

Agilent ChemStation



新しい **ChemStation** ワーク
フロー入門



Agilent Technologies

注意

© Agilent Technologies, Inc. 2006, 2007-2009

本マニュアルは米国著作権法および国際著作権法によって保護されており、Agilent Technologies, Inc.の書面による事前の許可なく、本書の一部または全部を複製することはいかなる形式や方法（電子媒体による保存や読み出し、外国語への翻訳なども含む）においても、禁止されています。

マニュアル番号

G2170-96043

エディション

2/2009

Printed in Germany

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

研究目的のみ。

本文書掲載の製品は診断用ではありません。

ソフトウェアリビジョン

このガイドは、Agilent ChemStationソフトウェアのB0.04.xx リビジョンに対して有効です。xx は、ソフトウェアの修正がこのガイドの技術的な精度に影響を与えるものではなく、比較的重要でないことを表します。

保証

このマニュアルに含まれる内容は「現状のまま」提供されるもので、将来のエディションにおいて予告なく変更されることがあります。また、Agilent は、適用される法律によって最大限に許可される範囲において、このマニュアルおよびそれに含まれる情報に関して、商品性および特定の目的に対する適合性の暗黙の保証を含みそれに限定されないすべての保証を明示的か暗黙的かを問わず一切いたしません。Agilent は、このマニュアルまたはそれに含まれる情報の所有、使用、または実行に付随する過誤、または偶然的または間接的な損害に対する責任を一切負わないものとし、Agilent とお客様の間で書面による別の契約があり、このマニュアルの内容に対する保証条項がこの文書の条項と矛盾する場合は、別の契約の保証条項が適用されます。

技術ライセンス

このマニュアルで説明されているハードウェアおよびソフトウェアはライセンスに基づいて提供され、そのライセンスの条項に従って使用またはコピーできます。

安全に関する注意

注意

注意は、危険を表します。これは、正しく実行しなかったり、指示を順守しないと、製品の損害または重要なデータの損失にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起します。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、注意を無視して先に進んではなりません。

警告

警告は、危険を表します。これは、正しく実行しなかったり、指示を順守しないと、人身への傷害または死亡にいたるおそれがある操作手順や行為に対する注意を喚起します。指示された条件を十分に理解し、条件が満たされるまで、警告を無視して先に進んではなりません。

このガイドでは…

分析ラボでは、短時間で効率的にクロマトグラフデータを取り込む必要があります。不明瞭な結果を具体的に把握するには時間がかかる可能性があり、管理費が高くなることがあります。ChemStation のリビジョン B.02.01 以降、結果データを素早く確認し再解析できるように、データ保存およびデータ参照の機能が改善されてきました。

このマニュアルでは、ラボの生産性を高めるための ChemStation リビジョン B.04.01 の新しいデータ保存および検索機能の効率的な使用法を説明します。

1 ChemStation データ構造

この章では、ChemStation リビジョン B.02.01 より前に使用されていたデータ構造とリビジョン B.02.01 以降の新しいデータ構造の違いの概要を説明します。

2 データ取り込み

この章では、新しいデータ構造がシーケンスやシングルランのデータを取り込むワークフローにどのように影響を及ぼすかを説明します。

3 データ解析

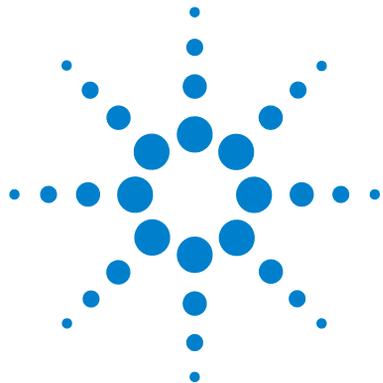
この章では、データ解析と使用可能なレビューオプションの概要を説明し、データ構造がオプションの選択にどのような影響を及ぼすかを説明します。

4 ユニークなフォルダ作成をオフにしたワークフロー

この章では、ChemStation リビジョン B.01.03 以前の形式でデータを保存することができるようにする、[ユニークなフォルダ作成] をオフにした作業について説明します。このモードでは、ChemStation での最新のデータレビューや再解析機能は十分に活用されません。

目次

1 ChemStation データ構造	5
B.02.01 より前の ChemStation	6
ChemStation B.02.01 以降	7
2 データ取り込み	11
データ取り込み	12
3 データ解析	19
データ解析	20
データ解析：データレビュー	23
データレビュー時の ChemStation ユーザーインターフェース	30
データ解析：データの再解析	33
4 ユニークなフォルダ作成をオフにしたワークフロー	37
ユニークフォルダ作成をオンまたはオフにして作業しますか？	38
「ユニークなフォルダ作成」をオフにしたワークフロー	39
シーケンスデータコンテナのマイグレーション	43



1

ChemStation データ構造

B.02.01 より前の ChemStation 6

ChemStation B.02.01 以降 7

この章では、ChemStation リビジョン B.02.01 より前に使用されていたデータ構造とリビジョン B.02.01 以降の新しいデータ構造の違いの概要を説明します。



B.02.01 より前の ChemStation

ChemStation リビジョン B.02.01 より前は、シーケンス、メソッド、作成したデータファイルと結果は、指定による固定された別々の場所に保存されていました。たとえば、メソッドはシーケンス内で名前参照され、メソッド、シーケンス、データファイルの一貫性を維持するのはユーザーの責任でした。このため、データの長期アーカイブと結果の複製は面倒な仕事でした。規制対象ラボだけでなく、非規制対象ラボ（環境分析ラボなど）の一部においても、ユーザーがクロマトグラム、結果、関連メソッドを文書に記録する必要がありました。ChemStation リビジョン B.02.01 より前は、この目的を達成するには、すべてをレポートに印刷するしかありませんでした。

ChemStation B.02.01 以降

データファイルとメソッドの関連性を強めるため、ChemStation B.02.01 以降では以下の新しいデータ編成の仕組みが実装されました。ChemStation とともに使用される *Agilent OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM)* でも新しいデータ概念を取り入れています。これは、完全なデータセット (シーケンス / メソッド / データファイル) を一塊にして、ECM へ転送 (アーカイブ) できるようになったためです。

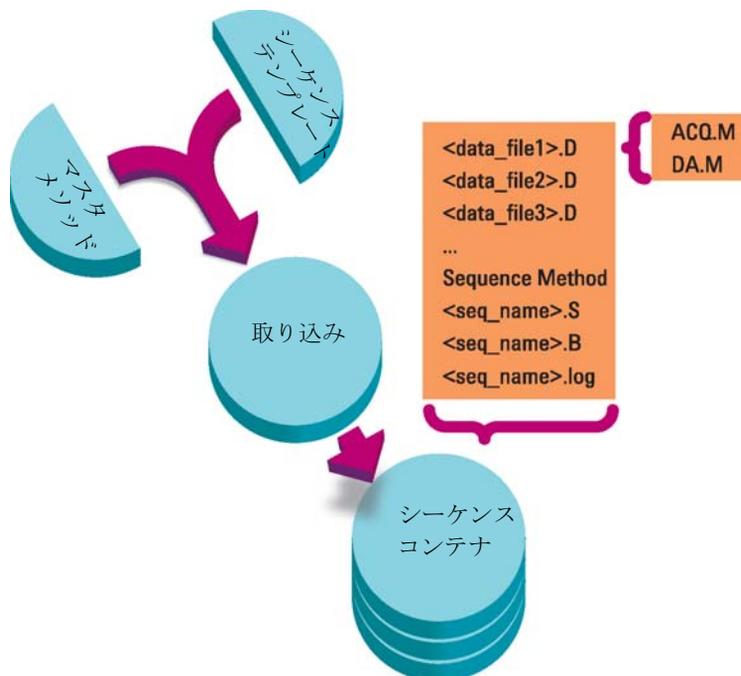


図 1 シーケンス取り込み B.02.01 以降

フォルダ Chem32\1\methods にあるメソッドはマスターメソッドの役割を果たします。つまり、これらのメソッドは取り込みとデータ解析中に変更されません。

同様に、フォルダ Chem32\1\sequence にあるシーケンスは、複数回シーケンスを再実行 (再解析ではない) するのに使用できるシーケンステンプレートの役割を果たします。

データ保存パターンは、シングルランデータが取り込まれるか、シーケンスデータが取り込まれるかによって変化します。

- 1 シーケンスが実行される際、一意の名前を持つ新しいフォルダ (シーケンスコンテナ) が指定されたサブディレクトリに自動的に作成されます。単一のサンプルが分析される場合、データファイル (*.d) は指定されたサブディレクトリに書き込まれます。
- 2 シーケンスデータでは、実行したシーケンステンプレート (*.s) と関連するすべてのメソッド (*.m) がシーケンスコンテナにコピーされます。メソッドのコピーは、元のマスターメソッドと区別するためにシーケンスメソッドと呼ばれます。

すべてのシーケンス関連タスク (取り込みとデータ解析) は、シーケンスとメソッドのコピーに対して実行されます。そのため、シーケンステンプレートとマスターメソッドは次のシーケンスを実行しても変更されません。

