Agilent OpenLAB CDS ChemStation エディション

コンセプトとワークフロー



Agilent Technologies



© Agilent Technologies, Inc. 2010-2011

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

M8301-96012

エディション

09/2011

Printed in Germany

Agilent Technologies Hewlett-Packard-Strasse 8 76337 Waldbronn

本製品は、システムが適切な規制 機関で登録を受け関連する規制に 準拠している場合、ビトロ診断シ ステムのコンポーネントとして使 用できます。それ以外の場合は、 一般的な実験用途でのみ使用でき ます。

ソフトウェア リビジョン

本書の内容は Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition のリビ ジョン C.01.03 に対応していま す。

Microsoft ® は、Microsoft Corporation の米国の登録商標で 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 ないものとします。Agilent とお 客様の間に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条 やを十分に理解し、条件がれるまで、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。



本書の内容

本書では、Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition の概念を説明しま す。

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。OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.01 およびそれ以降のバージョンでは、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 OpenLAB CDS ChemStation Edition 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 概要

この章では、Agilent OpenLAB CDS の概要と Agilent OpenLAB CDS ChemStation エディションの新機能について説明します。以降、 ChemStation は、Agilent OpenLAB CDS ChemStation エディションのこと を指します。

2 OpenLAB CDS システムアーキテクチャ

この章では、異なるビジネスニーズをカバーするさまざまな構成オプションについて説明します。

3 OpenLAB CDS ChemStation ライセンス

この章では、Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition の主要コンポー ネントと機能について解説し、これらのコンポーネントと機能のライセン ス形態について説明します。

4 セキュリティとデータ整合性

この章では、内蔵セキュリティ機能と FDA 21 CFR Part 11. に対する準拠 状況について説明します。また、Shared Services により提供されるシス テムセキュリティ機能についても説明します。



5 OpenLAB Shared Services

OpenLAB コントロールパネルでは、Shared Services は、セントラルアク セス、セントラルコンフィグレーション、またはラボステータス全体の表 示などのコントロール機能を提供します。これらの機能を、この章で詳細 に説明します。

6 OpenLAB CDS ChemStation Edition の基本概念

この章では、リモートコントロール、グラフィカルインターフェイス、および ChemStation 表示など、ChemStation での操作に使用する原則について説明します。

7 メソッドの使用

メソッドは ChemStation の重要な部分であり、この章ではそのコンセプト について詳細に説明します。

8 データ取り込み

この章では、データ取り込みプロセスの概要について説明します。

9 自動化 / シーケンス

本章では、自動化の概念について説明します。具体的には、ChemStation でシーケンスを使用する方法、シーケンスの実行時に起こること、および シーケンスのカスタマイズ方法を説明します。

10 データ解析とレビューの概念

この章では、データ解析およびデータレビューのオプションについて説明 します。OpenLAB CDS ChemStation Edition では、これらのオプションは 2 つの異なるビューとして使用できます。

11 キャリブレーション

本章では、キャリブレーションの概念について説明します。

12 レポート作成

この章では、インテリジェントレポートとクラシックレポートの概念について説明します。

13 CE 特有のコンセプトと機能

この章は、ChemStation を使用して CE 機器をコントロールする場合にの み関連する内容です。

14 付録

この章では、関連マニュアルと、OpenLAB Shared Services で使用される 権限に関する情報について説明します。

目次

1	概要 9
	新機能 10
	OpenLAB CDS 13
	OpenLAB Shared Services 15
	OpenLAB CDS ChemStation Edition 17
2	OpenLAB CDS システムアーキテクチャ 19
	ワークステーション 20
	ネットワークワークステーション 22
	分散システム 24
3	OpenLAB CDS ChemStation ライセンス 27
	一般製品構成 28
	ライセンス 30
4	セキュリティとデータ整合性 43
	セキュリティの側面 44
	データ整合性 47
5	OpenLAB Shared Services 49
Ŭ	继兴答理 50
	ラボステータス全体の表示 51
	ライセンス管理 52
	システムアクティビティログ 53
	認証プロバイダ 54
	セキュリティホリンー 55
6	OpenLAB CDS ChemStation Edition の基本概念
	リモート機器コントロール 64
	ChemStation ソフトウェアについて 67
	ChemStation データ構造 83

ChemStation のコンセプトとワークフロー

63

7 メソッドの使用 87
 メソッドの詳細 89
 メソッドの各部分 90
 メソッドのタイプ 92
 メソッドの作成 94
 メソッドの編集 95
 メソッド管理 99
 メソッドの実行時に起こる事柄 103

8 データ取り込み 111

データ取り込みとは 112 オンラインモニタ 115 ログブック 116 ステータス情報 117

9 自動化 / シーケンス 119

自動化とは 121 シーケンスおよびシーケンステンプレートとは 122 シーケンスパラメータ 123 シーケンステーブル 125 シーケンスの作成(シーケンスとシーケンステンプレート) 126 イージーシーケンス 128 シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート) 133 シーケンスログファイル 146 シーケンスの実行時に起こる事柄 147 シーケンスデータファイルの構造 149 ポストシーケンス処理 159 自動リキャリブレーション 161 リキャリブレーションの指定 162 シーケンスの種類 165

10 データ解析とレビューの概念 181

データ解析 182 レビュー 195

目次

11 キャリブレーション199用語の定義200キャリブレーションの種類201キャリブレーションテーブル208ピーク和209未知サンプル210リキャリブレーション211

12 レポート作成 215

レポートとは 216 クラシックおよびインテリジェントレポート 217 インテリジェントレポート 218 クラシックレポート 226

13 CE 特有のコンセプトと機能 239

メソッド & ランコントロールビューにおける CE Agilent ChemStation 固有の機能 240 ピークトップタイプ 243 キャリブレーションタイプ 244 CE-MSD 246 CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ 247

14 付録 249

文書マニュアル 250 OpenLAB Shared Services の権限 251



この章では、Agilent OpenLAB CDS の概要と Agilent OpenLAB CDS ChemStation エディションの新機能について説明します。以降、 ChemStation は、Agilent OpenLAB CDS ChemStation エディション のことを指します。



新機能

Agilent OpenLAB は、オープンアーキテクチャと再使用可能な標準化され たインタフェースを提供する、ラボソフトウェアのポートフォリオを含む オープンアーキテクチャです。科学的データのライフサイクルの各ステッ プについて、多様な OpenLAB ソリューションを用意しています。

・ クロマトグラフデータシステム (CDS)

OpenLAB CDS は EZChrom エディションまたは ChemStation エディショ ンとして使用できます。本書では ChemStation エディションについて説 明します。

- エンタープライズコンテンツマネージャー (ECM)
- Electronic Lab Notebook (ELN)

OpenLAB CDS には、Agilent の LC、GC、CE、CE-MS、および LC-MSD 機器 のすべての機器コントロールが用意されています。OpenLAB CDS には、マ ルチテクニック、マルチベンダーの機器コントロールを利用してデータの 取り込み、分析、解析を行うツールが装備されています。OpenLAB Shared Services (OLSS) で提供されるすべての機能にアクセスする OpenLAB コン トロールパネルからクロマトグラフィソフトウェアを開始します。

OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.01 の新機能

ラボの規模に応じて、単一のワークステーション、またはネットワーク ワークステーションのいずれかとして OpenLAB CDS をインストールするこ とができます。

単一のワークステーションでは、インテリジェントレポート、メソッド、 またはデータ解析モードなどのすべての新機能を含む ChemStation の全機 能を使用することができます。

ネットワークワークステーションでは、以下の追加機能が使用できます。

- ユーザーの集中管理
- 機器の集中管理
- ライセンスの集中管理
- ラボステータスの一覧表示

OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.02 の新機能

リビジョン C.01.02 以上の OpenLAB CDS ChemStation Edition では、次のインストール方法をサポートします。

- 分散システムとしてのインストール。分散システムインストールでは、
 以下の追加機能が使用できます。
 - 任意の PC から機器をコンフィグレーション
 - 任意の PC から機器をコントロール
 - 任意の PC からデータを再解析
- OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM) とのデータ同期。ECM へは、ワークステーション、ネットワークステーション、または分散システムから接続することができます。

OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.03 の新機能

OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.03 には以下の新機能があります。

• 機器コントロール – 追加ドライバ

低流量のポンプ、インジェクタ、バルブ、および G1364D 自動フラク ションコレクタの LC 機器に対応した RC.Net ドライバが追加されまし た。OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.03 は、490 Micro GC をコ ントロールできます。

・ 機器コンフィグレーション操作を改善

OpenLAB CDS ChemStation エディション C.01.03 は、より素早くかつ直 感的に、機器コンフィグレーションを効率的に実行します。

シーケンスのプランとキュー

シーケンスキューへはイージーシーケンスだけではなく、ChemStation の従来のシーケンスをキューすることができるようになります。また一 時停止の追加が可能です。新機能のキュープランを使用して、複数の シーケンスをセットとして事前に準備することができます。

・ レポートビューア

レポートビューアでは、ChemStation レポートをより簡単に表示させる ことができます。レポートビューアは、ChemStation から起動すること ができ、PDF や TXT フォーマットの ChemStation レポートを表示させ ることが可能です。



注記 C.01.xx から新しいバージョンへのアップグレード方法の詳細については、該 当する OpenLAB CDS のインストールガイドを参照してください。



OpenLAB CDS

Agilent OpenLAB CDS				
EZChrom エディション/ICM	ChemStation エディション			
インテリジェント レポート作成 RC.NET ドライバ	インテリジェント レポート作成 RC.NET ドライバ			
イージーシーケンス	イージーシーケンス			
標準データ形式 (ACAML)	標準データ形式(ACAML)			
ファイル システム /ECM …	ファイル システム /ECM …			
Choused	Convisoo			
コントロールパネル				

図 1 OpenLAB CDS アーキテクチャ

OpenLAB CDS には以下のソフトウェアとインタフェースモジュールが含ま れています。

• OpenLAB コントロールパネル

OpenLAB コントロールパネルは、OpenLAB Shared Services にアクセス するためのユーザーインターフェイスです。

• OpenLAB Shared Services

これらのサービスは、セントラルアクセス、セントラルコンフィグレー ション、ラボステータスの一覧表示、および機器のリモートコントロー ルを提供します。セントラル機能は、すべての OpenLAB モジュールで使 用することができます。

• 機器コントロールおよびデータ取込モジュール (ChemStation/EZChrom)



このモジュールは ChemStation と EZChrom のどちらにもあります。両 ソフトウェアとも下位互換性があるため、以前のバージョンで取り込ま れたデータを処理することができます。OpenLAB CDS ChemStation およ び OpenLAB CDS EZChrom にはイージーシーケンス、RC.NET ドライバ、 またはインテリジェントレポートなど、共通の機能があります。本ガイ ドは OpenLAB CDS ChemStation エディションについて説明しています。

1

OpenLAB Shared Services

OpenLAB Shared Services には OpenLAB コントロールパネルでアクセスします。Shared Services には、すべての OpenLAB モジュールで使用可能な以下の機能が含まれます。

機器管理

機器の基本情報を管理することができます。この情報はコンフィグレー ションにより、単一 PC からアクセス可能である場合と、ネットワーク 内の複数ワークステーションからアクセス可能な場合があります。

・ ラボステータス全体表示

機器の基本情報に集中的にアクセスすることができます。基本情報と は、機器の名称、ロケーション、ステータス(オンラインまたはオフラ イン)などです。

リモート機器コントロール

分散システムコンフィグレーションでは、CDS クライアント PC から機器を設定および管理することができます。

アクティビティログブック管理

ユーザーログイン、ユーザーの作成 / 削除、機器の作成 / コンフィグ レーション / 変更 / 削除といったすべてのシステム作業に、集中的にア クセスすることができます。

ユーザー管理

ユーザー、グループ、ロール、権限を管理することができます。ECM シ ステムまたは Windows ドメインでユーザーを管理する場合、既存ユー ザーを Shared Services に設定することができます。

ライセンス管理

このサービスにより、機器モジュールやアドオンに必要なすべてのライ センスを管理することができます。ライセンスの追加および削除、およ びすべてのライセンスのステータス表示が可能です。ライセンスは、シ ングルライセンスサーバー、またはリダンダントライセンスサーバーに おいて使用できます。

機器を起動すると、ChemStation は必要なライセンスがライセンスプー ルで利用できることを自動的に確認し、機器を動作させるために必要な



OpenLAB Shared Services

ライセンスを確保します。機器を停止すると、ライセンスは解放され、 他の機器で使用可能になります。

1

OpenLAB CDS ChemStation Edition

OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.03 には以下の新機能があります。

・ インテリジェントレポート

新しいレポートテンプレートエディタにより、テンプレートの作成およ び修正を簡単に行うことができます。レポートテンプレートは、 Microsoft Business Intelligence Studio でも使用されている標準のレ ポート定義言語 (RDL)で保存されます。

シーケンスメソッドでレポートテンプレートを参照する場合、そのレポートテンプレートは自動的に結果セットにコピーされます。

インテリジェントレポートを有効にすると、新設の[レビュー]ビュー が利用可能になります。これにより、データファイルのさまざまな組み 合わせに対してあらゆるレポートテンプレートを適用することができま す。

• RC.NET ドライバ

ChemStation は、Agilent RC.NET ドライバテクノロジーをサポートして おり、ほとんどの機器モジュールで利用可能です。これらのドライバ は、機器と通信する最新のインターフェイスを備えています。このイン ターフェイスは、このドライバを使用するすべてのアプリケーションで 同一です。また、クラシックドライバを利用することもできます。

・ メソッド用途

ChemStation エクスプローラから、マスターメソッドおよびシーケンス メソッドを直接読み込むことができます。 [メソッドの更新] ダイアロ グでは、マスターメソッドとシーケンス メソッドを同期することがで きます。

データ解析モード

再計算モードまたは再解析モードを選択することが可能です。再解析 モードでは、シーケンスのコンテキスト内のサンプルを再解析すること ができます(ブラケットキャリブレーションなど)。再計算モードでは、 メソッドの異なるサンプルまたはサンプルセットを再計算することがで きます。各モードに関連する必要機能は、個別のツールバーで利用可能 です。



OpenLAB CDS ChemStation Edition

・ 結果セット

コンテナは結果セットと改称されました。結果セットで使用するメソッ ドは、取り込み中でも修正可能です。すでに取り込んだデータを利用し て、独自の結果セットを作成することができます。例えばクロスサンプ ル計算について、ユーザーが編集した結果セットを利用することができ ます。

リモート機器コントロール

リビジョン C.01.02 現在で、ChemStation は、分散システムのインス トールにおいてフルリモート機器コントロールをサポートします。機器 を継続して実行させながら機器セッションを切断して後に再接続するこ とや、異なる PC から機器セッションを引き継ぐ、あるいは別のユー ザーから機器セッションを引き継ぐことができます。

・ シーケンスのプランとキュー

リビジョン C.01.03 以降では、実行させたい一連のシーケンスを事前に 定義しておくことができます。たとえば、夜間のタスクや週末の分析を 計画することができます。そのために、ChemStation には以下の機能が 用意されています。

- キュープラン:ここでは関連するシーケンスを選択します。
- キューシーケンス: この機能はすでにイージーシーケンスで利用でき ますが、今度は ChemStation シーケンスもサポートします。シング ルシーケンスを直接スケジュールすることができます。または、 キュープランに定義したすべてのシーケンスを処理することができま す。
- ・ レポートビューア

リビジョン C.01.03 以降は、データ解析画面で結果の表示と比較にレ ポートビューアを使用することができます。保存されているシーケンス サマリレポートまたは各シングル注入レポートを ChemStation から直接 開き、標準の PDF テクノロジーを使用した別画面のフローティングウィ ンドウにそれぞれ表示させ、比較することができます。



ChemStation のコンセプトとワークフロー

2 OpenLAB CDS システムアーキテク チャ

ワークステーション 20
ネットワークワークステーション 22
分散システム 24

この章では、異なるビジネスニーズをカバーするさまざまな構成オ プションについて説明します。



2 OpenLAB CDS システムアーキテクチャ ワークステーション

ワークステーション

小規模ラボでは、OpenLAB CDS のすべてのコンポーネントを単一ワークス テーション上にインストールすることが可能です。これにより、Shared Services サーバー (OLSS サーバー)を ChemStation と同じ PC で実行で きます。

以下の図は、OpenLAB CDS ChemStation ワークステーションのコンフィグ レーションを示します。1 つの ChemStation インスタンスのみが示されて いますが、ワークステーションに複数の ChemStation および関連機器を設 定することができます。



図 2 OpenLAB CDS: ワークステーション

OpenLAB ECM を使用する場合もしない場合も、OpenLAB CDS ワークステー ションコンフィグレーションを使用できます。ECM に接続されている場合、 ChemStation PC に保存されているデータは ECM のデータ保存と同期しま

OpenLAB CDS システムアーキテクチャ 2 ワークステーション

す。ECM を使用した ChemStation についての詳細は、『ECM を使用した OpenLAB CDS ChemStation エディションのコンセプトガイド』を参照して ください。 **2** OpenLAB CDS システムアーキテクチャ

ネットワークワークステーション

ネットワークワークステーション

1 つのネットワーク内に多くの機器を持つ大規模ラボでは、Shared Services サーバー (OLSS サーバー) として動作する個別の PC に Shared Services をインストールすることができます。ネットワークワークステー ション上にある Shared Services は、専用の Shared Services サーバー を参照します。この場合、サーバーに設定されたワークステーションから Shared Services を通して得たすべての情報にアクセスすることができま す。たとえば、どの機器がどのロケーションで利用可能であるか、またそ の機器の現在のステータス(オンライン、オフライン、エラー、実行中、 ノットレディなど)を確認することが可能です。

ネットワークワークステーションはリモートでコントロールできないため、 機器を設定した特定の PC からのみ機器を起動して設定できまます。

ネットワーク ワークステーションが設定されている OpenLAB CDS ChemStation を以下に示します。ネットワーク内には、複数のネットワー クワークステーションがある場合があります。図には 1 つの ChemStation インスタンスのみが示されていますが、同じマシンに複数の ChemStation および関連機器を設定することができます。

OpenLAB CDS システムアーキテクチャ 2 ネットワークワークステーション



図 3 OpenLAB CDS: ネットワークワークステーション

OpenLAB ECM を使用する場合もしない場合も、OpenLAB CDS ネットワーク ワークステーションコンフィグレーションを使用できます。ECM に接続し ている場合、各 ChemStation PC に保存されているデータは ECM のデータ 保存と同期します。ECM を使用した ChemStation についての詳細は、『ECM を使用した OpenLAB CDS ChemStation エディションのコンセプトガイド』 を参照してください。

分散システム

注記 久

分散システムコンフィグレーションでは、OpenLAB ECM バージョン 3.3.2 SP1 または 3.4.1 が必要です。

分散システムとして OpenLAB CDS がインストールされている場合、システ ムのどの PC からでも機器にアクセスし、実行することができます。

ネットワークワークステーションのインストールと同様に、Shared Services では、システム内のすべての機器の概要が示されます。任意の CDS クライアントから、Shared Services によって提供されるすべての情 報にアクセスできます。たとえば、どの機器がどのロケーションで利用可 能であるか、またその機器の現在のステータス(オンライン、オフライン、 エラー、実行中、ノットレディなど)を確認することが可能です。

ネットワークワークステーションのインストールとは対照的に、ネット ワーク内のすべての機器を設定して起動できます。機器ハードウェアコン フィグレーションは、Agilent 機器コントロール (AIC) マシン上にインス トールされます。AIC マシン上の ChemStation インスタンスには、リモー トデスクトップサービスクライアント経由で任意の CDS クライアントから アクセスできます。

リモートデスクトップ接続を経由して ChemStation にアクセスすると、 ChemStation セッションでより柔軟に操作することが可能です。たとえば、 オンラインで ChemStation の起動、シーケンスの開始を行い、次に ChemStation による AIC マシン上の実行をし続けてもリモートデスクトッ プ接続のみを切断することができます。他のユーザーも含め、ユーザーは、 異なる CDS クライアントから再びこのセッションにあとで接続し、オンラ イン ChemStation の操作を終了して、ChemStation をシャットダウンする ことができます。

以下の図は、OpenLAB CDS ChemStation Edition の分散システムのインス トールを示します。

OpenLAB CDS システムアーキテクチャ 2 分散システム



図 4 OpenLAB CDS: 分散システム

OpenLAB CDS の分散システムコンフィグレーションでは、必ず OpenLAB ECM システムへの接続が含まれます。各 AIC に保存されるデータは、ECM のデータ保存と同期します。ECM を使用した ChemStation についての詳細 は、『ECM を使用した OpenLAB CDS ChemStation エディションのコンセプ トガイド』を参照してください。 **2** OpenLAB CDS システムアーキテクチャ 分散システム



ChemStation のコンセプトとワークフロー

3 OpenLAB CDS ChemStation ライセンス

一般製品構成 28
ライセンス 30
ライセンスタイプ 30
ライセンス方式 30
ライセンス方式 30
ライセンスの主要機能 32
Agilent OpenLAB CDS 製品に含まれるライセンス機能 35
ライセンスの例 36
バリューライン (VL) のライセンス機能 38
Flexera ライセンスマネージャ 41

この章では、Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition の主要コンポーネントと機能について解説し、これらのコンポーネントと機能のライセンス形態について説明します。



3 OpenLAB CDS ChemStation ライセンス 一般製品構成

一般製品構成

製品 OpenLAB CDS ChemStation Edition は、機器コントロール、データ取 り込みとデータ解析(積分、定量、レポート)、自動化、およびカスタマイ ズのための複合ソフトウェアモジュールとして設計されています。測定器 特有のシングル機器製品は、たとえばガスクロマトグラフ、または液体ク ロマトグラフなど、一定の分離テクニックをコントロールする機能を提供 します。シングル機器コンフィグレーションは、ソフトウェアモジュール を追加すること(アドオン)で拡張することできます。

以下のセクションでは、製品モジュールについて説明します。製品ライセンスについての詳細は、『「ライセンス方式」30ページ図』を参照してください。

コアモジュール

コアモジュールでは(機器コントロールを除く)データ分析、自動化およ びカスタマイズの各機能を以下の機器タイプで使用可能です。

- ガスクロマトグラフィ (GC)
- 液体クロマトグラフィ (LC)
- キャピラリー電気泳動(CE)
- 外部イベントプロトコルを持つアナログデータ取り込み(A/D)

機器ドライバ

特定の機器タイプ向けの単一機器ドライバで、上記の機器をコントロール することが可能です。複数の機器ドライバをインストールすると、例えば 同一または異なる 2 つのクロマトグラフといったような、1 つ以上の分析 システムを Agilent ChemStation でコントロールすることができます。

ChemStation ソフトウェアの機器コントロール能力は、技術的な構成組み 合わせができるよう追加モジュールを購入して拡張することが可能です。

アドオン

取り込んだデータは、通常 2 次元(「2D」)です。つまり、検出器レスポン スを時間とともに測定しています。スペクトル検出器は、検出器レスポン スを第 3 の軸(波長または質量範囲など)にわたり追加して測定すること で、3 次元(「3D」)データを作成できます。以下のモジュールにより、こ の「3D」データの分析とレポートを行うことができます。

- ・ OpenLAB CDS ChemStation 3D UV アドオン
- ・ OpenLAB CDS ChemStation CE 3D MS アドオン
- ・ OpenLAB CDS ChemStation LC 3D MS アドオン
- OpenLAB CDS ChemStation LC/MS デコンボリューションおよびバイオア ナライザ

3 OpenLAB CDS ChemStation ライセンス ライセンス

ライセンス

ライセンスタイプ

OpenLAB CDS で導入された新しいライセンス形態では、ライセンスをより 効果的に使用できます。以前の ChemStation バージョンとは対照的に、機 器コントロール、ドライバ、およびアドオンのライセンスはフローティン グライセンスとなっています。起動するあらゆる機器は、ライセンス管理 から必要なライセンスを要求し、機器が終了するとライセンスを戻すとい う仕組みです。そのため、インストールした機器ごとに 1 つのライセンス ではなく、同時に実行する最大数の機器を取り扱うライセンスだけを購入 すればよいことになります。ライセンス管理は Shared Services の一部で す。

以下の通り、2 つのタイプのライセンスがあります。

- カウントライセンスは、関連ソフトウェアまたは機器モジュールごとに
 1 つ使用されます。
- 共有ライセンスは、PC または機器ごとに共有可能です。たとえば、 Agilent OpenLAB CDS ChemStation ライセンスは共有ライセンスです。 つまり、PC で ChemStation インスタンスを実行する数に関わらず PC 1 つに必要なライセンスは 1 つのみです。

60 日間有効のスタートアップライセンスを、すべての OpenLAB CDS のイ ンストール用に用意しています。有効期限は、アプリケーションを初めて 起動した日から起算されます。

ライセンス方式

以下の図は、さまざまなインストールのシナリオで、OpenLAB CDS に必要 なライセンスを示します。

- ワークステーション
 - ChemStation コアライセンス 1 個
 - 必要に応じて、機器ライセンスとアドオンライセンス。1台のワーク ステーションで複数の機器製品を実行することができます。

- ネットワークワークステーション
 - Shared Services サーバーライセンス 1 個
 - 各ネットワークワークステーションに ChemStation コアライセンス を各 1 個。複数のネットワークワークステーションを Shared Services サーバーに接続できます。
 - 必要に応じて、機器ライセンスとアドオンライセンス。1台のネット ワークワークステーションで複数の機器製品を実行することができます。
- 分散システム
 - Shared Services サーバーライセンス 1 個
 - 各 Agilent 機器コントロール (AIC) マシンに ChemStation コアラ イセンスを各 1 個。複数の AIC を Shared Services サーバーに接続 できます。
 - 必要に応じて、機器ライセンスとアドオンライセンス。1 台の AIC で複数の機器製品を実行することができます。

Agilent 機器コントロールライセンスと Agilent ドライバライセンスは、 常に Agilent 製品向けにバンドルされています。これらのライセンスは、 Shared Services ライセンス管理では 1 個の製品ライセンスとして示され ます。ライセンスファイルの中でのみ、これら項目は個別のラインとして 示されます。

3 OpenLAB CDS ChemStation ライセンス ライセンス

Distributed System Workstation Networked Workstation Add-on Add-on Add-on License License License Instrument Instrument Instrument Driver Driver Driver License License License Instrumenet Product Instrumenet Product Instrumenet Product Instrument Instrument Instrument Control Control Control License License License Workstation: **Networked Workstation:** AIC: **ChemStation Core License ChemStation Core License ChemStation Core License** OpenLAB OpenLAB Shared Services Server Shared Services Server License License

図 5 ライセンス方式

ライセンスの主要機能

ライセンスを必要とする主な機能は以下の通りです。アジレント製品の購入価格には、数種類の機能がすでにデフォルトとして含まれています。ア ジレント製品に含まれるライセンス機能は以下の通りです。

ライセンス機能	ライセンス タイプ	対象	コメント
AgilentOpenLABCDSChem Station	PC 内で共有	すべての ChemStation イン スタンス	これは、常に消費される ChemStation のフルコアライセンス です。LC フルドライバまたは GC フ ルドライバパッケージ (CE、ADC、 CE/MS、または LC/MS を含む)を 使用して最大 4 つの機器をサポー トします。
AgilentOpenLABCDSChem StationVL	PC 内で共有	すべての VL ChemStation イン スタンス	これは、常に消費される ChemStation バリューライン(VL) のコアライセンスです。VL ドライ バのみをサポートし、1120/1200 Compact LC または 7820 GC のみを最 大 4 つまでコントロールします。
AgilentOpenLABSharedSer vices	カウント	別サーバーで実行 中の Shared Services に対して のみ	OpenLAB コントロールパネルに追 加ライセンスは必要ありません。 また、 OpenLAB CDS ワークステー ションで実行中の Shared Services に も追加ライセンスは必要ありませ ん。
AgilentInstrumentControl	カウント	オンラインインス タンスのみ	ライセンスは、ChemStation が機器 に接続可能かどうかに関わらず消 費されます。機器コントロールラ イセンスはドライバ製品の一部で す。
AgilentDriversLC AgilentDriversGC AgilentDriversCE AgilentDriversADC AgilentDriversMS	カウント	オンラインインス タンスのみ	ライセンスは、 ChemStation が機器 に接続可能かどうかに関わらず消 費されます。

表1 主なライセンス機能

3 OpenLAB CDS ChemStation ライセンス ライセンス

表1 主なライセンス機能

ライセンス機能	ライセンス タイプ	対象	コメント
AgilentDriversLCVL AgilentDriversGCVL	カウント	オンラインインス タンスのみ	バリューライン (VL) ドライバを 個別に入手することはできません。 これらは機器 (1120/1220 Compact LC または 7820 GC) と常にセット になっています。 VL ドライバライセンスの機能は、 ChemStation VL のコアライセンス または ChemStation のフルコアラ イセンスと組み合わせることがで きます。
Add0n3DUV	(機器ごと に) 共有	オンラインおよび オフラインインス タンス (セット アップウィザード で 3D オプション が選択されている 場合のみ)	このライセンスはオプションです。 このライセンスが利用可能でない 場合は、ChemStation でスペクト ル分析は無効です。
AgilentAddOnMSDataAna Iysis	(機器ごと に) 共有	オンラインおよび オフラインインス タンス	MS が設定される場合は、アドオン MS データ分析は必須です。
AgilentAddOnMSDeconvo lution	(機器ごとに)共有	オンラインおよび オフラインインス タンス (セット アップウィザード でバイオアナライ ザオプションが選 択されている場合 のみ)	このライセンスは、デコンボ リューション搭載の LC/MS に対し てのみ必須です。

Agilent OpenLAB CDS 製品に含まれるライセンス機能

Agilent OpenLAB CDS 製品を購入すると、数種類のライセンス機能がデフォルトで含まれています。Agilent OpenLAB CDS 製品に含まれるライセンス機能は以下の通りです。

アジレント製品	ライセンス機能
OpenLAB CDS ChemStation ワークステーション	AgilentOpenLABCDSChemStation ¹
OpenLAB CDS ChemStation ワークステーション VL	AgilentOpenLABCDSChemStationVL ¹
OpenLAB CDS Shared Services サーバー SW	AgilentOpenLABSharedServices
OpenLAB CDS 機器コントロールライセンス	AgilentInstrumentControl AgilentDriversADC
OpenLAB CDS Agilent A/D 用機器ドライバ	AgilentInstrumentControl
OpenLAB CDS Agilent CE 用機器ドライバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversCE AddOn3DUV
OpenLAB CDS Agilent MS 機器ドライバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversMS AgilentAddOnMSDataAnalysis
OpenLAB CDS Agilent GC 用機器ドライバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversGC
OpenLAB CDS Agilent LC 用機器ドライバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLC
OpenLAB CDS ChemStation MS DA	AgilentAddOnMSDataAnalysis
OpenLAB CDS CS LC/MS デコンボリューション バイオアナライザ	AgilentAddOnMSDeconvolution

表 2 Agilent OpenLAB CDS 製品に含まれるライセンス機能

1 同時に最大4つの機器をサポートします。

- 3 OpenLAB CDS ChemStation ライセンス ライセンス
 - 注記 VL ドライバライセンスは個別に入手することはできません。これらのライセンスはそれぞれの機器と常にセットになっています。
 - LC VL ドライバ: 1120/1220 Compact LC 機器にバンドルされています。このライセンスにはその他の LC モジュールも含まれますが、ポンプモジュールは含まれません。
 - GC VL ドライバ: 782 0 GC 機器にバンドルされています。

ライセンスの例

例 1: ワークステーション (ChemStation フルコアライセンス付き)

数量	製品	ライセンス機能
1	OpenLAB CDS ChemStation ワークステー ション	AgilentOpenLABCDSChemStation
1	OpenLAB CDS Agilent LC 機器ドライバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLC
1	OpenLAB CDS Agilent CE 機器ドライバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversCE AddOn3DUV

表3 購入した製品および関連ライセンス機能

- スタンドアローンワークステーションには OpenLAB Shared Services の ライセンスは必要ありません。
- 3D オプションを有効にして LC ChemStation を起動すると、以下のライ センスが消費されます。1x OpenLAB CDS ChemStation、1x 機器コント ロール、1x LC ドライバ、1x アドオン 3D UV。
- 同じ PC 上で、CE ChemStation を起動したい場合は、ChemStation には、追加で機器コントロール 1 個、CE ドライバ 1 個、およびアドオン 3D UV 1 個が必要になります。アドオン 3D UV ライセンスがない場合、 ChemStation の起動に失敗します。
例 2: ネットワークワークステーション

表4 購入した製品および関連ライセンス機能

数量	製品	ライセンス機能
1	OpenLAB CDS Shared Services サーバー	AgilentOpenLABSharedServices
2	OpenLAB CDS ChemStation ワークス テーション	AgilentOpenLABCDSChemStation
1	OpenLAB CDS Agilent LC 機器ドライバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLC
1	OpenLAB CDS Agilent CE 機器ドライバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversCE AddOn3DUV

- OpenLAB Shared Services サーバーのライセンスは、Shared Services をサーバー上で起動するときに使用されます。
- PC1 で CE ChemStation を起動すると、以下のライセンスが消費されます。1x OpenLAB CDS ChemStation、1x 機器コントロール、1x CE ドライバ、1x アドオン 3D UV。
- PC2 で、3D オプションを有効にして LC ChemStation を起動すると、3D オプションは利用できませんという警告が表示されます。以下のライセ ンスが消費されます。1x OpenLAB CDS ChemStation、1x 機器コントロー ル、1x LC ドライバ。

例 3: 分散システム

表 5 購入した製品および関連ライセンス機能

数量	製品	ライセンス機能
1	OpenLAB CDS Shared Services サーバー	AgilentOpenLABSharedServices
1	OpenLAB CDS ChemStation ワークステー ション	AgilentOpenLABCDSChemStation

数量	製品	ライセンス機能
1	OpenLAB CDS Agilent LC/MS 機器ドラ イバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLC AgilentDriversMS AgilentAddOnMSDataAnalysis AddOn3DUV
1	OpenLAB CDS Agilent CE 機器ドライバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversCE AddOn3DUV

表 5 購入した製品および関連ライセンス機能

- OpenLAB CDS Shared Services サーバーのライセンスは、Shared Services をサーバーで起動するときに使用されます。
- AIC マシンで、CE ChemStation がリモートで起動すると、以下のライセンスが消費されます。1x OpenLAB CDS ChemStation、1x 機器コントロール、1x CE ドライバ、1x アドオン 3D UV。
- 同じ AIC マシンで、LC/MS ChemStation がリモートで起動しても、 ChemStation ライセンスを追加する必要はありません。以下のライセン スが消費されます。1x 機器コントロール、1x LC ドライバ、1x MS ドラ イバ、1x アドオン MS データ分析、1x アドオン 3D UV。

バリューライン(VL)のライセンス機能

OpenLAB CDS ChemStation エディションワークステーションのフルライセ ンスが不要な、特定の Agilent の機器があります。これらの機器をコント ロールするには、OpenLAB CDS ChemStation ワークステーションバリュー ライン (VL) ライセンスを取得して、機器コンフィグレーションで機器タ イプに Agilent LC VL システムまたは Agilent 7820 GC システムを使用し ます。VL ドライバライセンスは、それぞれの機器と常にセットになってお り、個別のライセンスとして入手することはできません。

以下の機器タイプは VL システムです。

・ LC VL システム

機器タイプ [Agilent LC VL システム] を使用すると、ポンプモジュー ル以外のすべてのモジュールを含む、Agilent 1120/1220 LC システムを コントロールすることができます。LC VL システムでは、OpenLAB CDS ChemStation エディションワークステーション VL コアライセンスと LC VL ドライバライセンスが必要です。対応するフルライセンスがある場合 には、そのライセンスでこの機器をコントロールすることもできます。

また、標準の LC システム機器タイプ([Agilent LC システム])を使用 して VL システムの機器を設定できますが、その場合 ChemStation のフ ルコアライセンスとフル LC ドライバライセンスが消費されます。

LC VL システムとの組み合わせで使用される場合も、3D UV アドオンに は、フルの [AddOn3DUV] ライセンスが常に必要です。

LC/MS のコンフィグレーションは LC VL システムでは実行できません。

・ GC VL システム

GC システムでは、[Agilent 7820 GC システム] 機器タイプのみが VL システムです。7820 GC システムでは、OpenLAB CDS ChemStation エ ディションワークステーション VL コアライセンスと GC VL ドライバラ イセンスが消費されますが、対応するフルライセンスがある場合には、 そのライセンスで機器をコントロールすることもできます。

注記

バリューラインシステムは、スタンドアローンワークステーションのみでサ ポートします。このシステムは、ネットワークワークステーションや分散シス テムでは実行できません。

VL とフルライセンスの組み合わせ

VL システムを起動すると、通常 1 個の ChemStation VL コアライセンス と 1 個の VL ドライバライセンスが消費されます。ただし、以下のケース のいずれかが該当する場合は、VL システムをコントローすることもできま す。

- ChemStation のフルコアライセンスと VL ドライバライセンスが利用可 能な場合
- ChemStation のフルコアライセンスとフルドライバライセンスが利用可能な場合

ただし明確にするため、できる限り専用のシステムを設定することをお勧めします。可能な場合は常に、同じワークステーションに VL システムのみ、またはフルシステムのみを設定するようにしてください。

3 OpenLAB CDS ChemStation ライセンス ライセンス

例:VL 専用コンフィグレーション

表6 購入した製品および関連ライセンス機能

数量	製品	ライセンス機能
1	OpenLAB CDS ChemStation ワークス テーション VL	AgilentOpenLABCDSChemStationVL
1	Agilent 1220 LC	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLCVL
1	Agilent 7820 GC	AgilentInstrumentControl AgilentDriversGCVL

- スタンドアローンワークステーションには OpenLAB Shared Services の ライセンスは必要ありません。
- Agilent 1220 LC を起動すると、以下のライセンスが消費されます。1x ChemStation VL、1x 機器コントロール、1x LC VL ドライバ。
- 同じ PC 上で、Agilent 7820 GC を起動したい場合は、ChemStation コ アライセンスは共有されるため、追加の ChemStation コアライセンスは 必要ありません。以下のライセンスが消費されます。1x 機器コントロー ル、1x GC VL ドライバ。

例: 1220 LC 機器と 1290 Infinity LC システムが混在するコン フィグレーション

а П	ライセンス機能
nLAB CDS ChemStation ワークス -ション	AgilentOpenLABCDSChemStation
ent LC 用の OpenLAB CDS 機器ド イバ	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLC
ent 1220 LC	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLCVL
	nLAB CDS ChemStation リークス -ション ent LC 用の OpenLAB CDS 機器ド / バ ent 1220 LC

