

SYSTAT NEWSLETTER

September 2008

In dieser Ausgabe:

Produkte:	_____	Das neue SigmaPlot 11 – mit über 50 statistischen Schlüsselmethoden und mehr als 100 2D- und 3D-Graphtypen
Artikel:	_____	Review Statistik in SigmaPlot 11: aus: <i>Scientific Computing World</i>
	_____	„Kardiologische Forschungsdaten auswerten und effektivvoll präsentieren mit SigmaPlot“ aus: <i>Lebendige Wissenschaft: Spitzenforschung Herz-Kreislaufmedizin</i>
	_____	„Die Dekonvolution als Methode zur Quantifizierung überlagerter chromatographischer Peaks“ aus: <i>http://www.novia.de und Laborpraxis</i>
Download:	_____	SigmaPlot 11 Broschüre _____ kostenlose Demo-CD
Veranstaltungen:	_____	Systat Software Online-Seminare
Tech Tipps:	_____	Graphen mit mehreren Achsenunterbrechungen _____ 3D-Balkendiagramm mit „Fehlerbalken“

Produkte

Das neue SigmaPlot 11 - mit über 50 statistischen Schlüsselmethoden und mehr als 100 2D- und 3D-Graphtypen

Hier noch einmal kurz zusammengefasst einige der neuen Funktionen in SigmaPlot 11. Weitere Einzelheiten und eine PDF-Broschüre zum Download finden Sie auch auf unserer website www.systat.de. Eine kostenlose Demo-CD zum Testen des Programms mit eigenen Daten erhalten Sie per E-Mail an kontakt@systat.de oder telefonisch unter 02104 9540. Bitte geben Sie dabei *NL0108* an.

NEUE Datenanalyse-Funktionen

Statistikanalyse - SigmaPlot ist jetzt ein komplettes Graphik- UND Statistikpaket. Fortgeschrittene statistische Analysen können nun ohne den zusätzlichen Kauf von SigmaStat durchgeführt werden. SigmaPlot 11 führt Anwender schrittweise durch die komplexen statistischen Analysen, ohne dass der Anwender ein Statistikexperte sein muß.

Globale Kurvenanpassung - Die komplett neue Anwender-Oberfläche in SigmaPlot 11 ermöglicht es nun, ganz leicht eine globale Kurvenanpassung durchzuführen. Anwender können so ganz leicht einen oder mehrere Gleichungsparameter auf mehrere Datensätze anwenden.

Verbessertes Standardkurven-Makro - Zusätzlich zu dem EC50-Wert, der schon zuvor berechnet werden konnte, können Anwender nun auch andere selbst eingegebene Werte wie EC40 und EC60 sofort berechnen. Zwei logistische Funktionen mit fünf Parametern wurden neu hinzugefügt.

Statistische Tests in SigmaPlot 11:

- **Regression** (z.B., lineare, schrittweise, logistische, nichtlineare und andere)
- **Varianzanalyse** (z.B. parametrische, ranked, wiederholte Messungen)
- **Nicht-parametrische Statistiken** (z.B. Mann-Whitney, Kruskal-Wallace)
- **Korrelation** (e.g., Spearman, Pearson)
- **Rates and proportions** (e.g., Chi-Quadrat, Kontingenz-Tabellen)
- **Teststärke- und Stichprobengröße** (z.B. T-tests, Verhältnisse and ANOVA)
- **Beschreibende Statistiken** (z.B. Durchschnitt, Median, Standardabweichung)
- **Überlebensanalyse** (z.B. Kaplan-Meier, Cox Regression, Proportional Hazards, Stratified Model)
- **Regressionsdiagnostik** (z.B. Multicollinearität, homoscedasticity)

NEUE Funktionen der Anwender-Oberfläche

Vorformatierte Arbeitsblätter - mehr Anwenderflexibilität. Nehmen wir an, Sie würden gerne mit einem bestimmten Graphen beginnen, wissen aber nicht, wie Sie das Arbeitsblatt dafür aufsetzen sollen. Mit SigmaPlot 11 können Sie zuerst einen Graphen auswählen und erhalten dann ein vorformatiertes Arbeitsblatt für die Strukturierung Ihrer Daten. Die Daten, die Sie in das Arbeitsblatt eingeben, können Sie umgehend in dem Diagramm sehen.

Neue überarbeitete Anwender-Oberfläche - SigmaPlot 11 präsentiert sich im gesamten Anwendungsumfeld in einem neuen Look. Fügen Sie Werkzeugleisten-Optionen hinzu oder löschen Sie einzelne Funktionen. So passen Sie Ihren individuellen Arbeitsbereich an und rationalisieren Ihre Arbeit.

NEUE Graphik-Funktionen

Neue 2D-Vektordiagramme - Ein 2D-Vektordiagramm ist die Darstellung eines Vektorfeldes in XY-Koordinaten, bei dem Richtung und Größe dargestellt werden. Über eine Popup-Dialogbox bestimmen Sie Pfeil-Eigenschaften wie Farbe und Linienstärke oder Länge und Neigungswinkel des Pfeilkopfes.

Verbesserte 3D-Graphanpassung - Jetzt können auch alle 3D-Graphobjekte für die individuelle Anpassung selektiert werden.

NEUE Automatisierungs-Funktionen

Automatisches Updaten von Quick Transforms - Jedes SigmaPlot-Arbeitsblatt kann eine Liste mit anwenderdefinierten Transformationen enthalten, die automatisch wieder neu ablaufen, wenn die Eingabe-Daten der Transformationen verändert werden.

