

今日のクロマトグラフィーラボに最適な設計

Agilent OpenLab CDS 2





ラボの生産性向上を実現する次世代のソフトウェア

アジレントは、装置だけでなくソフトウェアのイノベーションにも取り組んでいます。アジレントの数十年にわたる実績と皆様 から寄せられたご意見とを組み合わせることにより、クロマトグラフィーラボでの分析を速く、精度よく、簡単に行うことがで きます。



この結果誕生したのが、次世代のソフトウェア OpenLab CDS 2 です。

Agilent OpenLab CDS 2 で実現できること:

- 1. ラボのコストの削減 管理、インフラストラクチャ、トレーニングのコストを削減
- 2. 生産性の向上 無駄のない分析ワークフローにより、すばやく結果に到達
- 3. 科学的課題への対応 分析データを取得して有用な情報に変換
- 4. データインテグリティソリューションの強化 データの一貫性、正確性、セキュリティを確保
- 5. 成長に応じた拡張 ワークステーションからクライアントサーバー構成まで

40 年以上にわたる CDS の技術革新

1970 年代 _____ 1990 年代 ____

を開発

_____ 2000 年代 _____ 2010 年代 ___

アジレントがミニコンピュータ アジレントが Windows グラフィ アジレントの CDS がネットワー 使いやすさと生産性に特化して ベースの CDS ソフトウェアを導入 カルユーザーインタフェースを ク接続されたクライアントサー 設計された次世代 CDS が登場 採用した初の PC ベースの CDS バーシステムにまで拡張され、 複数の機器を使用するマルチベ ンダー環境に対応

ラボのコストの削減



ラボは生産性向上とコスト削減の両立を強く迫られています。

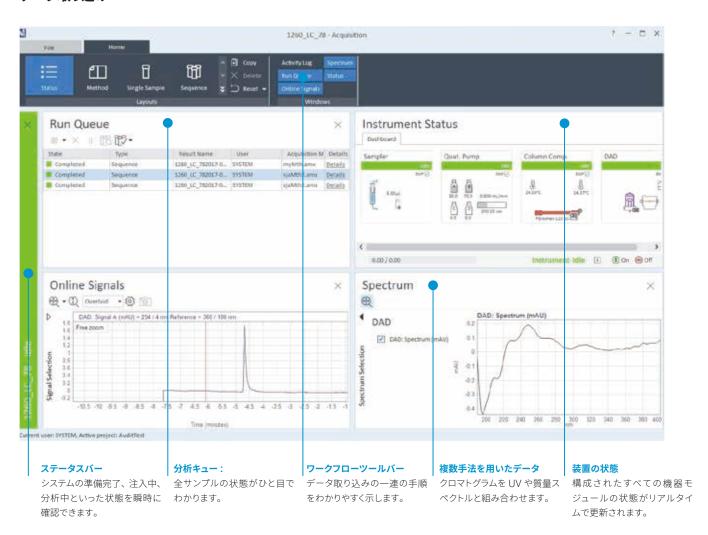
OpenLab CDS 2 はこの課題を念頭に設計されました。

分析ラボのための統合ソフトウェアソリューション

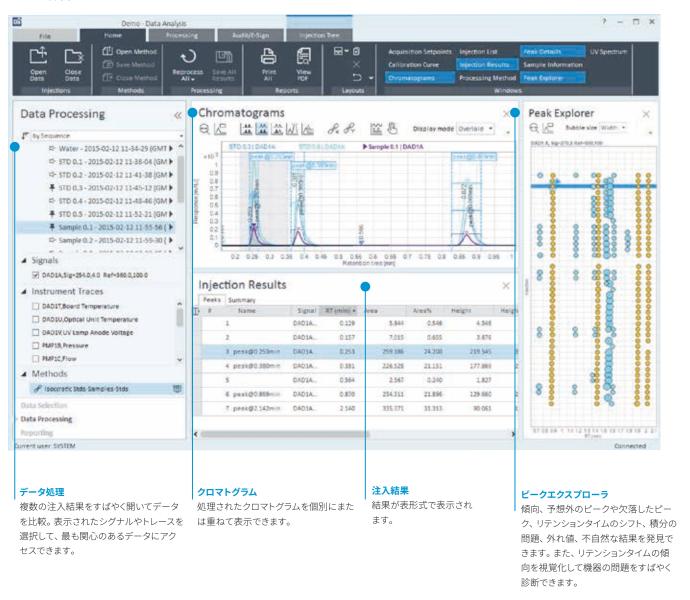
OpenLab CDS 2 により、ラボの標準的な作業手順を簡素化し、ミスを排除してより短時間で結果を得られるようになります。 LC、GC、シングル四重極 MS 機器のすべてを、同一の強力なツールセットで制御できるため、複数のソフトウェアの操作を覚える必要がありません。

