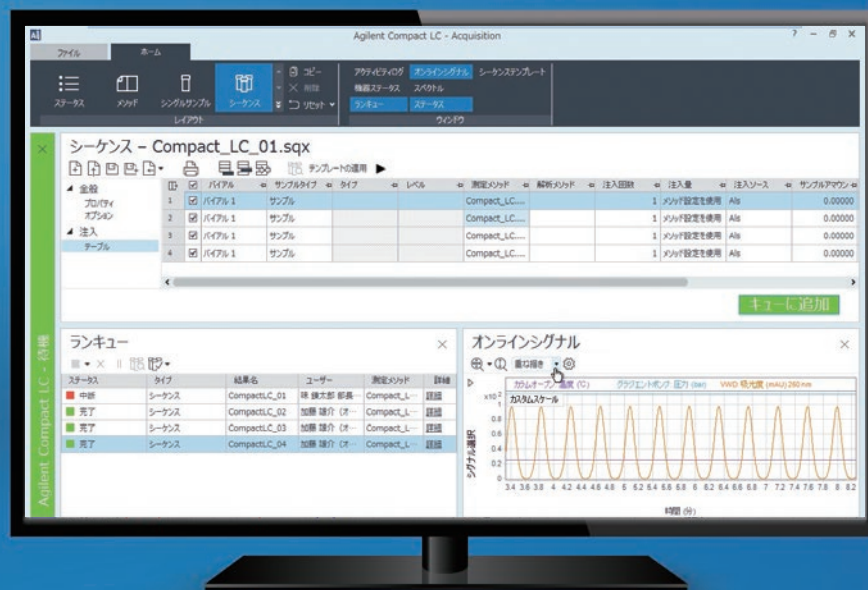


Agilent OpenLab CDS クロマトグラフィーデータシステム

新世紀 クロマトグラフィーデータシステム 登場





高機能で新しいソフトウェア ラボのニーズに合わせた設計

アジレントは、30 年以上にわたって分析装置の最先端企業として業界をリードし、お客様を長年サポートしてきました。また、歴史を通して変遷するラボの姿を、データインテグリティに関する規制の進化を目にしてきました。だからこそ、ラボが継続的に成果を上げていくには何が必要なのか、ラボがどんな課題を抱えているのか、ラボの運用維持に必要なものは何かを熟知しています。

現代のラボは、スタッフの確保や予算の管理といった問題に対処しなければなりません。また、より短時間でより大きな成果を求める要求にも応えなければなりません。もちろん、正確性を犠牲にすることは許されません。

アジレントが、次世代の OpenLab クロマトグラフィーデータシステム (CDS) を開発した理由は、ここに 있습니다。この高機能なソフトウェアによって、ネットワーク環境でもスタンドアロン環境でも、確実にコンプライアンスを準拠しつつ、効率性と生産性を維持しながら、アジレントの装置を全体的にコントロールします。

ラボの課題を解決する OpenLab CDS

ラボの分析結果のデータ管理は、印刷された紙の記録から電子的なデータへと大きく様変わりしています。その他にも、データを異なるシステムと共有する DX 改革、医薬 GLP/GMP のデータインテグリティ規制や ISO17025 など分析結果への信頼性担保、働き方の多様化と業務効率化との両立、にも対応しなければなりません。アジレントは、このような課題を解決する機能と製品群を OpenLab CDS に持たせ、お客様に貢献できるよう努めています。

ワークステーション

分析装置と対になったスタンドアローン構成。1 台の PC で分析に必要な分析装置の制御、測定の実施、データの解析、レポートの出力を行います。一般的な分析ラボで分析装置と共に最小単位で導入できる仕様です。

< 最新機能 >

- ・ 積分条件の検討時間を短縮する積分最適化ツール
- ・ 測定中のシグナルに重ねて表示できるリファレンスクロマトグラムの登録機能
- ・ フラクションコレクタや 2D-LC、GPC などのオプション機能を強化



ワークステーション プラス

分析装置と対になった、データベースを搭載したスタンドアローン構成です。スタンドアローン構成でありながら、規制対応に必要な機能を装備しています。医薬品規制強化や ISO17025 の改変に伴い、データの信頼性を向上させる要求が高まっている中、分析装置 1 台からでも対応できるシステムです。

< 規制対応機能 >

- ・ アクセスコントロール機能によるユーザー管理とロール設定
- ・ データベースへの結果セットの保存、結果のバージョン管理、ファイル削除の制限
- ・ 操作記録の詳細を監査証跡に記録
- ・ 監査証跡をレビューした記録を監査証跡内に記録し、ペーパーレス化を実現
- ・ 承認作業を電子的に行う電子署名機能
- ・ バックアップツールを用いた自動バックアップ機能



クライアント・サーバー

分析に関連するファイルや OpenLab CDS の設定をサーバーで一括管理する構成です。OpenLab CDS の操作はクライアントから行い、特定の分析装置の制御やデータの解析はすべてのクライアントから操作が可能となっているため、分析業務をより効率化できます。規制対応、パソコン故障時の障害対策、導入後の増設費用や分析装置の更新費用の削減が大きく見込める構成です。