NEUE Windows Integrations-Funktionen

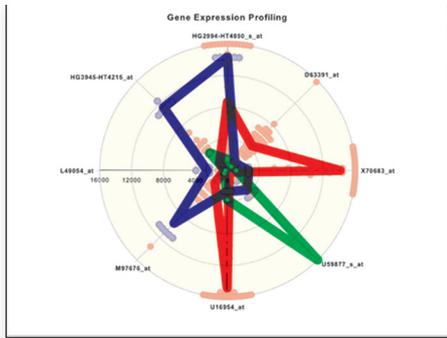
100%ige Vista-Kompatibilität -SigmaPlot 11 ist voll kompatibel mit Windows Vista und unterstützt die SigmaPlot Hilfe-Dateien.

Direkter Import von Excel 2007 - Dateien in SigmaPlot 11 - SigmaPlot 11 erweitert seine Kompatibilität mit Microsoft Office 2007

NEUE Import-/Export-Funktionen

Unterstützung von EMF-Dateien - Enhanced Metafile (EMF) Format-Dateien sind eine neue, verbesserte 32-bit-Version des WMF-Formats mit höherer Funktionalität. SigmaPlot 11 unterstützt jetzt auch den Import- und Export von EMF-Dateien.

SigmaPlot 11



SigmaPlot 11, while staying true to its roots and philosophy as an environment for production of publication quality charts and graphs, also breaks new ground in several ways that confirm the developmental payoff accruing from its acquisition, a couple of versions back, by Systat Software International.

Paradoxically, one of the biggest stories is not strictly about SigmaPlot at all, but about SigmaStat. SigmaStat, one of the easiest to use statistics packages around, is very widely popular with scientists.

A quick and very superficial trawl has just netted me more than a thousand peer-reviewed research papers, published in the past 12 months, which cite it as the software used for their data analysis. It has, in the past, always been a stablemate of SigmaPlot, with interaction between them when installed. Now, though still available as a standalone package, it has also been imported, wholesale, into its graphics sibling as a replacement for SigmaPlot's own facilities. This brings considerably extended analytical reach within the same interface as the illustrative and presentation functions.

The resulting 'SigmaPlot Statistics' offers a good range of descriptives, tests (including a useful spread of repeated measures), fits (including dynamic nonlinear regression), transforms (including eight new probability functions across three forms), and an optional question-and-answer-based advisory wizard to assist in selection of the most appropriate methods. The dynamic curve fitting tool, which selects the best fit obtained from multiple models across multiple parameter ranges, is impressive, while a sophisticated global curve fitter simultaneously marshals selectively shared parameters across multiple data sets to give improved fit accuracy in many cases.

Back on the graphics front where SigmaPlot's main business lies, vector plots have arrived and can, in common with other options, be overlaid and fine tuned in a flexible variety of ways. Representation can be in either point to point Cartesian start and end form or as an argument and magnitude centred on a (x,y) data point. A bit of experimentation with multivariate vector data allowed the two forms to be combined, with change in effect modelled as separate polar forms in different colours at either end of every transit – not recommended with high density sampling, but usefully informative if applied to sparse or fractional sets. Angular units, magnitude scaling (via worksheet transforms), arrowhead detail, and colour, are all selectable and changeable at will.

Customisation of output is a principal characteristic of SigmaPlot, and continues to develop well. An interesting addition is optional filling in of the gaps in broken lines with a secondary colour. This is not something to over use, but two separate but closely intertwined curves, for example, gain considerably in clarity and coherence if given a suitable infill. Selection of objects in a 3D plot, which used to be less carefree than in 2D, is much improved.

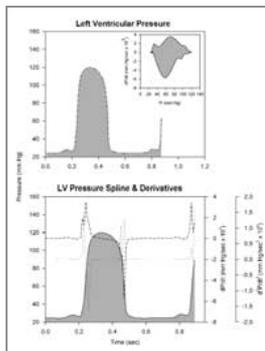
Aspects not covered here include, among others, plot confidence intervals, mean and range charts, contour superimposition, the upgrade of metafiles to 32-bit, preformatting of datasheets, and optionally self updating quick transforms saved with the data sheet. There are also general interface and house-keeping developments such as database and Excel 2007 file import, macro bridged plotting of Access data, Vista compatibility, a new look with user-editable toolbars, and so on.

Taken together, this is the most significant upgrade for some time; after a period of consolidation, SigmaPlot has a firm new direction to follow.

von Felix Grant, in: *Scientific Computing World*, 25 Juni 2008

Kardiologische Forschungsdaten auswerten und effektiv präsentieren mit SigmaPlot

Es ist eine bewährte Praxis, Kardiologen bei der Entwicklung von Software-Lösungen für kardiologische Anwendungen als Berater hinzuzuziehen. Dass diese aber selbst dazu übergehen, Software für ihren Bereich zu entwickeln, ist wohl eher die Ausnahme. So geschehen Anfang der 80er-Jahre, als Dr. John Osborn, Pionier der kardiotorakalen Chirurgie und Forscher im Bereich der kardiopulmonären Medizin, feststellte, dass ihm die richtige Software zur Analyse und Veröffentlichung seiner umfangreichen Forschungsdaten fehlte.