表7 購入した製品および関連ライセンス機能

- スタンドアローンワークステーションには OpenLAB Shared Services の ライセンスは必要ありません。
- Agilent 1290 Infinity LC システム を起動すると、以下のライセンス が消費されます。1x ChemStation、1x 機器コントロール、1x LC ドライ バ。
- 同じ PC 上で、Agilent 1220 LC 機器を起動したい場合は、ChemStation コアライセンスは共有されるため、追加の ChemStation ライセンスは必 要ありません。両方のシステムとも、ChemStation のフルコアライセン スを使用して実行できます。以下のライセンスが消費されます。1x 機器 コントロール、1x LC VL ドライバ。
- コアライセンスが ChemStation VL ライセンスである場合には、起動で きるのは 1220 LC システムのみです。1290 Infinity LC システムは起 動できません。1290 Infinity LC システムは ChemStation VL ライセン スでは実行できません。さらに、ChemStation VL コアライセンスと、 Agilent LC システムのフルドライバライセンスの組み合わせはサポート しません。

Flexera ライセンスマネージャ

Shared Services では、Flexera 製の FlexNet Producer Suite と呼ばれ るサードパーティツールを使用してライセンスを管理しています。必要コ ンポーネントは、Shared Services と共にデフォルトでインストールされ ています。ライセンスサーバーは、ローカル PC、リモート Shared Services サーバー、既存の Flexera ライセンスマネージャを持つサー バーのいずれかになります。既存の Flexera ライセンスマネージャを利用 する場合、OpenLAB コントロールパネルにライセンスサーバーのホスト名 または IP アドレスを入力します。

Shared Services のライセンス管理で、追加の Windows サービスを実行す る必要があります。この Windows サービスは、Agilent OpenLAB ライセン スサーバーと呼ばれます。このサービスは、ライセンス管理を行うサー バー上で実行する必要があります。機器は、起動する度にライセンスサー バーサービスにライセンス取得のリクエストを出します。つまり、この サービスを実行している場合のみ機器を起動することができます。

3 OpenLAB CDS ChemStation ライセンス ライセンス



4

ChemStation のコンセプトとワークフロー

セキュリティとデータ整合性

セキュリティの側面 44 セキュリティ関連の Shared Services 44 ChemStation セッションロック 45 ChemStation 管理ツール 46 データ整合性 47

この章では、内蔵セキュリティ機能と FDA 21 CFR Part 11. に対す る準拠状況について説明します。また、Shared Services により提 供されるシステムセキュリティ機能についても説明します。



4 セキュリティとデータ整合性 セキュリティの側面

セキュリティの側面

OpenLAB CDS ではセキュリティ面を、主に OpenLAB Shared Services でカ バーしています。ChemStation にのみ関連する部分については、 ChemStation 管理ツールでカバーしています。

セキュリティ関連の Shared Services

セキュリティ関連の OpenLAB Shared Services 機能には以下が含まれます。

システムアクティビティログ

有効化すると、OpenLAB Shared Services により記録されたさまざまな メッセージが表示されます。これらメッセージはユーザー管理などその 他コンポーネントから来る場合と、機器モジュールから来る場合とがあ ります。機器メッセージには、エラーメッセージ、システムメッセー ジ、イベントメッセージなどがあります。ChemStation はこれらのイベ ントを独自の環境で記録しますが、アクティビティログにもイベントを 送信します。[システムアクティビティログ]は、イベントが表示に関 わらず、これらのイベントを記録します。イベントに関する詳細を得る には、作業ログブック ビューア内で対象行を拡大します。

診断

登録モジュールが作成するログファイル、トレースファイルなどに集中 的にアクセスすることができます。

• 認証プロバイダの選択

ユーザー、パスワード、ユーザーグループの既存のコンフィグレーショ ンを再利用するために、Windows あるいは OpenLAB ECM など複数の中か ら、認証プロバイダを選択することができます。もう 1 つの方法とし て、Shared Services を認証プロバイダとして利用することができます。

• ユーザー管理

Shared Services では高度なユーザー管理を利用できます。ユーザー管理の具体例には、グループやロールの設定、権限の割り当てなどがあります。

セキュリティの側面

• セキュリティポリシー

21 CFR Part 11 は、企業 / ラボにパスワードポリシーを定めるよう義務 付けています。Shared Services のユーザー管理を利用している場合、 特定のログインオプションやパスワード要件を設定することができま す。その他の認証プロバイダでは、この設定は認証システム(Windows ドメインなど)内に指定されています。

ChemStation セッションロック

ChemStation コンピュータを一定期間使用しない場合、ChemStation を ロックして他のユーザーによるプログラムへのアクセスを防止することが できます。この安全機能により、ChemStation への無許可アクセスを完全 にシャットアウトします。セッションロックを有効化すると、ChemStation での作業を続ける前にあなたまたは別のユーザーのログインが必要となり ます。

ChemStation にはセッションロックを有効化する以下のオプションがあります。

- ・ プライベート([ユーザー] > [セッションをロック] > [プライベート])
 : セッションロックを有効化したユーザーまたは [セッションロックを 解除] の権限を持つユーザーのみがログインできます。
- ・ 非プライベート ([ユーザー]> [セッションをロック]> [非プライ ベート]):有資格のユーザーがログインできます。例えばシフトの変 更で、担当者が ChemStation を離れる時に次のシフトの担当者が来るま でロックするというような場合に便利です。
- ツールバーロックボタン:ツールバーロックボタンで、ChemStation セッションをプライベートロックまたは非プライベートロックするための設定を行うことができます。
- タイムベース:Shared Services の設定に応じて、一定期間中にユーザー の操作がない場合に ChemStation を自動的にロックします(『「セキュリ ティポリシー」55ページ図』、[非アクティブタイムアウト]を参照)。
 タイムベースセッションロックを設定して ChemStation セッションをプ ライベートロックまたは非プライベートロックすることができます (『46ページ図 6』を参照)。

4 セキュリティとデータ整合性

セキュリティの側面

ChemStation 管理ツール

ChemStation 管理ツールでは、ChemStation のコンフィグレーションに 関連するいくつかの機能が用意されています。この機能の 1 つにセッショ ンロックの解除があるため、ChemStation 管理ツールへのアクセスは厳し く制限されています。

- ChemStation 管理ツールは、ChemStation PC でのみ開くことができます。分散システムは、関連 AIC でツールを開く必要があります。
- ローカルユーザーグループ [CSAdministrators] のメンバーであるユー ザーのみが起動できるようになっています。

😳 ChemStation 管理ツール
こログイン
🥅 セッションロックを解释除(<u>B</u>)
セッションロックの時間をもとにプライベートをロック(T)
— 一 🔂 ツールバーロックボタンでプライベートをロック(Q)

図 6 ChemStation 管理ツール

ChemStation 管理ツールでは、セッションロックの作成、解除のために以下のオプションを設定できます。

 「セッションロックを解除]: このチェックボックスを選択すると、「ロ グイン」ダイアログの「キャンセル」をクリックするだけであらゆる ユーザーがロックされた ChemStation にアクセスできるようになりま す。ChemStation がロック中で認証プロバイダが利用できない場合、こ のチェックボックスを選択することが ChemStation セッションにアクセ スするための唯一の方法となります。

上記により ChemStation ヘアクセスしたユーザーは、すべての ChemStation 機能に無制限でアクセスできるようになることにご注意ください。

- 「タイムベースセッションロックによるプライベートロック]: ChemStation がセッションタイムアウトによりロック中である場合、このセッションを解除できるのは現在のユーザーまたは必要な権限を持つ ユーザーのみです。
- [ツールバーロックボタンによるプライベートロック]: ChemStation が ツールバーのロックボタンを使用してロックされている場合、このセッ ションを解除できるのは現在のユーザーまたは必要な権限を持つユー ザーのみです。

46

注記

セキュリティとデータ整合性 4 データ整合性

データ整合性

結果データは、インストールされた OpenLAB CDS の設定に応じて、ローカ ル ChemStation PC または OpenLAB ECM のいずれかに保存されます。ロー カルワークステーション上にデータを保存する場合、データを手動でバッ クアップする必要があります。Agilent OpenLAB ECM を利用する場合に限 り、21 CFR Part 11 に完全準拠することが可能です。OpenLAB ECM は、21 CFR Part 11 に準拠してデータを保存します。OpenLAB ECM は、21 ントロールおよび監査証跡を行ってデータを安全に保存します。データ ファイルは、データ整合性と追跡可能性を確保するためバージョン化され ています。また、OpenLAB ECM では電子署名を利用してデータからサイン オフすることが可能です。OpenLAB ECM は、データを定期的に自動バック アップしアーカイブ化するよう設定可能です。

詳細は、『ECM を使用した OpenLAB CDS ChemStation エディションのコン セプトガイド』を参照してください。 4 セキュリティとデータ整合性 データ整合性



5 OpenLAB Shared Services

機器管理 50
ラボステータス全体の表示 51
ライセンス管理 52
システムアクティビティログ 53
認証プロバイダ 54
セキュリティポリシー 55
ユーザー管理 57
ユーザー 57
グループ 59
ロールと権限 59
個別ロケーション、機器に関する固有権限 60

OpenLAB コントロールパネルでは、Shared Services は、セントラ ルアクセス、セントラルコンフィグレーション、またはラボステー タス全体の表示などのコントロール機能を提供します。これらの機 能を、この章で詳細に説明します。



機器管理

OpenLAB コントロールパネル内に異なるロケーションツリーを作成し、関 連するロケーションへと機器を追加することが可能です。これらのロケー ションで、例えば部署や部屋やテーブルごとに、機器を体系化することが できます。各機器の名称、詳細説明、機器タイプといった基本情報が入力 可能です。

機器タイプは定義済みです。OpenLAB CDS をインストールするときに、 ChemStation システムまたは EZChrom システムを選択できます。選択した システムにより、機器管理で使用できる機器タイプが決定されます。

注記 ChemStation と EZChrom 機器を共存させることは OpenLAB CDS A.01.01 また は A.01.02 でサポートしていません。

OpenLAB CDS での権限に応じて、数種類の操作を機器上で行なうことが可能です。

- 機器情報(機器ステータス、機器詳細、アクティビティログ)の表示
- ・ ロケーションと機器ツリーの表示
- 機器情報の編集
- 機器の設定

機器コンフィグレーションはローカル PC に保存されますが、OpenLAB コントロールパネルからそのコンフィグレーションにアクセスできま す。

オンラインまたはオフラインでの機器の起動

機器のコンフィグレーションはローカル PC に保存されているため、起動できるのはその PC で設定されている機器のみです。

ユーザーの権限は、ロケーションや機器により異なる場合があります (『「個別ロケーション、機器に関する固有権限」60ページ図』を参照)。

ラボステータス全体の表示

OpenLAB コントロールパネルの [機器] ビューでは、ネットワークのすべての機器の概要が示されます。1 ページに要約されたすべての機器に関する下記の情報を確認することができます。

- カラーコードでの機器ステータス
- 機器名
- 機器のロケーション
- 機器タイプ
- コンフィグレーションの最終変更

ライセンス管理

ライセンスファイルを追加する前にまずライセンスを購入し、 SubscribeNet を利用してライセンスファイルを作成する必要があります。 新規ライセンスファイル作成についての詳細は、『ソフトウェアライセンス インストールガイド』を参照してください。

OpenLAB コントロールパネル内のライセンス管理で以下の機能を利用できます。

- ライセンスファイルをライセンスサーバーに追加できます。
- ライセンスモニタへ移動し、ライセンスサーバーにインストール済みの すべてのライセンスのプロパティを表示することが可能です。

ライセンスファイルの追加およびライセンスプロパティの表示についての 詳細は、OpenLAB コントロールパネルのオンラインヘルプを参照してくだ さい(**スタートアップ 〉ライセンス追加**)。

インストール済みライセンスについては以下のプロパティが表示されます。

- ・ [機能]:使用しているライセンスタイプを表示します(例: AgilentOpenLABCDSChemStation、AgilentInstrumentControl、 AgilentDriversLC)。
- [バージョン]: ライセンスがバージョン化されている場合、たとえば Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition C. 01. 01 の場合には 1.1 な どのように、バージョン番号を見ることができます。バージョン化され ていないライセンスの場合には、バージョンは常に 1.0 として表示され ます。
- 「使用数(使用可能数)]: 現在使用中のライセンスの数(括弧内はライセンスの総数)を示します。新しいライセンス形態では、ライセンスはソフトウェアインスタンスの実行中にのみ使用されます(『「ライセンスタイプ」30ページ図』を参照)。
- [使用期限]: ライセンスが期間限定である場合、有効期限が表示されます。

利用可能なライセンスがゼロになる場合、またはプールにないライセンス を必要とするソフトウェアインスタンスを起動した場合、[警告]ペイン が表示されます。

OpenLAB Shared Services 5 システムアクティビティログ

システムアクティビティログ

システムアクティビティログには、Shared Services や機器に関連するさ まざまなイベントが含まれます。特定のイベントのみを、特定の時間範囲 で、特定のユーザーが作成したものまたは特定の内容を含むものに限定し て、表示するようリストをフィルタリングできます。

以下のイベントタイプが記録されます。

- ・ システム
- 機器管理
- 機器
- プロジェクト管理
- 機器コントローラ
- ユーザー
- グループ
- セキュリティ
- プリンタ
- ライセンス

認証プロバイダ

認証プロバイダは、システムにログインするユーザーを識別証明するため に使用されます。Shared Services は以下の認証プロバイダをサポートし ます。

・ [なし]

このモードでは、OpenLAB コントロールパネルにアクセスする際にログ イン画面が表示されません。ユーザーは、セキュリティ解除されている アプリケーションへと自動的にログインします。ログエントリには「無 名」として記録されます。認証プロバイダ [**なし**]に設定すると、 OpenLAB コントロールパネルでセキュリティポリシーおよびユーザー管 理ノードが非表示となります。

・[内部]

内部モードでは、ユーザーの資格情報が Shared Services データベース に保存されます。その他のユーザーをセットアップする前に、Shared Services のための管理者アカウントを作成するよう促されます。これ は新規ユーザーを作成できるシステム内唯一のモードであり、その他の モードではシステム既存のユーザーのマッピングしかできません。

・ [Windows ローカル] または [Windows ドメイン]

既存の Windows ユーザーを Shared Services にインポートします。こ の認証は、ローカル Windows のユーザー管理、Windows Active Directory ドメイン、Enterprise 内の NT 4.0 ドメインのいずれかで行 われます。Shared Services は、マッピングされたユーザーの ID およ びパスワードのみを使用します。認証はそのまま Shared Services で設 定されます。

• ECM

ECM モードでは、OpenLAB ECM システムが認証を行います。OpenLAB コ ントロールパネルを起動すると、ユーザー確認のための ECM 資格情報が プロンプト表示されます。既存 ECM ユーザーを Shared Services の管 理者として選択しなければなりません。検索機能を利用して特定の ECM ユーザーを見つけることができます。Shared Services は、マッピング されたユーザーの ID およびパスワードのみを使用します。認証はその まま Shared Services で設定されます。

セキュリティポリシー

[なし] ではなく、認証プロバイダを選択する場合のみ、セキュリティポリ シーが利用できます。

認証プロバイダが [内部] である場合、OpenLAB コントロールパネルに、 以下で説明するすべてのパラメータを設定できます。外部の認証プロバイ ダを使用すると、OpenLAB コントロールパネルに非アクティブの時間のみ を設定できますが、その他のパラメータはすべて外部システムによって定 義されます。

21 CFR Part 11 の必要事項についての詳細は、『ECM を使用した OpenLAB CDS ChemStation エディションのコンセプトガイド』を参照してください。

設定	説明	21 CFR Part 11 要件
パスワードの長さ	ユーザーがパスワードを変 更する場合、最低限の任意 文字数を満たすパスワード を入力しなければなりませ ん。デフォルト設定は5で す。 [内部]認証プロバイダで のみ利用可能です。	最低 5 文字の長さの パスワードが必要で す。
パスワード有効期間 (日)	デフォルト値は 30 日です。 この期間後にユーザーがロ グインしようとすると、パ スワードの変更を促すシス テムメッセージが出ます。 有効期限は、最後のパス ワード変更時または新規デ フォルトパスワードを持つ ユーザーの作成時から開始 されます。 [内部]認証プロバイダで のみ利用可能です。	有効期限は 180 日以 下に設定することを お奨めします。

表 8 セキュリティポリシー設定

設定	説明	21 CFR Part 11 要件
アカウントロックまで のログイン試行回数	無効なユーザー情報で何度 もログインを試行した場合、 そのユーザーを一定期間シ ステムからロックアウトし ます。有効なユーザー資格 情報を用いてもログインが できなくなります。許容す るログイン試行回数を定義 できます。 [内部]認証プロバイダで のみ利用可能です。	許容ログイン試行回 数は、3 回に制限す ることをお奨めしま す。
アカウントロック時間 (分)	ユーザーがアカウントロッ クまでのログイン試行回数 を超過したときに、再試行 可能になるまでに経過しな ければならない時間です。 [内部]認証プロバイダで のみ利用可能です。	
アプリケーションロッ ク前の無通信時間	コントロールパネルを使用 しない状態がこの時間続く と、ユーザーインタフェー スがロックされます。この セッティングは、 ChemStation におけるタイ ムベースセッションロック の設定にも利用されます。	

表8 セキュリティポリシー設定

ユーザー管理

Shared Services では、特定のロールをユーザーまたはユーザーグループ に割り当てることができます。1 人のユーザーが複数グループのメンバー である場合もあります。

各グループに対して特定のロールを割り当てる必要があります。単一ユー ザーに対してロールを割り当てることもできますが、簡素化のためロール の割り当てはグループレベルで行うことを推奨します。

ロールには多くの固有権限が付随しており、それら権限によりユーザーは OpenLAB コントロールパネルおよび ChemStation での表示と実行が許可さ れます。

ユーザー

新規内部ユーザーを作成するには以下の情報が必要です。

値 説明 必須 システムにログインするためのユー 名前 はい ザー名 説明 ユーザーについての追加情報(部署、 いいえ 機能など) パスワード ユーザー用のパスワード。セキュリ はい ティポリシーで定義されている長さ以 上のもの。 ユーザーの電子メールアドレス 電子メールアドレス いいえ フルネーム ユーザーのフルネーム いいえ 連絡先情報 一般的な間い合わせ先情報(電話番号、 いいえ ポケットベルなど)

表9 ユーザー資格情報

表(. 9	ユーち	げー資	格情報
----	-----	-----	-----	-----

値	説明	必須
ユーザーを無効にする	チェックボックスを選択するとユー ザーを無効にします。無効にされた ユーザーはログインすることができな くなります。ログイン失敗を何度も繰 り返すと、そのユーザーは自動的に無 効にされます。 ユーザーが無効にされると、チェック ボックスの代わりに対応するメッセー ジが表示されます。一定時間が経過す ると([セキュリティポリシー] 設定 内の[アカウントロック時間]を参 照)、ユーザーは自動的に再び有効とな ります。	いいえ
ユーザーはパスワード を変更できない	ユーザーが自分自身のパスワードを変 更可能かどうかを示すフラグです。デ フォルトではフラグはオフになってい ます(つまり、ユーザーは自身のパス ワードを変更できます)。	いいえ
ユーザーは次回ログイ ン時にパスワードの変 更が必要	オンになっている場合、ユーザーは次 のログインの際に自身のパスワードを 変更しなければなりません。ユーザー がパスワードを変更すると、このフラ グは自動的にオフになります。このフ ラグは、デフォルトでは新規ユーザー 向けにオンになっています。	いいえ
グループメンバーシッ プ	ユーザーを関連するグループに割り当 てます。	
ロールメンバーシップ	ロールを直接ユーザーに割り当てます。	

外部認証プロバイダ (ECM または Windows) を利用する場合、新規ユー ザーを作成することはできません。代わりに認証システム内の既存ユー ザーをインポートする必要があります。検索機能を利用して、認証システ ム内の特定ユーザーを見つけることができます。OpenLAB コントロールパ ネルでこれらの外部ユーザー用のロールを管理できますが、ユーザー名や

パスワードといった実際のユーザー資格情報を管理することはできません。 外部ユーザーを削除するには、OpenLAB コントロールパネル内でユーザー をマッピング解除します。当該ユーザーは外部認証システムにそのまま残 ります。

グループ

外部認証プロバイダを利用する場合、外部システムに既存のグループ名を インポートするか、新規内部グループを作成するかのいずれかが可能です。 マッピングおよび作成できるグループの数に制限はありません。

外部システムまたは OpenLAB コントロールパネルのグループにユーザーを 割り当てることができます。OpenLAB CDS にのみ関係のある追加のユー ザー割り当てが必要な場合には、OpenLAB コントロールパネルに作成しま す。割り当てが必要でない場合は、グループをインポートして、そのグ ループに必要なロールを割り当てるだけで十分です。

グループを削除またはマッピング解除する場合、そのグループのメンバー であるユーザーに対する変更は行われません。

ロールと権限

ロールは権限をユーザーまたはユーザーグループに割り当てるために使用 され、全体的にまたは特定の機器、ロケーションごとに割り当てることが 可能です。システムには定義済みロールのリストが、システムインスタ レーションの一部としてインストールされています([機器管理者]、 [ChemStation ラボマネージャ]、[ChemStation オペレータ]など)。各 ロールには、固有の権限が割り当てられています。

権限は、主要な3 つのロールタイプに従ってグループ化されています。権限をロールに割り当てる場合、まず必要なロールタイプを選択してからそのロールタイプに関連する権限を選択します。各ロールは、特定のロールタイプ1 つに対応する権限のみを有します。定義済みロールである[**すべて**]のみが唯一の例外で、このロールはすべてのロールタイプのすべての 権限を有します。ユーザーまたはグループがシステム機能を実行するためには、複数ロールが必要な場合があります。例えば、ロール ChemStation

ユーザー管理

オペレータを有するユーザーには、機器を実行する権限を持つ**機器ユーザー** といった別のロールが常に必要です。

表 10 ロールタイプの説明

ロールタイプ	説明
管理権限	これらの権限はユーザーまたはグループに対して全体 的に割り当てられ、機器、ロケーションレベルで変更 することはできません。代表的な管理権限に、[バック アップと復元]、[セキュリティの管理]、[プリンタ の管理] などがあります。
機器権限	これらの権限は、全体的にまたは機器、ロケーション レベルで割り当てることが可能です。機器に関する権 限には、[機器またはロケーションの表示]や[機器 の実行]などがあります。 OpenLAB コントロールパネルのロケーションと機器ツ リーを閲覧するには、全体レベルで[機器またはロ ケーションの表示]の権限が必要となります。
プロジェクト権限	ChemStation C.01.01 はプロジェクトをサポートして いないため、ChemStation アプリケーション権限は ユーザー全体に割り当てられます。ChemStation では 作業中のデータに関わらず、これらの権限がユーザー に割り当てられます。

権限リストについての詳細は、『「OpenLAB Shared Services の権限」251 ページ 図』をご覧ください。

個別ロケーション、機器に関する固有権限

デフォルトでは、ユーザーまたはグループのロールは全体的に設定されています。すなわち、ユーザーまたはグループは、すべてのロケーションとすべての機器に関して同じロールを有しています。ロールの設定は、ルートノード [機器]から継承されます。ある特定のロケーションまたは機器に関する異なるロールをユーザーまたはグループに割り当てるには、必要なノードの [権限を編集]ダイアログで [アクセス制御を親から継承] チェックボックスを未選択にします。その後、特定のロケーションまたは 機器についてのみ有効となる異なるロールを割り当てることが可能になり ます。

例えば、あるユーザーはすべてのロケーションでグループ [ChemStation オペレータ]のメンバーとなりますが、ある特定ロケーションではグループ [機器管理者]のメンバーとなります。

5 OpenLAB Shared Services ユーザー管理



ChemStation のコンセプトとワークフロー

6 OpenLAB CDS ChemStation Edition の基本概念

リモート機器コントロール 64 ChemStation ソフトウェアについて 67 オペレーティングシステム 67 メソッドおよびシーケンス 67 システムコンフィグレーション 67 データモデル 68 ファイルの命名規則 68 ソフトウェアユーザーインターフェイス 70 データ取り込み 73 データ解析 74 レポート作成 77 ユーティリティと互換性 77 カスタマイズ 78 自動化 78 GLP 80 ChemStation データ構造 83 ChemStation データ構造 83

この章では、リモートコントロール、グラフィカルインターフェイ ス、および ChemStation 表示など、ChemStation での操作に使用す る原則について説明します。



リモート機器コントロール

分散システムコンフィグレーションでは、OpenLAB Shared Services サー バーに接続される任意の OpenLAB コントロールパネルから ChemStation 機器を設定および起動することが可能です。

機器の起動

機器を設定または起動するには、OpenLAB コントロールパネルで [機器コ ンフィグレーション]、[オンライン起動]、および [オフライン起動] ボタン を使用することができます。ワークステーションまたはネットワークワー クステーションのコンフィグレーションでのように、[機器コンフィグレー ション] ダイアログがローカル PC で実行します。ただし、分散システム コンフィグレーションでは、ChemStation アプリケーション自体は Agilent Instrument Control (AIC) マシンで実行します。アプリケーショ ンには、AIC マシンへのリモートデスクトップ接続を経由してアクセスし ます。

リモート ChemStation ウィンドウは、OpenLab コントロールパネルから独 立して表示されます。機器を起動し、コントロールパネルを閉じて、機器 を続けて操作することができます。また、異なるログオン認証を使用して、 同じクライアントで OpenLAB コントロールパネルの複数のインスタンスを 実行できます。さまざまな認証は、対応する OpenLAB コントロールパネル から起動する機器に影響します。

機器名と AIC 名の両方を含む、ウィンドウのタイトルによってリモート AIC マシンで実行中の機器を識別できます。

セッション切断

AIC で実行中の機器は、リモートデスクトップ接続で開いたクライアント から独立しています。たとえばネットワークの不具合のためにクライアン トが切断する場合は、機器で実行中のシーケンスは続けて影響を受けるこ とはありません。ネットワークがいったん回復して機器を再び制御できる ようにするには、[オンライン起動] または [オフライン起動] ボタンを再 びクリックするだけです。

リモート機器コントロール

意図的に切断するには、[**閉じる**] ボタンをクリックするか、[ファイル] > [終了] を選択します。 [**閉じる**] ダイアログでは、追加の [**切断**] ボタン が提供されます。切断して、機器を実行したままリモートデスクトップ接 続をオフにします。

シーケンス実行中は、リモートデスクトップ接続を切断することができます。

この機器に再接続するには、OpenLAB コントロールパネルで [オンライン 起動] または [オフライン起動] ボタンをクリックするだけです。再接続 は、OpenLAB Shared Services サーバーに接続される任意の OpenLAB コン トロールパネルから行うことができます。

[オフライン起動]をクリックしてオンライン機器に再接続する場合、オン ライン機器用とオフライン機器用の2つの機器ウィンドウが表示されま す。

セッション引き継ぎ

注記

既存のセッションは、異なる PC の OpenLAB コントロールパネルで [オン ラインの起動] または [オフラインの起動] ボタンをクリックして、引き継 ぐことができます。

PC 1 の OpenLAB コントロールパネルから機器を起動し、同じユーザー認 証を使用して PC 2 の Open LAB コントロールパネルにログオンし、そこ で同じ機器を起動する場合は、既存のセッションを引き継ぐだけで、PC 1 で開始した内容を PC 2 で継続します。

別のユーザーが異なる PC で OpenLAB コントロールパネルから機器を起動 した場合、元のユーザーは、そのセッションも引き継ぐことができます。 この場合、もう一方のユーザーには、元のユーザーがそのセッションを引 き継ぐ旨のメッセージが通知されます。その一方のユーザーがこのメッ セージに気付いたらすぐに、この機器ウィンドウは、このユーザーの PC で閉じられ、元のユーザーの PC で開きます。もう一方のユーザーは、そ のセッションを引き継いだユーザーを通知するメッセージを受け取ります。

注記 新ユーザーと前のユーザーが同じ認証を持っている場合は、警告は表示されません。

リモート機器コントロール

オンライン機器とオフライン機器は、同じセッションに含まれているため、 常に一緒に転送されます。オンライン機器とオフライン機器がすでにセッ ションで起動している場合、[オンラインの起動]または [オフラインの起 動]ボタンをクリックしたかどうかに関わらず、この引き継ぎで双方の機 器のコントロールが転送されます。[オフラインの起動]をクリックし、そ のセッションにオンライン機器のみが含まれている場合、またはその逆の 場合は、オンライン機器用とオフライン機器用の2つの機器ウィンドウが 表示されます。

ChemStation ソフトウェアについて

オペレーティングシステム

ChemStation C.01.03 は、Microsoft Windows XP Professional SP3、 Windows Vista Business SP2 または Windows 7 を必要とします。

ChemStation のコントロールチャート機能は Microsoft Excel を必要とします。

メソッドおよびシーケンス

分析メソッドは、分析を実行する方法を記述したものです。これには、積 分、定量およびレポートを含む、機器コントロール、データ取り込みおよ び解析に関するすべてのパラメータが含まれています。システムは、多数 のサンプルから異なるメソッドでデータを取り込むように設定できます。 この操作のためのコントロールファイルはシーケンスと呼ばれ、個別のサ ンプル情報、適切なメソッドの参照、および自動的なリキャリブレーショ ンの条件が含まれます。メソッドおよびシーケンスについての詳細は、 『「自動化 / シーケンス」119ページ 図』とオンラインヘルプシステムを参 照してください。

システムコンフィグレーション

機器システムのコンフィグレーションは、コンフィグレーションエディタ プログラムを起動する OpenLAB コントロールパネルから行います。これを 使えば、機器の GPIB または IP アドレス、データ、シーケンスおよびメ ソッドのディレクトリ、ChemStation ソフトウェアの画面で使用する色を 定義することができます。

ChemStation ソフトウェアについて

データモデル

ChemStation ソフトウェアは、レジスタと呼ばれるメモリ構造体に基づく データモデルに従って設計されています。レジスタは、多目的の構造体で、 分析データと、2次元の情報(時間/強度など)および3次元の情報(時間/強度/波長など)の両方の情報を格納できます。

ChemStation は、レジスタの構築、拡張、抽出、および主要なデータを変 更しない場合に編集を行うためのコマンドと機能を提供します。詳細は、 $[~ \mu J] > [= ¬ ン F]$ から、ChemStation のオンラインリファレンスを 参照してください。

ファイルの命名規則

命名規則

以下の規則によって、ChemStation ではファイルとディレクトリで有効な 名前の作成と処理が行えます。

以下の文字はファイルまたはディレクトリ名には使えません。

<>: " / ¥ | @ % * ? ' & 空白 (スペース) など。

これらの文字をファイルまたはディレクトリ名に使用すると、ChemStation にファイルをロードする際にエラーが発生する原因となることがあります。 さらに、これらの文字がインストールフォルダに使用されている場合、解 析画面の起動は始まりません。%の文字がインストールフォルダに使用さ れている場合、一部の [Agilent ChemStation C.01.03] のショートカット は適切に動作しません。

以下の規則が追加で適用されます。

表 11 制限された文字

ChemStation パラメータ	文字
メソッドファイル名 :	% および .(小数点) は使用できません
データファイル名(プレフィッ クス / カウンタ)	空白にすることはできません

ChemStation ソフトウェアについて

表 11 制限された文字

ChemStation パラメータ	文字
データサブディレクトリおよび	[] + = ; , . (小数点)、スペースは使
シーケンスサブディレクトリ :	用できません

次の予約済みデバイス名は、ファイル名としては使用できません。

• CON, PRN, AUX, NUL

注記

- COMx (ここで x は 1~9の数字)
- LPT1x (ここで x は 1~9の数字)

また、この名前を拡張子の前に付けないでください (Nul.txt など)。

| 英語、日本語、中国語のオペレーティングシステムで、命名規則をテストして います。Agilent は英語以外のオペレーティングシステムでのサポートステー トメントおよび特殊文字を提供できません。

ChemStation ファイル名とサブディレクトリの最大の長さ

ファイル名およびサブディレクトリの Agilent ChemStation の仕様は、以下に記載されています。

表 12 ChemStation ファイル名とサブディレクトリの最大の長さ

データファイル / サブディレ クトリ / パス	最大長	自動付加	例
データファイル名	38	.D	Demodad.d
プレフィックス / カウンタを 使用するデータファイル名	15	. D	longname000001.d
メソッド、シーケンス、ハイ パーシーケンス、ライブラ リ、カスタマイズされたレ ポートテンプレート	40	. M . S . HYP . UVL . FRP	def_lc.m def_lc.s def_lc.hyp demodad.uvl areapct.frp
データファイルサブディレク トリ	40		demo(サンプル情報で 入力)

ChemStation ソフトウェアについて

データファイル / サブディレ クトリ / パス	最大長	自動付加	例
データシーケンスサブディレ クトリ	40		demo(シーケンスパラ メータで入力)
結果セット名	40		test_date_time(シー ケンスプレファレンス を使用して作成)
データパス メソッドパス シーケンスパス ハイパーシーケンス パス ライブラリパス カスタマイズされたレポート テンプレートパス	100	100	c:¥chem32¥1¥data c:¥chem32¥1¥methods c:¥chem32¥1¥sequence c:¥chem32¥1¥hyper c:¥chem32¥speclib c:¥chem32¥repstyle

表 12 ChemStation ファイル名とサブディレクトリの最大の長さ

ChemStation のすべてのログブックはシステムメッセージを拡張フォー マットでレポートし、情報文字列は複数行にわたって印刷されます。シー ケンスレポートなどの特定のレポートは、すべての情報がレポートテンプ レートに収まるように、ファイル名を切り詰めることがあります。

ソフトウェアユーザーインターフェイス

ChemStation のユーザーインターフェイスは、ビュー分けのデザインに なっており、ソフトウェアの機能を代表的な分析タスクに従ってグループ 化されています。以下の標準的なビューは、すべてのソフトウェアコン フィグレーションに存在します。

- [メソッド&ランコントロール]:機器コントロールおよびデータ取り込み
- ・ [データ解析]: 取り込んだデータの再解析
- [レビュー]:指定したレポートテンプレートを使用したデータの再確認
- ・ [レポートレイアウト]: レポートレイアウトの設計

ChemStation ソフトウェアについて

追加データ解析モジュール、または機器の診断およびベリフィケーション をサポートする機器コンフィグレーションを注文した場合には、追加の ビューが存在します。機器オペレータが、構成済みの使いやすいテーブル からサンプルを分析するほうが望ましい場合には、[ChemStation コンパニ オン]ビューが利用可能です。

ナビゲーションペインにはナビゲーションボタンがあり、ChemStation の ビュー、およびツリーベースの ChemStation エクスプローラを素早く切り 替えることができます。ChemStation エクスプローラの内容はビューに応 じて変わり、異なる ChemStation のエレメントにアクセスできます。

それぞれのビューは、メニューとツールバーを含む、標準的なユーザーエ レメントのセットから構成されています。標準ツールバーを使えば、メ ソッドやシーケンスなど、共通のシステム仕様情報に素早くアクセスする ことができます。[メソッド&ランコントロール]ビューには、システム ステータスバー、シングルの分析または自動分析を構成できるサンプル情 報エリア、および GC、CE および LC コンフィグレーションの視覚的な機 器インタフェースダイアグラムが組み込まれています。視覚的な機器イン タフェースダイアグラムはホットスポットを使用しており、機器パラメー タや、各分析の進行に伴いステータスをアニメーション化したグラフィカ ルな概要に素早くアクセスすることができます。視覚的な機器インタ フェースダイアグラムは必要でないときにはオフにすることができ、メモ リや Windows の他のリソースを節約できます。

[データ解析]ビューでは、データ解析モードに応じて標準的なツール バーが拡張されます。これらのデータ解析モードには、再計算、再解析, 積分、キャリブレーション、レポート、注釈、シグナル比較、およびモ ジュールがインストールされている場合にはその他の特別なモードが含ま れます。これら個別のデータ解析モジュールはそれぞれ、モード固有の ツールセットによってサポートされます。

[レビュー]ビューは、その機器でインテリジェントレポートの使用が選 択されている場合に利用可能です。このビューでは、柔軟にデータをレ ビューすることができます。あらゆるデータファイルを組合わせてレ ビューのベースとして使用可能です。また、既存のレポートテンプレート に選択したデータを適用できます。選択したレポートテンプレートにより、 データの表示方法および生成レポートに含まれる情報タイプが決定されま す。ツールバーを利用して、生成レポートを印刷およびエクスポートする ことができます。

[レポートレイアウト]ビューでは、レポートテンプレートまたはレポー トスタイルのレイアウトを定義することができます。また、このタスクに

ChemStation ソフトウェアについて

固有のツールバーのセットも使います。このビューで表示されるレポート テンプレートエディタのタイプは、機器に設定されているレポートのタイ プにより異なります。クラシックレポートまたはインテリジェントレポー トのいずれかを利用可能です(『「レポート作成」215ページ図』を参照)。

ナビゲーションペイン

ChemStation ビューの左側にあるナビゲーションパネルは、主要な ChemStation 要素の多くへのアクセスを高速化するためや、ビューを素速 く切り替えられるように設計されています。ナビゲーションパネルには、 ツリーベースの ChemStation エクスプローラと、構成可能なボタンエリア があります。これにはまた、ChemStation ワークスペースが妨げられない ようにするための自動非表示機能があり、ナビゲーションボタンエリアの サイズ変更、および再配列などの標準的な機能も提供しています。

ナビゲーションボタン

特定のナビゲーションボタンをクリックすれば、ChemStation のビューを 切り替えることができます。ナビゲーションボタンのセクションは最小化、 拡張、再配置が行えます。

ChemStation エクスプローラ

ナビゲーションパネルの内容は、ビューに応じて変わります。[メソッド &ランコントロール]、[データ解析]、[レビュー]および[レポート レイアウト]では、ChemStation エクスプローラによって ChemStation の それぞれの要素にナビゲートされます。デフォルトでは、データ、メソッ ドおよびシーケンスのこれらの要素は、コンフィグレーションエディタの 設定に基づいています。[ビュー]メニューの[プレファレンス]オプ ションを利用して、メソッド、シーケンス、データロケーションのノード を指定することができます。

表 13 ナビゲーションペイン項目

ナビゲーションボタン	ChemStation エクスプローラ要素
メソッド & ランコントロール	シーケンステンプレート / マスターメソッ ド、結果セットメソッド
データ解析	データ / マスターメソッド、結果セットメ ソッド
ChemStation ソフトウェアについて

ナビゲーションボタン	ChemStation エクスプローラ要素
レビュー	データ / レポートテンプレート
レポートレイアウト	クラシックレポート:マスターメソッド インテリジェントレポート:レポートテン プレート
ベリフィケーション(LC およ び LC/MS)	ベリフィケーションビュー固有のショート カット
診断 (LC および LC/MS)	診断ビュー固有のショートカット
チューン (LC/MS)	チューンビュー固有のショートカット

表 13 ナビゲーションペイン項目

データ取り込み

機器のステータスは、ソフトウェアがウィンドウとして表示されていると きでも、アイコン化されたときでも継続してモニタされ、分析の経過時間 とともにディスプレイ上で更新されます。エラー、分析の開始および終了 時の機器の状態を含む、分析中に生じたトランザクションは、システムの ログブックに記録されます。その摘要が、データファイル毎に保存されま す。

液体クロマトグラフの流量、温度、圧力および溶媒の組成などの機器コン ディションは、各データファイルに記録、保存されます。これらの機器パ ラメータを表示、プロットして、各分析の品質を確認することができます。 実際にどのようなパラメータが記録されるかは、システムと構成機器の性 能の両方に応じて決まります。