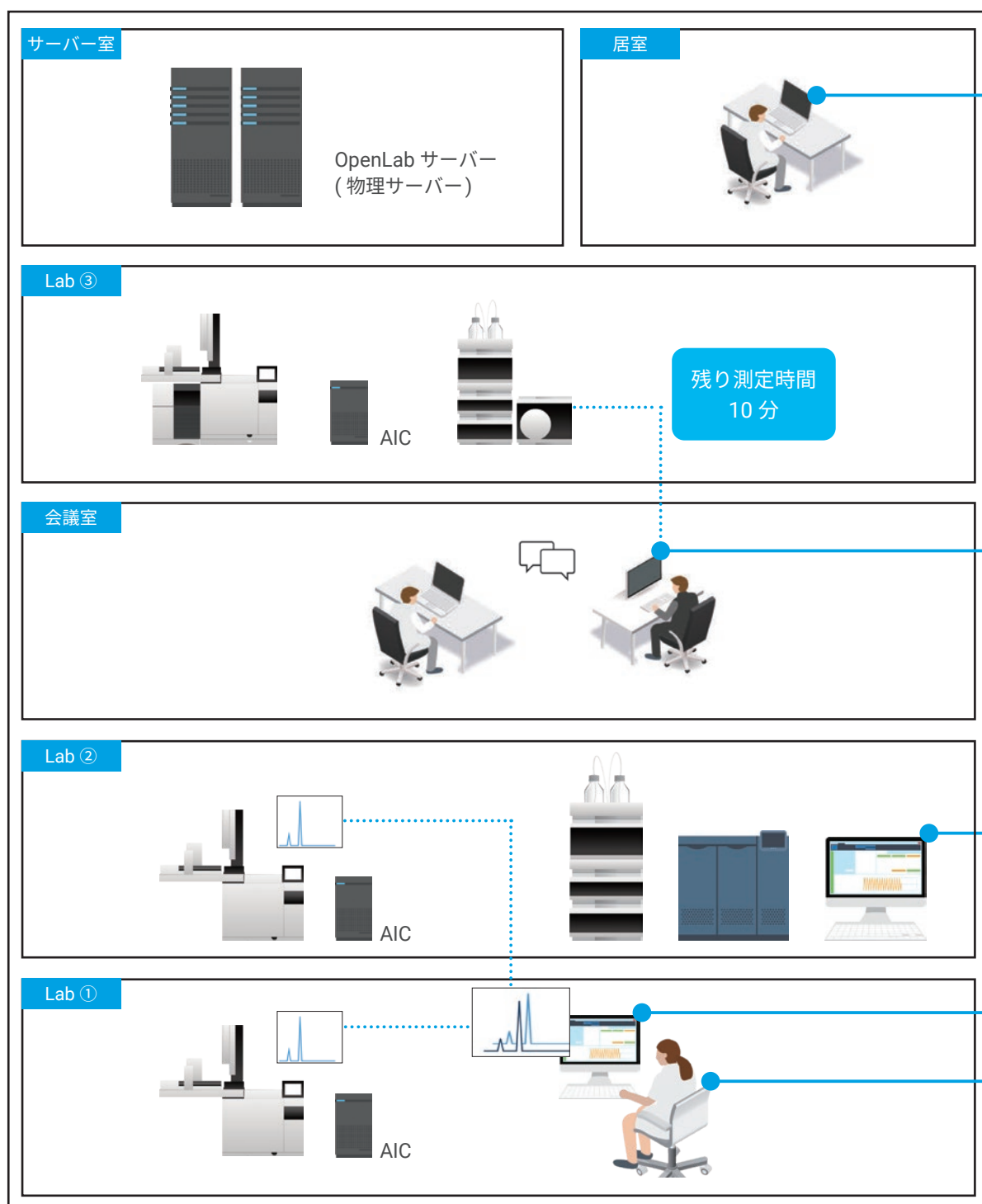


ネットワークを活用してスマートラボを実現

OpenLab CDS のクライアント・サーバーは、

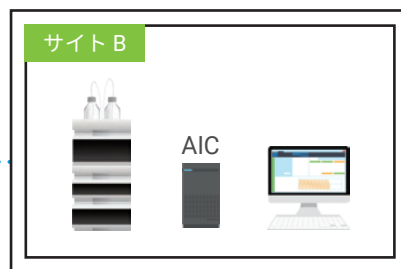
・リモートアクセス ・マルチベンダー機器サポート ・クラウドおよびデータセンター対応

という機能で、スマートラボの実現に貢献します。ネットワーク共有による分析データの有効活用や、知的財産であるデータの安全な管理と保管を実現します。さらに、異なる場所に設置された分析装置による結果の比較検討や、出張先や自宅など離れた場所でもラボと同じ操作を可能にする新たな分析ラボのかたちを提案します。





クラウドおよびデータセンターに
OpenLab サーバーを構築



DX 対策、拠点を越えたデータ管理、データという財産の保護を実現

デジタル技術を用いて業務フロー改善のニーズに応え、OpenLab CDS はデータの共有利用や長期的なデータ管理を実現させるクラウド技術やデータセンターへのサーバー構築をサポートしています。複数拠点のデータを 1 つのサーバーで集中管理することも可能になり、拠点間の結果比較やデータ管理が円滑になります。

居室から分析データの解析や他システムとのオンライン連携が可能

OpenLab CDS は、LIMS (ラボ情報管理システム) や ELN (電子ラボノート) など他のシステムとオンラインで連携できます。ユーザーは、居室で OpenLab CDS のデータ解析を行って、そのデータを最小限の操作で LIMS や ELN に転送できるだけでなく、解析結果のレビューも居室で実施可能になります。Sample Scheduler for OpenLab CDS では、LIMS から直接 GC や LC の測定を実行させつつ、分析ラボ全体の運転状況の把握を容易にします。

エラーや残り測定時間などの測定状況を遠隔で把握

分析装置の隣でしか確認できなかった測定の残り時間や進捗状況などを遠隔で確認することが可能です。測定状況の確認のために都度ラボに行く必要がなくなるため、測定が終了する時間まで分析業務以外の作業に集中することができます。測定中にエラーが発生したとしても、エラーの発生と原因を遠隔で即時に把握できます。

操作用 PC の配置は必要最低限

分析装置 1 台ごとに操作用 PC を配置するためのスペースを確保する必要はありません。ラボに配置する PC の台数を最小限にし、限られたスペースを有効活用できます。