Zusammen mit Dr. Richard Mitchell – wie er ehemaliger Direktor am Institute of Biomedical Engineering Sciences des Pacific Medical Center in San Francisco – gründete Osborn ein kleines Software-Unternehmen, das schon bald darauf die erste Version von SigmaPlot für die Datenanalyse und graphische Präsentation von Forschungsdaten auf den Markt brachte.

Heute ist SigmaPlot mit weltweit mehr als 200 000 Anwendern Standardprogramm in vielen Unternehmen, Universitäten, privaten und öffentlichen Forschungs-Instituten. Die neueste Version, SigmaPlot 11, mit umfangreichem Statistikbereich ist soeben erschienen.

In der kardiologischen Forschung wird das Programm u. a. eingesetzt

- für statistische Analysen wie die Bestimmung des Korrelationskoeffizienten bei einem Students t-Test oder einem Mann-Whitney Rank Sum Test für ungepaarte Proben, z. B. im Rahmen von Untersuchungen zu Myokarditis oder muriner Stauungsinsuffizienz infolge eines Herzinfarkts;

- zur Auswertung von Daten z. B. aus Studien zur Hämodialysebehandlung, oder der Herzfrequenzvariabilität bei Langzeit-EKGs, zur Untersuchung

von Wirkstoffen wie Dopexamin und Dopamin bei Patienten im septischem Schock, oder auch zur Bestimmung von EC₅₀-Werten aus einer Logit-Transformation von Spannungsdaten;

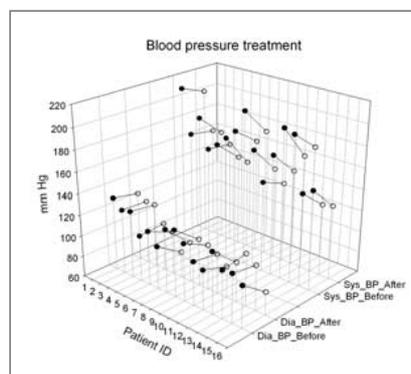
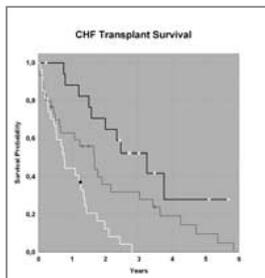
- für die nichtlineare Kurvenanpassung, z. B. Einsatz des Marquardt-Levenberg Algorithmus zur Identifizierung von Modell-Parametern bei der Untersuchung des zerebralen Blutflusses und des zerebrovaskulären Verhaltens bei modifizierter Rückatmung; Einsatz einer polynomialen nichtlinearen inversen Regressionsgleichung 2. Ordnung bei der Untersuchung von Herzmuskelschwäche oder Einsatz eines logistischen Modells mit 4 Parametern zur Anpassung der Kalibrierungskurven einer ELISA-Analyse;

- zur Erstellung von Graphiken, z. B. einer Survival Curve bei der Erforschung des Brustkrebs-Anfälligkeits-Gens, eines Bland-Altman-Plots, einer Dosis-Wirkungs-Kurve oder eines funnel plots;

Was zeichnet SigmaPlot aus?

SigmaPlot ist übersichtlich und leicht in der Handhabung. Das Programm ist genau auf wissenschaftliche Bedürfnisse zugeschnitten mit einem besonders großen Arbeitsblatt, umfangreichen Datenanalyse- und Statistik-Funktionen, einem breit gefächerten Angebot an flexibel gestaltbaren 2D- und 3D-Graphen, technischen Graph-Optionen, wie Standardabweichung, Fehlerbalken oder Konfidenzintervallen und Automatisierungsfunktionen.

Für Vergleiche und zur besseren visuellen Kontrolle lassen sich mehrere Graphen auf einer Seite anordnen und automatisch anpassen. Die Graphiken sind dann ohne weitere Bearbeitung publikationsfähig. Ein weiterer Pluspunkt ist SigmaPlots enge Zusammenarbeit mit Microsoft Excel. Erweiterungen des Programms durch Module (Enzymkinetik-, Elektrophysiologie-Modul) oder spezielle Makros (Standardkurvenanalyse, ROC-Kurvenanalyse, Ligand Binding) runden das Programm ab. Nähere Informationen unter www.systat.de.



KONTAKT

Systat Software GmbH
Schimmelbuschstraße 25
D-40699 Erkrath
Tel.: +49 (0)2104 9540
Fax: +49 (0)2104 95410
E-Mail: kontakt@systat.de
www.systat.de

erschienen in: Lebendige Wissenschaft: Spitzenforschung Herz-Kreislaufmedizin, April 2008

Artikel im PDF-Format downloaden unter: <http://www.systat.de/PDFs/Kardiologie.pdf>

Die Dekonvolution als Methode zur Quantifizierung überlagerter chromatographischer Peaks

Mike Hillebrand (1), Hans-Joachim Kuss (2), Stavros Kromidas (3)

In der chromatographischen Methodenentwicklung ist es bei komplexen Proben und/oder Matrices oft nicht möglich, Peaks basisliniengetrennt zu eluieren, sie können sich überlagern. Dies führt dazu, dass die Einzelkomponenten nicht mehr als Einzelpeaks quantifizierbar sind und daher erst separiert werden müssen. Nun steht der Analytiker vor der Entscheidung, welche Methode er zur Trennung verwenden soll. Nachfolgend wird eine Möglichkeit aufgezeigt, wie man auch in schwierigen Situationen dennoch zur „richtigen“ Integration kommen kann.