機器が取り込んでいるデータをリアルタイムにモニタするために、いくつ かの表示ウィンドウを使用することができます。データは、mAU、ボルト、 ℃または bar など、実際の測定単位で表示されます。ウィンドウはそれぞ れ、複数のクロマトグラフ、電気泳動シグナル、圧力などの機器パラメー タを重ね書きで表示することができます。表示のデフォルト設定を、調整 し、システムに記憶させることができます。これによりユーザーは、自分 の設定を機器のデフォルトとして設定することができます。ウィンドウに はズーム機能があり、カーソルで任意の時点の特定のシグナルのレスポン スを表示することができます。

6 OpenLAB CDS ChemStation Edition の基本概念

ChemStation ソフトウェアについて

分析の間も、オフラインのコピーで ChemStation のすべての機能を使用す ることができます。取り込みを行っている間、オンラインセッションの データ解析部分にアクセスできないので、データの確認はオフラインセッ ションを実行する必要があります。

分析の完了前にデータの処理を開始したい場合は、スナップショット機能 を利用してください。スナップショットは、機器のオフラインセッション で取る必要があります。これは確認用としてすぐに表示されます。

視覚的な機器インターフェイスダイアグラムを含む、シグナルおよびス テータス情報ウィンドウのレイアウトは、自動的に保存されます。

データ取り込みについての詳細は、『「データ取り込み」111 ページ 図』お よびオンラインヘルプシステムを参照してください。

データ解析

データ解析-表示

[データ解析]ビューでは、標準的なツールバーが拡張され、再計算、再 解析、積分、キャリブレーション、レポート、注釈、およびシグナル比較 ツールセットを含む、タスクグループ化されたデータ解析機能が追加され ます。以下の主要なグラフィカル操作が可能になります。

- クロマトグラム / エレクトロフェログラム読み込み時に、単一または複数シグナルを表示
- 異なるサンプルのクロマトグラム / エレクトロフェログラムの重ね書き
- あるクロマトグラム / エレクトロフェログラムから他のものを減算
- 視覚的に比較しやすくするため、シグナルを縦または横に並べて表示
- 視覚的に比較しやすくするため、シグナルの上下または左右反転
- グラフィカルなズームおよびスクロール機能
- チックマーク、ベースライン、軸、リテンション/マイグレーションタイムおよび化合物名を含む、表示属性の調整(RT および化合物ラベルのフォント選択、表示のサイズと向きの調整、重ね書き表示または分割表示の選択および倍率の選択)

ChemStation ソフトウェアについて

- 構成機器の性能に応じた、クロマトグラム / エレクトロフェログラム表示への機器パラメータのグラフィカルな重ね書き
- ユーザー定義の注記を、フォント、サイズ、テキストの回転および色を 選択して、表示へ対話的に追加(一度定義した注記は、グラフィカルに 移動、編集または削除が可能)
- ディスプレイを Windows のクリップボードに、メタファイルとビット マップの両方の形式でコピー
- ・ ピックモード機能を使って、個別のデータポイントの値を検出器の単位 で表示
- デジタル化された時間/強度のポイントを Microsoft Windows のクリッ プボードにエクスポート

データ解析 – 積分

ChemStation のインテグレータアルゴリズムは、耐久性、信頼性および使いやすさに焦点を当てた、新しい世代の2番目のバージョンです。

データ解析 - 定量

ChemStation のデータ解析ビューのキャリブレーションモードを使うと、 以下を同時に表示することができます。

- キャリブレーション中のシグナルと、現在の化合物のリテンション/マ イグレーションタイムウィンドウの表示
- キャリブレーションパラメータの包括的な選択によって表示を構成できるキャリブレーションテーブル
- キャリブレーションされた化合物のキャリブレーションカーブ

すべてのキャリブレーションモードウィンドウはリンクしているので、い ずれかを変更すれと自動的に他のウィンドウに反映されます。このモード を使えば、キャリブレーションデータをグラフィカルに選択して、修正で きます。

定量は、ピーク面積または高さから計算された %、Norm%、ESTD、ESTD%、 ISTD、および ISTD% に基づいて行われます。キャリブレーションはマルチ レベルで行うことができ、複数の内部標準定義を設定することができます。 キャリブレーション履歴は自動的に保存され、リキャリブレーション計算 の重み付けに使用できます。

6 OpenLAB CDS ChemStation Edition の基本概念

ChemStation ソフトウェアについて

キャリブレーションと定量についての詳細は、『「キャリブレーション」199 ページ 図』を参照してください。

データ解析 – バッチレビュー

データ解析ビューでは、次の2つの追加ツールセットを使用できます。

- ナビゲーションテーブル
- ・ バッチレビュー

ナビゲーションテーブルでは、次の主要なグラフィカル操作が可能です。

- ソート、ドラッグアンドドロップオプション、カラムの選択、希望するナビゲーションテーブルのコンフィグレーションを指定するための項目のグループ化などの標準のテーブルコンフィグレーション機能
- シグナルの読み込み、重ね書き、データのエクスポート、レポートのプリントを行うためのマウス右クリック機能
- ナビゲーションテーブルの行を展開することによる、シグナルの詳細の レビュー
- 特定メソッドを使用する、シグナルのレビューと ChemStation レポートの作成

バッチレビューでは、以下の主要なグラフィカル操作が可能になります。

- (キャリブレーションされた)データファイルの自動またはマニュアルのレビューと再解析の定義
- キャリブレーションテーブルのリキャリブレーション
- キャリブレーションされたメソッドの化合物テーブルのレビュー
- 固有バッチレポートの作成

データ解析 – 再計算

再計算モードの機能を利用して、ナビゲーションテーブルに表示される データサブセットの結果またはレポートを素早く生成することが可能です。 サンプルを取り込んだ時のオリジナルシーケンスに依存することなく、自 分で組み合わせたデータセットを簡単に作成できます。再計算にはあらゆ るメソッドが利用可能です。使用メソッドは、シングルデータファイル (DA. M) ヘコピーされます。再計算中にキャリブレーションは行われませ ん。

ChemStation ソフトウェアについて

データ解析 - 再解析

再解析モードの機能により、シーケンス全体の再解析ができます。シーケンステーブルで定義されているメソッドおよびキャリブレーションサンプルの結果を利用して、サンプル結果を計算します。

レポート作成

インテリジェントレポートが選択されいる場合、[レビュー]ビューが有 効になりインテリジェントレポート用のレポートテンプレートエディタが [レポートレイアウト]ビューに表示されます。

インテリジェントレポートを有効化すると、インテリジェントレポートテ ンプレートとクラシックレポートテンプレートのどちらかを使用してシン グル注入レポートおよびシーケンスサマリレポートを作成することができ ます。権限がある場合には、インテリジェントレポート用にレポートテン プレートを作成することができます。

インテリジェントレポートを無効にすると、クラシックレポートテンプ レートのみを使用してシングル注入レポートおよびシーケンスサマリレ ポートを作成することができます。権限がある場合には、クラシックレ ポート用にレポートテンプレートを作成することができます。

ユーティリティと互換性

ChemStation は、データファイルを Analytical Instrument Association (AIA)、リビジョン 1.0、copyright 1992 の andi (Analytical Data Interchange) クロマトグラフフォーマットでインポートおよびエクスポー トできます。データのインポートは、コンプライアンスレベル 1 (サンプ ル情報およびシグナルデータ) で、データのエクスポートはコンプライア ンスレベル 2 (サンプル情報、シグナルデータ、および積分結果) でサ ポートされています。

ChemStation には、Microsoft Windows プラットフォームのダイナミック データ交換 (DDE) 規格をサポートするコマンドと機能が、DDE クライアン トおよび DDE サーバーの両方が含まれています。コマンドセットには、接 続の確立と解除、双方向の転送情報、およびリモート関数の実行のための コマンドが含まれています。

6 OpenLAB CDS ChemStation Edition の基本概念

ChemStation ソフトウェアについて

カスタマイズ

ChemStation は、効果的なコマンドセットを使用してカスタマイズするこ とができます。これらのコマンドはグループ化して、特定の機能を自動的 に実行できます。このようなグループはマクロと呼ばれます。マクロを記 述するユーザーは、自分独自の変数の定義、条件およびループ構造の作成、 ファイル処理およびユーザー対話を含む物理 I/O の実行、マクロのネス ト、スケジュール設定、および他の MS-DOS または Microsoft Windows ア プリケーションとのデータ交換を行えます。

カスタマイズについての詳細は、[**ヘルプ**] > [**コマンド**] から、 ChemStation のオンラインリファレンスを参照してください。

自動化

ChemStation ではマルチメソッドのシーケンスを計画し、実行することができます。

シーケンスパラメータは、自動生成されたファイル、または 15 字までの ユーザー定義のプレフィックスを持つ連番ファイルを使用するように定義 されます。ユーザーは、分析のすべてを実行するか、またはデータ再解析 だけのシーケンスを実行するかを選択できます。また、エラーまたはすべ ての分析が完了した後のシーケンスの終了時に、一連の固有シャットダウ ンコマンドまたはユーザー定義のシャットダウンマクロを選択することが できます。

シーケンステーブル、つまり実行する分析のリストは、表計算に似たユー ザーインターフェイスで構築することができ、ユーザーは、バイアル番号 およびサンプル名、分析メソッド、またサンプルアマウント、倍率や希釈 率、キャリブレーションの指定、データ交換パラメータ LIMSID および繰 り返し注入の回数を含む、サンプル定量パラメータを指定できます。コン フィグレーションされた機器およびモジュールに応じて、より多くの フィールドにアクセス可能です。例えば、Agilent 1100/1200 LC システム のフラクションコレクタが含まれている場合には、「Fract. Start」カラム がシーケンステーブルに表示されます。シーケンステーブルの様相は、 ユーザーが構成できます。ユーザーは、テーブル内の個々のセル間を移動 できます。また、個々のセル、行全体、または一連の行をコピー、カット またはペーストして、シーケンスを効率的または素早く構築することがで きます。

ChemStation ソフトウェアについて

サンプルは、シーケンステーブルで未知、キャリブレーション、またはコ ントロールサンプルタイプとして識別できます。サンプルタイプでは、次 のようにサンプルの特別な解析処理を決めます。

- 未知のサンプルは、メソッドの指定に従って解析され、レポートされます。
- キャリプレーションサンプルは、後述するように、メソッドの定量化合物をリキャブレートするために使用されます。
- コントロールサンプルは、メソッドで定義された各成分のリミットに基づいて解析されます。結果が、指定されたパラメータ範囲外になった場合には、シーケンスの実行は停止されます。

キャリブレーションサンプルは、シンプル、周期またはブラケットとして 定義されます。シンプルリキャブレーションは、シーケンスでキャリブ レーションサンプルが定義されるたびにリキャブレーションが行われるこ とを意味します。周期的リキャリブレーションは、一連の不明物の分析中 に、定義された間隔で行われることを意味します。一連の不明なサンプル をブラケットすると、2 つのキャリブレーションセットが分析されます。 そして、不明なサンプルの定量レポートは、2 つのキャリブレーション セットを平均したキャリブレーションテーブルを使用して計算されます。

部分シーケンス機能を使えば、ユーザーは、シーケンスの実行の順序を確 認できます。また、個々のサンプルエントリを選択して、再分析または再 解析することができます。すでに取り込んだデータの再解析を行う場合、 ユーザーは、再解析で元のサンプル定量データを使用するか、それとも シーケンスのサンプルテーブルに入力された新しいデータを使用するかを 指定できます。

他のメソッドでシングル注入優先サンプルを分析するため、シーケンスを 一時停止し、その後、自動化を中断せずに再開することができます。サン プルは、シーケンスの実行中にシーケンステーブルに追加することができ ます。

シーケンスと部分シーケンステーブルは、両方とも印刷できます。

シーケンスキューにより、複数のシーケンスを順番に自動実行させること が可能です。キューが一時停止にされない限り、データシステムがレディ になると、最初にキューに追加されたシーケンスが開始します。イージー シーケンステンプレートに基づいたシーケンス、従来の ChemStation シー ケンス、またはキューの一時停止をキューに追加できます。

6 OpenLAB CDS ChemStation Edition の基本概念

ChemStation ソフトウェアについて

キュープランを使用して、複数のシーケンスをセットとして準備し、その 計画をファイルシステムに保存することができます。計画したシーケンス プランを開始するには、プランを開き、それをシーケンスキューに追加し ます。この機能によって、夜間または週末の分析などの長期にわたるタス クを開始できます。

シーケンスについての詳細は、『「自動化 / シーケンス」119 ページ 図』お よびオンラインヘルプシステムを参照してください。

GLP

ChemStation は、国際的に認識されるデザインおよび開発標準で開発され、 特に、標準化された環境でユーザーが操作する上で助けとなる多くの機能 があります。これらの機能は、メソッドが意図した仕様に適しているかど うかについて、完全なメソッド指定とバリデーションの分野に関するもの で、そのシステムの操作をチェックし、データの追跡可能性、オリジナリ ティ、品質を確保することができます。

開発プロセス

各ソフトウェアパッケージに付属するバリデーション証明書には、ソフト ウェア開発および開発サイクルの一部として実行されたテストステップに ついて記述されています。開発プロセスは、ISO 9001 品質規格に登録され ています。

メソッドの仕様と使用

- グローバルなメソッド すべての機器およびデータ解析は1箇所に保存されます。メソッドには、キャリブレーション範囲外で適用されていない定量結果をチェックするための個々の化合物範囲の指定が含まれています。
- メソッドの変更履歴ログ機能を使えば、検証されたメソッドのユーザーは、メソッドがいつどのように変更されたかを自動的に記録することができます。ユーザーは、オプションとして、変更履歴ログにコメント理由を追加できます。変更履歴ログは、自動的に、メソッドの一部としてバイナリ形式で保存されます。レコードが許可されていない方法でアクセスされるのを防ぐため、レコードは後述の方法で、ユーザーアクセス

ChemStation ソフトウェアについて

スキームによって保護されています。変更履歴ログは表示し、印刷する ことができます。

- データ解析定量のセクションで説明しているように、クロマトグラフ/ エレクトロフェログラムの数およびシステムパフォーマンスパラメータ について、各メソッドの化合物単位で制限を割り当てることができま す。これらのパラメータ範囲を超える結果は、自動化のセクションで説 明しているように、自動化シーケンスの実行をコントロールするために 使用されます。これらは、適切な分析レポートに示されます。
- システムパフォーマンスまたはスータビリティレポート(前述のレポートのセクションを参照)では、分離の品質についての詳細な分析が提供されています。

異なるロールおよび権限を OpenLAB Shared Services に設定可能です。事 前に設定されている [ChemStation 管理者]、[ChemStation ラボマネー ジャ]、[ChemStation 分析者]、[ChemStation オペレータ]は、ご利用環 境の基本のロールになります。

メソッドの堅牢性

シーケンスサマリレポート(『「クラシックおよびインテリジェントレポート」220ページ図』を参照)には、メソッドの堅牢性をテストする手段が用意されています。クラシックレポートでは、ユーザーが選択した基準に対する拡張フォーマットレポートが傾向チャートとしてレポートされ、実際的な操作の限界を決定するために使用することができます。インテリジェントレポートでは、上限、下限ライン付きの傾向チャートを含む、自分自身のシーケンスサマリレポート用テンプレートを作成することができます。その後、これらの限界をメソッドに組み込んで、コントロールサンプルの分析中、メソッドが指定した範囲内で運転するようにすることができます。

システム操作

ChemStation ベリフィケーションキットは、標準ソフトウェアの一部で、 テストを実行したときに生成された結果と前もって記録された既知の値と を比較することにより、ソフトウェアのデータ解析部が正しくインストー ルされて、動作しているかどうかを、自動的にチェックします。ベリフィ ケーションキットを使えば、ユーザーは、自分独自のデータファイルとメ ソッドを定義して、テストの基礎とすることができます。

データの追跡可能性、オリジナリティおよび品質

ランタイムログブックには、システム全体のトランザクションログが記録 されています。これにはまた、異常なイベント(エラーや分析中のパラ メータ変更など)や、分析前後の機器の状態が記録されます。関連するロ グブックの摘要のコピーは、それぞれのデータファイルに保存されます。

圧力、流量、および温度など、それぞれの分析中に生じた実際の機器の状態は、構成された機器がこの機能をサポートしている場合には記録されます。データはそれからクロマトグラム / エレクトロフェログラムとともに表示して、特定の分析中の機器の実際の状態を示すことができます。またこれは、レポートにも含められます。

データファイルとともに保存されたメソッドは、分析時の実際のメソッド を記録するので、後ほど、レポートされたデータを完全に再構成すること ができます。メソッドは、すべての分析ステップが完了すると、保存され ます。

デフォルトでは、すべてのレポートにタイムスタンプと追跡可能なページ 番号 (page x of y の番号付けスタイル) が付けられます。ユーザーは、レ ポートごとに詳細さのレベルを、簡単なサマリレポートから完全なシステ ムの詳細にいたるまで選択することができます。

メソッドコンフィグレーションの一部として指定された GLP Save レジス タファイルは、サンプル情報、データ解析メソッド、クロマトグラフ/エ レクトロフェログラムシグナル、機器の状態、積分と定量の結果、レポー トデータおよび分析ログブックを含む、オリジナルのすべてのデータを、1 つのチェックサムで保護されたバイナリファイルに保存します。これは編 集不可能なバイナリフォーマットで、結果のオリジナリティを確保します。 ファイルには、データが再解析されたかどうかを示すリビジョニングス キームが含まれます。

コントロールサンプルタイプは、シーケンステーブルで定義することがで き、機器を無人で動作させるときに、機器のパフォーマンスを、品質コン トロールサンプルの結果を基にして自動的にチェックするために使用でき ます。結果が、ユーザーが指定した受け入れ可能な範囲内に入らなかった 場合には、機器の自動実行は停止されます。

ChemStation データ構造

ユニークなフォルダ作成を利用しない

このデータ構造は、ChemStation リビジョン B.01.03 以前に使用される データ構造に対応しています。シーケンス、メソッド、および作成した 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ま す。たとえば、メソッドはシーケンス内にて名前で参照され、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す。 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す。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 必要があります。結果セットを作成せずにこれを行うには、すべてをレ ポートに印刷するしかありません。

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、次の取り込みとすでに取り込んだデータの再解析のた めの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。
- 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、古いデータ構成スキームに従っ 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 以前でまだ動作しているシステムがあるラボで ChemStation C.01.03 を動作させる場合は、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利用する

データファイルとメソッドの関連性を強化するために、ChemStation B.02.01 で結果セットを導入しました(結果セットは以前はシーケンスコ ンテナと呼んでいました)。ChemStation と共に使用される場合、Agilent OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM) はこのデータコンセプトを取り

6 OpenLAB CDS ChemStation Edition の基本概念

ChemStation データ構造

入れています。これは、1 エントリとして、完全な結果セット(シーケン ス/メソッド/データファイル/レポートテンプレート)を ECM へ転送 (アーカイブ) できるようになったためです。



図 7 シーケンスによるデータ収集(ユニークなフォルダ作成オン)

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 します。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。

フォルダ Chem32¥repstyle にあるレポートテンプレートは、独自のレポートテンプレートを作成するための開始点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([結果 セット])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 ー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。

 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)が結果セットにコピーされます。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。インテリジェントレポートを使用している 場合は、関連するすべてのレポートテンプレート(*.rdl)も結果セッ トにコピーされます。

すべてのシーケンス関連タスク(取り込みとデータ解析など)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、取り込みシーケンスへのすべて の変更は、結果セット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 1 つ含まれます。以下のメソッド情報が保存されます。
 - 取り込みパラメータは ACQ. TXT として保存され、特定のデータファイルごとにオリジナルのメソッドパラメータを確実に保護します。このパラメータは、[メソッド]>[メソッドの表示] コマンドを使用して表示、印刷できます。
 - データ解析パラメータを含む完全なメソッドは、データ解析部分の完 了後に DA.M として保存されます。

結果セット利用の利点は以下の通りです。

- 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、 結果のデータファイルを一意の名前で独自の結果セットに保存します。
- 結果セットの概念では、データと共に以下のデータ分析に必要な全情報 を保存します。シーケンスファイルのコピー、すべてのメソッドのコ ピー、(インテリジェントレポート利用の場合)シーケンスで使用する

6 OpenLAB CDS ChemStation Edition の基本概念

ChemStation データ構造

レポートテンプレートのコピー。これらのシーケンスメソッドをシーケ ンスに固有に入力、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、結果セットの概 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。

- データ再計算と再解析は、ナビゲーションテーブルによって [データ解析] ビューで両方使用できます。
- 結果セットの概念より、Agilent OpenLAB エンタープライズコンテンツ マネージャー (ECM)を使用したデータ交換のために最適な前提条件が 提供されます。

ユニークなフォルダ作成をオン / オフにする

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、[プレファレンス]ダイアログ ボックスの [シーケンス] タブにある [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(『「プレファレンス -シーケンスタブ」149 ページ 図』を参照)。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、前の章で述べたようなデータ保存概念が可能になります。



ChemStation のコンセプトとワークフロー

メソッドの使用

7

メソッドの詳細 89 メソッドの各部分 90 メソッドのタイプ 92 マスターメソッド 92 シーケンスメソッド 92 データファイルメソッド 93 メソッドの作成 94 メソッドの編集 95 メソッドの編集可能な部分 95 メソッドの編集 95 オンラインモードでのメソッドの編集 97 オフラインモードでのメソッドの編集 - 98 メソッド管理 99 ChemStation エクスプローラのメソッドツリー 99 マスターメソッドの更新 99 メソッドの更新 100 メソッドの実行時に起こる事柄 103 メソッド操作のまとめ 103 プレランコマンドまたはマクロ (ランタイムチェックリスト) 106 データ取り込み(ランタイムチェックリスト) 106 データ解析 (ランタイムチェックリスト) 106 カスタマイズデータ解析 108 GLP データ保存 108 ポストランコマンドまたはマクロ 109 データファイルにメソッドのコピーを保存 109 データファイルと一緒にメソッドのコピーを DA.M という名 前で保存(ChemStation デフォルト) 109



ChemStation データ構造

メソッドは ChemStation の重要な部分であり、この章ではそのコン セプトについて詳細に説明します。

メソッドの詳細

メソッドには、取り込みやデータ解析のためのすべてのパラメータと、特定のサンプルのプレランおよびポストランタスクからなります(必要な場合)。

利用可能なメソッド(*.m)ファイルは、ChemStation エクスプローラに表示されます。素早く簡単にナビゲーションできるように、[プレファレンス]ダイアログボックスの[パス]タブを用いて、追加のメソッドの場所を ChemStation エクスプローラの選択ツリーに追加できます。

7 メソッドの使用 メソッドの各部分

メソッドの各部分

メソッドは、40 字までの英数字によって識別されます。ファイル名には、 メソッドであることを示す.M という拡張子が付けられます。メソッドは、 メソッドのコンポーネントに関連したそれぞれのファイルを含むディレク トリとして保存されます。

メソッドは、次の4つのコンポーネントから構成されます。

- メソッド情報
- 機器コントロール
- データ解析
- ランタイムチェックリスト

メソッド情報

このセクションでは、メソッドについての説明となる情報を定義します。

機器コントロール

機器またはそのコンポーネントをコントロールするパラメータを定義しま す。LC 機器の場合には、移動相組成、流量、注入量、検出器の波長などの パラメータが、ポンプ、インジェクタ、検出器をコントロールします。GC 機器の場合には、注入口温度、注入口圧力、パックドカラムの流量設定な どのパラメータが、機器をコントロールします。

データ解析

データ処理をコントロールするパラメータを定義します。

・ シグナル詳細

データ解析で使用するシグナルとそのプロパティを定義します。

・ 積分イベント

クロマトグラム / エレクトロフェログラムの特定のリテンション / マイ グレーションタイムで生じるタイムイベントを定義します。このタイム イベントは、シグナルを積分方法の変更に使用します。 ピーク認識

クロマトグラム / エレクトロフェログラムでのピークの識別に関連した データ処理パラメータを定義します。

ピーク定量

各ピークに対応するサンプル成分のアマウントまたは濃度を決める定量 計算に影響する、データ処理パラメータを定義します。

キャリブレーションおよびリキャリブレーション

キャリブレーションとその頻度に影響するデータ処理パラメータを定義 します。

・ カスタムフィールド

メソッドに使用できるカスタムフィールドに関連するサンプルまたは化 合物のプロパティを定義します。カスタムフィールドにより、サンプル 中のサンプルまたは化合物にカスタム情報を追加できます。

・ レポート

クラシックレポート:分析後に印刷されるレポートの形式を定義しま す。

インテリジェントレポート:分析後のレポート生成で使用するレポート テンプレートを指定します。

ランタイムチェックリスト

メソッドの実行時に、メソッドの実行する部分を定義します。

ランタイムチェックリストは、次の目的で使用できます。

- ・ データを取り込み、保存、処理して、レポートを生成する
- メソッドの一部だけを実行する
- ・ データを取り込み、保存するが解析は行わない
- 既存のデータファイルを再解析する
- データ解析、プレランおよびポストラン処理のために自身で作成したマ クロを使用する
- ・ 解析の結果を、GLP の目的でレジスタに保存する

7 メソッドの使用 メソッドのタイプ

メソッドのタイプ

メソッドにはいくつかタイプがあります。保存ロケーションによりメソッ ドは、マスターメソッドとして、シーケンスの結果セットのリファレンス としてまたはデータ取り込みで使用した実際の設定記録として、のいずれ かです。

マスターメソッド

コンピュータのディスクに保存されたメソッドがあります。メソッドは、 最大 40 文字の英数字の名前で拡張子 .M が付いています。マスターメ ソッド ディレクトリは [プレファレンス] で設定します (『「パスの選択」 112 ページ 図』を参照)。

マスターメソッドはメソッドのサブディレクトリに保存され、ChemStation エクスプローラのメソッドのノードで使用できますが、結果セットとは直 接関連はありません。

シーケンスメソッド

(オプション[ユニークなフォルダ作成オン]を用いて)シーケンスを実行 する場合、シーケンスで使用するすべてのマスターメソッドのコピーを、 シーケンスデータファイルと共に結果セットに保存します。(『「プレファレ ンス - シーケンスタブ」149ページ 図』参照)これらのメソッドはシーケ ンスに直接リンクされ、シーケンスが再解析される場合にも使用されます。 デフォルトではこれらのメソッドへの変更は、マスターメソッドに自動的 に影響はしません。変更が有効となるのは、シーケンス実行の開始または 一時停止後の次の分析からです。また変更は、シーケンスを再解析する際 に、あらゆるレポートの作成において、データファイルメソッド (DA. M) にも反映されます。

データファイルメソッド

分析メソッドのコピー (データファイルメソッド DA.M) は、データファイ ルと共に保存されます。

データファイルメソッド DA.M は、各結果生成(データ取り込み、再計算、 レポート作成)が行われると自動的に更新されます。最後に行った結果 モードの結果を再計算する時に、ChemStation によっても読み込まれます (『「前回の結果モードでの再計算」185 ページ 図』を参照)。

メソッドは、結果ファイル (run.m) に保存することができます。この場 合、ランタイムチェックリストの [データファイルにメソッドを保存]オ プションを使用して、メソッドディレクトリをデータファイルディレクト リのサブディレクトリとして保存します。

ChemStation エクスプローラでは、メソッド項目をダブルクリックしてマ スターメソッドまたはシーケンスメソッドを簡単に読み込むことができま す。 7 **メソッドの使用** メソッドの作成

メソッドの作成

新しいメソッドの作成とは、マスターメソッドまたはシーケンスメソッド の変更、もしくはその変更の保存を意味します。既存メソッドを上書き、 またはメソッドを新しいマスターメソッドとして保存することができます。 メソッドを変更しても変更を保存しない限り、ディスク上のバージョンは 変化しないことに注意してください。

メソッドの作成方法についてはいくつかの選択肢があります。分析の一部 またはすべてを実行するメソッドを作成できます。たとえば、データ取り 込みのみ実行するメソッドを作成できます。データの分析とレポートの作 成の準備ができている場合は、メソッドを修正してデータ処理タスクを実 行できます。

注記 デフォルトのメソッド (DEF_LC.M、DEF_CE.M または DEF_GC.M) は削除しない でください。これらのメソッドは、メソッドを新規作成するためのテンプレー トとして使用されます。

メソッドの編集

既存のメソッドは、[メソッド]メニューの[メソッド全体の編集]項目 を使用して編集できます。すべてのメソッドダイアログボックスを設定す るようにガイドされ、最後にメソッドを保存できます。このプロセスは次 のとおりです。



メソッドの編集可能な部分

各メソッドは、個別に編集できる 4 つのコンポーネントからなっています。

以下のサブセクションの一部は特定のダイアログボックスに言及しており、 他のものは一般的な説明です。

メソッドの編集

- **メソッド情報** は次のものから構成されています:
 - メソッドについてのテキストによる説明
- 機器コントロールはコンフィグレーションに依存しており、次のものから構成されています:
 - オーブンパラメータ
 - インジェクタパラメータ
 - 検出器パラメータ
- **データ分析**は、以下の項目で構成されます:
 - シグナル詳細
 - 積分パラメータ
 - 定量パラメータ
 - キャリブレーションパラメータ
 - カスタムフィールド セットアップパラメータ
 - レポートパラメータ
- ランタイムチェックリストは次のものから構成されています:
 - メソッドのうち、実行される部分

フォルダ

メソッドは、メソッドディレクトリ(*.M)に保存されたファイルのグルー プからなります。

デフォルトでは、マスターメソッドは Chem32¥1¥METHODS に保存されます。 マスターメソッドの追加のパスは、プレファレンス設定を用いて追加でき ます。シーケンスメソッドは結果セットに保存され、データファイルメ ソッドは DA.M としてデータファイル サブディレクトリに保存されます。

ファイル

.MTH という拡張子を持つメソッドファイルは、パラメータセットを含んで おり、UNICODE 形式です。ファイル INFO.MTH は、メソッドコントロール パラメータを含んでいます。

機器パラメータを含むメソッドファイルには、関連する分析モジュールの 名前が付いています。たとえば、次のようになっています。

HPCE1.MTH	キャピラリ電気泳動用の取り込みメソッド。
ADC1. MTH	Agilent 35900 の取り込みメソッド。同一の機器が 2 台構成されている場合には、メソッドファイルは ADC1.MTH、ADC2.MTH となる。
DAMETHOD. REG	データ解析用ファイル。
LALS1. REG	クラシックモジュール LC システムが設定される場 合の、Agilent 1100/1200 シリーズ オートサンプ ラのパラメータ。他の Agilent 1100/1200 シリー ズモジュール用のメソッドファイルは、Lxxx1.reg という命名規則に従う。ここで xxx はモジュール の略号。
AgilentSamplerDriver1 .RapidControl.xxx.xml	モジュール LC システムが設定される場合、 Agilent 1100/1200 シリーズ オートサンプラのパ ラメータ。Several .xml ファイルはパラメータの さまざまな部分に存在 (ファイル名の xxx で示さ れます)。他のモジュールで同様の .xml ファイル が利用可能。

表 14 メソッドファイルの例

オンラインモードでのメソッドの編集

オンライン ChemStation がアイドルであるときに、シーケンスメソッドの 部分をすべて編集できます。シーケンスが現時点で実行中の場合は、すべ ての取込パラメータ、およびレポート条件下の設定など、データ解析パラ メータの一部を編集できます。

変更が保存され、現在の分析および同一メソッドを使用するその後のシー ケンスラインに直ちに反映されます。これは、シーケンスの一時停止また はシーケンスの選択分析の間にもメソッドを変更することが可能であるこ とを意味しています。

オフラインモードでのメソッドの編集

同一メソッドがオンライン ChemStation の分析に使用されている間に、オ フライン ChemStation のシーケンスメソッドを編集することができます。 このシナリオでは、オフラインセッションでデータ解析部分を編集可能で す。オフラインセッションでの変更を保存すると、変更された DA 設定が オンラインセッションの現在のシーケンス分析の次のデータ解析に使用さ れます。

キャリブレーションに関するメソッド更新は考慮されません。また、履歴 エントリはマージされません。すなわち、メソッドがオンラインセッショ ンで実行されている場合にはオンライン、オフラインの両方のセッション で変更でき、メソッドの監査証跡にはオフライン ChemStation 内で行った 変更のみが含まれます。

注記 同じメソッドがオンラインとオフライン ChemStation で読み込まれる場合、 シーケンスの実行中はオフラインのメソッドのみを編集できます。オフライン ChemStation のメソッドは、オンライン ChemStation がアイドルの場合は編 集できません。



メソッド管理

ChemStation エクスプローラのメソッドツリー

ChemStation エクスプローラのメソッドツリーは、2 つの部分に分かれています。上部には、現在読み込み中の結果セットに含まれているメソッドが表示されます。下部には、[プレファレンス]ダイアログで設定したマスターメソッドディレクトリのメソッドが表示されます。

▲ LC1200 (オフライン): データ解析 ファイル(E) メソッド(M) シーケンス(S) 再計算(L) グラフィックス(<u>G</u>) 積分(<u>L</u>) キャリブレーション(<u>C</u>) レポード(<u>R</u>) スペクトル(<u>S</u>) バッチ(<u>B</u>) 表示(<u>V</u>) 中断(<u>A</u>) ヘルプ(<u>H</u>) シグナル 🏡 喩 メソッド 🏠 🛃 🕎 🕕 Co_DEMO M Gビーケンス)													
データ解析 シーケンスメソッド	4 /	シー/ 		EMO1	44	 A		レディ/デ	ータ再解析モード				4
C:¥CHEM32¥LC_	DEMO1		重ね	タイプ	ライン	注入	バイアル	サンブル名	シーケンス メソッド	サンブル タイブ	₹二	Cal レベル	サンブル情す
		•	•	- C	1	1	P1-F-01	isocratic sampl	LC_DEMO.M	キャリブレーション	-	1	isocratic c
			+	R	2	1	P1-F-02	isocratic sample	LC_DEMO.M	キャリブレーション	-	2	isocratic ch
			+	2	3	1	P1-F-03	isocratic sample	LC_DEMO.M	キャリブレーション	-	3	isocratic ch
			+	R	4	1	P1-F-04	isocratic sample 1	LC_DEMO.M	サンブル	-		isocratic ch
			+	2	5	1	P1-F-05	isocratic sample	LC_DEMO.M	サンブル	-		isocratic ch
			+	2	6	1	P1-F-06	isocratic sample 2	LC_DEMO.M	サンブル	-		isocratic ch
マスターメソッド	/ ^	•		85.			D4 5 05	ten enekte se er et e	LC DEVO V	<u>au</u> x → a	1	1	F F
C:¥CHEM32¥1¥ME	TH E	L	積分 遵	きキャリブし	ノーション	<mark>M</mark> シク	ブナル 🔣 純	主度 💩 スペクトル					

図 9 メソッドナビゲーションツリー

読み込み中のメソッドの名前は常に太字で表示されます。

マスターメソッドをシーケンスメソッドへとドラッグ&ドロップすると、 簡単にコピーができます。メソッド全体 (DA パラメータおよび ACQ パラ メータ) が、結果セットへとコピーされます。

マスターメソッドの更新

[マスターメソッドを更新]オプションは、[メソッド]メニューから、お よび ChemStation エクスプローラのシーケンスメソッドのコンテキストメ ニューから利用可能です。この機能で、シーケンス作成時に参照したマス ターメソッドを更新することができます。マスターメソッドが、そのまま マスターメソッドディレクトリ内に存在していることが前提条件となりま す (マスターメソッドの名前がシーケンスメソッドのものと同一でなくて はなりません)。

注記 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すべて 上書きされることに注意してください。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。

またシーケンスパラメータを設定して、各シーケンスの取り込み、再解析 中にこの機能を自動的に実行することが可能です。詳細は、『「マスターメ ソッドの自動更新」135ページ 図』を参照してください。

メソッドの更新

[メソッドの更新] ダイアログ(下図を参照)では、マスターメソッド ディレクトリから結果セットへとメソッドをコピーすること、またはその 逆ができます。マスターメソッドを結果セットへとコピーする場合、メ ソッド全体がコピーされます (DA パラメータおよび ACQ パラメータ)。 シーケンスメソッドをマスターメソッドディレクトリへとコピーしてマス ターメソッドを更新する場合、マスターメソッドの DA パラメータのみが 更新されます。

このダイアログは、[メソッド]>[メソッドの更新]メニューから、または ChemStation エクスプローラ内のシーケンスメソッドのコンテキストメニューから開くことが可能です。

メソッドの使用 7 メソッド管理



図 10 [メソッドの更新]ダイアログ

- 1 左側には、すべてのマスターメソッドディレクトリ(プレファレンス で設定)のメソッドが表示されます。
- 2 右側には、現在読み込まれている結果セットのメソッドが表示されま す。
- 3 それぞれのメソッドには、前回保存された日付が表示されます。日付のツールチップにはメソッドの最終履歴が表示されます。
- 4 メソッドはマスターメソッドディレクトリのサブフォルダにも保存で きます。
- 5 読み取り専用のメソッドには、[R] のプレフィックスが付きます。現 在ロードされているシーケンスメソッドはイタリック体で表示されま す。

7 メソッドの使用 メソッド管理

- 6 シーケンス結果セットとマスターメソッドに共通なメソッドは太字で 表示されます。メソッドは名前だけでマッチングされます。メソッド 名が1つ以上のプールに存在している場合、各インスタンスは共通と みなされます。
- 7 ドラッグアンドドロップを使用するか、【く】および【>】ボタンを使用して、マスターメソッドとシーケンス結果の間でメソッドをコピーすることができます。読み取り専用のマークが付いているメソッドを上書きすることはできません。

メソッドの使用 7 メソッドの実行時に起こる事柄

メソッドの実行時に起こる事柄

[ランタイムチェックリスト]ダイアログボックスでは、分析の開始時に メソッドの実行する部分を指定します。

ランタイムチェックリストには、次のような8つの部分があります。

- プレランコマンドまたはマクロ
- データ取込
- 標準データ解析
- セカンドシグナルの分析メソッド(GCのみ)
- カスタマイズデータ解析
- GLP データ保存
- ポストランコマンドまたはマクロ
- ・ データファイルと一緒にメソッドのコピーを保存 (RUN.M)

メソッドを実行すると、[ランタイムチェックリスト]ダイアロググボックスで定義されたメソッドの、指定された部分が実行されます。

メソッド操作のまとめ

次のリストは、ランタイムチェックリストのすべての部分を選択した場合の、メソッド操作の流れを示しています。

1 プレランコマンドマクロ

分析開始前のタスクを実行します。

2 データ取り込み

インジェクタプログラムを実行します。 サンプルを注入します。 生データを取り込みます。 データを保存します。

メソッドの実行時に起こる事柄

- **3 データファイルと一緒にメソッドのコピーを保存**(RUN.M) ランタイム チェックリストのオプションです
- 4 データ解析(データ処理)