離れた装置の結果比較やメソッドの移行に USB メモリは不要、1 画面で完結

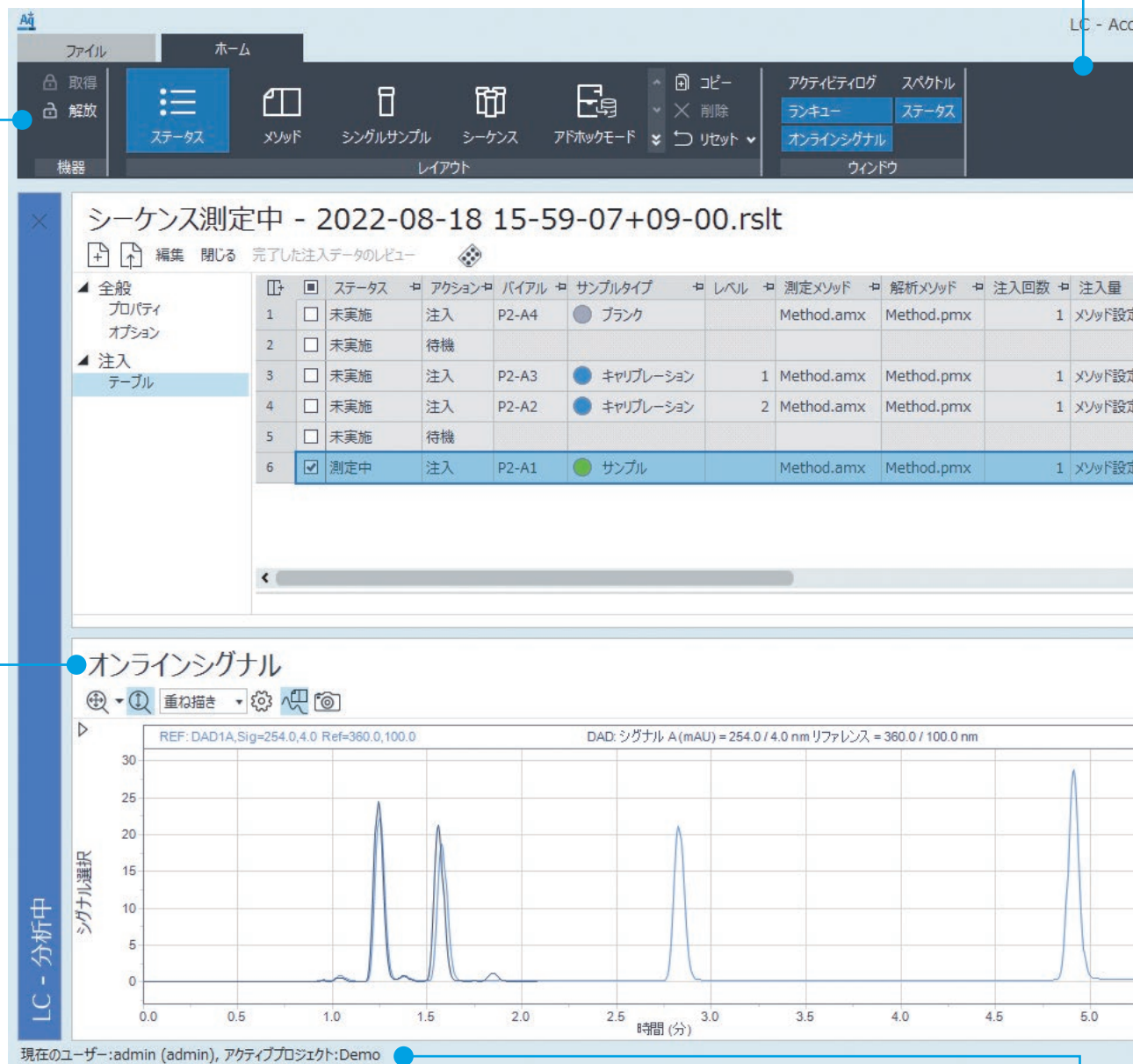
離れた場所に設置された分析装置のデータ比較やメソッド移行には USB メモリを使用せず、PC 画面上で操作が完了します。OpenLab CDS を起動し、特別な作業をせずに各分析装置のデータを読み込み、クロマトグラムの重ね描きや同じメソッドを使用した再解析を実施できます。

順番待ちを気にしない測定とデータ解析

どのクライアントからでも分析装置の制御と、あらゆるデータの解析が可能になるため、PC の占有による業務の滞りは発生しません。測定中にじっくりデータ解析を行うことができます。

直観的に操作できるユーザーインターフェース

お客様の声を元にして作られた OpenLab CDS のインターフェースは、どこに何があるのかが分かりやすく、必要な時に必要な情報だけを表示させるようになっています。必要最小限の情報と色彩による表示を用いることで、一目で分析の内容を把握することができます。



機器コントロールの取得と解放

機器へのダイレクトコントロールができるユーザーは 1 人に制限されるため、複数ユーザーが 1 つの機器にアクセスして、誤って設定が変更されることはありません。ダイレクトコントロールの終了後、機器コントロールを解放することで他のユーザーが使用できます。

オンラインシグナル

機器から得られるシグナルをオンラインで表示します。分析前のベースラインの状態や測定中のデータが確認できるだけでなく、以前に分析した標準品のクロマトグラムを測定中に重ね描きして、分析が順調に進んでいるか否かを簡単に判断できます。

ウィンドウ選択

画面に表示したいウィンドウを選択します。表示に必要なウィンドウのみに絞って画面レイアウトをカスタマイズできます。

ヘルプ & ラーニング

操作で困ったときに使用するヘルプ機能は、対話的なオンデマンドチュートリアルガイドになっています。特定のタスクやプロセスのみを手順に従って覚えられるので、短時間で必要な操作のみを確認できます。

機器ステータス

ダッシュボード

サンプラ 分析 EMF ✓
0.10 µL P2-A1

クォータリポンプ 分析 EMF ✓
21.5 78.4 0.350 mL/min
0.0 0.0 454.09 bar

カラムコンパートメント 分析 EMF ✓
40.00°C [40.0°C] 40.00°C [40.0°C]

DAD 分析 EMF ✓

分析 2.11 / 5.50 min 機器 分析 [1] [ON] [OFF]

ランキュー

ステータス	タイプ	キューに追加した時間	結果名	ユーザー	測定メソッド	詳細
■ 測定中	シーケンス	2022-08-18 15:59:07	2022-08-18 15-59-07	admin (admin)	Method.amx	詳細
■ 保留中	シーケンス	2022-08-18 15:59:31	2022-08-18 15-59-31	admin (admin)		詳細
■ 保留中	シーケンス	2022-08-18 15:59:41	2022-08-18 15-59-41	admin (admin)		詳細

アクティブ 履歴

シャットダウンメソッド ...
パス C:\CDSProjects\Demo\Results > ...