さらに、時間のかかるユーザーごとの設定が簡略化され、現在必要な作業のみが表示されます。トレーニングの時間とコストを 削減するためのオンデマンドの学習ツールも含まれています。

データ取り込み



データ解析



「ラボでは新しいスタッフの参加や入れ替わりがあるため、 誰でも機器をすぐに操作できるような、直感的に使用できる ソフトウェアがあると助かります。」

OpenLab CDS 2 への移行による迅速な テクノロジーリフレッシュ

アジレントは、Agilent OpenLab CDS 2 へのアップグレード に伴うコストとダウンタイムを低減するためのさまざまなサービスやツールを提供しています。

プロセスの自動化: Agilent ChemStation ソフトウェア、OpenLab CDS ChemStation Edition、またはOpenLab CDS EZChrom Editionを使用しているラボの場合、OpenLab CDS 2 用の自動マイグレーションツールセットを活用すれば、手作業での転記によるミスを排除して電子的な方法でメソッドとデータを最大限保持し、再利用することが可能になります。システム構成、ユーザー、役割、権限、機器のエクスポートとインポートを自動ですばやく実行できます。

充実した移行サポート: アジレントは最新のソフトウェアや機器への移行に役立つ包括的なサービスを提供しており、お客様のご相談に応じてメソッド、ワークフロー、データを新しいプラットフォームに移行する際の計画やプロジェクト管理をサポートします。また、スタッフが新しいソフトウェアや機器を最大限に活用できるようにするためのトレーニングも、お客様のご都合に合わせて提供いたします。

所有コストの管理

OpenLab CDS 2 を最新の状態に保ち、最新機能やバグ修正を適用したいとお考えでしょうか。1 年ごとのソフトウェアサブスクリプションをご利用いただくと、3 年ごとに個別に更新を行う場合よりも 46 % 少ないコストでソフトウェアが自動更新されます。

また、OpenLab CDS 2 への移行で得られるものはソフトウェアだけではありません。オンライン教育センターである Agilent University では、ラボで使用するすべての機器の性能を最大限に引き出すためのカリキュラムが提供され、随時追加されています。アジレントコミュニティーでは、他のお客様とオンラインで情報交換を行い、製品の使用体験やヒント、レポートテンプレートなどを共有できます。さらに、アジレントのエキスパートで構成されるグローバルネットワークからサポートを受け、現場準備、据付、取扱説明、個別トレーニングなどのサービスを通じて、投資から最大限の価値を引き出すことができます。アジレントコミュニティーには、community. agilent.com からご参加ください。

ソフトウェアを最大限に活用

OpenLab CDS 2 の新しいヘルプ & ラーニングシステムにより、習熟度を問わずすべてのユーザーが、作業に必要な情報を簡単に入手できます。

はじめに:機器固有の学習モジュールが用意されており、初心者がガイド付きのシミュレーションを通じて基本的な操作方法をすばやく学べます。

操作手順: OpenLab CDS 2 での作業に関する詳細な情報が提供されます。ソフトウェアとハードウェアに関する多数のトピックを含む膨大なライブラリを参照することも、検索機能を使って必要な情報を即座に入手することもできます。

