上的**软件设置**窗口中，可以定义用于手动 CSV 导入序列的数据字段。

- ▶ 使用菜单命令**程序|设置**打开**软件设置**窗口，并切换到**存储、导出和报告**选项卡。

- ▶ 在**序列导入 CSV** 区域，选择**建议**：列表框中的数据字段，然后单击 → 以将其转移到**已使用**：列表框。单击 →| 接受所有数据字段。
- ▶ 要成功导入 CSV，请传输**方法名** 数据字段。
- ▶ 要更正选择，请选择**已使用**：列表框中的数据字段，然后单击图标将其从列表框中移除：并单击 ← 图标将其从列表框中删除。单击|←可删除列表框中的所有数据字段。
- ▶ 单击 ↑ 和 ↓ 可更改**已使用**：列表框中数据字段的顺序。
- ▶ 在**CSV配置** 区域定义字段分隔符和小数分隔符。
 - ✓ 现在您已经配置了手动 CSV 序列导入的数据字段。导入后，在**序列** 窗口中加载序列，并根据需要为测量序列添加其他设置。

成功导入 CSV 的前提条件：

- CSV 文件中数据字段的名称和顺序必须与您在**软件设置, 存储、导出和报告** 选项卡中定义的数据字段一致。
- CSV 文件中的**方法名** 数据字段必须填写软件中已创建的方法名称。
- 目前，在 CSV 导入过程中，只能将液体方法测量的样品量导入序列。用于固体方法的样本量必须手动转入序列。

5.2 管理用户

用户管理在标准软件和 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块中有所不同。

另见

📖 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块中的用户管理 [▶ 123]

5.2.1 用户和用户角色

首次登录

软件安装后的首次登录会创建一个管理员，其登录信息如下：

- 用户：Admin
- 密码：Admin

首次登录后，请在**程序 | 修改密码**中更改管理员密码。

如果密码丢失，Analytik Jena将无法恢复资料。将密码保存在安全的地方。

用户管理

使用菜单命令**程序 | 用户管理** 打开用户管理。

用户管理 窗口显示所有用户和用户角色及其访问权限的概览。

作为管理员，您可以创建新用户和用户角色。您可以授予新用户角色个人访问权限。

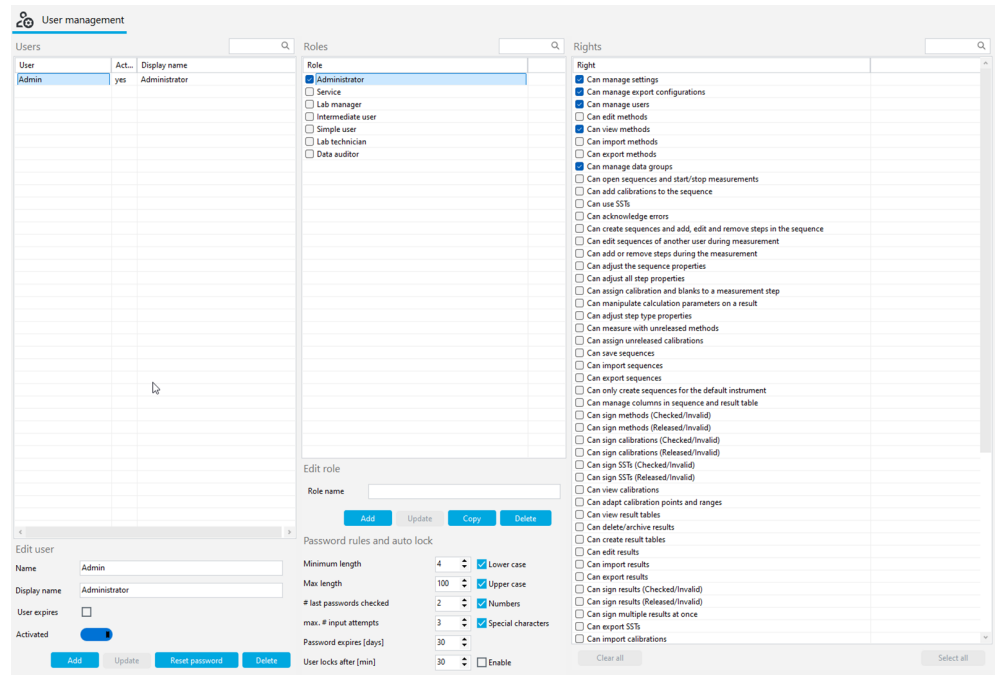


图 35 用户管理窗口

用户

在用户表中选择用户时，可以查看和编辑其用户配置文件的设置。为此，请使用编辑用户区域中的输入框、复选框和按钮。

复选框/字段/按钮	描述
名称	指定登录系统的用户名
显示名称	指定显示在状态栏、签名和报告中的用户名
用户过期	<ul style="list-style-type: none"> 如果用户有效期有限，请选中复选框 在旁边的日历中选择有效期的最后一天。日期 用户账户过期后，该用户就不能再登录系统。管理员可以重新激活用户并设置新的到期日。
激活/停用	激活后，用户可以登录软件 如果停用，用户配置文件将被锁定
用户为外部	激活后，用户可使用 LDAP 通过外部技术系统登录（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块） LDAP 是 Lightweight Directory Access Protocol（轻量级目录访问协议）的缩写。该协议允许组织存储和管理用户数据。
添加	输入用户名等信息，添加新用户。 点击添加后，软件会显示用户首次登录的初始密码。
更新	在用户表中选择现有用户并编辑字段后对其进行更新
重置密码	重置用户密码 软件会在表格下方显示新的初始密码。
清除	提示后删除用户 软件会删除用户，但不会删除其测量数据。

在用户表中选择用户后，软件会在角色表中显示为该用户分配的角色。一个用户可以有多个用户角色。这样，用户就拥有了所有这些用户角色的访问权限。

用户角色

角色表显示了用户角色概览。选择用户角色后，可以查看其访问权限。

	描述
复选框	勾选复选框，为所选用户分配用户角色

使用**编辑角色**区域中的输入框和按钮编辑用户角色。

字段/按钮	描述
添加	输入角色名称后添加新用户角色
更新	更改角色名称后更新自定义用户角色 无需保存对权限设置的更改。
复制	复制用户角色
清除	提示后删除用户角色

软件默认提供具有分级访问权限的用户角色。

- 不能更改默认用户角色的访问权限。
- 您可以为新用户角色定义个人访问权限。

用户	访问权限
管理员	<ul style="list-style-type: none"> ■ 管理员可以管理用户和访问权限。 ■ 管理员可以更改软件许可证。 ■ 管理员可以查看和导出审计追踪。 ■ 管理员可以创建组。他们建立数据存储和数据导出。 ■ 管理员无权执行测量。
服务	<ul style="list-style-type: none"> ■ 服务角色仅限于 Analytik Jena 的服务技术人员或经 Analytik Jena 授权的人员。 ■ 服务是唯一可以通过查看 维护桌面菜单项访问受密码保护的服务功能的角色。 ■ 服务角色可以广泛使用软件功能，例如，可以开始测量、查看结果和编辑结果。
实验室管理员	除用户管理和许可证管理外，实验室管理人员可广泛访问软件功能。
实验室技术员	实验室技术人员的权利介于实验室经理和实验室助理之间。
中级用户	实验室助理的权利仅限于测量操作。
简单用户	临时工作人员的访问权限小于实验室助理。
数据审计员	<ul style="list-style-type: none"> ■ 原始数据验证器在可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块中发挥着重要作用。他们可以查看、签署和评论测量方法、顺序、校准和测量结果。 ■ 原始数据验证器可以生成报告、导出数据和查看审计追踪。

另见

 [更改密码 \[► 52\]](#)

5.2.2 访问权限

软件默认提供具有分级访问权限的用户角色。

- 不能更改默认用户角色的访问权限。
- 您可以为新用户角色定义个人访问权限。

通过**用户管理**窗口中的**权利**表，可以查看分配给用户角色的访问权限。**权利**表控制所有软件功能的访问权限。

访问权限包括创建、编辑、导入/导出和批准数据。

- 配置软件设置
- 编辑设备配置和更改软件许可
- 配置数据存储、数据导入和导出
- 管理用户
- 配置管理数据的组

- 自定义序列和结果表
- 创建和编辑方法
- 创建和编辑序列并执行测量
- 创建和编辑校准
- 查看和编辑结果
- 导入和导出数据
- 使用电子签名批准数据
- 确认错误消息
- 查看审计追踪并添加手动条目（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）

您可以通过勾选复选框来激活自己用户角色的访问权限。不要求保存。访问权限适用于具有该用户角色的所有用户，从他们下次登录软件时开始生效。

读取权限只允许对数据进行只读访问。用户可以查看和使用数据，但不能编辑数据。读取权限是编辑权限的前提条件：编辑权限必须与读取权限一起分配。

某些权限限制了对某些要素的访问，例如只能为默认仪器创建序列。

如果用户没有菜单和对话框的访问权限，相关区域将不显示或显示为灰色。

您可以使用表格下方的按钮快速更改权限选择：

按钮	描述
全部清除	明确的权限选择
选择全部	选择所有权限

5.2.3 编辑用户

创建一个新用户角色

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令程序|用户管理。
- ▶ 在编辑角色中输入新角色名称。
- ▶ 在角色 区域，单击添加 保存用户角色。
- ▶ 或者，点击复制 按钮复制现有用户角色。
- ▶ 在权利 表中选择用户角色的访问权限。为此勾选此复选框。没必要保存。
 - ✓ 您已创建了一个具有自定义用户权限的新用户角色。现在可以为用户分配新的用户角色了。

创建一个新用户

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令程序|用户管理。
- ▶ 在编辑用户 区域，在名称 输入字段中输入用户名。
- ▶ 输入显示的名称。
- ▶ 如果用户有效期有限，则激活用户过期 选项。在日期 中设置他们可以登录软件的最后日期。
- ▶ 在编辑用户 区域，点击添加 保存用户。
 - ✓ 软件会在用户 表下方显示用户首次登录的初始密码。
- ▶ 选择初始密码，用 Ctrl + C 复制到剪贴板，然后转发给新用户。
- ▶ 在角色 表中为新用户选择用户角色，并通过复选框激活。
 - ✓ 您创建了一个新用户，并为该用户分配了一个用户角色。新用户被授权登录系统。

一个用户可以有多个用户角色。这样，用户就拥有了所有这些用户角色的访问权限。

建议新用户在首次登录后使用菜单命令**程序 | 修改密码**更改密码。

编辑用户设置

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令**程序 | 用户管理**。
- ▶ 在**用户**表中选择用户。
- ▶ 在**编辑用户**中自定义用户数据。
- ▶ 单击**更新**按钮保存更改。
- ▶ 如果需要，为用户分配一个新的用户角色。为此，请选中**角色**区域中的复选框。
- ▶ 对于自己的用户角色：在**角色**区域选择一个角色。更改**权利**表中的访问权限。无法编辑预定义用户角色的访问权限。
 - ✓ 您已定制用户设置。

访问权限的任何更改都会影响分配给用户角色的所有用户。

删除用户和用户角色

您可以删除未分配给任何用户的用户和自己的用户角色。

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令**程序 | 用户管理**。
- ▶ 在**用户**表中选择用户。
- ▶ 单击**删除**按钮删除用户。不能删除预定义的管理员。
- ▶ 在**角色**区域选择一个用户角色。
- ▶ 单击**删除**按钮删除用户角色。
 - ✓ 您已删除选定的用户或用户角色。

停用用户

您可以停用用户，拒绝他们访问软件。您可以稍后再解除对用户的阻止。

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令**程序 | 用户管理**。
- ▶ 在**用户**表中选择用户。
- ▶ 单击**激活**切换开关。
 - ✓ 用户已停用。
- ▶ 如果需要，再次单击切换开关重新激活用户。

重置密码

您可以重置用户密码，例如在用户忘记密码的情况下。

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令**程序 | 用户管理**。
- ▶ 在**用户**表中选择用户。
- ▶ 单击**重置密码**。
 - ✓ 软件会重置当前密码，并为首次登录生成一个新的初始密码。软件会在**用户**表下方显示密码。

5.2.4 配置密码规则和自动注销

在**用户管理**窗口中，您可以定义密码的有效性标准，并配置不活动后自动登出。

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令**程序 | 用户管理**。
- ▶ 在**密码规则和自动锁定**中设置密码条件（见表）。

- ▶ 激活**启用**选项，以便在用户非活动时自动注销。在**用户在[*min*]后锁定**中以分钟为单位设置非活动时间。
 - ✓ 新密码条件对所有新密码都有效。更改前创建的密码仍然有效。

条件	描述
最小长度	设置最小密码长度（最少 4 个字符）
最大长度	设置最大密码长度（最多 100 个字符）
上次检查的密码	定义以前使用过的密码的允许重复次数（最多 10 次）
最大输入尝试次数	定义在锁定用户配置文件前无效登录尝试的次数（最多 10 次）。 管理员可在 用户管理 中解锁锁定的用户配置文件。
密码过期[days]	设置密码失效的天数（1 至 365 天）
用户在[<i>min</i>]后锁定	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 通过复选框激活自动注销非活动用户 ▪ 定义非活动持续时间，默认设置：30 分钟（1 至 2000 分钟） 该软件可锁定屏幕，从而防止意外访问数据。测量继续进行。
小写	定义密码必须包含的字符：
大写	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 大写和小写字母
数字	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 数字
特殊字符	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 特殊字符
禁用常用密码	使用内部软件列表拒绝简单密码

5.3 更改密码

- ▶ 使用**程序 | 修改密码**菜单选项打开**修改密码**窗口。
- ▶ 在**密码**：输入字段中输入旧密码。
- ▶ 在**新密码**：中输入新密码。
- ▶ 在**确认新密码**：中重复输入新密码。
- ▶ 单击**确定**以确认输入的数据。
- ▶ 如果密码不符合**程序 | 用户管理**中定义的条件，软件会显示错误信息。必要时调整密码。
- ▶ 单击**确定**关闭窗口。
 - ✓ 您已更改密码。

6 方法菜单

定义方法中的程序设置。此设置取决于方法类型（TC、TOC、TN 等）。
在方法 菜单中创建和管理方法。

6.1 方法 窗口

请通过菜单命令方法|方法 打开方法 窗口。

在方法窗口中

- 单击**添加**按钮即可创建新方法。从下拉菜单中选择方法类型。
- 您可以在**方法**视图中编辑窗口右侧的方法设置。
- 单击**删除**按钮即可删除方法。
- 可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块可防止数据被删除。
- 在**选择组**窗口中单击**分配组**，即可将方法分组。
- 您可以使用**导入**和**导出**导出方法。
- 单击**复制**可复制选定的方法，将其作为新方法的模板。
- 单击**报告**打开打印预览。在这里，您可以打印方法报告或将其保存为 PDF 格式。

窗口布局

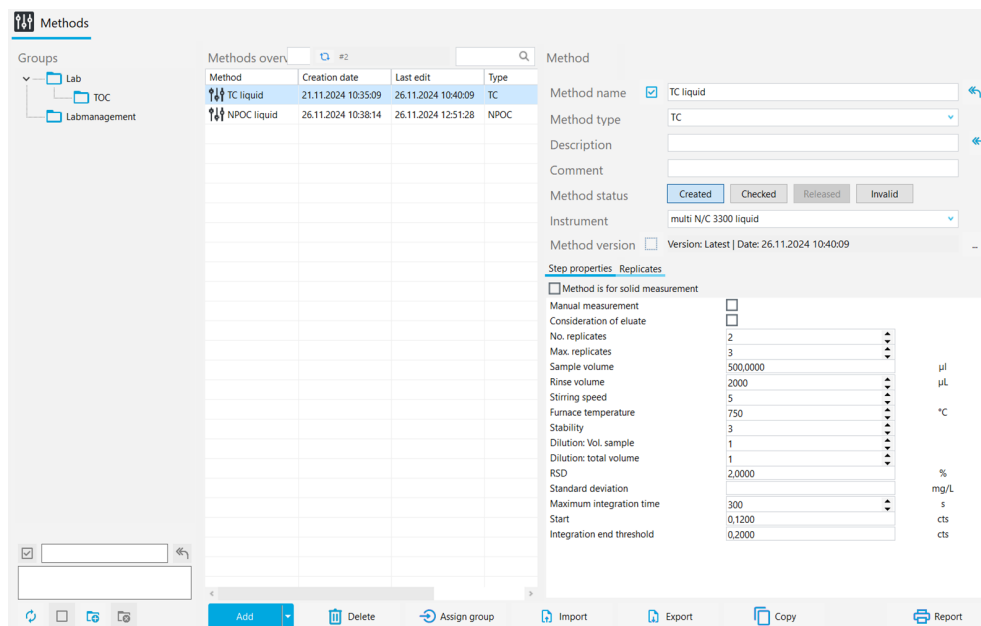


图 36 方法窗口

面积	描述
群组 (左)	管理组
方法概述 (中)	已创建方法一览表 <ul style="list-style-type: none"> ■ 方法名 ■ 创建和最后更改日期 ■ 方法类型和测量通道, 例如: 类型: NPOCTN, 参数: NPOC, TN 类型: TOC, 参数: TC、IC、TOC ■ 方法的签署状态
方法 (右)	所选方法的详细视图, 包括可编辑的方法参数、将校准链接到方法的选项和签署状态信息

电子签名是可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块的重要组成部分。您可以通过签名和相应的权利分配来限制使用未经批准的数据。签名时，必须输入用户名和密码。

在标准软件中，您可以设置数据的状态，例如**审核**。但是，您不能为数据添加电子签名。**签名** 选项卡仍为空。数据状态不受限制。这意味着，即使是被屏蔽的数据也可以使用。

另见

■ 电子签名 [▶ 132]

■ 分组组织 [▶ 37]

6.2 可编辑的方法参数


您可以在方法窗口中创建和编辑方法。

在方法视图中，您可以在规定的范围内调整所选方法的方法参数，以适应您的测量任务。软件中的预设值为大多数测量提供了良好的结果。

一般方法设置

您可以在详细视图的第一行定义一般方法设置。使用方法名输入框旁边的 按钮保存更改。

参数	描述
方法名	定义方法名称
方法类型	更改方法类型 <ul style="list-style-type: none"> ■ TC：测定样品的总碳含量 ■ TIC：测定碳酸盐和碳酸氢盐中的无机碳总量以及游离二氧化碳含量 ■ TN：测定铵盐、亚硝酸盐/硝酸盐、氨基酸、蛋白质等中的总结合氮。 ■ NPOC：测定不可净化的有机碳 如果样品中含有易净化的有机物质，请勿使用此方法，因为这些物质会被CO₂吹扫。 ■ NPOC plus：确定 TIC 含量高或游离二氧化碳含量高的样品中 TOC 含量低的情况 ■ TOC: 根据微分法测定样品中含有的总有机碳 如果样品中含有苯、环己烷、氯仿等易吹扫的有机物质，请使用微分法。如果样品的 TIC 含量明显高于 TOC 含量，则不要使用微分法。 ■ POC：确定可吹扫的有机碳总量（并非所有分析仪都能提供此功能） 您可以在方法中组合确定多个参数：TOC-TN、TC-TN、NPOC-TN 或 NPOC plus-TN。
描述	输入描述和评论
备注	
方法状态	<ul style="list-style-type: none"> ■ 查看方法的签署状态 ■ 测试后逐步释放或阻止方法 仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块：在 签名 选项卡上查看有关签名的详细信息。
仪器	根据需要为设备配置指定方法 软件会自动将方法分配给活动设备配置。

参数	描述
方法版本	方法的版本 无论何时编辑方法，软件都会创建一个新版本。 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 点击...图标，然后浏览版本 ▪ 点击  图标返回上一版本

步骤属性 选项卡

参数	描述
方法用于固体测量	通过复选框激活 TC 和 IC 方法的固体测量 该软件会相应地调整方法参数。
手动测量	通过复选框激活手动样品应用
洗脱液的因素	使用洗脱样品复选框指定软件考虑洗脱空白值
平行样数量	设置重复测量同一样品容器的最少和最多次数
最大平行样数量	如果输入的最小值和最大值不同，软件会根据相对标准偏差或绝对标准偏差下指定的标准自动选择离群值。
样本量	选择测量液体样品的样品容量
冲洗量	选择冲洗量，用样品冲洗样品通路
搅拌速度	分段设置搅拌强度（仅适用于使用自动进样器进样的情况）
炉体温度	选择炉温（仅适用于具有高温氧化功能的分析仪） 建议温度： <ul style="list-style-type: none"> ▪ 铂催化剂 Pt (Al₂O₃) : 750 °C, 用于含盐量较高的样品：720 ... 750 °C，使用盐试剂盒： 680 °C ▪ 特殊催化剂 (CeO₂) : 850 °C ▪ 固体模块 HT 1300: 900 ... 1300 °C
稀释：体积样本	输入稀释比例
稀释：总体积	指定稀释比例： <ul style="list-style-type: none"> ▪ 原始样品的份数（稀释：体积样本）与总份数（稀释：总体积）之比（例如，1/10 表示 10 ml 总体积中含有 1 ml 原始样品） ▪ 1 比 1 的稀释度表示样品未被稀释。
单位参考	对于固体测量，请从下拉菜单中选择体积相关单位、质量相关单位或面积相关单位 根据选择，平行样选项卡上的输入字段会发生变化。
RSD 标准差	指定相对或绝对标准偏差作为重复测量的终止标准 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 如果在最低测定次数后仍未达到规定的标准偏差，分析仪将不再进行任何测定。 ▪ 如果超过规定值，分析仪将从同一样品容器中进行进一步测量，直至达到最大测定次数。 您可以为每个测量通道分别定义标准。
稳定性	指定用于确定积分结束的例程中应包含的测量值个数 默认值经过优化，适用于所有方法类型。 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 如果增加稳定值，就能非常确定地得出正确的积分终点，但分析时间会更长。 ▪ 如果降低稳定性值，就能更快地结束整合，但有些内容可能无法识别。
最大积分时间	指定最大积分时间作为终止积分的标准 最长积分时间是从积分开始到积分结束的时间。如果其他标准均未终止整合，则将其作为终止标准。 所需的整合时间取决于样品中的碳和氮含量。

参数	描述
	<ul style="list-style-type: none"> 根据预期浓度调整积分时间。 积分时间不要设置得太长，否则分析时间会很长。
启动	<p>设置积分开始时与基线的距离</p> <p>当测量值超过起始值时，积分开始。默认值为优化值。</p> <ul style="list-style-type: none"> 如果浓度较低，可稍稍降低起始值。但是，如果选择的值过低，就会导致基线噪声被识别出来。 如果选择的值过高，可能无法检测到低测量峰值。
积分结束阈值	<p>设置积分结束时与基线的距离</p> <p>当测量值低于该值时，积分结束。默认值为优化值。</p> <ul style="list-style-type: none"> 数值太小会延长分析时间。 过高的数值会使积分过早结束。某些内容可能无法被识别。
添加试剂	<p>使用复选框指定将过硫酸钠注入 UV 反应器（仅适用于带有 UV 氧化功能的分析仪）。</p> <p>如果 TOC 浓度大于 1 mg/l，则激活选项</p>
自动酸化	<p>通过自动进样器自动酸化样品（仅适用于 NPOC 方法）</p> <p>如果激活，自动进样器将从自动进样器上的酸容器中取酸并酸化样品（并非所有自动进样器都这样做）。</p>
带有 TIC 控制	<p>指定在吹扫后立即确定 TIC 作为对照（仅适用于 NPOC 方法）</p> <p>TIC 控制装置检查 TIC 是否已完全清除。测定的值不包括在测量结果中。</p>
吹扫时间 1	指定在首次 NPOC 测定前吹扫样品的时间
吹扫时间 2	第二次吹扫时间是在重复测量之间，只能在手动模式或使用自动进样器进行非平行吹扫时执行。
COD 计算已激活	<p>对于 TOC 和 NPOC 方法，根据 TOC/NPOC 激活 COD（化学需氧量）的计算。</p> <p>公式：$c(\text{CSB}) = A \times c(\text{TOC}) + B$</p>
COD 换算系数 A	指定斜率 (A) 和截距 (B) 用于计算 COD，默认设置为：
COD 抵消量 B	A = 3.000, B = 0.000
BOD ₅ 计算已激活	<p>对于 TOC 和 NPOC 方法，根据 TOC/NPOC，启动 BOD₅（生化需氧量）的计算。</p> <p>公式：$c(\text{BOD}_5) = C \times c(\text{TOC}) + D$</p>
BOD ₅ 转换系数 C	定义上升 (C) 和截距 (D) 来计算 BOD ₅ ，默认设置为：
BOD ₅ 偏移量 D	C = 3.000, D = 0.000
CO ₂ 计算已激活	<p>对于 TIC 方法和液体样品，您可以激活基于 TIC 的二氧化碳浓度计算</p> <p>公式：$c(\text{CO}_2) = 2.833 \times c(\text{TIC})$</p>
总蛋白质转化活性	<p>对于 TN 方法，激活基于 TN 的总蛋白质含量计算</p> <p>公式：$c(\text{总蛋白质}) = A \times c(\text{TN})$</p>
总蛋白质转化系数 A	将计算总蛋白质含量的系数设置为 0 到 10 之间，默认设置为： A = 6.250（对比物质：BSA—牛血清白蛋白）

自动固体分析

参数	描述
炉孔位置	固体模块炉中的固定点，用于向自动进样器的船只进料
保温时间	第一炉位置等待时间
炉进料速度	舟进样的进料速度（通过炉孔位置后）

积分条件

软件会在每次测量前确定基线。以下参数定义了积分条件：**稳定性, 最大积分时间, 启动 和积分结束阈值**。您可以分别定义碳和氮的积分条件。默认积分条件已经优化。

i 注意！如果大幅更改积分条件，会导致测量结果失真。

平行样 选项卡

参数	描述
冲洗周期数	指定样品使用前的冲洗次数 每次重复测量前，自动进样器都会用样品冲洗样品通路 x 次。
吹扫	对于 NPOC 测量，在重复测量前激活或关闭吹出样品功能 只有在手动模式下或使用自动进样器进行非平行吹出时，才能对样品进行额外的第二次吹出。
样品质量	确定固体测量的样品质量，适用于与活性炭吸附空气污染物的样品质量相同的固体测量
样品面积	选择以面积为单位时，请输入样本面积，例如，这对检查用于擦拭消毒的抹布非常有用。擦拭消毒时，请在此处输入擦拭表面的尺寸。
样品密度 样本量	选择与体积相关的单位时，请输入固体样本的密度和体积，这对检测高粘度油类等非常有用
样品位置	确定重复测量固体的样品位置

关联校准曲线 选项卡

在 **关联校准曲线** 标签上，可以将校准与方法关联。

软件使用链接校准法对测量样品、日常因子和 QC 标准进行分析。

元素	描述
按钮 删除默认校准	点击箭头后，选择测量通道，并从方法中删除校准链接
带下拉菜单的测量通道	从一个或多个测量通道的下拉菜单中选择校准，并将校准与测量方法关联起来 软件会将与方法类型不匹配的测量通道变灰。 通过 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块，您只需将已获批准的校准与方法相关联。

6.3 创建新方法

- ▶ 使用方法 | 方法菜单选项打开方法窗口。
- ▶ 点击**添加**按钮旁边的箭头。从下拉菜单中选择方法类型。
 - ✓ 软件会创建一个新方法。该方法使用默认名称：方法 + 时间戳。
- ▶ 点击**添加**后，软件会创建一个 TC 方法（默认设置）。
- ▶ 在**方法概述**表中选择方法。
- ▶ 在**方法**区域编辑方法设置。
- ▶ 如有必要，请在**方法类型**中再次调整方法类型。
- ▶ 软件会自动将方法分配给活动设备配置。如有必要，可通过设备配置旁边的下拉菜单将方法分配给不同的仪器。
- ▶ 选中**方法用于固体测量**复选框。方法参数也会相应调整。TC 和 TIC 可采用固体方法。

- ▶ 更改方法名下的方法名称。
建议：如果为不同的设备配置创建方法，请在方法名称中添加设备配置的缩写。
- ▶ 可选择输入该方法的描述和注释。
- ▶ 在步骤属性选项卡上的定义范围内自定义测量任务的方法参数。预设值为大多数测量提供了良好的结果。
- ▶ 在平行样选项卡上，指定自动取样器在重复测量前是否以及多长时间用样品冲洗样品路径。
对于 NPOC 方法，指定在重复测量前是否再次冲洗样品。分析系统只能在手动模式下或与自动进样器非并行吹扫模式下再次吹扫样品。
- ▶ 如果需要，在关联校准曲线标签上将一个或多个校准与方法相关联。
- ▶ 单击 按钮保存方法。
✓ 您创建了一个新方法。

6.4 编辑方法

- ▶ 使用方法 | 方法菜单选项打开方法窗口。
- ▶ 在方法概述表中选择方法。
- ▶ 如有必要，请更改方法类型中的方法类型。如果更改了方法类型，参数选择将根据方法类型进行调整。
- ▶ 在方法区域编辑方法设置。
- ▶ 单击 按钮保存方法。
✓ 保存时会创建新版本的方法。已编辑的方法将与修改日期一起保存。