シャットダウンをキューに追加

ステータスバー

機器の状態、ログインしているユーザー、選択しているプロジェクト名を確認できます。

ランキュー

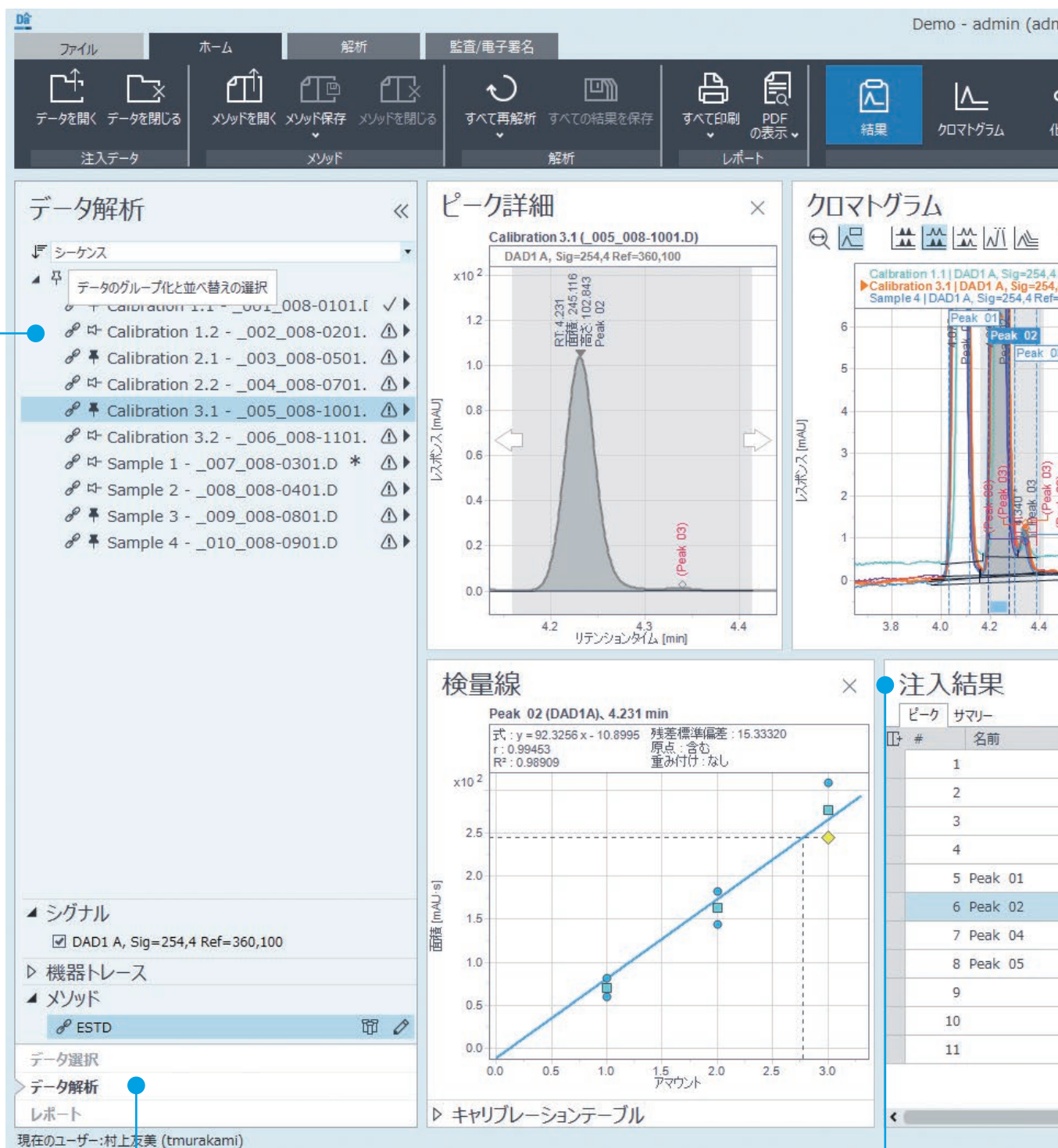
ランキュー画面では、測定の実行リストが表示されます。連続分析（シーケンス分析）を複数追加することができ、完了した分析や保留中の分析などを確認できます。分析の優先度に応じて、分析の順序を変更できる機能もあります。

機器ステータス

機器の詳細な状態を確認します。この画面から機器電源のオン / オフや各種パラメーターの設定を行います。

複雑なデータ解析を簡単に実行

お客様の声を元にして作られた OpenLab CDS のインターフェースは、設定の微調整、表示や比較方法の変更ができ、再解析をスムーズに行える機能を多く装備しています。



データ選択

ワンクリックで簡単にデータを選択できます。比較したいデータの選択も ボタンをクリックするだけでデータの重ね描きなどをスムーズに行えます。

画面変更

データ解析以外にも、レポートレイアウト変更画面、読み込みデータの選択画面へ素早くアクセスできます。

レイアウト変更

ウィンドウを自由に並べてレイアウトを作成。
お好みのレイアウトの保存も可能です。

ウィンドウ選択

ウィンドウから表示させたい画面だけを簡単に選べます。



結果の確認

積分結果を「注入結果」でリアルタイムに確認。分離度や S/N 比など表示項目の選択、CSV ファイルや PDF ファイルへのエクスポートも簡単に行えます。

3D データの可視化

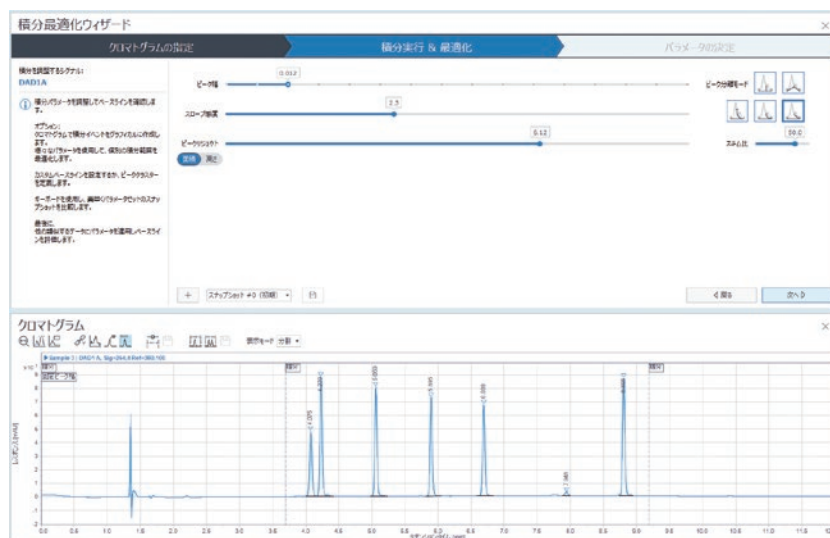
目的のサンプルに最適な検出波長やサンプルに含まれる不純物の有無を確認。等高線からクロマトグラムの抽出や重ね描きによる比較も可能です。

多彩な機能で再解析がスムーズに

OpenLab CDS に搭載された最先端のデータ解析ツール、Data Analysis により、大量データの高速処理と迅速なデータ確認が実現します。数千ものピークや成分の中から、不自然な結果を瞬時に突き止め、ワンクリックで素早く積分ができます。

積分最適化はウィザードで実施

積分条件の設定には、試行錯誤が必要です。OpenLab CDS では、積分範囲を指定するだけでおすすめの積分イベントと、それを用いたベースラインを表示します。表示されたおすすめ設定から微調整を行い、結果のプレビューも確認できるため、積分条件の検討時間を短縮することができます。



バブルチャートによる傾向の可視化

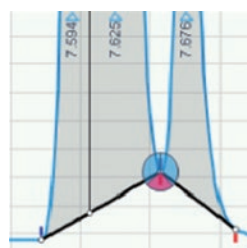
ルーチン分析でも、予想外の結果が出てしまった場合には、たくさんのクロマトグラムを参考にして原因を究明する必要があります。ピークが消えてしまったり、逆に増えていたり、リテンションタイムがずれていたり、積分値が不自然だった場合、ピークエクスプローラ機能ならすぐに判断することができます。