データファイルを読み込みます。

データファイルを積分します。

ピークを同定し、定量します。

利用可能であれば、スペクトルライブラリを検索します。

利用可能であれば、ピーク純度をチェックします。

メソッド (DA.M) のコピーを保存し、レポートを印刷します。

5 カスタマイズデータ解析

ユーザーのマクロを実行します。

6 GLP データ保存

バイナリレジスタ GLPSave. Reg を保存します。

7 ポストランコマンドマクロ

分析完了後のタスクを実行します。たとえば、カスタマイズレポートを 生成します。

メソッドの実行時に起こる事柄



図 11 メソッド操作

以下の図は、メソッド操作中の ChemStation のステータスの概要を示して います。ここでは、ランタイムチェックリストのすべての部分を選択して います。

[ユニークなフォルダ作成オフ]モードである場合には、DA.M は生成されません。詳細は、『「プレファレンス - シーケンスタブ」149ページ 図』を参照してください。

注記

メソッドの実行時に起こる事柄

プレランコマンドまたはマクロ(ランタイムチェックリス ト)

プレランコマンドまたはマクロを指定した場合には、それは分析が始まる 前に実行されます。この部分は通常、他のソフトウェアパッケージと組み 合わせる、システムカスタマイズのために使用されます。

データ取り込み(ランタイムチェックリスト)

- すべてのパラメータは、現在のメソッドで指定された初期状態に設定されます。
- 指定された場合には、注入プログラムが実行されます。注入には定義されているバイアルを使用します。
- モニタ表示には、クロマトグラム / エレクトロフェログラムの情報、および利用できる場合にはスペクトルデータを含む分析の進行状況が表示されます。
- ・ データは取り込まれて、データファイルに保存されます。
- データの取り込みが完了すると、現在実行されているメソッドの取り込みパラメータがデータファイルの ACQ.txt としてデフォルトで保存されます。

データ解析(ランタイムチェックリスト)

ストップタイムを経過すると、分析は完了して、すべての生データはコン ピュータのハードディスクに保存されます。すべての生データが保存され ると、ソフトウェアがデータ解析を開始します。

積分

 ・ シグナルのクロマトグラム / エレクトロフェログラム オブジェクトは、 [積分イベント]ダイアログボックスで指定された条件で積分されます。

メソッドの実行時に起こる事柄

- ピークの開始、ピーク頂点、リテンション / マイグレーションタイムおよびピークの終了が決定されます。
- 各ピークのベースラインが定義され、最終的なピーク高さと面積が決定 されます。
- 積分の結果は、積分結果リストとして表示されます。

ピーク同定と定量

- リテンション/マイグレーションタイムとオプションのピーククォリファイアを使い、それらをキャリブレーションテーブルで定義された既知の化合物と参照することによって、ソフトウェアはピークを同定します。
- ピーク高さとピーク面積を使用して、キャリブレーションテーブルで指定されたキャリブレーションパラメータを使用して、検出された各化合物のアマウントを計算します。

スペクトルライブラリサーチ (ChemStations for LC 3D、CE、 CE/MS および LC/MS システムのみ、クラシックレポートで利用可 能)

利用可能な UV 可視スペクトルを持つすべてのピークの場合、UV 可視スペ クトルに基づいてサンプル内の化合物を同定するために、定義済みのスペ クトルライブラリの自動検索を行うことができます。詳細は、スペクトル モジュールを理解するを参照してください。

ピーク純度のチェック (ChemStations for LC 3D、CE、CE/MS お よび LC/MS システムのみ)

UV 可視スペクトルを持つピークの場合、そのピークの純度ファクタを計算 して、レジスタに保存することができます。自動ライブラリサーチを指定 したとき、または適切なレポートスタイルを選択したときに、[純度 チェック]ボックスをチェックした場合には、メソッドの一部として、各 分析の最後にピーク純度を自動的に決定することができます。詳細は、ス ペクトルモジュールを理解するを参照してください。

メソッドの実行時に起こる事柄

レポート印刷

分析で検出された化合物の同定結果とアマウントを示すレポートが生成されます。

カスタマイズデータ解析

解析データを評価するために、独自にカスタマイズしたマクロを実行する ことができます。

GLP データ保存

バイナリレジスタ GLPSave. Reg を、デフォルトのデータファイルサブディ レクトリに、データ解析メソッドとともに保存します。. この機能は、 データのオリジナリティおよび個々の分析の質を保証するためにデザイン されました。

GLPSave. Reg バイナリファイルは、編集不可のチェックサムで保護された レジスタファイルとして、次のような情報を含んでいます。

- 主要な機器の設定値(グラフィカルにレビュー可能)
- ・ クロマトグラフまたは電気泳動のシグナル
- 積分結果
- 定量結果
- データ解析メソッド
- ログブック

これらのデータは、ランタイムチェックリストのチェックボックスで [GLP データ保存]機能を有効にした場合にのみ、保存されます。ChemStation のデータ解析メニューで、GLP データのレビューを行えますが、編集はす ることができません。
メソッドの使用 7

メソッドの実行時に起こる事柄

ポストランコマンドまたはマクロ

ポストランコマンドまたはマクロを指定すると、データの解析後に実行されます。たとえば、データをバックアップのためにディスクにコピーするなどです。

データファイルにメソッドのコピーを保存

これは、ランタイムチェックリストで[データファイルにメソッドを保存]が有効になっている場合に限り、データ取り込み後に行われます。取り込みに使用するメソッドをデータディレクトリに、RUN.Mという名前でコピーします。RUN.Mには DAと ACQ パラメータが含まれます。RUN.Mは読み取り専用であるため、一時的にメソッドが変更された場合でも、分析を再構築することができます。メソッドや選択したパラメータの変更が分析に与える影響を確認することができるため、最適化することが可能です。

データファイルと一緒にメソッドのコピーを DA.M という名 前で保存(ChemStation デフォルト)

ランタイムチェックリストでチェックした項目とは独立して、現在実行されているメソッドのコピーがデータファイルのレポートと一緒に DA.M という名前で保存されます。これは、標準データ解析部分の最後に、また [データ解析] 画面でレポートを作成する際に、実行されます。DA.M は、レポート設定で1 つ以上のレポート出力先を指定した場合のみ作成されます。

7 メソッドの使用

メソッドの実行時に起こる事柄



ChemStation のコンセプトとワークフロー

8 データ取り込み

データ取り込みとは 112 オンラインモニタ 115 オンラインシグナルモニタ 115 オンラインスペクトルモニタ 115 ログブック 116 ステータス情報 117 ChemStation ステータス 117 ステータスバー 117 システムダイアグラム 118

この章では、データ取り込みプロセスの概要について説明します。



8 データ取り込み データ取り込みとは

データ取り込みとは

データ取り込み中、分析機器によって取り込まれたすべてのシグナルは、 検出器内でアナログシグナルからデジタルシグナルに変換されます。デジ タルシグナルは ChemStation に電子的に転送され、シグナルデータファイ ルに保存されます。

パスの選択

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、選択した新しいロケーションのパスを [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。

データ取り込み 8 データ取り込みとは

プレファレンス	X
パス シーケンス シグナル/レビューオプション 監査証跡 シーケンステンプレート	
C.¥Chem32¥1¥SEQUENCE¥	追加(A) 消去(<u>B</u>)
データー	
C.¥Chem32¥1¥DATA¥	追加(A) 消去(<u>B</u>)
マスターメンッド	
C.¥Chem32¥1¥METHODS¥	追加(<u>A</u>) 消去(<u>R</u>)
	OK

図 12 [プレファレンス]ダイアログ内の[パス]タブ

これにより、分析を実行する際に新たに指定したすべてのデータパスを [サンプル情報]および [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。



ーケンスパラメータ シーケンス出力	4.01 6.00
	-341-326-
サブディレクトリ:	2274
④ 自動 プレフィックス カウンター	ChemStore
⑦ ブレフィックス/カウンタ SI31 000001	転送設定
シッド事行部分	->uwwh&m>
「いたんし エーックロフト(-従る)」	די אייקר גיאר אייקר אייקר אייקר אייקר אייקר
7791 L71999 A Picite 7	
── シーケンステーブル情報を使用	Ψ
待機 0.00 🄄 min (新しいメソッドを読み込み後)	ノットレディタイムアウト: 0.00 🌧 min
-バーコーダ -バーコーゲスで使用 バーコード不一致の場合	- フラクション/皆報 - フラクションの開始5 ロケーション:
☑ マスターメソッドを更新 (データ解析パラメータ) シーケンスコメント:	
	OK キャンセル ヘルプ

図 13 [シーケンスパラメータ]ダイアログ内のデータパス選択

オンラインモニタ

2 種類のオンラインモニタ、オンラインシグナルモニタとオンラインスペクトルモニタがあります。

オンラインシグナルモニタ

オンラインシグナルモニタを使えば、複数のシグナルを、そして関連機器 がサポートしている場合には機器パフォーマンスプロットを、同じウィン ドウでモニタできます。表示するシグナルを選択し、時間と吸光度軸を調 整できます。この機能をサポートしている検出器の場合には、バランスボ タンが使用できます。

ディスプレイ内で十字線のカーソルを移動すれば、メッセージ行に絶対シ グナルレスポンスを表示できます。

オンラインスペクトルモニタ

オンラインスペクトルモニタは、スペクトル解析をサポートしている ChemStation でのみ使用できます。これは、吸光度を波長の関数として表 示します。表示された波長範囲と吸光度のスケールは、両方とも調整でき ます。



ログブック

ログブックには、分析システムによって作成されたメッセージが表示され ます。これらのメッセージは、モジュールからのエラーメッセージ、シス テムメッセージまたはイベントメッセージになります。ログブックは、こ れらのメッセージを、表示されるかどうかにはかかわりなく記録します。 ログブックのイベントに関する詳しい情報を入手するには、適切な行をダ ブルクリックして、説明となるヘルプテキストを表示します。



ステータス情報

ChemStation ステータス

[ChemStation ステータス] ウィンドウには、ChemStation ソフトウェアの 全体的なステータスが表示されます。

シングル分析の実行中には、次のようになります。

- [ChemStation ステータス]ウィンドウの最初の行には、実行中の分析が 表示されます。
- ステータスウィンドウの2行目には、現在のメソッドのステータスが表示されます。
- 生データファイル名は、分単位の実分析時間と一緒に3行目表示されます(GC機器の場合、フロントおよびバックインジェクタのファイルも表示されます)。

[機器ステータス]ウィンドウには、機器モジュールと検出器についての ステータス情報が表示されます。これらは、個別のコンポーネントのス テータスと、適切な場合には、圧力、グラジェント、流量データなど、現 在の状態が表示されます。

ステータスバー

ChemStation のグラフィカルユーザーインターフェイスは、ChemStation の[メソッド&ランコントロール] ビューのツールバーとステータスバー から構成されています。ステータスバーは、システムステータスフィール ドと、現在読み込まれているメソッドおよびシーケンスに関する情報から なっています。読み込み後に修正された場合は、黄色の歯車でマークされ ます。Agilent 1100/1200 シリーズ LC モジュールの場合は、黄色い EMF 記号によって、ユーザーは、消耗品(ランプなど)に設定された使用期限 が切れたことがわかります。

システムダイアグラム

設定された分析機器によってサポートされている場合(Agilent 1200 Infinity シリーズ LC モジュールまたは Agilent 6890 シリーズ GC な ど)、ChemStation システムでグラフィカルなシステムダイアグラムを表示 できます。これにより、システムのステータスを一目でチェックできます。 ダイアグラムを有効にするには、[メソッド&ランコントロール] ビュー の[表示]メニューから[システムダイアグラム]を選択します。これ は、ChemStation システムをグラフィカルに表現したものです。各コン ポーネントはアイコンによって表されます。以下に示すカラーコーディン グによって、現在のステータスが表示されます。

色	ステータス
暗灰色	オフライン
薄灰色	スタンバイ (ランプ消灯など)
黄色	ノットレディ
緑色	レディ
紫色	プレラン、ポストラン
青色	分析
赤色	エラー

表 15 モジュールまたは機器のステータスを示すために使用される色

加えて、実際のパラメータ設定のリストを表示することができます。ス テータスの概要のほかに、ダイアグラムからシステムコンポーネントごと のパラメータ設定のダイアログボックスに素早くアクセスできます。

システムダイアグラムの詳細は、オンラインヘルプシステムの機器の部分 を参照してください。



ChemStation のコンセプトとワークフロー

-自動化 / シーケンス

自動化とは 121 シーケンスおよびシーケンステンプレートとは 122 シーケンスパラメータ 123 シーケンステーブル 125 シーケンスの作成(シーケンスとシーケンステンプレート) 126 シーケンステーブルエディタの使用 126 バイアル範囲の挿入ボタンの使用 126 行追加ボタンの使用 127 カスタムフィールドボタンの使用 127 イージーシーケンス 128 イージーシーケンス 128 [**イージーシーケンス セットアップ**] タブ(テンプレート) の使用法 129 「イージーシーケンス]タブ(シーケンス)の使用 法 131 「シーケンスキュー」タブ(キュー)の使用法 132 シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレー ト) 133 シーケンスでのデータ取り込み 133 シングルランのデータ取り込み 135 マスターメソッドの自動更新 135 優先サンプル 136 コントロールサンプルを使用したシーケンス 137 シーケンスの一時停止 137 シーケンスの停止 137 シーケンスの中断 138 シーケンスの選択分析 138 シーケンスのプランとキュー 141



9 自動化 / シーケンス ステータス情報

ヘナーブへ消散

新規結果セットの作成 144 シーケンスログファイル 146 シーケンスの実行時に起こる事柄 147 シーケンスデータファイルの構造 149 プレファレンス - シーケンスタブ 149 データファイル構造(ユニークなフォルダ作成オ ン) 154 シーケンスデータファイルの命名 155 シーケンスのデータファイルの命名 155 データファイル名のマニュアル入力 156 結果セットのマイグレーション 157 ポストシーケンス処理 159 ノットレディータイムアウト(LC および CE のみ) 159 待機時間(LC および CE のみ) 160 自動リキャリブレーション 161 リキャリブレーションの指定 162 シーケンステーブル内のリキャリブレーションパラメー タ 162 シーケンスの種類 165 明示的キャリブレーションシーケンス 165 周期的シングルレベルキャリブレーションシーケン ス 165 周期的マルチレベルキャリブレーション シーケン ス 166 明示的および周期的キャリブレーション両方 169 ブラケットを使用した周期的キャリブレーションシーケン ス 172 標準の同じ希釈率を含むマルチバイアルを使用した周期的リ キャリブレーションシーケンス 176

本章では、自動化の概念について説明します。具体的には、 ChemStation でシーケンスを使用する方法、シーケンスの実行時に 起こること、およびシーケンスのカスタマイズ方法を説明します。

自動化とは

自動化とは、複数のサンプルを無人で分析するものです。

ChemStation ソフトウェアのシーケンス機能により、取り込み、データ解 析、レポート作成を自動化することができます。

シーケンスおよびシーケンステンプレートとは

シーケンスおよびシーケンステンプレートとは

シーケンスとはサンプルの分析を自動化する一連の命令のことです。シー ケンスは、自動的に各サンプルを注入し、そのサンプル用に指定されたメ ソッドにしたがってデータを取り込み、解析するのに使用されます。シー ケンス内の各サンプルバイアルは、異なる分析メソッドを使用することで、 異なるクロマトグラフ/エレクトロフェログラフ条件および解析パラメー タのセットで分析することもできます。

ChemStation では、ワークフローに合ったデータ保存モデルを選択できる ように、2 つのデータ保存モードを導入しています。このモードは以下の シーケンスの使用法に影響します。

- [ユニークなフォルダ作成]オン
- [ユニークなフォルダ作成]オフ

サンプルデータの一貫性を保つための[ユニークなフォルダ作成]オンで は、シーケンスはシーケンステンプレートとして複数回取り込みを実行す るために使用しますが、このテンプレートは[データ解析]での再解析に は使用されません。シーケンステンプレートを実行すると、すべての関連 ファイルを含む結果セットを作成します。シーケンステンプレートを再利 用すると、再利用ごとに新しい結果セットを作成します。

[ユニークなフォルダ作成]オフではすべてのデータを1 つのディレクト リに保存します。シーケンスファイル *.s はシーケンステンプレートとし ては使用されません。そのためユーザーがデータディレクトリを変更しな い場合、シーケンスを再実行することで現在のデータを上書きする恐れが あります。

利用可能なシーケンス / シーケンステンプレート (*.s) は、ChemStation エクスプローラに表示されます。素早く簡単にナビゲーションできるよう に、[プレファレンス] ダイアログボックスの [パス] タブを用いて、追 加のシーケンス / シーケンステンプレートの場所を ChemStation エクスプ ローラの選択ツリーに追加できます。

シーケンスパラメータ

[**シーケンスパラメータ**]ダイアログには、シーケンス内のすべてのサン プルバイアルに共通する情報が含まれています。このダイアログボックス を使用して、次のタスクを行います。

- [パス] コンボボックスを使用して、データディレクトリを選択し、オペレータ名([アクセスレベル]ダイアログボックスで入力したオペレータ名が表示される)の情報を入力
- [メソッド実行部分]パラメータで、シーケンス解析をどのように行うのか指定

次のいずれかを選択できます。

- ランタイムチェックリストに従う
- ・ データ取り込みのみ実行
- 再解析のみ実行(ChemStation リビジョン B.01.03 以前で取り込んだ データ、または[ユニークなフォルダ作成オフ]オプションで取り込ま れたデータ用)
- 注記

リビジョン B.01.03 までの ChemStation で取り込んだか、[ユニークなフォ ルダ作成オフ]オプションを使用して取り込んだシーケンスデータは、[メ ソッド & ランコントロール]ビュー内の再解析オプションを使用して再解 析する必要があります。

ChemStation リビジョン B. 02. 01 以降で取り込んだシーケンスデータは、[データ解析ナビゲーションテーブル]の[再解析]オプションを使用して 再解析する必要があります。

[再解析]オプションが選択されている場合は、もともとサンプル分析す る際に定義したサンプルデータを使用するか、[シーケンステーブル情報 を使用]チェックボックスを有効にして、シーケンステーブルに以下の新 しいデータを入力して、更新されたサンプルデータの使用を選択できます。

 [シャットダウン]パラメータを使用して、シーケンスが終了時の動作を 指定

ChemStation のコンセプトとワークフロー



システムにバーコードリーダーがインストールされている場合、シーケンスでバーコードの使用、およびバーコードの不一致をどのように処理するかを指定

ChemStation のコンセプトとワークフロー

シーケンステーブル

シーケンステーブルは、サンプルバイアルを分析するのに使用するメソッド、およびバイアルが分析される順序を決定します。このテーブルには、 名前、定量パラメータ、およびリキャリブレーションパラメータなどの各サンプルのデータを含みます。

デュアルサンプルリングをサポートする機器(GC)には、[インジェクタ] グループボックスが表示されます。[フロント]または[バック]を選択 すると、シーケンステーブル内のライン、およびそのインジェクタの現在 の実行ステータスが表示されます。

このテーブルの列の説明、およびこの列がメソッドに格納されている情報 とどのように作用し合うかに関する説明については、オンラインヘルプリ ファレンスを参照してください。

シーケンスの作成(シーケンスとシーケンステンプレート)

シーケンスの作成(シーケンスとシーケンステンプレー ト)

シーケンステーブルを使用して、シーケンス内で分析されるサンプル、メ ソッド、およびバイアルを指定します。シーケンステーブルでは、分析さ れる順にシーケンス中の各サンプルが一覧表示されます。このテーブルに は、必要なバイアル、メソッド、各サンプル用のキャリブレーション情報 が含まれます。

シーケンステーブルエディタの使用

シーケンステーブルの表示およびコンテンツを変更したい場合は、シーケ ンステーブルの右下隅にある [テーブルコンフィグレーション] をクリッ クして、シーケンステーブルエディタを開くことができます。シーケンス テーブルエディタを開くと、シーケンステーブル内に表示させる列を指定 することができます。加えて、各シーケンステーブルの列の幅を定義でき ます。LC/MS がインストールされると [ターゲットマス] フィールドなど、 インストールしたソフトウェアパッケージに応じて追加の列フィールドは 変更されます。

バイアル範囲の挿入ボタンの使用

サンプルメソッドを使用するサンプルをたくさん持っている場合は、[バ イアル範囲の挿入]機能を使用して、これらのサンプルをシーケンステー ブルに素早く入力できます。この機能は、メソッド名、バイアル範囲、バ イアルごとの注入回数をコピーし、サンプルアマウントを指定した場合は、 ISTD アマウント、倍率、および希釈率もコピーされます。システムは、そ の後、範囲内にある各バイアルの情報をシーケンステーブルに入力します。

シーケンスの作成(シーケンスとシーケンステンプレート)

行追加ボタンの使用

[行追加] ボタンを選択すると、新しい空行がシーケンステーブルの最後 に追加されます。

カスタムフィールドボタンの使用

シーケンステーブルで使用するメソッドのカスタムフィールドが設定され ている場合、[カスタムフィールド] ボタンを選択して、各サンプル(サン プル関連カスタムフィールド)またはサンプルのメソッド中の各化合物 (化合物関連カスタムフィールド)のカスタムフィールド値を編集すること ができます。



イージーシーケンス

[イージーシーケンス]は、テンプレートを使ってシーケンスを短時間で 簡単に設定するためのユーザーインタフェースです。テンプレートでは、 ユーザーが表示または編集する必要のあるパラメータを指定します。キャ リブレーションセットアップは、キャリブレーションタイプとサンプルポ ジションを指定するために使いやすいドラッグアンドドロップインタ フェースを備えています。また、シーケンスの概要を表示します。[イー ジーシーケンス]を使うと、データシステムで実行する複数のシーケンス をシーケンスキューに追加できます。

 イージーシーケンスセットアップ 論 シーケンス 協 イージーシーケンスとセットアップ 論 シーケンス 協 イージーシーケンスとサトアップ: C ばんem32#2#sequence#Test Seq Temp2.est メリッド: MYDEH001.M デークカイル: ゴー・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	機器コントロール イージーシーケンス シーケンスキュー イージーシーケンス セットアップ	
	イージーシーケンスセットアップ 🎥 シーケンス 🎡	📫 🗱 🖨 🖗
x3/5)F储程 x3/5)F能 x3/5)F能 x3/5)F能 x3/5)F能 x3/5)F能 x3/5)F能 x3/5)F能 x3/5)F能 x3/5)F能 x3/5)F能 x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5)F x3/5F x3/5F x3/5F x3/5F x3/5F x3/5F x3/5F x3/5F x3/5F	イージーシーケンスセットアップ: C:¥Chem32¥2¥sequence¥Test Seq Temp2.est	
メリケド: MYDEMO01.M データフィイル: <>> データフィイル: <>> ウンフル障碍 フロント 開始パイアルロケーション: 1 サンプル後: 6 サンプル後: AnySampleName <c> メインドサンプルスト * シーウンス線石学 イングリン 1 サンプルクト * サンプルクト * サンプルクト * シーウンス線石学 イングリン * サンプルクト * サンプルクト * シーウンス線石学 イングリン * サンプルクト * サンプルスト * * 1 AnySampleName0001 2 AnySampleName0002 3 AnySampleName0003 4 AnySampleName0005 6 AnySampleName0006</c>	メソッド情報	データ情報
	メソッド: MYDEMO01.M	
サンプル情報 フロント 第25/小価数 フロント 第25/ト コント 第25/ト コント サンプル数: 6 : サンプル数: 6 : サンプル数: AnySampleName <c> × × サンプルクレオート シ サンプルクレオート シ 1 AnySampleName0001 2 AnySampleName0002 3 AnySampleName0002 3 AnySampleName0002 3 AnySampleName0002 5 AnySampleName0004 5 AnySampleName0005 6 AnySampleName0006</c>		- シーケンス情報
サンプル結婚 フロント 開始パイアルロケーション: 1 サンプル語: 6 ・ サンプル語: ・ ナンプルジェート: ・ サンプルジェート: ・ オージアリンド ・ ハッSampleName0001 ・ AnySampleName0002 ・ AnySampleName0003 ・ AnySampleName0006 ・ AnySampleName0006		シーケンス保存ディレクトリ:
フロント コント 開始パイアルロケーション: 1 サンプル線: 6 サンプル線: AnySampleName <c> サンプルルインボート シ サンプルルインボート シ パイアル サンプルスト シ 1 AnySampleName0001 2 AnySampleName0002 3 AnySampleName0002 3 AnySampleName0003 4 AnySampleName0004 5 AnySampleName0005 6 AnySampleName0006</c>	「サンプル情報	୬-ケンス名: • :
開始ドイアルロケーション: 1 サンプル型・ション: 2 サンプル型: 6 ・ サンプル型: 6 ・ サンプル型: AnySampleName <c> ・ × サンプルジスト サンプルジスト サンプルジスト サンプルジスト レ イバイアル サンプルスト シ 1 AnySampleName0001 2 AnySampleName0002 3 AnySampleName0004 5 AnySampleName0005 6 AnySampleName0006</c>	フロント	
サンプル袋: 6 ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・	開始バイアルロケーション: 1	ににコメントを入力
サンプル名: AnySampleName <c> × サンプルクインボート ・ サンプルフトの作成 サンプルフトの アロントサンプルスト ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・</c>	サンプル数: 6 🗘	
サンプルクトンボート ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	#\フォルを・AnySamnleName <c></c>	
サンプルグインボート サンプルジストの作成 サンプルジストの フロントサンブルジスト 1 AnySampletIame0001 2 3 AnySampletIame0002 3 AnySampletIame0003 4 4 AnySampletIame0005 5 AnySampletIame0006 5 5 AnySampletIame0006 5 AnySampletIame0006 5		
CDU-FUTJUUZA TU-FUTJUUZA 1 AnySampleItame0001 AnySampleItame0003 4 AnySampleItame0004 5 AnySampleItame0005 6 AnySampleItame0006	<u> </u>	サンプルリストの作成
1/177/h 1/27/h/26 1 AnySampleHame0001 2 AnySampleHame0002 3 AnySampleHame0003 4 AnySampleHame0004 5 AnySampleHame0005 6 AnySampleHame0006	70°.k#\vftuu7.k	
1 AnySampleName0001 2 AnySampleName0002 3 AnySampleName0003 4 AnySampleName0004 5 AnySampleName0005 6 AnySampleName0006		
2 AnySampleName0002 3 AnySampleName0003 4 AnySampleName0004 5 AnySampleName0005 6 AnySampleName0006	Y11 //// 9.27///6 AnySampleName0001	
3 AnySampleName0003 4 AnySampleName0004 5 AnySampleName0005 6 AnySampleName0006	2 AnySampleName0002	
4 AnySampleName0004 5 AnySampleName0005 6 AnySampleName0006	3 AnySampleName0003	
5 AnySampleName0005 6 AnySampleName0006	4 AnySampleName0004	
6 AnySampleName0006	5 AnySampleName0005	
	6 AnySampleName0006	
1		

図 14 [イージーシーケンス]タブ

[ィージーシーケンス セットアップ] タブ (テンプレート)の使用 法

[イージーシーケンス セットアップ]は、シーケンス作成の出発点となる テンプレートを作成するために使います。ここには、2 つのパネルがあり ます。[サンプル]と[キャリブレーション]です。[サンプル]パネル では、メソッド、サンプル、データ、シーケンスについての情報を指定し ます。テンプレートは、非表示または読み取り専用とするパラメータを指 定するためにも使います。[キャリブレーション]パネルは、キャリブ レーション分析の設定と表示を行うためのグラフィカルインタフェースを 備えています。[キャリブレーション]は、キャリブレーションタイプ、 周期的シーケンスとブラケットシーケンス、サンプルポジションを指定す るための使いやすいドラッグアンドドロップインタフェースを備えていま す。

イージーシーケンステンプレートの作成方法

- **1** [**イージーシーケンス セットアップ**] タブから [**サンプル**] パネルを選 択します。既存のテンプレートを開くか、新しいテンプレートを作成し ます。
- 2 [メソッド]を選択します。メソッドの注入ソースが[デュアル]の場合は、[デュアル インジェクション]オプションが表示されます。バックシグナルに対しては、バック用の解析メソッドを指定できます。メソッドはテンプレートで唯一必須のパラメータです。
- 3 必要に応じて、サンプル分析の推定継続時間(分単位)を入力します。 継続時間とは、サンプル開始から次のサンプル開始の範囲で測定された時間です。このパラメータを使用して、シーケンスの合計推定継続時間 を予測します。推定サイクルタイムの機能を使用しない場合には、これらのフィールドを空白にしておいてください。
- 4 [バイアル開始ロケーション]、[サンプル数]、[サンプル名] を指定します。
- **5** [**データロケーション**]を選択します。
- **6** [シーケンスロケーション]を選択し、[シーケンス名]を指定します。
- 7 テンプレートにコメントを記入します。
- 8 非表示または読み取り専用とするパラメータを指定します。[注入回数 / バイアル]、[サンプルアマウント]、[ISTD アマウント]、[注入量]

ChemStation のコンセプトとワークフロー

などに、デフォルト値を入力します。[**イージーシーケンス**]タブで シーケンスを作成するときに、間違える可能性を最小限にできます。 **9** テンプレートを保存します。

キャリブレーションを定義するには、以下の手順を実行します。

テンプレート内で使用するメソッドは、必要なレベルにキャリブレーションされている必要があります。

- **1** [**イージーシーケンス セットアップ**] タブから [**キャリブレーション**] パネルを選択します。
- [キャリブレーションモード] ドロップダウンリストから、[周期的] または [ブラケット]、または [シンプルキャリブレーション] を選択します。
- 3 [シーケンスダイアグラム]には、以下のセクションがあります。
 - シーケンス開始
 - ブラケット / 周期的
 - ・ サンプル / 注入
 - シーケンス終了
- **4** Sequence の サンプル エリアでは、サンプル数または注入回数に基づいて キャリブレーションインターバル を設定します。
- 5 サンプルタイプ エリアから Sequence Diagram セクションまでアイコン をドラッグすることにより、Sample type、ブランク、キャリブラント、 または QC サンプル を設定します。
- 6 各サンプルタイプのパラメータを設定し、非表示または読み込み専用を 指定します。
- 7 [イージーシーケンス] 概要で、キャリブレーションモードを確認しま す。
- 8 テンプレートを保存します。

[ィージーシーケンス] タブ (シーケンス) の使用法

[**イージーシーケンス セットアップ**] で作成したテンプレートからシーケ ンスを作成するには、[**イージーシーケンス**] タブを使います。CSV 形式 で保存したサンプルのインポートも可能です。

シーケンスの定義方法

- 1 [イージーシーケンス] タブで [イージーシーケンスセットアップ開始] アイコンをクリックし、テンプレートを開きます。
- 2 必要に応じて、更新します。ここには、サンプルバイアルロケーション、キャリブレーション化合物バイアルロケーション、データ、シーケンスロケーションが含まれています。編集可能なパラメータは、テンプレートのコンフィグレーションに依存します。
- 3 記入済みのサンプルが新しいサンプルロケーションに適合しない場合は、[サンプル記入]をクリックしてテーブルを修正します。
- 4 [**シーケンスのプレビュー**/印刷...]をクリックしてシーケンスをプレ ビューします。
- 5 シーケンスを保存します。

チップ シーケンスは、キュー内でのステータスが保留中であれば、編集可能です。

6 [保存してキューに追加]をクリックし、シーケンスをシーケンス キューに登録します。

サンプルデータのインポート方法

[**イージーシーケンス**]には、サンプルデータセットをインポートできま す。サンプルをインポートする前に、CSV ファイルを準備して正しく フォーマットしておく必要があります。CSV サンプルデータファイルの作 成方法については、オンラインヘルプを参照してください。

- **1** [**イージーシーケンス**] タブで [**イージーシーケンスセットアップ開始**] ボタンをクリックし、テンプレートを開きます。
- **2** [**サンプルのインポート**...] をクリックします。
- 3 インポートする CSV ファイルを選択します。

ChemStation のコンセプトとワークフロー

有効なフィールドがすべてインポートされます。

注記 サンプルデータを [バックサンプルリスト] にインポートする場合は、[サ ンプルのインポート] ボタンを押す前に、[バックサンプルリスト] を選択 して表示させていることを確認してください。

4 [サンプルリスト]をレビューし、各フィールドを確認します。

[シーケンスキュー] タブ (キュー) の使用法

キューには、複数の異なるタイプのシーケンスを追加することができます。 シーケンスキューは、イージーシーケンステンプレートだけでなく、従来 の ChemStation シーケンスもサポートします。キューが一時停止にされな い限り、データシステムがレディになると、最初にキューに追加された シーケンスが開始します。追加したシーケンスはキューの最後に追加され ます。またシーケンスの実行順序は変更することができます。キューの [**イージーシーケンス**] は、ステータスが保留中であれば編集可能です。

シーケンス計画方法の詳細については、『「シーケンスのプランとキュー」 141ページ 図』を参照してください。

イージーシーケンスについての詳細は、オンラインヘルプを参照してくだ さい。 [イージーシーケンスセットアップ] のチュートリアルは、オンラ インヘルプにあります。

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステン プレート)

シーケンス(シーケンスとシーケンステンプレート)は、[シーケンス] メニューからアクセスし、作成されます。シーケンスは、メソッドと同じ 方法で作成および保存できます。シーケンスを保存する際には、.Sの拡張 子を持ったファイルが作成されます。シーケンスを編集したり、再利用し たい場合は、たとえば、[シーケンス]メニューの[シーケンスの読み込 み]アイテムを使用してそのシーケンスにアクセスします。

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使用する必要が 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] ビューで動作します。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。

すでに説明したように、シーケンステンプレート <sequence_name>.S とマ スターメソッド <method_name>.M 用いてシーケンスを実行する場合、シー ケンスランで生成されるすべてのファイルを格納する新しいフォルダ(「結 果セット」) 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で 設定され、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] が結果セット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。

ChemStation のコンセプトとワークフロー

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

プレファレンス	×
パス シーケンス シグナル/レビューオブション 監査証跡	
データ保存	
ユニークなフォルダ作成オン	
各シーケンス実行のためにユニークなデータフォルダを作成します。詳細はヘルプを見てください。	
◎ ユニークなフォルダ作成オフ	
ChemStation B.01.03 以前のようにデータを保存します。このモードは、最新のデータ レビューおよび、 ChemStation 再解析機能は利用できません。	
 -名前のパターン	
<seqn> <date> <time></time></date></seqn>	
SIM07 2010-11-15 19-11-16	
OK キャンセル ヘル	,7

図 15 [プレファレンス]ダイアログ / [シーケンス]タブ

シーケンス取り込み開始時に、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結果セットにコピーされます。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 結果セット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、結果セットのシーケンスメソッドに 書き込まれます。インテリジェントレポートを利用している場合、シーケ ンスパラメータまたはメソッドプロパティで選択したレポートテンプレー トが、結果セットへとコピーされます。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を、データレビューおよび 再解析に使用できます。

取り込み中、データファイルは結果セットに保存されます。各データファ イル (*.D) に、シーケンスメソッドのコピーが特定の分析のために保存さ れます。ファイル ACQ.txt にはシーケンスメソッドの取り込みパラメータ が含まれており、そのデータファイル取り込み時の状態のメソッドを維持 します。フォルダ DA.M には、シーケンスメソッドで使用したデータ分析 パラメータのコピーが含まれています。

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

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。

注記 結果セットには、完全なすべてのデータファイル(*.D) セットが常に含まれ ている必要があります。データファイルの一部を削除してしまうと、OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM) に結果セットをアップロードする際に問 題が発生します。シーケンスを短くする必要がある場合には、短縮したシーケ ンスラインから新規結果セットを作成します(『「新規結果セットの作成」144 ページ 図』を参照してください)。

シングルランのデータ取り込み

シングルランでは、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。一部メソッドの取 り込みが完了すると、取り込みパラメータのコピーがファイル ACQ.txt. に保存されます。マスターメソッドのデータ解析部分が実行されると、 データ解析パラメータのコピーがデータファイルディレクトリ (DA.M) に 保存されます。

マスターメソッドの自動更新

この機能を利用すると、結果セットへとコピーしたマスターメソッドの データ分析パラメータを ChemStation が自動的に更新します。例えば、リ キャリブレーションでシーケンスを再解析した後にマスターメソッドの キャリブレーションテーブルを更新するために利用できます。

この機能は、[シーケンスパラメータ]ダイアログで有効にすることができます(下図を参照)。取り込み中に、セット内のすべてのシーケンスメソッドに関するマスターメソッドのデータ分析パラメータが、ChemStationにより更新されます。

マスターメソッドのデータ分析パラメータは、シーケンスの再解析後にも 更新されます。マスターメソッドが、そのままマスターメソッドディレク

ChemStation のコンセプトとワークフロー

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

トリ内に存在していることが前提条件となります(マスターメソッドの名 前がシーケンスメソッドのものと同一でなくてはなりません)。

シーケンスパラメータ: LC1200	
シーケンスパラメータ、シーケンス出力	
- データファイル- パフ-	- オペレータ名
サブディレクトリ:	システム
 自動 プレフィックス カウンター ペートコートコートカー 	ChemStore
@) () / 799 (/ 79) / 99 (000001	軟送設定
メソッド実行部分	- <u>></u> +>+>t
データ再解析のみ	▼ ポストシーケンス コマンド/マクロ
☑ シーケンステーブル 情報を使用	PUMPALL OFF
待機 0.00 📄 min (新しいメソッドを読み込み後)	ノットレディタイムアウト: 0.00 🚖 min
-バーコードリーダー □ シーケンスで使用 バーコード不一致の場合 ◎ 注入禁止	- フラクション(情報 フラクションの開始なロケーション:
マスターメソッドを更新 (データ解析パラメータ) シーケンスコメント:	
Aqc. of isocratic standard samples	
	OK キャンセル ヘルブ

図 16 [シーケンスパラメータ]ダイアログの[マスターメソッドの更 新]オプション

この機能はパフォーマンスに負担がかかるため、数百のメソッドを持つシーケンスの場合には、使用をお奨めしていません。

優先サンプル

注記

現在分析中のシーケンスは、処理中のメソッドが完了したら一時停止する ことができます。シーケンスは、同じまたは別のメソッドで優先サンプル の分析をするために一時停止することができます。シーケンスは、その後 再開し、一時停止した時のサンプルから続行できます。

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

コントロールサンプルを使用したシーケンス

コントロールサンプルは、シーケンステーブルの[サンプルタイプ] フィールドで指定することができます。コントロールサンプルの分析に使 用するメソッドには、化合物の1つにコントロールサンプルリミットが指 定されているキャリブレーションテーブルが必要です。指定したコント ロールサンプルリミットを超えた場合、シーケンスは停止し、ログブック にメッセージが書き込まれます。ChemStationのレポートスタイルのいず れかを使用している場合は、これらの分析で生成されるレポートにはコン トロールサンプルリミットも出力されます。コントロールサンプルを持つ シーケンスの定義方法については、オンラインヘルプの「方法」の部分を 参照してください。

シーケンスの一時停止

現在実行中の分析は、シーケンスを一時停止する前に完了します。

シーケンスの一時停止中は、シーケンステーブルファイル名およびデータ ファイル名の変更はできません。まだ実行されていないシーケンス行の変 更、または現在のシーケンス行のバイアル番号の変更のみ行えます。未実 行部分の分析用にシーケンス行の追加、削除、および変更はできます。