点击方法版本中...的图标，即可浏览方法版本。点击 图标返回当前版本。

6.5 将校准与方法关联起来

该分析系统可长期提供可重复的结果。因此，该软件可让您选择将一个或多个定标与一种方法相关联。

通过 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块，您只需将已获批准的校准与方法相关联。

- ▶ 使用方法 | 方法菜单选项打开方法窗口。
- ▶ 创建新方法或编辑现有方法。
- ▶ 在方法概述表中选择方法。
- ▶ 在方法区域中，切换到关联校准曲线选项卡。
- ▶ 选择一个或多个测量通道。
软件会将与方法类型不匹配的测量通道变灰。
- ▶ 从下拉菜单中为测量通道选择已经测量过的校准。
- ▶ 单击 按钮保存方法。
✓ 校准与方法关联。该软件使用相关联的校准来评估使用该方法测量的所有样品、日常因子和 QC 标准。

创建序列时，无需为每个测量步骤指定校准。不过，在步骤属性面板中的序列中，您可以选择为测量步骤手动指定不同的校准。

如果未将校准与方法相关联或未按顺序分配测量步骤，软件将使用存储在设备参数中的设备标准校准。您可以在 **步骤属性** 面板上 **校准** 标签的 **添加新序列** 窗口中查看标准校准的校准系数。

6.6 复制方法

您可以将各种方法作为开发新方法的模板。为此，请创建一个方法副本。

- ▶ 使用方法 | 方法菜单选项打开方法窗口。
- ▶ 在 **方法概述** 表中选择方法。
- ▶ 单击 **复制**。
 - ✓ 软件会复制该方法。新方法使用默认名称：方法 + 时间戳。
- ▶ 在 **方法概述** 表中选择方法。
- ▶ 更改方法名下的方法名称。
建议：如果为不同的设备配置创建方法，请在方法名称中添加设备配置的缩写。
- ▶ 在 **方法** 区域编辑方法设置。
- ▶ 单击 按钮保存方法。
 - ✓ 您在现有方法的基础上创建了一个新方法。

6.7 导入或导出方法

导入方法

导入 XML 格式的方法如下：

- ▶ 使用方法 | 方法菜单选项打开方法窗口。
- ▶ 单击 **导入** 按钮。
- ▶ 在 Windows 文件管理器的打开窗口中选择方法。
- ▶ 单击 **打开**。
 - ✓ 软件导入方法。如果已经存在同名方法，软件会提示您输入新名称。

导出方法

导出 XML 格式的方法如下：

- ▶ 使用方法 | 方法菜单选项打开方法窗口。
- ▶ 在 **方法概述** 表中选择方法。
- ▶ 单击 **导出**。
- ▶ 在 **另存为** 窗口中选择存储位置。默认导出文件夹：
C:/ProgramData/Analytik Jena/multiWinPro/export/methods.
- ▶ 根据需要更改文件名，然后单击 **保存**。
 - ✓ 软件导出方法。

6.8 打印和保存方法报告

打印报告

- ▶ 使用方法 | 方法菜单选项打开方法窗口。
- ▶ 在 **方法概述** 表中选择方法。

- ▶ 单击**报告** 打开打印预览。
- ▶ 为了更好地概览，请单击**页面概述** 按钮，在报告左侧显示带有页面摘要的导航区。单击**放大** 和**缩小** 可放大或缩小视图。
- ▶ 在报告中添加公司徽标。单击**报告徽标** 区域中的**加载** 按钮，然后在 Windows 文件管理器中选择徽标，并用**打开** 将其加载到报告中。
- ▶ 单击**打印机选项** 设置打印机。
- ▶ 单击**页面设置** 可配置页面设置，如纸张大小或方向。默认：A4，肖像。将布局应用于当前页面或所有报告页面。
- ▶ 单击**打印** 开始打印。

保存报告

- ▶ 使用**方法 | 方法菜单选项** 打开方法窗口。
- ▶ 在**方法概述** 表中选择方法。
- ▶ 单击**报告** 按钮打开打印预览。
- ▶ 单击**保存**，然后在**另存为** 窗口中指定文件名、存储目录和文件类型。
- ▶ 单击 **保存** 按钮保存报告。

您可以用以下文件格式保存报告：PDF（默认）、RTF、HTML、TXT、FP3。
编辑方法时，只有在保存报告后，更改才会应用到报告中。

7 测量菜单

在测量中，您可以创建和管理用于测量样品、校准、日系数、QC 标准、空白和 SST 测试的序列。SST 测试仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块。



在测量菜单中

- 使用**添加新序列**菜单命令打开**添加新序列**窗口。在这里，您可以创建序列并开始测量。
- 使用**测量**菜单命令打开**序列**窗口，以管理已保存的序列。

7.1 样品类型

您可以在软件中测量不同类型的样品。为此，请为序列中的每个测量步骤指定样本类型。

选择样品类型

- ▶ 使用**测量 | 添加新序列**菜单选项创建新的序列。
- ▶ 使用**按方法添加**创建序列中的测量步骤。从下拉菜单中选择方法。
 - ✓ 该软件创建样本类型为**样品**的测量步骤。
- ▶ 根据需要调整样本类型：
 - 在序列中选择一个或多个测量步骤。
 - 从下拉菜单中按照**样品类型**选择样品类型。
 - 只有在随后的校准中要添加或重新测量校准点时，才选择**校准**样品类型。
- ▶ 要创建用于校准的测量系列，请单击图标打开**校准向导**。
- ▶ 要创建系统适用性测试 (SST) 的测量系列，请单击图标打开**创建 SST**（仅适用于 FDA 21CFR Part 11 Compliance 模块）。
 - ✓ 您已为序列中的单个测量步骤或测量系列定义了样品类型。

7.1.1 样品

选择样品类型**样品**用于测量样品和洗脱液。软件由此计算出浓度。


如果在测量前手动稀释样品，请在**步骤属性 | 步骤 | 稀释：体积样本**和**稀释：总体积**中输入稀释度。该软件在计算结果时会考虑稀释情况。

软件使用所选方法分析样品，并根据所选校准计算结果。

如果您确定或手动指定 H_3PO_4 和 $Na_2S_2O_8$ 的试剂空白（仅适用于带紫外氧化功能的分析仪），则软件在计算结果时会将空白考虑在内。

7.1.2 校准

在校准过程中，需要测量一系列已知浓度的校准标准。

您可以使用**校准向导**在序列中创建校准。为此，请单击图标。

选择校准类型：

- 最好使用恒定的样品量和可变的标准浓度进行多点校准。选项：**固定体积**
- 或者，使用固定浓度的标准品，并加入不同体积的标准品。选项：**固定浓度**

您可以在以后重新测量校准标准，或将标准添加到校准中。为此，请在序列中选择**样品类型 | 样品类型 | 校准**。

您可以在校准序列中测量制备用水空白值，或在向导中手动输入。如果使用试剂进行测量，则可以测量试剂空白值或手动指定该值。软件通过制备水空白值和试剂空白值调整校准标准的测量值。

另见

▣ 进行校准 [▶ 85]

7.1.3 日系数

日系数可以用于使用标准样检查并修正校准。软件将所有后续测量结果与日系数相乘。

$$\text{日系数} = c_{\text{target}} / c_{\text{actual}}$$

您可以手动指定日系数，也可以通过测量来确定日系数。为此，请选择**样品类型 | 日系数**。

- 如果执行新的校准或添加校准范围，软件将以日系数 = 1 进行计算。
- 在您测量或输入新的日系数之前，软件会将日系数用于计算结果。
- 在测量低浓度范围 (< 10 mg/l) 的日系数之前，先确定当前制备用水的空白值。
- 如果测量中使用了试剂，软件会根据试剂空白值调整日系数。

您可以为序列中的日系数定义限制。如果数值低于或超过限值，则需要进行全面校准。

如果测量值超出公差范围，软件会在结果中添加注释。

使用自动进样器时，可以选择在数值超出限值时要采取的措施。

忽略	当数值低于或超过限值时，软件会忽略。
询问	软件将显示提示。您可以选择停止序列或继续序列。
取消	软件中止序列。

7.1.4 QC 标准

如果要测量用于分析质量控制的标准样品，请选择**QC 标准** 样品类型。分析使用所选方法和校准进行，您可在**步骤类型属性** 面板中进行选择。

在测量低浓度范围 (< 10 mg/l) 的 QC 标准品之前，先确定制备用水的空白值。

如果使用试剂进行测量，软件会根据试剂空白值调整结果。

在**步骤类型属性** 面板中输入该 QC 标准的目标浓度。您可以在**下限** 和 **上限** 中定义公差范围。

如果测量值超出公差范围，软件会在结果中添加注释。

使用自动进样器时，可以选择在数值超出限值时要采取的措施。

忽略	当数值低于或超过限值时，软件会忽略。
询问	软件将显示提示。您可以选择停止序列或继续序列。
取消	软件中止序列。

7.1.5 制备用水空白值

制备用水空白值是用于配制标准物质的水的空白值。

软件会根据制备水的空白值调整所有标准测量值（质控标准、日系数、校准）。确定空白值，尤其是测量低浓度 (µg/l 范围内) 时。

在向导中，您可以为校准指定在校准前测量制备用水空白值。为此，应提供制备用水。软件可确定制备用水的平均积分。或者：可以选择单独确定空白值，然后手动将其输入到软件中。

空白值可能随着时间的推移而变化。测量标准品之前，再次测定制备用水空白值。否则，软件将使用上一个空白值。

如果使用试剂进行测量，软件会根据试剂空白值调整空白值。

要监控空白值，可以在**步骤类型属性**中指定序列中的边界。

这些以面积单位 AU/ml 表示。

如果测量值超出公差范围，软件会在结果中添加注释。

使用自动进样器时，可以选择在数值超出限值时要采取的措施。

忽略	当数值低于或超过限值时，软件会忽略。
询问	软件将显示提示。您可以选择停止序列或继续序列。
取消	软件中止序列。

7.1.6 试剂空白值

试剂空白值是所用试剂的空白值：

- 磷酸 H_3PO_4 (TIC 分支试剂) - TIC 空白值
- 过硫酸钠 $Na_2S_2O_8$ (TC 分支试剂，即 UV 反应器) - TC 空白值

$Na_2S_2O_8$ 的试剂空白仅适用于具有 UV 氧化功能的分析仪。

软件会根据试剂空白值调整样品和所有其他空白值的结果。考虑试剂空白值，尤其是在测量低浓度 ($\mu g/l$ 范围内) 时。

您可以测量序列中的空白值。或者：可以选择单独确定空白值，然后手动将其输入到软件中。

- 试剂空白值不能用 TOC 等混合方法测量。
- 磷酸空白值必须使用 IC 方法测量。
- 过硫酸钠溶液的空白值可使用 NPOC 或 TC 方法测量。

空白值可能随着时间的推移而变化。因此，应在测量系列开始时再次确定空白值。否则，软件将使用上一个空白值。

要监控空白值，可以在**步骤类型属性**中指定序列中的边界。

试剂的注入量是恒定的，与样品量无关。因此，试剂空白值被指定为以面积单位 (AU) 表示的绝对值。

如果测量值超出公差范围，软件会在结果中添加注释。

使用自动进样器时，可以选择在数值超出限值时要采取的措施。

忽略	当数值低于或超过限值时，软件会忽略。
询问	软件将显示提示。您可以选择停止序列或继续序列。
取消	软件中止序列。

7.1.7 稀释剂空白值

稀释剂空白值是用于稀释样品的水的空白值。

如果使用稀释液测量样品，软件会根据稀释液空白值调整结果。软件会考虑所用稀释剂的体积。

您可以测量序列中的空白值。或者：可以选择单独确定空白值，然后手动将其输入到软件中。

空白值可能随着时间的推移而变化。因此，应在测量系列开始时再次确定空白值。否则，软件将使用上一个空白值。

稀释的定义：

- 原始样品的百分比
(如 10 份中的 1 份)，即 1 ml 初级样品用稀释水稀释至总体积为 10 ml。
- 1 比 1 的稀释度表示样品未被稀释。

如果使用试剂进行测量，软件会根据试剂空白值调整空白值。

要监控空白值，可以在**步骤类型属性** 中指定序列中的边界。

这些以面积单位 AU/ml 表示。

如果测量值超出公差范围，软件会在结果中添加注释。

使用自动进样器时，可以选择在数值超出限值时要采取的措施。

忽略	当数值低于或超过限值时，软件会忽略。
询问	软件将显示提示。您可以选择停止序列或继续序列。
取消	软件中止序列。

7.1.8 清除空白值

洗脱液空白值是清洁验证样品或洗脱液制备的空白值。空白值相当于超纯水中的 TOC 含量，例如用于提取/洗脱拭子的超纯水。

您可以在方法中定义洗脱液空白值的考虑因素。为此，请激活 **洗脱液的因素** 选项。

您可以测量序列中的空白值。或者：可以选择单独确定空白值，然后手动将其输入到软件中。

空白值可能随着时间的推移而变化。因此，应在测量系列开始时再次确定空白值。否则，软件将使用上一个空白值。

软件会根据空白值调整测量结果，并将注入量考虑在内。软件不会将洗脱空白值用于校准测量，因为您一般不会洗脱标准物质。

如果使用试剂进行测量，软件会根据试剂空白值调整空白值。

要监控空白值，可以在**步骤类型属性** 中指定序列中的边界。

这些绝对值以面积单位 AU/ml 表示。

如果测量值超出公差范围，软件会在结果中添加注释。

使用自动进样器时，可以选择在数值超出限值时要采取的措施。

忽略	当数值低于或超过限值时，软件会忽略。
询问	软件将显示提示。您可以选择停止序列或继续序列。
取消	软件中止序列。

7.1.9 舟空白值

舟空白值是将固体样品引入分析仪的舟的空白值。

您可以将空舟或装有样品添加剂的舟放入燃烧炉中进行分析，从而确定舟的空白值。

您可以测量序列中的空白值。或者：可以选择单独确定空白值，然后手动将其输入到软件中。

空白值可能随着时间的推移而变化。因此，应在测量系列开始时再次确定空白值。否则，软件将使用上一个空白值。

要监控空白值，可以在**步骤类型属性** 中指定序列中的边界。

以面积单位 AU 指定绝对值。

如果测量值超出公差范围，软件会在结果中添加注释。

使用自动进样器时，可以选择在数值超出限值时要采取的措施。

忽略	当数值低于或超过限值时，软件会忽略。
询问	软件将显示提示。您可以选择停止序列或继续序列。
取消	软件中止序列。




7.2 添加新序列 窗口

使用菜单命令 **测量 | 添加新序列** 打开添加新序列 窗口。

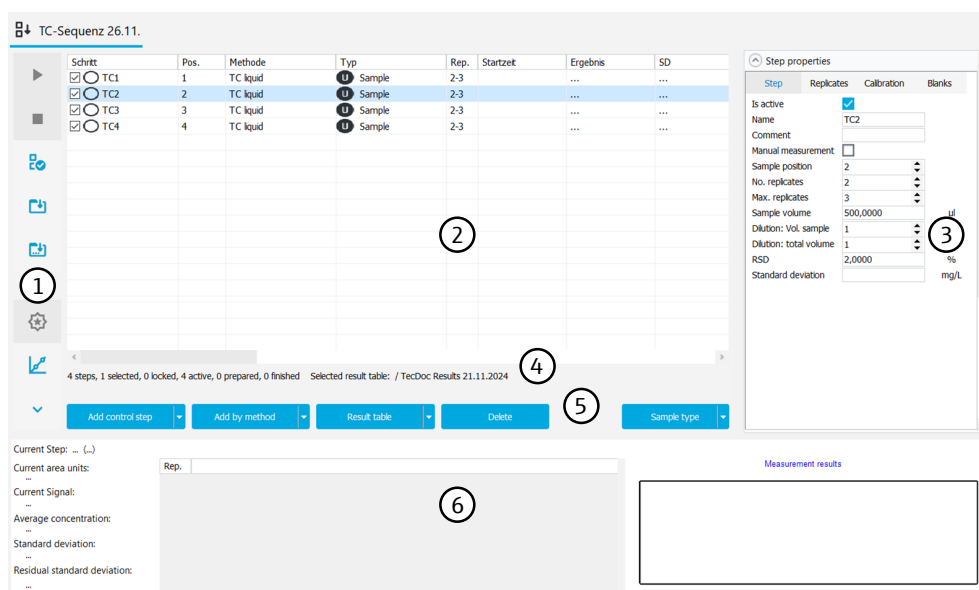
在 **序列** 窗口中加载已保存的序列时，也可以通过单击 **加载** 按钮或双击来进入该窗口。窗口中显示已保存序列的名称。

在添加新序列窗口中

您可以在 **添加新序列** 窗口中创建序列并开始测量。

- 在序列中，使用 **按方法添加** 按钮创建单个测量步骤，并为每个测量步骤选择方法和样品类型。您可以使用 **添加多个步骤** 命令（在上下文菜单中）快速创建多个测量步骤。
- 单击  或  按钮，使用向导为系统适用性测试 (SST) 和校准创建测量系列。（仅使用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块进行系统适用性测试）
- 在 **步骤属性** 面板中，您可以根据测量任务调整所选方法参数。您可以查看与方法相关联的校准或选择校准。您可以查看空白值，并根据需要编辑空白值。
- 在 **步骤类型属性** 面板中，可以定义样品类型的特定参数，如目标值、限值和超出限值时的操作。
- 在 **序列属性** 面板中，您可以定义适用于多个序列的设置，例如自动稀释。
- 使用 **结果表** 按钮选择保存结果的结果表。
- 单击  图标开始测量后，您可以在窗口底部查看当前测量结果的记录。您可以在 **步骤结果** 面板中查看已经测量过的样品结果。

窗口布局



TC-Sequenz 26.11.

Schritt	Pos.	Methode	Typ	Rep.	Startzeit	Ergebnis	SD
<input checked="" type="checkbox"/> TC1	1	TC liquid	U Sample	2-3
<input checked="" type="checkbox"/> TC2	2	TC liquid	U Sample	2-3
<input checked="" type="checkbox"/> TC3	3	TC liquid	U Sample	2-3
<input checked="" type="checkbox"/> TC4	4	TC liquid	U Sample	2-3

Step properties

Step: TC2

Is active:

Name: TC2

Comment:

Manual measurement:

Sample position: 2

No. replicates: 2

Max. replicates: 3

Sample volume: 500,000

Dilution: Vol. sample: 1

Dilution: total volume: 1

RSD: 2,0000

Standard deviation: mg/L

4 steps, 1 selected, 0 locked, 4 active, 0 prepared, 0 finished Selected result table: / TecDoc Results 21.11.2024

Buttons: Add control step, Add by method, Result table, Delete, Sample type

Current Step: ...

Current area units: ...

Current Signal: ...

Average concentration: ...

Standard deviation: ...

Residual standard deviation: ...

Measurement results

图 37 添加新序列窗口

元素	描述
带图标的工具栏 (1)	<ul style="list-style-type: none"> 点击 图标开始测量序列或点击图标 取消序列 取消序列后，您可以点击 图标测量未处理的步骤。为此，请单击提示中的是。如果点击否，软件将不进行测量。 用 检查序列的合理性 用 保存序列或另存为 使用 将空序列分配给另一个设备配置 用 打开创建 SST 向导并准备系统适用性测试（仅使用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）。 使用 打开校准向导 并准备校准
序列表 (2)	以表格形式查看测量步骤序列
折叠式面板 (3)	<p>查看和编辑选定步骤的设置和结果</p> <p>步骤属性</p> <ul style="list-style-type: none"> 指定样品名称并定义样品位置 根据测量任务调整方法参数 对于每个测量通道，查看与方法关联的校准或选择不同的校准 如果未将校准与方法关联或未在此处选择校准，软件将使用存储在设备参数中的设备默认校准。软件会在下拉菜单中显示校准系数。 查看和编辑空白值 <p>步骤类型属性</p> <ul style="list-style-type: none"> 定义限值 and 超出限值时的操作 对于 校准（仅重新测量）和 日系数 样品类型，定义标准的目标值 <p>步骤结果</p> <ul style="list-style-type: none"> 查看选定步骤的测量结果，包括积分、质量和浓度、相对标准偏差和绝对标准偏差 <p>序列属性</p> <ul style="list-style-type: none"> 激活适用于多个序列的设置：用于 NPOC 方法的固体测量、自动/智能稀释、智能体积缩小和并行吹扫 软件可根据设备配置调整可用设置。
序列信息行 (4)	<p>查看序列和当前处理状态的汇总信息：</p> <ul style="list-style-type: none"> 总步数以及选定、受阻和活动步数 准备和进行的分析次数 选定的结果表： 分配的设备配置
按钮栏 (5)	编辑序列（见下文）
折叠式结果视图 (6)	<ul style="list-style-type: none"> 跟踪测量进度，以表格和图形方式记录当前测量结果 用 / 展开/折叠

按钮

按钮	描述
添加控制步骤	<p>按顺序插入控制步骤</p> <p>暂停 暂停序列处理，在步骤属性中以（秒）为单位设置暂停持续时间，在用户确认或不确认的情况下继续序列处理</p> <p>冲洗 依次增加漂洗步骤</p> <p>反向冲洗 用超纯水反冲洗样品通路（并非所有分析仪）。</p>


按钮	描述
	<p>吹扫 吹出 NPOC 样品，在 步骤属性 中指定样品盘上的位置和吹出时间。如有必要，启用手动测量</p> <p>仪器关闭 在序列结束时关闭设备</p> <p>仪器待机 将设备置于待机状态。该装置将炉温降至 步骤属性 中选择的温度，并关闭气流。</p> <p>设置气体流量 关闭或开启气流</p> <ul style="list-style-type: none"> 在序列中插入 设置气体流量 步骤以关闭气流，例如在测量结束时 在序列中插入 设置气体流量 控制步骤，并在 步骤属性 面板中勾选 GasFlowActive 复选框，重新打开气流控制步骤 <p>唤醒 待机后初始化设备</p>
按方法添加	<p>在序列中添加步骤，从下拉菜单或在 选择方法 窗口中选择方法</p> <p>提示：使用 添加多个步骤 命令（在序列的上下文菜单中）添加多个步骤</p>
结果表	<ul style="list-style-type: none"> 选择结果表以保存结果 创建新的结果表 <p>除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：程序 设置 结果表</p> <p>i 注意！没有结果表，序列无法启动。</p>
删除	删除所选步骤
样品类型	<ul style="list-style-type: none"> 从下拉菜单中选择样品类型：校准标准、日系数、QC 标准和各种空白值 点击 样品类型 按钮，将采样类型改回采样类型。

7.2.1 序列表

序列表是 **添加新序列** 窗口的一部分。序列表以表格形式概述了所有测量步骤的信息。

序列表的布局

您可以在 **常见** 标签上的 **软件设置** 窗口中自定义序列表的布局。如果使用 **调整显示列表** 命令（在上下文菜单中）自定义布局，则设置仅适用于选定的序列表。

列	描述
步骤	<p>复选框和样品名称</p> <p>使用复选框激活或关闭序列中的控制步骤</p> <p>样品名称中不允许使用以下特殊字符： % & () = ` ' + ~ ' # , ; - _</p> <p>i 注意！不要在示例名称中使用您定义为 CSV 导入/导出分隔符的任何字符。</p> <p>您可以通过多种方式更改样品名称：</p> <ul style="list-style-type: none"> 双击测量步骤，打开 步骤属性 窗口。在窗口中定义样品名称。 慢速双击后，直接在序列表中重新命名测量步骤 在 名称 中的 步骤属性 面板中编辑样品名称。按 Enter 键确认输入后，软件会直接跳转到序列表的下一行。可以快速连续重命名多个样本。 <p>软件会用红色图标  突出显示测量值超过或低于规定限值的测量步骤。</p>

列	描述
位置	样品盘上的位置 在步骤属性 窗口或步骤属性 面板中双击后编辑采样位置。
方法	测量方法
类型	样品类型 (样品、校准标准、日系数、质控标准、空白值) 通过 样品类型 自定义样品类型
重复	重复测量的最小和最大次数, 规格: 最小-最大
开始时间	测量开始时间
结果	测量结果 (平均浓度)
SD	测量结果的标准偏差
RSD	测量结果的相对标准偏差 (%)
c(TC) 等	各测量通道的平均浓度
SD(TC) 等	各测量通道结果的标准偏差
RSD(TC) 等	各测量通道结果的相对标准偏差 (%)
体积	样品体积
质量	固体测量的样品质量
信息	个人信息
目标浓度	目标浓度 在 步骤类型属性 面板中指定目标浓度
参数	测量通道
稀释水	手动或自动稀释样品的稀释比例
COD	用 TOC 和 NPOC 方法测定的 COD (化学需氧量)
BOD ₅	根据 TOC 和 NPOC 方法测定的 BOD ₅ (生化需氧量)
TP	根据 TN 方法测定的 TP (总蛋白) 含量
CO ₂	用 TIC 法测定的二氧化碳浓度

上下文菜单








命令	描述
位置	在序列表中移动测量步骤 向上移动 向上移动一行 向下移动 向下移动一行 移至列表顶部 移至列表顶部 移至列表底部 移至列表底部 移到位置 在 移到位置 窗口中, 选择所需的位置, 点击 确定 按钮移动测量步骤
状态	定义在序列中止后重新启动时如何处理测量步骤 设置步骤为未准备 将所选测量步骤的状态设置为未处理 设置步骤为已准备 将所选测量步骤的状态设置为准备就绪 重置选定步骤 将多个测量步骤的状态设置为未处理

命令	描述
	重置所有的步骤 将所有测量步骤的状态设置为未处理 当序列重新启动时，状态为未处理的测量步骤将被准备和测量。对状态为准备就绪的测量步骤进行测量。
分配方法	为选定步骤选择新方法
删除所选步骤	删除所选步骤
下一步进行测量	下一步测量所选步骤 软件会将步骤移动到序列的起始位置或正在进行的测量的下一个位置。
导入顺序	从剪贴板或文件导入 XML 或 CSV 格式的序列
导出此序列	以 XML 格式导出序列
添加多个步骤	在序列中增加几个步骤，这些步骤使用相同的方法进行测量，并根据标准化方案命名 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 选择方法 创建步骤的方法： ▪ 定义步骤数量 样品数： ▪ 定义词根 基本名称： ▪ 在使用数字：输入框中输入起始编号，为样品编号 ▪ 单击将样品系列转移至序列 创建步骤
定义新列	用 ID 和列名创建自己的序列列
步骤属性	自定义测量步骤的样品名称和样品盘上的位置，添加个人信息
调整显示列	自定义序列列的选择和顺序
单位	调整输入和结果显示的单位和小数位数 选择输出单元 调整 添加新序列 窗口中结果显示的单位和小数位数 选择输入单元 调整单位和小数位，以便在 添加新序列 窗口中输入样本信息

7.2.2 自定义序列列表








您可以在**常见** 标签上的**软件设置** 窗口中自定义序列列表的布局。如果使用 **调整显示列** 命令（在上下文菜单中）自定义布局，则设置仅适用于选定的序列列表。

总体调整

- ▶ 选择**程序 | 设置** 菜单选项。切换到**常见**选项卡。
- ▶ 单击 **预设序列列** 区域中的 **配置** 按钮。
- ▶ 在**配置视图** 窗口中，调整表格列的显示和顺序：
 - 使用  图标将建议（左）中的一列转移到表格（右）中。
 - 使用  图标从表格中删除一列（右图）。
 - 使用  图标将建议（左）中的所有列转移到表格（右）中。
 - 使用  图标删除表格中的所有列（右图）。
 - 使用  图标可将序列列表中的一列向下或向右移动。
 - 使用  图标可将序列列表中的一列向上或向左移动。
 - 使用  图标恢复预设栏。
- ▶ 单击**确定** 以确认输入的数据。
 - ✓ 您已自定义了表格列。

调整选定的序列列表

- ▶ 使用**测量 | 添加新序列** 菜单选项创建新的序列。

- ▶ 右键单击序列列表，打开上下文菜单。
- ▶ 选择**定义新列** 命令创建自己的列。
- ▶ 在**定义新列** 窗口中，在**唯一列标识符** 中为列定义一个 ID。在**列名** 中指定一个名称。名称显示在表头。
- ▶ 单击**确定** 以确认输入的数据。
- ▶ 选择**调整显示列** 命令。
- ▶ 在**配置视图** 窗口中，调整表格列的显示和顺序：
 - 使用  图标将建议（左）中的一列转移到表格（右）中。
 - 使用  图标从表格中删除一列（右图）。
 - 使用  图标将建议（左）中的所有列转移到表格（右）中。
 - 使用  图标删除表格中的所有列（右图）。
 - 使用  图标可将序列列表中的一列向下或向右移动。
 - 使用  图标可将序列列表中的一列向上或向左移动。
 - 使用  图标恢复预设栏。
- ▶ 单击**确定** 以确认输入的数据。
 - ✓ 您已自定义了表格列。