数字の羅列から異常な傾向を発見するには困難が伴いますが、ピークエクスプローラではバブルチャートで表現することができるため、一目で分析傾向を発見できるだけでなく、それが異常なのか自然現象なのかを判断する材料にもなります。



マニュアル積分でもベースラインは思いのまま

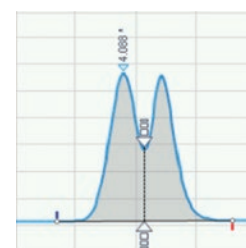
OpenLab CDS では、マウスカーソルをクロマトグラム上に合わせると、ソフトウェアが自動で判断して、適切なマニュアル積分処理が表示されます。どのようにベースラインを定義すればよいのか一瞬でわかるだけでなく、思い通りのベースラインを定義できます。食品、環境、天然物分析などでは、非常に便利な機能です。



ベースラインの修正



新規ベースラインの作成

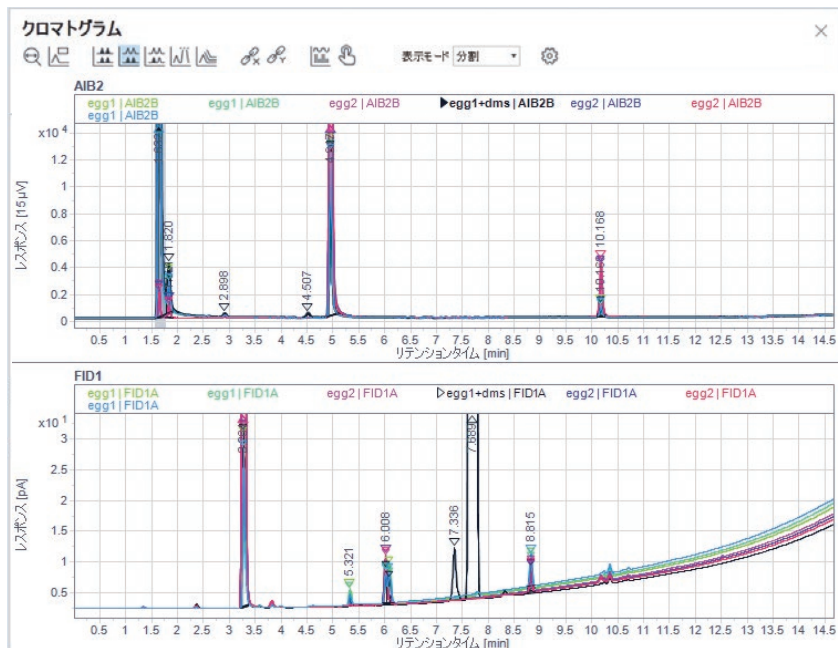


ピークの分割

自在なクロマトグラム表示

クロマトグラムを画面に表示させるモードとして、一般的な分割モードや重ね書きモードの他に、検出器ごと、サンプルごと、シグナル名ごと、データごとに表示させるモードも選べます。スプリッタやハートカットなどを用いて複数の検出器から信号を取り込んだ際、それぞれの検出器ごとにクロマトグラムを重ね書きすることが可能になります。

また、「ズーム概要ウィンドウ」アイコンをクリックすると、クロマトグラム全体の中でどの部分が拡大表示されているのかが一目でわかります。クロマトグラムを分割表示した時でも、この機能はそれぞれのクロマトグラムで独立に作用します。異なるメソッドや異なる検出器で、同じサンプルを分析して比較する時などに役立つ機能です。



1つのソフトウェアでMSも解析

従来では、クロマトグラムの解析とMSスペクトルの解析は別のソフトウェアで行うことがあり、両方の情報を扱う科学者にとっては2つのソフトウェアの操作法を覚えなければならませんでした。

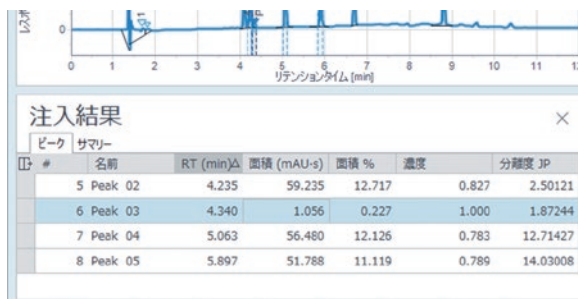
OpenLab CDSでは、GCとLCだけでなく、シングル四重極GC/MSとLC/MSのデータも解析できるため、操作法を覚えるべきソフトウェアの数が少なくなります。

また、クロマトグラムの情報とMSの情報を1つの画面に並べて表示できるため、データやサンプル同士の比較を今まで以上に多角的に行うことが可能になります。



再解析結果を画面上で確認 エクスポート機能で出力も簡単

再解析時にレポートへ出力せず、注入結果ウィンドウを用いれば、面積値やS/N比などの結果を表示できます。定量結果の小数点以下の桁数も選択可能です。エクスポート機能で結果のファイル形式を選択して任意の保存先を選択できるほか、クリップボードを使用することでExcelなどに結果を簡単にコピーすることができます。



OpenLab CDS 上の注入結果ウィンドウ

	A	B	C	D	E	F	G
1	#	名前	RT (min)	面積 (mAU)	面積 %	濃度	分離度 JP
2	5	Peak 02	4.235	59.235	12.717	0.827	2.50121
3	6	Peak 03	4.34	1.056	0.227	1	1.87244
4	7	Peak 04	5.063	56.48	12.126	0.783	12.71427
5	8	Peak 05	5.897	51.788	11.119	0.789	14.03008

注入結果をExcelにエクスポートした例

お好みのレポートを自由自在に作成

OpenLab CDS には、Excel などで作成するようなレポートを、そのままソフトウェア内で行うことができるインテリジェントレポート機能が標準で備わっています。簡単な操作で、各部署や依頼者の要望に沿ったレポートが作成できるだけでなく、手作業やデータ移行で発生する時間のロスやミスをなくすることが可能です。また、作成したレポートは、PDF、Excel、Word、テキスト形式で保存することができます。

分かりやすいレポート編集

インテリジェントレポートによるレポート作成は、直観的で分かりやすく、好きな場所に好きな情報を配置させることができます。その作成作業は、まるで PowerPoint でスライドを作成するような感覚で行えます。

各パーツごとにプロパティ設定があり、表示桁数、フォントサイズや色といった細かな設定ができます。レポートアイテムにも作成例となるパーツが数多く登録されており、編集の参考として活用できます。また、作成したレポートアイテムをオリジナルのレポートアイテムとして登録することで、オリジナルのレポートテンプレートを簡単に作成することができます。