Bemerkung

Unter „Trennung“/„Abtrennung“ ist in vorliegender Arbeit nicht die chromatographische Abtrennung von Substanzen gemeint, vielmehr wird unter „Trennung“ das rechnerische Auseinanderdividieren von chromatographisch nicht-aufgelösten Peaks verstanden.

Zur Abtrennung von überlagerten Peaks in Integrationssystemen kommen nur wenige Methoden zur Anwendung. Die in der Praxis am häufigsten verwendeten sind die Lotfällung („Drop“) sowie die tangential Abtrennmethode (Tangential Skim“), die allerdings nur in Spezialfällen anwendbar ist. Manche Integrationssysteme erlauben zusätzlich die exponentielle („Exponential Skim“) und die Gaussabtrennmethode („Gaussian Skim“). Diese Abtrennmethoden liefern je nach Grad der Überlagerung und Anwendung enorm große Abweichungen zur „wahren“ Peakfläche. Um den gemachten Fehler einschätzen zu können, besteht die Möglichkeit mit MS-EXCEL eine Simulation des vorhandenen Chromatogramms anzufertigen, bei welchem die Sollflächen jeder Komponente bekannt sind [1]. Diese kann dann in ein Dateiformat umgewandelt werden, die eine Bearbeitung im Chromatographie-Daten-System erlaubt.

Eine wirkliche Möglichkeit zur Trennung von überlagerten Peaks bietet die Dekonvolution. Die Form basisliniengetrennt eluierender Peaks ist bekannt. Diese kann abhängig von der Peaksymmetrie durch verschiedene theoretische Modelle beschrieben werden. Am Gängigsten sind das Gausspeakmodell [2] für symmetrische sowie das Exponentially Modified Gaussmodell (EMG-Modell) [2,3] für asymmetrische Peaks. Es existiert noch eine Vielzahl weiterer, auf die jedoch hier nicht weiter eingegangen wird. Da das Chromatogramm bei überlagerten Peaks eine Addition von Einzelpeaks darstellt, ist die Anwendung der Dekonvolution nahe liegend. Unter Dekonvolution versteht man, bezogen auf überlagerte Peaks, eine Kurvenapproximation über ein mathematisches Modell. Dies bedeutet, dass die Summenkurve eines Chromatogramms unter Zuhilfenahme theoretischer Peakmodelle wieder in die einzelnen Summanden, d.h. Einzelpeaks der Komponenten, zerlegt wird.

Zur Veranschaulichung wird nachfolgend ein von A.W. Westerberg im Jahre 1969 veröffentlichter Report eines chromatographischen Laufs [4] in eine Simulation überführt und anschließend durch die Lotfällung sowie mittels Dekonvolution ausgewertet. Anschließend werden die Ergebnisse mit einander verglichen. In der verwendeten Arbeit beschreibt A.W. Westerberg schon vor nahezu 40 Jahren die Nachteile der Lotfällung bei überlagerten Peaks und empfiehlt eine Kurvenanpassung.

Zur Simulation werden die Retentionszeit, die Standardabweichung der Retentionszeit als Peakbreitenparameter und die Fläche benötigt. Die zur Simulation erforderliche Retentionszeit kann direkt aus dem Report entnommen werden. Über die Fläche A und Höhe H kann man unter Verwendung von Gleichung 1, die zur Simulation benötigte Standardabweichung s_p der Peaks berechnen.

$$s_p = \frac{A}{H \cdot \sqrt{2\pi}} \quad (\text{Gleichung 1})$$

Um den Peakflächenfaktor in $\mu\text{V min}$ zu erhalten, wird die Fläche, welche in V s vorliegt, erst in $\mu\text{V s}$ umgerechnet und dann durch 60 dividiert. Die erhaltenen Parameter werden in die Matrix der EXCEL-Simulationstabelle (detaillierte Anleitung zur Erstellung bzw. auf beiliegender CD siehe [5]), eingegeben und ein Rauschen von $10 \mu\text{V}$ zugefügt. Um die zu empfohlene Anzahl von 100 Datenpunkten für überlagerte Peaks [5] zu erhalten, sollte die Datensammelrate hier auf mindestens 5 Hz festgelegt werden. Man erhält eine Simulation, welche bei ähnlicher Skalierung, dem von A.W. Westerberg publizierten Chromatogramm praktisch identisch ist (siehe Abbildung 1).