调整结果输出的单位和小数位数

在**添加新序列** 窗口中，您可以使用**单位 | 选择输出单元** 命令（从上下文菜单）自定义输入样品信息的单位。这些设置只适用于相应的窗口。

您可以在 **单位和精度** 标签上的 **软件设置** 窗口中对单位和小数位进行跨软件设置。

- ▶ 右键单击序列列表，打开上下文菜单。
- ▶ 从上下文菜单中选择**单位** 或**选择输出单元**。
- ▶ 在**单位和精度** 部分更改单位和小数位数。
- ▶ 单击**确定** 确认您的选择。
- ▶ 单击**加载默认单位** 按钮，恢复之前在**单位和精度** 选项卡上的**软件设置** 窗口中定义的设置。

自定义输入样本信息

在**添加新序列** 窗口中，可以使用 **单位 | 选择输入单元** 命令（从上下文菜单中）自定义在**步骤属性** 和**步骤类型属性** 属性面板中输入示例信息的单位。

- ▶ 右键单击序列列表，打开上下文菜单。
- ▶ 选择**单位 | 选择输入单元** 命令。
- ▶ 在**单位输入** 窗口中，自定义以下样品信息的单位和小数位数：
 - 浓度
 - 数量
 - 样品密度
- ▶ 要转移小数位，请激活相应的 **使用数字** 复选框。
- ▶ 单击**确认** 按钮确认输入。

7.3 序列 窗口

使用菜单命令**测量 | 序列** 打开**序列** 窗口。

在序列窗口中

您可以在**序列** 窗口中管理已保存的序列。

- 双击序列或单击**加载**按钮，即可加载已保存的序列。然后就可以编辑序列或开始测量。
- 点击**删除**按钮即可删除序列。
- 可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块可防止数据被删除。
- 在**选择组**窗口中点击**分配组**，即可将序列组织分组。
- 您可以使用**导入**和**导出**按钮以 XML 格式导入和导出序列。

窗口布局

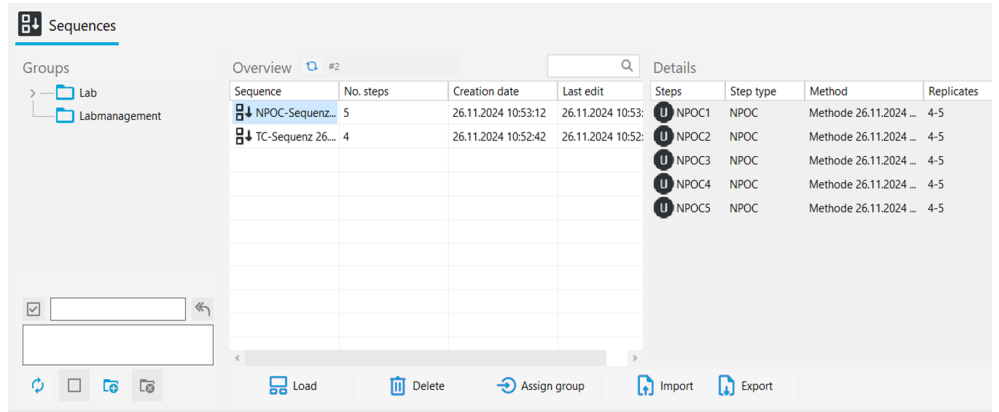


图 38 序列窗口

区域	描述
群组 (左)	管理组
概述 (中)	以表格形式显示已保存序列的详细信息： <ul style="list-style-type: none"> ■ 序列名称 ■ 测量步骤数量 ■ 创建和最后更改日期
详细信息 (右)	选定序列的详细视图 (带列)： <ul style="list-style-type: none"> ■ 带名称的测量步骤 ■ 测量类型或控制步骤 ■ 方法 ■ 重复测量的最小和最大次数 (最小-最大)

另见

📁 分组组织 [▶ 37]

7.4 校准向导

在校准向导中，您可以准备校准。

通过添加新序列窗口中的  图标打开向导。

布局

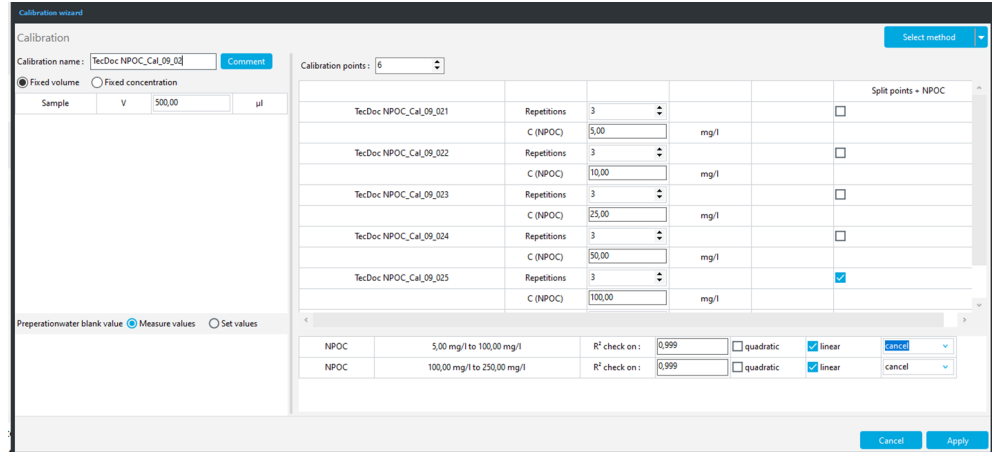


图 39 校准向导

元素	描述
按钮 选择方法	点击 选择方法 ，然后在 选择方法 窗口中选择方法。
输入字段 校准	为校准指定名称 默认名称为：Methodtype_Cal.
按钮 备注	点击 备注 ，然后在 备注 窗口中输入备注
单选按钮	选择选项：
<ul style="list-style-type: none"> 固定体积 固定质量 固定浓度 	<ul style="list-style-type: none"> 使用恒定配料量和多种不同浓度的标准物质进行多点校准 使用恒定质量的不同浓度的标准物质进行固体校准。 或者，使用恒定浓度的标准和不同计量体积的液体标准或不同重量的固体标准进行多点校准
输入字段 样品	<ul style="list-style-type: none"> 用于恒容或恒重校准：软件从方法中获取设置。可选择调节数值。 用于恒定浓度校准：输入校准标准的浓度。
制备用水空白：使用单选按钮	将制备用水空白值考虑在内：
<ul style="list-style-type: none"> 测量值 设定值 	<ul style="list-style-type: none"> 校准前立即测量制备用水的空白值。软件会按顺序创建空白值测定。 或者，单独确定制备用水空白值并输入 (AU/ml) (如果不考虑制备用水空白值，则输入值 0)。
舟空白值使用单选按钮	在进行固体校准时，考虑舟的空白值：
<ul style="list-style-type: none"> 测量值 设定值 	<ul style="list-style-type: none"> 校准前立即测量空白值。软件会按顺序创建空白值测定。 或者，单独确定空白值并输入 (AU) (如果不考虑空白值，则输入值 0)。
字段 校准点：	指定校准点数量
校准点一览表	<ul style="list-style-type: none"> 软件定义校准点的名称：Methodtype_Cal_No 如有必要，请调整添加新序列 窗口中的名称。 对于校准点，在平行样 中指定重复测量次数。软件会提示该方法的最大测定次数。 输入校准点标准物质的浓度、质量或体积
分割点 + 测量通道复选框	为每个测量通道激活分割点，从而定义多个校准范围，每个范围有一个共同的分割点
校准范围表	<ul style="list-style-type: none"> 将确定系数 R^2 定义为每个校准量程的限值，默认设置为 0.999 选择线性或二次回归类型 从下拉菜单中选择测定系数未达到极限值时要采取的措施，例如 取消
按钮 取消	取消校准准备
按钮 应用	将校准转移到序列
设置输入单位 命令 (在表格的上下文菜单中)	更改 校准向导 向导中浓度和样本量的输入单位和小数位数


元素	描述
	激活 使用数字 复选框以传输小数位数
	将校准传输到序列时，软件会将条目转换为您在 程序 设置 单位和精度 菜单命令下定义的单位。



另见

- 定义输入样本信息和输出结果的单位和小数位数 [▶ 41]
- 进行校准 [▶ 85]

7.5 使用手动进样创建序列和测量

初步考虑：



- 空白值会随着时间的推移而变化。因此，您应该决定是否在序列开始时重新测量空白值。
- 如有必要，您可以使用日系数校正校准。为此，请在序列的开头测量一个或多个标准溶液以确定日系数。如果日系数在 **步骤类型属性** 面板中序列指定的限制范围内，软件会自动将日系数转移到校准中。
- ▶ 为手动进样准备一种或多种方法。为此，请激活方法参数中的**手动测量**复选框。序列可以包含使用不同方法的示例步骤。但是，不能在一个序列中同时测量液体和固体。
停用用于手动测量的**自动酸化**方法参数。
- ▶ 或者：等待激活**手动测量**复选框，直到在方法参数中创建序列。
- ▶ 使用**测量 | 添加新序列**菜单选项创建新的序列。
- ▶ 在**序列属性**面板中激活**是固体测量**复选框用于手动固体测量。
- ▶ 默认情况下，软件会为活动设备配置分配一个新序列。如有必要，请单击  图标将空序列分配给不同的设备配置。
为此，请在**选择仪器配置**窗口中选择设备配置。单击**确定**按钮确认选择。
- ▶ 或者，打开已经准备好的序列。使用菜单选项**序列 | 序列**打开序列。从**概述**表中选择准备好的序列。双击或使用**加载**打开序列。
- ▶ 使用**按方法添加**创建序列中的测量步骤。确保方法设置（如样品量）与设备配置相匹配。
- ▶ 从下拉菜单或**按方法添加**窗口中选择方法。
- ▶ 双击测量步骤在**步骤属性**面板，点击步骤，在序列表中输入样品名称。
默认名称是：方法类型 + 步骤号。
(可选) 添加评论。
- ▶ 如有必要，使用选项**添加多个步骤**（在上下文菜单中）创建多个样品步骤。
 - 在窗口 **向序列添加多个步骤**中选择方法。
 - 在**样品数**：中设置测量步数的数字。
 - 在**基本名称**：中为步骤名称选择一个常用基本词。默认名称是：样品 + 方法类型。
 - 输入框中的起始编号 输入**使用数字**：为测量步骤编号。
 - 单击**创建步骤**将测量步骤转移到序列中。
- ▶ 对于手动稀释的样品，在**稀释：体积样本**和**稀释：总体积**中输入稀释比例：初级样品在总体中所占部分。
该软件在计算结果时会考虑稀释情况。

- ▶ 如果需要，请在序列中选择一个或多个测量步骤，然后根据测量任务调整步骤属性面板中的方法设置。
选择方法设置后，您可以单击“输入”按钮浏览各个测量步骤。
- ▶ 在校准选项卡上的步骤属性面板中，查看与每个测量通道的方法相关联的校准。校准系数显示在下拉菜单中。
如果需要，从下拉菜单中选择不同的校准来计算测量结果。
如果未将校准与方法链接或未在此处选择校准，软件将使用存储在设备参数中的标准校准。
- ▶ 在空白选项卡上查看每个测量通道的空白值。如有必要，编辑空白值。
该软件会自动校正任何空白值的测量结果。除非您在序列开始时重新定义空白值，否则软件将使用最后的空白值。
- ▶ 软件使用样本类型样品创建测量步骤。选择测量步骤，单击样品类型按钮后，从下拉菜单中选择其他样品类型，例如日系数。
- ▶ 可选地在步骤类型属性面板中指定测量结果的下限值和上限值。如果超过限值，请从下拉菜单中选择操作，例如取消用于停止测量。
- ▶ 单击结果表后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用创建新的结果表创建新的结果表。
除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：程序 | 设置 | 结果表
i 注意！如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在另存为窗口中设置序列的名称，然后用确定确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 提供样品。如需进行液体测量，请将样品进气管浸入样品中。对于 NPOC 测量，还要将吹扫针管插入样品中。
- ▶ 开始测量之前：在仪器状态面板中检查设备准备情况。
- ▶ 单击 ▶ 开始测量。按照屏幕上的说明进行操作。
在重复测量过程中，请勿离开设备，以便遵守和确认指示。
✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列添加更多步骤。

软件在下部窗口区域和结果表中以图形方式显示记录期间的当前测量结果。

在步骤结果面板中，您可以查看已测量样品的结果。对序列进行处理后，您可以在结果菜单中看到结果。


另见




-  测量和编辑空白 [▶ 83]
-  确定日系数 [▶ 89]

7.6 创建序列并使用自动进样进行测量

初步考虑：

- 空白值会随着时间的推移而变化。因此，您应该决定是否在序列开始时重新测量空白值。
- 如有必要，您可以使用日系数校正校准。为此，请在序列的开头测量一个或多个标准溶液以确定日系数。如果日系数在步骤类型属性面板中序列指定的限制范围内，软件会自动将日系数转移到校准中。





- ▶ 准备一种或多种测量方法。
序列可以包含使用不同方法的测量步骤。但是，例如液体和固体方法不能按顺序测量。
可选择将一个或多个定标与方法联系起来。
- ▶ 在样品托盘上提供样品。
- ▶ 使用**测量 | 添加新序列**菜单选项创建新的序列。
- ▶ 在**序列属性**面板中，配置适用于多个序列的设置：
用于 NPOC 方法的固体测量、自动或智能稀释、智能减少样品量和并行吹扫。
为此，请勾选相应的复选框。
可用选项取决于设备配置。
- ▶ 默认情况下，软件会为活动设备配置分配一个新序列。如有必要，请单击  图标将空序列分配给不同的设备配置。
为此，请在**选择仪器配置**窗口中选择设备配置。单击**确定**按钮确认选择。
- ▶ 或者，打开已经准备好的序列。使用菜单选项**序列 | 序列**打开序列。从**概述表**中选择准备好的序列。双击或使用**加载**打开序列。
- ▶ 使用**按方法添加**创建序列中的测量步骤。确保方法设置（如样品量）与设备配置相匹配。
- ▶ 从下拉菜单或**按方法添加**窗口中选择方法。
- ▶ 双击测量步骤在**步骤属性**面板，点击步骤，在序列中输入样品名称。
默认名称是：方法类型 + 步骤号。
(可选) 添加评论。
- ▶ 如有必要，使用选项**添加多个步骤**（在上下文菜单中）创建多个样品步骤。
 - 在窗口 **向序列添加多个步骤**中选择方法。
 - 在**样品数**：中设置测量步数的数字。
 - 在**基本名称**：中为步骤名称选择一个常用基本词。默认名称是：样品 + 方法类型。
 - 输入框中的起始编号 输入**使用数字**：为测量步骤编号。
 - 单击**创建步骤**将测量步骤转移到序列中。
- ▶ 软件使用**样本类型样品**创建测量步骤。选择测量步骤，单击**样品类型**按钮后，从下拉菜单中选择其他样品类型，例如**日系数**。
- ▶ 在**步骤属性 | 选项卡**步骤中**样品位置**确定样品托盘上的测定位置。
在一个序列中，您可以在自动进样器托盘上多次使用各个位置。
- ▶ 如果需要，请在序列表中选择一个或多个测量步骤，然后根据测量任务调整**步骤属性**面板中的方法设置。
选择方法设置后，您可以单击“输入”按钮浏览各个测量步骤。
- ▶ 对于手动稀释的样品，在**稀释：体积样本**和**稀释：总体积**中输入稀释比例：初级样品在总体中所占部分。
该软件在计算结果时会考虑稀释情况。
- ▶ 在**校准**选项卡上的**步骤属性**面板中，查看与每个测量通道的方法相关联的校准。校准系数显示在下拉菜单中。
如果需要，从下拉菜单中选择不同的校准来计算测量结果。
如果未将校准与方法链接或未在此处选择校准，软件将使用存储在设备参数中的标准校准。
- ▶ 在**空白**选项卡上查看每个测量通道的空白值。如有必要，编辑空白值。
该软件会自动校正任何空白值的测量结果。除非您在序列开始时重新定义空白值，否则软件将使用最后的空白值。
- ▶ 可选地在**步骤类型属性**面板中指定测量结果的下限值和上限值。如果超过限值，请从下拉菜单中选择操作，例如**取消**用于停止测量。

- ▶ 单击**添加控制步骤**按钮，向序列中添加控制步骤，例如暂停或其他冲洗步骤。
- ▶ 在序列尾部添加控制步骤**待机**或**仪器关闭**，以便在序列处理后关闭分析系统。
- ▶ 单击**结果表**后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用**创建新的结果表**创建新的结果表。
除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：**程序 | 设置 | 结果表**
- ▶ **i** 注意！如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在**另存为**窗口中设置序列的名称，然后用**确定**确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 开始测量之前：在**仪器状态**面板中检查设备准备情况。
- ▶ 单击  开始测量。
 - ✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列中添加更多测量或控制步骤。

软件在下部窗口区域和结果表中以图形方式显示记录期间的当前测量结果。

在**步骤结果**面板中，您可以查看已测量样品的结果。对序列进行处理后，您可以在**结果**菜单中看到结果。

另见

-  [测量和编辑空白 \[▶ 83\]](#)
-  [确定日系数 \[▶ 89\]](#)
-  [智能减少样品体积 \[▶ 94\]](#)
-  [自动或智能稀释样品 \[▶ 90\]](#)

7.7 导入和导出样品数据

在**序列**窗口中，您可以导入和导出 XML 格式的序列。

导入顺序

- ▶ 使用菜单选项**序列 | 序列打开序列**。
- ▶ 单击**导入**按钮。
- ▶ 在 Windows 文件管理器的打开窗口中选择序列。
- ▶ 点击**打开**。
 - ✓ 软件导入序列。如果已经存在同名序列，软件会提示您输入新名称。

导出序列

- ▶ 使用菜单选项**序列 | 序列打开序列**。
- ▶ 从**概述**中选择序列。
- ▶ 单击**导出**。
- ▶ 在**另存为**窗口中选择存储位置。默认导出文件夹：*C:/ProgramData/Analytik-Jena/multiWinPro/export/sequences*。
- ▶ 根据需要更改文件名，然后点击**保存**。
 - ✓ 软件导出此序列。

导出的序列包含样品数据。如果已经测量过序列，测量结果只会保存在结果表中，而不会保存在序列中。

此外，您还可以在**添加新序列**窗口中导入或导出序列。为此，请使用序列表上下文菜单中的**导入顺序**和**导出此序列**命令。您还可以在此处导入 CSV 格式的序列。

以 CSV 格式导入序列

- ▶ 使用**测量 | 添加新序列**菜单选项创建新的序列。
- ▶ 右键单击序列表，打开上下文菜单。
- ▶ 选择**导入顺序 | 从文件导入**菜单选项。
- ▶ 在打开窗口中，选择**CSV 文件类型**。
- ▶ 在 Windows 文件管理器中选择 CSV 文件。
- ▶ 单击**打开按钮**导入 CSV 文件。
 - ✓ 软件会将 CSV 文件导入**添加新序列**窗口。现在您可以展开序列表并开始测量。

软件从 CSV 文件中提取样本量，并在必要时覆盖方法设置。软件将采样体积舍入到**软件设置 | 单位和精度**窗口中指定的小数位数。

成功导入 CSV 的前提条件：

- CSV 文件中数据字段的名称和顺序必须与您在**软件设置, 存储、导出和报告**选项卡中定义的数据字段一致。
- CSV 文件中的**方法名**数据字段必须填写软件中已创建的方法名称。
- 目前，在 CSV 导入过程中，只能将液体方法测量的样品量导入序列。用于固体方法的样本量必须手动转入序列。

如果由于方法不存在等原因无法完成 CSV 导入，软件会发出错误信息。

从剪贴板导入序列

- ▶ 将序列创建为 Excel 表格，其中两列表格**样本 ID**和**方法名**按指定顺序排列。
- ▶ 复制电子表格。
- ▶ 使用**测量 | 添加新序列**菜单选项创建新的序列。
- ▶ 右键单击序列表，打开上下文菜单。
- ▶ 选择**导入顺序 | 从剪贴板导入**菜单选项。
 - ✓ 软件会从剪贴板导入序列。

软件从方法中获取样本量设置。

如果无法完成从剪贴板导入，软件会发出错误信息。

7.8 自定义序列中的方法设置

在**添加新序列**窗口中，您可以在**步骤属性**面板中查看和编辑每个测量步骤的选定方法设置。为此，请在序列表中选择一个或多个测量步骤。

如果在序列表中选择多个测量步骤，则可以更改多个测量步骤的方法设置。软件以彩色突出显示不同的方法设置。

可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块严格限制已批准方法的编辑。您只能自定义一些方法设置，例如序列中的样品量。

步骤 选项卡

参数	描述
已激活	激活或禁用测量步骤。
名称	样品名称
备注	备注
样品位置	样品盘上的位置

参数	描述
手动测量	通过复选框激活手动样品应用
平行样数量	设置重复测量同一样品容器的最少和最多次数
最大平行样数量	如果输入的最小值和最大值不同，软件会根据相对标准偏差或绝对标准偏差下指定的标准自动选择离群值。
样本量	选择测量液体样品的样品容量
冲洗量	选择冲洗量，用样品冲洗样品通路
稀释：体积样本	输入稀释比例
稀释：总体积	指定稀释比例： <ul style="list-style-type: none"> ▪ 原始样品的份数（稀释：体积样本）与总份数（稀释：总体积）之比（例如，1/10 表示 10 ml 总体积中含有 1 ml 原始样品） ▪ 1 比 1 的稀释度表示样品未被稀释。
单位参考	对于固体测量，请从下拉菜单中选择体积相关单位、质量相关单位或面积相关单位 根据选择，平行样选项卡上的输入字段会发生变化。
RSD 标准差	指定相对或绝对标准偏差作为重复测量的终止标准 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 如果在最低测定次数后仍未达到规定的标准偏差，分析仪将不再进行任何测定。 ▪ 如果超过规定值，分析仪将从同一样品容器中进行进一步测量，直至达到最大测定次数。 您可以为每个测量通道分别定义标准。
自动酸化	通过自动进样器自动酸化样品（仅适用于 NPOC 方法） 如果激活，自动进样器将从自动进样器上的酸容器中取酸并酸化样品（并非所有自动进样器都这样做）。
吹扫时间 1	指定在首次 NPOC 测定前吹扫样品的时间
吹扫时间 2	第二次吹扫时间是在重复测量之间，只能在手动模式或使用自动进样器进行非平行吹扫时执行。
添加试剂	使用复选框指定将过硫酸钠注入 UV 反应器（仅适用于带有 UV 氧化功能的分析仪）。 如果 TOC 浓度大于 1 mg/l，则激活选项
COD 计算已激活	对于 TOC 和 NPOC 方法，根据 TOC/NPOC 激活 COD（化学需氧量）的计算。 公式： $c(\text{CSB}) = A \times c(\text{TOC}) + B$
COD 换算系数 A	指定斜率 (A) 和截距 (B) 用于计算 COD，默认设置为： $A = 3.000, B = 0.000$
COD 抵消量 B	
BOD ₅ 计算已激活	对于 TOC 和 NPOC 方法，根据 TOC/NPOC，启动 BOD ₅ （生化需氧量）的计算。 公式： $c(\text{BOD}_5) = C \times c(\text{TOC}) + D$
BOD ₅ 转换系数 C	定义上升 (C) 和截距 (D) 来计算 BOD ₅ ，默认设置为： $C = 3.000, D = 0.000$
BOD ₅ 偏移量 D	
CO ₂ 计算已激活	对于 TIC 方法和液体样品，您可以激活基于 TIC 的二氧化碳浓度计算 公式： $c(\text{CO}_2) = 2.833 \times c(\text{TIC})$
总蛋白质转化活性	对于 TN 方法，激活基于 TN 的总蛋白质含量计算 公式： $c(\text{总蛋白质}) = A \times c(\text{TN})$

参数	描述
总蛋白质转化系数 A	将计算总蛋白质含量的系数设置为 0 到 10 之间，默认设置为：A = 6.250（对比物质：BSA-牛血清白蛋白）

平行样 选项卡

参数	描述
冲洗周期数	指定样品使用前的冲洗次数 每次重复测量前，自动进样器都会用样品冲洗样品通路 x 次。
吹扫	对于 NPOC 测量，在重复测量前激活或关闭吹出样品功能 只有在手动模式下或使用自动进样器进行非平行吹出时，才能对样品进行额外的第二次吹出。
样品质量	确定固体测量的样品质量，适用于与活性炭吸附空气污染物的样品质量相同的固体测量
样品面积	选择以面积为单位时，请输入样本面积，例如，这对检查用于擦拭消毒的抹布非常有用。擦拭消毒时，请在此处输入擦拭表面的尺寸。
样品密度 样本量	选择与体积相关的单位时，请输入固体样本的密度和体积，这对检测高粘度油类等非常有用
样品位置	确定重复测量固体的样品位置

校准 选项卡

在校准 标签上，可以查看与每个测量通道的方法相关联的校准。如有需要，请从相应的下拉菜单中选择不同的校准来计算测量结果。

如果未将校准与方法链接或未在此处选择校准，软件将使用存储在设备参数中的设备标准校准。

软件会在下拉菜单中显示校准参数。

空白 选项卡

空白 选项卡显示软件中为每个测量通道存储的空白值。如果您有适当的权限，可以手动编辑空白值。

如果您在序列中创建了空白测量，软件在计算所有后续测量结果时会自动将新空白考虑在内。

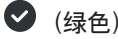

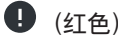
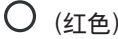


7.9 取消测量后继续测量序列

测量中断后，您可以点击  图标继续测量序列。


当重新启动中止的序列时，软件会显示以下行为：

- 已完成的测量步骤不再测量。
- 未处理的测量步骤准备进行测量并完成测量。根据测量任务的不同，准备工作包括自动酸化、吹扫和稀释样品。
- 不会再次准备已经充分准备好的测量步骤。当序列重新启动时，将对测量步骤进行测量。
- 重新启动时会跳过处理过程被中断的测量步骤。序列从下一步开始。


您可以通过以下图标识别序列中测量步骤的状态：

图标	描述
 (绿色)	测量步骤顺利完成。
	测量步骤已为测量做好充分准备，但尚未测量。
 (红色)	测量中断。
 (红色)	准备工作中断。
	测量数据尚未处理..
	当序列重新启动时，将继续在此测量步骤进行处理。

如有需要，您可以通过上下文菜单编辑测量步骤的状态，从而决定如何进一步处理这些步骤。

- ▶ 从序列表中选择一个或多个测量步骤。
- ▶ 右键单击序列表，打开上下文菜单。
- ▶ 选择状态 | 设置步骤为未准备 命令，将所选测量步骤的状态设置为未处理。
- ▶ 选择状态 | 重置选定步骤 命令，将多个测量步骤设置为未处理。
- ▶ 选择状态 | 重置所有的步骤 命令，将所有测量步骤设置为未处理。
 - ✓ 在序列重新启动时准备和完成测量步骤。
- ▶ 选择状态 | 设置步骤为已准备 命令，将选定的测量步骤设置为准备就绪。
 - ✓ 重新启动序列时，不会再次准备测量步骤，而是进行测量。
- ▶ 点击 ，继续测量中止的序列。
 - ✓ 软件会通过确认提示告知您测量步骤的处理情况。
- ▶ 使用 是 确认提示，继续测量序列。

7.10 编辑和测量已保存的序列




您可以稍后加载已保存的序列，必要时对其进行编辑，然后点击  图标开始测量。

您可以将保存的序列作为日常工作的模板。您还可以再次测量已经全部测量过的序列。

特别是如果您要每天校准，准备一个序列并反复测量会有帮助。

使用一个序列作为模板

您可以准备一个序列，例如包含测量空白值、日因子和 QC 标准的典型测量序列。您可以将此序列作为日常操作的模板。

- ▶ 使用菜单选项 **序列 | 序列打开序列**。
- ▶ 从 **概述** 中选择序列。
- ▶ 双击或单击 **加载** 按钮加载所选序列。
- ▶ 查看和编辑序列的测量步骤。
- ▶ 如有必要，可点击  图标以相同名称保存编辑后的序列，或点击  图标以新名称保存。
- ▶ 点击  开始测量序列。
 - ✓ 您编辑了已保存的序列并将其用作新序列的模板。

再次测量序列

您可以再次测量已经完全测量过的序列。

重复测量时，软件会删除序列中的中间结果。不过，旧的结果仍会保留。您可以在**结果表**窗口中打开并查看已保存结果的结果表。

- ▶ 使用菜单选项**序列 | 序列**打开序列。
- ▶ 从**概述** 中选择一个序列。
- ▶ 双击或单击**加载** 按钮加载所选序列。
 - ✓ 如果某个序列已经完全测量完毕，软件会显示确认提示：**该序列之前已经测量过，因此包含了最后的结果。您是否想清除此窗口中的所有临时结果并开始下一次运行？**
- ▶ 用**是** 确认提示，从序列中删除中间结果。
 - i** 注意！软件不会从结果表中删除旧结果。
- ▶ 如果需要，单击**结果表**后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用**创建新的结果表**创建新的结果表。
- ▶ 单击 **▶** 开始序列的新测量。
 - ✓ 软件会再次测量序列，并将结果保存在选定的结果表中。