プレビューデータ

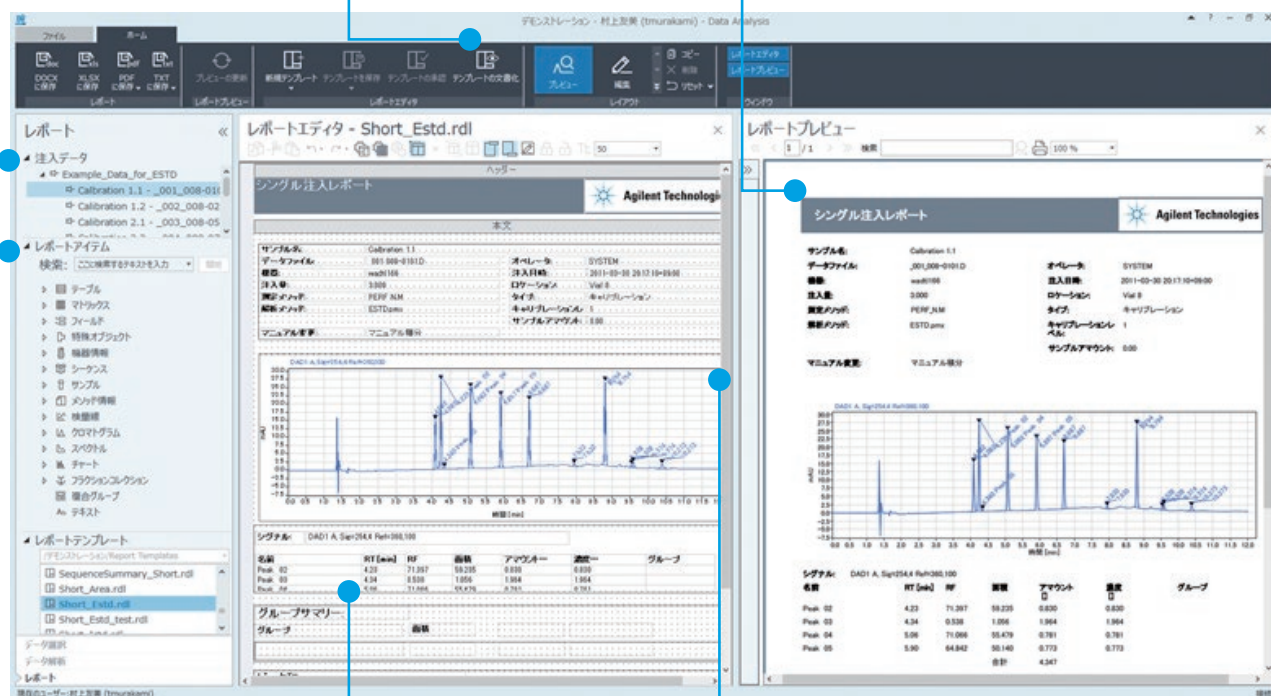
プレビューさせる生データを選択します。複数データの選択も可能です。

テンプレートを文書化

埋め込んだ計算式やフィルター情報を文書として出力できます。

編集時に完成イメージをプレビュー表示

編集中に実際のレポート完成形をプレビュー表示します。レポート編集画面とプレビュー画面を並べて表示させ、確認しながらレポート作成を行えます。



レポートアイテム

必要な項目をドラッグ & ドロップで簡単に追加することができます。

結果テーブル

面積や定量結果だけでなく、分離度や S/N 比なども追加できます。表示する桁数や合計値などの設定も追加可能です。

クロマトグラム

プロパティでスケール調整や色、注釈などカスタマイズ可能です。サイズの調整やリファレンスクロマトグラムとの重ね描きにも対応しています。

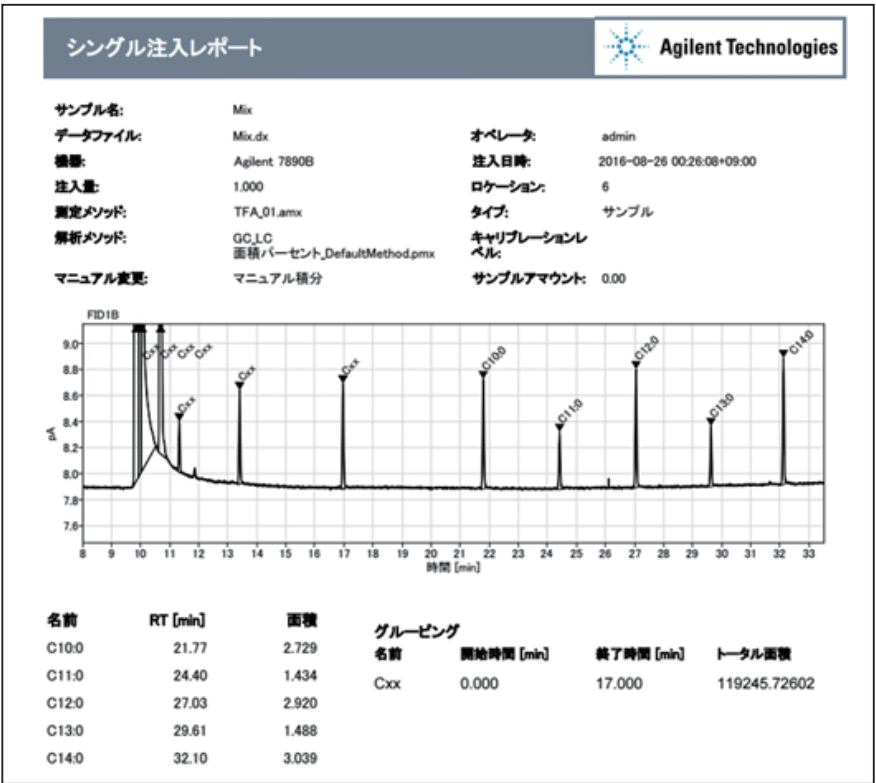
多彩な標準搭載レポート

OpenLab CDS では、標準搭載されたレポートテンプレートを数多く利用できます。

- 1つの結果を1枚のレポートに表示するレポート
 - 複数データをまとめたレポート
 - 検量線レポート
 - MS 結果の定量レポート
 - ライブラリーサーチ結果
 - メソッド情報
 - 監査証跡レポート
- などを搭載しています。

ESTD で定量した結果を出力するレポートテンプレート(右図)をそのまま使用することも、項目やサイズなどを編集してカスタマイズすることも可能です。

レポート出力例は、インテリジェントレポート集に掲載しています。(カタログ番号: 5994-5180JAJP)



