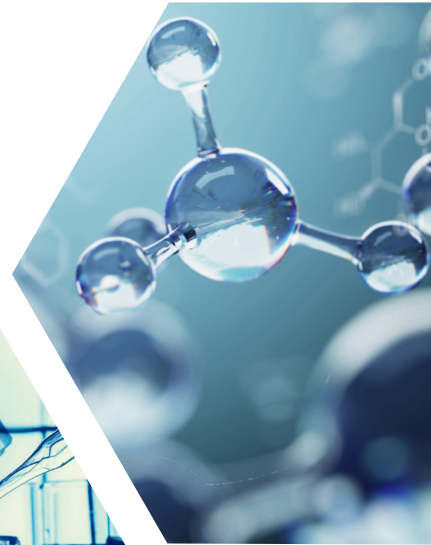


**WIE MIT CHROMELEON™
KORREKT ZU RUNDEN IST**



#1: DIE DEFINITION DER SIGNIFIKANTEN STELLEN

Die einzelnen Stellen einer Zahl werden als signifikante Stellen bezeichnet, wenn diese Zahl innerhalb der Grenzen der Abweichung der letzten Messung (o. ä.) liegt. Dazu zählen alle aussagekräftigen Ziffern ohne die führenden Nullen. Endende Nullen sind signifikant, sofern diese durch die Messung als eindeutiges Ergebnis erhalten werden. Durch geeignete Schreibweise und den korrekten Übertrag der Ergebnisse kann dies eindeutig festgelegt sein.

Beispiel: 01,3060 g

Die 0 vor der 1 ist als führende Null nicht signifikant, die anderen beiden vermutlich schon. Die 0 zwischen der 3 und der 6 ist als eindeutig dem Messergebnis zugehörig definitiv signifikant. Bei der folgenden 0 müsste geprüft werden, ob diese im Messergebnis (also der Einwaage) enthalten ist oder angehängt wurde. Setzen wir voraus, dass die letzte 0 Teil der Einwaage ist, gibt es bei diesem Beispiel fünf signifikante Stellen, wobei bei folgenden Berechnungen nur mit vier Stellen gerechnet werden darf, da die letzte Stelle für Folgeberechnungen stets mit einem Fehler (Messunsicherheit) behaftet ist.

#2: RECHNEN MIT SIGNIFIKANTEN STELLEN

Generell ist festzuhalten, dass die Zahl der zulässigen signifikanten Stellen der gesamten Berechnungen über den Wert mit der geringsten Anzahl definiert wird. So können zwar alle Messwerte unverändert in ihrer Anzahl an signifikanten Stellen angegeben werden, aber bei der Berechnung ist der Wert mit der geringsten Anzahl der bestimmende Faktor. Die oft gängige Arbeitsweise, bei Multiplikationen mehr Stellen anzugeben als die Messergebnisse rechtfertigen, ist daher als falsch zu bewerten und entspricht nicht der korrekten Rechnung mit signifikanten Stellen gemäß DIN EN ISO 80000-1.

Beispiel: 10,1436 g 1,4092 g 0,0366 g

Würden die drei in dem Beispiel genannten Einwaagen berücksichtigt werden, so gibt es sechs, fünf und drei signifikante Stellen. Da jedoch in diesem Falle drei der geringste Wert ist, kann mit maximal drei signifikanten Stellen gearbeitet werden. Die vierte Nachkommastelle ist mit einem Fehler behaftet und darf in weiteren Berechnungen nicht mehr verwendet werden. Für weitere Berechnungen ist darüber hinaus ebenfalls bedeutsam, welche Rechenart ausgeführt werden soll. Wird eine Strichrechnung durchgeführt, so gilt die Zahl der geringsten Nachkommastellen als entscheidend, bei allen anderen Rechnungen gilt die Zahl der kleinsten signifikanten Stellen.

Somit dürfte bei einer Multiplikation nur mit drei Stellen im Ergebnis weitergerechnet werden, wobei die vierte Nachkommastelle mit einer Unsicherheit behaftet ist. Würde eine Addition erfolgen, so wäre für alle drei Messwerte die Zahl der kleinsten Nachkommastellen vier und die Ergebnisse könnten alle mit vier Nachkommastellen angezeigt werden, wobei gemäß der Messunsicherheit geprüft werden müsste, ob die vierte im Ergebnis angezeigt werden darf oder nicht.