如果将结果保存在与上次测量相同的结果表中，软件将不会覆盖旧的结果。软件会将新结果添加到结果表中。软件不会更改测量步骤的名称。

每日校准

如果您想每天进行校准，建议您保存一个带有校准步骤的序列，必要时还可以保存进一步的测量步骤，然后每天再次测量该序列。软件会自动使用新的校准来分析序列中包含的样品、QC 标准和日常因子。

- ▶ 使用菜单选项**序列 | 序列**打开序列。
- ▶ 从**概述** 中选择一个序列。
- ▶ 双击或单击**加载** 按钮加载所选序列。
 - ✓ 软件将显示提示：**请调整以前分配的标准曲线。**软件会自动重命名校准，在名称中添加当前日期和时间。
- ▶ 如有需要，重新命名**新名称** 输入字段中的校准。此外，可输入备注。
 - ✓ 如果名称已被使用，软件将显示错误信息。
- ▶ 使用**确定** 关闭窗口，测量新校准。
 - 如果单击**取消**退出窗口，软件会将新校准点分配给现有校准。
- ▶ 有关进一步的测量步骤，请检查**步骤属性** 面板上**校准** 标签中的指定校准。
 - ✓ 软件会自动将新的校准值分配给旧校准值所对应的所有样品、QC 标准和日因子。
- ▶ 如果需要，单击**结果表**后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用**创建新的结果表**创建新的结果表。
- ▶ 单击 **▶** 开始测量序列。
 - ✓ 软件测量序列并创建新的校准。软件使用新的校准来评估序列中包含的样品、QC 标准和日常因子。




7.11 进行 NPOC 测量


在 NPOC 分析中，您需要确定不可净化有机碳总量。酸化样品后，手动或在自动进样器上清除形成的二氧化碳。然后，分析仪测定样品中残余的有机碳。

采用流动注射技术的分析仪可以在吸出一个样品的同时，在自动进样器上吹扫第二个样品。有些自动进样器可以自动酸化样品。这使整个过程实现了高度自动化。

- ▶ 设置 NPOC 吹扫流量。
吹扫流量已预设，但可根据测量任务进行调整。
 - 通过**仪器 | 单一控制步骤 | 吹扫** 菜单命令激活吹扫流量。
在“NPOC”针阀处设置气体流量。
- ▶ 准备 NPOC 方法。
- ▶ 在方法设置中，在**吹扫时间 1** 中定义清洗时间。
- ▶ 在手动模式或自动进样器的非并行吹扫模式下，您可以在多次测定之间再次吹扫样品。
 - 为此，请在**吹扫时间 2** 中设置第二吹扫时间。
 - 在**平行样** 选项卡上，选择要再次吹扫样品的重复测量次数。为此，请勾选**吹扫复选框**。
- ▶ 在自动进样器上搅拌样品，实现高效吹扫。在**搅拌速度** 中指定搅拌强度。
- ▶ 根据需要选中带有**TIC 控制** 复选框。然后，软件使用 TIC 测量来检查 TIC 是否已完全吹扫。确定的值只是一个校验值，不包含在测量结果中。
- ▶ 为自动酸化样品，请选中方法设置中的**自动酸化** 复选框。
 - AS 60：将酸容器放在酸位置。
 - AS vario：将酸容器放在样品盘的酸位置：
该酸位置在 NPOC 方法的序列中被屏蔽，不能用于样品。
提示：如果酸位置未知，则使用菜单命令**仪器 | 进样器校准 | 酸性位置** 移动到样品盘上的酸位置。

样品盘	酸性位置
47 (dilut)	28
52	42
72	55
100	85
146	131

- EPA 进样器：将酸容器放在样品盘的 54 酸位置。
- ▶ 或者，在自动进样器外将样品酸化至<2。
- ▶ 在样品托盘上提供样品。
- ▶ 手动取样时，将样品和吹扫套管浸入酸化样品中。
- ▶ 使用**测量 | 添加新序列** 菜单选项创建新的序列。
- ▶ 要进行并行样品吹扫，请在**序列属性** 面板中选择**平行吹扫** 选项。
- ▶ 使用**按方法添加** 按钮按顺序创建使用 NPOC 方法的测量步骤。
- ▶ 要在 NPOC 测量后继续进行非 NPOC 测量，请在两次测量之间在样品盘上留出一个空位。
 - 软件会发出相应的信息。当样品正确放置在样品盘上时，用**确定** 确认信息。软件继续测量。
 - 否则用**取消** 确认消息。正确放置样品。点击  图标继续序列。
- ▶ 单击**结果表**后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用**创建新的结果表** 创建新的结果表。
除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：**程序 | 设置 | 结果表**
-  **注意！** 如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。

- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在另存为窗口中设置序列的名称，然后用确定确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 不创建新序列，也可以使用已保存的序列。在序列窗口中选择已保存的序列，然后双击加载它。要进行并行样品吹扫，请在序列属性面板中选择平行吹扫选项。
- ▶ 单击 ▶ 开始测量。
 - ✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列中添加更多测量或控制步骤。

根据 NPOC plus 方法进行的 NPOC 分析

此方法是专门为检测高 TIC 含量或高溶解 CO₂ 浓度样品中低 TOC 含量而开发的。通常建议使用 NPOC 方法分析此类样品。但是对于较高的，尤其是未知的 TIC 含量，可能需要很长时间 (t > 10 min) 才能完全吹除 CO₂。因此使用这种方法需要在外部吹除无机结合碳。

NPOC plus 方法是 NPOC 和微分法的组合。

- 在分析仪 (pH < 2) 外对样品进行酸化。
- 即将分析前应吹除外部形成的大部分二氧化碳。
- 准备 NPOC plus 方法并分析样品。
- 分析仪测定已制备样品的 TC 和 TIC 含量，并根据差值计算 NPOC 含量。

由于您已经从外部吹除了大多数以无机方式结合的碳，因此使用此方法确定的 TIC 值仅是计算值，与分析无关。

在样品制备过程中，高挥发性的有机物质也会被吹除，因此不会被检测到。

型号为 multi N/C 3300 和 multi N/C 3100 的设备可以对样品进行自动和智能稀释。



i 注意！NPOC 模式下的自动酸化和自动或智能稀释通常不能同时进行。

7.12 测量和编辑空白

您可以确定序列中的空白。在确定新空白之前，软件会自动将测量结果用于所有后续测量。


测量空白

- ▶ 提供空白样。
- ▶ 使用测量 | 添加新序列 菜单选项创建新的序列。
- ▶ 使用按方法添加创建序列中的测量步骤。确保方法设置（如样品量）与设备配置相匹配。
- ▶ 从下拉菜单或按方法添加窗口中选择方法。软件需要一种合适的方法来测量空白。不过，软件存储空白的方法与相应测量通道（TC、IC、NPOC、TN）的方法无关。
- ▶ 点击样品类型，然后从下拉菜单中选择样品类型：
 - 制备用水空白 (PB)：制备标准用水的空白 (QC 标准、日系数、校准)
 - H₃PO₄ 试剂空白 (RB) 和 Na₂S₂O₈ 空白 (RB)：试剂磷酸和过硫酸钠 (Na₂S₂O₈) 的空白。该程序已在软件中定义：空白测定的试剂取自试剂瓶。
i 注意！不能用差分法测量试剂空白。
 - 稀释空白 (DB)：稀释水为空白。在样品盘上准备一个装有超纯水的样品容器，以确定空白值。
 - 洗脱空白 (EB)：用于洗脱拭子的水的空白
 - 舟空白 (BB)：将固体样品引入分析仪的舟的空白

- ▶ 在**步骤类型属性** 面板中定义空白的限值。
- ▶ 从**动作**：旁边的下拉菜单中选择超出限制时要采取的操作，例如**取消** 以中止序列。
- ▶ 单击**结果表**后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用**创建新的结果表**创建新的结果表。
除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：**程序 | 设置 | 结果表**
- ▶ **i** 注意！如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在**另存为**窗口中设置序列的名称，然后用**确定**确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 单击 ▶ 开始测量。
 - ✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列中添加更多测量或控制步骤。

查看和编辑空白

无论采用哪种方法，软件都会保存空白。您可以按顺序查看软件中保存的空白。如果您有适当的权限，就可以编辑序列中的空白。更改仅适用于序列。


- ▶ 使用**测量 | 添加新序列**菜单选项创建新的序列。
- ▶ 使用**按方法添加**创建序列中的测量步骤。确保方法设置（如样品量）与设备配置相匹配。
- ▶ 从下拉菜单或**按方法添加**窗口中选择方法。
- ▶ 从序列表中选择一个或多个测量步骤。
- ▶ 在**步骤属性** 面板的**空白** 选项卡上查看每个测量通道保存的空白。
- ▶ 根据需要手动编辑空白。更改应用于当前序列。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在**另存为**窗口中设置序列的名称，然后用**确定**确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 单击 ▶ 开始测量。
 - ✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列中添加更多测量或控制步骤。

软件在计算结果时会考虑空白。

或者，您也可以在测量结果中查看计算所用的空白，并在此进行编辑。

查看和编辑设备配置中的空白

无论采用哪种方法，软件都会保存空白。您可以在**仪器** 窗口中查看软件中保存的空白。如果您有适当的权限，就可以编辑设备配置中的空白。这些更改适用于所有软件。


- ▶ 使用**仪器 | 仪器**菜单选项打开**仪器**窗口。
- ▶ 在**仪器概述** 表中选择设备配置。
- ▶ 右键单击打开右键菜单，选择**空白值**。
- ▶ 在**空白值** 窗口中查看不同选项卡上的空白值。
- ▶ 如有必要，可点击  图标编辑空白。
- ▶ 单击**确定**按钮确认更改。
 - ✓ 更改后的空白适用于所有软件。




另见

- ▣ 试剂空白值 [▶ 63]
- ▣ 稀释剂空白值 [▶ 63]
- ▣ 清除空白值 [▶ 64]
- ▣ 舟空白值 [▶ 64]

7.13 进行校准

为使软件能够计算测量结果，必须使用准备好的方法对每个测量通道进行校准。

- ▶ 在方法表中准备方法。
- ▶ 使用测量 | 添加新序列菜单选项创建新的序列。
- ▶ 点击  图标打开校准向导向导。
- ▶ 在校准向导向导中，单击选择方法 打开选择方法 窗口。从概述表中选择准备好的方法。单击确定确认您的选择。
- ▶ 在校准 中为校准指定名称。默认名称为：Methodtype_Cal。
- ▶ 可选地：点击备注，然后输入评论。用应用 确认注释。
- ▶ 选择校准类型。最好使用恒定的样品量和可变的标准浓度进行多点校准。为此，请选择固定体积 选项。
- ▶ 对于恒定体积的校准：软件自动使用方法中设定的样品量。只有当校准标准的体积偏离方法中设定的体积时，才可更改体积。
- ▶ 要进行恒定浓度校准，请选择固定浓度 选项。在表格中输入标准物质的浓度。
- ▶ 通过制备用水空白：选择制备用水空白的测定方法。
 - 如果选择 测量值，软件会在校准前立即测量制备用水的含量。为此，在自动进样器上准备一个装有制备用水的容器。如果手动输入样品，软件会提示您提供制备水。
 - 如果选择 设定值，请分别确定制备用水的含量，并在各参数的输入栏中输入 (AU/ml)。
 - 如果软件不考虑制备用水空白，请在输入框中输入值 "0"。
- ▶ 在校准点：设置校准点数。
一次校准最多可创建 50 个校准点。
- ▶ 填写校准表。
 - 软件定义校准点的名称。如有必要，可在添加新序列 窗口中调整名称。
 - 对于平行样，软件会输入方法中指定的最大重复测量次数。根据需要更改数字。
 - 用于恒定体积校准：在输入字段中输入为每个测量通道 (TC, TN,等) 准备的标准物质的浓度。
 - 用于恒定浓度校准：在输入字段中输入每个测量通道的标准体积。
- ▶ 根据需要调整单位。为此，请右键单击表格打开上下文菜单。选择设置输入单位 命令。从下拉菜单中为浓度 和数量 选择所需单位。
- ▶ 根据需要调整小数位数。激活相应的 使用数字 复选框，将小数点位数转移到向导中。
- ▶ 单击确认按钮确认更改。

- ✓ 软件会将更改的单位和小数位传送到 **校准向导** 向导。
将校准传输到序列时，软件会将条目转换为您在 **程序 | 设置 | 单位和精度** 菜单命令下定义的单位。
- ▶ 使用 **分割点** 列中的复选框激活每个测量通道的分割点。这样就可以定义多个校准范围。
- ▶ 如有需要，请为每个测量通道和校准范围定义最小确定系数 R^2 和回归类型。
- ▶ 如果校准未达到确定系数，请从下拉菜单中选择操作，例如 **取消** 以中止校准。
- ▶ 通过 **应用** 将准备好的校准加入序列。
 - ✓ 软件将校准步骤转移到序列中。为了检查测定系数，软件在序列中定义了一个 "QA..." 步骤（质量保证）。此处不进行测量。
- ▶ 软件会自动建议校准步骤使用样品盘上的第一个空闲空间。如有必要，可在 **步骤属性 | 步骤 | 样品位置** 中选择一个步骤并更改位置。
- ▶ 查看 **步骤属性** 中的方法设置，必要时进行调整。
- ▶ 如有必要，可在序列中增加更多测量步骤。除校准外，还可按相同顺序执行其他测量。
- ▶ 要计算测量结果，请从 **步骤属性** 面板 **校准** 选项卡的下拉菜单中选择已创建的校准。
- ▶ 单击 **结果表** 后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用 **创建新的结果表** 创建新的结果表。
除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：**程序 | 设置 | 结果表**
- i** 注意！如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在 **另存为** 窗口中设置序列的名称，然后用 **确定** 确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 用  图标启动序列。
 - ✓ 分析系统对序列进行处理。





软件在下部窗口区域和结果表中以图形方式显示记录期间的当前测量结果。

在 **步骤结果** 面板中，您可以查看已测量样品的结果。对序列进行处理后，您可以在 **结果** 菜单中看到结果。





您可以在 **校准** 窗口中查看和编辑校准。

如果您想每天进行校准，建议您保存一个带有校准步骤的序列，必要时还可以保存进一步的测量步骤，然后每天再次测量该序列。软件会自动使用新的校准来分析序列中包含的样品、QC 标准和日常因子。

另见

-  **校准** [▶ 61]
-  **制备用水空白值** [▶ 62]
-  **编辑和测量已保存的序列** [▶ 80]
-  **校准菜单** [▶ 96]

7.14 进行固体校准

- ▶ 在仪器窗口中为固体测量准备设备配置。
 - 在使用外部固体模块进行手动或自动固体测量的仪器配置区域，从炉类型：下拉菜单中选择外部水平选项。
 - 若要使用内部固体模块，请选择内部水平选项。
 - 若要自动固体分析，请选择进样器类型：选择 FPG 48 自动进样器。
 - 使用 保存按钮保存设备配置，然后单击设为默认按钮激活。
- ▶ 准备用于固体测量的 TC 方法。
 - 在方法设置中，选中步骤属性选项卡上的方法用于固体测量复选框。
 - 对于手动进样：选中手动测量方法参数复选框。
 - 在单位参考下，选择按质量选项，即可称量不同质量的固体样品。
 - 根据分析仪操作说明书中的规格设置炉温。
 - 用于自动进样：指定方法参数炉孔位置，保温时间 and 炉进料速度。
- ▶ 使用测量 | 添加新序列菜单选项创建新的序列。
- ▶ 在序列属性面板中选中复选框是固体测量。
- ▶ 点击  图标打开校准向导。
- ▶ 在校准向导中，单击选择方法打开选择方法窗口。从概述表中选择准备好的方法。单击确定确认您的选择。
- ▶ 激活固定浓度选项。
- ▶ 在向导中输入固体标准物质的碳含量。
- ▶ 根据需要调整单位。为此，请右键单击表格打开上下文菜单。选择设置输入单位命令。从下拉菜单中为浓度和数量选择所需单位。
- ▶ 根据需要调整小数位数。激活相应的使用数字复选框，将小数位数转移到向导中。
- ▶ 单击确认按钮确认更改。
 - ✓ 软件会将更改的单位和小数位传送到校准向导。
 - 将校准传输到序列时，软件会将条目转换为您在程序 | 设置 | 单位和精度菜单命令下定义的单位。
- ▶ 在校准序列开始时测量舟空白值，或单独确定该值并将其输入向导。
- ▶ 在校准点：中指定校准点数量。
- ▶ 在船上称量不同质量的固体标准。
- ▶ 填写校准表。在表中输入重量。
- ▶ 通过应用将准备好的校准加入序列。
- ▶ 单击结果表后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用创建新的结果表创建新的结果表。
除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：程序 | 设置 | 结果表
- ▶  注意！如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在另存为窗口中设置序列的名称，然后用确定确认。软件相应地命名窗口。

- ▶ 单击 ▶ 开始测量。
 - ✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列中添加更多测量或控制步骤。

有关如何进行手动和自动固体测量的信息，请参阅 HT 1300 固体测量模块的用户手册。



您可以选择使用不同碳含量的标准进行固体校准。为此，请在向导中选择 **固定质量** 选项，并始终使用相同的质量。

7.15 重新测量或添加校准标准

随后可以重复测量校准点，或在校准中添加更多校准点。

通过选择序列中的**校准** 样品类型来测量单个校准点。软件会自动将校准点传输到选定校准中。

测量校准点

- ▶ 使用**测量 | 添加新序列**菜单选项创建新的序列。
- ▶ 使用**按方法添加**创建序列中的测量步骤。确保方法设置（如样品量）与设备配置相匹配。
- ▶ 从下拉菜单或**选择方法**窗口中选择方法。
 - i** 注意！使用作为校准基础的方法。
- ▶ 点击**样品类型** 按钮，然后从下拉菜单中选择**校准** 样品类型。
- ▶ 在**步骤属性** 面板中，在**校准** 选项卡中浏览到所需的测量通道。从下拉菜单中选择**校准**。
- ▶ 在**步骤类型属性** 面板中，在**目标浓度** 中输入标准物质的浓度。
- ▶ 从**步骤类型属性** 面板的下拉菜单中选择要重新测量或添加标准的校准。或者，在**选择校准** 窗口中单击...选择校准。
- ▶ 单击**结果表**后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用**创建新的结果表**创建新的结果表。除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：**程序 | 设置 | 结果表**
 - i** 注意！如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在**另存为**窗口中设置序列的名称，然后用**确定**确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 单击 ▶ 开始测量。
 - ✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列中添加更多测量或控制步骤。

软件会从测量结果中减去制备用水的空白值。有关制备水空白值，请参阅**步骤属性** 面板，**空白**选项卡，**水** 字段。

在校准中手动加入校准点

在**结果表** 窗口中，您也可以手动将校准点包含在校准中。

- ▶ 使用**结果详情 | 结果表**菜单选项打开**结果表**窗口。
- ▶ 从**概述** 表中选择带有新校准点的结果表。
- ▶ 双击或使用**加载** 按钮打开结果表。
- ▶ 在**结果表** 窗口中的**概述**表中选择所需的测量值。
- ▶ 单击**添加到校准** 按钮，然后在**选择选择校准** 窗口中将校准点分配给校准。

- ▶ 单击**确定**确认您的选择。
 - ✓ 您在校准中添加了一个新的校准点。

7.16 确定日系数



您可以使用日系数来检查和校正校准。要确定日系数，请在序列中选择日系数 样品类型，并测量一个或多个标准溶液。

如果日系数在指定范围内，软件会自动将日系数纳入选定的校准中。

软件会将所有后续测量结果乘以日系数。软件使用该日系数，直到您向校准发送新的日系数。


二次回归只能使用一个校准范围。该软件会自动将日系数分配到正确的校准范围。日系数仅适用于该校准范围。

测量日系数


- ▶ 提供一个或多个标准解决方案。
- ▶ 使用**测量 | 添加新序列**菜单选项创建新的序列。
- ▶ 使用**按方法添加**创建序列中的测量步骤。确保方法设置（如样品量）与设备配置相匹配。
- ▶ 从下拉菜单或**按方法添加**窗口中选择方法。
- ▶ 单击**样品类型**，然后从下拉菜单中选择日系数 样品类型。
- ▶ 在**步骤类型属性** 面板中，在**目标浓度** 中输入标准物质的浓度。
- ▶ 在**下限** 和**上限** 中指定日系数限值（mg/l）。建议：下限 $0.8 \times c$ （标准），上限 $1.2 \times c$ （标准）
- ▶ 从下拉菜单中选择超出限值时的操作。建议：如果超出限值，取消序列并重新校准。
- ▶ 从**步骤类型属性** 面板的下拉菜单中选择适用日系数的校准。或者，在**选择校准** 窗口中单击...选择校准。
- ▶ 在**校准** 选项卡上的**步骤属性** 面板中，查看与每个测量通道的方法相关联的校准。校准系数显示在下拉菜单中。
如果需要，从下拉菜单中选择不同的校准来计算测量结果。
如果未将校准与方法链接或未在此处选择校准，软件将使用存储在设备参数中的标准校准。
- ▶ 单击**结果表**后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用**创建新的结果表**创建新的结果表。
除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：**程序 | 设置 | 结果表**
- ▶ **i** 注意！如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在**另存为**窗口中设置序列的名称，然后用**确定** 确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 单击 ▶ 开始测量。
 - ✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列中添加更多测量或控制步骤。

查看日系数

- ▶ 在**结果表** 窗口中查看计算结果中的日因数。
- ▶ 使用**校准 | 校准**菜单选项打开校准窗口。

- ▶ 在**概述**表中选择校准。在此之前，请单击图标（在表格上方）更新校准概览。
- ▶ 在**详细信息**选项卡上的**详细信息**视图中查看校准数据。
- ▶ 检查**日系数**中校准系数表中的日系数，必要时进行更改。

另见

 日系数 [▶ 62]

7.17 自动或智能稀释样品

如果使用 multi N/C 3300 或 multi N/C 3100，软件可以在以下自动进样器上自动智能地稀释样品：

自动进样器	样品盘	自动稀释	智能稀释	自动酸化
AS vario	47 (dilut)	是	否	否
	72	是	是	是 (智能稀释) 否 (自动稀释)
	100	是	是	是 (智能稀释) 否 (自动稀释)
AS 21hp	10 (dilut)	是	是	否
AS 10e (无搅拌功能)	10 (dilut)	是	是	否

在自动和智能稀释情况下，软件默认禁用样品自动酸化选项。

- 因此，对于 NPOC 方法，您必须手动酸化原始样品。
- 对于自动稀释，您也可以用移液管将酸液移入空的样品容器中，自动进样器会将样品稀释到容器中。
- 在这两种情况下，检查样品的 pH 值是否为 <2。只有这样，自动进样器才能在吹扫过程中将无机碳化合物 (TIC) 以 CO₂ 的形式完全清除。

使用 AS vario 自动进样器和 72 或 100 样品盘时，智能稀释是一个例外。在这种情况下，可以进行自动酸化。以下位置必须保持空闲，以便放置酸容器：

- 位置 55 (72 样品盘)
- 位置 85 (100 样品盘)

7.17.1 自动稀释

在测量 TC 或 TN_b 含量非常高的样品或未知高负载样品基质时，使用自动稀释。您可以在软件中指定稀释比例。

稀释具有以下优点

- 延长反应器的使用寿命
- 您可以通过自动化节省工作时间。
- 高浓度范围无需额外校准。
- ▶ 使用带有合适样品盘的自动进样器，例如带有 72 样品盘的 AS vario 自动进样器。在 AS vario 自动进样器上安装合适的套管支架。

创建并激活设备配置

- ▶ 创建自动稀释的设备配置。请通过菜单命令**仪器 | 仪器**打开**仪器**窗口。

- ▶ 在**仪器类型**：中选择 multi N/C 3300 或 multi N/C 3100。
- ▶ 在**进样器类型**：和**样品盘尺寸**：中，选择自动进样器和样品盘，例如 AS vario 和 72。在**样品瓶尺寸 (mL)**：中，选择 50 ml。
当选择 100 用于**样品瓶尺寸 (mL)**：时：选择 20 ml。
当选择 47 (dilut) 用于**样品瓶尺寸 (mL)**：时：选择 50 ml。
- ▶ 如果由软件显示，请勾选**自动稀释**复选框。
- ▶ 单击 按钮保存设备配置。
- ▶ 从**仪器概述**表中选择设备配置，单击**设为默认**将其激活为默认配置。或者，双击以激活设备配置。

装入 72 样品盘

- ▶ 在 1 至 36 号位置 (50 ml) 装入装有空样品容器的样品盘。
- ▶ 将原始样品装入样品容器 (50 ml)。在 37 至 72 号位置将样品装入样品盘。
- ▶ 将不需要稀释的样品放在 1 至 36 号位置中的任何一个位置。
- ▶ 将超纯水注入超纯水瓶。

装入 100 样品盘

- ▶ 在 1 至 50 号位置 (20 ml) 装入装有空样品容器的样品盘。
- ▶ 将原始样品装入样品容器 (20 ml)。在 51 至 100 号位置将样品装入样品盘。
- ▶ 将不需要稀释的样品放在 1 至 50 号位置中的任何一个位置。
- ▶ 将超纯水注入超纯水瓶。

装入 47 (dilut) 样品盘

- ▶ 为样品盘配备空的样品容器 (50 ml)。
- ▶ 将原始样品装入样品容器 (12 ml)。将样品放在样品盘上。
- ▶ 将不需要稀释的样品装入样品容器 (50 ml) 并且把它们放在托盘的外侧一排。
- ▶ 将超纯水注入超纯水瓶。

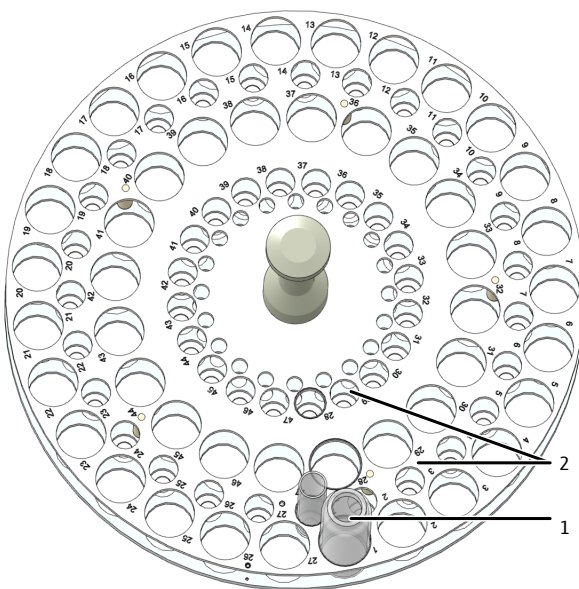


图 40 稀释盘

1 位置 1 ... 47 用于 50 ml 容器




2 位置 1 ... 47 用于 12 ml 容器

调整 AS vario 自动进样器

- ▶ 使用**仪器 | 进样器校准**菜单选项打开**进样器校准**窗口。
- ▶ 将样品进样套管对准样品盘。为此，请在**进样器位置**表中选择**位置 1**。
✓ 如果使用 47 (dilut) 托盘，自动进样器臂将移至外排的位置 1。
- ▶ 在样品容器中调整位置 1 (50 ml) 对于 100 托盘，请使用样品容器 (20 ml)。

- ▶ 使用-升高/+ 降低 分步调节浸入深度。
- ▶ 每次更改后，单击**移动**按钮移动到相应位置并进行检查。
- ▶ 用**确认**保存调整后的位置。
- ▶ 如果使用 47 (dilut) 托盘，则在小型样品容器中检查位置 1 (12 ml)。为此，请在**移到位置**区域选择位置 1，然后单击**移动**按钮。
如果**稀释位置**复选框被激活，自动进样器将移动到内行的位置 1。

创建方法和序列

- ▶ 准备方法。在**方法**视图中编辑方法设置：
- ▶ 通过**稀释：体积样本**和**稀释：总体积**选择稀释比例。
- ▶ 使用**测量 | 添加新序列**菜单选项创建新的序列。
- ▶ 在**序列属性**面板中激活复选框**自动稀释**。
- ▶ 使用**按方法添加**创建序列中的测量步骤。确保方法设置（如样品量）与设备配置相匹配。
- ▶ 从下拉菜单或**按方法添加**窗口中选择方法。
- ▶ 单击**样品类型**，然后选择**稀释空白 (DB)**选项来确定稀释空白值。在样品盘上准备一个装有超纯水的样品容器，以确定空白值。
- ▶ 可选择在序列中的方法设置中调整各个测量步骤的稀释比例。为此，请编辑**步骤**选项卡上**步骤属性**面板中**稀释：体积样本**和**稀释：总体积**中的条目。
- ▶ 对于不需要稀释的样品，在**稀释：体积样本**和**稀释：总体积**中均输入1。
- ▶ 在**校准**选项卡上的**步骤属性**面板中，查看与每个测量通道的方法相关联的校准。校准系数显示在下拉菜单中。
如果需要，从下拉菜单中选择不同的校准来计算测量结果。
如果未将校准与方法链接或未在此处选择校准，软件将使用存储在设备参数中的标准校准。
- ▶ 单击**结果表**后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用**创建新的结果表**创建新的结果表。
除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：**程序 | 设置 | 结果表**
i 注意！如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在**另存为**窗口中设置序列的名称，然后用**确定**确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 单击  开始测量。
 - ✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列中添加更多测量或控制步骤。