合否判定を自動で可視化

専用の設定画面を使用するだけで、マクロを組み込んだようなレポートを作成できます。基準値から外れた結果に対して文字やセルの色を変更させることで、異常値を一目で判断できるレポートも作成可能です。必要に応じて、計算結果を元に「合格」「不合格」といった判定表示をレポートに追加することもできます。

[判定値]

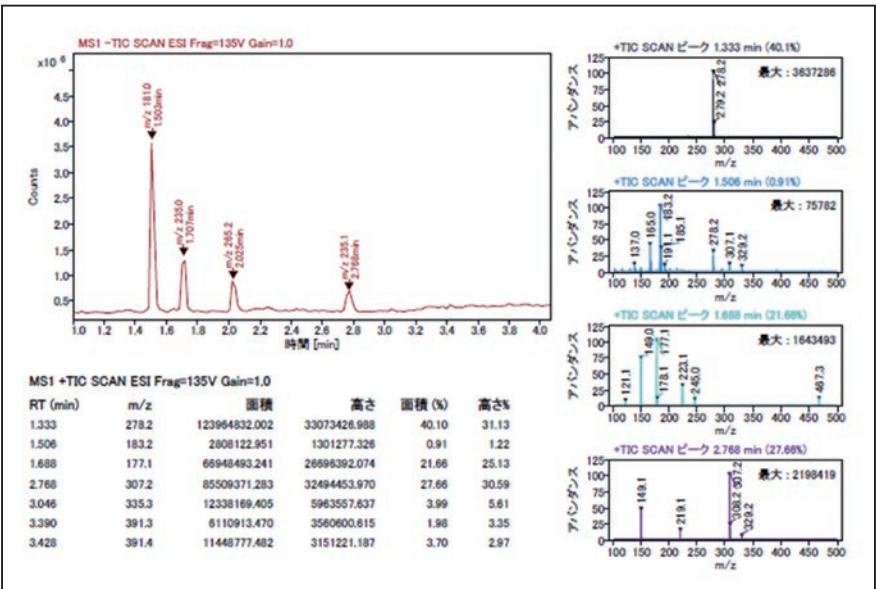
分離度 JP 2.4以上

化合物 名前	Peak 01	分離度 JP
Sample 1	4.222	2.49739
Sample 2	4.220	2.50456
Sample 3	4.230	2.41923
Sample 4	4.225	2.41815
Sample 5	4.227	2.31952
平均	192.0408	
標準偏差	84.9625	0.07508
RSD	44.2419	3.08736

MS スペクトルにも対応

このインテリジェントレポートでは、レポート上に GC/MS と LC/MS のスペクトルと TIC を掲載することができます。この時のスペクトルは解析条件と連動し、バックグラウンド補正の有無に応じた結果が反映されます。

また、NIST のライブラリ検索結果やライブラリの参照スペクトル、純度計算結果もレポートに掲載することもできます。



データインテグリティ対策

OpenLab CDS は、ALCOA+ や ISO/IEC17025 のデータインテグリティ要件に対応します

信頼できるラボの結果は、ラボが属する業界やラボの機能に関係なく、データの品質と信頼性に依存します。堅実なデータ整合性を実現するためには、データ管理のためのラボソフトウェアが必要不可欠です。OpenLab CDS は、FDA 21 CFR Part 11、EU Annex 11、GAMP5、ISO/IEC17025 などのコンプライアンスガイドラインに従う必要があるラボに対し、データを安全に取得、再解析、レポート、保存するための技術的制御を提供します。



積極的で堅牢なセキュリティ

生データとメタデータを結果セットで管理：データは、測定や解析時に、即時に安全なデータベースに自動保存されます。結果セットはバージョン管理され、結果の復元が可能になっています。

バックアップは安全な場所に自動保存：バックアップは、外部メディアやクラウドなど、安全な場所に自動保存されます。ベリフィケーション機能も搭載しています。

迅速な検索：サンプル名やオペレータなどを自動的に抽出してインデックス化することで、効率よく検索できます。



データベースを用いた結果の保護、
結果のバージョン管理、インデックス検索



監査証跡をオンラインレビューしてペーパーレスを推進

どこでも通用する監査証跡：詳細な監査証跡の記録を残します。一度有効にした監査証跡を無効にすることはできません。監査証跡は、データなどのファイルに埋め込まれ、削除や改ざんすることはできません。

監査証跡レビューを画面上で記録：監査証跡を確認したレビュー記録を、ワンクリックで監査証跡内に残せます。確認のための印刷が不要になり、ペーパーレス運用を推進します。

監査証跡

監査証跡 VirtualDAD_20160115 111646 - VirtualDAD_20160115 111646.dx (エントリ数: 7)

検索 開始日 2016/01/15 21 終了日 2016/01/15 21 フィルタ デフォルト監査 +

2016/01/15 検索 (1 エントリ)

スター-ス	ユーザー名	日時 (GMT+09:00)	確認	ホスト名	確認済み	理由	カテゴリ
	admin	2016/01/15 11:56	結果を保存しました。	WIN-QQ8803			保存

2016/01/15 再配布 (2 エントリ)

スター-ス	ユーザー名	日時 (GMT+09:00)	確認	ホスト名	確認済み	理由	カテゴリ
	admin	2016/01/15 11:55	データ再配布成功 ノット / Project01/Results/Result03.rpt/VQAD_D	WIN-QQ8803			再配布

	admin	2016/01/15 11:55	データ再配布成功 ノット / Project01/Results/Result03.rpt/VQAD_D	WIN-QQ8803			再配布
--	-------	------------------	--	------------	--	--	-----

2016/01/15 メタデータ管理 (1 エントリ)

スター-ス	ユーザー名	日時 (GMT+09:00)	確認	ホスト名	確認済み	理由	カテゴリ
	admin	2016/01/15 11:55	データセット VQAD_D_Meth01 を更新しました	WIN-QQ8803			メタデータ更新

	admin	2016/01/15 11:55	データセット VQAD_D_Meth01 を更新しました	WIN-QQ8803			メタデータ更新
--	-------	------------------	------------------------------	------------	--	--	---------

2016/01/15 シーケンス (3 エントリ)

スター-ス	ユーザー名	日時 (GMT+09:00)	確認	ホスト名	確認済み	理由	カテゴリ
	admin	2016/01/15 11:18	注入 1 で測定が完了	WIN-QQ8803			シーケンス

	admin	2016/01/15 11:16	メソッド 1 (バージョン / Project01/Results/Result01.rpt/VQAD_AcqMet	WIN-QQ8803			シーケンス
--	-------	------------------	--	------------	--	--	-------

	admin	2016/01/15 11:16	シーケンス - Result01 で測定が開始	WIN-QQ8803			シーケンス
--	-------	------------------	-------------------------	------------	--	--	-------