#3: DER RUNDUNGsalGORITHMUS IN CHROMELEON™

In Chromeleon™ kommt ein Rundungsalgorithmus zum Einsatz, der mittels kaufmännischer Rundung die Ergebnisse darstellt. Das heißt, dass wenn an der ersten Stelle, die gemäß der Rundung wegfällt, eine Ziffer von 0 bis 4 steht, so wird an der gewünschten Stelle die Zahl einfach abgeschnitten, die Ziffer vor dem Schnitt bleibt dabei unverändert. Befindet sich an der ersten Stelle, die wegfällt, jedoch eine 5 bis 9, so wird ebenfalls geschnitten, allerdings wird die letzte Ziffer vor dem Schnitt um 1 erhöht. Zudem ist der Algorithmus in Chromeleon so eingestellt, dass nachfolgende Nullen hinter dem Komma nicht dargestellt werden, aber für die weiteren Berechnungen und die Betrachtung der signifikanten Stellen selbstverständlich relevant sind.

Beispiel: 1,0340 g würde dargestellt als: 1,034 g

Rundungen stellen einen Schwachpunkt in der Darstellung von Ergebnissen dar, da durch Runden immer eine bestimmte Präzision des Wertes verloren geht. Daher sollte stets so spät und selten wie möglich gerundet werden. Wiederholte Rundungen führen zu einem signifikanten Messfehler. Chromeleon™ bietet stets die Möglichkeit die gewünschte Anzahl an Nachkommastellen zu wählen, rechnet aber immer mit 16 Nachkommastellen. Daher betrifft der von Qpliance vorgebrachte Vorschlag für das Runden in Chromeleon™ auch nur das tatsächliche Ergebnis, das ausgegeben wird. In allen Messwerten und Zwischenergebnissen wird mit den Rohdaten gearbeitet, die lediglich die messbedingten Fehler aufweisen.

#4: DIE MÖGLICHKEIT NACHKOMMASTELLEN ZU INDIVIDUALISIEREN

Es gibt in Chromeleon™ die Möglichkeit, für jede Spalte die Zahl der Nachkommastellen zu bestimmen. So kann beispielsweise für den Amount mehreres gewählt werden, wie in Abbildung 1 dargestellt. Neben der klassischen Möglichkeit die gewünschte Anzahl an Nachkommastellen zu wählen kann hier auch eine exponentielle Ausgabe der Ergebnisse eingestellt werden. Für Messwerte, bei denen ein Zeitformat gewählt werden muss, könnte auch dieses unter „Format“ nach den Bedürfnissen oder Anforderungen konfiguriert werden.

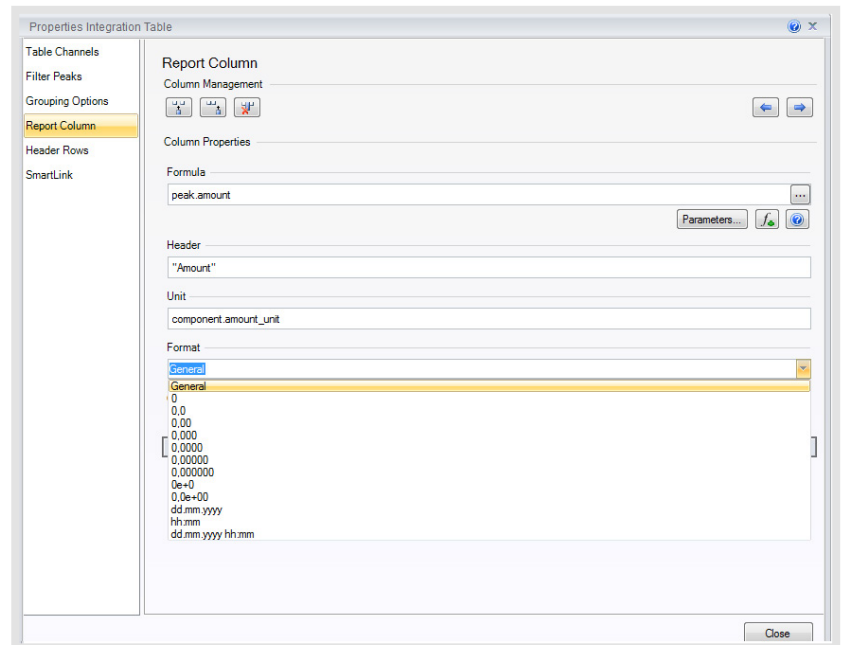


Abbildung 1: Die Zahl der Nachkommastellen kann in den Eigenschaften der Spalte unter Format eingestellt werden.

Darüber hinaus gibt es die Möglichkeit in einer Spalte, abhängig von der Injektion, die Zahl der Nachkommastellen zu definieren. In diesem Falle könnte dann zum Beispiel der „Amount“ für jeden Eintrag eine andere Anzahl an Nachkommastellen erhalten. So könnte in Abhängigkeit der zuvor korrekt bestimmten signifikanten Stellen das Ergebnis immer die richtige Menge an Nachkommastellen darstellen.

Um dieses Ziel zu erreichen muss zunächst eine Custom Variable erstellt werden. Diese muss eine numerische Injektionsvariable sein.