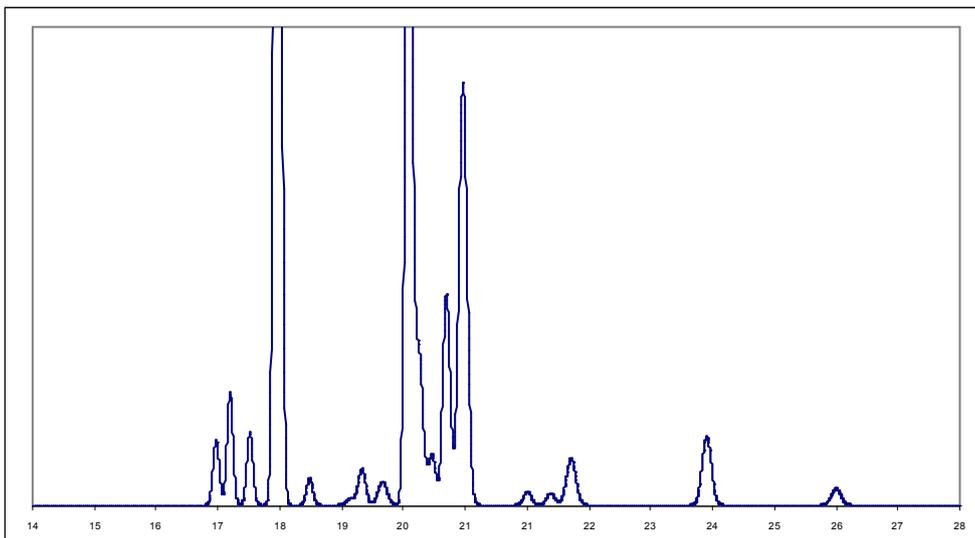


Abbildung 1: Simulation des Reports von A.W. Westerberg [4] mittels MS-Excel

Das erhaltene xy-Diagramm der Simulation wird nun in ein cdf-File (AIA-Format) umgewandelt (detaillierte Vorgehensweise [5]), um es in ein Chromatographie-Daten-System einlesen zu können. Die Bearbeitung der Simulation mit der Lotfällung wurde mit Empower2 (Fa. Waters) und dem ApexTrack-Integrationsmodus mit Detect Shoulders durchgeführt.

Die heutigen chromatographischen Auswertungsprogramme, welche auch die Namenhaftesten und Teuersten einschließt, besitzen die Anwendungsmöglichkeit der Dekonvolution nicht. Dies ist umso erstaunlicher, wenn man bedenkt, dass die Möglichkeiten der Dekonvolution seit Jahrzehnten bekannt sind. Ebenfalls scheint es so zu sein, dass die von den HPLC-Anbietern verwendeten Algorithmen seit Jahrzehnten kaum verändert worden sind. Das Programm PeakFit, das von der Firma Systat Software GmbH vertrieben wird, bietet die Möglichkeit der Detektion und Separation von Peaks, sowie eine Kurvenapproximation. Die Detektion der Peaks wurde - ähnlich dem Prinzip bei ApexTrack -, über die Verwendung der 2. Ableitung der Summenkurve durchgeführt. Die Dekonvolution beruht auf dem Gausspeakmodell.

Simulation Report nach A.W. Westerberg

Pk=Gauss Area 18 Peaks

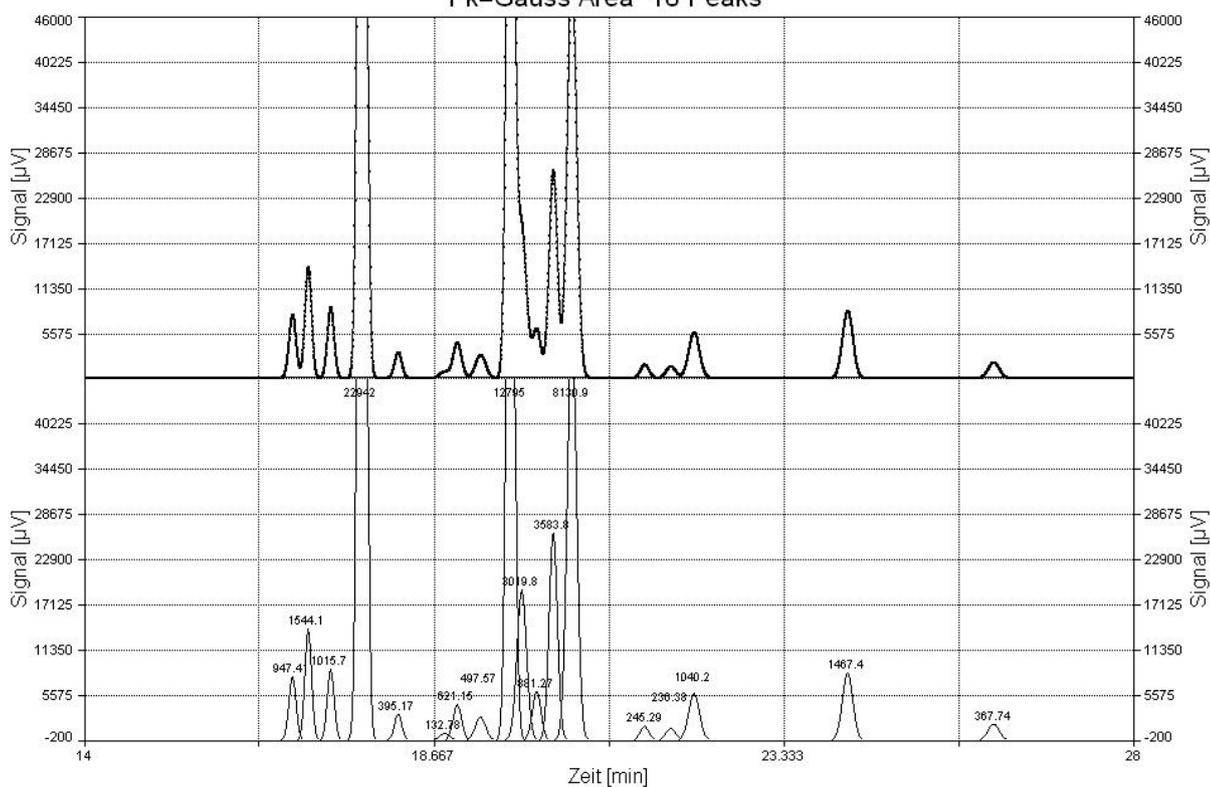


Abbildung 2: Resultat der Dekonvolution mittels PeakFit

Abbildung 2 zeigt graphisch das Resultat der Bearbeitung mittels PeakFit. In der oberen horizontalen Hälfte ist die Summenkurve der Simulation zu sehen. In der unteren Hälfte sind die aus der Approximation ermittelten Einzelpeaks mit angegebenen Peakflächen in $\mu\text{V min}$. aufgeführt.