使用 AS 21hp 和 AS 10e 自动进样器进行稀释

- 使用 10 (dilut) 托盘。
- 将样品装入 50 ml 中的样品容器中。
- 将未稀释的原始样品置于 11 至 20 号位置。
- 在 1 至 10 号位置提供空 50 ml 样品容器用于稀释。位置 11 的样品被稀释至位置 1 的样品容器中，依此类推。
- 将不需要稀释的样品放在 1 至 10 号位置中的任何一个位置。在**稀释：体积样本**和**稀释：总体积**中均输入1。
- 按照分析仪操作说明书的说明，在开始测量前调整自动进样器。

自动稀释时应遵守以下规定：

- 自动进样器按照选定的稀释比例将原始样品稀释到提供的样品容器中。
- 在 NPOC 模式下工作时，每个样品都会被稀释成一个完整的系列，然后进行分析。自动进样器对稀释后的样品进行吹扫。

- 多次测定的可能次数取决于所选方法、注入量和冲洗周期数。
- 软件会显示稀释样品的面积积分，并根据这些值自动计算未稀释原始样品的浓度。

7.17.2 智能稀释

对于 TC 或 TN_b 浓度未知的样品或样品基质未知的样品，智能稀释尤其有用。

通过智能稀释，分析仪首先测量原始样品。第一次测定后，软件会使用 TC 或 TN_b 含量来决定是自动稀释样品还是继续重复测量。软件可自行确定稀释比例。

- ▶ 使用带有合适样品盘的自动进样器，例如带有 72 样品盘的 AS vario 自动进样器。在 AS vario 自动进样器上安装合适的套管支架。

创建并激活设备配置

- ▶ 为智能稀释创建设备配置。请通过菜单命令 **仪器 | 仪器** 打开 **仪器** 窗口。
- ▶ 在 **仪器类型**：中选择 multi N/C 3300 或 multi N/C 3100。
- ▶ 在 **进样器类型**：和 **样品盘尺寸**：中，选择自动进样器和样品盘，例如 AS vario 和 72。在 **样品瓶尺寸 (mL)**：中，选择 50 ml。
当选择 100 用于 **样品瓶尺寸 (mL)**：时：选择 20 ml。
当选择 47 (dilut) 用于 **样品瓶尺寸 (mL)**：时：选择 50 ml。
- ▶ 单击 按钮保存设备配置。
- ▶ 从 **仪器概述** 表中选择设备配置，单击 **设为默认** 将其激活为默认配置。或者，双击以激活设备配置。

装入 72 样品盘

- ▶ 将原始样品装入样品容器 (50 ml)。将样品放置在样品盘上的位置 1 至 36。
- ▶ 在 37 至 72 号位置 (50 ml) 装入装有空样品容器的样品盘。位置 1 的样品被稀释至位置 37 的样品容器中，依此类推。
- ▶ 如果在 NPOC 方法中激活了 **自动酸化** 选项，则不要将样品放在位置 19 和 55 中。将酸容器放在位置 55。
- ▶ 将超纯水注入超纯水瓶。

装入 100 样品盘



- ▶ 将原始样品装入样品容器 (20 ml)。将样品放置在样品盘上的位置 1 至 50。
- ▶ 在 51 至 100 号位置 (20 ml) 装入装有空样品容器的样品盘。位置 1 的样品被稀释至位置 51 的样品容器中，依此类推。
- ▶ 如果在 NPOC 方法中激活了 **自动酸化** 选项，则不要将样品放在位置 35 和 85 中。将酸容器放在位置 85。
- ▶ 将超纯水注入超纯水瓶。

调整 AS vario 自动进样器

- ▶ 使用 **仪器 | 进样器校准** 菜单选项打开 **进样器校准** 窗口。
- ▶ 将样品进样套管对准样品盘。为此，请在 **进样器位置** 表中选择 **位置 1**。
✓ 自动进样器臂移动到位置 1 上。
- ▶ 在样品容器中调整位置 1 (50 ml) 对于 100 托盘，请使用样品容器 (20 ml)。
- ▶ 使用 **-升高/+降低** 分步调节浸入深度。
- ▶ 每次更改后，单击 **移动** 按钮移动到相应位置并进行检查。
- ▶ 用 **确认** 保存调整后的位置。

准备方法和序列

- ▶ 准备方法。在 **方法** 视图中编辑方法参数。**稀释：体积样本** 和 **稀释：总体积** 对智能稀释没有影响。
- ▶ 使用 **测量 | 添加新序列** 菜单选项创建新的序列。
- ▶ 在 **序列属性** 面板中激活复选框 **智能稀释**。

- ▶ 使用按方法添加创建序列中的测量步骤。确保方法设置（如样品量）与设备配置相匹配。
- ▶ 从下拉菜单或按方法添加窗口中选择方法。
- ▶ 点击样品类型，然后选择稀释空白 (DB) 选项来确定稀释空白值。在样品盘上准备一个装有超纯水的样品容器，以确定空白值。
- ▶ 在校准选项卡上的步骤属性面板中，查看与每个测量通道的方法相关联的校准。校准系数显示在下拉菜单中。
如果需要，从下拉菜单中选择不同的校准来计算测量结果。
如果未将校准与方法链接或未在此处选择校准，软件将使用存储在设备参数中的标准校准。
- ▶ 单击结果表后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用创建新的结果表创建新的结果表。
除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：程序 | 设置 | 结果表
i 注意！如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在另存为窗口中设置序列的名称，然后用确定确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 单击 ▶ 开始测量。
✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列中添加更多测量或控制步骤。

使用 AS 21hp 和 AS 10e 自动进样器进行稀释

- 使用 10 (dilut) 托盘。
- 将样品装入 50 ml 中的样品容器中。
- 将未稀释的原始样品置于 1 至 10 号位置。
- 在 11 至 20 号位置提供空 50 ml 样品容器用于稀释。位置 1 的样品被稀释至位置 11 的样品容器中，依此类推。
- 按照分析仪操作说明书的说明，在开始测量前调整自动进样器。




智能稀释时要注意以下几点

- 多次测定的可能次数取决于所选方法、注入量和冲洗周期数。
- 软件会显示稀释样品的面积积分，并根据这些值自动计算未稀释原始样品的浓度。
- 稀释后的样品紧接着原始样品出现在结果表中。软件会标记稀释后的样品。

7.18 智能减少样品体积

软件可自动减少高浓度样品的进样量，使结果在校准范围内。该选项仅适用于 multi N/C 2300 和 multi N/C 3300 分析仪。

- 当样品浓度超出校准范围时，软件会启动智能体积减小功能。
- 软件可将样品量减少到最小进样量，请参见分析仪的技术数据。
- ▶ 使用测量 | 添加新序列菜单选项创建新的序列。
- ▶ 在序列属性面板中激活复选框智能减量。
- ▶ 使用按方法添加创建序列中的测量步骤。确保方法设置（如样品量）与设备配置相匹配。
- ▶ 从下拉菜单或按方法添加窗口中选择方法。

- ▶ 在校准选项卡上的步骤属性面板中，查看与每个测量通道的方法相关联的校准。校准系数显示在下拉菜单中。
如果需要，从下拉菜单中选择不同的校准来计算测量结果。
如果未将校准与方法链接或未在此处选择校准，软件将使用存储在设备参数中的标准校准。
- ▶ 单击结果表后，从下拉菜单中选择结果表。或：使用创建新的结果表创建新的结果表。
除非您选择结果表，否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置，请参见：程序 | 设置 | 结果表
i 注意！如果没有结果表，则无法开始测量。
- ▶ 单击  检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
- ▶ 如有必要，使用  保存序列。在另存为窗口中设置序列的名称，然后用确定确认。软件相应地命名窗口。
- ▶ 单击  开始测量。
 - ✓ 分析系统对序列进行处理。在测量期间，您可以向序列中添加更多测量或控制步骤。

分析仪首先测量原始样品。第一次测定后，软件会根据测定内容决定是减少样品量还是继续重复测量。

对于样品量减少的测量，软件会自动在序列中创建一个新的测量步骤。对于结果表，软件在计算样品浓度时会考虑到注射量的减少。

您可以在结果表中查看两个测量步骤的结果：

- 原始样品量的原始样品
- 原始样品，样品量减少

如果在序列属性的序列设置中选择了自动体积减少和智能稀释，软件会优先执行体积减少。只有当体积减少量不足以达到校准范围时，软件才会执行智能稀释。

8 校准菜单

您可以在**校准**菜单中管理已执行的校准。查看和编辑校准数据。

备注：

- 如果要准备和测量校准，请选择**序列**菜单。
- 如果要查看单个校准点的测量曲线或手动添加校准点到校准中，请选择**结果详情**菜单。

另见

- 📖 进行校准 [▶ 85]
- 📖 查看结果 [▶ 107]

8.1 校准窗口

请通过菜单命令**校准 | 校准**打开校准窗口。

在校准窗口中

- 您可以在**详细信息**视图中查看校准详细信息，如校准点、校准图或流程特性。如果您有相应的权限，就可以编辑校准。
- 单击**添加**按钮创建一个空校准，您可以使用**结果表**窗口中的**添加到校准**按钮添加校准点。
- 单击**删除**按钮即可删除校准。
- 可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块可防止数据被删除。
- 在**选择组**窗口中单击**分配组**，即可将定标分配到组中。
- 您可以使用**导入**和**导出**按钮导入和导出 XML 格式的校准。
- 单击**报告**查看校准报告。您可以打印报告或将其保存为 PDF 格式。

窗口布局

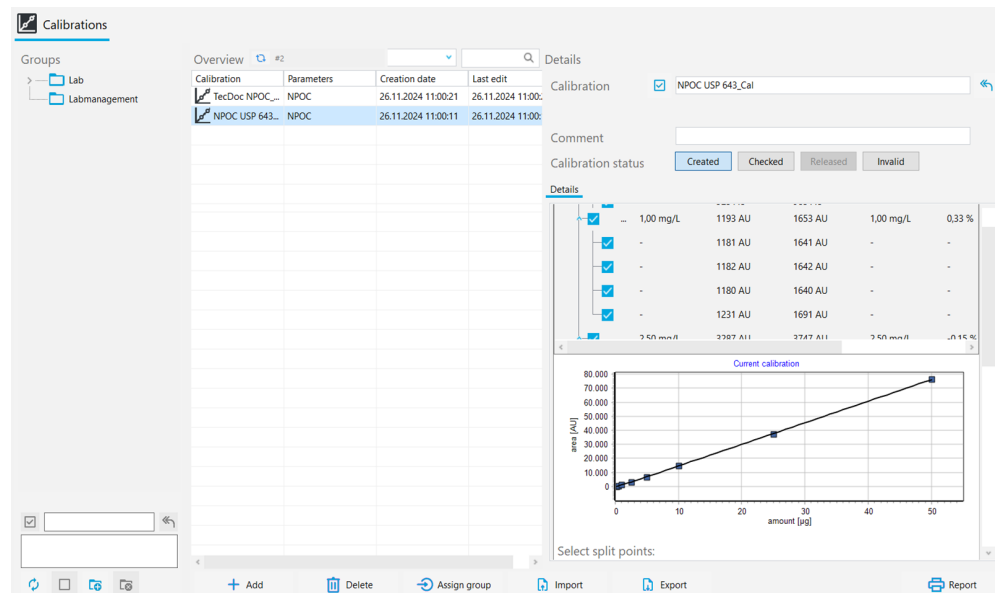


图 41 校准窗口

区域	描述
群组 (左)	管理组
概述 (中)	以表格形式概览已保存的校准结果： <ul style="list-style-type: none"> ■ 校准和校准测量参数的名称 ■ 创建和最后更改日期

区域	描述
详细信息 (右)	所选校准的详细视图： <ul style="list-style-type: none"> 一般信息：校准名称、描述、注释和发布状态 详细信息 选项卡，包含校准详细信息的详细信息 面板 详细信息 选项卡，包含方法参数的方法 面板 带有签名信息的 签名 选项卡（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）

电子签名是可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块的重要组成部分。您可以通过签名和相应的权利分配来限制使用未经批准的数据。签名时，必须输入用户名和密码。

在标准软件中，您可以设置数据的状态，例如审核。但是，您不能为数据添加电子签名。签名 选项卡仍为空。数据状态不受限制。这意味着，即使是被屏蔽的数据也可以使用。

详细信息 面板

您可以在详细信息 面板中查看校准结果。

区域	描述
制备用水空白值	制备用水空白值 如有需要，可编辑制备用水空白值，并使用确认 按钮保存
结果表	显示测量通道、校准点和单个重复测量： <ul style="list-style-type: none"> 目标浓度 面积积分的平均值（毛积分和净积分的规格，通过制备用水空白进行调整） 平均浓度 计算浓度与目标浓度的偏差百分比 制备用水空白值 样品体积 用 \vee / \wedge 来展开和折叠测量通道、校准点和重复测量的显示屏。 通过勾选或清除复选框来选择或取消选择测量数据
校准图	带 x 轴的回归图 : 含量 (绝对质量 [μg]) y 轴: 面积积分 (AU) <ul style="list-style-type: none"> 如果激活或禁用结果表中的测量值，软件会调整图形显示。 为进行缩小：将鼠标指针放在图表中，然后从左到右拖动所需的部分。 为进行放大：将放大的部分从右向左拖动。
区域 选择分割点：	通过复选框为每个测量通道 (TC、TN 等) 指定截止点和多个校准范围
范围使用单选按钮	对于所有校准量程，在线性或二次回归的基础上确定回归方程的计算方法 <ul style="list-style-type: none"> 默认：线性 默认：二次 软件会显示所选回归类型的校准系数。
工艺特征表	<ul style="list-style-type: none"> 回归类型 如果需要，为每个校准范围分别选择回归类型 校准系数 k_0, k_1, k_2 (k_2 仅用于二次回归) 校准范围的下限和上限 日系数 测定系数 R^2 检测限和定量限 (仅用于线性回归) 软件根据 DIN 32645 (校准函数) 计算过程特性，其显著性水平为 $P = 95\%$ 。


区域	描述
	软件定义了 33,3 % (具有 k = 3 因子) 相对结果不确定性的量化极限。

另见

- 📖 电子签名 [▶ 132]
- 📖 分组组织 [▶ 37]

8.2 查看校准

在**校准**窗口中，您可以查看校准图、过程特性以及各测量通道、校准点和重复测量的结果。

- ▶ 使用**校准** | **校准**菜单选项打开**校准**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择校准。在此之前，请单击图标  (在表格上方) 更新校准概览。
- ▶ 在**详细信息**选项卡上的**详细信息**视图中查看校准数据：
 - 可编辑制备用水空白值
 - 折叠式结果显示，可显示各种测量通道、校准点和重复测量结果
 - 校准图
 - 可激活多个校准范围的截止点
 - 过程特性：可选回归类型、校准系数、校准范围的下限和上限、可编辑的日系数、测定系数、检测限和定量限
- ▶ 在**方法**面板中查看方法设置。
- ▶ 在**备注**中输入可选评论。
- ▶ 更改后，单击 按钮保存校准。


8.3 编辑校准


具有相应权限的用户可以在**校准**窗口中编辑校准：

- 您可以使用复选框在结果表中激活或禁用校准点和重复测量。
- 您可以选择线性回归或二次回归。
- 您可以为多个校准范围定义截止点。
- 您可以查看和编辑制备用水空白值和日系数。

您可以为不同浓度范围指定多个校准范围。两个连续的校准范围必须有一个共同的截止点。


每次更改后，软件都会重新计算校准系数、过程特性和回归图。

- ▶ 使用**校准** | **校准**菜单选项打开**校准**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择校准。在此之前，请单击图标  (在表格上方) 更新校准概览。
- ▶ 在**详细信息**选项卡上的**详细信息**视图中查看校准数据。
- ▶ 如有必要，请进行以下更改：
 - 检查制备用水空白值。在**制备用水空白值**字段中输入新的制备用水空白值。使用**确认**接受数值。


- 在结果表中，展开测量通道、校准点的结果显示，并用  依次重复测量。如有需要，可通过复选框停用单个校准点或重复测量。
- 在选择分割点：区域为多个线性校准范围定义截止点。
- ▶ 通过范围为所有校准范围选择回归类型（线性或二次）。
 - 也可选择为流程特性表中的每个校准范围单独定义回归类型。
 - 查看和编辑流程特性表中的日系数。
- ▶ 单击 按钮保存更改。

8.4 打印和保存校准报告

打印校准报告

- ▶ 使用**校准 | 校准菜单**选项打开**校准窗口**。
- ▶ 在**概述**表中选择校准。在此之前，请单击图标 （在表格上方）更新校准概览。
- ▶ 单击**报告**打开打印预览。
- ▶ 为了更好地概览，请单击**页面概述**按钮，在报告左侧显示带有页面摘要的导航区。单击**放大**和**缩小**可放大或缩小视图。
- ▶ 在报告中添加公司徽标。单击**报告徽标**区域中的**加载**按钮，然后在 Windows 文件管理器中选择徽标，并用**打开**将其加载到报告中。
- ▶ 单击**打印机选项**设置打印机。
- ▶ 单击**页面设置**可配置页面设置，如纸张大小或方向。默认：A4，肖像。将布局应用于当前页面或所有报告页面。
- ▶ 单击**打印**开始打印。
 - ✓ 您已打印校准报告。

保存校准报告

- ▶ 使用**校准 | 校准菜单**选项打开**校准窗口**。
- ▶ 在**概述**表中选择校准。在此之前，请单击图标 （在表格上方）更新校准概览。
- ▶ 单击**报告**打开打印预览。
- ▶ 单击**保存**，然后在**另存为**窗口中指定文件名、存储目录和文件类型。
- ▶ 单击**保存**按钮保存报告。

您可以用以下文件格式保存报告：PDF（默认）、RTF、HTML、TXT、FP3。
编辑校准时，只有在保存报告后，更改才会应用到报告中。

9 结果详情 菜单

软件将测量结果保存在结果表中。结果表可以包含各种测量结果：样品、校准标准、系统适用性测试 (SST)、QC 标准和空白值。在结果详情 菜单中，您可以管理结果表和其中保存的测量结果。

在 结果详情 菜单中

- 使用**结果表** 菜单命令打开**结果表**窗口。在这里，您可以管理结果表并加载选定的结果表，以查看和编辑测量结果。
- 使用**SSTs** 菜单命令打开**SSTs** 窗口，显示系统适用性测试 (SST) 的结果。SST 仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块。

另见

📖 系统适用性测试 (SST) [▶ 133]

9.1 结果表 窗口

请通过菜单命令**结果详情 | 结果表** 打开**结果表** 窗口。

在结果表窗口中

您可以在**结果表** 窗口中管理结果表。

- 双击或单击**加载** 按钮打开选定的结果表，以便在**结果表** 窗口中查看和编辑测量结果。
- 单击**添加** 按钮，创建一个新的结果表，用于未来的测量。
- 单击**删除** 可删除保存有所有测量结果的结果表。
- 可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块可防止数据被删除。
- 在**选择组** 窗口中点击**分配组**，即可将结果表分成组。

窗口布局

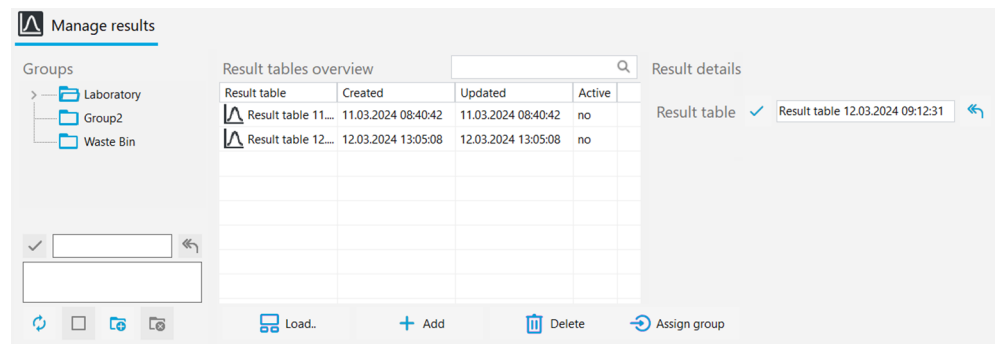


图 42 结果表窗口

区域	描述
群组 (左)	管理组
概述 (中)	以表格形式概述结果表，包括 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 结果表名称 ▪ 创建和最后更改日期 ▪ 结果表的状态 (是：是 /否)
结果详情 (右)	所选结果表的名称

另见

📖 分组组织 [▶ 37]

9.2 结果表 窗口

您可以在结果表 窗口中查看保存在结果表中的测量结果。拥有适当权限的用户可以手动编辑结果。

在结果表 窗口中点击加载 按钮，加载选定的结果表，从而打开结果表 窗口。或者，您也可以双击所需的结果表来打开该窗口。

窗口布局

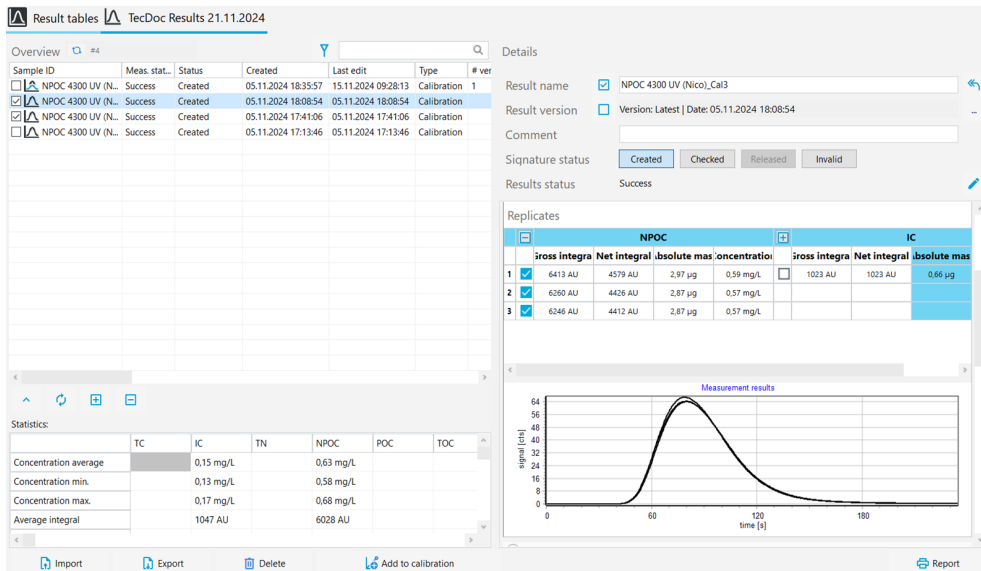


图 43 结果表窗口

元素	描述
概述 表 (左)	<ul style="list-style-type: none"> 通过表格概览查看每个测量步骤的结果 如果需要，可使用上下文菜单中的调整显示列 命令自定义表格
带折叠面板的详细信息概览 (右)	<ul style="list-style-type: none"> 查看单个测量结果的详细信息，点击 图标进行编辑 单击签名状态 区域中的一个按钮，在验证后释放结果
图标和按钮栏 (底部)	<ul style="list-style-type: none"> 用 / 来展开和折叠统计数据：区域 用 选择概述 表中的所有结果 用 取消选择表格中的所有结果 使用导入 以 XML 格式导入结果 使用 导出 以 XML 格式导出结果，默认导出文件夹： <code>C:/ProgramData/Analytik-Jena/multiWinPro/export/results</code>。 使用添加到校准 将校准点添加到校准中。 使用 编辑所有检查结果 编辑所选结果的计算参数 使用转至 SST 在表格中选择系统适用性测试的测量结果（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）。 使用签署所有检查结果 可同时签署多个结果 使用报告 打开打印预览、打印或保存报告 <p>勾选复选框，在进一步处理前选择结果</p>
折叠 统计数据：区域 (底部)	<ul style="list-style-type: none"> 用 / 来展开和折叠统计数据：区域 计算并显示选定测量值的平均积分和平均浓度。软件会将所选测量值记录为重复测量值。 勾选概述 表格中的复选框，选择测量结果

9.2.1 概述 表格

概述 表格是**结果表**窗口的一部分。表格概览显示保存在结果表中的所有测量结果。您可以使用**常见 标签**中的**软件设置**命令自定义表格的布局。如果使用**调整显示列**命令（在上下文菜单中）自定义布局，则设置只适用于选定的结果表。








列	描述
带复选框的样本 ID	带复选框的样品 ID <ul style="list-style-type: none"> 勾选复选框，选择结果用于平均值计算、导入/导出或报告
测量状态	测量成功
状态	签署状态
已创建	测量时间
上次编辑	上次更新时间
类型	样品类型（样品、校准标准、空白、日系数、QC 标准、SST 样品）
版本	结果版本号 无论何时编辑结果，软件都会创建一个新版本的结果。
c (实际)	平均浓度 软件根据重复测量的结果确定平均浓度，并根据空白进行调整。
SD	测量结果的标准偏差
RSD	测量结果的相对标准偏差 (%)
方法	测量方法
参数	方法类型（TC、NPOC 等）
平行样	重复测量次数 <ul style="list-style-type: none"> 规格：测量次数，括号内为重复测量的最少和最多次数（最少-最多）
体积	样品体积
稀释水	手动或自动稀释样品的稀释比例
参数	测量通道
目标浓度	序列表中定义的目标浓度
备注	作为备注的个人信息
密度	液体样品的密度
位置	样品盘上的位置
COD	用 TOC 和 NPOC 方法测定的 COD（化学需氧量）
BOD ₅	根据 TOC 和 NPOC 方法测定的 BOD ₅ （生化需氧量）
总蛋白质	根据 TN 方法测定的 TP（总蛋白）含量
CO ₂	用 TIC 法测定的二氧化碳浓度
用户	测量期间登录的用户

9.2.2 自定义 概述








概述 表格是**结果表**窗口的一部分。表格概览显示保存在结果表中的所有测量结果。您可以使用**常见 标签**中的**软件设置**命令自定义表格的布局。如果使用**调整显示列**命令（在上下文菜单中）自定义布局，则设置只适用于选定的结果表。

总体调整

- ▶ 选择**程序 | 设置**菜单选项。切换到**常见**选项卡。
- ▶ 单击**预设结果表列**区域中的**配置**按钮。
- ▶ 在**配置视图**窗口中，调整表格列：

- 使用  图标将建议（左）中的一列转移到表格（右）中。
- 使用  图标从表格中删除一列（右图）。
- 使用  图标将建议（左）中的所有列转移到表格（右）中。
- 使用  图标删除表格中的所有列（右图）。
- 使用  图标可将概述表格中的一列向下或向右移动。
- 使用  图标可将概述中的一列向上或向左移动。
- 使用  图标可恢复软件的预设列。
- ▶ 单击**确定**以确认输入的数据。
 - ✓ 您已自定义了表格列。

自定义选定的结果表

- ▶ 使用**结果详情 | 结果表**菜单选项打开**结果表**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择结果表。双击或单击**加载**按钮加载所选结果表。
- ▶ 右键单击**概述**，打开上下文菜单。
- ▶ 选择**调整显示列**命令。
- ▶ 在**配置视图**窗口中，调整表格列：
 - 使用  图标将建议（左）中的一列转移到表格（右）中。
 - 使用  图标从表格中删除一列（右图）。
 - 使用  图标将建议（左）中的所有列转移到表格（右）中。
 - 使用  图标删除表格中的所有列（右图）。
 - 使用  图标可将概述表格中的一列向下或向右移动。
 - 使用  图标可将概述中的一列向上或向左移动。
 - 使用  图标可恢复软件的预设列。
- ▶ 单击**确定**以确认输入的数据。
 - ✓ 您已自定义了表格列。

自定义单位和小数位

您可以自定义**结果表**窗口中显示结果的单位和小数位数。

您可以在**单位和精度**标签上的**软件设置**窗口中对单位和小数位进行跨软件设置。

- ▶ 右键单击结果表，打开上下文菜单。
- ▶ 从右键菜单中选择**调整单位**。
- ▶ 在**单位和精度**部分更改单位和小数位数。
- ▶ 在**结果表**窗口中输出结果：在**结果详情**选项卡上，定义结果表的单位和小数位。在**结果概览表**选项卡上，配置详细视图的设置。
- ▶ 单击**确定**确认您的选择。
- ▶ 单击**加载默认单位**按钮，恢复之前在**单位和精度**选项卡上的**软件设置**窗口中定义的设置。