たとえば、サンプルの新しいバッチを追加するため、実行中のシーケンス を編集する必要があるとします。これらのバイアルが、現在実行中のシー ケンスラインのサンプルの後に、ChemStation で処理される次のサンプル になるように、シーケンスを編集できます。

シーケンスの停止

現在実行中の分析が、直ちに停止します。しかし、データ解析はこの分析 で実行されます。中止されたシーケンスを再開することはできません。

シーケンス停止前に現在の分析を完了させたい場合、シーケンスを一時停止して分析が完了するのを待ち、その後シーケンスを停止します。

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

シーケンスの中断

中断機能は、現在実行中のシーケンスを即時停止させます。データ解析は 実行されません。

シーケンスの選択分析

選択分析用の結果セットの選択

[ユニークなフォルダ作成] オンを利用する場合(『「プレファレンス -シーケンスタブ」149ページ 図』を参照)、一部のシーケンスを取り込む ためのオプションを以下から選ぶことができます。

• 新しい結果セットに部分シーケンスを取り込む

または

• 既存の結果セット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結果セットに取り込 むと、以下のシナリオで役立つ可能性があります。

- 例えば、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。これは、シーケン ス取り込み中に機器障害が発生した場合などが考えられます。
- 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、リストから既存の結果セットを選択するか、新しい結果 セットを作成するかのオプションを選択するダイアログが表示されます。

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

「イレクトリ	日付	データファイル数
C¥CHEM32¥1¥DATA¥1_RL1	2011/09/27 16:42:03	5
C¥CHEM32¥1¥DATA¥1_RL1	2011/09/27 16:47:03	4
C:¥CHEM32¥1¥DATA¥1_RL1	2011/09/27 16:51:08	1

図 17 [シーケンスの選択分析] 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)結果セットの一貫 性を保つために、以下の特定の条件を満たす結果セットのみが部分取り込 みを実行できます。

- シーケンステンプレート(ソースシーケンス)の名前と、結果セット内のシーケンス.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が、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] (既存の結果セットの 1 つを選択する場合) または [新 規] (新規結果セットを作成する場合) をクリックしてこのダイアログを 閉じた後に、部分シーケンスを実行するシーケンスラインを選択できます。 シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

部分シーケンス取り込み用のシーケンスラインの選択

[シーケンスの選択分析]ダイアログボックスがシステムにより表示され、 分析用テーブルから個々のサンプルを選択できます。このダイアログは 「ユニークなフォルダ作成」の設定に関係なく開きます。

[シーケンスの選択分析] ダイアログボックスの各行に、シングル分析が 表示されます。各分析ごとに、バイアル、メソッド、データファイル、お よびサンプル名が与えられます。加えて、シーケンステーブルおよびキャ リブ:RF:RT 列にはそれぞれ、シーケンステーブルおよびすべてのキャリ ブレーションサンプルのエンコードされた情報が表示されます。これらの コードの説明は、オンラインヘルプを参照してください。

[印刷]ボタンを選択すると、シーケンスの選択分析を紙に印刷できます。

[選択した分析用に自動更新]オプションでは、対応するマスターメソッドを持つ選択済み分析で使用するすべてのシーケンスメソッドを更新する ことができます。

[マニュアル更新...] では、[メソッド更新] ダイアログボックスを開き ます。これにより、マスターメソッドと、シーケンステンプレートで使用 されるメソッド間でメソッドをマニュアルで同期することができます。

例えば、[シーケンスの選択分析]ダイアログは以下のように表示される 場合があります。サンプルを処理用にマークすることが可能です。

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

行する 開始前 火	シーケンス部を選択してください にメソッド更新 ノッド更新 図 選択し	。 た分析用に自動更新				
有無	サンプル名	データファイル	実行	ロケーション	メソッド	シーケンス テ キャリブ:RF:RT
8	sample 1	NV0101	1		BL1	01:01
	sample2	NV0201	2		RL1	02:01
-	sample3	NV0301	3		RL1	03:01
	sample4	NV0401	4		RL1	04:01
-	sample5	NV0501	5		RL2	05:01
					ラン シーケンス	キャンセル ヘルブ 印刷

図 18 [シーケンスの選択分析]ダイアログボックス

シーケンスのプランとキュー

シーケンスキューでは、追加のパラメータと共に一連のシーケンスをスケ ジュールすることが可能です。この機能によって、夜間または週末の分析 などの長期にわたる操作を自動化することができます。シーケンスに加え、 一時停止をスケジュールすることもできます。一時停止では、ChemStation はカスタマイズ可能なメッセージを表示し、ユーザーが確認するまで待機 します。

シーケンスキューは、イージーシーケンステンプレートですでに利用する ことができました。ChemStation リビジョン C.01.03 以降、シーケンス キューは、従来の ChemStation シーケンステンプレートでも利用できるよ うになりました。

リビジョン C.01.03 の新機能として、キュープランを事前に準備してお き、後からこのプランをシーケンスキューに追加することができます。

以下のワークフローがサポートされています。

シングルシーケンスのキュー

ChemStation のコンセプトとワークフロー

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

- a 従来の ChemStation シーケンステンプレートまたはイージーシーケ ンステンプレートの選択
- b シーケンステーブルの編集とレビュー
- c シーケンスパラメータの編集とレビュー
- **d** 設定の保存
- e シーケンスをキューに追加
- シーケンスキューの変更
- キュープランの準備
- 事前定義したシーケンスセットをシーケンスキューへ追加
 - a キュープランの選択
 - **b** プランをシーケンスキューへ追加

シーケンスキュー

シーケンスキューは、オンライン ChemStation セッションのみで利用できます。

[メソッド&ランコントロール] ビューの **[シーケンスキュー**] タブから シーケンスキューにアクセスします。

シーケンスをキューに追加するには、メニュー [ランコントロール] > [キューシーケンス...] を使用します。現在読み込まれているシーケンス を変更せずに、シーケンステーブルおよびシーケンスパラメータを修正す ることができます。最後にこのシーケンスをキューに追加する前に、シー ケンスをそのままキューに追加するか、シーケンスを新たなシーケンステ ンプレートとして保存してからキューするかのどちらかを選択するダイア ログが表示されます。

[キューシーケンスの完了] ダイアログには、チェックボックス [完了後、 ー時シーケンステンプレートを削除] もあります。ChemStation では、 キューしたシーケンステンプレートのコピーが一時ディレクトリに常に保 持されます。この一時シーケンステンプレートを使用して、キューからの シーケンスを実行します。異なるパラメータを使用して同じシーケンスが 複数回キューに追加される場合があるため、ChemStation ではキューされ たそれぞれのアイテムに個別のコピーが必要になります。

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

チェックボックスの設定によって、この一時シーケンステンプレートは、 キューが次のアイテムでも続く場合に保持されたり削除されたりします。 [ユニークなフォルダ作成]の設定に応じて、デフォルトでチェックボック スがオンまたはオフに設定されます(『「プレファレンス - シーケンスタ ブ」149ページ図』を参照してください)。

• [ユニークなフォルダ作成オフ]の場合:

[完了後、一時シーケンステンプレートを削除] チェックボックスのデ フォルト設定はオフです。

データを再解析する場合、シーケンステンプレートが必要です。そのため、テンプレートファイルのコピーを保持しておくことをお勧めします。デフォルトではファイルは、Chem32¥< 機器 >¥SEQUENCE に保存されます。

「ユニークなフォルダ作成オン」の場合:

[完了後、一時シーケンステンプレートを削除] チェックボックスのデ フォルト設定はオンです。

再解析に必要なすべての情報は、結果セットですでに利用することができます。そのため、一時シーケンステンプレートのコピーは必要ではありません。このチェックボックスをオンにした場合、コピーはデフォルトで Chem32¥< 機器 >¥TEMP¥AESEQ に保存されます。

キュープラン

キュープランでは、シーケンス(イージーシーケンステンプレート *.es または従来の ChemStation シーケンステンプレート *.s) または一時停止 のセットを順序を含め定義することができます。キュープランは *.qpl ファイルとして保存されます。 [メソッド&ランコントロール] ビューの [ランコントロール] > [キュープラン...] メニューから、キュープラン を開きます。

シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

	動作	副羊糸田	削除	データディレクトリ	シーケンス から	請入
1	2000 クラシックシーケンスの実行	ROUTINES	V	C:¥Chem32¥1¥DATA¥DEMO¥	V	a) jetn
2	🛄 一時停止	くここにテキストを入力>		n/a		
3	しょう クラシックシーケンスの実行	DEF_LOS	V	C:¥Chem32¥1¥DATA¥		× il
						م (

図 19 キュープラン

一時停止を追加すると、[詳細]列にカスタムメッセージを入力することができます。シーケンスキューが一時停止になると、ChemStationは停止し、入力したカスタムメッセージを画面に表示します。キューを続行するためには、ユーザーがメッセージを確認し OK する必要があります。

ユーザインターフェースについての詳細は、オンラインヘルプを参照して ください。

新規結果セットの作成

[データ解析] ビューで [シーケンス] > [新規結果セット作成] コマンド を利用して、ナビゲーションテーブルに現在表示されているデータを使用 して新しい結果セットを作成することができます。新規結果セットの作成 は、たとえば以下のような場合に役立ちます。

- 複数のシングルサンプル、複数のシーケンス、またはこれらが混在する データを組み合わせて、特定のメソッドで再解析する場合。
- シーケンスの長さを短くしたい場合。

新規結果セットの作成方法

- 1 必要なデータファイルをナビゲーションテーブルに追加します。
- ナビゲーションテーブルで、新規結果セットに含めるすべてのデータ ファイルを選択します。
シーケンスを用いた作業(シーケンスとシーケンステンプレート)

- **3 [シーケンス] > [新規結果セット作成]**を選択し、**[新規結果セット作成]** ダイアログボックスを開きます。
- 4 新規結果セットに関連付けるメソッドを選択します。
- 5 新規結果セット用のフォルダーを指定します。
- 6 設定を確認して OK し、選択したデータファイルリストで指定したフォ ルダーに結果セットを作成します。



シーケンスログファイル

シーケンス実行中に何が起こったかを示すシーケンスログファイルが生成 されます。無人または終夜でシーケンスが実行されている場合にエラーが 発生した時に認識するために役立ちます。ログブックファイルには、常に .log の拡張子が付きます。ログブックファイルは、シーケンスのデータが 保存されているディレクトリにあります。

シーケンスの実行時に起こる事柄

シーケンスの実行時に起こる事柄

[ユニークなフォルダ作成]オンを使用したシーケンスの開始

シーケンスパラメータ内のパス定義およびシーケンスプレファレンスに基 づいて、結果セットがシステムにより作成されます。シーケンステンプ レート*.s、このシーケンスに属するシーケンステーブルで定義されたす べてのメソッドは結果セットにコピーされます。インテリジェントレポー トを使用している場合、メソッドまたはシーケンステンプレートで定義し たすべてのレポートテンプレート(拡張子.rdl)が、結果セットへとコ ピーされます。取り込み中、システムはこれらのファイルを使用して作動 し続けます。シーケンスを開始すると、対応するシーケンス行のメソッド がこれらの結果セットから ChemStation に読み込まれます。

[ユニークなフォルダ作成]オフを使用したシーケンスの開始

シーケンスを開始すると、システムはシーケンスファイル *.s を読み込み、シーケンステーブルのエントリに基づき、シーケンス行の対応するメソッドを ChemStation に読み込みます。2 番目のデータ保存モード [ユニークなフォルダ作成] オンと対照的に、結果セットは作成されません。シーケンスとメソッドはマスターディレクトリに残ります。

シーケンス実行中にさらに実行されるステップ:

実行されるシーケンス行ごとに以下のステップが繰り返されます。

- オートサンプラがコンフィグレーションされている場合、ChemStation ソフトウェアは、バイアルの列に入力されている数字に従ってサンプル をセットします。
- ・ メソッドパラメータを機器に読み込みます。
- プレランマクロを実行します。
- ・ サンプルを機器に注入します(マニュアルまたは自動)。
- データが測定されます。
- メソッドデータ測定が終了します。ユーザー定義のマクロすべてを含む、積分、定量、およびレポート作成を実行します。モード[ユニーク

なフォルダ作成]オンを利用している場合、分析中に追加のメソッドが保存されます。

- ポストランマクロが実行されます。
- 処理全体で、ChemStation ではシーケンスの進捗がリアルタイムで追跡 管理され、シーケンスログファイルが作成されます。



ChemStation ステータス

図 20 シーケンスステータス

自動化 / シーケンス 9 シーケンスデータファイルの構造

シーケンスデータファイルの構造

プレファレンス - シーケンスタブ

オンラインセッションの[シーケンス]タブで、ユーザーは2つの異なるデータ保存モデルを選ぶことができます。これらのモードでは、 ChemStation でシーケンスデータがどのように保存されるかが定義されます。

プレファレンス	×
パス シーケンス シグナル/レビューオプション 監査証証	
データ保存	
④ ユニークなフォルダ作成オン	
各シーケンス実行のためにユニークなデータフォルダを作成します。詳細はヘルプを見てください。	
◎ ユニークなフォルダ作成オフ	
ChemStation B.01.03 以前のようにデータを保存します。このモードは、最新のデータ レビューおよび、 ChemStation 再解析機能は利用できません。	
「名前のパターン」	
<seqn> <date> <time></time></date></seqn>	
SIM07 2010-11-15 19-11-16	
OK (キャンセル) へ、	ルプ

図 21 [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。 シーケンスデータファイルの構造

注記

作業開始時に 2 つのモードのいずれかに決定し、以後は切り替えないことを 強くお勧めします。

ChemStation が OpenLAB ECM に接続されている場合、[ユニークなフォルダ作 成オフ] の切り替えはサポートされていません。

ユニークなフォルダ作成オン

このモードのデータ保存では、生データとメソッドの間に堅牢で永続的な リンクが存在します。各データファイルは、シーケンスに取り込み済みで あるか単一分析であるかに関わらず、データ解析に使用したメソッドにリ ンクされています。

シーケンスデータは、一意の結果セット名を使用して結果セットに保存されます。[プレファレンス]ダイアログボックスの[シーケンス]タブで、結果セットの命名規則(名前のパターン)を指定できます。名前のパターンが指定されていない場合、デフォルトのシーケンス名パターンが使用されます。[シーケンス]タブはデータ取り込みのみに使用されるので、オンラインシステムのみに存在します。

シーケンス名のパターンには、さまざまなセクションを使用することがで きます。システムは、選択されたシーケンス名のパターンに含まれるセク ションを使用して結果セットの名前を決定し、作成します。この特定の シーケンスに属するデータファイル、メソッド、シーケンスログブック、 <sequence_name>.s ファイル、および <sequence_name>.b ファイルはすべ て結果セットに保存されます。結果セットは、シーケンスが開始した際に 作成されます。

シーケンスファイル (*.s) はシーケンステンプレートとして使用される ため、このコンセプトでは、既存のデータが上書きされることなく、また シーケンスパラメータが変更されることもなく、任意のシーケンスファイ ルを何度でも実行できます。カウンタと時間のどちらもシーケンス名パ ターンに使用されていない場合は、システムはカウンタを自動的に導入し て、データが上書きされないようにします。同じシーケンステンプレート を複数回使用する場合には、結果セット名にカウンタが追加されます。

ユニークなフォルダ作成オフ

このデータ保存モードでは、取り込みと解析に使用されたメソッドとデー タファイルの間で、唯一メソッド名がリンクします。メソッドのコピーは いずれもシーケンスまたはデータファイルと共には保存されません。メ

シーケンスデータファイルの構造

ソッドが変更された場合、またはその名前を持つ新しいメソッドが作成さ れた場合、シーケンスを正確に再現することができません。シーケンス データファイルは、[シーケンスパラメータ]ダイアログボックスの[データファイル]グループで指定されたパラメータに従って保存され、[プレファレンス]ダイアログボックスの[シーケンス]タブにあるシーケ ンス命名機能は、このモードでは無効になります。このモードのデータ保 存は B.02.01 より前の ChemStation リビジョンと同一であるために、 ChemStation の[データ解析] 画面の最新のデータレビュー/再解析機能 の利点をフルに活用できません。

注記
[ユニークなフォルダ作成オフ]オプションを使用して取り込まれたシーケ ンスデータは、[メソッド&ランコントロール]ビューの再解析オプション を使用して再解析する必要があります。

注記 Agilent OpenLAB エンタープライズコンテンツマネージャー (ECM) では、プ レファレンスモード [ユニークなフォルダ作成オン]を必要とします。 OpenLAB ECM の使用中は、オプション [ユニークなフォルダ作成オフ]は無 効にされます。

> [ユニークなフォルダ作成]をオフに切り替えると、データ保存に以下の 影響が出ます。

- シーケンスデータは結果セットに取り込まれませんが、[シーケンスパラメータ]で指定したサブディレクトリに直接取り込まれます(『「シーケンスパラメータ」123ページ図』を参照)。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
- これは、2回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。
- 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(『「パスの選択」112ページ 図』を参照)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にも使用する必要があります。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、異なる名前でメ 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。

9 自動化 / シーケンス シーケンスデータファイルの構造

 [ユニークなフォルダ作成]オフを利用して取り込んだシーケンスがナビ ゲーションテーブルへと読み込まれると、[データ解析]ビュー内の再 解析モードは利用できなくなります(『152ページ 図 22』)。[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は、[シーケンスパラ メータ]の[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]ビューでのみ再解析ができます(『153ページ 図 23』)。

	アイル(E) メソッド(M) シー	ケンス	(<u>S</u>) 再	け算(⊑) ク	ラフィック	7	積分(1) =	-ヤリブレーション(<u>C</u>)	レポート(B) ス	ペクトル	(<u>5</u>) バッチ(B) 表示(⊻) :	₽断(A) ヘルブ	(11)
	シグナル 🌇 🔯 🛛 メソッド 🛙	8 🗟	, 🕤 🕻	DEF_LC	.M			🔲 🕗						
	——李解析 —— —	9-	がンス:8A	гсн							_			
CONSIDUALIVOATA FAD FA	1			D b	NN	4		再計算モ	- K		0			
EATCH Image: Constraint of the state of the	CINCHEM32V1VDATA		重ね	タイナ	ライン	注入	パイアル	サンブル名	サンプルタイプ	₹	Call J-KJ-	サンブル情報	サンブルアマ	ISTO アマウン
C_DEMO1 「「」」」 2 1 5 Isocratic Std. 1 4ψ/ブルーション - 1 0 0 0 - シングルラン - 1 5 Isocratic Std. 1 エレーション - 1 0 0 0 - シングルラン - 1 5 Isocratic Std. 1 エレール・サン - 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	BATCH	F.			1		15	Isocratic Std. 1	キャリプレーション	-	1		0	0
SysPh/Sy I I Isorate Std. L/A □ /h Ψ ∪ - 0 0 0 G = StD_DAD E = 10 4 1.6 Boorate Std. 2 Ψ ∪/J /h - 0 0 0 G = RACTION_COLL C = 10 Sorate Std. 3 Φ ∪/J /h - 0 0 0	LC DEMO1		•	- 23	2		1 5	Isocratic Std. 1	キャリプレーション	-	1		0	0
	- 🍯 シングルラン		•	-	3		1 5	Isocratic Std. 1	コントロール サン	-			0	0
G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G G	. Carl ESTD_DAD		•	2	4		16	Isocratic Std. 2	サンブル	-			0	0
	FRACTION_COLL		•	20	5		1 7	Isocratic Std. 3	サンブル	-			0	0

図 22 [ユニークなフォルダ作成]がオフのときに取り込まれたシー ケンスのナビゲーションテーブル

自動化 / シーケンス 9 シーケンスデータファイルの構造

データファイル	
パス: E¥My ChemStation Files¥Data¥ サブディレクトリ: サブディレクトリ	山田太郎
 自動 ブレフィックス カウンター フレフィックス/カウンタ SIG1 000001 	ChemStore 転送設定
クット美口でおか ランタイムチェックリストに従う アンタイムチェックリストに従う アーク取り込みのみ アーク取り込みのみ アーク取り近かのの 何報便 UUU ○ mn 様わしいメソッドを読み込み。(*)	<u>シャットダウン</u> □ ポストシーケンス コマンド/マクロ ノットレディタイムアウト: 000 ♥ min
-バーコードリーダ - シーケンスで使用 バーコード不一致の場合 ・ 注入禁止	- フラクション/信幸福
シーケンスコメント	

図 23 [ユニークなフォルダ作成]がオフのときに取り込まれたシー ケンスデータの再解析

データファイル構造(ユニークなフォルダ作成オン)

下図で示されている通り、生データとメソッドの間には強い関連性があり ます。





注記

結果セットには、完全なすべてのデータファイル(*.D) セットが常に含まれ ている必要があります。データファイルの一部を削除してしまうと、OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM) に結果セットをアップロードする際に問 題が発生します。シーケンスを短くする必要がある場合には、短縮したシーケ ンスラインから新規結果セットを作成します(『「新規結果セットの作成」144 ページ 図』を参照してください)。

シーケンスデータファイルの構造

シーケンスデータファイルの命名

シーケンス内のデータファイルの命名は、次の方法で行われます。

- 自動
- ・ マニュアル
- プレフィックス / カウンタ

シーケンスのデータファイルの命名

サンプルバイアル

例: 017-0103.D

変数の意味は次のとおりです。

- ・ 最初の3 桁はバイアル番号。たとえば、017。
- 液体クロマトグラフィおよびキャピラリー電気泳動において、第4番目の桁は分離のためのハイフン(-)です。ガスクロマトグラフにおいては、この桁はフロント(F)か、バック(B)のどちらかです。
- 第5番目と6番目の桁は、使用されるメソッドを定義するシーケンス 行です。たとえば、最初のシーケンス行は01で表されます。
- 第7番目と8番目の桁は、メソッドによるこのバイアルに対する注入 番号です。

ブランクラン

例: NV--0499.D

変数の意味は次のとおりです。

- NV は、非バイアル (no vial) を表します。
- - は、分離のためのハイフンです。
- 0499 は、シーケンスの第4行の99回目のブランクランを意味します。

シーケンスデータファイルの構造

データファイル名のマニュアル入力

シーケンステーブルの列の 1 つに、[データファイル] があります。その 列にエントリがない場合は、指定されたデータファイル命名規則 (自動ま たはプレフィックスカウンタ)を使用してデータファイル名を作成します。 [データファイル] 列に任意のテキストが入力されると、ChemStation では そのテキストが分析用のデータファイル名として使用されます。

バイアル別に複数回の注入が、マニュアルデータファイル名のあるライン で指定されると、ChemStation では、ユーザーが入力した名前の最後から 文字が自動的に切り捨てられ、代わりに注入番号が追加されます。これに より、同じデータファイル名が複数回の注入に使用されるのを防ぎます。

データファイルの命名にプレフィックス / カウンタを使用

[プレフィックス / カウンタ]を使用してデータファイルに名前を付ける場合は、ChemStation では各分析の名前が割り当てられます。GC のように デュアルシグナル分析をサポートする機器の場合は、ChemStation ではシ グナルごとに名前が付けられます。

シーケンス設定では、プレフィックス / カウンタに長いファイル名を使用 できます。プレフィックス / カウンタにより定義されたデータファイル名 には、最高 15 文字と.d の拡張子、つまり全体で17 文字まで使用できま す。

プレフィックス / カウンタのフィールドには、次のルールが適用されます。

- カウンタは、最大 6 文字まで使用可能
- プレフィックスに使用されている文字が9文字に満たない場合、カウン タが自動的に6桁に拡張される
- カウンタ内で指定されている番号は、増加する値の開始番号

表 16 ファイル名

プレフィックス	カウンタ	作成されるファイル名
long	000001	long000001
longname	000001	longname000001
testwithalongna	1	testwithalongna1

シーケンスデータファイルの構造

結果セットのマイグレーション

ChemStation では、結果セットではないデータを結果セット形式に移行す るツールを用意しています。このタスクを正常に実行するには、オリジナ ル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 シーケンスラインを含み、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、[結果セットマイ グレーション] を開始します。

🐴 結果セットマイグレーション		×
結果セットにデータをマイグレーションする 戦シーケンス テンプレート選択	ため、シーケンス テンプレート、 メリッド パス、データ ソースおよび出力先を選択します。	
🔰 メソッド パス選択		
📚 ソース選択		
💐 出力先選択		
メッセージと注意:		* *
	開始 閉じる ヘルプ	

図 25 結果セット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。

[シーケンステンプレート選択]:移行す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。

[メソッドパス選択]:シーケンステーブルが参照しているメソッドが含まれるディレクトリを選択します。

[ソース選択]:移行するデータファイルを含むディレクトリを選択します。

シーケンスデータファイルの構造

[出力先選択]:作成する結果セット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が完了したら、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。

- 結果セット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結果セットにコピーされます。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。
- シーケンステーブルで参照するメソッドは、指定したパスから結果セットフォルダへコピーされます。
- 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。

結果セット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 セージと注意]フィールドに表示されます。マイグレーション中に問題が 発生した場合にも、それを表すメッセージが表示されます。警告メッセー ジをダブルクリックすると、警告に関する詳細が表示されます。

ポストシーケンス処理

通常実行中にシーケンスが完了した後、またはシーケンス処理中に ChemStation にエラーが発生した後の処理を指定できます。LC の処理に は、シーケンスパラメータの [ポストシーケンスコマンド/マクロ] チェックボックスをオンにすることでこれを指定できます。次の選択が可 能です。

- システムを、ポンプとランプがオフになる STANDBY の状態に設定する
- システムを、すべてのランプがオフになる LAMPOFF 状態に設定する(LC および CE のみ)
- システムを、すべてのポンプがオフになる PUMPOFF 状態に設定する (LC および CE のみ)
- デフォルトの SHUTDOWN マクロを使用するか、SHUTDOWN. MAC を変更して、特定の処理を決定する

たとえば、シーケンスが完了した後は、システムのスイッチを切ること ができます。シャットダウンマクロを使用すると、フローをゼロにセッ トしたり、フローを緩やかに減らしたりもできます。

シーケンスパラメータ内では、[ポストシーケンスコマンド/マクロ] フィールドにマクロの名前を含めて、ボックスをオンにすることで、任意 のカスタムマクロを実行するように指定します。

ノットレディータイムアウト(LC および CE のみ)

シーケンスパラメータ内のノットレディータイムアウトは、装置の準備が 整うまでシステムが待機する時間の長さです。この時間が経過すると、シ ステムはシャットダウンします。

待機時間(LC および CE のみ)

シーケンスパラメータでは、メソッドの読み込み後、そのメソッドを使用 して注入するまでの待機時間を指定できます。これは、新しい分析条件を 利用する場合に、カラム / キャピラリを再平衡化するために役立ちます。

自動リキャリブレーション

自動リキャリブレーション

キャリブレーションは、たとえばカラムやキャピラリの変更など、操作条件を変更した後にしばしば実行されます。分析性能に影響を与えるファクタを補正するために、分析シーケンスの開始時またはシーケンス実行中に 定期的にプログラムの一部として自動リキャリブレーションを実行します。

自動シーケンスリキャリブレーションを指定するには、2 つの方法があり ます。

- 明示的キャリブレーションシーケンス
- 周期的キャリブレーションシーケンス

プレファレンスモード [ユニークなフォルダ作成オン] を使用し たリキャリブレーション

リキャリブレーション実施中、使用したメソッドのキャリブレーション テーブルは定義したメソッド設定に従って更新されます。データ保存モー ド[ユニークなフォルダ作成オン]を使用すると、リキャリブレーション メソッドは結果セット内で利用可能となります。この処理中、シーケンス メソッドのキャリブレーションテーブルは更新されます。DA.M に加え、 個々のデータファイルのメソッドには結果作成に使用したキャリブレー ションの更新が含まれます。

プレファレンスモード [ユニークなフォルダ作成オフ] を使用し たリキャリブレーション

リキャリブレーション実施中、使用したメソッドのキャリブレーション テーブルは定義したメソッド設定に従って更新されます。データ保存モー ド[ユニークなフォルダ作成オフ]を使用すると、リキャリブレーション 中に、マスターメソッドのキャリブレーションテーブルが更新されます。

リキャリブレーションの指定

シーケンス用のリキャリブレーションパラメータは、シーケンステーブル に直接入力されます。これらのパラメータは、シーケンスの中でメソッド がどのようにリキャブレーションされるかを定義します。

シーケンステーブル内のリキャリブレーションパラメータ

レスポンスファクタおよびリテンション/マイグレーションタイムは、次 に挙げるいくつかの方法で更新できます。キャリブレーションレベル、レ スポンスファクタ更新、およびリテンション/マイグレーションタイム更 新は、キャリブレーションテーブルをリキャリブレーションする際にデー タ解析で使用される命令です。

サンプルテーブルの [サンプルタイプ]の列にキャリブレーションと入力 した場合、次に挙げる列が有効になり、編集できます。

- Cal レベル
- RT 更新
- RF 更新
- ・ インターバル

これらの各列に入力できる値を表に示します。

表 17 シーケンステーブル内のリキャリブレーシ	ィョンパ	ペラメー	·タ
--------------------------	------	------	----

CAL レベル	RT 更新	RF 更新	インターバル
キャリブレーション テーブルレベル番号 (1-999)	更新せず	更新せず	周期的リキャリブレー ションインターバル番号 (1-999)
	平均	平均	ブランク
	置換	置換	
		ブラケット	

リキャリブレーションの指定

CAL レベル	RT 更新	RF 更新	インターバル
		F%	

表 17 シーケンステーブル内のリキャリブレーションパラメータ

この表では、シーケンステーブル内の列が表示されており、リキャリブ レーションパラメータ、およびそこに入力できる値が含まれています。

更新せず

レスポンスファクタまたはリテンション / マイグレーションタイムを変更 しません。

置換

以前のリテンション / マイグレーションタイムおよびレスポンス(面積または高さ)を、現在の分析のみのものと置き換えます。このリキャリブレーション分析の中に見つからないピークに対しては、レスポンスは変更されません。

平均

各ピークのリテンション / マイグレーションタイムおよびレスポンス(面積または高さ)を、元のキャリブレーションランとそれ以降に平均化されたすべてのリキャブレーションに基づいて平均化します。リキャブレーションの中に、ピーク1つが欠けている場合でも、ピークの平均レスポンスには大きな影響はありません。

ブラケット

サンプルは、プレサンプルおよびポストサンプルキャリブレーションに挟 み込まれます。閉じているブラケットの最後のキャリブレーションサンプ ルが分析されると、解析が実行されます。既存のキャリブレーションデー タは、開いているブラケットのキャリブレーションランの結果データに置 き換わります。閉じているブラケットキャリブレーションとそのキャリブ レーションテーブルとの平均を計算します。 9 自動化 / シーケンス リキャリブレーションの指定

インターバル

インターバルは、シーケンス中のキャリブレーション頻度を決定します。 キャリブレーション頻度は、次のキャリブレーション注入セットが実行さ れる前に行われるサンプル注入回数に対応します。分析の開始時にキャリ ブレーションが行われ、その結果(レスポンスファクタなど)がキャリブ レーション テーブルに入力されます。これらの結果は、その後、二次的な 定量計算に用いられます。指定した注入回数が実行されると、別のキャリ ブレーションが分析され、その結果はキャリブレーションテーブルに入力 されます。このとき、前のキャリブレーション分析結果は上書きされます。

F%

デルタ % 計算により、解析からのレスポンスファクタとキャリブレーショ ンテーブルにマニュアルで入力されたレスポンスファクタの比較が可能に なります。デルタ % は、テーブル内のすべてのキャリブレーションピーク に適用されます。複数の内部標準を同定でき、次にその測定レスポンス ファクタはその他のピークの新しいレスポンスファクタの計算に使用され ます。どの内部標準が、キャリブレーションテーブルの各ピークのデルタ % 計算に使用されるか同定します。

シーケンスの種類

シーケンスには、次のような種類があります。

- 明示的キャリブレーションシーケンス
- 明示的シングルレベルキャリブレーションシーケンス
- 周期的マルチレベルキャリブレーションシーケンス
- シーケンス内での明示的および周期的キャリブレーション両方
- ブラケットキャリブレーションを含む周期的キャリブレーションシーケンス

自動化 / シーケンス

シーケンスの種類

9

明示的キャリブレーションシーケンス

この種類のシーケンスは、シーケンステーブルでユーザーが定義したインターバルでリキャブレーションされます。

明示的キャリブレーションシーケンスには、シーケンステーブル内にイン ターバルのエントリを指定せずに、キャリブレーションサンプルがシーケ ンスに入れられます。シーケンステーブル内にあるキャリブレーションサ ンプルのエントリごとに、リキャリブレーションが1度行われます。

周期的シングルレベルキャリブレーションシーケンス

この種類のシーケンスは、同じバイアル、つまり、シーケンス内で規則的なインターバルのキャリブレーションサンプルを使用します。

シーケンステーブル内のインターバルエントリは、リキャリブレーション の実行方法を決定します。例えば、インターバル値が2の場合は、シーケ ンス内で2つのサンプルバイアルごとにリキャリブレーションされます。

周期的マルチレベルキャリブレーション シーケンス

このタイプのシーケンスは、異なるキャリブレーションサンプルを使用し て、マルチレベルキャリブレーションメソッドをリキャブレーションしま す。

次に挙げる例では、2 つのグループのサンプルを分析するためにメソッド A およびメソッド B からなる 2 つのメソッドシーケンスについて説明し ます。メソッドの両方は、マルチレベルキャリブレーションメソッドで、 定義されたインターバルごとに自動的にリキャリブレーションを行います。

シーケンステーブルには、メソッドごとに次の 3 つのエントリがありま す。

- 2 つのキャリブレーションレベル:
 - メソッド A のシーケンスライン 1 および 2。
 - メソッド B のシーケンスライン 8 および 9。
- サンプル用の5つのエントリ:
 - メソッド A のシーケンスライン 3 から 7 まで。
 - メソッド B のシーケンスライン 10 から 14 まで。

シーケンスリキャリブレーションテーブルのリキャリブレーションイン ターバルによって、キャリブレーションは規則的なインターバルに実行さ れるように指定されています。

- メソッド A では、サンプルが 2 つ終わるごとにリキャブレーションされます。
- メソッド B では、サンプルが 3 つ終わるごとにリキャブレーションされます。

以下のシーケンステーブルでは、例を単純化するために省略してあります。

自動化 / シーケンス 9 シーケンスの種類

ライン バイ メソッド名 注入 サンプルタイプ Cal レ RF 更新 RT 更新 インター アル 回数 ベル バル 1 1 メソッドA 1 キャリブレー 1 平均 更新なし 2 ション 2 2 メソッド A キャリブレー 2 平均 更新なし 2 1 ション 3 10 メソッド A 1 4 11 メソッドA 1 5 12 メソッドA 1 6 13 メソッド A 1 7 メソッド A 14 1 8 メソッド B キャリブレー 平均 更新なし 3 1 3 1 ション 9 メソッド B キャリブレー 平均 更新なし 5 2 2 3 ション 10 20 メソッド B 1 11 21メソッド B 1 メソッド B 12 22 1 13 23 メソッド B 1 14 24 メソッド B 1

表 18 メソッド A および B 用のシーケンステーブル

メソッド A の分析順序

メソッド A は、2 つのメソッドを含むシーケンスの最初の部分のメソッド です。

表 19 メソッド A の分析順序

注入番号	メソッド	バイアル	操作
1	メソッド A	1	キャリブレーションレベル 1 およびレ ポート
2	メソッド A	2	キャリブレーションレベル 2 およびレ ポート
3	メソッド A	10	サンプル分析およびレポート
4	メソッド A	11	サンプル分析およびレポート
5	メソッド A	1	キャリブレーションレベル 1 およびレ ポート
6	メソッド A	2	キャリブレーションレベル 2 およびレ ポート
7	メソッド A	12	サンプル分析およびレポート
8	メソッド A	13	サンプル分析およびレポート
9	メソッド A	1	キャリブレーションレベル 1 およびレ ポート
10	メソッド A	2	キャリブレーションレベル 2 およびレ ポート
11	メソッド A	14	サンプル分析およびレポート

メソッド B の分析順序

メソッド B は、2 つのメソッドを含むシーケンスの 2 番目の部分のメ ソッドです。メソッド B はメソッド A とは異なり、キャリブレーション レベル 2 では、バイアルごとに 2 回の注入があります。インターバルエ ントリは 3 に設定されています。

注入番号	メソッド	バイアル	操作
12	メソッド B	3	キャリブレーションレベル 1 およ びレポート
13	メソッド B	5	キャリブレーションレベル 2 およ びレポート
14	メソッド B	5	キャリブレーションレベル 2 およ びレポート
15	メソッド B	20	サンプル分析およびレポート
16	メソッド B	21	サンプル分析およびレポート
17	メソッド B	22	サンプル分析およびレポート
18	メソッド B	3	キャリブレーションレベル 1 およ びレポート
19	メソッド B	5	キャリブレーションレベル 2 およ びレポート
20	メソッド B	5	キャリブレーションレベル 2 およ びレポート
21	メソッド B	23	サンプル分析およびレポート
22	メソッド B	24	サンプル分析およびレポート

表 20 メソッド B の分析順序

シーケンスの選択分析を使用すると、『168ページ 図 表 19』や 『169 ページ図 表 20』に示したような結果を表示でき、シーケンステーブル の設定後に分析順序をプレビューして確認することができます。

明示的および周期的キャリブレーション両方

この種類のシーケンスは、同じシーケンス内にある明示的および周期的 キャリブレーションから構成されています。

この機能を使用すると、シーケンスの初めにメソッドを完全にリキャリブ レーションすることができ(明示的リキャリブレーション)、その後、シー ケンスの間にキャリブレーションの更新ができます(周期的リキャリブレーション)。

- シーケンステーブル内で、キャリブレーションレベルごとに、キャリブレーション
 ション ラインを 2 行指定する必要があります。キャリブレーション ラインの 1 つは、明示的リキャリブレーションエントリ用で、もう 1 つは、 周期的リキャリブレーションエントリ用です。
- シーケンステーブルでは、キャリブレーション ラインごとのエントリ を必ず含む必要があり、またすべての周期的リキャリブレーションバイ アルは、必ず明示的リキャリブレーションおよびサンプルエントリの前 に位置する必要があります。

例

以下のシーケンステーブルは、SimpReg と呼ばれるシングルレベルキャリ ブレーションメソッドを表しています。例を単純化するために省略してあ ります。

表 21 SIMPREG 用のシーケンステーブル

ライ ン	バイ アル	メソッド 名	注入回数	サンプルタイ プ	Cal レベ ル	RF 更新	RT 更新	インター バル
1	1	SimpReg	1	キャリブレー ション	1	平均	平均	3
2	1	SimpReg	1	キャリブレー ション	1	置き換え	置き換 え	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

ライ ン	バイ アル	メソッド 名	注入回数	サンプルタイ プ	Cal レベ ル	RF 更新	RT 更新	インター バル
1	1	SimpReg	1	キャリブレー ション	1	平均	平均	3
2	1	SimpReg	1	キャリブレー ション	1	置き換え	置き換 え	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