詳細な監査証跡の記録

OpenLab CDS の画面上でワンクリックで監査証跡のレビューを記録

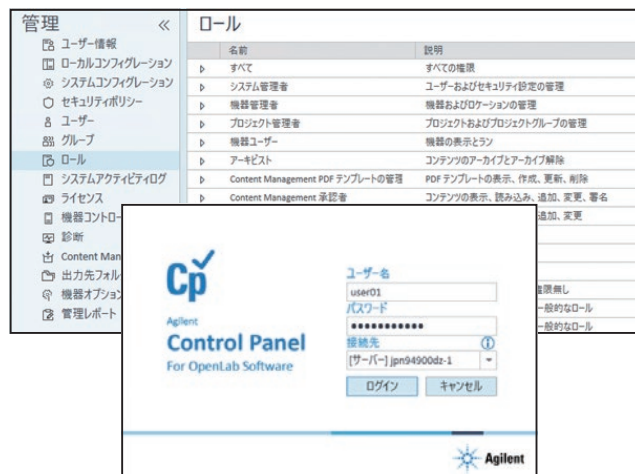




正当なアクセス権を付与

アクセス制御：システムへアクセスするには、ユーザーID とパスワードが要求されます。不正アクセスが検出された場合には、ログに記録が残ります。

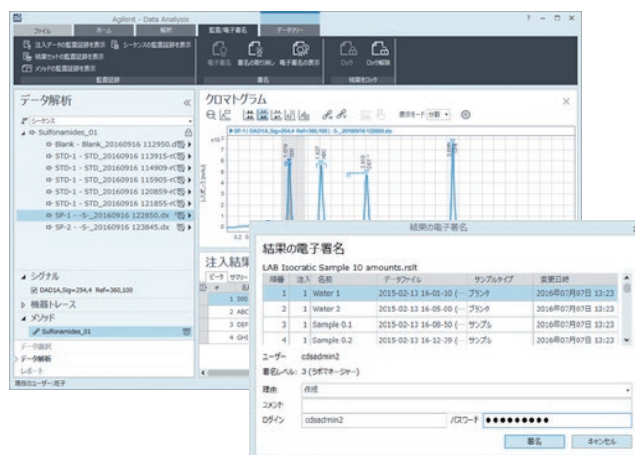
柔軟なロールの適用：ユーザーごとの役割に応じて、制限を加えたロールを設定できます。ロールは、デフォルトの設定から必要に応じてカスタマイズすることで、オリジナルのロールセットを作成することも可能です。



署名を永久に確実にキープ

電子署名：電子署名は永久的に記録にリンクされ、結果に埋め込まれます。電子署名を実施するには、ユーザーID、パスワード、署名の理由が要求されます。

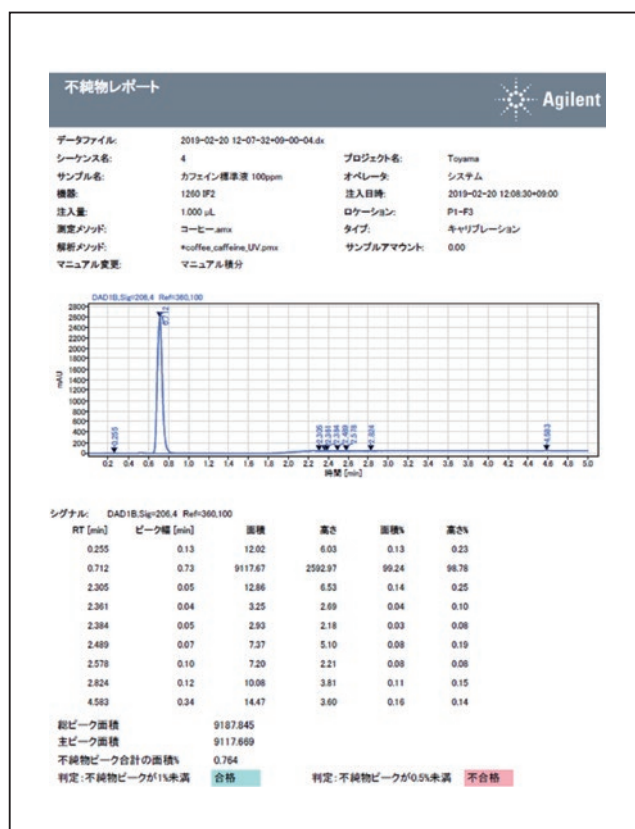
多段階承認：承認者が複数の場合、署名の順序に確実に従うよう強制されます。承認作業をペーパーレス化し、文書管理におけるリスクとコストが軽減されます。



レポートに関連情報を表示 二次計算機能で手入力を削減

関連情報を表示：生データとメタデータ、署名情報など関連情報をレポートに追加できます。レポートの結果をOpenLab CDS上で再現が可能になります。

二次計算機能：関数を用いた二次計算を適用できるため、数値をエクセルへ転記する手間を削減できます。編集過程は監査証跡に記録され、レポートを文書化して出力することも可能です。



OpenLab ソフトウェアで開かれる未来

ラボ管理を効率化する OpenLab ソフトウェア製品群により、ビジネスの価値を高めるために、データを収集、解析、共有できます。また、アジレントと知識豊富なプロフェッショナルサービスコンサルタントが、あらゆる段階でお客様をサポートします。そのため、この包括的なソフトウェア製品群のメリットを導入直後から実感していただくことができます。

データ管理 - OpenLab ECM XT

- 時間や場所に関係なく、データと情報にアクセス可能
- 実験の開始から終了までファイルを保護
- 規制遵守の業務をサポートし、知的財産を管理
- 紙の使用量を削減
- Web UI からアクセス



ラボ情報管理システム - SLIMS

- LIMS、ELN、LES の総合システム
- 試験指示や管理、検体の派生経路の把握、試薬管理、設備管理や成績書発行が可能
- 上位システムの連携、接続機器との連携
- 試験室や作業進捗の可視化
- データインテグリティ対応
- Web UI からアクセス



www.agilent.co.jp/chem/openlab

カスタムコンタクトセンタ

0120-477-111

email_japan@agilent.com

本資料掲載の製品は、すべて研究用です。本資料に記載の情報、説明、製品仕様等は予告なしに変更されることがあります。アジレントは、本文所に誤りが発見された場合、また、本文書の使用により付随的または間接的に生じる損害について一切免責とさせていただきます。