9.2.3 详细信息

详细信息视图是**结果表**窗口的一部分。概览显示单个测量结果的详细信息。

如果您有手动编辑结果的权限，则可以单击  图标编辑测量结果。

一般规格

显示参数	描述
结果名称	可编辑样品 ID
结果版本	结果版本 无论何时编辑结果，软件都会创建一个新版本的结果。 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 点击 图标，然后浏览结果版本 ▪ 点击 图标返回上一版本
备注	输入个人信息
签名状态	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 查看结果的签署状态 ▪ 测试后发布或阻止结果
结果状态	测量成功的显示

您可以通过四个折叠面板查看测量结果的详细信息。

信息 面板

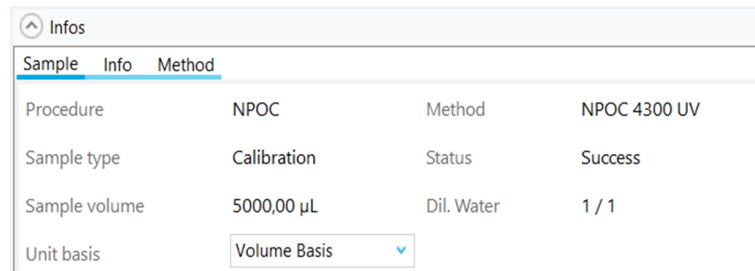


图 44 信息 面板

区域	描述
选项卡 样品	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 方法类型和方法 ▪ 样品类型 ▪ 测量成功 ▪ 样品体积 (µl) ▪ 手动或自动稀释样品的稀释比例 ▪ 单位基础 下拉菜单，用于为参数 和平行样 面板中的结果选择单位基准（基于体积、质量或面积）。
选项卡 信息	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 设备类型和序列号 ▪ 软件和固件版本 ▪ 测量时登录的用户
选项卡 方法	方法参数设置
选项卡 签名	有关签署状态的详细信息（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块）

电子签名是可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块的重要组成部分。您可以通过签名和相应的权利分配来限制使用未经批准的数据。签名时，必须输入用户名和密码。

在标准软件中，您可以设置数据的状态，例如审核。但是，您不能为数据添加电子签名。签名 选项卡仍为空。数据状态不受限制。这意味着，即使是被屏蔽的数据也可以使用。

参数 面板

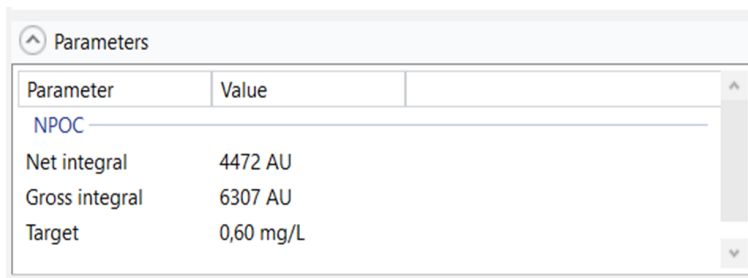


图 45 参数 面板

面积	描述
有结果的测量通道	显示每个测量通道的测定结果和过程特性 <ul style="list-style-type: none"> 平均原始积分 (AU) 和净积分, 按空白值进行调整 平均质量 (μg) 和平均浓度 (mg/l), 按空白值进行调整 标准偏差 (mg/l) 相对标准偏差 (%) 目标含量 (用于 QC 标准、日系数、校准标准) 空白值 (用于空白值) 确定的限值

平行样 面板

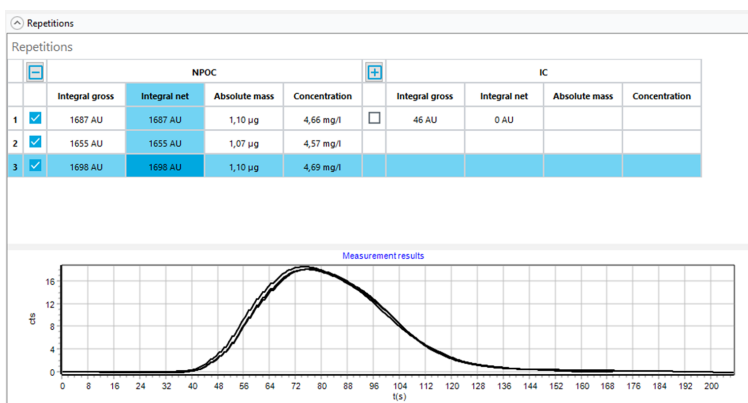


图 46 平行样 面板

区域	描述
重复测量结果表	显示每个测量通道和每次重复测量的结果： <ul style="list-style-type: none"> 测量的原始积分 (AU) 和净积分, 按空白值进行调整 计算的绝对质量 计算浓度 软件可调整现有空白样品的绝对质量和浓度。 软件会检测出异常值, 并用灰色标出相应的表格行。 <ul style="list-style-type: none"> 您可以使用复选框激活或禁用重复测量。软件在计算结果时不会考虑停用的测量值。
测量曲线图	每个测量通道和每次重复测量的测量曲线图 (X 轴: 时间 (秒), Y 轴: 测量信号 (毫微秒)) <ul style="list-style-type: none"> 测量多个测量通道时, 软件会以不同颜色显示测量曲线。 如果激活或禁用测量通道或在表格中重复测量, 软件会调整图形显示。 为进行缩小: 将鼠标指针放在曲线上, 然后从左到右拖动所需的部分。 为进行放大: 将放大的部分从右向左拖动。 按住鼠标键并移动该部分。

计算参数 面板

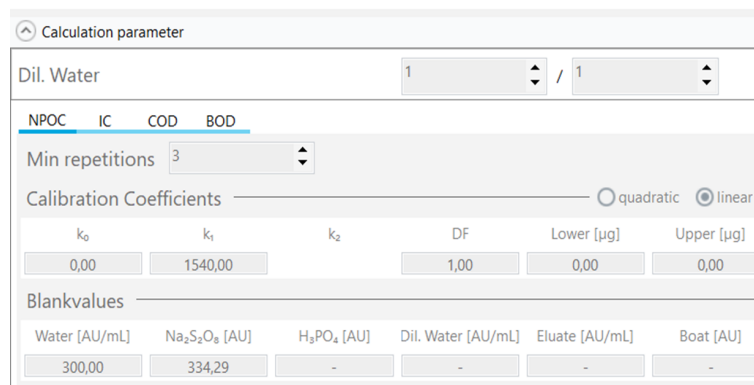


图 47 计算参数 面板

在计算参数 面板中，您可以使用选项卡在各种测量参数的计算参数之间进行切换。

面积	描述
字段 稀释水	计算时考虑的稀释比，可编辑
字段 平行样数量	用于计算结果的可编辑重复测量次数
面积 校准系数	<ul style="list-style-type: none"> 用于显示和更改回归类型（二次 或线性）的单选按钮 校准名称 如果未显示名称，软件将使用设备的标准校准或手动编辑的校准系数。 单击 ... 图标打开 选择校准 窗口，为测量参数分配新的校准值 可编辑的校准系数 k_0, k_1, k_2 (k_2仅适用于二次回归) 可编辑日系数 校准范围的下限和上限
面积 空白值	可编辑空白值
面积 COD/BOD/总蛋白 转化参数	用于计算 COD、BOD ₅ 和总蛋白含量的可编辑斜率和截距，可在COD、BOD ₅ 选项卡上查看 总蛋白质

另见

📄 电子签名 [▶ 132]


9.3 创建新的结果表

软件将测量结果保存在结果表中。

- ▶ 使用结果详情 | 结果表菜单选项打开结果表窗口。
- ▶ 点击添加，创建一个新的结果表。默认名称为：结果表+时间戳。
- ▶ 如有必要，更改结果详情视图中结果表 字段中的名称。单击 按钮保存更改。
或者：您可以在添加新序列 窗口中创建新的结果表。
- ▶ 使用测量 | 添加新序列菜单选项创建新的序列。
- ▶ 打开结果表 按钮上的下拉菜单。
- ▶ 使用创建新的结果表 创建新结果表。
 - ✓ 软件会在结果表 窗口中创建一个新的结果表，名称为 "结果表 + 时间戳"。

9.4 查看结果

您可以在**结果表**窗口中查看保存在结果表中的测量结果。拥有适当权限的用户可以手动编辑结果。

- ▶ 使用**结果详情** | **结果表**菜单选项打开**结果表**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择结果表。双击或单击**加载**按钮加载所选结果表。
- ▶ 在**概述**表格中查看测量结果。如有需要，可搜索结果或点击  进行过滤。
- ▶ 在**概述**表格中选择测量，并在**详细信息**视图中查看结果：
- ▶ **信息** 面板
 - 样品选项卡：方法类型和方法、样品类型和样品量等，
 - 信息选项卡：设备类型或软件版本等背景信息
 - 方法 选项卡：方法参数
 - 签名 选项卡：有关签署状态的详细信息，仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块
- ▶ **参数** 面板：各测量通道的结果，包括平均原始积分和净积分、平均绝对质量、平均浓度和统计数据
- ▶ **平行样** 面板：单个重复测量的结果，带有测量曲线和选择异常值的选项
- ▶ **计算参数** 面板：稀释比、计算所用的重复测量次数、计算和校准参数、日系数和空白值，并可进行手动后处理
- ▶ 可选择在**备注**中输入备注。
- ▶ 更改后，点击 按钮保存结果。

计算和显示结果


- 软件会计算每条测量曲线的原始积分 (AU)。
- 软件可检测异常值，并在结果中突出显示。软件在计算平均积分时会排除异常值。
- 软件根据平均积分计算平均浓度。
- 软件会调整现有空白样品的平均积分和平均浓度。
- 软件会考虑到校准中存储的日系数。
- 软件会标记超出校准范围的结果。
- 通过序列参数的适当设置，分析系统可自动或智能地稀释高浓度样品。软件会计算未稀释原始样品的浓度，以得出结果。不过，显示的积分是稀释样品的测量积分。
- 在序列参数中进行适当设置后，分析系统会自动减少高浓度样品的体积。软件会将原始样品体积和缩小体积的测量结果逐一显示在**概述**表格中。
- 软件会标记您手动编辑过的结果。

9.5 编辑结果

如果您有适当的权限，就可以在**结果表**窗口中编辑结果。您可以同时编辑一个结果或多个结果。

- ▶ 使用**结果详情** | **结果表**菜单选项打开**结果表**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择结果表。双击或单击**加载**按钮加载所选结果表。
- ▶ 使用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块，将结果的签名状态设置为 **已创建** 以便能够编辑结果。

编辑测量步骤

- ▶ 从**概述**表中选择方法。
- ▶ 在**详细信息**视图中编辑结果。为此，请单击  图标。

- ▶ 如果需要，可使用复选框激活或禁用表格概览中平行样面板的重复测量，以便随后选择异常值。
- ▶ 检查计算参数面板中的以下校准参数，必要时进行更改：
 - 稀释比例
 - 用于计算平均值的最小测定次数
 - 回归类型（线性回归或二次回归）
 - 校准和校准系数
 - 日系数
 - 空白值
 - 斜率和截距，用于计算总蛋白含量 (TP)、COD、BOD₅。
- ▶ 选择新校准：单击 ... 打开 **选择校准** 窗口，为测量通道分配新的校准。选择校准窗口仅显示与测量通道匹配的标定。
- ▶ 更改后，点击 按钮保存结果。
 - ✓ 您手动编辑了结果。

编辑多个测量步骤

- ▶ 从 **概述** 表中选择几个测量步骤。为此勾选此复选框。
- ▶ 单击 **编辑所有检查结果**。
- ▶ 检查 **编辑多个结果** 窗口中的以下参数，必要时进行更改：
 - 稀释比例
 - 用于计算平均值的最小测定次数
 - 回归类型（线性回归或二次回归）
 - 校准和校准系数
 - 日系数
 - 空白值
 - 斜率和截距，用于计算总蛋白含量 (TP)、COD、BOD₅。
- ▶ 选择新校准：单击 ... 打开 **选择校准** 窗口，为测量通道分配新的校准。选择校准窗口仅显示与测量通道匹配的标定。
- ▶ 编辑计算参数时，软件会自动激活相应的复选框。编辑完成后，检查是否激活了所有已编辑计算参数的复选框。
- ▶ 点击 **确认** 以应用更改。
 - ✓ 软件会重新计算所选测量步骤的结果。

如果更改后的计算参数无法应用或无法应用于所有测量步骤，例如，由于没有对所有测量步骤的所有已编辑测量通道进行测量，软件会发出错误信息。

版本和标签



每当对结果进行编辑然后保存时，软件都会创建一个新版本的结果。保留原始数据。

软件会在 **结果版本** 和 **概述** 表中显示结果的版本。点击 ... 然后在 **选择版本** 窗口中导航到结果版本。

软件会在 **概述** 表格和报告中标记经过编辑的结果。



9.6 浏览已编辑结果的版本

在 **结果表** 窗口中编辑结果时，软件会创建一个新版本的结果。保留原始数据。默认情况下，软件会显示上一版本的结果。

- ▶ 使用**结果详情 | 结果表**菜单选项打开**结果表**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择结果表。双击或单击**加载**按钮加载所选结果表。
- ▶ 在**概述**表格中选择结果。
- ▶ 在**详细信息**视图中，单击图标打开**选择版本**窗口。
- ▶ 在**版本：表**中选择版本。
- ▶ 用**确定**打开版本。
 - ✓ 软件会显示旧版本的编辑结果。版本参见字段：**结果版本**。
- ▶ 单击图标加载当前版本的结果。

9.7 计算所选结果的平均值

您可以在**结果表**窗口中计算所选结果的平均值和标准偏差。您可以使用此选项将单个测定结果合并为一个固体测量结果。

- ▶ 使用**结果详情 | 结果表**菜单选项打开**结果表**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择结果表。双击或单击**加载**按钮加载所选结果表。
- ▶ 在**概述**表格概览中，通过复选框激活所需的测量。单击图标以过滤结果。从下拉菜单中选择过滤标准。
- ▶ 单击以扩展**统计数据：区域**。
 - ✓ 软件可计算所选测量的平均积分、平均浓度、最小浓度和最大浓度。软件会在**统计数据：区域**显示结果。

另见

 [搜索和过滤器 \[▶ 36\]](#)

9.8 导入和导出结果


导入结果



以 XML 格式导入结果，如下所示：

- ▶ 使用**结果详情 | 结果表**菜单选项打开**结果表**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择结果表。双击或单击**加载**按钮加载所选结果表。
- ▶ 单击**导入**。
- ▶ 在 Windows 文件管理器的打开窗口中选择 XML 格式的结果文件。
- ▶ 单击**打开**。
 - ✓ 软件会将结果导入开放式结果表。



导出结果

以 XML 或 CSV 格式导出结果如下：

- ▶ 用于 CSV 导出：在**软件设置**窗口的**存储、导出和报告**选项卡中检查导出范围，必要时进行调整。
 - 使用菜单命令**程序 | 设置**打开**软件设置**窗口的**存储、导出和报告**选项卡。
 - 如有需要，限制导出范围。为此，可通过单击图标从**已使用：列表框**中删除条目。


- 扩大导出范围。为此，可通过单击  图标将条目从**建议：列表框**复制到**已使用：列表框**。
- ▶ 使用**结果详情 | 结果表**菜单选项打开**结果表**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择结果表。双击或单击**加载**按钮加载所选结果表。
- ▶ 在**概述**表格概览中，通过复选框激活所需的测量。单击  图标以过滤结果。从下拉菜单中选择过滤标准。
- ▶ 单击**导出**。
- ▶ 在**另存为**窗口中选择存储位置。默认导出文件夹：
C:/ProgramData/Analytik-Jena/multiWinPro/export/results.
- ▶ 如有需要，请更改文件名。
- ▶ 在**文件类型**下选择导出格式：XML 或 CSV。
- ▶ 单击**保存**。
 - ✓ 软件可将所选结果导出并汇总到 XML 或 CSV 文件中。

另见

-  [搜索和过滤器 \[▶ 36\]](#)
-  [定义导出和报告设置 \[▶ 43\]](#)


9.9 打印和保存结果报告

打印报告

- ▶ 使用**结果详情 | 结果表**菜单选项打开**结果表**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择结果表。双击或单击**加载**按钮加载所选结果表。
- ▶ 在**概述**表格概览中，通过复选框激活所需的测量。单击  图标以过滤结果。从下拉菜单中选择过滤标准。
- ▶ 单击**报告**打开打印预览。
- ▶ 为了更好地概览，请单击**页面概述**按钮，在报告左侧显示带有页面摘要的导航区。单击**放大**和**缩小**可放大或缩小视图。
- ▶ 通过**报告**窗口中的复选框指定打印范围：
 - **概述** (简表)
在报告开头打印所有测量结果的概览表
 - **测量结果**
显示包含样品 ID、测量方法和样品体积的概览表
当复选框被激活时，软件会激活以下三个复选框。
 - **元数据**
显示各项测量的元数据
 - **参数数据**
显示各测量参数的结果 (平均值)
 - **平行样**
显示单次重复测量的测量结果
 - **图表**
为所有测量、测量通道和重复测量添加测量曲线的图形表示
只有激活**参数数据**复选框，软件才会激活该复选框。


- ▶ 在报告中添加公司徽标。单击**报告徽标**区域中的**加载**按钮，然后在 Windows 文件管理器中选择徽标，并用**打开**将其加载到报告中。
- ▶ 单击**打印机选项**设置打印机。
- ▶ 单击**页面设置**可配置页面设置，如纸张大小或方向。默认：A4，肖像。将布局应用于当前页面或所有报告页面。
- ▶ 单击**打印**开始打印。

保存报告

- ▶ 打开**结果表**。
- ▶ 在**概述**表格概览中，通过复选框激活所需的测量。单击  图标以过滤结果。从下拉菜单中选择过滤标准。
- ▶ 单击**报告**打开打印预览。
- ▶ 确定打印范围和徽标。
- ▶ 单击**保存**，然后在**另存为**窗口中指定文件名、存储目录和文件类型。
- ▶ 单击**保存**按钮保存报告。

您可以用以下文件格式保存报告：PDF（默认）、RTF、HTML、TXT、FP3。
编辑结果时，只有在保存报告后，更改才会应用到报告中。

另见

 [搜索和过滤器 \[▶ 36\]](#)

10 仪器 菜单

您可以使用仪器 菜单在测量过程之外控制分析系统并管理设备配置。

在 仪器 菜单中

- 使用**初始化** 初始化分析系统。您可以使用**待机** 和**关闭** 菜单命令将分析系统切换到待机状态或关闭。
- 在测量暂停期间，您可以使用**气体流出** 和**气流开启** 菜单命令关闭和重新打开气体流量。
- 点击**进样器校准**，然后在 **进样器校准** 窗口中调整自动进样器。
- 单击**仪器**，然后在**仪器** 窗口中创建新设备配置、更改和管理新设备。此外，您还可以通过上下文菜单访问存储在软件中的设备配置空白值，并确定和查看选定设备组件的维护间隔。
- 单击**单一控制步骤**，然后在**单一控制步骤** 窗口中准备对分析系统进行维护或冲洗。
- 咨询客户服务部门后，单击**仪器组件测试**，即可单独控制阀门和组件，并在**仪器组件测试** 窗口中检索检测器的特定传感器数据。

10.1 进样器校准 窗口

使用菜单命令**仪器 | 进样器校准** 打开窗口。

在**进样器校准** 窗口中，您可以调整自动进样器，使其能够正确接近自动进样器或分析仪进样系统的各个位置。



注意

设备损坏的风险

当自动进样器调整不当或根本没有调整时，自动取样工具会在操作过程中撞击到坚硬的面。这会损坏自动取样工具和驱动装置。

- 在首次使用自动进样器之前，每次改装之后，以及在运输或存放较长时间之后，都要对自动进样器进行调整。

窗口布局

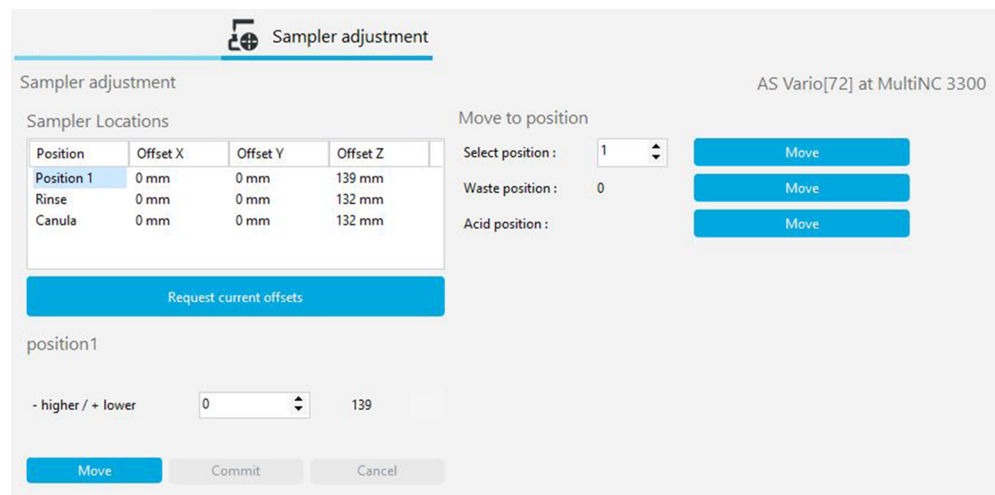


图 48 进样器校准窗口

区域	描述
进样器校准（左上角）	列表框显示 X、Y、Z 方向的调整位置和偏移值。 <ul style="list-style-type: none"> 从列表框中选择调整位置 单击请求当前值按钮以查询当前偏移值
逐步调整区域（左下角）	<ul style="list-style-type: none"> 使用-向后/+ 向前 向前或向后移动自动进样器臂（并非适用于所有自动进样器） 使用-向左/+ 向右 向左或向右移动自动进样器臂（并非适用于所有自动进样器） 使用-升高/+ 降低 向上或向下移动自动进样器臂或活塞 使用移动 按钮移动到更改后的位置 使用确认 按钮保存调整后的位置 使用取消 按钮取消调整并重置为起始值 <p>您可以调整自动进样器臂的移动位置。对于活塞，调整活塞移动的距离。无法使用取消 取消活塞调节。</p>
移到位置 区域（右）	选择位置，移动到这些位置检查调整情况 <ul style="list-style-type: none"> 使用移动 按钮移动到一个位置进行检查

另见

调整自动进样器 [▶ 117]

10.2 仪器 窗口

使用菜单命令 **仪器 | 仪器** 打开 **仪器** 窗口。

您可以在 **仪器** 窗口中管理设备配置。

在仪器窗口中

- 单击 **添加** 可创建新的设备配置，例如用于液体或固体测量。
- 单击 **设为默认** 将激活设备配置为默认配置。软件会根据当前配置调整方法和序列的选择选项。
- 使用 **删除** 可删除选定的设备配置。
- 可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块可防止数据被删除。
- 在 **选择组** 窗口中使用 **分配组** 将设备配置分到组中。
- 使用 **空白值** 菜单命令（在右键菜单中）打开 **空白值** 窗口。您可以在此查看和全局更改设备配置中存储的空白值。
- 在 **维护** 标签上，可以设置燃烧炉、UV 反应器和 IC 反应器的维护间隔，并在维护后重置注射计数器。

窗口布局

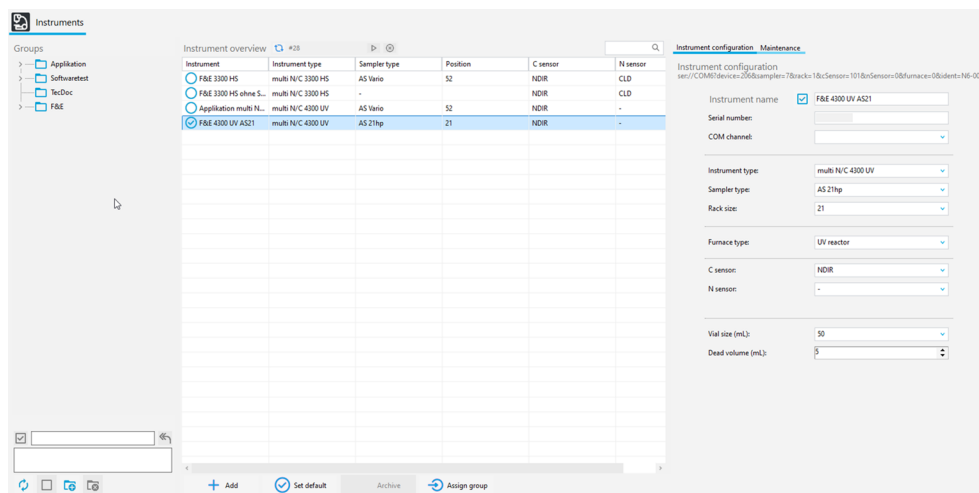


图 49 仪器窗口

面积	描述
群组 (左)	管理组
仪器概述 (中)	表格概览, 包含详细信息 : <ul style="list-style-type: none"> ▪ 设备铭牌 ▪ 设备类型 ▪ 自动进样器 ▪ 样品盘 ▪ 检测器 活动的设备配置高亮显示。
仪器配置 选项卡 (右侧)	选定设备配置的详细视图, 可编辑设置
维护 选项卡 (右侧)	用于燃烧炉、UV 反应器和 IC 反应器的注射计数器, 可编辑维护间隔, 并可在维护后重置注射计数器

仪器配置 详细视图

您可以在详细视图中查看和编辑设备配置。

选项	描述
仪器名称	为设备配置定义名称 默认名称为 : 新设备_时间戳。
序列号 :	分析仪序列号 软件会在授权时自动将序列号复制到字段中。序列号不可更改。
COM 通道 :	从下拉菜单中选择电脑与分析仪的接口 如有需要, 在 Windows 设备管理器中查看 COM 端口
仪器类型	从下拉菜单中选择设备型号
进样器类型 :	从下拉菜单中选择自动进样器
样品盘尺寸 :	从下拉菜单中选择样品盘
炉类型 :	内部垂直 选项 选择通过高温氧化进行液体测量 UV 反应器 选项 选择通过 UV 氧化进行液体测量 内部水平 选项 选择内部固体模块进行固体测量 外部水平 选项 选择通过外部固体模块进行手动或自动固体测量
C 传感器 :	从下拉菜单中选择碳检测器
N 传感器 :	从下拉菜单中选择氮气检测器 : <ul style="list-style-type: none"> ▪ ChD 用于使用内部 ChD 进行电化学检测 ▪ CLD 用于使用外部 CLD 进行化学发光检测
样品瓶尺寸 (mL):	从下拉菜单中选择样品容器的容积
死体积 (mL):	查看样品容器的预设死体积, 必要时进行调整
复选框 自动稀释	激活自动稀释选项 (仅在选择了带稀释盘的自动进样器时显示)

维护 带注射计数器的标签

在**维护** 标签上设置燃烧炉、UV 反应器和 IC 反应器的维护间隔。维护后, 将当前计数器读数重置为零。

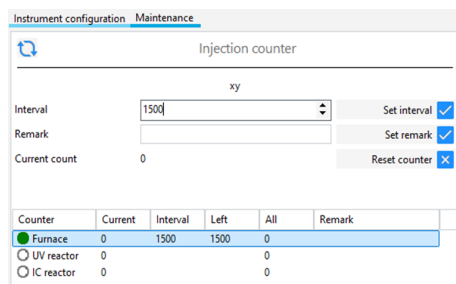


图 50 维护 选项卡

元素	描述
图标	刷新视图
序列号	注射计数器和维护间隔的设置适用于指定序列号的选定设备。
间隔	<p>选择燃烧、UV 反应器或 IC 反应器后，在表格概览中查看维护间隔。直接输入或使用箭头键编辑维护间隔时间</p> <p>调节范围：</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 炉, UV 反应器：0...5000 ■ IC 反应器：0 ... 15000 次注射 <p>单击设置间隔按钮应用维护间隔</p> <p>建议的维护间隔：</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 炉：1500 注射 ■ UV 反应器：5000 注射 ■ IC 反应器：500 注射 <p>如果输入 "0"，则不检查维护间隔。</p>
备注	<p>选择燃烧炉、UV 反应器或 IC 反应器后，输入当前计数器读数的注释，例如当前日期或催化剂批号</p> <p>单击 设置备注 按钮，将当前计数器读数的注释转移到表格概览中</p>
当前值	<p>选择燃烧炉、UV 反应器或 IC 反应器后，在表格概览中查看当前计数器读数</p> <p>单击 重置计数 按钮，在维护后将注射计数器重置为零</p> <p>计数器复位后，注射总数保持不变。</p> <p>通过 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块，计数器读数的重置会记录在审计跟踪中。输入的注释将转入审计跟踪。</p>
注射计数器计数	<p>以表格形式概述当前注射次数、剩余注射次数和总注射次数的信息</p> <p>需要维护的设备组件</p> <ul style="list-style-type: none"> ■ 炉（用于高温氧化设备） ■ UV 反应器（用于 UV 氧化设备） ■ IC 反应器（用于直接喷射设备：multi N/C 2300, multi N/C 2100S）
当前	<p>当前注射次数</p> <p>如果设备没有显示设备组件，则计数器显示值 "0"。</p>
间隔	规定的维护间隔
左	<p>达到维护间隔前的剩余注射次数</p> <p>一旦注入量只剩下 10%，软件就会发出警告，例如在序列的可信度检查中。如果维护间隔已过期，则软件在此处计为负数。</p> <p>利用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块，在达到维护间隔时会在审计跟踪中进行记录。</p>
所有	<p>总注射次数</p> <p>重置当前计数器读数后，注射总数保持不变。</p>
备注	对当前计数器读数发表评论