シーケンステーブルへの行の追加など、取り込み中のシーケンスへのすべての変更は、シーケンスコンテナ内のシーケンスファイルのコピーに対して行われます。シーケンステンプレートは変更されません。

同様に、メソッドに変更がある場合 (つまり、キャリブレーション分析でキャリブレーションテーブルが更新される場合) は、シーケンスメソッドには反映されますが、マスターメソッドには反映されません。

シーケンス実行中、作成されるデータファイル (*.d) は、それに対応するバッチファイル (*.b) とシーケンスログファイル (*.log) とともに、すべてシーケンスデータフォルダに保存されます。

- 3 各データファイルには、分析を作成するために使用されるメソッドのコピーが 2 つ含まれます。
 - 1 番目のコピーは ACQ.M と呼ばれ、メソッドの取り込み部分が完了した後直接保存されます。
 - DA.M と呼ばれる 2 番目のコピーは、データ解析部分の完了後に保存されます。

これら両方のメソッドには、取り込みパラメータとデータ解析パラメータなどのすべてのメソッドパラメータが含まれます。

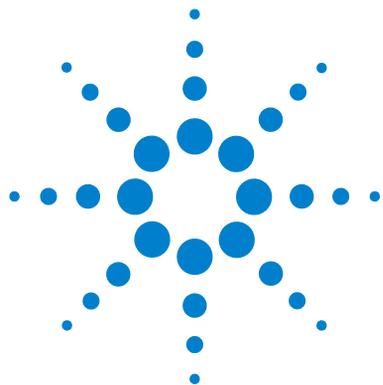
ACQ.M は、特定のデータファイルごとのオリジナルのメソッドパラメータの保護を行うためのものです。取り込みパラメータは、[データ解析] ビューで表示および印刷できます。

シーケンスのすべての分析には適用されませんが、タイム積分イベントなどの特定のデータファイルに対して固有のデータ解析パラメータを保存するために、DA.M をデータの解析中に変更できます。

以下の章では、この構造が一般的なワークフローに及ぼす影響を詳細に説明します。ChemStation のダイアログにおいて、これに対応する設定値も示します。

1 ChemStation データ構造

ChemStation B.02.01 以降



2 データ取り込み

データ取り込み 12

シーケンスでのデータ取り込み 13

部分シーケンスによる取り込み 15

シングルランのデータ取り込み 17

この章では、新しいデータ構造がシーケンスやシングルランのデータを取り込むワークフローにどのように影響を及ぼすかを説明します。



データ取り込み

ChemStation B.02.01 から、シングルランやシーケンスに対する柔軟性の高いデータ保存により、再コンフィグレーションせずにさまざまな保存場所を指定できるようになりました。[表示]メニューの[プレファレンス]ダイアログボックスにある[パス]タブにより、デフォルトパスの C:\chem32\x\DATA (ここで x は機器番号)に加えて複数のパスを追加することができます。[追加]や[消去]ボタンを使用して、既存のパスを簡単に消去したり、選択した位置に移動し、新しい位置のパスを[プレファレンス]に追加したりできます。デフォルトパスはリストから削除できませんが、コンフィグレーションエディタで変更できます。

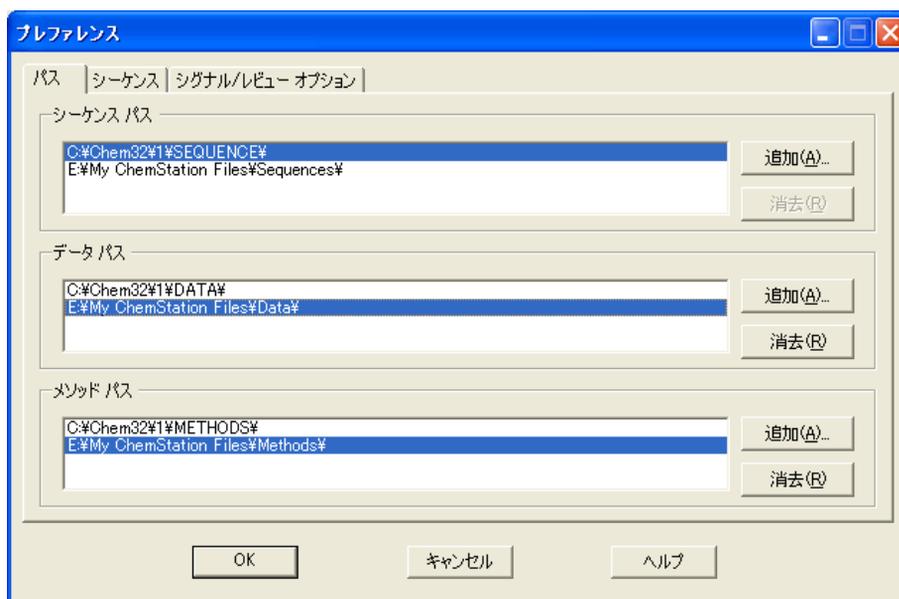


図 2 プレファレンスダイアログ / パスタブ

その結果、新たに指定したすべてのデータパスは、分析を実行する際に[サンプル情報]/[シーケンスパラメータ]ダイアログボックスで選択可能になります。

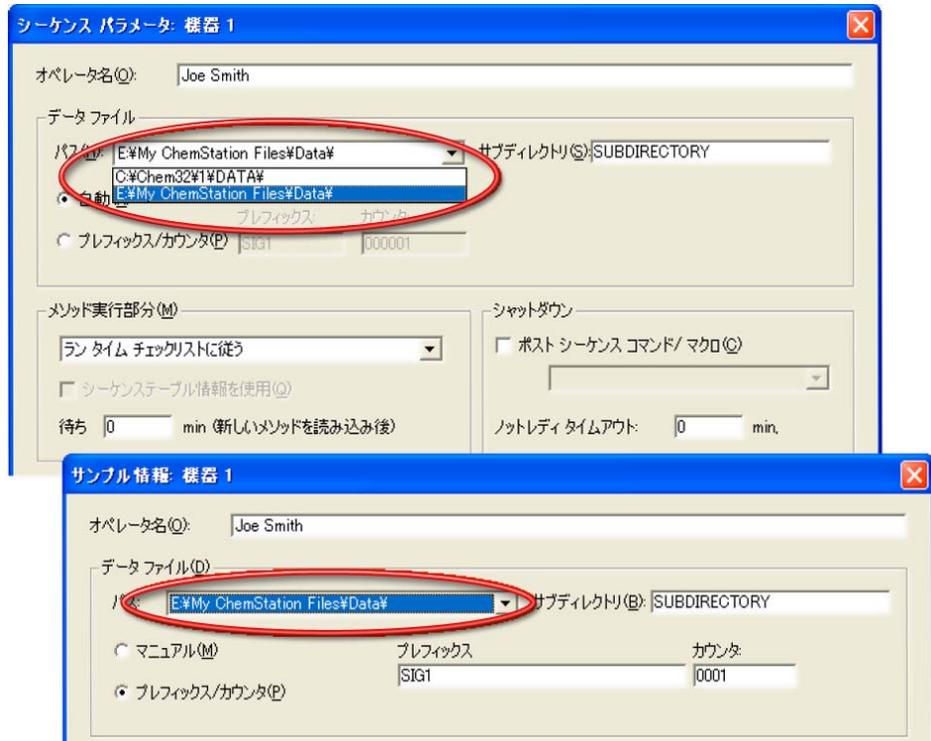


図 3 データパス選択

シーケンスでのデータ取り込み

シーケンスを実行するために、適切な定義済みメソッドを利用できるようにする必要があります。上記のようなマスターメソッドをそれらの目的で使用できます。通常、マスターメソッドとシーケンステンプレートは、ChemStationの[メソッド & ランコントロール]ビューで作業します。そのため、ChemStation エクスプローラでは、[メソッド & ランコントロール]ビューからマスターメソッドとシーケンステンプレートにアクセスできます。

シーケンステンプレートは、シーケンステーブルにあるこれらのメソッドを参照します。

2 データ取り込み データ取り込み

すでに説明したように、シーケンスがシーケンステンプレート
<sequence_name>.S を使用して実行され、マスターメソッド
<method_name>.M が使用された場合、シーケンスランから生じるすべての
ファイルを格納する新しいフォルダ(「シーケンスコンテナ」)が作成されま
す。

このフォルダの場所は、[シーケンスパラメータ] ダイアログボックスの中の
設定により決定され、このフォルダの名前は [プレファレンス] ダイアログ
ボックスの [シーケンス] タブにより決定されます。デフォルトでは、
<sequence_name> <acquisition_date> <acquisition_time> という名前になりま
すが、[オペレータ]、[機器]、[カウンター]、[PC 名] などを使用して設定
するか、任意の名前を手動で入力することができます。[名前のパターン] が
シーケンスコンテナに対して一意の名前にならない場合、ChemStation はカウ
ンタを付加して一意になるようにします。