システムセットアップ: 管理者に向けた設定作業とメンテナンス作業のガイドが提供されます。

用語集: OpenLab CDS 2 の多数の用語とその定義を参照できます。

お困りの場合は、F1 を押してください。適切なヘルプ&ラーニングセクションに自動的に移動します。

生産性の向上



サンプル自動化: ワークフローを簡素化してミスを最小限に

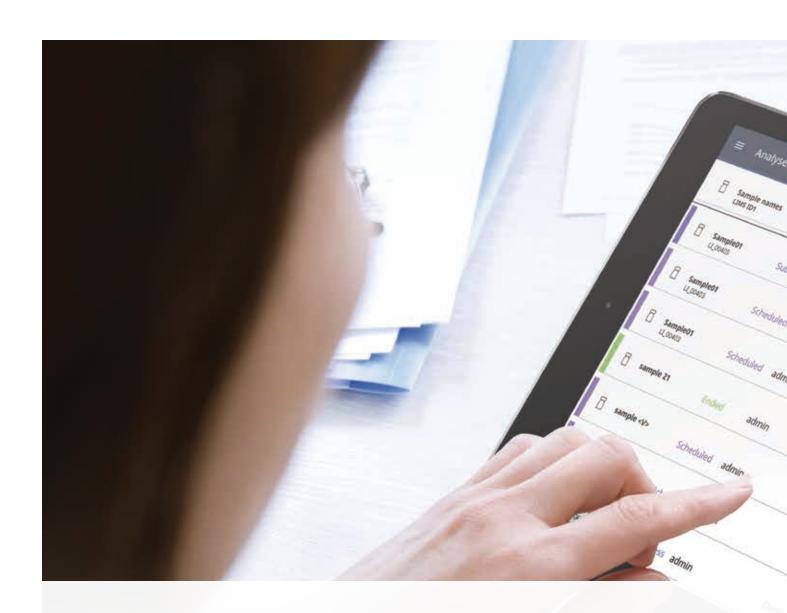
OpenLab CDS 2 では、単一のサンプルの分析でも、ブランク、標準溶液、未知化合物を含む複雑なシーケンスの分析でも、高品質な結果を効率的に得られます。

単一サンプルの分析画面では、個別のサンプルをすばやく簡単に分析できます。メソッド、注入、サンプルに関する基本情報を入力し、緑色の大きなランキーを押すだけで分析が開始されます。

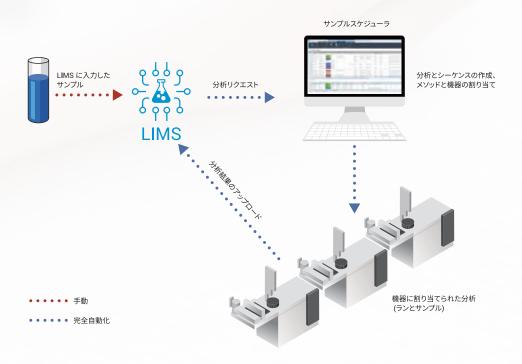
シーケンステンプレートでは、機器の SOP に準拠したシーケンスをすばやく簡単に作成できます。サンプルのリストを入力してテンプレートを適用するだけで、あらかじめ作成された構造パターンを使用してシーケンスが即座に作成されます。

シーケンス分析機能	説明
シーケンステンプレートの保存/ロード	時間のかかる手入力なしでシーケンス構造を作成
同じデータの自動入力	表の複数の列に同じ情報をすばやく入力
柔軟な分析キュー	分析するサンプルを簡単に確認し、重要度の高いサンプルをキューに追加
ブラケット	未知化合物の前後に標準溶液を用いて結果を算出
CSV ファイルのインポート	Excel または LIMS から生成されたサンプル情報をドラッグ&ドロップ
分析前のエラーチェック	分析の送信前に必要なすべてのフィールドが正しく指定されていることを確認
システム適合性	サンプリング前に、機器が目的に適合しているかどうかを確認





サンプルスケジューラ: LIMS との通信





複数のユーザーまたは複数の機器を使用するラボの場合、アジレントの **OpenLab 用サンプルスケジューラ**が、OpenLab CDS 2 と LIMS (Laboratory Information Management System) の間の通信ハブとして機能します。まず、サンプルスケジューラが LIMS から受け取ったすべてのワークリストを 1 つの表にまとめます。LIMS は、サンプルの取り込みと分析に必要なすべての情報を、自動で OpenLab CDS 2 に直接転送します。これにより、転記ミスが回避できます。サンプルスケジューラは、サンプルを正しく割り当てたうえですべての結果を LIMS に自動で返します。

また、サンプルスケジューラはラボのダッシュボードとしても機能します。ラボマネージャと技術者は、スケジュールされたサンプルがキュー内のどこにあるかを即座に確認し、サンプルの優先順位の変更や新しいサンプルのスケジュールを行い、分析の完了予定時間を把握できます。