表 22 SIMPREG 用のシーケンステーブル

シングルキャリブレーションレベルごとに 2 つのエントリがあります。

- 最初のキャリブレーションラインは、同じレベル用ですが、キャリブレーションパラメータを平均化します。インターバルのエントリは、サンプルが3つ終わるごとにリキャリブレーションが実行されるように指定します。
- 2番目のエントリは、すべてのリキャリブレーションパラメータを置き 換えます。つまり、リキャリブレーション全体が実行されます。これに は、リキャリブレーションインターバルがありません。
- シーケンステーブルは7行で構成されています。最初の行は、周期的リテーブル
 キャリブレーションサンプルを示しています。2番目の行は、シーケンスの始めに1度だけ実行される明示的リキャリブレーションを示しています。3行目から7行目までは、分析するサンプルです。

シーケンステーブルのエントリの順序はとても重要です。周期的キャリブ レーションを指定するすべての周期的リキャリブレーションバイアルのエ ントリは、サンプルエントリ、またはメソッド用の明示的なリキャリブ レーションエントリよりも**必ず前に**位置する必要があります。

SimpReg の分析順序

以下の表は、SimpReg メソッドの分析順序です。

表 23 SimpReg の分析順序

シーケンス ライン	注入番号	メソッド	バイアル	操作
2	1	SimpReg	1	サンプルキャリブレーション
1	2	SimpReg	1	通常キャリブレーション
3	3	SimpReg	2	サンプル分析
3	4	SimpReg	3	サンプル分析
4	5	SimpReg	4	サンプル分析
5	6	SimpReg	1	通常キャリブレーション
6	7	SimpReg	5	サンプル分析
7	8	SimpReg	6	サンプル分析

ブラケットを使用した周期的キャリブレーションシーケンス

ブラケットを使用した周期的キャリブレーションシーケンスでは、現在の キャリブレーションと以前のキャリブレーションの結果を平均化するによ り、不明の定量結果を計算するために使用されるキャリブレーションテー ブルが生成されます。この新しいキャリブレーションテーブルは、サンプ ルの分析時の機器のレスポンスをより正確に表すものです。

例

次のような状況を考えてみてください。

- 機器のレスポンスがドリフトしている。
- 同一の2成分混合物が3回注入されるように指定されている。
- 2回の注入は、キャリブレーションサンプルとして指定されており、残りの1回は、サンプルとして指定されている。
- 最初と3番目の注入は、キャリブレーションサンプルである。

• 2 番目の注入はサンプルです。

2 番目の注入(サンプル)の正確な定量結果を取得するには、2 つのキャ リブレーションサンプル間の線形補間行われる必要があります。図を参照 してください。この処理は、ブラケットと呼ばれます。



図 26 ブラケット

ブラケットシーケンス処理

- 最初のキャリブレーションバイアルが分析される。
- サンプルバイアルが分析される。
- 次のキャリブレーションバイアルが分析される。
- 既存のレスポンスファクタを新しいものと取り替えて、以降のキャリブレーションランを新しいキャリブレーションテーブルに平均化して格納することにより、キャリブレーションテーブルが作成される。
- サンプルバイアルデータが解析され、レポートが生成される。
- 分析が必要なサンプルバイアルがさらにある場合は、ステップ2 ヘシー ケンスが戻る。

例

このセクションでは、Brack.M と呼ばれる 1 つのメソッドから構成される ブラケットシーケンスの例を説明します。Brack.M メソッドは、周期的 キャリブレーションを使用した 2 レベルの内部標準メソッドです。

シーケンス
 Brack. M のシーケンステーブル(次ページ)は、例を単純化するために省
 テーブル
 略してあります。このシーケンステーブルは7行で構成されています。最初の2行は各レベル用にリキャリブレーション条件を定義します。残りの行は、分析するサンプルを定義します。

さらに具体的に説明すると、Brack.M メソッドのテーブルには次に挙げる ものが含まれます。

- キャリブレーションサンプルを使用したサンプルのブラケットを指定する、[レスポンスファクタ更新]列の中の「ブラケット」というエントリ。
- リテンション/マイグレーションタイムの置換を指定する、[リテンション/マイグレーションタイム更新]列の中の「置き換え」というエントリ。
- 3 サンプルごとにリキャリブレーションを実行するように指定する、[リキャリブレーションインターバル]列の中にある「3」というエント リ。

表 24 BRACK-M 用シーケンステーブル

ライン	バイ アル	メソッド名	注入 回数	サンプルタイ プ	Cal レ ベル	RF 更新	RT 更新	インター バル
1	1	BRACK-M	2	キャリブレー ション	1	ブラケット	置き換え	3
2	2	BRACK-M	2	キャリブレー ション	2	ブラケット	置き換え	3
3	10	BRACK-M	1					
4	11	BRACK-M	1					
5	12	BRACK-M	1					
6	13	BRACK-M	1					
7	14	BRACK-M	1					

自動化 / シーケンス 9 シーケンスの種類

	Mothod			DataEila				Oneration
No.	Name	No.	No.	Name	No.	RF	Ret	operation
1	Brack.M	1	1	c1-03001.d	1	R	R	Report for Calibration Run No.1
2	Brack.M	1	2	c1-03002.d	1	A	R	Report for Calibration Run No.2
3	Brack.M	2	1	c2-03001.d	2	R	R	Report for Calibration Run No.3
4	Brack.M	2	2	c2-03002.d	2	A	R	Report for Calibration Run No.4
								Print Calibration Table
5	Brack.M	10	1	010-0301.d				Sample Analysis, no report
6	Brack.M	11	1	011-0301.d				Sample Analysis, no report
7	Brack.M	12	1	012-0301.d				Sample Analysis, no report
8	Brack.M	1	1	c1-03003.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
9	Brack.M	1	2	c1-03004.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
10	Brack.M	2	1	c2-03003.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
11	Brack.M	2	2	c2-03004.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
								Print Calibration Table
				010-0301.d				Report for Sample Run No.5
				011-0301.d				Report for Sample Run No.6
				012-0301.d				Report for Sample Run No.7
				c1-03003.d	1	R		Report for Calibration Run No.8
				c1-03004.d	1	A		Report for Calibration Run No.9
				c2-03003.d	2	R		Report for Calibration Run No.10
				c2-03004.d	2	A		Report for Calibration Run No.11
12	Brack.M	13	1	013-0301.d				Sample Analysis, no report
13	Brack.M	14	1	014-0301.d				Sample Analysis, no report
14	Brack.M	1	1	c1-03005.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
15	Brack.M	1	2	c1-03006.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
16	Brack.M	2	1	c2-03005.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
17	Brack.M	2	2	c2-03006.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
								Print Calibration Table
				013-0301.d				Report for Sample Run No.12
				014-0301.d				Report for Sample Run No.13
				c1-03005.d	1	R		Report for Calibration Run No.14
				c1-03006.d	1	A		Report for Calibration Run No.15
				c2-03005.d	2	R		Report for Calibration Run No.16
				c2-03006.d	2	A		Report for Calibration Run No.17
						Whee		
						wnei	D D	average
							K =	reprace

図 27 ブラケットシーケンスの分析順序

標準の同じ希釈率を含むマルチバイアルを使用した周期的 リキャリブレーションシーケンス

「ラウンドロビン」キャリブレーションバイアルを使用した周期 的リキャリブレーションシーケンス

周期的リキャリブレーションを実行する、つまり決まった数のサンプル注入の後に自動リキャリブレーションを実行する大きなシーケンスを分析する場合、シーケンスの過程においてキャリブレーションバイアルの容量が空になってしまうという潜在的リスクがあります。ChemStation シーケンステーブルは、ラウンドロビン形式で使用される標準と同じ希釈率を含む 一連のバイアルを使用する方法を提供します。

この機能のおかげで、複数のキャリブレーションを使用する大きなシーケ ンスを、決まったインターバルで自動リキャブレーションを行うように定 義でき、各キャリブレーションバイアルは同一程度に消費されます。

適切な数のキャリブレーションバイアルを定義することで、各キャリブ レーションバイアルが一度だけ使用されることを保証することもできます。 たとえば、すべてのリキャリブレーションに新しいキャリブレーションバ イアルが必要とされる場合には、以上のことは重要な要件です。なぜなら、 いったんセプタムが破裂したり、スチールニードルと接触して劣化し始め ると、検体が蒸発するからです。以下のセクションでは、ChemStation シーケンステーブルを以上の要件を満たすように設定するにはどうしたら よいかついて説明します。

シーケンス全体におけるキャリブレーション化合物の予想使用量に基づいて、各レベル用のキャリブレーションバイアルの全体の数を決定してください。

キャリブレーションバイアルごとに、個別の周期的リキャリブレーション 行を設定します。同一のキャリブレーションレベル用に定義された行は、 隣接するシーケンス行の中にある必要があり、定義されたバイアルの位置 も、隣接している必要があります。すべてのキャリブレーション行に対し て、同一のリキャリブレーションインターバルを選択します。たとえば、 使用するシーケンスでサンプル注入を 6 回行うたびにリキャブレーション すル必要がある場合、リキャブレーションインターバルを 6 に設定しま す。

バイア ル番号	サンプル名	サンプルタ イプ	メソッド名	注入回 数	レベル	RT 更 新	RF 更 新	インター バル
1	Calla	Calib	メソッドA	1	1	平均	平均	6
2	Callb	Calib	メソッドA	1	1	平均	平均	6
3	Callc	Calib	メソッドA	1	1	平均	平均	6
5	Cal2a	Calib	メソッドA	1	2	平均	平均	6
6	Cal2b	Calib	メソッドA	1	2	平均	平均	6
7	Cal2c	Calib	メソッドA	1	2	平均	平均	6
10	サンプル 10	サンプル	メソッドA	6				
11	サンプル 11	サンプル	メソッドA	6				
12	サンプル 12	サンプル	メソッドA	6				
13	サンプル 13	サンプル	メソッドA	6				
14	サンプル 14	サンプル	メソッドA	6				

表 25 各レベルに定義された 3 つのバイアルを使用する周期的リキャリブレーションシー ケンス

実行の順序は次のとおりです。

- バイアル 1 (Calla)
- バイアル 5 (Cal2a)
- バイアル 10 (サンプル 10) から 6 回注入
- バイアル 2 (Callb)
- バイアル 6 (Cal2b)
- バイアル 11 (サンプル 11) から 6 回注入
- バイアル 3 (Callc)
- バイアル 7 (Cal2c)
- バイアル 12 (サンプル 12) から 6 回注入
- バイアル 1 (Calla)

9 自動化 / シーケンス シーケンスの種類

- バイアル 5 (Cal2a)
- バイアル 13 (サンプル 13) から 6 回注入
- バイアル 2 (Callb)
- バイアル 6 (Cal2b)
- など

キャリブレーションごとに異なるバイアルを使用する周期的リ キャリブレーション

すべてのキャリブレーションバイアルが、確実に 1 度だけ注入されるよう にするために、シーケンスは十分な数の異なるキャリブレーションバイア ルを定義し、前の例で説明した**ラウンドロビン**順が適用されないようにす る必要があります。たとえば、サンプル 10 個ごとに要求されるリキャリ ブレーションに、シーケンスが 80 個のサンプルバイアルを処理する場合、 シーケンステーブルには、各レベルごとに 80/10 + 1= 9 で計算される 9 個のキャリブレーション行が含まれている必要があります。

前の例にあったように、キャリブレーション行は、隣接するバイアルの位置を参照する隣接するシーケンス行である必要があります。

開始および終了ブラケットに異なるバイアルを使用するブラケッ トシーケンス

同じ機能がブラケットシーケンスでも利用可能です。キャリブレーション バイアルの適切なバイアル範囲を定義することにより、異なるキャリブ レーションバイアルが開始および終了ブラケットに使用されるようにブラ ケットシーケンスを定義できます。この場合もまた、キャリブレーション バイアルのバイアルの位置と同じく、シーケンス内のキャリブレーション 行は隣接している必要があります。

ブラケットキャリブレーションバイアルがラウンドロビンモードで使用されるか、1回のシングル注入のみに使用されるかは、各レベル用のキャリ ブレーションバイアルの合計数、およびシーケンスが要求するリキャリブ レーションの数に単に依存します。

以下の例では、キャリブレーションによりブラケットされている 3 回のサ ンプル注入を定義しています。開始ブラケットは、終了ブラケットとは異 なるキャリブレーションを使用します。サンプル注入が行われるごとに、 リキャリブレーションを実行する必要があります。このため、リキャブ

自動化 / シーケンス 9 シーケンスの種類

レーションインターバルは 1 にします。レベルごとのキャリブレーション 行の数は、サンプルの数に 1 を足した数です。

バイア ル番号	サンプル名	サンプルタ イプ	メソッド名	注入回 数	レベ ル	RT 更 新	RF 更 新	インター バル
1	Calla	Calib	メソッドA	1	1	Brkt	Brkt	1
2	Callb	Calib	メソッドA	1	1	Brkt	Brkt	1
3	Callc	Calib	メソッドA	1	1	Brkt	Brkt	1
4	Calld	Calib	メソッドA	1	1	Brkt	Brkt	1
10	サンプル 10	サンプル	メソッドA	1				
11	サンプル 11	サンプル	メソッドA	1				
12	サンプル 12	サンプル	メソッドA	1				

表 26 開始および終了ブラケットに使用される異なるバイアル

このシーケンスの実行順序は次のとおりです。

- バイアル 1 (Calla)、開始ブラケット 1
- バイアル 10 (サンプル 10)
- バイアル 2 (Callb)、終了ブラケット 1 および開始ブラケット 2
- ・ バイアル 11 (サンプル 11)
- バイアル 3 (Callc)、終了ブラケット 2 および開始ブラケット 3
- バイアル 12 (サンプル 12)
- バイアル 4 (Callb)、終了ブラケット 3


ChemStation のコンセプトとワークフロー

10 データ解析とレビューの概念

データ解析 182
再計算モード 184
再解析モード 186
メソッドの更新 190
データ解析のレポートビューア 191
レビュー 195
インテリジェントレポート要件 195
データファイル選択 196
レポートテンプレート選択 197
レポートプレビュー 197
レビューワークフローの例 197

この章では、データ解析およびデータレビューのオプションについ て説明します。OpenLAB CDS ChemStation Edition では、これらの オプションは 2 つの異なるビューとして使用できます。



10 データ解析とレビューの概念 データ解析

データ解析

ー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、指定したフォルダ内 のすべてのシーケンスデータ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。

■ LC1200 (オフライン): データ報析 ファイル(E) メソッド(M) シーケンス(S) 再計算(L) グラフィックス(Q) 積分(L) キャリブレーション(C) レポード(B) スペクトル(S) バッチ(B) 表示(V) 中断(A) ヘルブ(H)											
シグナル 💼 🎰 メソッド 💦 🛃 🎧 🛄 LC_DEMO.M (ジーケンス)											
データ解析 早	9-1		DEMO1								4
シーケンスメソッド /			₩₩.	🖶 🖪 🔜		レディ/デ・	ータ再解析モード	🧇 🕜			
C:¥CHEM32¥LC_DEM01		重ね	タイプ	ライン 注入	バイアル	サンブル名	シーケンス メソッド	サンブル タイブ	₹	Calレベル	サンブル情す ^
	•	+		1	1 P1-F-01	isocratic sampl	LC_DEMO.M	キャリブレーション	-	1	isocratic c
		+	2	2	1 P1-F-02	isocratic sample	LC_DEMO.M	キャリブレーション	-	2	isocratic ch [≡]
		+	R	3	1 P1-F-03	isocratic sample	LC_DEMO.M	キャリブレーション	-	3	isocratic ch
		+	a	4	1 P1-F-04	isocratic sample 1	LC_DEMO.M	サンブル	-		isocratic ch
		+	- Reg	5	1 P1-F-05	isocratic sample	LC_DEMO.M	サンブル	-		isocratic ch
		+	R	6	1 P1-F-06	isocratic sample 2	LC_DEMO.M	サンブル	-		isocratic ch
マスターメンッド / _	•		<u>85</u>	-	1 01 5 05	ten analite an anala	10.0510.0	aller → a			F
	Ŀ	積分 ឡ	キャリブレ	レーション 📶 :	シグナル <u>枫</u> 新	も度 💩 スペクトル					

図 28 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すべての分析のセットのリストで構成されます。 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むことができます。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使用できます。

シーケンス分析は、常に取り込みまたは再解析で使用したシーケンスメ ソッドと共に読み込まれます。シングルランは、ChemStation に最後に読 み込まれたマスターメソッドと共に読み込まれます。

ChemStation により、データファイルがナビゲーションテーブルから読み 込まれる時に自動的に実行されるデフォルトのアクションを指定すること ができます。これには、読み込み後にそのままクロマトグラムを積分する、 または各シングル注入のレポートの印刷するなどの解析タスクが含まれま す。下図を参照してください。

データ解析とレビューの概念 10

データ解析

図 29 [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

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 ブにある [シグナル読み込み]オプション の機能は、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にのみ適用されます。[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。

2 つのデータ分析モードから選択することが可能です;再計算モード、再 解析モード上記モードは、[ビュー]メニュー([ビュー]) 再計算モー ド、[ビュー]) 再解析モード)から、またはツールセットからアクセス 可能です(下図を参照)。



図 30 再計算モードおよび再解析モードの選択

各モードのツールセットには、固有の機能が含まれています。2 つのモー ドとそれぞれの機能については、次のセクションで説明します。[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

データ解析

ブで、結果セットを読み込む時にデフォルトでどのモードを有効にするか を選択することができます。

再計算モード

分析を読み込むと、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、レビューすることができます。この場合、シー ケンスコンテキストを考慮しない、または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。このタイプのデータ解 析用のナビゲーションテーブルには、下図に示すツールセットが用意され ています。



図 31 ナビゲーションテーブルの再計算ツールセット

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始めにジャンプ、 次または前の分析に進む、分析全体にオートステップを行う、オートス テップの停止、特定のメソッドを使用しての分析再計算、ナビゲーション テーブルのクリアなどを行うことができます。

再計算は分析ごとの解析を意味します。ナビゲーションテーブルには、分 析済みのランのみが表示されます。ナビゲーションテーブルにフィルタを 適用した場合、実際にテーブルに表示された分析のみが再計算されます。 ナビゲーションテーブルの並び替えも考慮されます。

再計算は、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結果セット内に存在しない、異なるメソッドを用いて結果セットのデータファイルをレビューする場合。
- シーケンスメソッドを編集し、これらのパラメータが異なる分析にどの 程度適用するかをチェックするために、このメソッドを使用して特定の 分析をレビューする場合。

データ解析

特定のメソッドによる再計算

デフォルトでは、データファイルと共に読み込まれたメソッドを、常に再 計算に使用します。シーケンス分析については、シーケンスメソッドを使 用します。シングルランについては、最後に読み込まれたマスターメソッ ドを使用します。

この機能では、特定のマスターメソッドを使用して、ナビゲーションテー ブルに表示された分析を再計算することができます。[シングルメソッド で再計算]ダイアログで、必要なマスターメソッドを指定します(下図を 参照)。選択済みのマスターメソッドがインテリジェントレポート(『「レ ポート作成」215ページ図』を参照)を使用している場合、シングル注入 レポートで使用するレポートテンプレートを指定することもできます。

メソッドで再計算		×
አህ୬ሾ፡	[参照
レポートテンプレート:		参照
オートステップ間隔:	10 sec	
	出力充 ・ プレビュー 〇 プリンタ 〇 メソッドでの指定に従う 〇 なし (レポートなし)	
	OK 年やンセル	<u> へルプ</u>

図 32 [シングルメソッドで再計算]ダイアログ

[マスターソッドの参照] ダイアログと [マスターパスのテンプレートの 参照] ダイアログでは、プレファレンスで指定したすべてのファイルロ ケーションを閲覧することができます。

注記 ChemStation の以前のリビジョンでは、ツールバーから [現在のメソッド使 用]、[データファイルからメソッド使用]、[シーケンスメソッド使用] のいずれかを選択することで、特定メソッドを利用しての再計算が可能です。

前回の結果モードでの再計算

このモードでは、シーケンスメソッドではなく、各分析のデータファイル メソッド(DA. M)が読み込まれます。このメソッドは、前回のデータ分析 (取り込み、再解析、再計算)に使用したものです。そのため、一時的に シーケンスメソッドが変更された場合にも、前回の結果を最初に使用した メソッドで再生することができます。

データ解析

ツールバー内のメソッド名には DA.M が表示されており、データファイル メソッドが読み込まれていることを示します。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。

注記 DA.M は通常、読み取り専用です。DA.M は、マニュアルで読み込むことはでき ません。再計算用に前回の結果モードで ChemStation によってのみ読み込ま れます。編集は可能ですが、保存することはできません。レポートを生成する 場合、まずシステムにメソッドを保存する必要があります。この場合、新規結 果が作成されますと警告メッセージが出ます。ユーザーが確認すると、DA.M が現在の設定で更新されます。

再解析モード

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。 再計算とは対照的に、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、キャリブレーション分析の場合にはシーケンスメソッド のキャリブレーションテーブルが更新され、倍率、アマウントなどをシー ケンステーブルで変更できます。

結果セットには再解析に必要なすべてのファイルが含まれます。具体的に はデータファイル、シーケンス ファイルのコピー、すべてのシーケンスメ ソッド、最初に取り込みに使用したすべてのレポートテンプレートです。 そのため、再解析するには、シーケンスをナビゲーションテーブルに読み 込み、必要な再解析ツールセットを選択します。

今後の分析のための入力として、シーケンスメソッドでの変更を対応する マスターメソッドに反映させる必要がある場合には、[マスターメソッド の更新]機能により簡単に反映できます(『「マスターメソッドの更新」99 ページ図』を参照)。

データファイルを再解析するたびに、DA.M が自動的に更新されます。

再解析のため、ナビゲーションテーブルは以下のツールセットを提供しま す。



図 33 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

データ解析とレビューの概念 10 データ解析

このツールセットにより、シーケンステーブルの編集、シーケンスパラ メータの編集、現在のシーケンスの保存、現在のシーケンスの印刷、シー ケンスログブックの表示または非表示、シーケンスの再解析、シーケンス の停止、またはシーケンスの一時停止を行うことができます。

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 作成された結果セットにだけ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、および「ユニークな フォルダを作成 オフ」で取り込まれたデータ(『「プレファレンス - シー ケンスタブ」149 ページ 図』を参照)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、[メソッド & ランコントロール] のシーケンスパラメータで [メソッド実行部分] を [再解析のみ] に 選択し、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、ナビゲーションテーブルの[データ解析タスク]として再 解析が提供されます。

他の方法としては、新規にユーザーが編集した結果セットにサンプルまた はシーケンスを追加する方法があります。そこでシーケンスメソッドを割 り当てた後に、シーケンス全体を再解析することが可能です(『「自己編集 した結果セット」190ページ図』を参照)。

再解析に関しては以下の規則に注意してください。

- 結果セットをナビゲーションテーブルに読み込むと、ChemStation はこの結果セット内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、この結果セット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ラインが含まれます。
- 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。変更し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。
- 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が更新されます。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、このシーケンスメソッドで上書 きされます。
- 新規メソッドをマスターメソッドディレクトリからシーケンステーブル へと追加する場合には、まず ChemStation エクスプローラを使用してマ スターメソッドを結果セットへとコピーします。その後、シーケンス テーブルから新しいシーケンスメソッドを選択します。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。

- **10 データ解析とレビューの概念** データ解析
 - 〔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、シーケンス情報の使用法を変更できます。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。

シーケンスパラメータ: LC1200	
シーケンスパラメータシーケンス出力	
データファイル パス: C#Chem32¥1¥DATA¥ マ	オペレータ名 「ジステム
9 フティレット9: ● 自動 フレフィックス カウンター ◎ ブレフィックス/カウンタ demo 000001	ChemStore 章云送該定
メソット実行部分 データ再解析のみ マ シーケンステーブル情報を使用 待機 0.00	ジャットダウン ▼ ポストシーケンス コマンド/マクロ PUMPALL OFF ノットレディタイムアウト: 0.00 宗 min
-バーコードリーダ - バーコードリーダ - ジーケンスで使用 バーコード不一致の場合 ③ 注入禁止	フラクション/香報 フラクションの開始ロケーション:
Aqc. of isocratic standard samples	
	OK キャンセル ヘルプ

図 34 データ解析のシーケンスパラメータ

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有効です。

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るようになりました。 データファイルをレビューまたは再解析する時はいつでも、データファイ ル中のマニュアル積分イベントが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 付けられます。

データ解析

手動によるベースライン描画やピーク削除のツールのほかに、以下の操作 を行う3つのツールがユーザーインタ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]テーブルのレビュー中に次のデータファイルで操作を 続ける場合、ChemStation は未保存のマニュアル積分イベントを確認し、 イベントを保存するかユーザーに尋ねます。

[ナビゲーション] テーブル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は、[バッチ] 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と結合しません。データファイルのマニュアルイベ ントに関して、これら 2 つのレビュー方法は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ありま す。

[メソッドのマニュアルイベントアップデート]: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。必要に応じて、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 クボックスを選択した場合、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] チェックボックスを

データ解析

選択した場合、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。

自己編集した結果セット

[データ解析] ビューでは、ナビゲーションテーブルに読み込まれたシン グルランまたはシーケンスの内容が表示されます。ナビゲーションテーブ ルへと、データファイルを読み込み、解放、追加することができます。[シーケンス]>[新規結果セットの作成] コマンドを利用して、ナビゲー ションテーブルに現在表示されているデータから自分で選択した新規結果 セットを作成することができます。自分で編集した結果セットは、自動的 に作成された結果セットと同様に再解析可能です。

現在のデータセットの解放

[ナビゲーションテーブル] のコンテキストメニューから、[現在のデータ セットの解放] コマンドを利用して、[ナビゲーションテーブル] を ChemStation 起動直後のように空の状態に戻すことができます。保存され ていないデータがある場合、保存するようメッセージが出ます。

選択データファイルの削除

ナビゲーションテーブルのコンテキストメニューから[選択したデータ ファイルの削除] コマンドを利用して、ナビゲーションテーブルから選択 した行を削除することができます。これにより削除できるのはナビゲー ションテーブル内のリファレンスのみであり、ファイルシステム上に読み 込まれた結果セットまたはシングルランから、物理的データファイルを削 除することはできません。追加 / 重ね書きファイルのリファレンスのみを 削除することができます。

メソッドの更新

[データ解析] ビューには、マスターメソッドディレクトリと結果セット との間でメソッドをコピーするためのオプションをいくつか用意していま す。詳細は、『「メソッド管理」99ページ 図』を参照してください。

データ解析とレビューの概念 10 データ解析

データ解析のレポートビューア

コンフィグレーションに応じて、ChemStation はシングル注入レポートお よびシーケンスサマリレポートを決まったタイミングでファイルシステム に自動的に保存します。データ取り込み、再解析、または再計算からの結 果をチェックするために、レポートビューアを使用して保存したレポート ファイルを容易に表示することができます。

09/27 17:09:06 DEMO(000001isocratic sample STD2011-0	9-27.PDF	表示数: 2	₹ 17
				-
ESTD レポート			200 4 - 156	
			Agilent Technologi	65
データファイル:	C:#CHEM32#1#DATA#DEMO#LC_D	EMO1¥DEMO000001.D		
サンブル名:	isocratic sample STD			
サンブル情報:	isocratic check out sample, calibrat	ion mixture 1		
機器:	Instrument 1	ロケーション:	P1-F-01	
注入日時:	2008/07/09 17:25:53	注入:	1/1	
測定メソッド:	LC_DEMO.M	注入量:	3.000	
解析メソッド:	LC_DEMO.M	測定オペレータ:	A.G.H.	
最終変更日時:	2010/11/16 18:15:25			
サンプルアマウント	0.000	サンプルタイプ:	キャリプレーション	
倍率	1	希釈率:	1	
		I THEC ID.		

図 35 レポートビューア

レポートビューアには以下の利点があります。

- ChemStation からレポートファイルを直接開くことができます。ファイルシステム内のファイルを検索する必要はありません。
- 各レポートが個別のフローティングウィンドウに開きます。そのため、 複数のウィンドウを並べて異なるレポートを容易に比較できます。
- フルスクリーンを使用してレポートファイルを表示できます。
- Adobe Reader の機能を使用して、.pdf レポートを表示することができます。
- ・.txt レポートに加え .pdf レポートで特定のテキストを検索できます。
- シーケンスを再解析する場合、全シーケンスの再解析が完了するまで待つ必要はありません。すでに完了しているシーケンスのサンプルについては、保存されているレポートファイルを開くことができます。



レポートビューアの起動

レポートビューアは、メニュー、ツールバーのアイコン、またはナビゲー ションテーブルのコンテキストメニューから開くことができます。シーケ ンスサマリレポートおよびシングル注入レポートにはそれぞれ異なるアイ テムがあります。

シングル注入レポートを表示するには:

- レポート > レポートファイルの表示メニューを選択して、レポートファイル、または読み込んだシグナルのファイルを表示します。
- ナビゲーションテーブルでサンプルのコンテキストメニューから、[レ ポートファイルの表示] コマンドを選択します。このコマンドによっ て、現在読み込まれていないファイルの場合でも、レポートファイルま たはシグナルファイルが読み込まれます。
- ワークスペースツールバーから[保存したレポートファイルの表示]ア イコンをクリックして、レポートファイル、または読み込みシグナルの ファイルを表示します。



シーケンスサマリレポートを表示するには:

- シーケンス > サマリレポートファイルの表示メニューを選択します。
- ナビゲーションツールバー(再解析モード)から[保存したシーケンス サマーリレポートファイルの表示]アイコンをクリックします。



レポートビューアウィンドウの設定

レポートビューアの動作に関していくつかのオプションを設定することが できます。これらの設定はすべて、レポートビューアウィンドウの [オプ ション] ボタンからアクセスします。

同時に開くレポートビューアウィンドウの最大数を定義することができま す。ウィンドウは循環して再利用されます。レポートビューアの最大ウィ ンドウ表示数よりも多いレポートファイルを表示すると、最初に開いた ウィンドウの内容が更新されます。

データ解析とレビューの概念 10 データ解析

複数のレポートを比較する必要がない場合は、レポートビューアウィンドウの 注記 表示数を1に設定することをお勧めします。

複数のレポートを比較する場合は、レポートビューアウィンドウのタイト ルバーを調整すると便利な場合があります。レポートビューアウィンドウ にはさまざまなトークンが利用できます。シーケンスサマリレポート、 シーケンスサンプル用のシングル注入レポート、またはシングルラン用の シングル注入レポートごとに設定できます。これらのトークンを使用して、 各レポートビューアウィンドウを区別することができます。

レポートビューアウィンドウは、常に ChemStation アプリケーションの前 面に表示されます。ChemStation とレポートビューアを同時に操作する場 合は、これらを両方見られるように双方のウィンドウの大きさを調整して 配置します。ChemStation を閉じるときに、ウィンドウのサイズと位置は 保存されます。ChemStation を次回起動するときは同じ設定が使用されま す。

レポートビューアの操作

レポートビューアは、たとえば以下のようなワークフローに従い使用しま す。

- メソッドとシーケンスで、ファイルシステムに PDF レポートを保存する ように設定します。シーケンスの実行が完了したら、レポートビューア で ChemStation から直接レポートファイル (シーケンスサマリレポート またはシングル注入レポート)を開きます。ズームや検索などの Adobe Reader の機能を使用して、レポートの詳細を確認します。
- すでにレポートファイルを含んでいるシーケンスを ECM からダウンロー ドします。
 - 最終結果を確認するには、ナビゲーションテーブルで関連するサンプ ルを選択し、レポートビューアを使用して ChemStation から直接レ ポートファイルを開きます。
 - 必要に応じて、メソッドを変更してシーケンスを再解析することがで きます。再解析の実行中に、すでに完了しているサンプルのレポート を表示することができます。

レポートビューアでは、左上にあるリストから新旧のレポートを両方 とも選択することができます。リストのエントリとして表示される作 成日時を確認して、レポートを区別することができます。転送設定に

10 データ解析とレビューの概念 データ解析

> 応じて、新しいレポートファイルなどのデータは、再解析の終了後 ECM に自動的にアップロードされる場合があります。

- TXT レポートファイルのみを保存するシーケンスを実行します。レポートビューアでは、これらのレポートファイルも確認できます。
- さまざまなレポートスタイルやテンプレートに基づき、同じシーケンス サンプルの異なるレポートをレビューします。

まず、拡張パフォーマンスレポートを保存するシーケンスを作成しま す。シーケンスを実行または再解析してレポートファイルを保存しま す。レポートに表示されている結果が満足できるものであれば、シーケ ンスメソッドを変更して、簡易レポートを作成します(たとえば、異な るレポートテンプレートやクラシックレポートスタイルで[簡易]を選 択します)。次に、シーケンスを再解析して簡易レポートを保存します。 レポートビューアでレポートを表示するときは、左上のリストからレ ポートを選択して2つの異なるレポートの表示を切り替えることができ ます。各ファイルの作成日時はリストのエントリとして表示されます。

データ解析とレビューの概念 10 レビュー

レビュー

Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition では、データ解析の純粋に データレビューのワークフローを対象とする新しいビューを使用できます。 この [レビュー] ビューでは、シーケンス全体、シーケンスのサブセッ ト、異なるシーケンス / シングルサンプルからのデータファイルのレポー トを生成することができます。

[レビュー]ビューではメソッドの読み込みはできません。また、再計算 または再解析のとおりに新規結果を作成することもできません。[レ ビュー]ビューで生成するレポートは、すでに計算済みの結果のみを表示 します。

レポートテンプレートを選択して、特定のデータファイル選択に適用する ことができます。テンプレートとデータファイル選択の組み合わせにより、 生成レポートの出力内容が決定されます。

注記

[**レビュー**] ビューは、OpenLAB コントロールパネル上で [機器コンフィグ レーション] のインテリジェントレポートが有効となっている場合にのみ利用 可能です。

インテリジェントレポート要件

ChemStation C.01.03 はインテリジェントレポートで使用するフォーマット(*.ACAML)で結果データを生成します。ChemStation バージョン A または B で取り込んだデータのレポートを作成したい場合、まず ChemStation C.01.03 を使用して結果を再生成する必要があります(たとえば、データ解析ビューでデータを再計算するか、シングル注入レポートを生成する)。結果を必要なフォーマットで入手できない場合、[レビュー]ビューで生成するレポートには何のデータも含まれません。 **10 データ解析とレビューの概念** レビュー

データファイル選択

ChemStation エクスプローラのナビゲーションツリーからシーケンスまた はシングルランを読み込むことで、必要なデータファイルを選択すること が可能です。その後、すべての利用可能なデータファイルがナビゲーショ ンテーブルに表示されます。ナビゲーションテーブルでは、レポートとし て結果を確認するデータファイルを選択します。

データファイルの読み込み

シーケンス全体またはシングルランフォルダから、すべてのデータファイ ルを読み込むことができます。ChemStation エクスプローラの [データ] タブで、シーケンスをダブルクリックするか、コンテキストメニューの [読み込み] コマンドを利用するかのいずれかにより、そこに含まれるすべ てのデータファイルを読み込むことができます。

データファイル読み込むと、新しいデータファイルを表示する前にナビ ゲーションテーブルが自動的にクリアされます。その後、シングルサンプル レポートまたはシーケンスサマリレポートのいずれかのデータを作成するこ とができます。

データファイルの追加

異なるシーケンスの結果を比較するには、まず 1 つのシーケンスを読み込み、その後別のシーケンスからの必要なデータファイルを追加します。 ChemStation エクスプローラの [データ] タブで、コンテキストメニューから [データファイルの追加] コマンドを利用して、特定データファイルのみをすでに読み込まれた選択肢へ追加します。ダイアログが開き、そこで必要なデータファイルを選択できます。

データファイルを追加すると、ナビゲーションテーブルはすでに読み込ん だデータファイルリストにデータファイルを付け加えます。その後、例え ば**クロスシーケンスレポート**といったデータを作成することができます。

レポート用データファイルの選択

ナビゲーションテーブルは、ChemStation エクスプローラでダブルクリッ クして選択したシーケンスまたはシングルサンプルコレクションから、す べてのデータファイルを表示します。ナビゲーションテーブルで、レポー トを作成しようとするデータファイルを選択します。選択した行のみが、 生成するレポートに含まれます。

レポートテンプレート選択

ChemStation エクスプローラの [レポートテンプレート] タブから必要な レポートテンプレートを選択できます。ナビゲーションツリーは、 chem32/repstyle ディレクトリにあるすべてのレポートテンプレートを表 示します。

レポートプレビュー

生成されるレポート内容は、データの選択とレポートテンプレートによっ て決定されます。そのため、データファイルを選択してレポートテンプ レートを読み込むと、ChemStation は対応するレポートを生成しレポート プレビューを表示します。

レポートをプリンタに送信することができ、またファイル (PDF または XLS) として保存することができます。Agilent OpenLAB ECM を使用する場 合、レポートを ECM へと直接アップロードすることもできます。

レビューワークフローの例

[レビュー] ビューは、たとえば以下のワークフローで使用できます。

- シーケンスを読み込み、そのシーケンスのすべてのデータファイルを選 択します。レポートテンプレートを読み込み、シーケンスサマリレポート を生成します。
- シーケンスサマリレポート生成後に、異なるレポートテンプレートを読み込みます。異なるレポートレイアウトを利用して同一データをレビューします。
- シーケンスを読み込み、データファイルのサブセットのみを選択します。レポートテンプレートを読み込み、そのシーケンスの部分のみについてシーケンスサマリレポートを生成します。
- データファイルのサブセットを読み込んだ後に、その他のデータファイルを追加します(シーケンス、またはシングルサンプルコレクションから)。レポートテンプレートを読み込み、クロスサンプルまたはクロスシーケンスレポートを生成します。

10 データ解析とレビューの概念 レビュー



ChemStation のコンセプトとワークフロー

11 キャリブレーション

用語の定義 200 キャリブレーションの種類 201 シングルレベルキャリブレーション 201 マルチレベルキャリブレーション 202 キャリブレーション範囲 204 検量線の近似 204 原点処理 205 キャリブレーションテーブル 208 ピーク和 209 未知サンプル 210 リキャリブレーション 211 リキャリブレーションとは 211 なぜリキャリブレーションするのか? 211 マニュアルリキャリブレーション 211 ピーク和を使用したリキャリブレーション 212 リキャリブレーション方法 212 未確認のピークのリキャリブレーション 213

本章では、キャリブレーションの概念について説明します。



Agilent Technologies

11 キャリブレーション 用語の定義

用語の上我

用語の定義

- キャリブレーションとは、特別に用意されたキャリブレーションサンプル
 ション を注入して、成分の絶対濃度を計算するためのレスポンスファクタを決定 するプロセスのことです。同定のために、キャリブレーションテーブルも 使用します。
 - 化合物 化合物は、マルチシグナルキャリブレーションの場合は複数のピークから 構成されることがありますが、通常はシグナルごとに1つです。シングル シグナルキャリブレーションでは、化合物は1つのピークを参照します。
- **キャリブレー** キャリブレーションレベルは、1 つのキャリブレーションサンプル濃度用 **ションレベル** の複数のキャリブレーションポイントから構成されます。マルチシグナル キャリブレーションでは、いくつかのシグナルにわたってキャリブレー ションポイントを区別できます。
- **キャリブレー** キャリブレーションポイントは、検量線上のピークに対応するアマウント ションポイン / レスポンス比を参照します。
- **キャリブレー キャリブレー**ションスタンダードまたは標準混合物とも言われるキャリブ **ションサンプ** レーションサンプルは、定量する化合物の既知アマウントを含むサンプル です。ソフトウェアでは、キャリブレーション標準バイアルからの注入を キャリブレーションサンプルと呼びます。