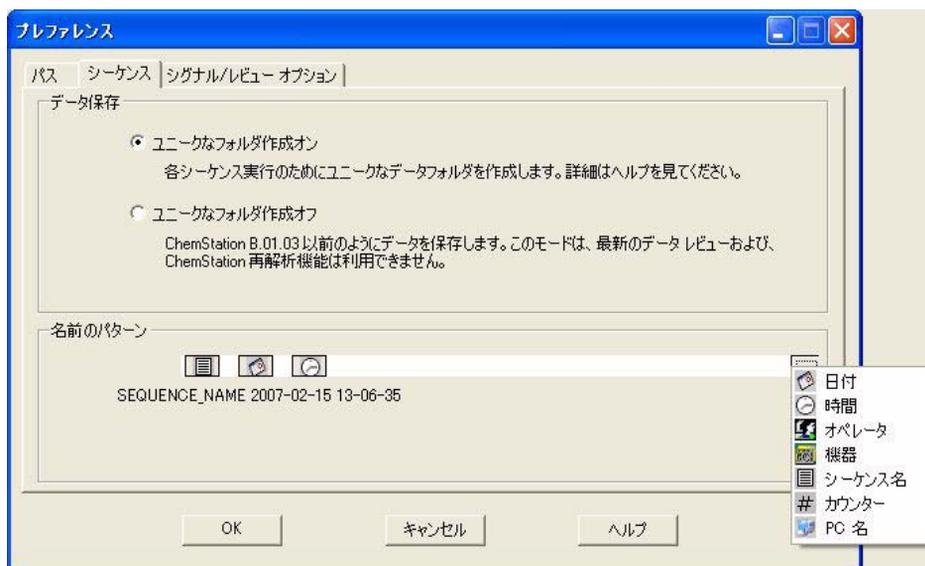


図 4 プレファレンスダイアログ / シーケンスタブ

取り込みシーケンスの開始時に、シーケンステーブルで指定されたメソッドが
マスターメソッドフォルダからシーケンスコンテナにコピーされます。さら
に、シーケンスのコピーが、シーケンスログとバッチ (*b) ファイルとともに
シーケンスコンテナに、作成され保管されます。メソッドのすべての更新 (
キャリブレーションテーブルの更新など) はコンテナ内のこのシーケンスメ

ソッドに書き込まれます。こうして、マスターメソッドまたは他のシーケンスラン用のシーケンステンプレートに適用された変更の影響を受けることなく、必要なファイルのすべてが後のデータレビューや再解析のために使用できます。

取り込み中、データファイルはシーケンスコンテナに保存されます。各データファイル (*.D) 内には、この特定の分析のために **ACQ.M** と **DA.M** という 2 つの追加メソッドが保存されます。これらの 2 つのメソッドは、シーケンスメソッドのコピーで、特定のデータファイルの取り込み時の状態にメソッドを維持します。キャリブレーションテーブルの更新などの場合、**DA.M** メソッドは、実行ごとに異なります。

個別の取り込みメソッド **ACQ.M** は取り込みパラメータを保存するためのものなので、将来データをレビューする際にもこのメソッドは変更しないことを推奨します。[**データ解析**] ビューで、このメソッドの取り込みパラメータを表示および印刷できます。

マスターメソッドまたはシーケンステンプレートを変更せずに、シーケンスフォルダに保存されたこれらのファイルを使用してすべてのデータレビューおよび再解析作業を実行できます。必要に応じて、メソッドの変更はマスターメソッドに再び保存することもできます。

部分シーケンスによる取り込み

部分シーケンスによる取り込みの場合、ユーザーは以下の 2 つの選択肢から決定できます。

- 新しいシーケンスコンテナに部分シーケンスを取り込む

または

- 既存のシーケンスコンテナに部分シーケンスを取り込む

データファイルを、部分シーケンスの実行から既存のシーケンスコンテナに取り込むと、以下のシナリオで役立つ可能性があります。

- たとえば、間違ったバイアルを使用していたので、単一のデータファイル（または複数のデータファイル）を上書きする必要がある場合。
- シーケンスの最初の部分のみが実行されているので、部分シーケンスを実行して不明なサンプルを追加する必要がある場合。以上のようなことは、シーケンス取り込み中に発生した障害などによって引き起こされる可能性があります。

2 データ取り込み

データ取り込み

- 既存の行を取り込んだ後に、シーケンステンプレートに行が追加された場合。追加の分析は、既存のデータに追加されるようになっています。

そのため、ユーザーが [シーケンス] メニューから [部分シーケンス] を選択すると、リストから既存のシーケンスコンテナを選択するか、新しいシーケンスコンテナを作成するかのオプションを提供するダイアログが表示されます。

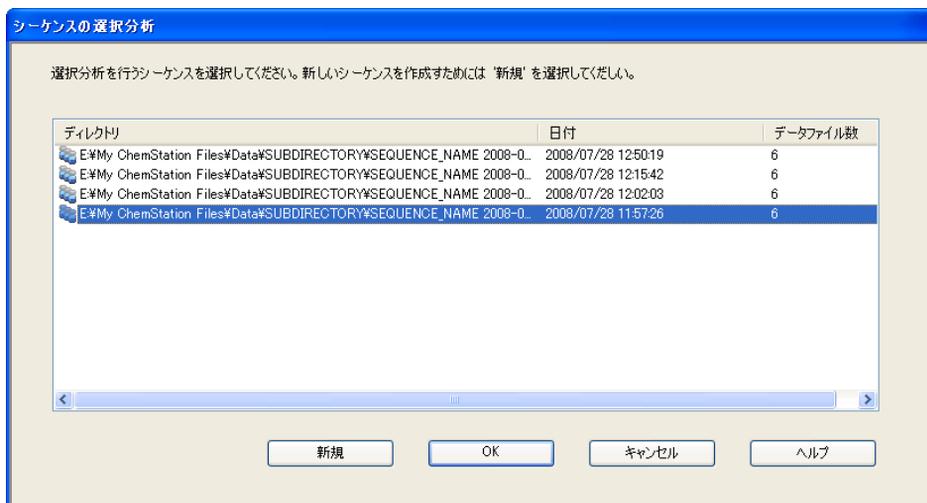


図 5 部分シーケンスダイアログ

ただし、(データ解析で完全に再解析できるように) シーケンスコンテナの一貫性を保つために、以下の特定の条件を満たすシーケンスコンテナのみが部分取り込み用に提供されています。

- シーケンステンプレート (ソースシーケンス) の名前と、シーケンスコンテナ内のシーケンス .S ファイル (ターゲットシーケンス) の名前が同一である。
- シーケンスファイルに関して、データパスとサブディレクトリの両方が同一である。
- ソースシーケンスのシーケンス行数は、ターゲットシーケンスのシーケンス行数以上である。
- ターゲットシーケンスの各行で、サンプルタイプと注入回数が、ソースシーケンスのそれに対応する行の値と同一である。
- 2つのシーケンスファイルのデータファイルの命名規則が同一である。

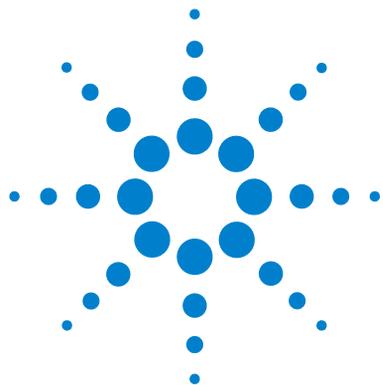
ユーザーは、[OK] (既存のシーケンスデータコンテナの1つを選択する場合) または [新規] (新規シーケンスコンテナを作成する場合) をクリックしてこのダイアログを閉じた後に、部分シーケンス中に実行するシーケンス行を選択できます。

シングルランのデータ取り込み

新しいデータの概念は、シングルランにも導入されます。この場合、データファイルはそれぞれのサブディレクトリに直接保存されます。シングルランでは、メソッドが1つだけ使用されるので、このメソッドをサブディレクトリにコピーする必要はなく、すべてのアクションはマスターメソッドを使用して直接行われます。メソッドの取り込み部分が完了すると、マスターメソッドのコピーがデータファイルディレクトリ (ACQ.M) に保存されます。メソッドのデータ解析部分が実行されると、もう1つのコピー (DA.M) が保存されます。

2 データ取り込み

データ取り込み



3 データ解析

データ解析 20

データ解析:データレビュー 23

データレビュー時の ChemStation ユーザーインターフェース 30

データ解析:データの再解析 33

この章では、データ解析と使用可能なレビューオプションの概要を説明し、データ構造がオプションの選択にどのような影響を及ぼすかを説明します。



データ解析

一度データが取得されると、[ChemStation データ解析]ビューでそれらを解析できます。ChemStation エクスプローラの [データ] タブを選択した場合、該当する記号をダブルクリックすることで、特定フォルダ内のすべてのシーケンスの実行またはすべてのシングルランを読み込めます。その後、該当するデータセットをナビゲーションテーブルから利用できます。