Nun können die aus dem Report von A.W. Westerberg erhaltenen und als Soll der Simulation verwendeten Flächenwerte mit den Ergebnissen der Lotfällung sowie der Dekonvolution verglichen werden. Diesen Vergleich zeigt Tabelle 1.

Peak	Sollfläche	Lotfällung [Empower 2]	Abweichung zur Sollfläche	Dekonvolution [PeakFit]	Abweichung zur Sollfläche
1	947,35	935,92	-1,21%	947,41	0,01%
2	1544,05	1555,42	0,74%	1544,09	0,00%
3	1015,70	1015,32	-0,04%	1015,74	0,00%
4	22941,67	22941,50	0,00%	22941,59	0,00%
5	395,37	395,15	-0,05%	395,17	-0,05%
6	132,73	112,78	-15,03%	132,78	0,04%
7	621,22	642,32	3,40%	621,15	-0,01%
8	497,73	495,87	-0,38%	497,57	-0,03%
9	12795,50	13661,27	6,77%	12795,46	0,00%
10	3019,67	2223,55	-26,36%	3019,82	0,01%
11	881,40	781,50	-11,33%	881,27	-0,01%
12	3583,83	3555,65	-0,79%	3583,79	0,00%
13	8130,83	8188,82	0,71%	8130,9	0,00%
14	245,20	244,82	-0,16%	245,29	0,04%
15	236,33	237,45	0,47%	236,38	0,02%
16	1040,27	1038,87	-0,13%	1040,23	0,00%
17	1467,47	1467,15	-0,02%	1467,42	0,00%
18	367,75	367,42	-0,09%	367,74	0,00%

Tabelle 1: Vergleich der Flächenergebnisse der Lotfällung sowie der Dekonvolution in $\mu\text{V min}$

Die in Tabelle 1 rot markierten Peaks sind jene innerhalb der Simulation, die stark überlagert eluieren. So sind Peak Nr. 6 und 10 Schulterpeaks mit einer sehr geringen Auflösung. Dies sind die interessanten Stellen des Chromatogramms zur Anwendung und Beurteilung der Abtrennmethode bzw. der Dekonvolution. Die Abweichungen zur Sollfläche, die über 1% liegen, wurden hellgrau und über 5% dunkelgrau hinterlegt.

Die Abweichung der Peaks, die überwiegend basisliniengetrennt vorliegen, ist bei beiden Methoden nahezu 0%. Die geringen Abweichungen resultieren zum Teil aus dem Einfluss des Rauschens.

Die Lotfällung liefert deutliche Abweichungen, die bis zu 26% bei Peak 10 betragen. Gerade die Schulterpeaks besitzen deutliche Abweichungen. So belegt Peak Nr. 6 Platz 2 mit 15%. Von den neun überlagerten Peaks besitzen sechs höhere Abweichungen als 1%. Von diesen sechs Peaks besitzen wiederum vier Peaks eine Abweichung von über 5%. Diese enormen Fehler nimmt man bei der Quantifizierung über die Lotfällung in Kauf. Weisen überlagerte Peaks zusätzlich noch ein Tailing auf, führt die Integration durch Lotfällung zu Fehlern in der Peakfläche von nicht unter 20-30% [6].

Bei der Dekonvolution mittels Gausspeakmodell besitzen alle Peaks eine Abweichung kleiner 1%. Diese sind sogar nahezu 0%, unabhängig davon, ob die Peaks überlagern oder nicht.

In Bezug auf alle überlagerten Peaks liefert die Dekonvolution somit deutlich geringere Abweichungen als die Lottfällung.

Nun wurde hier die Simulation mittels Gausspeaks erstellt. Oft besitzen Peaks in einem chromatographischen Prozess nicht diese Form. Sie können zum Beispiel tailen. Auch wurden keine weiteren Parameter, welche ein Chromatogramm beeinflussen können, betrachtet. So kann eine Basisliniedrift oder auch ein Gradientenlauf vorliegen. Wie wird die Dekonvolution mit solchen Einflüssen fertig und wie mit realen Chromatogrammen? Auf diese Fragestellungen wird in einer in Vorbereitung sich befindenden Publikation [6] eingegangen und diese dort erläutert. Vorweg zu nehmen sind die überaus positiven Ergebnisse, welche sich unter Anwendung der Dekonvolution erreichen lassen. Gerade im Vergleich zu den vorhandenen Abtrennmethoden wird das hier erzeugte Bild bestätigt und verfestigt.

Interessierte Leser können gerne das verwendete cdf-File der Simulation des veröffentlichten Reports von A.W. Westerberg per Email anfordern, um sich einen eigenen Eindruck verschaffen zu können. Die Firma Systat bietet die Möglichkeit sich unter www.systat.com/downloads/ eine 30 Tage gültige Vollversion von PeakFit herunter zu laden oder als kostenlose Demo-CD bei kontakt@systat.de anzufordern.