サンプルスケジューラの詳細については、次のページをご覧ください。

www.agilent.com/chem/sample-scheduler-for-OpenLab



フェールオーバーモードによる事業継続性の確保

コンピュータやネットワークの予期しない問題は、最悪のタイミングで発生するものです。大量の処理を行う ラボにおいては稼働時間が重要な要件となるため、クロマトグラフィーデータシステムと機器には、データの 損失を最小限に抑えながらこうした状況に対処する能力が必要です。さらに、機器では現在のキューにある サンプルの分析を継続できることが理想です。

ネットワーク環境で OpenLab CDS 2 のフェールオーバー機能を構成すればこれを実現できます。

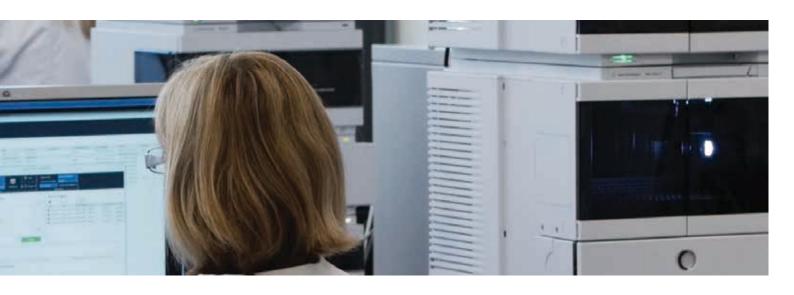
ネットワークまたはハードウェアに問題が生じると、Agilent Instrument Controllers (AIC) がスケジュール済みのサンプルの取り込みと分析を継続し、データを AIC のローカルの場所に保存します。復旧に時間がかかり、分析が必要なサンプルがさらにある場合も、問題はありません。AIC をワークステーションとして使用し、新しいサンプルのスケジュールと分析を実行できます。サーバー接続が復旧すると、データが中央のストレージに再びマッピングされます。電子記録はすべて元の状態で維持されます。

包括的な機器コントロール

OpenLab CDS 2 は、GC、LC、GC/MS シングル四重極、LC/MS シングル四重極、SFC などのアジレントの主要システムに対する、最も包括的な機器コントロールとデータ取り込み機能を備えています。アジレントは、各機器クラス向けに開発されたネイティブの機器ドライバを OpenLab CDS 2 に直接統合し、可能な限り最高の信頼性を実現するため、数千時間にわたって新しい機器の試運転を実施しました。

また、OpenLab CDS 2 では他社製機器のサポートを拡大し、ラボ全体を 1 つのソフトウェアシステムで管理するという目標を実現しつつあります。

さらにアジレントは、機器ベンダーと提携して、各社のシステムのドライバを OpenLab CDS 2 に統合する取り組みも進めています。OpenLab CDS 2 でサポートされている他社製機器については、www.agilent.com/chem/OpenLabcds をご覧ください。

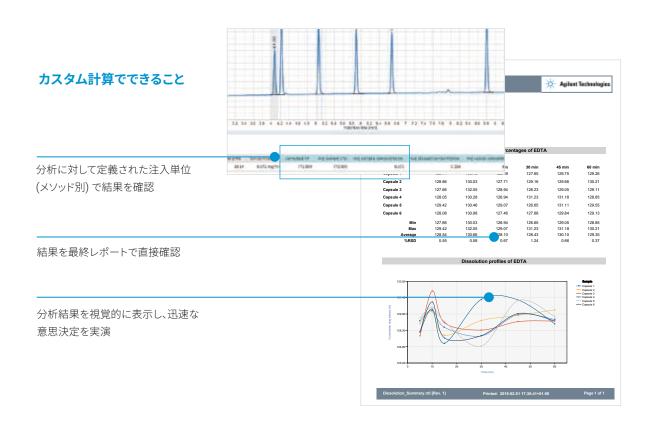


カスタム計算によって複数のサンプルを迅速に確認

通常、分析者は収集したデータの品質と精度を確認する必要があります。OpenLab CDS 2 には、ピーク別やスペクトル別の結果、または多数の注入結果の集計を表示できるセレクションツールがあり、この確認作業がスピードアップします。

新しい**カスタム計算機能**を利用することで、基本の結果情報に関数を組み込むことができます。これらの関数を用いて、アプリケーション中心の結果 (NGA/RGA や溶出試験など) や、問題のある注入を明らかにする品質管理の統計を生成できます。