図 6 ChemStation エクスプローラからナビゲーションテーブルへのシーケンスの読み込み

ナビゲーションテーブルの主要部分は、セットに含まれるすべての分析のリストで構成されます。分析を [ファイル] / [シグナル読み込み] メニューから読み込む代わりに、ナビゲーションテーブルの該当する行をダブルクリックすることで ChemStation メモリに分析を読み込めるようになりました。さらに、分析を右クリックすると、ファイルからの特定シグナルの読み込みまたは重ね書き、データのエクスポート、あるいは取り込みメソッドパラメータの表示などさまざまなオプションが提供されます。

一旦分析が読み込まれると、そのレビュー (つまり、データ解析パラメータの調整)、シグナルの積分、最終的なレポートの印刷などができます。この場合、シーケンスコンテキストを考慮しないか、シーケンステーブルの機能を使用せずに、シングルランとして分析を解析します。

このようなデータ解析方法は、**データレビュー**と呼ばれます。**ナビゲーションテーブル**には [21 ページ 図 7](#) のようなツールセットが提供され、データレビューをより便利に行うことができます。



図 7 ナビゲーションテーブルのデータレビューツールセット

このツールセットを使用して、**ナビゲーションテーブル**の先頭または末尾にジャンプしたり、次または前の分析に進んだり、分析全体を自動的に進んだり、自動進行を停止したりすることができます。

データを解析する別の方法に、シーケンス全体の**再解析**があります。この処理では、すべての分析がシーケンスコンテキストで再解析されます。つまり、シーケンスメソッドのキャリブレーションテーブルがキャリブレーション分析の場合は更新され、倍率、アマウントなどをシーケンステーブルで変更でき、新しいメソッドをシーケンスコンテナに追加することができます。**ナビゲーションテーブル**では、再解析用に以下のツールセットを提供しています。



図 8 ナビゲーションテーブルのシーケンス再解析ツールセット

ナビゲーションテーブルの再解析アイコンは、ChemStation B.02.01 以降で作成されたシーケンスデータに対してのみ使用できることに注意してください。**シングルランデータ**、B.02.01 以前で作成されたデータ、[**ユニークなフォルダを作成**] がオフ (「ユニークなフォルダ作成」 をオフにしたワークフロー) [39 ページ 図](#) を参照) で取り込まれたデータについては、**データ解析**で再解析できません。そのようなシーケンスは、シーケンスパラメータ「**実行するメソッドの一部**」を「**再解析のみ**」と定義し、[**メソッド & ランコントロール**] で再解析する必要があります。ChemStation B.02.01 以降で作成されたシーケンスでは、[**メソッド & ランコントロール**] の再解析オプションは削除され ([22 ページ 図 9](#) を参照)、再解析は**ナビゲーションテーブル**の**データ解析**タスクとして提供されます。

3 データ解析 データ解析



図 9 ChemStation B.02.01 以降のメソッド & ランコントロールビューのシーケンスパラメータ

データ解析: データレビュー

データレビューとは、分析ごとに解析を行うことです。ChemStation では、データファイルが読み込まれる際に自動的に実行されるデフォルトのアクションを、ナビゲーションテーブルで指定することができます。これには、読み込み後にクロマトグラムを直接積分するようなデータ解析タスクや、読み込まれるメソッドの指定も含まれます。

レビュー用の該当するオプション (再解析には使用されない) は、[プレファレンス] ダイアログボックスの [シグナル / レビューオプション] タブで設定できます。

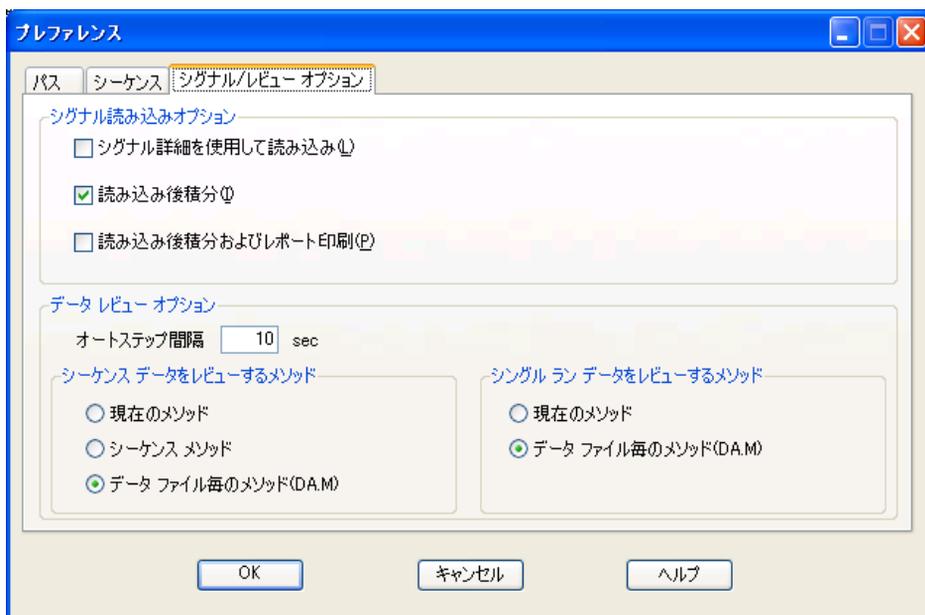


図 10 プレファレンスダイアログ / シグナル / レビューオプションタブ

最初のセクション [シグナルオプションの読み込み] では、分析のどのシグナルを読み込むか、クロマトグラムを積分するか、読み込み後すぐに結果をレポートするかを指定できます。

3 データ解析

データ解析: データレビュー

2 番目のセクション [データレビューオプション] では、ナビゲーションテーブル内の分析を自動的に進める間隔を設定できます。

このセクションの残りの部分では、分析がナビゲーションテーブルから読み込まれる際に、データレビュー中にどのメソッドが読み込まれるかを指定します。これらはデータレビューにのみ適用され、再解析には適用されません。以下の個々のオプションセットはシーケンスランとシングルランに使用できません。

表 1 シーケンスおよびシングルランデータのデータレビューオプション

シーケンスデータをレビューするメソッド	シングルランデータをレビューするメソッド
現在のメソッド	現在のメソッド
シーケンスメソッド	データファイル毎のメソッド (DA.M)
データファイル毎のメソッド (DA.M)	

注記

[プレファレンス] ダイアログの [シグナル / レビューオプション] タブのオプションは、ナビゲーションテーブル からデータファイルを読み込んだ場合のみ適用されます。[ファイル] から [シグナル読み込み] メニューまたはメインツールバーの該当するアイコンを使用すると、設定が適用されず、メソッドが読み込まれないなどの結果につながります。

「現在のメソッド」を保持

現在読み込まれているメソッドを使用する場合、レビュー設定の**現在のメソッド**を必ず使用する必要があります。この点において、どのシングルランまたはシーケンスファイルが読み込まれているかに関係なく、現在のメソッドがデータレビュー用にロードされます。[プレファレンス] ダイアログで [現在のメソッド] を選択することで、このオプションを有効にできます (25 ページ 図 11 を参照)。これにより、分析が読み込まれるごとに、同じメソッドがメモリ内に常駐するようになります。

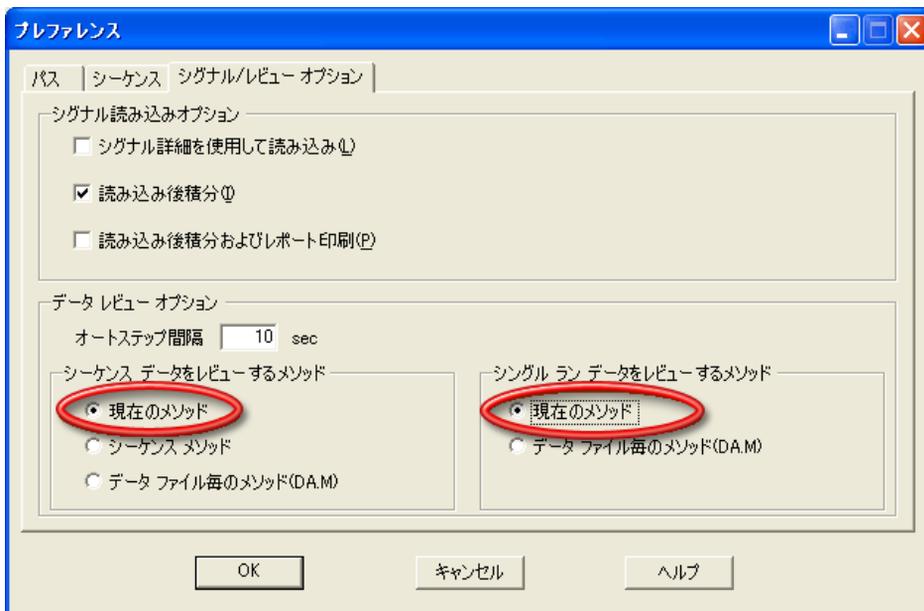


図 11 データレビューのために現在のメソッドを保持

このオプションは、たとえば以下のワークフローなどで使用できます。

- ワークフローで個別の取り込みメソッドとデータ解析メソッドを採用しているために、取り込みに使用されていないマスターメソッドなどのコンテナ内に存在しない、異なるメソッドを用いてシーケンスコンテナのデータファイルをレビューする場合。レビュー開始時に異なるマスターメソッドを読み込むには、ChemStation エクスプローラの [メソッド] タブから読み込むのが最も簡単な方法です。
- オンラインセッションで、データコンテナを取り込むために必要なマスターメソッドを編集する場合。機器パラメータとデータ解析パラメータの両方を、次の取り込みシーケンスの実行の即時開始ポイントとして編集する場合。
- シーケンスコンテナ内の分析の 1 つに対して、個々のメソッドである DA.M のデータ解析パラメータを編集した場合。[現在のメソッド] オプションを使用すると、これらのパラメータが他の分析に対してもうまく適用されるかどうかを確認するために、このメソッドを用いてすべての分析をレビューできます。