Literatur:

[1] H.J. Kuss, S. Kromidas, "Chromatographie-Gespräch, Wie testet man kommerzielle Integrationssysteme für die HPLC und GC?", LABO, 09/2006

[2] N. Dyson, "Chromatographic Integration Methods", The Royal Society of Chemistry, Second Edition, 1998

[3] J.P. Foley, "Equations for Chromatographic Peak Modeling and Calculation of Peak Area", Analytical chemistry, 1987, 59, 1984.

[4] A.W. Westerberg, "Detection and resolution of overlapped peaks for an on-line computer system for gas chromatographs", Analytical chemistry, 1969, 41, 1770.

[5] S. Kromidas, H.-J. Kuss, "Chromatogramme richtig integrieren und bewerten", Wiley-VCH, 2008

[6] H.J. Kuss and S. Kromidas (Eds) „Quantification in LC and GC – A practical guide to Good Chromatographic Data“, Wiley-VCH, 2009, in Vorbereitung

(1) Sanofi-Aventis Deutschland GmbH, (Mike.Hillebrand@sanofi-aventis.com)

(2) LMU, 80336 München

(3) Saarbrücken

Systat Software Online-Seminare:

Lernen Sie in nur 30 Minuten direkt an Ihrem PC, wie Sie mit wenigen Klicks Ihre Forschungsdaten analysieren und publikationsfähige Graphen erstellen. Für unsere kostenlosen Online-Seminare benötigen Sie nur einen Internet- und Telefonanschluss. Die nächsten Termine für das Online-Seminar "SigmaPlot 11 - Mit wenigen Klicks von Daten zur Präsentation", sind:

Mittwoch, 22. Oktober 2008, 14 Uhr
Mittwoch, 12. November 2008, 14 Uhr

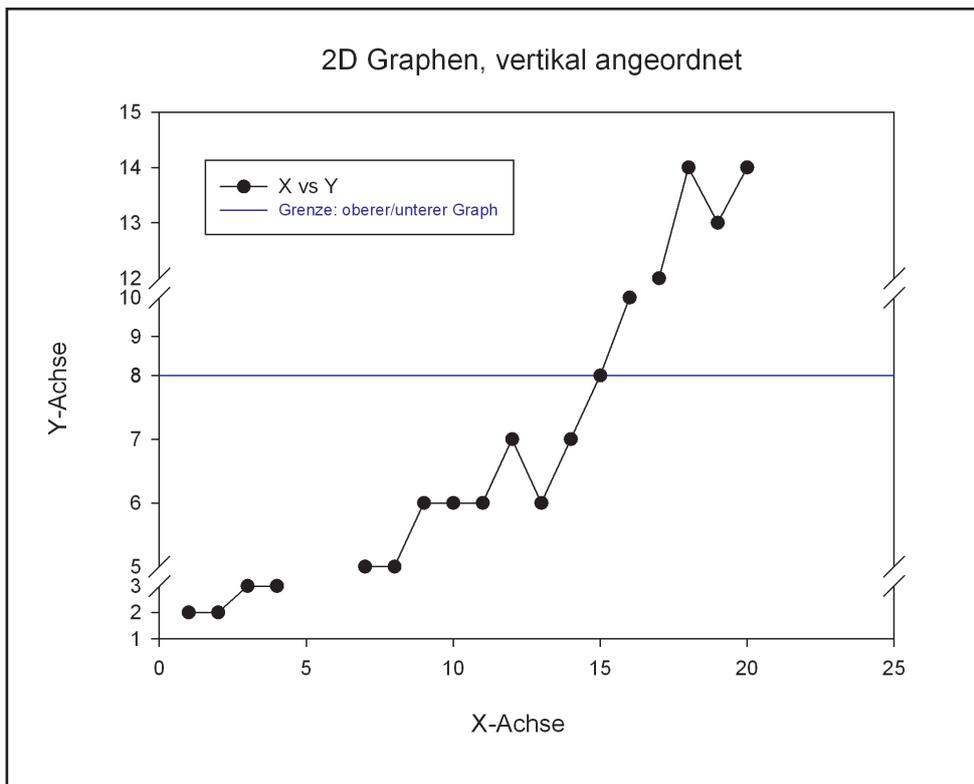
Melden Sie sich gleich online auf www.systat.de an. Hier finden Sie auch noch weitere Informationen. Oder rufen Sie uns unter 02104 9540 an, wenn Sie noch Fragen haben.

Tech Tipp

Graphen mit mehreren Achsenunterbrechungen

Um in SigmaPlot einen Graphen mit 2 Achsenunterbrechungen zu erhalten, greifen wir kurz in die Trickkiste. Wir erstellen 2 Graphen mit jeweils einer Achsenunterbrechung und ordnen die Graphen übereinander an.

1. Kopieren Sie den Graphen auf der Graphseite (Edit > Copy, Edit > Paste).
2. Ordnen Sie beide Graphen übereinander an (Rechtsklick > Object Properties > Size and Position > Position: Top, und Size: Height)
3. Passen Sie in beiden Graphen den Wertebereich der Y-Achse an (Graph Properties > Axes > Scaling). In unserem Beispiel: 0..8 und 8..15.
4. Legen Sie für beide Graphen die Position etc. der Achsenunterbrechungen fest.