キャリブレーションサンプルは、化学薬品供給業者から購入するか、正確 に計量した純粋化合物の一部を使用します。キャリブレーションサンプル 内の化合物のアマウントは、一般的に ng/µl を単位とする濃度で表現され ます。

キャリブレーションの種類

キャリブレーションの種類

ChemStation には、シングルレベルおよびマルチレベルキャリブレーショ ンという、2 種類のキャリブレーションがあります。

シングルレベルキャリブレーション

『201 ページ 図 36』に示されているキャリブレーションカーブには、1 つ のポイント、つまり 1 つのレベルが含まれています。シングルレベルキャ リブレーションカーブでは、検出器のレスポンスは、対象となるサンプル 用の濃度の実用範囲に対して、直線になると仮定されます。任意のコン ポーネントピークのレスポンスファクタは、ポイントと原点とを結んだ キャリブレーションカーブの線のスロープを逆にすることで得られます。 シングルレベルキャリブレーションの欠点は、サンプル濃度に対する検出 器レスポンスが直線になると仮定され、濃度対レスポンスのプロット上で 原点を通過するという点です。これは常に正確であるとは言えず、不正確 な結果につながる可能性があります。



図 36 シングルレベル検量線

キャリブレーションの種類

正確な定量結果を得るには、キャリブレーションカーブに少なくとも 2 つ のレベルがなければなりません。これらのレベルは、未知サンプル内で見 つかると予想されるアマウントを含んでいる必要があります。



図 37 2 レベル検量線

たとえば、化合物を定量する際に、未知サンプルが 1 ~ 10 ng/µl の範囲 であると予想される場合は、キャリブレーションカーブは 『202 ページ 図 37』のように少なくとも 2 レベルを持つ必要があります。

アマウントの限界

ChemStation では、各コンポーネントに対する絶対アマウントに基づいて 有効な定量範囲を定義することができます。

マルチレベルキャリブレーション

ある成分が直線のレスポンスを表していると仮定したり、キャリブレー ション範囲の直線性を確認するのに正確さに欠ける場合には、マルチレベ ルキャリブレーションを使用できます。各キャリブレーションレベルは、 特定の成分濃度を持つキャリブレーションサンプルに対応します。キャリ ブレーションサンプルは、未知サンプル内で予想される濃度範囲内で、各 成分濃度が変化するように準備する必要があります。これにより、検出器 のレスポンスが濃度に従って変化することが可能になり、それに応じてレ スポンスファクタを計算できます。

キャリブレーションの種類

このマルチレベル検量線には 3 つのレベルがあり、原点までの直線の近似 が表示されます。この原点までの直線の近似方式は、シングルポイントメ ソッドキャリブレーションに似ています。濃度に対する検出器のレスポン スは直線だと仮定されます。2 つのキャリブレーションタイプの違いは、 直線の近似を使用すると、検出器のレスポンスのスロープが各レベルに 1 つずつ、複数のポイントに基づく最適な近似により決定できるという点で す。



図 38 3 レベルのマルチレベル検量線

この曲線を作成するために使用される情報の表形式である該当のキャリブ レーションテーブルは、『203 ページ 図 表 27』の表と同じように見える かもしれません。

表 27 キャリブレーションテーブル

レベル	アマウント(ng/μL)	レスポンス(面積カウント)
1	1	100
2	5	500
3	10	1000

この例では、3 つのレベルを生成するのに使用されたキャリブレーション サンプルは、1、2、および 3 と識別されています。

キャリブレーションの種類

キャリブレーション範囲

各マルチレベルキャリブレーションは、キャリブレーションサンプルで使 用されている濃度範囲に有効です。検量線の外挿は、(特に)検量線が直線 ではない場合は、近似値に過ぎません。各化合物の有効なキャリブレー ションは、[化合物の詳細]ダイアログボックスで定義できます。その化 合物の各エントリは、上限および下限で表すことができます。これらの限 界を超えると、注釈レポートが付けられます。

検量線の近似

さまざまな検量線の近似計算が、マルチレベルキャリブレーションに使用 できます。

- 折れ線
- 直線
- 対数
- 累乗
- 指数
- 二次式
- 三次式
- ・ 平均(レスポンス/アマウント)

非直線の近似

サンプル濃度内の変化に対する検出器のレスポンスは、直線ではない場合 があります。このような種類の分析には、直線回帰キャリブレーションメ ソッドは適切ではなく、マルチレベルキャリブレーション計算を使用する 必要があります。

キャリブレーションの種類

原点処理

レスポンスカーブがプロットされる際の原点の処理方法には 次の4 つが あります。

- 原点を無視
- 原点を含める
- 原点を強制する
- 原点をつなぐ

検量線に原点を含めるように強制するには、キャリブレーションポイント が、第1象限から第3象限に原点を中心として対称に置かれます。回帰 の計算にすべてのポイントを使用すると、結果として生じる検量線が原点 を確実に通過するようになります。これは、『205ページ図39』でも説明 されます。



検量線の近似および原点処理の詳細については、**オンラインヘルプ**ファイル を参照してください。 キャリブレーションの種類

キャリブレーションポイントの重み付け

デフォルトの検量線を設定する場合、カーブを生成するさまざまなキャリ ブレーションポイントに、相対的な重み付け(または重要性)を指定でき ます。

次の重み付けオプションを選択できます。

重み付け	説明
均等	すべてのキャリブレーションポイントが同等の重み 付けを持ちます。
直線(アマウント)	アマウント x のキャリブレーションポイントは、最 小アマウントに対して 1/x で標準化された重みを持 つので、最大の重み付けは 1 です。標準化は、重み 付けを最小アマウントと掛け合わせることで行われ ます。たとえば、アマウント x のキャリブレーショ ンポイントの重みは (1/x) x a です。ここで a は、 キャリブレーション標準で調製されたキャリブレー ション済み化合物の最小アマウントです。 原点が含まれると、他のキャリブレーションポイン トの重み付けの平均値が割り当てられます。
直線(レスポンス)	レスポンス y のキャリブレーションポイントは、最 小レスポンスに対して 1/y で標準化された重みを持 つので、最大の重み付けは 1 です。標準化は、重み 付けを最小レスポンスと掛け合わせることで行われ ます。たとえば、アマウント y のキャリブレーショ

ンポイントの重みは、(1/y) x b です、ここで b は、 キャリブレーション標準で調製されたキャリブレー ション済み化合物の最小アマウントに対応するレス ポンスです。

原点が含まれると、他のキャリブレーションポイン トの重み付けの平均値が割り当てられます。

キャリブレーションの種類

重み付け	説明
モッアロリノ	1/1/1/1

- 二次式(アマウント) アマウント x のキャリブレーションポイントは、最 小アマウントに対して 1/x² で標準化された重みを持 つので、最大の重み付けは 1 です。標準化は、重み 付けを最小アマウントと掛け合わせることで行われ ます。たとえば、アマウント x のキャリブレーショ ンポイントの重みは(1/x²) × a² です。ここで a は、キャリブレーション標準で調製されたキャリブ レーション済み化合物の最小アマウントです。
- 二次式(レスポンス)レスポンス y のキャリブレーションポイントは、最 小レスポンスに対して 1/y²で標準化された重みを 持つので、最大の重み付けは 1 です。標準化は、重 み付けを最小レスポンスと掛け合わせることで行わ れます。たとえば、レスポンス y のキャリブレー ションポイントの重みは、(1/y²) × b²です、ここ で b は、キャリブレーション標準で調製されたキャ リブレーション済み化合物の最小アマウントに対応 するレスポンスです。
- キャリブレーションポイントは、ポイントのリキャ
 リブレーション回数に従って重み付けされます。標
 準化は行われません。

二次式キャリブレーションポイントの重み付けは、たとえば、キャリブ レーションポイントの散らばりに合わせて調整するのに使用できます。こ れにより、一般的に比較的正確に計測できる原点により近いキャリブレー ションポイントが、原点からさらに遠く散らばっている可能性のあるキャ リブレーションポイントよりも高い重み付けを得るようになります。

使用するキャリブレーションポイントの重み付けの種類を決定するには、 メソッドの要件を基礎に考える必要があります。

キャリブレーションテーブル

キャリブレーションテーブル

キャリブレーションテーブルは、選択した計算手順に従って、ピーク面積 または高さを選択した単位に変換します。このテーブルには、キャリブ レーション分析からのリテンション/マイグレーションタイムのリストが 含まれます。このリテンション/マイグレーションタイムは、サンプル分 析から得られたピークのリテンション/マイグレーションタイムと比較さ れます。一致するものがあれば、サンプル内のピークは、キャリブレー ションテーブル内にある成分と同じものを示しているとみなされます。分 析中またはレポートの生成中、各ピーク用に入力されたアマウントは、レ ポート用に選択された計算手順用のアマウントを計算するのに使用されま す。キャリブレーションテーブルを作成するのに必要な情報の種類とアマ ウントは、目的とする計算手順の種類によって異なります。

キャリブレーションテーブルを作成するには、次の情報が必要です。

- 各キャリブレーション混合成分ピークのリテンション / マイグレーションタイム
- キャリブレーション混合物を作成するのに使用した各成分のアマウント (一貫した単位で表したもの)

ピーク和

このピーク和テーブルは、以下の機能でより効率的に実行される石油化学および製薬業界向けの特定アプリケーションのために提供されます。

- ユーザーが指定した範囲内にあるピーク面積を合計する
- ピークの範囲内にある面積を合計し、乗数を1つ使用して計算を実行する
- 同じ名前を持つすべてのピークの面積を合計する

ピーク和テーブルは同様ですが、標準キャリブレーション テーブルと異な ります。キャリブレーション テーブルのように、現在のメソッドと関連し ています。

注記 ピーク和テーブルを作成する前に、分析のためのキャリブレーションテーブル を作成する必要があります。

未知サンプル

未知サンプルとは、定量する化合物のアマウントがどれぐらい含まれているかが不明なサンプルのことです。

未知サンプルに含まれる化合物の割合を知るには、次のことが必要です。

- 化合物の検量線を作成する
- 未知サンプルの一部を注入し、およびキャリブレーションサンプルと まったく同じ方法で分析を実行する
- 化合物のアマウントが不明なために生じるピークの面積または高さを表 すレスポンスを、シグナルから決定する
- 検量線を使用して、未知サンプル内の化合物のアマウントを計算する

たとえば、未知サンプル内のピークの面積が 500 である場合、『210 ページ図 40』に示した検量線を使用して、未知サンプル内のアマウントは 5 ng/µL と決定できます。



図 40 未知サンプルからのシグナルおよび検量線

リキャリブレーション

リキャリブレーション

リキャリブレーションとは

リキャリブレーションは、検量線上のレベルを更新したい場合に使用する プロセスです。リキャリブレーションをする場合、元と同じで同量(これ が最も重要)のキャリブレーション化合物を含んだサンプルを分析しま す。キャリブレーションサンプルを分析すると、更新されたレスポンス ファクタおよびリテンション/マイグレーションタイムが取得されます。 何度もキャリブレーション分析を行ってレスポンスファクターを平均化さ せ、レスポンスファクタが同等に重み付けされるようにすることもできま す。

なぜリキャリブレーションするのか?

ほとんどのキャリブレーションの寿命には、クロマトグラフィにおける変 化のため、限界があります。リキャリブレーションは、分析の正確性を保 持するために必要です。たとえば、カフェインを含むサンプルを定量する ためのカフェイン用化合物のキャリブレーションテーブルを作成します。 ある時点で、カラム / キャピラリを取り替える必要があります。カラム / キャピラリは、まったく同じ種類のものと取り替えますが、最初にカフェ イン用にキャリブレーションテーブルを作成した場合には、それが以前の カラム / キャピラリとまったく同じ動作をするわけではありません。した がって、一貫性を保持するために、キャリブレーションテーブル内のレベ ルをリキャリブレーションする必要があります。これを行うことで、同じ システム条件下で分析されたサンプルを定量することになります。

マニュアルリキャリブレーション

[新規のキャリブレーションテーブル]ダイアログボックスの[マニュアル設定]オプションボタンを使用して、ピークキャリブレーション情報のマニュアル入力およびキャリブレーションテーブルの標準化することができます。通常、新しいキャリブレーションメソッドは、キャリブレーショ

ン標準混合物の分析、キャリブレーションテーブルの作成、そしてすべて のキャリブレーションピークのアマウントを入力してレスポンスファクタ を入手することで、生成されます。しかし、この方法は、長年にわたって 同じ化合物が分析され、さまざまな化合物のレスポンスファクタや検出器 を簡単に利用できるようになっている、たとえば石油化学業界で使用され るようなアプリケーション向けには非効率です。

キャリブレーションテーブルをマニュアルで作成するには、ピークおよび そのレスポンスファクタをキャリブレーションテーブルに入力し、少なく とも1つのレスポンスリファレンスのピークを含む標準でメソッドをリ キャリブレーションし、デルタ%の更新を選択します。

ピーク和を使用したリキャリブレーション

リキャリブレーションが実行される場合は、メソッドのピーク和テーブル におけるリテンション/マイグレーションタイムの範囲は、実際にリキャ リブレーションが実行される前に更新されます。ピーク和リキャリブレー ションはこの方法で実行され、デルタが時間計算に統合されることが確認 されます。

リキャリブレーション方法

ChemStation のソフトウェアを使用すると、2 通りの方法でリキャリブ レーションができます。自動化された分析の間に、対話的または自動的に リキャリブレーションできます。対話的リキャリブレーションとは、1 つ または複数のキャリブレーションサンプルを注入した後、ChamStation ソ フトウェアを使用してリキャリブレーションの手順を直接に順番に行うこ とを指します。シーケンスを使用するリキャリブレーションとは、リキャ リブレーションが行われる際に、自動化ソフトウェアがリキャリブレー ションを実行するように指定することを指します。詳細は、『「自動リキャ リブレーション」161 ページ 図』を参照してください。

ソフトウェアを使用したリキャリブレーションの実行方法については、ヘ ルプシステムの「方法」の部分を参照してください。

キャリブレーション 11 リキャリブレーション

未確認のピークのリキャリブレーション

同定されていないピークをリキャリブレーションするには、3 つの方法が あります。

リキャリブレーションなし

キャリブレーションテーブルのピークが、積分結果の中で同定できなかった場合、キャリブレーションを中断します。シーケンス中でこれが起こる と、シーケンスも中断されます。

部分リキャリブレーション

この機能は、同定されたピークのみのリキャリブレーションが可能です。 ピークが見つからないときにキャリブレーションは中断はされませんが、 ピークが見つからないというレポートが注釈として付けられます。

リテンション / マイグレーションタイムのリキャブレーション

この機能により、同定されたピークおよび同定されてないピークすべての リテンション/マイグレーションタイムのリキャリブレーションが可能に なります。これは、同定されたピークのリテンション/マイグレーション タイムを使用して行われます。同定されたピークには、レスポンスファク タの更新はありません。





ChemStation のコンセプトとワークフロー

12 レポート作成

レポートとは 216 クラシックおよびインテリジェントレポート 217 インテリジェントレポート 218 インテリジェントレポートの利点 218 インテリジェントレポート用レポートテンプレートエディタ (RTE) 219 レポートテンプレートの保存 222 生成レポートの保存 224 ECM 内のレポートテンプレート 225 クラシックレポート 226 結果のレポート 226 定量結果 227 カスタムフィールド値のレポート 228 レポートスタイル 229 他のレポートスタイルパラメータ 231シーケンスサマリレポート 232 レポートファイルフォーマット 236

この章では、インテリジェントレポートとクラシックレポートの概 念について説明します。



Agilent Technologies

12 レポート作成 レポートとは

レポートとは

レポートは、分析するサンプルの定量的および定性的情報から構成されま す。レポートは紙に印刷したり、画面に表示したり、電子ファイルに出力 したりできます。レポートには、分析中に検出されたピークの詳細、およ び取り込んだシグナルのプロットが含まれます。

さまざまな目的用のレポート

データ取り込みやデータレビューなど、目的に合ったレポートを指定する ことができます。

- ・ シーケンスサマリレポートは、[シーケンスパラメータ] ダイアログの [シーケンス出力] タブで定義されます。このレポートは、シーケンス取 り込みの完了後、またはシーケンス再解析後に、ChemStation により自 動的に作成されます。
- シングル注入レポートは、[レポート条件]ダイアログで定義します。このレポートは、シーケンス取り込みまたはシーケンス再解析の実行中に 各シングルサンプルに関するものが作成されます。

インテリジェントレポートでは、レポートの目的に応じて異なるレポート タイプでテンプレートを作成できます。詳細情報は、『「レポートタイプ」 219ページ 図』を参照してください。

レポート出力先

レポートは以下の出力先に送信されます。

・スクリーン

レポート(テキストとグラフィックを含む)は、画面上のレポートプレ ビューウィンドウに表示され、そこから印刷することができます。

・ プリンタ

テキストとグラフィックから構成されるレポートは、現在選択されているプリンタに印刷されます。

・ ファイル

レポートは、たとえば Adobe PDF ファイルなどのファイルに保存されます。
レポート作成 12 クラシックおよびインテリジェントレポート

クラシックおよびインテリジェントレポート

Agilent OpenLAB CDS では使用するレポートのタイプを選ぶことができま す。具体的には以前の ChemStation バージョンで使用していたものと同じ クラシックレポートと、高性能の標準レポート定義言語と改善されたレ ビュー機能を備えるインテリジェントレポートです。以下のセクションで、 この 2 つのタイプのレポートについて説明します。

インテリジェントレポートがもたらすもの

インテリジェントレポートを利用する場合、OpenLAB コントロールパネル で[機器コンフィグレーション]の[インテリジェントレポート]を有 効にする必要があります。

インテリジェントレポートを有効にすると、ChemStation に以下の変化を もたらせます。

- [レポートレイアウト] ビューに、インテリジェントレポート用のレ ポートテンプレートエディタが表示されます。
- [**レビュー**] ビューが表示されます。
- [シーケンスパラメータ]ダイアログで、クラシックレポートまたはインテリジェントレポートを選択可能になります。
- [レポート条件]ダイアログで、クラシックレポートまたはインテリジェントレポートを選択可能になります。

インテリジェントレポート

インテリジェントレポート

インテリジェントレポートの利点

インテリジェントレポートには以下の利点があります。

- [**レビュー**] ビューを使用できます。
- クラシックレポートの各種の設定、および数種類のダイアログで使用可能な多くの機能は、現在ではレポートテンプレートに含まれます。[レポートレイアウト]ビューを使用してレポートテンプレートを作成または編集できます。このビューにはインテリジェントレポート用の新しいレポートテンプレートエディタが含まれています。このレポートテンプレートエディタには効果的な機能があります。
 - ChemStation で作成された結果データに対応するフィールドを選択することにより、すべての結果データにアクセスできます。
 - データフィールドで計算を行うために、独自の式を作成できます。
 Microsoft Visual Basic で記述された任意の有効な式を使用できます。
 - ChemStation カスタムフィールドで計算を行う場合に式を作成できます。
 - 結果へのフラグ付け:特定の結果の値に基づいて、その結果を強調表 示するための式を設定できます。
 - スニペット:レポートテンプレートエディタにはスニペットと呼ばれるプレコンフィグ済みのレポート項目があり、これをドラッグ&ドロップでレポートテンプレートに挿入できます。

ChemStation のコンセプトとワークフロー

レポート作成 12 インテリジェントレポート

インテリジェントレポート用レポートテンプレートエディ タ(RTE)

レポートタイプ

さまざまなタイプのレポートが作成可能です。レポートタイプに応じて、 異なるデータフィールドがレポートテンプレートに用意され、さまざまな 形でレポート項目がグループ化されます。

以下のレポートタイプが利用可能です。

・ シングル注入

生成されたレポートには、現在のデータの各注入に関して別々のテンプレートからレポート項目を表示します。注入ごとのデータを表示することはできますが、1 つのテーブルまたはマトリックス内の異なる注入の結果と比較することはできません。

・ シングルシーケンスサマリ

生成されたレポートには、現在のデータの各シーケンスに関する別々のテン プレートからレポート項目を表示します。1 つのテーブルまたはマトリック ス内の異なる注入の結果を比較することはできますが、異なるシーケンスの データを表示することはできません。

・ クロスシーケンスサマリ

このレポートタイプでは、データは自動的にグループ化**されません**。し たがって、レポート項目をグループ化するためにより注意を払う必要が ありますが、その代わり、異なるシーケンスのデータを比較するレポー ト項目を作成することができます。

テンプレートフォーマット

すべてのレポートテンプレートは、Microsoft が提供する標準の XML フォーマットであるレポート定義言語(RDL)に基づいています。

レポートテンプレートを作成するためには、レポートテンプレートエディ タ (RTE) または Microsoft SQL Server Business Intelligence Development Studio (BI Studio)のいずれかを使用することが可能です。

 RTE は、ステップを踏んでレポートテンプレートを作成できる使いやす いインタフェースを採用しています。すべてのタイプのレポート項目お よび対応するコンフィグレーションオプションのほとんどをサポートし ています。

ChemStation のコンセプトとワークフロー

インテリジェントレポート

RTE では、BI Studio を利用して作成したテンプレートを編集すること はできません。そのようなテンプレートを RTE で編集する必要がある場 合には、アジレントカストマサービスまでお問い合わせください。

 BI Studio には、あらゆる機能が装備されています。しかし BI Studio を操作するには、テンプレート開発の高度な知識が必要です。詳細については、G4635-96007 レポートテンプレートデザイナーマニュアルを参照してください。このマニュアルは OpenLAB ECM インテリジェントレポートに付属しています。このマニュアルのコピーを入手するには、 Agilent までお問い合わせください。このマニュアルには、OpenLAB ECM インテリジェントレポートと一緒に提供される Agilent レポートテンプレートの詳細な説明も記載されています。これらのテンプレートは BI Studio の利用に特化して設計されており、RTE では利用できない最も高度な機能が含まれています。

BI Studio では、BI Studio で作成したものはもちろん、RTE で作成し たレポートテンプレートも編集が可能です。

データフィールド

取り込み中に ChemStation により生成された、すべての結果データにアク セスできます。それぞれのデータ値が保存されている各データフィールド を選択することができます。要件に応じて、レポートテンプレートのデー タフィールドを調整することができます。以下のカテゴリのデータフィー ルドを調整可能です。

- ・ シーケンス
- ・ サンプル
- 注入
- ・ シグナル
- 化合物
- ・ ピーク
- キャリブレーションカーブ
- 機器
- ファイル
- プロジェクト

インテリジェントレポート

レポート項目

要件に応じて、さまざまなレポート項目をレポートテンプレートに追加可 能です。各レポート項目について、フォントフォーマット、背景色、式と いった複数のプロパティを設定することができます。以下のレポート項目 が利用可能です。

- テキストフィールド
- データフィールド
- テーブル
- マトリックス
- 複合グループ
- イメージ
- クロマトグラム
- 検量線
- スペクトル
- チャート
- メソッド情報

スニペット

レポートテンプレートエディタではスニペット(定義済みのレポート項目 またはレポートアイテムのグループ)が用意されており、ドラッグ&ド ロップでレポートテンプレートへと挿入することが可能です。

これらのスニペットは、例えば化合物結果またはシステムスータビリティ の構成済みテーブル、シングルシグナルプロットまたはマルチシグナルプ ロットのクロマトグラム、キャリブレーション精度やリテンションタイム 安定性のコントロールチャートなどがあります。スニペットは開始点とし て使用することができ、要件に応じて調整することが可能です。

カスタム計算

レポートテンプレートエディタでは、データフィールドの値を ChemStation で生成されたとおりに表示したり、またはさまざまな目的に 合わせて新しい値を計算することが可能です。既存のデータフィールドあ るいはカスタムフィールドを利用して、式を作成することができます。

221

インテリジェントレポート

値を変数として保存して、その後に利用するテンプレートのレポート項目 からこれらの変数にアクセスすることができます。

レポートテンプレートエディタには、有効な式の作成に役立つエクスプ レッションエディタが用意されています。すべての式は、Microsoft Visual Basic に基づきます。

条件付フォーマット

式から生成される値に応じて、フィールドまたはセル内のあるプロパティ を設定することが可能です。例えば化合物アマウントが表示されている場 合、そのアマウントが一定の値を超えている場合に背景色を赤とするよう 条件設定することができます。

デモデータ

[レポートレイアウト]ビューで新しいレポートテンプレートを開発する と、ChemStationからデモデータが提供されます。デモデータは、テンプ レートを編集またはプレビューする時にレポートテンプレートエディタに表 示されます。デモデータは、[データ解析]ビューのナビゲーションテーブ ルで現在選択中のデータセット(シーケンスまたはシングルラン)に対応し ます。シーケンスサマリレポート用のテンプレートを開発する場合、[デー タ解析]ビューのシーケンスを読み込みサンプルサブセットを選択する必要 があります。シングル注入レポート用のテンプレートを開発する場合は、 [データ解析]ビューのサンプルを1 つ選択するだけで十分です。

レポートテンプレートの保存

ChemStation では複数の定義済みレポートテンプレートが提供されます。 これらのデフォルトテンプレートは、ディレクトリ chem32¥repstyle に保 存されています。

シーケンスについては、シーケンスサマリレポートおよびシングル注入レ ポートに使用するレポートテンプレートは、結果セットの中のシーケンス メソッドと同じロケーションに保存されています。シーケンスのデータ ファイル内には、レポートテンプレートは保存されていません。

シングルサンプルについては、データファイル内にレポートテンプレートが保存されています。

レポート作成 12 インテリジェントレポート

インテリジェントレボー

テンプレートダイアログの参照

[シーケンスパラメータ]ダイアログまたは[レポート条件]ダイアログ でレポートテンプレートを参照する場合、デフォルトテンプレートディレ クトリと結果セットのテンプレートを同期することができます。



図 41 [結果セット]ダイアログでのレポートテンプレートの参照

- 1 左側に、デフォルトテンプレートディレクトリ (chem32/repstyle) の テンプレートが表示されます。
- 2 右側には、現在読み込まれている結果セットのテンプレートが表示さ れます。
- 3 それぞれのテンプレートには、前回保存された日付が表示されます。 日付のツールチップにはテンプレートの最終履歴が表示されます。

ChemStation のコンセプトとワークフロー

インテリジェントレポート

- 4 テンプレートは chem32/repstyle のサブフォルダにも保存することが できます。
- 5 結果セットとデフォルトメソッドディレクトリに共通のテンプレート は、太字で表示されています。テンプレートは名前によってのみ比較 しています。
- デフォルトテンプレートディレクトリから結果セットにテンプレート
 をコピーするには、ドラッグ&ドロップを使用するか、[>] ボタンを
 使用します。

データファイル管理(ユニークなフォルダ作成オフ)

[ユニークなフォルダ作成]オフオプションを利用して、シーケンスサマ リレポートおよびシングル注入レポートのテンプレートを、デフォルトテ ンプレートディレクトリ(chem32¥repstyle)からいつでも参照できます

生成レポートの保存

シングル注入レポートのファイル名

[レポート条件]ダイアログにシングル注入レポート用のファイル名を入力する場合、以下のトークンが使用可能です。

- ・ <Date> 現在の日付
- ・ <Time> 現在の時間
- 〈SeqN〉シーケンスファイル名(シングルサンプル用は "_" となります)
- ・ <Cont> 結果セット名 (シングルサンプル用は "_" となります)
- <SamN> サンプル名
- <Lims> LimsID
- <InjD> 注入日時
- 〈File〉 データファイル名
- 〈SLoc〉 サンプルロケーション

インテリジェントレポート

シーケンスサマリレポートのファイル名

[シーケンスパラメータ] ダイアログの [シーケンス出力] タブにシーケ ンスサマリレポートのファイル名を入力する場合、以下のトークンが使用 可能です。

- <Date> 現在の日付
- <Time> 現在の時間
- 〈SeqN〉シーケンスファイル名
- <Cont> 結果セット名

ECM 内のレポートテンプレート

Agilent OpenLAB ECM を利用する場合、レポートテンプレートは新規文書 タイプとして扱われます。ECM へとテンプレートをアップロードし、ECM からテンプレートをダウンロードすることができます。または、最新バー ジョンでローカルに存在する ECM ベースのレポートテンプレートをすべて 更新することができます。

クラシックレポート

結果のレポート

次の2種類のレポートが利用可能です。

- 検出器のレスポンスを修正しない、キャリブレーションされていないレポート
- 検出器のレスポンスにある相違点をサンプルのさまざまな成分に修正した結果を表示する、キャリブレーションされたレポート。

キャリブレーションされていないレポート

キャリブレーションされていないレポートには、面積%および高さ%レ ポートが含まれます。これらのレポートは主に、キャリブレーションされ たレポートの準備に使用されます。対象となる化合物用の単位面積または 高さのレスポンスを生成するのに必要な化合物の量が類似していれば、最 終レポートとしての価値もあります。

キャリブレーションされたレポート

キャリブレーションされたレポートは、検出器のレスポンスにある相違点 をレポートされた化合物に修正します。レポートされた化合物の既知アマ ウントを含む 1 つまたは複数のキャリブレーションサンプルを、未知のサ ンプルに使用されるのと同じ条件のもとで分析する必要があります。これ らのキャリブレーションサンプルから取得した積分データは、キャリブ レーションデータの準備に使用されます。このデータは、レポート生成に 使用される、リテンション/マイグレーションタイム、量およびレスポン スのリストです。キャリブレーションされたレポートは、外部標準および 内部標準とよばれる 2 つのキャリブレーション手順に基づいています。

外部標準レポート

ESTD レポートは、選択した単位、または存在するすべての化合物に占める 各化合物の割合を使用して、結果を一覧表示します。外部標準の手順には、 キャリブレーションサンプルと未知サンプルの両方が注入された相対量が

クラシックレポート

正確に分かっている必要があります。外部標準レポートの信頼性は、注入 の再現性、およびサンプルごとに違うその他の要因による限界があります。

内部標準レポート

外部標準手順の限界は、内部標準のアプローチを使用することで克服する ことができます。内部標準の正確な既知アマウント(同じアマウントであ る必要はない)がキャリブレーションサンプルと未知サンプルの両方に加 えられます。対象の各化合物のレスポンスは、内部標準のレスポンスで分 割され、レスポンス比を提供します。検量線は、このレスポンス比とアマ ウント比のプロットで、この情報はレポートされる結果の計算で使用され ます。このようにして、すべての化合物に等しく影響を与えるクロマトグ ラフ/エレクトロフェログラフシステムにおける注入量またはわずかな変 更に関する不注意によるエラーがなくなります。ISTD レポートは、選択し た単位で結果を一覧表示します。

コントロールチャートレポート

コントロールチャートレポートは、特定のキャリブレーション化合物に対 する複数の分析から、単一の結果を追跡管理します。コントロールチャー ト機能は、ChemStation が稼動した後にインストールされます。この機能 を使用するメソッドは、各分析の後、追跡管理の結果を Microsoft Excel のワークシートに渡します。その後、Excel を使用してレポートを印刷し ます。

定量結果

レポートタイプは、たとえば ISTD レポートのように、それを作成するの に使用された計算方法の名前で識別されます。以下は、各タイプの簡単な 説明です。各レポート用の計算方法については、『「定量結果」227 ページ 図』に記載されています。

面積%は最も簡単なレポートで、サンプル成分の検出器レスポンスの差異 に対しては修正が行われないため、キャリブレーションデータを必要とし ません。面積%レポートは、他のレポートオプションとともに使用する キャリブレーションテーブルを作成するのに特に役立ちます。このレポー トは、成分の検出器レスポンスでの相違が重要ではない分析に適していま す。 **高さ**%は、面積%レポートと同様のレポートですが、ピークの面積の代わりにピークの高さが計算に使用される点が異なります。

Norm% は、各成分が存在するすべての成分の割合として報告されるレポートです。ピークは、各割合の計算前に検出器のレスポンスに対して修正されます。

ESTD は、選択した単位にかかわらず、各物質の実際のアマウントのレポートを作成します。アマウントは、以前に作成されたキャリブレーションテーブルを使用して計算されます。外部標準を使用するには、注入されたキャリブレーション混合物の量を知っている必要があります。

ESTD% は、注入されたサンプルの割合として各物質の相対アマウントのレ ポートを作成します。アマウントは、以前に作成されたキャリブレーショ ンテーブルを使用して計算されます。外部標準を使用するには、注入され たキャリブレーション混合物の量を知っている必要があります。

ISTD は、各物質の実際のアマウントのレポートを作成します。アマウント は、以前に作成された検量線を使用して計算されます。サンプル混合物と キャリブレーション混合物の両方で内部標準を使用すると、注入されたサ ンプルの量を調べて管理する手間が省けます。これにより、分析ごとに機 器のパフォーマンスに生じる偏差も修正されます。

ISTD% は、注入されたサンプルの割合として各物質の相対アマウントのレポートを作成します。サンプル混合物とキャリブレーション混合物の両方で内部標準を使用すると、注入されたサンプルの量を調べて管理する手間が省けます。これにより、分析ごとに機器のパフォーマンスに生じる偏差も修正されます。

カスタムフィールド値のレポート

取り込みメソッドに従い特定のサンプルに取り付けられたカスタムフィー ルドの値を、レポートに追加できます。元のサンプル情報を含むレポート ヘッダーの最後に、サンプルカスタムフィールドが一覧表示されます。化 合物カスタムフィールドは、レポートの最後に表示されます。

レポートスタイル

[レポート条件]ダイアログボックスの適切なボックスにチェックを入れて、レポートスタイルにシグナルを追加します。

以下のレポートスタイルが利用可能です。

- [なし] テキストはレポートされません。[クロマトグラム出力の追加] オプションが選択されている場合のみ、クロマトグラムがレポートされ ます。
- [簡易] [シグナル詳細] ダイアログボックス(LCのみ)または[シグ ナル]ダイアログボックス(GCのみ)で設定したすべての積分シグナ ルの定量結果のテキストが含まれます。簡易レポートでは、ピーク幅は インテグレータに使用される次のような複雑な式で計算されます。PW = 0.3(IPRight - IPLeft) + 0.7(Area/Height)この式で、IPRight および IPLeft は変曲点です。
- [詳細] ヘッダー、定量結果、および検量線が含まれます。ヘッダーは メソッドディレクトリに保存されている RPTHEAD.TXT ファイルです。テ キストエディタを使用してヘッダーを変更し、メソッド固有のテキスト を使用することができます。
- [ヘッダー + 簡易] ヘッダーおよび定量結果テキストが含まれます。
 ヘッダーはメソッドディレクトリに保存されている RPTHEAD. TXT ファイルです。テキストエディタを使用してヘッダーを変更し、メソッド固有のテキストを使用することができます。
- [GLP + 簡易] ヘッダー、サンプル情報、機器条件、ログブック、シグ ナル、定量結果が含まれます。ヘッダーはメソッドディレクトリに保存 されている RPTHEAD.TXT ファイルです。テキストエディタを使用して ヘッダーを変更し、メソッド固有のテキストを使用することができま す。
- [GLP + 詳細] ヘッダー、サンプル情報、機器条件、ログブック、シグ ナル、定量結果、検量線が含まれます。ヘッダーはメソッドディレクト リに保存されている RPTHEAD. TXT ファイルです。テキストエディタを使 用してヘッダーを変更し、メソッド固有のテキストを使用することがで きます。
- [フル] ヘッダー、サンプル情報、機器条件、ログブック、シグナル、 定量結果が含まれます。ヘッダーはメソッドディレクトリに保存されて いる RPTHEAD. TXT ファイルです。テキストエディタを使用してヘッダー を変更し、メソッド固有のテキストを使用することができます。

ChemStation のコンセプトとワークフロー

クラシックレポート

 [パフォーマンス] -「システムスータビリティ」メニューにある[パ フォーマンスパラメータのリミット編集]ダイアログボックスで指定し たリミットに従ってレポートを作成します。

キャリブレーションされていないメソッドの場合、レポートには各ピー クのピーク番号、リテンションタイム/マイグレーションタイム、ピー ク面積、ピーク高さ、シグナル情報、半値幅(リファレンスガイドの 「真のピーク幅 Wx [min]」を参照)、対称度、k'、カラム効率(理論段 数)、分離度が含まれます。

キャリブレーションされたメソッドの場合、レポートには各ピークの ピーク番号、リテンションタイム/マイグレーションタイム、化合物 名、アマウント、シグナル情報、半値幅、対称度、k'、カラム効率(理 論段数)、分離度が含まれます。

このピークの半値幅の計算式は、インテグレータで使用される複雑な式 とは異なります。カラム効率および分離度の値は、ここで計算したピー ク幅に基づきます。レポートのヘッダーには、機器、カラム / キャピラ リ、サンプル、取り込みパラメータなどのメソッド関連情報がすべて含 まれます。シグナルもプロットされます。

- 「パフォーマンス + ノイズ] [システムスータビリティー] メニューの
 [ノイズ測定範囲の編集] ダイアログボックスで定義したノイズ範囲の
 ノイズ計算とパフォーマンスレポートスタイルを組み合わせたもので
 す。ノイズには 6σ (標準偏差の 6 倍)、ピーク to- ピーク、ASTM ノ
 イズが含まれます。ドリフトとうねりも計算されます。
- [拡張パフォーマンス] すべてのピークパフォーマンスの計算結果や 各ピークの個別プロットを含んだ拡張レポートが作成されます。プロッ トには、ベースライン、タンジェント、および定義済みの高さのピーク 幅を含みます。このレポートタイプにはキャリブレーションピークのみ が含まれます。

パフォーマンスレポートスタイルに印刷されたパラメータに加え、以下 のようにさらに多くのピークパフォーマンスパラメータが決定されま す。各ピークのピーク開始および終了時間、歪度(Skew)、尖度 (Excess)、ピーク幅、USP テーリングファクタ、データポイント間の時 間間隔、データポイント数、統計モーメント、理論段数、メートルあた りの理論段数、選択性、分離度が印刷されます。ピーク幅、理論段数、 メートルあたりの理論段数、選択性、および分離度は、真の半値幅、5 シグマ、タンジェント、テーリングメソッドにより計算されます(詳細 については、リファレンスガイドの「パフォーマンステストの定義」を 参照してください)。

クラシックレポート

レポートのヘッダーには、機器、カラム / キャピラリ、サンプル、取り 込みパラメータ、およびシグナルのプロットなどのメソッド関連情報が すべて含まれています。ピークパフォーマンスパラメータアルゴリズム の完全なリストについては、リファレンスガイドの「パフォーマンステ ストの定義」を参照してください。

スペクトルのレポートスタイル([簡易 + スペクトル]、[詳細] + [スペ クトル]、[パフォーマンス + ライブラリサーチ])の詳細については、『ス ペクトルモジュールの概要』に記載されています。