3 データ解析

データ解析: データレビュー

「シーケンスメソッド」の読み込み

[シーケンスメソッド] オプションを使用してデータをレビューすると (26 ページ 図 12 を参照)、ナビゲーション テーブルから分析を読み込むたびに、分析のシーケンス行に対応するシーケンスメソッドが読み込まれます。このオプションの名前が示すように、これはシーケンスデータセットのレビューのみで使用でき、シングルランのレビューには使用できません。

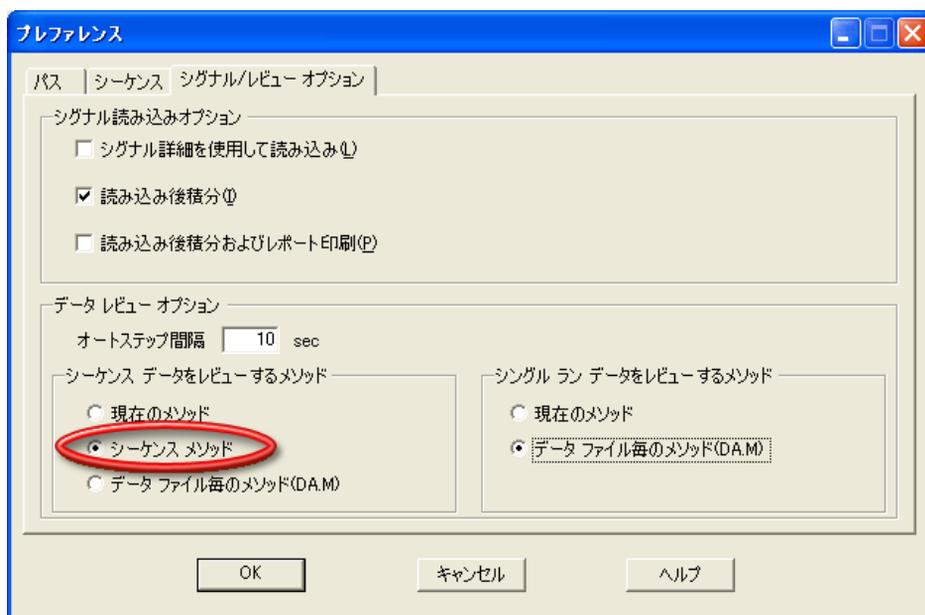


図 12 データレビューのためにシーケンスメソッドの読み込み

このオプションの一般的な用途は、データ解析パラメータのシーケンス特有の最適化で、特に、再解析の準備に用いられます (「データ解析: データの再解析」 33 ページ 図 を参照)。一旦すべての分析がレビューされ、シーケンスメソッドが改善されると、更新したメソッドを使用して全体のシーケンスを再解析できます。

以後の取り込みのために、シーケンスメソッドの変更に対応するマスターメソッドに反映させる必要がある可能性があります。たとえば、**マスターメソッドの更新機能**を使用して、これを手軽に行うことができます (31 ページ 図 表 3 を参照)。

「データファイル毎のメソッド (DA.M)」の読み込み

個々の DA.M を対応するデータファイルと一緒に自動的に読み込む場合、レビュー設定 [データファイル毎のメソッド (DA.M)] (27 ページ 図 13 を参照) を使用する必要があります。この場合、データファイルはナビゲーションテーブルを使用して読み込まれます。メソッドを変更した後、次の分析を読み込むと、新しいメソッド (次の分析の DA.M) が読み込まれるので、メソッドの変更を保存するか尋ねられます。

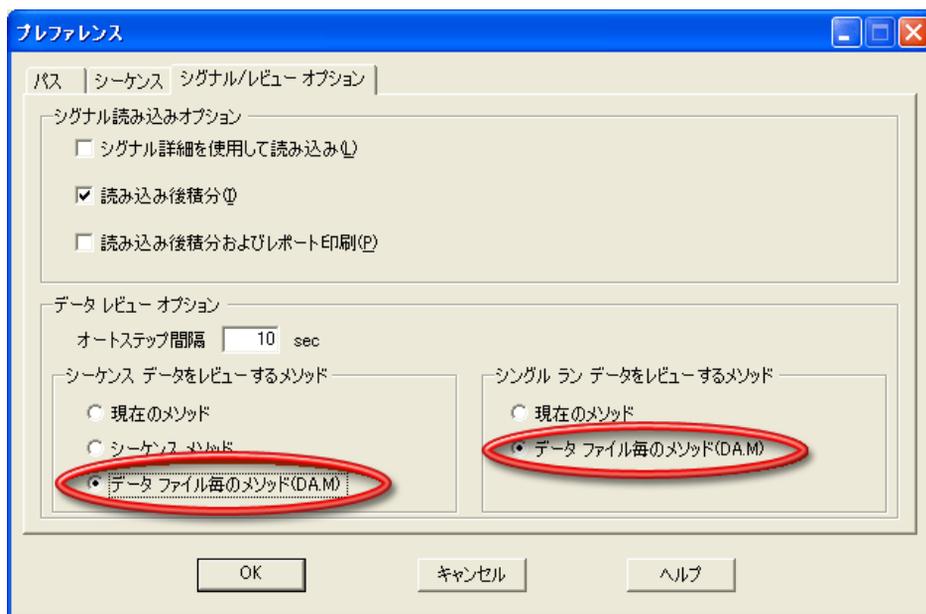


図 13 データレビューのためのデータファイル毎のメソッドの読み込み

個別のデータ解析メソッド (DA.M) を用いると、分析固有の変更を実行し、分析の個々のデータ解析メソッドにそれらを保存できます。シーケンスの複数の分析用に個別のタイム積分イベントを必要とする複雑なクロマトグラムを扱う場合に、このメソッドが役立つことがあります。

注記

シーケンスを再解析する際には、シーケンスメソッドに対してすべてのアクションが実行され、各データファイルの DA.M が上書きされます (それらのメソッドに保存したすべての変更を含む)。DA.M の最適化は、最終再解析を既に行った後の最後のデータ解析の手順として行う必要があります。

マニュアル積分イベントの処理

ベースラインの手動描画などのマニュアル積分イベントは、タイム積分イベントよりもさらにデータファイル固有のものです。複雑なクロマトグラムの場合、これらのイベントを再解析に使用できることが非常に望まれます。

そのため、**ChemStation B.04.01** 以降では、メソッドの代わりにデータファイルに直接、マニュアル積分イベントを保存できます。データファイルをレビューまたは再解析すると、データファイル中のマニュアル積分イベントが常に自動的に適用されます。マニュアル積分イベントを含む分析は、**ナビゲーションテーブル**の対応する列に印が付きます。

手動によるベースライン描画やピーク削除のツールに加えて、以下の操作を行う 3 つの追加ツールがユーザーインターフェースに用意されています。

- データファイルに現在表示されているクロマトグラムのマニュアルイベントを保存
- 現在表示されているクロマトグラムからすべてのイベントを削除
- 最後のマニュアル積分イベントを元に戻す (イベントが保存されるまで使用可能)

ナビゲーションテーブルでのレビュー中に次のデータファイルに対して操作を続行する場合、**ChemStation** は未保存のマニュアル積分イベントがないか確認し、イベントを保存するかどうかをユーザーに尋ねます。

ナビゲーションテーブルでのレビュー中にデータファイルに保存されたマニュアルイベントが、**[パッチ]**モードでのレビュー中に保存されたマニュアル積分イベントに干渉することはありません。これら 2 つのレビュー方法は、データファイルのマニュアルイベントに関して完全に分離されています。

リビジョン **B.04.01** より前の **ChemStation** では、マニュアル積分イベントはメソッドだけに保存できます。**B.04.01** でもこのワークフローを使用することができます。メソッドでマニュアル積分イベントを処理するために、**[データ解析]**ビューの**[積分]**メニューには以下の項目が示されます。

メソッドのマニュアルイベントの更新:メソッドに新しく記載されたマニュアルイベントを保存します。

メソッドからマニュアルイベントを適用:現在メソッドに保存されているマニュアルイベントを現在読み込まれているデータファイルに適用します。

メソッドからマニュアルイベントの削除:メソッドからマニュアルイベントを削除します。

メソッドに保存されたマニュアルイベントをデータファイル内のストレージに変換するには、メソッドからイベントを使用し、データファイルに結果を保存します。希望する場合は、メソッドからイベントを削除します。