另见

创建新设备配置 [▶ 118]

10.3 单一控制步骤 窗口

请通过菜单命令**仪器 | 单一控制步骤** 打开**单一控制步骤** 窗口。

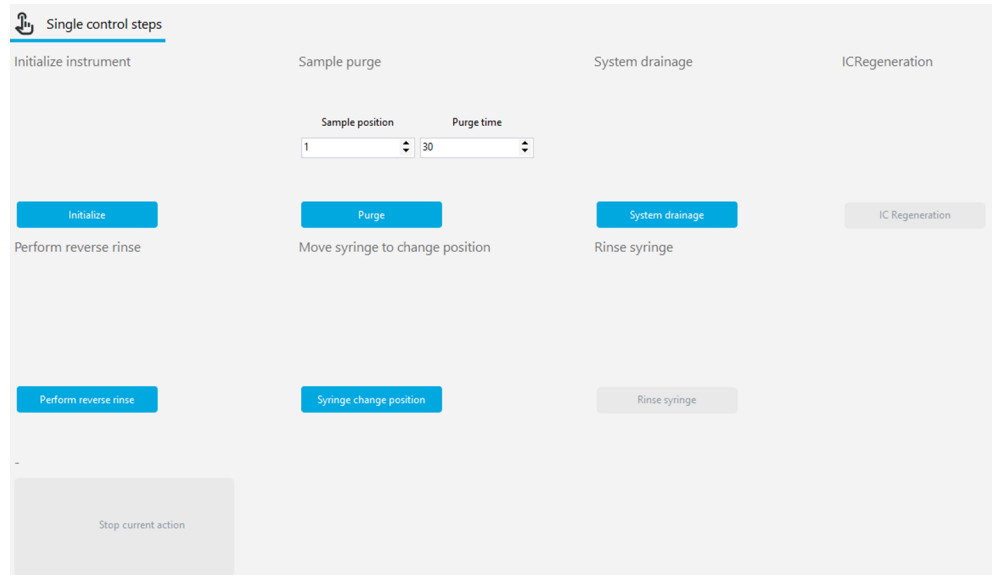


图 51 单一控制步骤窗口

在**单一控制步骤** 窗口中，您可以在测量序列之外控制分析系统，并为维护做好准备。

区域	描述
初始化仪器	单击开始初始化设备 初始化 TIC 冷凝水容器被抽空并再次填充。
样品吹扫	激活 NPOC 吹扫，例如设置 NPOC 吹扫流速 <ul style="list-style-type: none"> 在自动进样器模式下，选择取样位置在 样品位置 将吹扫时间设置为 吹扫时间 单击吹扫 开始吹扫
系统排放	单击 系统排放 ，抽空 TIC 冷凝水容器，并将注射泵设置为初始状态
反应器再生	单击 反应器再生 ，用磷酸冲洗 TIC 冷凝水容器，并用载气吹扫（适用于直接进样的分析仪）。
进行反向冲洗	单击 进行反向冲洗 （手动反冲洗），用高纯度水反冲洗进样系统的管道，将冲洗液反冲洗到自动进样器的冲洗容器中或废液容器中（对于带流动注射的分析仪）。
移动注射器以改变位置	单击 更换注射器位置 ，将分析仪的注射泵完全清空，并将活塞移到转换位置（对于带流动注射的分析仪）。
冲洗注射器	单击 冲洗注射器 ，冲洗自动进样器的定量注射器，并将其倒入废液位置（适用于直接进样的分析仪）。
停止当前操作	单击 停止当前操作 取消当前操作

10.4 仪器组件测试 窗口

使用菜单命令**仪器 | 仪器组件测试** 打开**仪器组件测试** 窗口。

在**仪器组件测试** 窗口中，您可以单独控制阀门和组件，并检索检测器的特定传感器数据。

- 只有在咨询客户服务部门后才能使用这些功能。
- 将检索到的数据和测试结果提供给客户服务部门进行评估。

窗口布局

区域	描述
阀门（左）	阀门和组件的单独控制 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 单击启动 按钮激活此区域。单击停下来 再次停用此区域。 ▪ 咨询客户服务部门后，选择阀门或组件，并用开启/关闭 切换开关激活或关闭。
光学台（中）	检查碳检测器的状态、检索模拟值并计算传感器的特定数据 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 单击启动 按钮，开始在模拟 区域检索数据。在计算得到的参数 区域开始数据计算。 ▪ 单击停下来 结束数据检索或数据计算。 ▪ 单击零点调整 按钮重新测量基线。
CLD（右）	读取传感器特定数据，检查氮气检测仪的状态 <ul style="list-style-type: none"> ▪ 单击启动 按钮开始数据检索。 ▪ 单击停下来 结束数据检索。

关闭**仪器组件测试** 窗口后，软件会自动停止所有正在运行的组件测试。

组件测试运行时，软件不会更新**仪器状态** 面板中的显示。

10.5 调整自动进样器



注意

设备损坏的风险

当自动进样器调整不当或根本没有调整时，自动取样工具会在操作过程中撞击到坚硬的表面。这会损坏自动取样工具和驱动装置。

- 在首次使用自动进样器之前，每次改装之后，以及在运输或存放较长时间之后，都要对自动进样器进行调整。

- ▶ 使用**仪器 | 进样器校准** 菜单选项打开**进样器校准**窗口。
- ▶ 从**进样器位置** 区域的列表框中选择调整位置。
- ▶ 有关调整和调整位置的详细信息，请参阅分析仪操作手册。
- ▶ 单击**请求当前值**按钮以查询当前偏移值。
- ▶ 按步骤调整-向后/+ 向前、-向左/+ 向右 和-升高/+ 降低 的偏移值。
- ▶ 每次更改后，单击**移动** 按钮移动到相应位置并进行检查。
- ▶ 用**确认** 保存调整后的位置。
- ▶ 最后，检查自动进样器的调节：
 - 在**移到位置** 区域中选择位置。
- ▶ 检查已调整的位置和其他位置，如酸位置。
 - 点击**移动**，移动到相应位置。
- ▶ 如有必要，请再次调整并保存。

- ✓ 您已调整好自动进样器，可以开始第一次测量。

10.6 创建新设备配置

您可以在**仪器**窗口中创建设备配置，例如用于液体或固体测量。

您可以将设备配置设置为默认配置。软件会根据活动设备配置调整方法和序列的选择选项。

- ▶ 使用**仪器 | 仪器菜单**选项打开**仪器**窗口。
- ▶ 单击 **添加** 以创建新的设备配置。
- ▶ 在**仪器名称**中命名设备配置。默认名称为：NewDevice_Timestamp
- ▶ 在**序列号**：中，软件会在授权时自动输入序列号。检查序列号。
- ▶ 在**COM 通道**：的下拉菜单中选择分析仪接口。如有必要，请在 Windows 设备管理器中检查 COM 端口。
- ▶ 在**仪器类型**下拉菜单中选择设备型号。
- ▶ 为**进样器类型**：和**样品盘尺寸**：选择自动进样器和样品盘。
- ▶ 从**炉类型**：下拉菜单中选择 UV 反应器、内部炉或外部炉：。


下拉菜单	选项
炉类型：	<p>内部垂直 选项 选择通过高温氧化进行液体测量</p> <p>UV 反应器 选项 选择通过 UV 氧化进行液体测量</p> <p>内部水平 选项 选择内部固体模块进行固体测量</p> <p>外部水平 选项 选择通过外部固体模块进行手动或自动固体测量</p>

- ▶ 在**C 传感器**：和**N 传感器**：下拉菜单中选择检测器。
- ▶ 从**样品瓶尺寸 (mL)**：下拉菜单中选择样品瓶的容量。该软件会相应地调整死体积。或者，您可以在**死体积 (mL)**：中调整死体积。
- ▶ 单击 **按钮**保存设备配置。
- ▶ 从**仪器概述**表中选择设备配置，单击**设为默认**将其激活为默认配置。或者，双击以激活设备配置。
- ▶ 每次更改设备配置后都要重新启动软件。
 - ✓ 您已定义并激活了新的设备配置。

10.7 更改设备配置中的空白

无论采用哪种方法，软件都会保存空白。您可以在**仪器**窗口中查看软件中保存的空白。如果您有适当的权限，就可以编辑设备配置中的空白。这些更改适用于所有软件。

- ▶ 使用**仪器 | 仪器菜单**选项打开**仪器**窗口。
- ▶ 在**仪器概述**表中选择设备配置。
- ▶ 右键单击打开右键菜单，选择**空白值**。

- ▶ 在 **空白值** 窗口中查看不同选项卡上的空白值。
- ▶ 如有必要，可点击  图标编辑空白。
- ▶ 单击**确定**按钮确认更改。
 - ✓ 更改后的空白适用于所有软件。

10.8 设置维护间隔并在维护后重置注射计数器

在 **仪器** 窗口中设置燃烧炉、UV 反应器和 IC 反应器的维护间隔。

当达到维护间隔时，软件会发出一条信息。然后进行以下定期维护工作：

- **炉**
 - 检查和更换带有高温氧化装置的燃烧管中的催化剂
 - 检查和更换使用过的燃烧管
 - 检查和更换带有流动喷射装置的炉头中严重腐蚀的喷射套管
(建议维护间隔：1500 注射)
- **UV 反应器**
 - 检查和清洁 UV 氧化装置的UV 反应器
(建议的维护间隔：5000 注射)
- **IC 反应器**
 - 更换带有直接进样装置的 TIC 锁和自动进样器上的隔膜
(建议的维护间隔：500 注射)

维护后将喷射计数器重置为零。然后，软件会再次计算注射次数，直到达到维护间隔。

设置维护间隔

- ▶ 使用**仪器 | 仪器菜单**选项打开**仪器**窗口。
- ▶ 切换到**维护**选项卡。
- ▶ 在概览表中选择燃烧炉、UV 反应器或 IC 反应器组件。
- ▶ 在**间隔** 输入字段中输入维护间隔。
建议的维护间隔：
炉：1500 注射
UV 反应器：5000 注射
IC 反应器：500 注射
如果输入 "0"，则不检查维护间隔。
- ▶ 单击**设置间隔** 退出窗口。单击**是**确认您的选择。
 - ✓ 在达到维护间隔之前，一旦注射量只剩下 10%，软件就会发出信息。
利用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块，软件会在达到维护间隔时在审计跟踪中记录。

维护后重置当前计数器读数

- ▶ 使用**仪器 | 仪器菜单**选项打开**仪器**窗口。
- ▶ 切换到**维护**选项卡。
- ▶ 在概览表中选择燃烧炉、UV 反应器或 IC 反应器组件。
- ▶ 单击 **重置计数** 按钮，将维护后的当前计数器读数重置为零。
- ▶ 如有必要，请在 **备注** 输入字段中添加注释，例如催化转换器的当前日期或批号。
- ▶ 单击**设置备注** 退出窗口。单击 **是**加以确认。
 - ✓ 注射计数器中的当前计数器读数重置为零。注射总数保持不变。

通过 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块，软件可在审计跟踪中记录计数器读数的重置。注释也会转入审计跟踪。

11 查看 菜单

您可以使用查看 菜单自定义程序界面的视图。客户服务部门可从此处进入受密码保护的服务模式。

在查看 菜单中

- 您可以使用窗口 菜单命令将未锁定的对话框窗口安排在前台。
- 单击定制，在 定制 窗口中自定义菜单栏和工具栏。
- 单击维护桌面，允许客户服务部门打开受密码保护的服务模式，该模式具有诊断和维护功能。

11.1 定制工具栏

您可以使用定制 菜单自定义工具栏的视图。

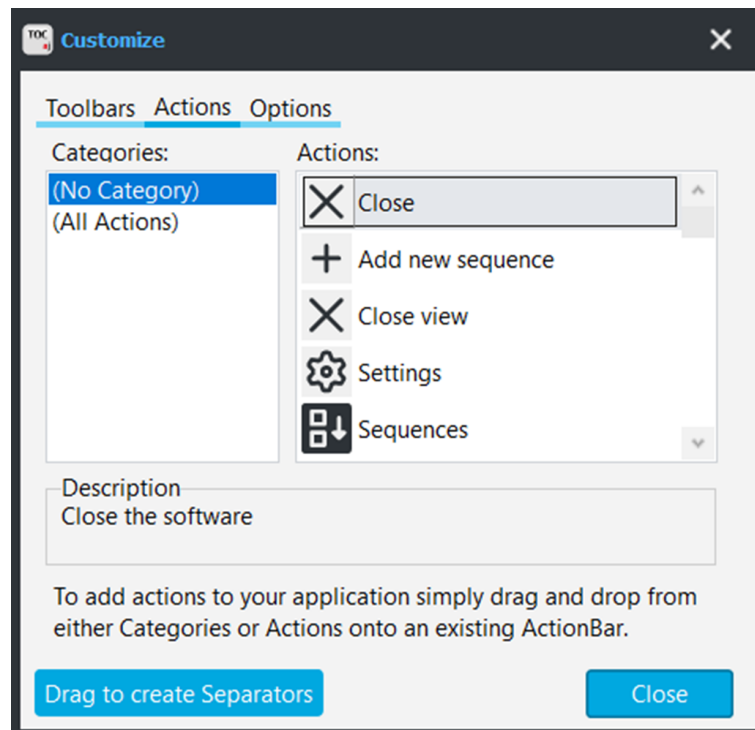


图 52 自定义窗口

- ▶ 使用查看 | 定制菜单选项打开定制窗口。
- ▶ 在工具栏选项卡上，使用复选框显示或隐藏工具栏。
- ▶ 使用工具栏选项区域中每个图标旁边的下拉菜单来显示或隐藏菜单命令。
- ▶ 在动作 选项卡的工具栏中选择要显示的图标。从动作 列表框中选择图标，然后按住鼠标键将其拖动到工具栏上。
- ▶ 如果需要，单击拖动创建分隔符，然后按住鼠标键将分隔符拖动到工具栏上所需的位置。
- ▶ 在选项选项卡上，选中菜单优先显示最近使用的项目复选框，将最近使用的菜单排列在菜单栏的首位。
- ▶ 在其他区域，根据需要放大图标。显示或隐藏工具提示和快捷键。个性化菜单动画
- ▶ 从工具栏中删除条目：
打开定制 窗口后，按住鼠标键并拖动工具栏上的图标或菜单命令。

- ▶ 移除分隔符：
 - 点击分隔符。当分隔符被矩形高亮显示时，它就被选中了。
 - 按住鼠标键，拖动工具栏上的分隔符。
- ▶ 单击关闭 关闭定制 窗口。
 - ✓ 您已经自定义了菜单栏和工具栏。

12 帮助 菜单

在帮助 菜单中，您可以找到有关操作问题和错误的帮助。您可以访问有关软件的信息，并为新的软件模块颁发许可证。

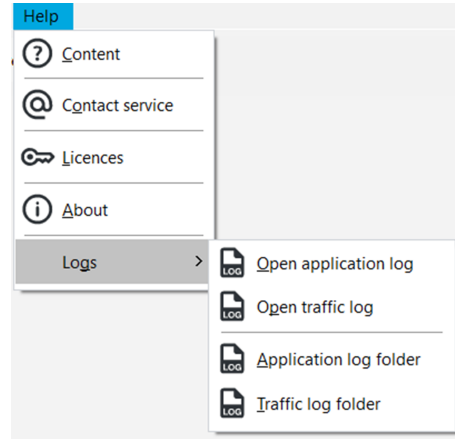


图 53 帮助 菜单

在帮助 菜单中

- 使用内容 菜单命令打开软件帮助。
- 单击联系服务人员，软件将自动创建一个电子邮件模板，以便您在发生故障时联系客户服务部门。
- 单击授权 查看许可证管理 窗口中的软件许可证。如有需要，可授权使用其他软件模块。购买模块时，您将收到所需的许可证代码。
- 使用关于 菜单命令查看有关软件的信息，如软件版本、版权、许可证或详细联系信息。
- 使用菜单命令帮助 | 日志 | 应用程序日志文件夹 和 | 流量日志文件夹 打开包含日志文件的文件夹。在电子邮件中附上当前日志文件，以便客户服务部门进行错误分析。

13 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块：

可供选择的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块可提供全面的数据完整性，符合 21 CFR Part 11 的药物指南。

保护电子记录

可选软件模块可保护电子记录并确保数据的机密性。为此，软件模块使用中央 CDM 服务，在公司本地内部网络中安装 CDM 服务器或 DBMS（数据库管理系统），并在测量站电脑上安装 CDM 客户端。CDM 代表中央数据管理。CDM 服务和客户端通过 RESTful API 接口进行加密通信。另外，如果只有一个客户端，也可以在本地电脑上安装 CDM 服务器。

用户管理

软件模块采用用户管理，限制授权人员访问软件和所选软件功能。用户管理是集中式的，任何更改都会影响所有客户端。

审计追踪

软件可生成审计追踪，记录每次访问和对系统的每次更改，并带有时间戳。

电子签名

在软件模块中，必须对数据（方法、校准、结果）进行多阶段检查和批准。电子签名可以毫无异议地识别签名人。

系统适用性测试 (SST)

系统适用性测试 (SST) 用于制药行业 TOC 或 NPOC 测定的质量保证，只有 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块才能实现。与蔗糖相比，该测试检验设备是否适用于测量难以氧化的有机物质（对苯醌）。根据 KP（韩国药典）和 JP 17 2.59 的规定，调查十二烷基苯磺酸钠的氧化性。

另见

 查看、打印或导出审计追踪 [▶ 128]

13.1 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块中的用户管理

13.1.1 用户和用户角色

首次登录

安装软件后首次登录时，需要设置与 CDM 服务器的连接。在此过程中，您将创建一个具有管理员权限和初始密码的用户。登录后会出现一个对话框，您必须在其中更改初始密码。

管理员可以在“用户管理”中设置其他用户。

建议：在用户管理中，设置一个具有**管理员恢复**角色的用户。如果密码丢失，可使用该用户恢复管理员配置文件。Analytik Jena不能恢复配置文件。

用户管理

使用菜单命令程序 | **用户管理** 打开用户管理。

用户管理 窗口显示所有用户和用户角色及其访问权限的概览。

作为管理员，您可以创建新用户和用户角色。您可以授予新用户角色个人访问权限。

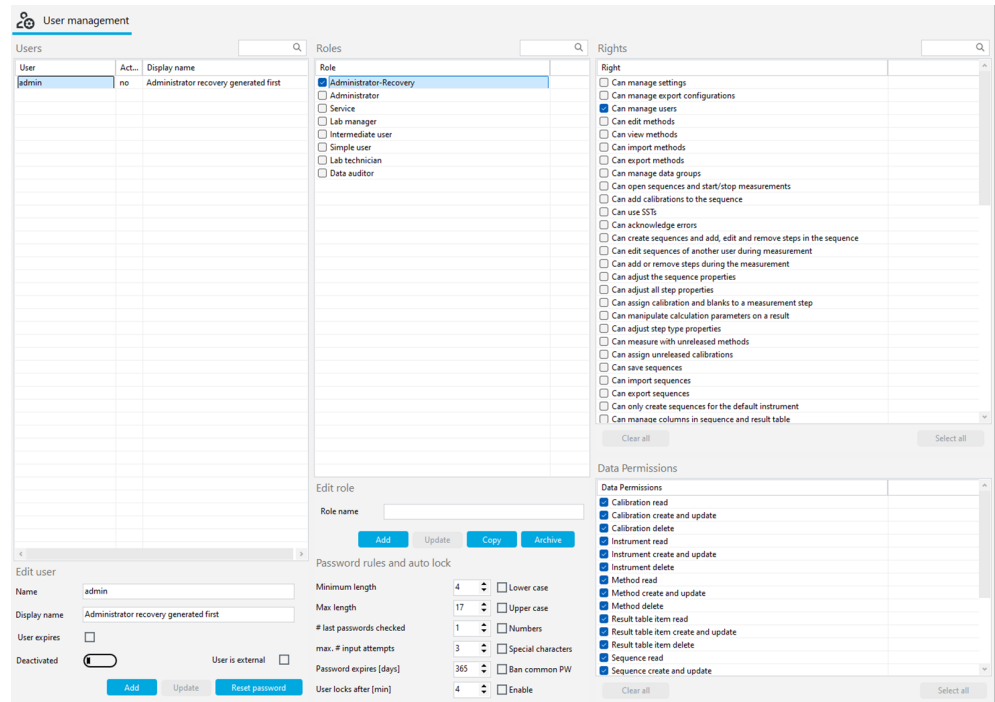


图 54 用户管理窗口

用户

在用户表中选择用户时，可以查看和编辑其用户配置文件的设置。为此，请使用编辑用户区域中的输入框、复选框和按钮。

复选框/字段/按钮	描述
名称	指定登录系统的用户名
显示名称	指定显示在状态栏、签名和报告中的用户名
用户过期	<ul style="list-style-type: none"> 如果用户有效期有限，请选中复选框 在旁边的日历中选择有效期的最后一天。日期 用户账户过期后，该用户就不能再登录系统。管理员可以重新激活用户并设置新的到期日。
激活/停用	激活后，用户可以登录软件 如果停用，用户配置文件将被锁定
用户为外部	激活后，用户可使用 LDAP 通过外部技术系统登录（仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块） LDAP 是 Lightweight Directory Access Protocol（轻量级目录访问协议）的缩写。该协议允许组织存储和管理用户数据。
添加	输入用户名等信息，添加新用户。 点击添加后，软件会显示用户首次登录的初始密码。
更新	在用户表中选择现有用户并编辑字段后对其进行更新
重置密码	重置用户密码 软件会在表格下方显示新的初始密码。

在用户表中选择用户后，软件会在角色表中显示为该用户分配的角色。一个用户可以有多个用户角色。这样，用户就拥有了所有这些用户角色的访问权限。

用户角色

角色表显示了用户角色概览。选择用户角色后，可以查看其访问权限。

	描述
复选框	勾选复选框，为所选用户分配用户角色

使用**编辑角色**区域中的输入框和按钮编辑用户角色。

字段/按钮	描述
添加	输入角色名称后添加新用户角色
更新	更改角色名称后更新自定义用户角色 无需保存对权限设置的更改。
复制	复制用户角色
存档	确认提示后存档所选用户角色 已存档的用户角色无法恢复。 只有未指定用户的用户角色才能存档。

软件默认提供具有分级访问权限的用户角色。

- 不能更改默认用户角色的访问权限。
- 您可以为新用户角色定义个人访问权限。

用户	访问权限
管理员	<ul style="list-style-type: none"> ■ 管理员可以管理用户和访问权限。 ■ 管理员可以更改软件许可证。 ■ 管理员可以查看和导出审计追踪。 ■ 管理员可以创建组。他们建立数据存储和数据导出。 ■ 管理员无权执行测量。
服务	<ul style="list-style-type: none"> ■ 服务角色仅限于 Analytik Jena 的服务技术人员或经 Analytik Jena 授权的人员。 ■ 服务是唯一可以通过查看 维护桌面菜单项访问受密码保护的服务功能的角色。 ■ 服务角色可以广泛使用软件功能，例如，可以开始测量、查看结果和编辑结果。
实验室管理员	除用户管理和许可证管理外，实验室管理人员可广泛访问软件功能。
实验室技术员	实验室技术人员的权利介于实验室经理和实验室助理之间。
中级用户	实验室助理的权利仅限于测量操作。
简单用户	临时工作人员的访问权限小于实验室助理。
数据审计员	<ul style="list-style-type: none"> ■ 原始数据验证器在可选的 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块中发挥着重要作用。他们可以查看、签署和评论测量方法、顺序、校准和测量结果。 ■ 原始数据验证器可以生成报告、导出数据和查看审计追踪。

另见

- 使用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块安装软件 [▶ 10]

13.1.2 访问权限

软件默认提供具有分级访问权限的用户角色。

- 不能更改默认用户角色的访问权限。
- 您可以为新用户角色定义个人访问权限。

通过**用户管理**窗口中的**权利**和**数据权限**表，可以查看分配给用户角色的访问权限。

数据权限表规定了在中央 CDM 服务上查看、创建、更新和删除数据的基本权利。

权利表详细控制各种软件功能的访问权限。例如，您可以使用**审核**和**已发布**签名为数据发布单独分配权限。此外，您还可以在数据发布前授权用户角色使用数据。

您可以使用表格定义以下访问权限：

- 配置软件设置
- 编辑设备配置和更改软件许可
- 配置数据存储、数据导入和导出
- 管理用户
- 配置管理数据的组
- 自定义序列和结果表
- 创建和编辑方法
- 创建和编辑序列并执行测量
- 创建和编辑校准
- 查看和编辑结果
- 导入和导出数据
- 使用电子签名批准数据
- 确认错误消息
- 查看审计追踪并添加手动条目 (仅适用于 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块)

您可以通过勾选复选框来激活自己用户角色的访问权限。不要求保存。访问权限适用于具有该用户角色的所有用户，从他们下次登录软件时开始生效。

读取权限只允许对数据进行只读访问。用户可以查看和使用数据，但不能编辑数据。读取权限是编辑权限的前提条件：编辑权限必须与读取权限一起分配。

某些权限限制了对某些要素的访问，例如只能为默认仪器创建序列。

如果用户没有菜单和对话框的访问权限，相关区域将不显示或显示为灰色。

您可以使用表格下方的按钮快速更改权限选择：

按钮	描述
全部清除	明确的权限选择
选择全部	选择所有权限

13.1.3 编辑用户

创建一个新用户角色

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令程序 | 用户管理。
- ▶ 在编辑角色中输入新角色名称。
- ▶ 在角色 区域，单击添加 保存用户角色。
- ▶ 或者，单击复制 按钮复制现有用户角色。
- ▶ 在数据权限 和权利 中选择用户角色的访问权限。为此勾选此复选框。没必要保存。
 - 数据权限 表规定了在中央 CDM 服务上查看、创建、更新和存档数据的基本权利。
 - 权利 表详细控制各种软件功能的访问权限。
- ✓ 您已创建了一个具有自定义用户权限的新用户角色。现在可以为用户分配新的用户角色了。

创建一个新用户

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令程序 | 用户管理。
- ▶ 在编辑用户 区域，在名称 输入字段中输入用户名。
- ▶ 输入显示的名称。
- ▶ 如果用户有效期有限，则激活用户过期 选项。在日期 中设置他们可以登录软件的最后日期。
- ▶ 在编辑用户 区域，单击添加 保存用户。

- ✓ 软件会在**用户**表下方显示用户首次登录的初始密码。
- ▶ 选择初始密码，用 **Ctrl + C** 复制到剪贴板，然后转发给新用户。
- ▶ 在**角色**表中为新用户选择用户角色，并通过复选框激活。
 - ✓ 您创建了一个新用户，并为该用户分配了一个用户角色。新用户被授权登录系统。

一个用户可以有多个用户角色。这样，用户就拥有了所有这些用户角色的访问权限。

首次登录时，软件会打开**修改密码**窗口，新用户必须在此更改密码。

编辑用户设置

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令**程序|用户管理**。
- ▶ 在**用户**表中选择用户。
- ▶ 在**编辑用户**中自定义用户数据。
- ▶ 单击**更新**按钮保存更改。
- ▶ 如果需要，为用户分配一个新的用户角色。为此，请选中**角色**区域中的复选框。
- ▶ 对于自己的用户角色：在**角色**区域选择一个角色。更改**数据权限**和**权利**表中的访问权限。
 - 无法编辑预定义用户角色的访问权限。
 - ✓ 您已定制用户设置。

访问权限的任何更改都会影响分配给用户角色的所有用户。

存档用户角色

您可以存档用户和自己的用户角色，这些角色未分配给任何用户。无法删除用户和用户角色。

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令**程序|用户管理**。
- ▶ 为此，请在**角色**区域选择一个已创建的用户角色，然后单击**存档**按钮。确认确认请求。
 - ✓ 您已将用户角色存档。以后无法恢复存档的用户和用户角色。

停用用户

您可以停用用户，拒绝他们访问软件。您可以稍后再解除对用户的阻止。

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令**程序|用户管理**。
- ▶ 在**用户**表中选择用户。
- ▶ 单击**激活**切换开关。
 - ✓ 用户已停用。
- ▶ 如果需要，再次单击切换开关重新激活用户。

重置密码

您可以重置用户密码，例如在用户忘记密码的情况下。

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令**程序|用户管理**。
- ▶ 在**用户**表中选择用户。
- ▶ 单击**重置密码**。
 - ✓ 软件会重置当前密码，并为首次登录生成一个新的初始密码。软件会在**用户**表下方显示密码。