カスタマイズレポートのレポートスタイルへの追加

ChemStation の [レポートのレイアウト] ビューで作成したカスタムレ ポートテンプレートを、利用可能なレポートスタイルのリストに追加でき ます。

パフォーマンスレポート以外のすべてのレポートは、インテグレータがより複 雑な式を使用して計算したピーク幅をリストにします(ピーク幅計算の詳細に ついては、リファレンスガイドの「ピーク幅」を参照してください)。

他のレポートスタイルパラメータ

ピーク和テーブル

注記

このピーク和テーブルは、石油化学および製薬業界向けの特定アプリケー ションのために提供され、以下の機能でより効果的に実行できます。

- ユーザーが指定した範囲内にあるピーク面積を合計する
- ピークの範囲内にある面積を合計し、乗数を1つ使用して計算を実行する
- 同じ名前を持つすべてのピークの面積を合計する

レポートが作成されると、ChemStation は、ピーク和レポートによって置き換えられる Norm% 例外として、ピーク和テーブルを使用して標準計算後に印刷されるピーク和レポートを生成します。

クラシックレポート

キャリブレーションされていないピークのレポートレイアウト

キャリブレーションされていないピークのレポートレイアウトを変更する には、[レポート条件]ダイアログボックス内で次のいずれかを選択しま す。

- リテンション/マイグレーションタイムでの並べ替えを選択している場合は分割された1つのテーブルで、シグナルでの並べ替えを選択している場合は分割された複数のテーブルで、[分割]を選択して、キャリブレーションされていないピークをレポートします。
- [キャリブレーションピークと一緒]を選択して、キャリブレーション されていないピークをキャリブレーションピークと一緒にレポートします。
- [レポートしない]を選択して、キャリブレーションされていないピー クのレポートを非表示にします。

シーケンスサマリレポート

概要

ChemStation では、個別のサンプル分析ごとに、さまざまな標準レポート を印刷できます。シーケンスサマリレポートは、レポート出力の別な方法 であり、多様な分析にわたってパラメータを計算し、レポートすることが できます。たとえば、機器の安定性や新しいメソッドの堅牢性をテストす るのに役立ちます。

シーケンスサマリレポートには以下のものが含まれます。

- タイトルページ
- 機器のリビジョン番号および使用される分析カラム / キャピラリーを含む、機器コンフィグレーション
- どの分析の自動シーケンスが実行される必要があるかを記述している シーケンステーブルのリスト
- シーケンスが行った内容およびシーケンス分析中に発生した予期しない イベントのログブック記述
- メソッドのリスト

- サンプルごとの個別レポート
- ・ 選択した基準に基づく分析に関する統計 統計はキャリブレーションされた化合物のみに対して計算される
- レポートの詳細セクションを参照するページ番号付きの目次

シーケンスサマリレポートの設定

シーケンスサマリレポートを設定する際、次に挙げる 9 個のカテゴリか ら、適切なチェックボックスをチェックして有効化し、必要に応じてテン プレートセクションからレポートスタイルを選択することにより、好きな 組み合わせを選択できます。各テンプレートは、シーケンスサマリレポー ト全体における特定のセクションの内容とレイアウトを指定します。

次に挙げるシーケンスサマリレポートのスタイルのいずれかを選択できま す。

ヘッダページ

GLP テンプレートは、以降のレポートのために、GLP をタイトルページとして、大きな文字で印刷します。日付および署名する場所も含まれます。

設定

レポートに機器コンフィグレーションおよび分析カラム / キャピラリの仕 様を含めたい場合は、[コンフィグレーション]を選択します。

シーケンステーブル

レポート内のサンプルのリスト、サンプル定量パラメータ、およびメソッド名を含むには、[シーケンステーブル]を選択します。このリストは、システムが何を分析したかを表示します。

ログブック

機器の状態およびサンプル分析中に発生した異常イベントを含む、システムが実行した分析のリストを取得するには、[ログブック]を選択します。

クラシックレポート

メソッド

ー連の自動分析の中で使用された、すべての分析メソッドを一覧表示する には、[メソッド]を選択します。

分析レポート

メソッド用に設定されたレポートスタイルに基づいて個別の分析レポート を取得するには、[分析レポート]を選択します。

個別の分析レポートは、シーケンスサマリレポート内で指定されたレポー トセクションに加えて、問題になっているメソッドに指定されたレポート スタイルに基づいて、分析ごとに印刷できます。以下の「シーケンス出力」 を参照してください。

SUILabel タイプ = アプリケーション > キャリブレーションランおよ びサンプルラン用の統計

[キャリブ試料分析の統計]を選択すると、キャリブレーションサンプル の統計的トレンド分析が生成されます。[未知試料分析の統計]を選択す ると、サンプル(不明)分析の統計的トレンド分析が生成されます。両方 の選択で、標準統計法および拡張統計法のテンプレートスタイルを使用で きます。拡張統計法は分析の統計トレンドをグラフで印刷するのに対し、 標準統計法はテキストのみ印刷します。[拡張統計法用のアイテムおよび リミット]ダイアログ ボックスで選択した内容は、[シーケンスサマリパ ラメータ]ダイアログ ボックスの[拡張統計法]オプションを選択した 場合にのみ使用されます。

[シーケンスサマリパラメータ]ダイアログボックスの[標準統計法]オ プションを選択した場合、レポートされる統計は次のとおりです。

- リテンション / マイグレーションタイム
- 面積、
- 高さ、
- アマウント、
- ピーク幅(レポートスタイルに基づき、『「レポートスタイル」229ページ図』を参照))
- 対称度。

クラシックレポート

統計計算では、マルチレベルキャリブレーションメソッドを使用するシー ケンス内の異なるキャリブレーションレベルは区別されません。これは、 たとえば、面積、高さ、アマウントのような濃度に依存するアイテム([拡張統計法用のアイテムおよびリミット]ダイアログボックスを参照し てください)はすべて、キャリブレーションレベルに関わらずひとまとめ にして考えられることを意味します。このため、[キャリブ試料分析の統 計]の値は、シーケンス内のマルチレベルキャリブレーションメソッドに は役立ちません。

サマリ

サマリを選択すると、分析された一連のサンプルの概要、および使用され たメソッドが印刷されます。サマリが他のシーケンスサマリ とともに選択 されている場合、シーケンスサマリレポートの別の部分を参照するページ 番号が含まれます。次に挙げる 2 つのサマリスタイルが利用可能です。

サンプルサマリは、サンプル名、データファイル名、メソッドおよびバイ アル番号のようなサンプル情報とともに、シーケンス内のサンプル分析実 行の詳細を表にします。

化合物サマリは、キャリブレーションされた化合物またはピークごとの基本定量結果とともに、メソッド内で指定されたレポートのタイプに基づい てサンプル分析を表にします。

シーケンス出力

[**シーケンス出力**] ダイアログボックスでは、シーケンスサマリレポート の印刷位置を定義することもできます。

[ファイルへのレポート]を選択して、指定したファイルにレポートを印 刷するファイル名を入力します。デフォルト設定では、データはファイル GLPrprt.txt に保存されます。デュアル注入機能を持つ GC システムでは、 フロントインジェクタとバックインジェクタのデータはそれぞれ GLPrptF.txt および GLPrptB.txt に保存されます。

[**PDF へのレポート**]を選択し、PDF 文書としてレポートを保存します。レポートは、CLPrprt.PDF という名前のシーケンスフォルダに保存されます。

[HTM へのレポート] を選択すると、レポートは HTML 形式で印刷されま す。レポートは、シーケンスパラメータで指定したデータディレクトリの HTM ディレクトリに保存されます。HTM レポートには、インデックスファ イル (index.htm) 以外に、コンテンツファイル (contents.htm) およびレ クラシックレポート

ポートの各ページの GIF (グラフィックス交換フォーマット) ファイル (page1.gif など) という少なくとも 2 つのファイルが含まれています。 HTML レポートを参照するには、ご使用のブラウザでインデックスファイル を開いてください。

[プリンタへのレポート]を選択すると、システム上のプリンタにレポートが印刷されます。[各装置レポートを印刷]を選択すると、各分析後にサンプルレポートを印刷する機能が有効になります。これらのレポートは、シーケンス全体の終了時に生成されるシーケンスサマリレポートとして指定したレポートに加えて印刷されます。これらのレポート用に、[シーケンス出力]ダイアログで新しい出力先を指定したり、個々のメソッド内で指定した出力先を使用することができます。

レポートファイルフォーマット

レポートは、さまざまな形式で保存できます。各フォーマットには個別の 拡張子があります。1 つのレポートに複数のフォーマットを選択すること もできます。

- **.TXT** レポートのテキストは、UNICODE テキストファイルとして出力されます。
- .EMF それぞれのレポートグラフィック(シグナルまたは検量線)は、 Microsoft Windows メタファイル(WMF)に保存されます。1 つのレポート に複数の.WMF ファイルを持たせることもできます。生成されたファイル フォーマットは、Windows のソフトウェア開発ドキュメントで定義されて いる Microsoft 標準メタファイルフォーマットにしたがいます。これらの ファイルは、さまざまな独自仕様のソフトウェアパッケージで使用されて いる Aldus Placeable Metafile (APM)フォーマットと互換性があります。
- .DIF 表形式のレポートは、データ交換フォーマット(DIF)で保存されます。このフォーマットは、Microsoft Windows EXCEL などのスプレッドプログラムで利用できます。選択されたレポートスタイルとは関係なく、"簡易"のレポートスタイルに含まれる情報のみ保存されます。
- . CSV このレポートは、CSV (値がコンマで区切られた)フォーマットです。これは表形式データ用の非常に単純な形式で、多くのスプレッドシートやデータベースで利用可能です。選択されたレポートスタイルとは関係なく、「簡易」のレポートスタイルに含まれる情報のみが保存されます。

クラシックレポート

単一のレポート用に、複数の.DIF および.CSV ファイルを使用できます。 レポートブロックごとに、たとえば REPORTOO.CSV のような最初のファイ ルにレポートヘッダー情報が含まれます。それに続くファイルには、表形 式の結果が含まれます。

結果がリテンション/マイグレーションタイムによってソートされている 場合、全体のテーブルに、たとえば REPORT01.CSV のようなファイル 1 個 のみ必要です。

結果がシグナルによってソートされる場合、シグナルごとに個別の表が必要です。この場合、ファイルは Report01.CSV から ReportNN.CSV (NN は シグナルの番号を表す)という形式で名前が付けられます。

- .XLS レポートは、Microsoft Excel スプレッドシートに XLS フォーマットでエ クスポートされます。データは一般的に処理を加える必要があります。
- PDF レポートは.pdf ファイルに印刷されます。ChemStation セットアップにより、「PDF-XChange 4.0」という PDF プリンタがインストールされます。コンピュータが再起動されるまで、このプリンタは[スタート]メニュー/[設定]/[プリンタと FAX] にのみ表示されます。ChemStation が起動されると、PDF-XChange に基づき「ChemStation PDF」という名前の他の一時プリンタが作成されます。ChemStation セッションを実行中は、ChemStation PDF は[スタート]メニュー/[設定]/[プリンタと FAX] に表示されます。[固有の PDF ファイル名] オプションでは、<sequence_container_name>_<data_file_name>.pdf というファイル名でレポートとは無関係に.pdf レポートを保存することができます。

12 レポート作成 クラシックレポート



ChemStation のコンセプトとワークフロー

13 CE 特有のコンセプトと機能

メソッド & ランコントロールビューにおける CE Agilent ChemStation 固有の機能 240

- バイアルテーブル 240 メソッド競合テーブル 241 シーケンス競合テーブル 242 メソッドシミュレーション 242 ピークトップタイプ 243 キャリブレーションタイプ 244 マイグレーションタイムベースキャリブレーション 244 移動度補正を使用したキャリブレーション 244 CE-MSD 246
 - バックグラウンド減算 246
- CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ 247
- この章は、ChemStation を使用して CE 機器をコントロールする場合にのみ関連する内容です。



Agilent Technologies

メソッド & ランコントロールビューにおける CE Agilent ChemStation 固有の機能

メソッド& ランコントロールビューにおける CE Agilent ChemStation 固有の機能

バイアルテーブル

注記

[バイアルテーブル]機能は、オンライン ChemStation セッションだけで使用できます。

[バイアルテーブル]は、バイアルトレー内のバイアルとサンプルとの関 連付けを行うテーブルですが、さらに重要なのは、バイアルに固有のタス ク(用途)を関連付けられる点です。たとえば、バッファ、フラッシュバ イアル、チューブ用バイアル、廃液バイアルなどです。[バイアルテーブ ル]はシーケンステーブルにリンクされています。シーケンスが読み込ま れると、シーケンステーブルからの情報がバイアルテーブルにコピーされ ます。ただし、バイアルテーブル】で「拡張」ボタンを選択すると、[バイアルテーブル拡張設定]ダイアログボックスが表示されます。する と、[バイアルテーブル]とメソッドまたはシーケンスの間の競合を警告 する機能と、シンボリック名の使用を有効にできます。[バイアルテーブル]と メソッドやシーケンスの間の競合をチェックする必要があります。

メソッドまたはシーケンスが読み込まれると、[バイアルテーブル]のバ イアル割り当てと、読み込まれたメソッドまたはシーケンスのバイアル割 り当てとの間で、一貫性のチェックが行われます。バイアルに競合がある 場合、[競合]テーブルを使用して簡単に解決できます。

注記 バイアルトレイ内のポジション 49 は、ニードル洗浄バイアルに使用され、ポ ジション 50 は、バイアルリフトが元の位置に戻せるように空のままです。こ れらのポジションは [バイアルテーブル] では利用できません。

> バイアルテーブルの [使用]の列により、バイアルの用途が指定できます。 [使用]フィールドには 5 つの有効なエントリがあります。

無関係 一貫性チェックなし

メソッド & ランコントロールビューにおける CE Agilent ChemStation 固有の機能

- メソッド メソッド内で参照
- シーケンス シーケンステーブル内で参照
 - **システム** これは、システムコンフィグレーションに属する特別なバイアルです。[名前]は、以下のシンボリック名の中の1つにする必要があります。
 - [@INLET] インレットバイアル
 - [@OUTLET] アウトレットバイアル
 - [@FLUSH] フラッシュバイアル
 - [@WASTE] 廃液バイアル
 - [@clean tubes] リプレニッシュメントチューブの洗浄に使用されるバイ アル
 - [@USER X] (ここで X は 1 ~ 10) シーケンスプレースホルダ

このオプションにより、メソッドで使用するシンボリック名に対して 個々のバイアル番号の仕様を指定できます。これにより、ユーザがシー ケンス内の各行の[インホーム]、[アウトホーム]、[リプレニッシュ]、[プレコンディショニング]、[ポストコンディショニング] などに 対して、異なるバイアルをユーザー設定することが可能となります。

使用されてい このポジションにはバイアルなし ません

メソッド競合テーブル

[メソッド競合テーブル]は、バイアルテーブルで定義されたバイアルと 競合するように定義されたバイアルを含むメソッドを読み込むと表示され ます。[メソッド競合テーブル]は2つの部分に分けられます。左半分 は、[バイアルテーブル]のイメージです。右半分には、競合バイアルが 表示されます。

競合を解決するには、場所を変えるか(一重線の矢印)、メソッド上の[バイアルテーブル]内の次の空きポジションにバイアルを移動するか(二 重線の矢印)のどちらかを選択できます。これは、テーブル内の競合する バイアルのそれぞれに対して実行可能です。

ユーザ定義のバイアル(シンボリック名 @User1、@User2 などを持つ)が 使用される際には、競合テストはこれらのバイアルに対して実行すること

ChemStation のコンセプトとワークフロー

メソッド & ランコントロールビューにおける CE Agilent ChemStation 固有の機能

ができません。これは、シーケンスの情報がなければ競合が存在するか否 かの判断ができないためです。

シーケンス競合テーブル

[シーケンス競合テーブル]は、バイアルテーブル上で定義されたバイア ルと競合するように定義されたバイアルを含むシーケンスを設定または読 み込むと表示されます。[シーケンス競合テーブル]は2つの部分に分け られます。左半分は、[バイアルテーブル]のイメージです。右半分には、 競合バイアルが表示されます。

競合を解決するためには、[バイアルテーブル] 情報を [シーケンステー ブル] の情報で上書きするように選択できますが、システムエントリに よって競合が引き起こされている場合は、情報を上書きできません。競合 を解決せずに [シーケンス競合テーブル] を閉じることも選択できます。

ユーザ定義のバイアル(User1、User2 などの列の中)が使用される際に は、競合テストをこれらのバイアルに対して実行することができません。 これは、メソッド情報がなければ競合が存在するか否かの判断ができない ためです。

メソッドシミュレーション

シミュレーション機能を使用してメソッドをチェックできます。シミュ レーション中に、ダイアグラムはメソッド中に実行される動作を表示しま す。たとえば、メソッドで指定されたバイアルはリフトに表示され、印加 される電圧と電力は実際の分析中と同じように表示されます。シミュレー ションは、分析を実行するよりも速く、各ステップには約3秒かかりま す。ステップは、CE ダイアグラムでの変更によって定義されます。

シミュレーションを開始するには、シミュレーションしたいメソッドを ロードし、[機器]メニューから[シミュレーション]を選択します。

CE 特有のコンセプトと機能 13 ピークトップタイプ

ピークトップタイプ

LC、GC、または MS ピークと違い、CE のピークが非対称になることは極め て一般的です。このため、定量結果で高いレベルの精度と再現性を得るた めに、積分パラメータを選択能力が非常に重要です。

[積分] ドロップダウンメニューで [ピークトップタイプ] を選択する と、以下のピークトップタイプが使用できます。

最高ポイント

- ・ ピークが三角形の場合
- 異なる濃度で作業する場合

放物線補間

・ テーリング、つまり分離されていないピークに使用

重心

- 三角形の形状のピークに、より正確な計算を提供
- ・ 濃度範囲がほぼ一定のサンプル

ガウシアンフィット

・ 対称ピークに使用

キャリブレーションタイプ

キャリブレーションタイプ

マイグレーションタイムベースキャリブレーション

シーケンスでのマイグレーションタイムベースキャリブレーショ ンの使用

マイグレーションタイムベースキャリブレーションおよびリキャリブレー ションは 1 つのシーケンスに含めることができますが、通常のキャリブ レーションおよび反復リキャリブレーションのみサポートされています。 ブラケットリキャリブレーションはサポートされていません。マイグレー ションタイムベースキャリブレーションには、シーケンスサマリレポート はありません。

マイグレーションタイムベースキャリブレーション用のレポート スタイル

マイグレーションタイムベースキャリブレーションに使用できるレポート スタイルは、簡易版(定量テキスト結果)と完全版(ヘッダ、サンプル情 報、機器条件、ログブック、定量結果、ピーク純度プロット)に限られま す。

移動度補正を使用したキャリブレーション

バッファ組成、分析温度や粘度のほか、キャピラリー壁への吸着のわずか な変動も、電気浸透流(OF)に影響を及ぼし、不安定にさせる原因となり ます。その結果、EOF が変化し、かなり大きなマイグレーションタイムの 標準偏差が生じます。移動度リファレンスピークのマイグレーションタイ ムをモニタリングすることで、移動度の補正をすることにより、分析毎で のマイグレーションタイムシフトを著しく低減させることができます。そ してマイグレーションタイム再現性を著しく向上させることができます。 以下の優先順位で、移動度リファレンスピークを選ばなければなりません。

- 一番高いシグナルでピークを選択します
- 最も分離されたピークを選択します

キャリブレーションタイプ

- 移動度リファレンスピークとして、EOF マーカーまたは内部標準も使用 できます
- 検索ウィンドウを拡大して、移動度リファレンスピークを常に探します
- 検索ウィンドウでいくつかのピークが降下すると、最も高いシグナルを 持つピークが、移動度リファレンスピークとして自動的に選ばれます。
- 2 つの移動度補正タイプが使用可能です。
- **実効移動度補正** [実効移動度補正]は、すべてのピークの実効移動度を使用し、エレクトロ フェログラムと一緒に電圧傾斜データを使用できるようにする必要があり ます。さらに、実効移動度補正で作業すると、すべてのサンプルコンポー ネントの実際の実効的移動度を測定できます。
- **相対移動度補正** [相対移動度補正]は、電圧データがない状態で操作でき、すべての測定に 対して一定電圧であると仮定します。

CE-MSD

CE-MSD

バックグラウンド減算

[バックグラウンド減算 (BSB)] メニュー項目を選択すると、直前に選択 されたマススペクトルが、現在のエレクトロフェログラムの各ポイントか ら減算されます。結果のデータは、オリジナルのデータファイルと同じ名 前で、同じディレクトリに保存されます。ただし、ファイル拡張子は.BSB に変更されます。

この新しいデータファイルが現在のデータファイルとなり、バックグラウ ンドが減算されたエレクトロフェログラムが表示されます。実行された バックグラウンド減算の回数の記録は、データファイルヘッダの[オペ レータ]項目に保持されます。

BSB データのテーブル形式のリストを表示する場合は、データ表示の精度 による違いを観察できます。

注記 LC/MSD 内にある HELP テキストファイルは、LC パラメータのみ参照し、CE は 参照しません。いくつかの LC/MSD ソフトウェアで利用可能な機能は、CE/MSD アプリケーションでは利用不可能または適用外ですが、LC アプリケーション では使用が可能です。[ピークマッチング]機能は CE-MS には適用外なので、 有効ではありません。CE-MS では、ひとつの分離キャピラリで UV および MS 検出が行われる有効長が異なります。有効長が違うため分離度が異なるので、 ピークマッチングは行えません。

CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ

CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ

CE でのメソッドは、選択した CE モードに依存します。そのため、各メ ソッドはそれぞれ異なるメソッドサブディレクトリに格納されます。

- **CE** CE モードのメソッドを格納
- **CEC** CEC モードのメソッドを格納
- **CEp** CE plus 圧力モードのメソッドを格納
- **CEMS** CE MS モードのメソッドを格納
- **CEMSp** CE MS plus 圧力モードのメソッドを格納

13 CE 特有のコンセプトと機能 CE モードごとの異なるメソッドサブディレクトリ



この章では、関連マニュアルと、OpenLAB Shared Services で使用 される権限に関する情報について説明します。



Agilent Technologies

文書マニュアル

Agilent OpenLAB CDS に利用可能なマニュアルは以下の通りです。

- OpenLAB CDS コントロールパネル オンラインヘルプ
- OpenLAB CDS ChemStation エディション オンラインヘルプ
- OpenLAB CDS ワークステーションインストールガイド
- OpenLAB CDS ネットワークワークステーションインストールガイド
- OpenLAB CDS ChemStation エディションアップグレードガイド
- OpenLAB CDS 分散システムインストールガイド
- OpenLAB CDS インストール (Oracle 11g R2)
- OpenLAB CDS ChemStation エディション 機器インストール&コンフィ グレーションガイド
- OpenLAB CDS ChemStation エディション ベーシックコンセプトとワークフロー
- ECM を使用した OpenLAB CDS ChemStation エディション コンセプト ガイド
- OpenLAB CDS ChemStation エディション 基本操作のリファレンス
- レポートテンプレート設計者用の OpenLAB インテリジェンスレポートマニュアル
- OpenLAB CDS 機器ファームウェア互換性マトリックス
- OpenLAB CDS ハードウェアおよびソフトウェア要件
- OpenLAB CDS ネットワーク要件
- IO ライブラリ
- Agilent 機器コントローラ用互換性ガイド
- ソフトウェアライセンスリクエストフォーム
- ソフトウェアライセンスインストールガイド
- XML (LIMS) 接続ガイド

ChemStation のコンセプトとワークフロー

OpenLAB Shared Services の権限

プロジェクト権限

表 28 プロジェクト管理

名前	説明
プロジェクトまたはプロジェクトグ ループの表示	プロジェクトおよびプロジェクト詳 細の閲覧。編集は不可。 注意: ChemStation ではプロジェ クトをサポートしていませんが、こ の権限はすべてのユーザーに必要で す。
プロジェクトまたはプロジェクトグ ループの管理	プロジェクトの作成とプロジェクト プロパティの編集、プロジェクトの 移動権限。設定へのアクセスは不 可。(EZChrom のみ、プロジェクト は ChemStation ではサポートして いません)。
プロジェクトまたはプロジェクトグ ループのアクセスの管理	プロジェクトへのアクセス設定を表 示、編集。(EZChrom のみ、プロ ジェクトは ChemStation ではサ ポートしていません)。
レポートテンプレート編集タブの表示	OpenLAB ECM Intelligent Reporter にのみ適用。この権限は、レポート クライアントで [レポートテンプ レート編集] タブを表示するため に必要です。

14 付録

OpenLAB Shared Services の権限

表 29 電子署名

名前	説明
電子署名の署名ファイル	ユーザーはデータファイルに署名す ることができます(EZChrom のみ、 電子署名機能は ChemStation ではサ ポートしていません)。
電子署名を無効にする	ユーザーは署名を取り消すことがで きます (EZChrom のみ、電子署名機 能は ChemStation ではサポートして いません)。

表 30 ChemStation: コントロール

権限	説明
測定	取り込みの開始(シングルサンプル またはシーケンス)。

表 31 ChemStation: データ

権限	説明
データの削除	ChemStation エクスプローラからの データファイル削除。
マニュアル積分	マニュアル積分の実行。
ECM ヘデータを保存	対話形式で ECM ヘデータを保存。

表 32 ChemStation: 機器

権限	説明
機器コンフィグレーションの変更	機器コンフィグレーションパラメー
	タの変更。

ChemStation のコンセプトとワークフロー
OpenLAB Shared Services の権限

権限	説明
ログブックの消去	現在のログブックを消去可能。
ログブックの保存	現在のログブックを保存可能。

表 33 ChemStation: ログブック

表 34 ChemStation: メソッド

権限	説明
キャリブレーションテーブルの編集	キャリブレーションテーブルの作成 と変更、キャリブレーション設定の 変更。
メソッドの削除	ChemStation エクスプローラからの メソッド削除。
積分イベントの編集	積分イベントの修正と自動積分の実 行。
イオンラベルの編集	イオンラベルオプションの編集 (LC/MS のみ)。
システムスータビリティの編集	ノイズ範囲およびパフォーマンスリ ミットの編集。
監査証跡を有効	特定のメソッドに対する監査証跡の 有効化。
機器メソッドの変更	機器メソッドパラメータの変更。
メソッドプロパティの変更	メソッド情報およびランタイム チェックリストの変更。
メソッド キャリブレーションを実行	対話形式でリキャリブレーションを 実行可能。
メソッド変更の保存	メソッドの変更を保存(データ解析 ビュー内のシーケンス / マスターメ ソッドの更新を含む)。

OpenLAB Shared Services の権限

表	35	ChemStation:	レポート
---	----	--------------	------

権限	説明
プレビュー / レポート印刷	レポートのプレビューと印刷。
レポートの変更	レポートの計算方法 / 印刷スタイル の修正、および機器カーブダイアロ グの編集。

表 36 ChemStation: セキュリティ

権限	説明
セッションロックを解除	他のユーザによりロックされた ChemStation セッションを解除。
コマンドライン	コマンドラインのオン / オフ。
キュー転送管理	キュー転送とスプーラキューマネー ジャへのアクセス。
ECM 転送プレファレンスの変更	ECM への自動アップロードの有効化/ 無効化。

表 37 ChemStation: シーケンス

名前	説明
シーケンスの削除	ChemStation エクスプローラからの シーケンス削除。
シーケンスサマリの編集	シーケンスサマリレポートおよび拡 張統計法の設定を変更。
再解析	シーケンスの再解析。
シーケンスの保存	シーケンスを ECM へ保存可能。

OpenLAB Shared Services の権限

権限	説明
コンパニオンビューにアクセス	コンパニオンビューへのアクセス (GC ChemStation のみ)。
データ解析ビューにアクセス	データ解析ビューへのアクセス。
診断ビューにアクセス	診断ビューへのアクセス。
メソッド & ランコントロールビューに アクセス	メソッド&ランコントロールビュー へのアクセス。
RT ロックにアクセス	リテンションタイムロックメニュー へのアクセス (GC のみ)。
RT 検索にアクセス	リテンションタイム検索メニューへ のアクセス (GC のみ)。
レビュービューにアクセス	ユーザーはレビュービューにアクセ スできます。
チューンビューにアクセス	チューンビューへのアクセス (LC-MSD ChemStation のみ)。
ベリフィケーションビューにアクセス	ベリフィケーションビューへのアク セス。
レポートレイアウトビューにアクセス	レポートレイアウトビューへのアク セス。レポートテンプレートの作成 / 編集 / 保存。
バッチビューを有効	バッチビューにおけるすべての操作 を有効化。
フルメニューを有効	ChemStation フルメニューの有効 化。

表 38 ChemStation: ビューアクセス

OpenLAB Shared Services の権限

機器権限

表 39 機器管理

名前	説明
機器またはロケーションの表示	ツリー内のロケーションを表示、ア クセス可能。ただしアクセスセキュ リティの編集は不可。プロパティの 表示は可能。
機器またはロケーションの管理	ロケーションの作成、移動とプロパ ティの編集(名前、説明など)。
機器またはロケーションアクセスの 管理	ロケーションアクセス設定の表示お よび編集。
機器の実行	機器セッションの開始。
機器サービス	機器のロックまたはロック解除。

管理権限

表 40 システム管理者

名前	説明
プリンタの管理	プリンタおよび印刷サーバーの追加 / 削除。
アクティビティログのプロパティの 編集	
システムアクティビティログのアー カイブ	システムアクティビティログをアー カイブ(アーカイブ / 削除)。アーカ イブ自動設定の定義。
アクティビティログの消去	アーカイブ後にログブックを消去可 能。
管理レポートの作成	システム管理レポートの作成。

ChemStation のコンセプトとワークフロー

OpenLAB Shared Services の権限

名前	説明
システムコンポーネントの管理	コンポーネント(アプリケーション) のインストール / 削除。
バックアップと復元	システム (DB) バックアップの作成 とバックアップの復元。
セキュリティの管理	 セキュリティ設定の変更。 ユーザー、グループ、およびロールの編集(追加、変更など)。 注意: この権限を持つユーザーは、 OpenLAB Shared Services のすべての設定へのアクセス権を自分自身に与えることが可能です。「セキュリティの管理」権限の付与は慎重に行ってください。
機器コントローラの管理	AIC コンフィグレーションの編集と、 コンフィグレーション UI で AIC を 管理。
ロックされた UI をロック解除	プライベートロックの場合であって も、ロックされたポータルまたは機 器セッションに(再ログインとして) ログイン。

表 40 システム管理者

索引

索引

A

ACAML 195 ACQ. TXT 85

В

Bl Studio 219 Business Intelligence Development Studio 219

С

CDS 10 ChemStation 17 エクスプローラ 99 カスタマイズ 78 管理ツール 46 製品構成 28 フレーバー 13

D

Da. M 85, 109, 185

Е

ECM 認証 54 ECM 10, 47, 225 ELN 10 EZChrom 10, 13, 50 F Flexera 41

G

GLP セーブ Reg 108 GLP データの保存 108 GLP 80

0

0LSS 10 0penLAB コントロールパネ ル 13, 15

R

 RC. NET
 17

 RDL
 219

 RTE
 219

S

shared services サー バー 22 Shared Services 13, 15 SubscribeNet 52

۷

Visual Basic 218, 222

W

Windows サービス 41 認証 54 X

XLS 197

あ

アーカイブ化 47
アーキテクチャ 20
アクティビティログブック 15
アドオン 29
アナログシグナル 112
アマウントの限界 202

こ

イージーシーケンス 128 一時停止 シーケンス 137 インテリジェントレポー ト 17, 77 データファイル 196 プレビュー 197 有効化 217 要件 195 利点 218

お

オンライン ヘルプ 250

か

外挿 204
カウントライセンス 30
化合物 200
カスタマイズ
データ解析 108
カスタム計算 221

ChemStation のコンセプトとワークフロー

カスタムフィールド 91. 218 カラーコード 118 監査証跡 47 管理権限 60 管理ツール 46

き

機器管理 15 機器コントロール 90 機器 管理 50 権限 60 ステータス 118 28 ドライバ 機能 10 キャリブレーションカー ブ 種類 201 シングルレベル 201 キャリブレーション 91 化合物 200 サンプル 200 周期的マルチレベ ル 166 範囲 204 ポイント 200 レベル 200 キャリブレーションテーブ ル とは? 208 共有ライセンス 30 <

クラシックレポート 77 グループ 59

クロスシーケンスレポー ト 219

け

結果セット 18. 85 自己編集 190 マイグレーション 157 結果フラグ付け 218 権限 管理 60 機器 60 個別ロケーションに関す る 61 プロジェクト 60 ロールと権限 59 検出器レスポンス 201

2

コアモジュール 28 更新 マスターメソッド 99 メソッド 135, 100 コンテナ 18 コンフィグレーション **67**

さ

再解析 17. 77. 86. 152, 186 再計算 17. 76. 86. 184 前回の結果 185 再接続 65 サンプル キャリブレーショ ン 200

L シーケンス 119, 122 一時停止 137 キュー 18 再解析 186 周期的キャリブレーショ ン 166 セットアップ 128 中断 138 停止 137 テーブル 125 取り込み 133 プラン 18 読み込み 182 シーケンステンプレー F 122 シーケンスの選択分析 結果セット選択 138 シーケンスライン 140 シーケンスパラメー タ 113. 123. 188 218. 222 式 シグナル 112 90 詳細 自己編集した結果セッ F 190 システムアクティビティロ グ 44. 53 システム シャットダウン 159

L

自動化 78. 119 とは? 121 白動 シャットダウン 159 ライブラリサーチ 107 リキャリブレーショ ン 161 シャットダウン システム 159 自動 159 マクロ 159 出力先 レポート 216 条件付フォーマット 222 シングルシーケンスレポー ト 219 シングル注入レポー ト 219 診断 44

す

スケーラビリティ 20 スタートアップライセン ス 30 スタンバイ状態 159 ステータス 機器 118 スニペット 218, 221

せ

製品構成 28 製品ライセンス 35 積分 106 イベント 90 結果テーブル 106 セキュリティ 44 セキュリティポリ シー 45. 55 セッション切断 64 セッション引き継ぎ 65 セッションロック 45

セッションロックを解 除 46 切断 64 前回の結果モード 185

そ

ソフトウェアの概要 オペレーティングシステ ム 67 システムコンフィグレー ション 67 データモデル 68 メソッドおよびシーケン ス 67

た

タイムベースロック 45 ち 中断 シーケンス 138 て

停止 シーケンス 137

で

ディレクトリ 結果セット 154 メソッド 97

τ

データ解析 90, 182 カスタマイズ 108 再解析 77 再計算 76 定量 75 バッチレビュー 76
データ取り込み 73, 112
データパス 113
データファイルと保存 メソッドのコピー 109
データフィールド 220
データ保存 151
デジタルシグナル 112
デモデータ 222
電子署名 47

لح

取り込みパラメータ 85

な

内部認証 54 ナビゲーションテーブ ル 182 データセットの解 放 190 データファイルの削 除 190 名前のパターン 133

に

認証プロバイダ 44, 54

ね

ネットワークワークステー ション 22

は

パス 112 パスワード 最小長さ 55 有効期間 55

ChemStation のコンセプトとワークフロー

ログイン試行回数 バックアップ 47 範囲 キャリブレーショ ン 204

ひ

ピーク 定量 91, 107 認識 91, 107 ピーク和テーブル 231 非プライベートロック 中 45

ふ

ファイル メソッド 97 ファイル名 シーケンスサマリレポー F 225 シングル注入 224 プレフィックス 156 フォーマット レポートテンプレー F 222 部分リキャリブレーショ ン 213 部分 213 プライベートロック中 45 プレファレンス 112. 133. 149 プレフィックス 156 フローティングライセン ス 30 分散システム 24 文書 250

ほ ポストシーケンス処 理 159 ポストラン コマンド 109 マクロ 109 保存 47

ま

56

マイグレーション 結果セット 157 マクロ シャットダウン 159 マッピング グループ 59 ユーザー 58 マニュアル 250 マルチレベル 周期的シーケンス 166

7

未確認のピーク リキャリブレーショ ン 213

め

90 メソッド情報 メソッドタイプ シーケンス 92 データファイル 93 マスター 92 メソッドツリー 99 メソッドファイル 機器パラメータ 97 メソッド GLP セーブ Reg 108

オフラインモード 98 オンラインモード 97 各部分 90 作成 94 135. 140 自動更新 修正 94 手動更新 100 ステータス 118 積分 106 操作のまとめ 103 ディレクトリ 97 特定を利用 185 マニュアル更新 99. 140 ライブラリサーチ 107

ŧ

モニタリング 機器ステータス 118

ゆ

ユーザー 管理 44, 57, 15 資格情報 57 文書 250 ユニークなフォルダ作 成 83, 147, 150 オン/オフ切り替 え 150

6

```
ライセンスファイル
作成 52
追加 52
モニタ 52
ライセンス
管理 15, 52
```

索引

機能 32 サーバー 41 タイプ 30 方式 30 ライブラリサーチ 107 ラボステータス全体の表 示 51 ラボステータス全体表 示 15 ランタイムチェックリス ト GLP データの保存 108 データ解析 106 データ取り込み 106 ポストランコマン ド 109 ポストランマクロ 109メソッドのコピーを保 存 109

り

リキャブレーション 完了 213 リテンションタイ ム 213 リキャリブレーション 自動 161 未確認のピーク 213 リテンションタイム リキャブレーショ ン 213 リモート機器コントロー ル 15 リモートコントロー ル) 18 リモートコントロール 64 リモートデスクトップ接 続 24.66

れ レスポンス 検出器 201 レビュー 195 レポート項目 221 レポート作成 77. 195 レポートタイプ クロスシーケンス 219 シングルシーケン ス 219 シングル注入 **219** レポートテンプレートエディ タ 219 レポートテンプレート ECM 225 カスタム計算 222 参照 223 条件付フォーマッ F 222 スニペット 218. 221 デフォルト 197 フォーマット 219 保存 222 レポート項目 221 レポートビューア 18 191 レポートプレビュー 197 レポート 91 カスタムフィール ド 218 クラシックまたはインテリ ジェント? 220 結果フラグ付け 218 シーケンスサマリ 216 出力先 216 シングル注入 216 スタイル 229

とは? 216 ファイル名 224

ろ

ロール 59 すべて 59 タイプ 59 ログイン 最大許容試行失敗回 数 56 ロケーションツリー 50 ロックアウト 45 セッションロックを解 除 46 タイムベース 45, 46 非アクティブ時間 56 非プライベート 45 プライベート 45 ロック時間 56 ロックボタン 46

わ

ワークステ	ーション	20
ワークフロ	1—	
レビュ・	— 197	
シーケンス	K	
作成	133	
編集	133	
保存	133	

索引

www.agilent.com

本書の内容

このガイドでは、Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition のさまざまな概念を説 明します。ChemStation がどのように動作す るかの理解を高めることを目的としていま す。

OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.03 では、結果データを素早く確認できるよう 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では、 シーケンスデータとメソッドを効率的に体系 化することができます。

© Agilent Technologies 2010-2011

Printed in Germany 09/2011



M8301-96012