メソッドの [積分イベントテーブル] の [マニュアルイベント] チェックボックスがオンの場合、このメソッドを用いるデータファイルを読み込む際に、メソッドのマニュアルイベントが常に適用されます。データファイルに追加マニュアルイベントが含まれる場合は、データファイル内のイベントが使用されます。[マニュアルイベント] チェックボックスがオンの場合、データファイルにイベントを保存するかどうかユーザーが尋ねられることはありません。

3 データ解析

データレビュー時の ChemStation ユーザーインターフェース

データレビュー時の ChemStation ユーザーインターフェース

ChemStation ユーザーインターフェースでは、データ解析に利用できるさまざまなメソッドを使用しやすくするために、多くの機能を提供しています (30 ページ 図 14)。

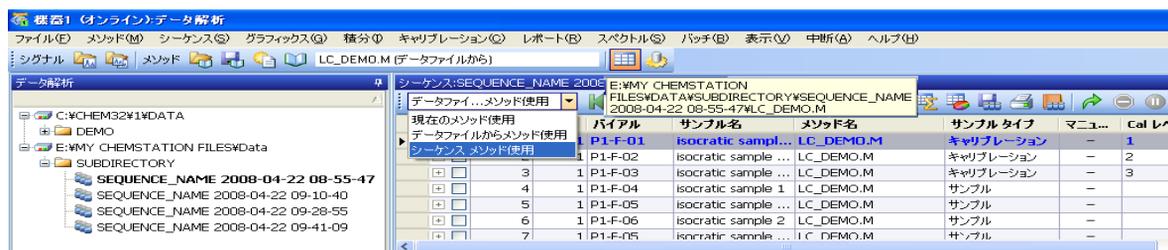


図 14 データ解析のユーザーインターフェース

- [データ解析] ビューにメソッド修正状態が表示されるため、保存されていないメソッド変更がある場合に簡単に追跡できます。ユーザーインターフェースには、現在読み込まれているメソッドの名前が常に表示されます (それがデータファイルの個々のデータ解析メソッドまたはシーケンスメソッドのいずれであるかの情報とともに)。
- マウスをフィールドの上に移動すると、ツールチップに完全なパスとメソッドの名前が追加で表示されます。
- ドロップダウンボックスでは、[プレファレンス] ダイアログのメソッドオプションへの「ショートカット」が提供されます。任意の利用可能なオプションを直接有効にでき、次回ナビゲーションテーブルから分析を読み込む際にそのオプションが適用されます。さらに、どのオプションが現在アクティブかを確認するのも非常に便利です。これらのオプションはデータレビューにのみ適用され、再解析には適用されないことに注意してください。

データ解析ビューでのメソッドの保存

[データ解析] ビューでの作業中に、ユーザーはメソッドのデータ解析パラメータを最適化します。ワークフローでは、メソッドの保存に加えて、シーケンスメソッドを別名で保存したり、マスターメソッドとしてマスターメソッドディレクトリに保存したりすることも必要になる場合があります。

データ解析の [メソッド] メニューには、メソッドを保存するためのいくつかの項目が用意されています。

表 2 データ解析ビューの [メソッド] メニューの保存オプション

メソッド読み込みプレファレンス	使用可能な保存オプション
現在のメソッド	メソッドを保存
	名前を付けてメソッドを保存
シーケンスメソッド	シーケンスメソッドを保存
	新規マスターメソッドとして保存
データファイルからの個々のメソッド	データファイルメソッドを保存
	新規マスターメソッドとして保存

シーケンスメソッドや、デフォルトごとの個々のメソッド DA.M に対する [新規マスターメソッドとして保存] オプションには、ターゲットディレクトリとして事前選択されたマスターメソッドディレクトリがあります。

マスターメソッド機能の更新

さらに、[メソッド] メニューでは、個々のメソッドのために開発された、シーケンスやマスターメソッドにのみ使用できるデータ解析パラメータが提供されます。このオプション [マスターメソッドの更新] または [シーケンスメソッドの更新] は、[メソッド] メニューから利用したり、該当する分析のナビゲーションテーブルで右クリックして選択することで利用したりできます。

この機能は以下の状況で使用できます。

表 3 更新の有効性 ... メソッド機能

読み込んだメソッド	使用できるオプション
個々のデータ解析メソッド (DA.M)	マスターメソッドの更新
	シーケンスメソッドの更新
シーケンスメソッド	マスターメソッドの更新
マスターメソッド	—

3 データ解析

データレビュー時の ChemStation ユーザーインターフェース

この機能によって、ターゲットメソッドのデータ解析パラメータのみが更新され、すべてのデータ解析パラメータが上書きされることに注意してください。

注記

技術的な理由から、データ解析パラメータに加えて、ターゲットメソッドの監査証跡もソースメソッドの監査証跡で上書きされます。

データ解析: データの再解析

データレビューとは逆に、シーケンス再解析では、キャリブレーションテーブルの更新、シーケンステーブルのパラメータ変更、新しいメソッドのシーケンスへの追加など、シーケンスのすべての分析がシーケンスとの関連で再解析されます。

新しいデータ編成概念では、シーケンスコンテナには、データファイル、シーケンスファイルのコピー、取り込みで使用されるすべてのシーケンスメソッドなど、再解析に必要なすべてのファイルが含まれています。そのため、シーケンスを再解析するには、それをナビゲーションテーブルに読み込むだけで、必要なツールセットが使用できます。



図 15 シーケンス再解析のためのツールセット

再解析に関しては以下の規則に注意してください。

- ナビゲーションテーブルにシーケンスコンテナを読み込む際に、ChemStationはこのコンテナにあるシーケンスファイル .S も自動的に読み込みます。このシーケンスファイルには、このコンテナに属するデータファイルに関連するすべてのシーケンス行が含まれます。
- すべてのアクションがシーケンスメソッドに対して実行されます。変更された解析パラメータを適用する場合は、シーケンスメソッドを変更する必要があります。
- [プレファレンス] ダイアログのメソッド読み込み設定は再解析に影響を及ぼさず、常にシーケンスメソッドまたは更新したシーケンスメソッドに対して影響を与えます。この機能セットはレビューのみに有効です。
- 再解析中、バッチ (*.b)、シーケンス/シングルランログ (*.log)、ナビゲーションテーブルは更新されます。処理された各データファイルの個々のデータ解析メソッド (DA.M) は、現在のシーケンスメソッドで上書きされます。

3 データ解析

データ解析: データの再解析

注記

シーケンスを再解析する際には、シーケンスメソッドに対してすべてのアクションが実行され、各データファイルの **DA.M** が上書きされます (それらのメソッドに保存したすべての変更を含む)。データ解析中の **DA.M** の最適化は、最終再解析を既に行った後の最後のデータ解析の手順として行う必要があります。

- マスターメソッドディレクトリの中の 1 つから新しいメソッドをシーケンステーブルに追加する場合、メソッドリストの [参照] 項目を使用して、指定したメソッドディレクトリを参照する必要があります (既にシーケンスコンテナに存在するメソッドのみ、参照なしに使用可能です)。再解析中、新しいメソッドもシーケンスコンテナにコピーされます。つまり、コンテナに既に存在するメソッドと同じ名前を持つメソッドを選択できないことを意味します。



図 16 シーケンステーブルのマスターメソッドディレクトリの参照

- シーケンステーブルでは、行の追加または削除はできません。
- [シーケンスパラメータ] ダイアログで、オペレータ名、シーケンスコメント、シーケンス情報の用途を変更できます。データ取り込み中にその他のフィールドをすべて設定する必要があります。そうしないと、再解析には適用されません。