カスタム計算を使用すると、システムにより生成された結果に対する数学的関数に基づいて新しい値を算出できます。関数はピーク別に実行することも、複数回の注入全体に対して実行することもでき、複雑な多変量解析にも対応します。カスタム計算を解析メソッドに組み込むための操作は、マウスを1回クリックするだけです。



科学的課題への対応



OpenLab CDS 2 は、複雑なクロマトグラムから新たな知見を引き出し、結果をわかりやすく報告するためのデータ解析、レポート、管理ツールを提供します。

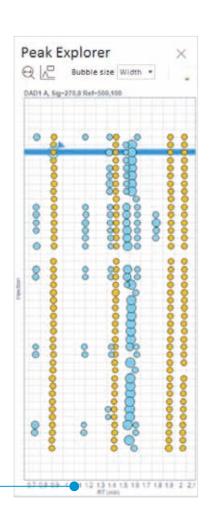
強力なピーク積分、調査、処理

複雑な混合物の分析では、高精度なクロマトグラフィーを使用しても、毎回すべての成分を完全に分離することは困難です。OpenLab CDS 2 は、こうした混合物の分離、識別、処理に役立つ組み込みの数学的なグラフ表示アルゴリズムを搭載しています。

また、複数のインテグレータから最適なものを選択し、最初にクロマトグラムが正しく統合されるように設定できます。これにより、OpenLab ChemStation Edition または EZChrom Edition を使用している場合に、過去に生成した結果と最新の結果の一貫性が確保されます。

マニュアル積分が必要なピークが現れることもありますが、OpenLab CDS 2 のコンテキストに応じたマニュアル積分機能により、このようなピークにも簡単に対処できます。目的の部分にカーソルを移動すると、適切な積分ツールが自動的に有効になります。複数の積分ツールが必要な場合は、積分ホイールに各ツールが表示され、必要なツールを簡単に選択できます。

ベースラインを修正したい場合は、開始点または終了点を移動します。見落としたピークの積分を行う場合は、ベースラインを追加します。操作を実行するたびに結果が自動的に生成され、表示されます。さらに、より短時間で結果を得るために、マニュアル積分イベントをデータ解析メソッドに組み込むこともできます。



ピークエクスプローラ: 大量のサンプルセットの調査と 視覚化を可能にする新しいツール

ピークエクスプローラは、複雑なデータセットを多次元のバブルチャート に表示します。これにより、傾向、予想外のピークや欠落したピーク、リテンションタイムのシフト、積分の問題、外れ値、不自然な結果の発見が 容易になります。

ピークエクスプローラを使用すると、複数回の注入における 1 つの化合物のリテンションタイムの傾向を視覚化し、機器の問題をすばやく診断できます。LC システムにおいて、溶出が早くなることは溶媒の混合に問題があることを示す場合があり、溶出が遅くなることはカラム平衡化が正しく行われていないことを示す場合があります。また、溶出時間が不規則な場合はポンプ内に空気が含まれている可能性があります。

データの魅力的な表現

OpenLab CDS 2 は汎用的なレポートエンジンを搭載しており、すぐに使用できる 20 以上のテンプレートによって標準レポートが生成されます。テンプレートはラボの要件に合わせて簡単に編集できます。また、カスタムレポートを生成して一般的な文書作成形式にエクスポートすることもできます。

また、OpenLab CDS 2 はこれまでにない柔軟な運用が可能で、1 回の注入に関するレポートや数百のサンプルを含むシーケンスのサマリレポートなど、多様なレポートの作成に対応します。さらにカスタム計算を組み込むと、システム適合性、不純物のプロファイリング、英熱量分析、成分均一性などの特定分野向けのレポートを作成することが可能になります。

レポートテンプレートエディタでは、使い慣れたドラッグ&ドロップ操作によって必要なレポートの要素を追加できます。追加できる要素には、会社ロゴ、サンプル情報、機器パラメータ、注入結果、カスタム計算などがあります。

OpenLab CDS 2 のレポートは、複数のファイル形式 (txt、csv、pdf、MS Word、MS Excel など) にエクスポートできます。さらに、レポートを LIMS または OpenLab ECM システムにインポートしたり、他の資料と統合して専門誌で発表するための文書を作成したりすることもできます。