13.1.4 配置密码规则和自动注销

在**用户管理**窗口中，您可以定义密码的有效性标准，并配置不活动后自动登出。

- ▶ 作为管理员登录软件。
- ▶ 选择菜单命令**程序 | 用户管理**。
- ▶ 在**密码规则和自动锁定**中设置密码条件（见表）。
- ▶ 激活**启用**选项，以便在用户非活动时自动注销。在**用户在[**min**]后锁定**中以分钟为单位设置非活动时间。
 - ✓ 新密码条件对所有新密码都有效。更改前创建的密码仍然有效。


条件	描述
最小长度	设置最小密码长度（最少 4 个字符）
最大长度	设置最大密码长度（最多 100 个字符）
上次检查的密码	定义以前使用过的密码的允许重复次数（最多 10 次）
最大输入尝试次数	定义在锁定用户配置文件前无效登录尝试的次数（最多 10 次）。 管理员可在 用户管理 中解锁锁定的用户配置文件。
密码过期[days]	设置密码失效的天数（1 至 365 天）
用户在[min]后锁定	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 通过复选框激活自动注销非活动用户 ▪ 定义非活动持续时间，默认设置：30 分钟（1 至 2000 分钟） 该软件可锁定屏幕，从而防止意外访问数据。测量继续进行。
小写	定义密码必须包含的字符：
大写	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 大写和小写字母
数字	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 数字
特殊字符	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 特殊字符
禁用常用密码	使用内部软件列表拒绝简单密码

13.1.5 密码丢失时恢复管理员

建议：在**用户管理**中，设置一个具有**管理员恢复**角色的用户。如果密码丢失，可使用该用户恢复管理员配置文件。Analytik Jena不能恢复配置文件。

- ▶ 如果管理员密码丢失：以**管理员恢复**角色的用户身份登录软件。
- ▶ 打开**用户管理**。在**用户**表格中选择管理员。
- ▶ 如有必要，点击**停用按钮**重新激活管理员。
- ▶ 单击**重置密码按钮**重置管理员密码。
- ▶ 使用 **Ctrl + C** 将新的初始密码复制到剪贴板，并提供给管理员，以便他们登录软件。

13.2 查看、打印或导出审计追踪

您可以在**程序 | 显示审计跟踪**中查看审计追踪。为此，请在**按时间筛选**中选择所需的时间段，然后点击  图标。显示审计跟踪时，软件最多可加载 2000 个条目。

Created	User	Details	Audit Trail type	Category	Action type
26.11.2024 13:03:24	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user login
26.11.2024 12:48:24	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user logout
26.11.2024 11:13:25	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user login
26.11.2024 10:58:07	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user logout
26.11.2024 10:56:20	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user login
26.11.2024 10:26:34	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user logout
26.11.2024 10:20:51	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user login
26.11.2024 10:11:33	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user logout
26.11.2024 09:09:22	Technical Documentation (TecDoc)	User rights of role FuE_BerechtigungenSWT c...	User Audit Trail	User management	changed user role rights
26.11.2024 09:09:20	Technical Documentation (TecDoc)	User rights of role FuE_BerechtigungenSWT c...	User Audit Trail	User management	changed user role rights
26.11.2024 08:39:42	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user login
26.11.2024 08:39:16	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user logout
26.11.2024 08:38:41	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user login
25.11.2024 12:56:53	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user logout
25.11.2024 11:11:34	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user login
25.11.2024 11:09:33	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user logout
25.11.2024 10:30:46	Technical Documentation (TecDoc)	User Technical Documentation (TecDoc) logg...	User Audit Trail	Login	user login

图 55 审计追踪窗口

记录的事件

软件会在审计追踪中记录以下事件：

- 启动和退出软件
- 用户登录和注销
- 分析系统的启动、待机和关闭
- 创建和编辑方法
- 开始、结束和手动终止测量
- 执行和编辑校准
- 测量或输入空白
- 记录日系数
- 进行系统适用性测试
- 发生的错误及错误信息
- 手动编辑结果
- 更改用户管理，如创建新用户
- 数据发布和数据导入
- 软件更新
- 创建或更改设备配置
- 更改跨软件设置

审计追踪的结构

软件以表格形式显示审计追踪。软件会将记录的事件分门别类，您可以利用这些类别过滤审计追踪。每个事件都会记录时间和登录用户。


列	描述
已创建	事件的日期和时间
用户	事件发生时登录的用户
详细信息	记录的事件（详细描述）
审计追踪类型	记录的事件类型： 用户审计跟踪 用户管理的变更 运行审计跟踪 记录测量过程 方法审计跟踪 创建或更改方法 显示审计跟踪 设备控制记录，包括设备配置的更改 错误 错误消息
类别	记录事件的类别
操作类型	记录的事件（代码）
已更改对象的类型	受影响的软件要素类型
已更改的对象	受影响的软件要素
仪器	设备型号

列	描述
序列号	设备序列号
应用类别	软件类型 (TOC)
应用类型	软件名称
应用实例	网络中的客户端


您可以按升序对记录的事件进行排序。为此，请单击要排序的列的标题。

过滤

您可以根据表格概览中的列过滤审计追踪，以减少显示的事件数量。

- ▶ 从一个或多个下拉菜单中选择条目，应用筛选器。
- ▶ 在**按时间筛选** 旁边，选择日历中时间窗口的开始和结束时间。
- ▶ 在**详细信息** 中，在搜索栏中输入自由文本，以筛选 **详细信息** 栏中的条目。
- ▶ 点击  图标打开暂停运行更新。
- ▶ 要删除过滤器，请选择下拉菜单顶部的空行。





显示和打印审计追踪

- ▶ 使用菜单命令**程序 | 显示审计跟踪** 打开审计追踪，然后点击  图标。
- ▶ 如有需要，可为某些事件设置筛选器或定义时间窗口：
 - 从一个或多个下拉菜单中选择条目。
 - 设置时间窗口：在显示的日历中选择开始和结束日期。
- ▶ 按升序对表格中的事件进行排序。为此，请单击要排序的列的标题。
- ▶ 单击**报告** 打开打印预览。
- ▶ 为了更好地概览，请单击**页面概述** 按钮，在报告左侧显示带有页面摘要的导航区。点击**放大** 和**缩小** 可放大或缩小视图。
- ▶ 单击**打印机选项** 设置打印机。
- ▶ 单击**页面设置** 可配置页面设置，如纸张大小或方向。默认：A4，肖像。将布局应用于当前页面或所有报告页面。
- ▶ 在报告中添加公司徽标。单击**报告徽标** 区域中的**加载** 按钮，然后在 Windows 文件管理器中选择徽标，并用**打开** 将其加载到报告中。
- ▶ 点击**打印** 开始打印。
- ▶ 单击 **保存** 按钮保存报告。

审计追踪通常包含大量条目。因此，建议对审计追踪进行过滤，以查找相关条目。您可以用以下文件格式保存报告：PDF（默认）、RTF、HTML、TXT、FP3。

13.2.1 自定义审计追踪

您可以使用**调整显示列** 命令（在右键菜单中）自定义表格的布局。

- ▶ 使用菜单命令**程序 | 显示审计跟踪** 打开审计追踪。
- ▶ 右键单击表格，打开右键菜单。
- ▶ 在**配置视图** 窗口中，调整表格列的显示和顺序：
 - 使用  图标将建议（左）中的一列转移到表格（右）中。
 - 使用  图标从表格中删除一列（右图）。
 - 使用  图标将建议（左）中的所有列转移到表格（右）中。
 - 使用  图标删除表格中的所有列（右图）。

- 使用 ↓ 图标可将序列表中的一列向下或向右移动。
- 使用 ↑ 图标可将序列表中的一列向上或向左移动。
- 使用 ↺ 图标恢复预设栏。
- ▶ 单击**确定**以确认输入的数据。
 - ✓ 您已自定义了表格列。

13.3 在审计追踪中添加手动输入项

您可以手动将某些条目添加到审计追踪中，例如固件更新或已进行的维护工作。

- ▶ 使用**程序 | 手动审计跟踪条目**菜单选项打开**手动添加审计跟踪条目**窗口。
- ▶ 在**条目类型**：的下拉菜单中选择一个条目：。
 - ✓ 软件会进一步显示下拉菜单，对事件进行分类。
- ▶ 使用出现的下拉菜单在审计追踪中存储设备配置和维护类型等其他信息。
- ▶ 在**备注**旁边的输入框中添加有关事件的自由文本。
- ▶ 单击**添加**，将手动条目添加到审计追踪中。
 - ✓ 软件会将人工输入的信息输入审计追踪。软件会在审计追踪中记录时间和记录事件的用户。

选项	描述
条目类型：	<p>设备鉴定失败选项 设备鉴定（如作为 IQ/OQ 的一部分）失败。</p> <p>设备鉴定成功选项 设备鉴定成功。</p> <p>固件更新选项 服务已执行固件更新。</p> <p>安装确认 (IQ) 失败选项 安装鉴定 (IQ) 失败。</p> <p>安装确认 (IQ) 成功选项 IQ 成功。</p> <p>维护选项 已进行维护工作。</p> <p>操作鉴定失败选项 操作鉴定 (OQ) 失败。</p> <p>操作鉴定成功选项 OQ 成功。</p>
仪器	选择设备配置
旧固件版本：	输入旧固件版本以进行固件更新
新固件版本：	输入新的固件版本进行固件更新
维护类型：	<p>选择维护类型：</p> <p>维护选项 有计划的定期维护工作</p> <p>修理选项 设备出错或出现分析问题后进行的维护工作</p>
备注	添加更多信息作为备注

13.4 电子签名

除用户管理外，为确保数据有效性符合21 CFR Part 11，签名也是重要组成部分。

使用 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块，必须签署数据。这意味着您只能使用已发布的、未阻止的方法和校准进行测量。除非您通过用户管理明确授权在数据发布前使用数据。

签署是根据双重控制原则进行的：

- 创建数据的用户会自动签署**已创建**。
- 使用**审核**进行校验和签名必须由其他用户执行。
- 每个有权限将数据签署为**已发布**的用户都可以发出已发布签署状态。

软件可依次提供以下签名状态：**已创建**、**审核**和**已发布**。点击**无效**，锁定过时或无效数据。

签名	描述
已创建	签名由创建数据时登录的用户自动添加。 授权用户可以继续处理数据。软件会将更改记录在审计追踪中。
审核	放行流程从指定 审核 签名开始。从那时起，您将无法再编辑数据。 签名用户验证数据。根据双重控制原则，验证者必须不同于创建者。
已发布	签名用户释放数据以供使用。 现在您可以使用测量方法和校准。一般来说，您可以使用发布的测量结果和 SST，并将其传达给第三方。
无效	签名用户锁定数据。您不能再使用这些数据。 更改签名状态后，您可以再次编辑锁定的数据。

软件为以下数据提供签名：

- 方法
- 校准
- 测量结果
- 系统适用性测试 (SST)

签署数据

您可以在**方法**、**校准**、**结果表**和**SSTs**窗口中签署数据。

- ▶ 打开窗口。
- ▶ 从概览表中选择方法、校准、测量结果或 SST 报告。在概览表中搜索搜索词，或使用下拉菜单中的过滤标准进行过滤。
- ▶ 点击**审核**和**已发布**按钮签署数据。
- ▶ 根据软件提示输入用户名和密码。
- ▶ 输入备注并通过**确定**确认。
- ▶ 点击**无效**，锁定过时或无效数据。
- ▶ 在**结果表**窗口中，通过勾选复选框来选择多个结果。单击**签署所有检查结果**按钮，一次签署多个结果。
 - ✓ 数据已签署。高亮按钮显示当前签署状态。
- ▶ 在**签名**选项卡上查看签名的详细信息，如日期、时间和签署数据的用户。

i 注意！如果您按顺序记录日系数，软件会自动将每日因数转移到校准中。校准的签署状态更改为**已创建**。您必须再次批准校准，才能按顺序进行下一步测量。

软件会将数据签名记录在审计追踪中。

在标准软件中，签名数据是可选项。**签名**选项卡上没有条目。

另见

 搜索和过滤器 [▶ 36]

13.5 数据管理

软件可保护数据免受有意或无意的数据篡改。

软件将所有数据集中存储在 CDM 服务器上：

- 用户管理
- 审计追踪
- 方法
- 序列
- 校准
- 结果
- 系统适用性测试
- 设备配置

如果用户拥有适当的访问权限，就可以查看和编辑软件中的数据。软件会将所有更改记录在审计追踪中。任何用户都无权删除数据。

13.6 系统适用性测试 (SST)

系统适用性测试 (SST) 用于制药行业 TOC 或 NPOC 测定的质量保证，只有 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块才能实现。与蔗糖相比，该测试检验设备是否适用于测量难以氧化的有机物质（对苯醌）。根据 KP（韩国药典）和 JP 17 2.59 的规定，调查十二烷基苯磺酸钠的氧化性。

- 作为 SST 的一部分，您需要使用 TOC 或 NPOC 方法测量 TOC 水、蔗糖标准物质和对苯醌标准物质。
- 软件会计算 TOC 值： $TOC_{Net} = TOC_{Standard} - TOC_{Water}$
- 软件计算出 TOC_{Net} （对苯醌）/ TOC_{Net} （蔗糖）之商。
- 软件会在结果 | SSTs 窗口和 SST 报告中输出结果。

如果 SST 商为 0,85 ... 1,15，则 SST 被视为合格。


对于 KP 和 JP 17 2.59，如果测得的十二烷基苯磺酸钠溶液的 TOC 浓度至少为 0,450 mg/l，则 SST 即为通过。配制水的 TOC 浓度必须 $\leq 0,250$ mg/l。

根据以下药典，可以使用不同浓度或不同物质的 SST 标准：

- USP SST，蒸馏水 (USP 643)
- USP SST，无菌水 (USP 643)
- EP SST (EP 2.2.44)
- JP/KP SST (KP, JP 17 2.59)

软件会相应地调整物质和目标浓度。

13.6.1 进行系统适用性测试 (SST)

- ▶ 使用测量 | 添加新序列菜单选项创建新的序列。
- ▶ 点击  图标打开创建 SST 向导。
- ▶ 在向导中为 SST 指定标题。默认名称为：SST + 时间戳。（可选）添加评论。

- ▶ 选择进行 SST 所应遵循的药典 :
 - USP SST, 蒸馏水
 - USP SST, 无菌水
 - EP SST
 - JP/KP SST
 - ▶ 单击方法按钮, 然后在选择方法窗口中选择 NPOC 或 TOC 方法。
 - ▶ 单击校准按钮, 然后在选择校准窗口中选择校准。
 - ▶ 如有必要, 请在目标浓度中调整目标浓度。目标浓度只有在药典发生变化时才可更改。
 - ▶ 点击确定, 确认向导中的输入。
 - ✓ 软件将 SST 测量结果传输到序列中。
 - ▶ 单击结果表后, 从下拉菜单中选择结果表。或: 使用创建新的结果表创建新的结果表。
除非您选择结果表, 否则软件会将结果保存在默认结果表中。有关默认设置, 请参见: 程序 | 设置 | 结果表
 - i** 注意! 如果没有结果表, 则无法开始测量。
 - ▶ 单击 检查完成的序列是否合理。软件检查是否可以测量创建的测量步骤。
 - ▶ 提供 SST 样品 (含 TOC 的水、蔗糖和对苯醌的标准样品, 或对于 KP, JP 17 2.59 含 TOC 的水和十二烷基苯磺酸钠的标准样品)。
 - ▶ 单击 ▶ 开始测量。
 - ▶ 如果手动送样, 则按照软件提示逐个送样。确认样品的测量结果。
 - ✓ 软件会自动评估 SST 并在 SST 报告中输出结果。
- 您可以在结果详情 | SSTs 中查看 SST 报告。

13.6.2 创建 SST

使用创建 SST 向导为 TOC 和 NPOC 测量准备系统适用性测试 (SST)。

通过添加新序列 窗口中的 图标打开向导。

布局

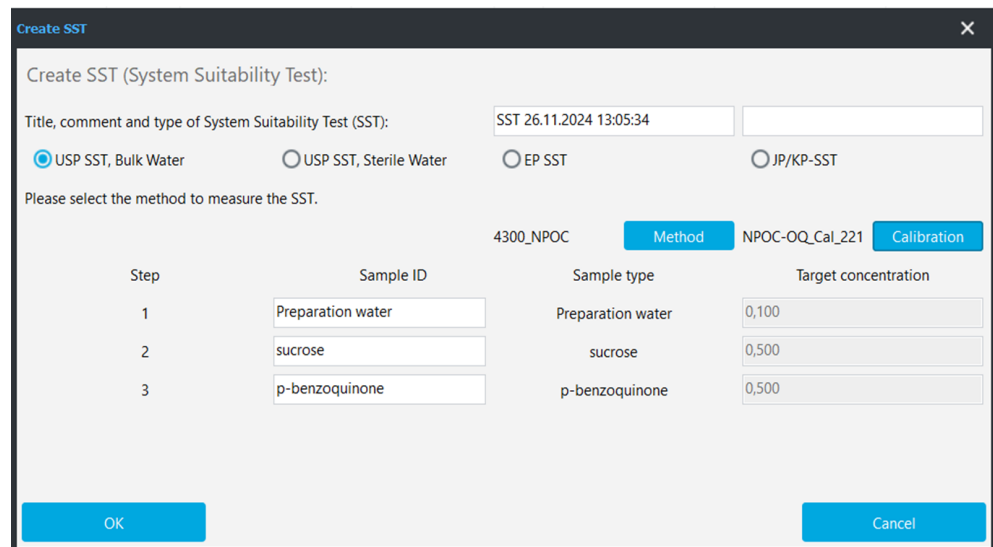


图 56 创建 SST

元素	描述
输入字段 系统适用性测试 (SST) 的标题、评论和类型：	<ul style="list-style-type: none"> 为 SST 指定名称 默认名称为：SST + 时间戳。 可选输入备注
单选按钮 <ul style="list-style-type: none"> USP SST, 蒸馏水 USP SST, 无菌水 EP SST JP/KP SST 	根据药典选择 SST： <ul style="list-style-type: none"> 根据 USP 643 “体相水” 对超纯水进行 SST 测试 根据 USP 643 “无菌水” 进行 SST 测试 根据 EP 2.2.44 进行 SST 测试 根据 KP, JP 17 2.59 进行 SST 测试 软件会相应地调整目标浓度。
按钮 方法	点击方法 按钮，然后在 选择方法 窗口中选择 NPOC 或 TOC 方法
按钮 校准	单击校准 按钮，然后在 选择校准 窗口中选择校准。
以往 SST 样品表	步骤 步骤编号 1 至 3 样本 ID SST 样品类型 TOC 水、蔗糖、对苯醌或 TOC 水和十二烷基苯磺酸钠（根据 KP JP 17 2.59）。 样品类型 选择 SST 类型 目标浓度 目标浓度 软件根据所选药典指定目标浓度。根据需要调整浓度。
按钮 确定	将 SST 转入序列
按钮 取消	取消准备 SST

13.6.3 在 SSTs 窗口中查看系统适用性测试结果

软件会自动评估系统适用性测试，并将结果显示在 SSTs 窗口中。使用菜单命令 **结果 | SSTs** 打开 SSTs 窗口。

在 SSTs 窗口中

- 您可以在 **概述** 表中管理 SST 的结果。
- 在 **选择组** 窗口中点击 **分配组**，即可将 SST 编入组中。
- 单击 **转至结果**，加载包含 SST 测量结果的结果表。
- 单击 **导出** 以 XML 格式导出所选 SST 的结果，默认导出文件夹：
C:/ProgramData/Analytik-Jena/multiWinPro/export/results.
- 单击 **报告** 打开打印预览，并打印或保存 PDF 格式的报告。

窗口布局

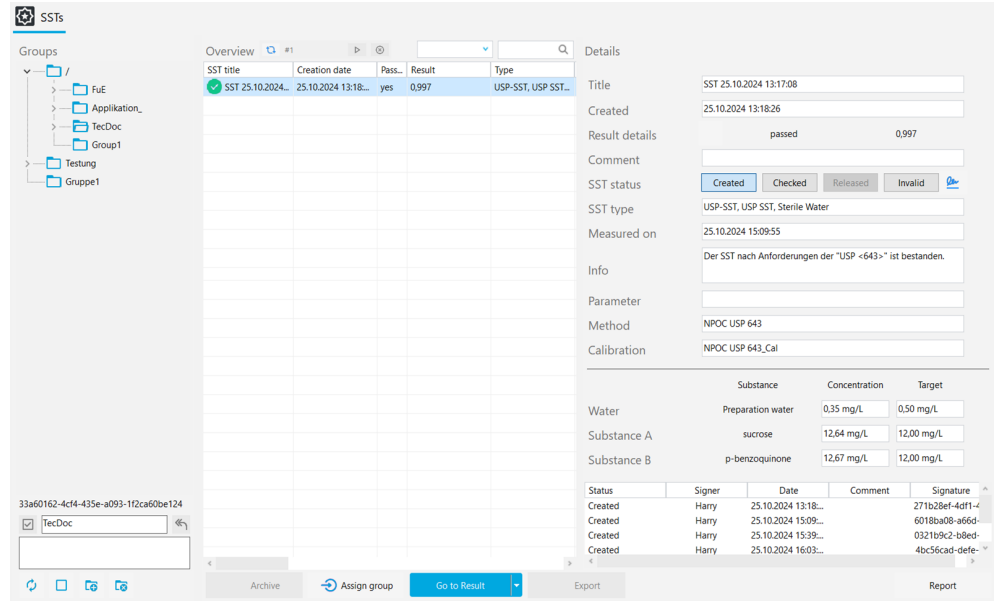


图 57 SSTs窗口

区域	描述
群组 (左)	管理组
概述 (中)	以表格形式概述记录的海温, 包括测量结果和背景信息, 如测量成功率、测量方法和校准等
详细信息 (右)	详细查看所选 SST 的结果, 并可签署测试和添加备注

13.6.4 概述 表格

概述 表格是SSTs 窗口的一部分。表格概览显示了所记录的系统适用性测试 (SST) 结果。

列	描述
SST 标题	SST 名称
报告创建时间	测量时间
通过	测试成功, 显示通过 - 是/否 如果 SST 商为 0,85 ... 1,15, 则 SST 通过。 对于 KP 和 JP 17 2.59, 十二烷基苯磺酸钠溶液中测得的 TOC 浓度必须大于 0,450 mg/l, 配制水的 TOC 浓度必须为 ≤0,250 mg/l。
结果	根据以下公式计算 SST 商数 : $TOC_{Net} \text{ (对苯醌)} / TOC_{Net} \text{ (蔗糖)}$
类型	根据以下药典进行 SST : <ul style="list-style-type: none"> 根据 USP 643 “体相水” 对超纯水进行 SST 测试 根据 USP 643 “无菌水” 进行 SST 测试 根据 EP 2.2.44 进行 SST 测试 根据 KP, JP 17 2.59 进行 SST 测试
启动	测量开始
结束	测量结束
信息	个人信息
水	SST 样品类型 TOC 水、蔗糖、对苯醌或 TOC 水和十二烷基苯磺酸钠 (根据 KP JP 17 2.59)。
物质 A	
物质 B	

列	描述
c (目标, 水)	SST 样品的目标浓度 (根据药典规定)
c (目标, A)	
c (目标, B)	
c (水)	测量的 SST 样品浓度
c(A)	
c(B)	
状态	签名
备注	作为备注的个人信息
方法	测量方法
校准	校准
参数	测量通道 (NPOC 或 TOC)
已测量	测量成功, 显示已测量 - 是/否

13.6.5 详细信息 详细视图

详细信息 表格是 SSTs 窗口的一部分。它显示了选定 SST 的详细信息。

显示参数	描述
名称	可编辑的 SST 名称
已创建	准备 SST 的时间
结果详情	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 显示 通过/未通过 ▪ 显示计算出的 SST 商数 软件计算出商： $TOC_{Net}(\text{对苯醌})/TOC_{Net}(\text{蔗糖})$ 。 如果 SST 商为 0,85 ... 1,15, 则 SST 通过。 对于 KP (JP 17 2.59), 十二烷基苯磺酸钠溶液中测得的 TOC 浓度必须大于 0,450 mg/l, 配制水的 TOC 浓度必须为 $\leq 0,250$ mg/l。
备注	个人信息
SST 状态	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 查看 SST 的签署状态 ▪ 测试后释放或阻止 SST
SST 类型	根据以下药典进行 SST： <ul style="list-style-type: none"> ▪ 根据 USP 643 “体相水” 对超纯水进行 SST 测试 ▪ 根据 USP 643 “无菌水” 进行 SST 测试 ▪ 根据 EP 2.2.44 进行 SST 测试 ▪ 根据 KP, JP 17 2.59 进行 SST 测试
已测量	测量时间
信息	评估测量是否成功
参数	测量通道 (NPOC 或 TOC)
方法	测量方法
校准	校准
结果表	以表格形式概述了测量浓度和目标浓度： <ul style="list-style-type: none"> ▪ TOC 水 ▪ 蔗糖 ▪ 对苯二酚 根据 KP, JP 17 2.59： <ul style="list-style-type: none"> ▪ TOC 水 ▪ 十二烷基苯磺酸钠

显示参数	描述
签名表	签名的详细视图

13.6.6 查看、打印和保存 SST 报告

查看 SST 报告

- ▶ 使用**结果详情 | SSTs**菜单选项打开**SSTs**窗口。
- ▶ 在**概述**表中选择 SST，并在**详细信息**视图中查看结果。
- ▶ 可选择在**备注**中添加备注。
- ▶ 使用**审核**和**已发布**按钮检查后发布结果。

打印报告

- ▶ 单击**报告**打开打印预览。
- ▶ 为了更好地概览，请单击**页面概述**按钮，在报告左侧显示带有页面摘要的导航区。单击**放大**和**缩小**可放大或缩小视图。
- ▶ 在报告中添加公司徽标。单击**报告徽标**区域中的**加载**按钮，然后在 Windows 文件管理器中选择徽标，并用**打开**将其加载到报告中。
- ▶ 单击**打印机选项**设置打印机。
- ▶ 单击**页面设置**可配置页面设置，如纸张大小或方向。默认：A4，肖像。将布局应用于当前页面或所有报告页面。
- ▶ 单击**打印**开始打印。

保存报告

- ▶ 单击**保存**按钮保存报告。
- ▶ 单击**保存**，然后在**另存为**窗口中指定文件名、存储目录和文件类型。
您可以用以下文件格式保存报告：PDF（默认）、RTF、HTML、TXT、FP3。

图列表

图 1	multiWin pro 软件 (有关视频, 请参阅软件帮助)	7
图 2	带有 FDA 21 CFR Part 11 Compliance 模块的软件 (有关视频, 请参阅软件帮助) 。	8
图 3	使用向导安装数据库	11
图 4	删除 "StackBuilder "上的复选标记	12
图 5	设置数据库密码	12
图 6	输入网络地址	12
图 7	将语言和地区设置设为默认本地语言。	13
图 8	启动 pgAdmin 4 软件	13
图 9	输入数据库密码	13
图 10	创建 cdmserver 数据库	14
图 11	检查数据库连接	14
图 12	安装 CDM 服务	15
图 13	将 CDM 服务配置为 Windows 服务	15
图 14	Windows 服务属性	16
图 15	将 CDM 服务作为 Windows 服务进行测试时的浏览器显示问题	16
图 16	启动 pgAdmin 4 软件	19
图 17	在对象资源管理器中选择数据库	19
图 18	开始备份	20
图 19	定义文件名并选择存储目录	20
图 20	成功备份后的信息	20
图 21	创建 cdmserver 数据库	21
图 22	恢复数据库	21
图 23	成功恢复数据库后的信息	22
图 24	许可证管理窗口	23
图 25	许可证管理窗口	26
图 26	选择 CDM 连接窗口	26
图 27	仪器控制 面板	34
图 28	仪器状态 面板	34
图 29	仪器信息 面板	34
图 30	方法 对话框	35
图 31	群组 区域	37
图 32	软件设置 窗口、常见 选项卡	39
图 33	软件设置 窗口、单位和精度 选项卡	42
图 34	软件设置 窗口、存储、导出和报告 选项卡	43
图 35	用户管理窗口	48
图 36	方法窗口	53
图 37	添加新序列窗口	65
图 38	序列窗口	71
图 39	校准向导	72

图 40	稀释盘	91
图 41	校准窗口	96
图 42	结果表窗口	100
图 43	结果表窗口	101
图 44	信息 面板	104
图 45	参数 面板	105
图 46	平行样 面板	105
图 47	计算参数 面板.....	106
图 48	进样器校准窗口	112
图 49	仪器窗口	113
图 50	维护 选项卡	115
图 51	单一控制步骤窗口.....	116
图 52	自定义窗口	120
图 53	帮助 菜单	122
图 54	用户管理窗口	124
图 55	审计追踪窗口	129
图 56	创建 SST	134
图 57	SSTs窗口	136