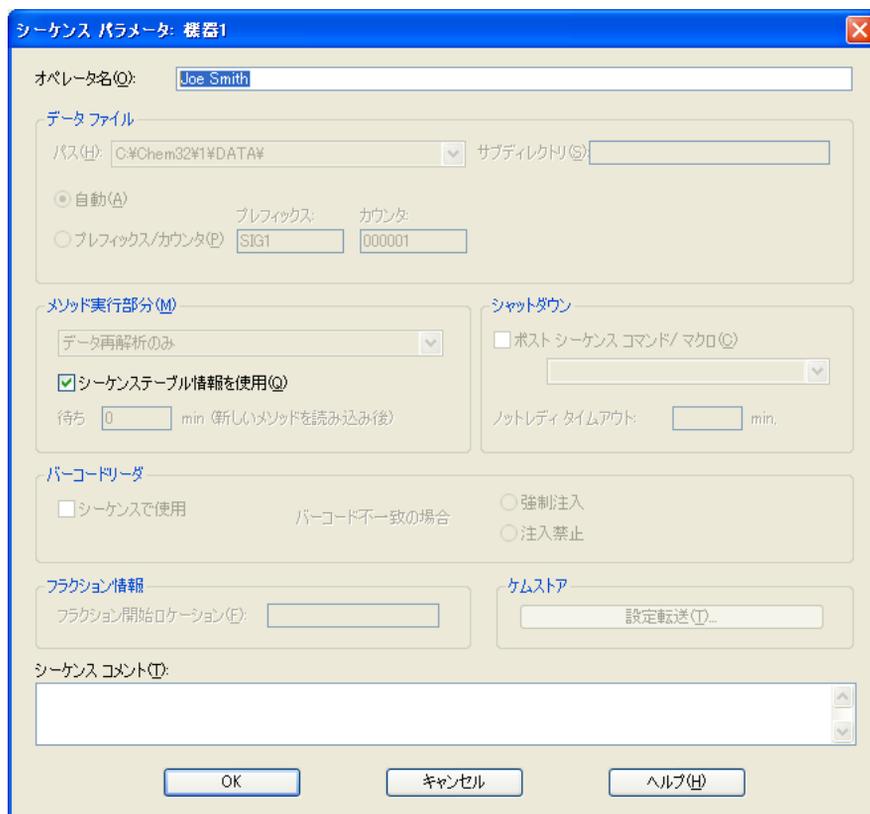


図 17 データ解析のシーケンスパラメータ

データ解析ビューでのシーケンスの保存

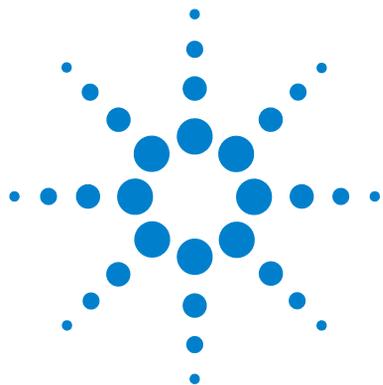
[シーケンス] メニューでは、シーケンステーブル、シーケンスパラメータ、シーケンス出力パラメータの変更後に、シーケンスを保存することができます。さらに、シーケンステンプレートとしてデータ解析シーケンス (シーケンスコンテナに保存される) を保存することもできます。

取込中にシーケンステーブルにシーケンス行を追加した場合、この機能が役立ちます。これらの追加行は、特定のシーケンスコンテナのみで使用でき、元々のシーケンステンプレートでは使用できません。

新規シーケンステンプレートとしてシーケンスを保存すると、すべてのフィールドが再編集できるようにシーケンスファイルが自動的に変換されます。

3 データ解析

データ解析: データの再解析



4

ユニークなフォルダ作成をオフにしたワークフロー

ユニークフォルダ作成をオンまたはオフにして作業しますか？ 38

「ユニークなフォルダ作成」をオフにしたワークフロー 39

シーケンスデータコンテナのマイグレーション 43

この章では、**ChemStation** リビジョン **B.01.03** 以前の形式でデータを保存することができるようにする、[ユニークなフォルダ作成] をオフにした作業について説明します。このモードでは、**ChemStation** での最新のデータレビューや再解析機能は十分に活用されません。



4 ユニークなフォルダ作成をオフにしたワークフロー

ユニークフォルダ作成をオンまたはオフにして作業しますか？

ユニークフォルダ作成をオンまたはオフにして作業しますか？

前の章で述べた新しいデータ概念には、以下のような多くの利点があります。

- シーケンスデータは上書きされません。シーケンスの取り込みごとに、結果として生じたデータファイルを一意の名前で独自のシーケンスコンテナに保存します。
- シーケンスコンテナ概念では、データはデータ解析に必要な情報、つまりシーケンスファイルのコピーとシーケンスで使用されるすべてのメソッドのコピーとともに保存されます。これらのメソッドをシーケンス固有の入力で変更して、元のマスターメソッドには影響を及ぼさないようにすることが可能です。このような理由から、コンテナの概念は、結果作成のために一連のデータファイルとメソッドが1つのシーケンスとしてグループを構成していることの意義を深めています。
- データレビューと再解析は、両方ともナビゲーションテーブルの[データ解析]ビューから使用できます。
- データコンテナの概念は、Agilent ChemStation OpenLAB オプションに対する最適な前提条件を提供し、これにより、Agilent OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM) とのデータ交換が可能になっています。

ただし、ユーザーが ChemStation B.01.03 以前の形式でデータを保存し、それに対応するワークフローに従って作業をすること望むような状況が発生する可能性があります。

- メソッドの開発中は、取り込みとデータ解析両方に対応する1つのメソッドを使用し、取得済みのデータの将来的な取り込みと再解析のために変更が自動的に利用できるようにしたほうが便利であると考えられます。
- 部分取り込みの場合など、複数の取り込みからのデータが1つのフォルダに保管される必要があります。
- ChemStation システムの古いリビジョン用に設計されている、カスタマイズされたマクロソリューションでは、古いデータ編成の仕組みに従ってデータ、メソッド、またはシーケンスを保存する必要がある可能性があります。
- ChemStation リビジョン B.01.03 以前で動作しているシステムがあるラボで ChemStation B0.04.01 を使用する場合は、すべてのシステムで同じデータ編成モードを使用するほうが便利です。

「ユニークなフォルダ作成」をオフにしたワークフロー

B.02.01 より前のリビジョンの ChemStation で使用されていたようなデータ保存概念で作業できるようにするために、[プレファレンス] ダイアログボックスの [シーケンス] タブの [データ保存] セクションで、以下のことを実行できます。[ユニークなフォルダ作成オン] と [ユニークなフォルダ作成オフ] のいずれかを選択できます (39 ページ 図 18)。デフォルトでは、[ユニークなフォルダ作成オン] が選択されています。[ユニークなフォルダ作成オン] により、前の 3 つの章で述べたようなデータ保存概念が可能になります。

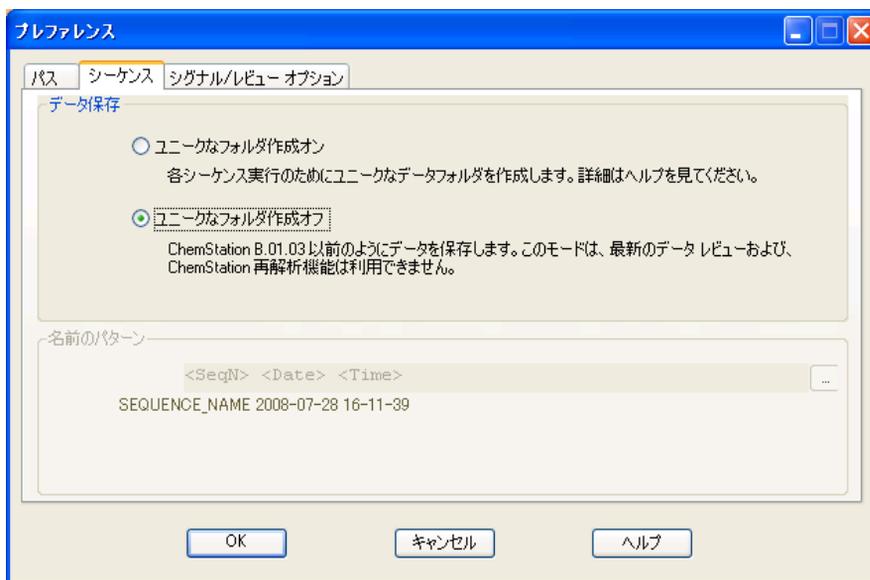


図 18 プレファレンスダイアログ / シーケンスタブ

注記

[ユニークなフォルダ作成] をオンまたはオフに切り換えると、後の取り込みに影響を及ぼしますが、既に取り込んだデータのデータ構成は変更されません。

4 ユニークなフォルダ作成をオフにしたワークフロー

「ユニークなフォルダ作成」をオフにしたワークフロー

注記

作業開始時に 2 つのモードのいずれかに決定し、切り換えないことをお勧めします。

[ユニークなフォルダ作成オフ]の切り替えは、ChemStation OpenLAB オプションや、ChemStore/セキュリティパックインストール済みシステムではサポートされていません。

[ユニークなフォルダ作成オフ]を切り換えると、データ保存に以下の影響が出ます。

- シーケンスデータはシーケンスコンテナに取り込まれずに、[シーケンスパラメータ]での指定に従ってサブディレクトリに直接取り込まれます(14 ページ 図 4)。そのため、シーケンス名のパターンは[プレファレンス]ダイアログの[シーケンス]タブで灰色で表示されます(39 ページ 図 18)。
- これはつまり、2 つ以上のシーケンスの取り込みに関して、同じサブディレクトリにデータが取り込まれる可能性があるということです。このことは、既存データが上書きされるというリスクがあることを意味しますが、一方では部分シーケンスの実行を使用してシーケンスを分割し、1 つのフォルダで結果を組み合わせることもできることを意味します(これは、[ユニークなフォルダ作成オン]では不可能です)。
- シーケンスメソッド(.M)またはシーケンスファイルのコピー(.S)はデータとともに保存されず、シーケンスログファイルとバッチファイル(.B)のみが保存されます。つまり、[プレファレンス]ダイアログで指定されたパスにあるメソッドとシーケンス(12 ページ 図 2)のみが使用できます。これらのファイルは、取り込みの他、データレビューや再解析でも使用される必要があります。シーケンスまたはデータファイル固有のメソッドの変更の保存は、異なる名前でもソッドを保存するしかありません。そうしないと、これらの変更は取り込みメソッドにも適用されます。一方、このような動作は、メソッドの開発中は望ましい可能性があります。
- 保存されるデータファイルに固有のメソッド ACQ.M および DA.M は存在しません。元の取り込みに関する情報は、レポートにそれを含めるか、メソッドのランタイムチェックリストから[データファイルにメソッドを保存]を選択することでのみ保存できます(41 ページ 図 19)。このオプションを使用すると、取り込みメソッドは各データファイルに RUM.M として保存されます。