オプションのアプリケーションソフトウェア

OpenLab CDS 2 は、アプリケーション固有の機能を簡単に追加できる設計になっています。 現在使用できる機能は次のとおりです。

ゲル浸透クロマトグラフィー	ゲル浸透クロマトグラフィーの計算とレポートを可能にするデータ解析アドオン
同定比較	さまざまな未知化合物と標準における自動ピーク同定と面積比較により、特に食品と香料のアプリケーションにおいて QC プロセスを簡素化
天然ガス分析とリファイナリガス分析	クロマトグラフィーデータを既存の SIMDIS ソフトウェアにエクスポート
疑似蒸留	精製前に炭化水素留分の沸点分布を求めるためのデータ解析アドオン
サンプルスケジューラ	LIMS との通信ハブ、およびラボのダッシュボードとして機能



データインテグリティ ソリューションの強化



アジレントは数十年にわたり、国際的なデータインテグリティ規制への準拠を支援してきました。この経験を活かし、OpenLab CDS 2 には技術管理機能が豊富に備わっており、21 CFR Part 11、EU Annex 11、その他規則の主要な要件を満たすためのサポートを提供します。こうした技術管理機能により、電子記録のセキュリティ保護、作業の責任の所在の明確化、電子署名など、完全なデータインテグリティのためにラボで必要となる手順コントロールの数が削減されます。

ユーザーとデータセキュリティ: 適切な者が適切な 情報に対して適切なアクセス権を持つ

OpenLab CDS 2 では、デフォルトで 7 つのラボロールが選択肢として提供されます。各ロールにはそれぞれ異なるアクセスレベルと能力が割り当てられています。また、新しいロールを作成し、1 つのロールに 50 以上のシステム属性を割り当てることもできます。

データセキュリティを確保するため、OpenLab CDS 2 は、取り込みおよび分析メソッド、取り込んだデータ、分析結果、監査証跡、電子署名などの特定の記録を重要データとして識別し、自動的にチェックサムを実行することにより、無効な記録や変更された記録を検出します。改ざんされた記録が検出されるとエラーメッセージが表示され、これらのファイルはロックした状態で安全に保存されます。

作業の責任の所在を包括的に明確化

OpenLab CDS 2 では監査証跡が自動的に作成され、スタッフや査察官はこれを利用して電子記録の履歴を再構成することができます。記録される情報には、アクションの責任者、発生内容、発生日時、影響を受けた記録、記録が変更された理由があります。

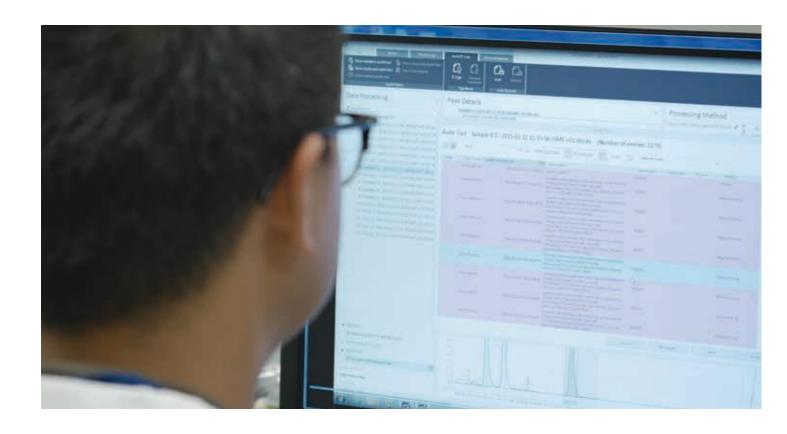
ビルトインのシステム適合性テスト

OpenLab CDS 2 には、ASTM および各国の薬局方 (米国、EU、日本) の規格に基づく包括的なシステム適合性テストを実行するために必要なツールがすべて含まれています。

- 機器テスト: 検出器感度、リテンションタイム精度、 ピーク面積精度
- メソッドテスト: リテンションタイムと量の精度、 メソッド感度、堅牢性、運用上の日々の変動
- システムテスト: 量の精度、特定の 2 つのピーク間の 分離能、ピークテーリング

システム適合性テストに使用するサンプルは、サンプルタイプに「システム適合性」のタグをつけることにより、既存のシーケンスに簡単に統合できます。

パフォーマンス & ノイズ、拡張パフォーマンスなどの標準のシステム適合性レポートに加え、OpenLab CDS 2 には、複数の分析の結果を照合、評価できるレポートテンプレートが用意されています。これらの計算はすべて、OpenLab のヘルプ & ラーニングシステムで文書として提供されています。