3D-Balkendiagramm mit „Fehlerbalken“

3D-Balkendiagramme haben normalerweise keine Fehlerbalken, es gibt jedoch Situationen, in denen Anwender diese gerne darstellen möchten. Wir kombinieren dazu im gleichen Graphen einen 3D-Balkenplot mit einem 3D-Scatterplot

Beispieldaten: XY Many Z-Werte in Spalten 1-5, Fehlerwerte in Spalten 6-8

	1-x	2-y	3-z1	4-z2	5-z3	6-e1	7-e2	8-e3
1	1.0000	1.0000	5.0000	6.0000	7.0000	1.0000	1.7000	0.9000
2	2.0000	2.0000	7.0000	8.0000	10.0000	2.3000	0.9000	2.4000
3	3.0000	3.0000	9.0000	10.0000	12.0000	1.8000	1.5000	2.7000
4	4.0000							
5								

3D-Balkenplot

1. Erstellen Sie zunächst aus Ihren Daten ein 3D-Balkendiagramm im Datenformat ‚XY Many Z‘ mit den Daten aus den Spalten 1-5

3D-Scatterplot

2. Berechnen Sie nun die Endpunkte der (positiven) Fehlerbalken mit der Transformation:

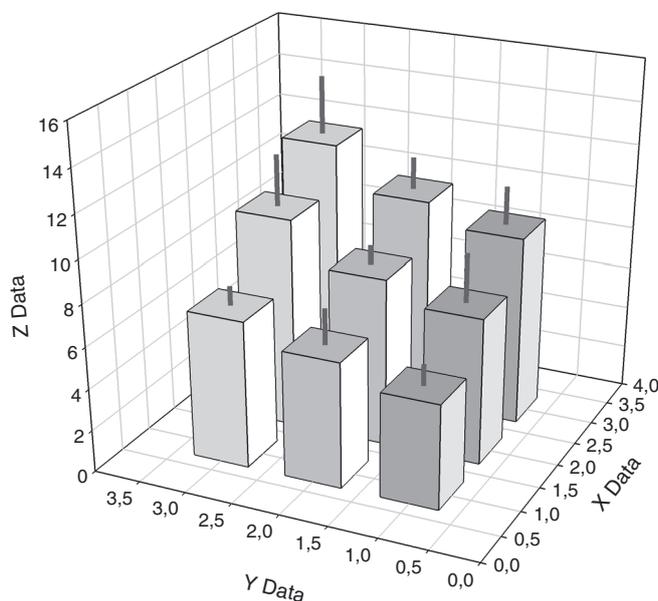
$$\begin{aligned} \text{col}(9) &= \text{col}(3) + \text{col}(6) \\ \text{col}(10) &= \text{col}(4) + \text{col}(7) \\ \text{col}(11) &= \text{col}(5) + \text{col}(8) \end{aligned}$$

Wenn Sie mit der Nutzung von Transformationen in SigmaPlot nicht so vertraut sind, hier eine kurze Beschreibung: Markieren und kopieren Sie die drei Transformationszeilen hier im Text, wählen Sie dann im SigmaPlot Datenarbeitsblatt den Menüpunkt ‚Transforms‘ und ‚User-Defined‘. Fügen Sie die kopierten Zeilen mit CTRL-V ein, und klicken Sie auf den ‚Run‘-Button.

3. Selektieren Sie den Graphen. Wählen Sie im Graph-Menü ‚Add Plot‘, und fügen Sie damit einen 3D-Scatterplot ‚XY Many Z‘ hinzu, mit den Daten aus den Spalten X: col(1), Y: col(2), First Z: col(9), Last Z: col(11).

4. Öffnen Sie die Graph Properties. Wählen Sie Plot 2 (den Scatterplot). Wählen Sie im Plots-Tab ‚Drop Lines‘ auf die XY-Ebene. Passen Sie Farbe und Linienstärke der Drop Lines an. Wählen Sie nun ‚Symbols‘, und schalten Sie die Symbole ab (durch Auswahl von ‚None‘).

3D-Balkendiagramm mit Fehlerbalken



Systat Software Service-Palette:

Spezielle Upgrade-Preise & Mehrfach-User-Lizenzen

Site-Lizenz

ab 5 Anwendern inkl. einjährigem Wartungsvertrag, in dem auch kostenlose Upgrades enthalten sind. Diese Lizenzform wurde für Multi-User ohne simultane Anwender entwickelt.

Netzwerk-Lizenz

schließt ebenfalls einjährigen Wartungsvertrag ein und basiert auf gleichzeitiger Nutzung. Die Lizenz beginnt bei einem Anwender und lässt eine beliebige Anzahl an Anwendern simultan zu. Beim Kauf einer 2-Anwender-Lizenz können zwei Anwender gleichzeitig mit dem Programm arbeiten usw.

Rabatt-System

ermöglicht den Erwerb mehrerer Einzelpakete zum ermäßigten Preis.

Wartungsverträge

Mit unserem Software-Wartungsvertrags-Service erhalten Einzel- und Gruppen-Nutzer besondere Vorteile wie kostenlose Upgrades, Updates und bevorzugten technischen Support.

Training

Das Systat Software Team verfügt über eine jahrelange Praxiserfahrung in der Durchführung von Seminaren für neue sowie erfahrene Anwender von SigmaPlot, SigmaStat und SYSTAT. Die ein- bis zweitägigen Seminare werden direkt in Ihrem Unternehmen abgehalten - nach Wunsch auch in Englisch.

Impressum:

Systat Software GmbH
Schimmelbuschstr. 25
40699 Erkrath

Tel. 02104 9540
Fax: 02104 95410

E-Mail: news@systat.de

<http://www.systat.de>