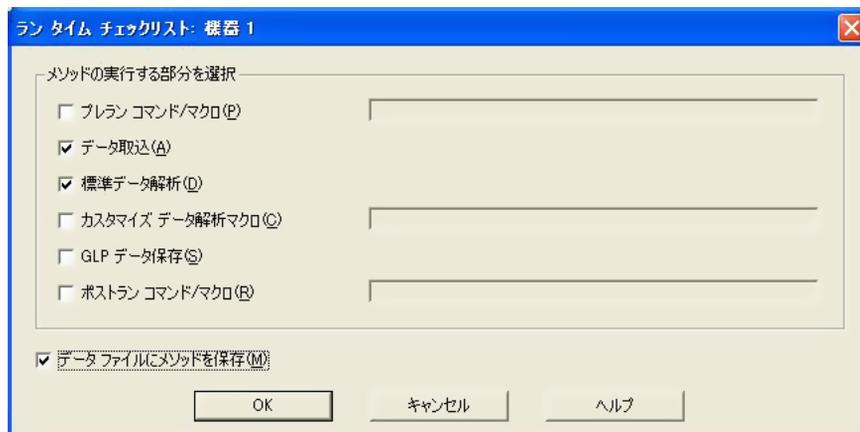


図 19 ランタイムチェックリスト:データファイルにメソッドを保存

ChemStation B.02.01 で導入された拡張 ChemStation ユーザーインターフェースは、[ユニークなフォルダ作成]がオフの場合にも使用できます。ただし、このモードでは利用できない機能があります。ChemStation B.02.01 より前のものを使用して取り込まれた分析にも、同じ制限が適用されます。

- シーケンスがナビゲーションテーブルに読み込まれると、再解析ツールセットは灰色で表示されます(41 ページ 図 20)。このデータ保存モードで取り込まれたシーケンスを再解析するには、[シーケンスパラメータ]の[データ再解析のみ]オプションを使用し、[メソッド & ランコントロール]ビューから行うのが唯一の方法です(42 ページ 図 21)。



図 20 ユニークなフォルダ作成がオフで取り込まれたシーケンスのナビゲーションテーブル

4 ユニークなフォルダ作成をオフにしたワークフロー 「ユニークなフォルダ作成」をオフにしたワークフロー

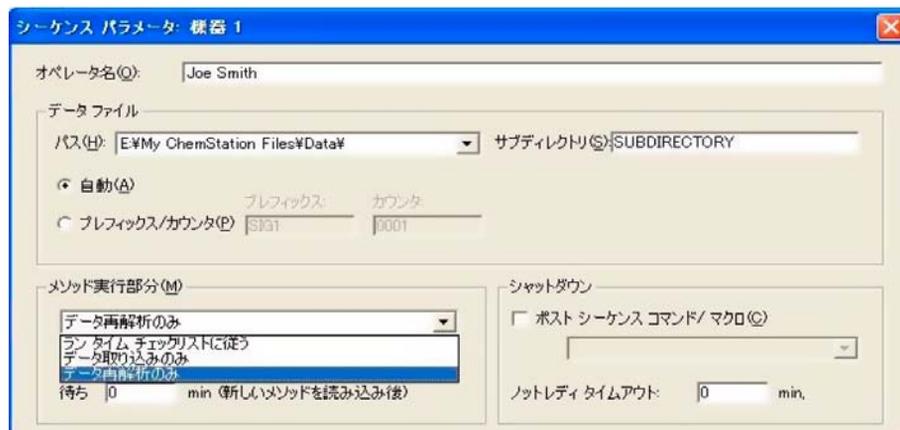


図 21 「ユニークなフォルダ作成」オフで取り込まれたシーケンスデータの再解析

- メソッド使用法のオプション [データファイル毎のメソッド] と [シーケンスメソッド] (23 ページ 図 10 を参照) を使用すると、ナビゲーションテーブルの分析がダブルクリックされるたびに、個々のメソッド/シーケンスメソッドが存在しないという警告メッセージが表示されます。前に説明したように、これらのメソッドはデータと一っしょには保存されません。この場合、データレビューのための有用なオプションは [現在のメソッドを使用] のみです。

シーケンスデータコンテナのマイグレーション

ChemStation では、非コンテナデータをシーケンスコンテナ形式に移行するツールが提供されます。このタスクを正常に実行するには、元のシーケンスファイルが使用できる必要があります。このファイルは、シーケンスのすべてのデータファイルを再解析するために、必要なすべてのシーケンス行を含み、元のデータのファイル命名規則に従っている必要があります。さらに、シーケンステーブルの [メソッド] 列に含まれるすべてのメソッドが利用できる必要があります。

マイグレーションを実行するには、以下の手順に従います。

[データ解析ビュー] の [シーケンス] メニューから、[シーケンスコンテナのマイグレーション] を開始します。

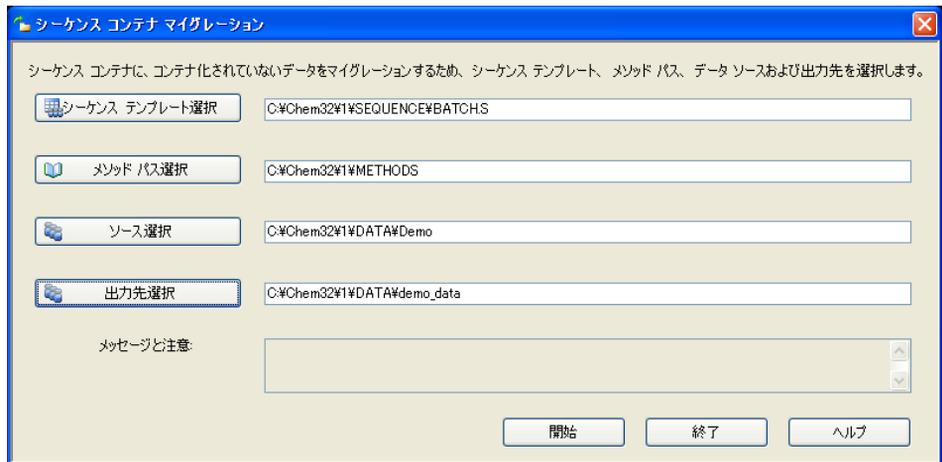


図 22 シーケンスコンテナのマイグレーション

以下の必須フィールドに入力します (43 ページ 図 22 を参照)。

シーケンステンプレートの選択 : 移行されるデータセットをマッチさせるシーケンステーブルを含むシーケンスファイル .S を選択します。

メソッドパッチの選択 : シーケンステーブルで参照されるメソッドが含まれるディレクトリを選択します。

4 ユニークなフォルダ作成をオフにしたワークフロー

シーケンスデータコンテナのマイグレーション

ソース選択: 移行されるデータファイルを含むディレクトリを選択します。

出力先の選択: 作成されるシーケンスコンテナのパスおよび名前を指定します。既存のフォルダを選択するか、新しいフォルダを作成します。

すべてのフィールドへの入力完了したら、マイグレーションを開始できます。

以下の手順が実行されます。

- シーケンスコンテナディレクトリが作成されます。
- シーケンステンプレートがコンテナにコピーされます。このテンプレートは、[**データ解析**] ビューでデータファイルを再解析できる状態に変換されます (「**データ解析: データの再解析**」 [33 ページ](#)  を参照)。
- シーケンステーブル内で参照されるメソッドは、コンテナフォルダへの指定したパスからコピーされます。
- データファイル、シーケンスログブック、およびバッチファイルが、データソースディレクトリから出力先ディレクトリにコピーされます。
- シーケンステーブル内の情報に従って、対応するメソッドのコピーがデータファイルごとに **DA.M** としてコピーされます。

コンテナのマイグレーションが完了すると、成功のメッセージが [**メッセージと警告**] フィールドに表示されます。それ以外で、マイグレーション中に問題が発生した場合は、それを表す警告メッセージが表示されます。

www.agilent.com

本書では

ChemStation のリビジョン B.02.01 以降では、結果データを速く確認できるようにデータの確認と再解析の機能が大幅に改善されました。

ChemStation の新しいデータ保存機能は、シーケンスデータとメソッドを効率的に体系化するのに役立ちます。

© Agilent Technologies 2006, 2007-2009

Printed in Germany
2/2009



G2170-96043