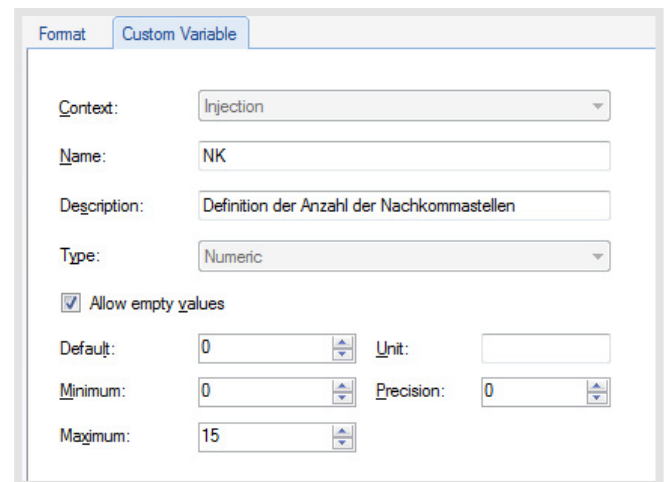


Abbildung 2: Beispiel für eine Custom Variable, die die Zahl der Nachkommastellen definieren kann.

Dabei ist es möglich den voreingestellten Wert zu definieren sowie den Mindest- und Maximalwert. In Abbildung 2 ist ein Beispiel dargestellt. Somit wird dann eine eigene Spalte in der Injektionsliste erstellt, in der ganze Zahlen eingegeben werden können. Diese stellen, bei Anwendung der entsprechenden Formel (siehe Abbildung 4), die gewünschte Anzahl der Nachkommastellen über die Tabellenspalten im Report oder Bildschirmreport dar. Somit ist dann über die Eingabe in der Injektionsliste die genaue Anzahl der Nachkommastellen direkt steuerbar. Ein mögliches Ergebnis ist in Abbildung 3 anhand der Spalte E „Amount“ zu sehen.

	A	B	C	D	E
1	Inj.	Injection Name	Type	Ret.Time	Amount
2	No.	Selected Peak:		min	
3				UV_VIS_1	UV_VIS_1
4				Component	Component 1
5	1	Cal Standard 1 (0.010 m	Calibration	0,628	0,08107
6	2	Cal Standard 1 (0.010 m	Calibration	0,632	0,08057
7	3	Cal Standard 1 (0.010 m	Calibration	0,630	0,07864
8	4	Cal Standard 2 (0.050 m	Calibration	0,632	0,497
9	5	Cal Standard 2 (0.050 m	Calibration	0,628	0,495
10	6	Cal Standard 2 (0.050 m	Calibration	0,632	0,493
11	7	Cal Standard 3 (0.100 m	Calibration	0,632	1,04
12	8	Cal Standard 3 (0.100 m	Calibration	0,633	1,04
13	9	Cal Standard 3 (0.100 m	Calibration	0,632	1,03
14	10	Cal Standard 4 (0.200 m	Calibration	0,632	2
15	11	Cal Standard 4 (0.200 m	Calibration	0,630	2
16	12	Cal Standard 4 (0.200 m	Calibration	0,630	2
17	13	Sample 1	Unknown	0,632	0,08057
18	14	Sample 2	Unknown	0,632	1,03
19	15	Blank	Blank	n.a.	n.a.
20	Maximum			0,633	2,0000
21	Average			0,631	0,8533
22	Minimum			0,628	0,0786
23	Standard Deviation			0,001	0,7260
24	Relative Standard Deviation			0,22%	85,09%

Abbildung 3: Abhängigkeit der Zahl der Nachkommastellen von dem in der Injektionsliste eingetragenen Wert.

Die Formel, die dafür notwendig ist, ist in Abbildung 4 unter „Formel“ dargestellt. Die Hauptformel Round Value (round) wird darin durch die zu rundende Chromeleon-Variable für den Amount (peak.amount) und die selbst erstellte Custom Variable (injection.customVar(„NK“)) bestimmt.

Abbildung 4: In dem Feld Formel ist die korrekte Anwendung zu sehen.

DR. JULIAN RAMCKE

Life Science Consultant, Qpliance GmbH

Julian Ramcke hat Chemie an der Universität Hamburg studiert und nach abgeschlossener Promotion zunächst im Bereich Korrosionsschutz und Schmierstoffe gearbeitet. Seit November 2017 ist er bei der Qpliance GmbH beschäftigt und befasst sich mit den Themen Consulting, GMP sowie Validierungsdokumentation und ist von Thermo Fisher zertifizierter Chromeleon Trainer.

E-Mail: julian.ramcke@qpliance.com

www.qpliance.com





Qpliance GmbH

Klosterstr. 5 | 13581 Berlin

Tel.: +49 (0) 30 55 63 45 16

Mobil: +49 (0) 163 2 04 49 22

info@qpliance.com

[**www.qpliance.com**](http://www.qpliance.com)