高度な監査証跡レビュー

規制機関は近年、ラボでの監査証跡レビューの実施と文書化の方法を変更しました。例えば、2010年に採用されたEU Annex 11の要件では、監査証跡の記録に加え、それらの監査証跡のレビューを実施してレビュー結果を文書化するよう規定されています。さらに、FDAは先ごろ、監査証跡レビューはレビュー対象の電子記録というコンテキストにおいて、関連するメタデータを含めて実施する必要があるとの見解を発表しました。すなわち、シーケンスとその結果をレビューするときに、対応する監査証跡を同時にレビューする必要があるということです。

OpenLab CDS 2 は、こうした新たな要件に対応するために更新されました。新機能として、監査証跡レビューの確認と文書化を電子記録の一部として含めることが可能になりました。手作業での印刷と署名は不要です。

また、全文検索を実行できるほか、データの再解析やマニュアル積分により発生する監査証跡エントリなど、監査カテゴリ別の検索も実行できるため、必要な監査証跡情報を簡単に絞り込んで検索できます。

規制に適合した電子署名

OpenLab CDS 2 により、システム内のすべての電子署名について次のことが可能になります。

- 取り消しできない方法で、対応する記録に関連付ける
- 署名者の氏名、署名日時、署名の理由を表示する
- 署名された記録を電子的に表示、または印刷するたび に署名を表記する

成長に応じた拡張

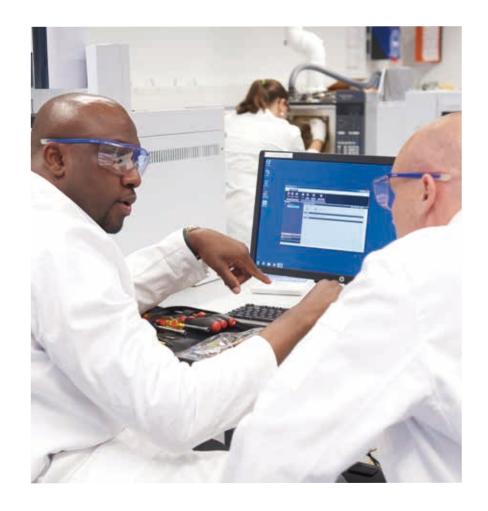


OpenLab CDS 2 は、数台の機器のみを使用するラボから最大 100 台のシステムを備えたラボまで、必要に応じて拡張できます。

ワークステーション構成: 小規模なラボに適したシンプルな構成

OpenLab CDS 2 のワークステーション構成は、機器台数が 5 台以下のラボに適しています。1 台の PC を、システム機能を含めて最大 4 台の機器を制御できるように構成できます。データベースの作成は必要ありません。

規制への対応が必要な小規模なラボの場合は、OpenLab CDS 2 ワークステーション Plus を利用できます。ワークステーション Plus では、保護されていないファイルベース のストレージがローカルの安全なデータベースストレージとなり、規制への対応に必要な電子記録を安全に保管するシステムを構築できます。



ネットワーク構成: 大企業に最適な構成

ラボの規模が拡大して機器が 5 台以上に増えた場合は、OpenLab CDS 2 のネットワーク構成を使用することで、管理を一元化し、ラボの運営全般を大幅に改善できます。ユーザーの管理と機器の設定をワークステーションごとにではなく 1 つの場所からシステム全体に対して実行できるほか、データとメソッドの一元管理によりコラボレーションが促進され、安全なシステムバックアップが可能になります。システムの大部分が既に稼働しているため、新しいユーザーや機器の追加も簡単な手順で完了します。また、ラボ全体の機器の状態を単一の画面で確認できます。

ネットワーク接続環境を構築するには、2 つのソフトウェアコンポーネントが追加で必要になります。Agilent Instrument Controller (AIC) とサーバーソフトウェアです。

AIC は、システムに含まれる機器のデータの制御、取得、解析および再解析、レポートに使用されます。この AIC は OpenLab CDS 2 に合わせて再設計されており、設置面積約900 cm² 以下で最大 6 台の機器を制御できます。ネットワークやサーバーの障害が発生した場合は、AIC を即座に変換し、フル機能を備えた一時的なワークステーションとして使用できます。

サーバーソフトウェアは、生データ、処理済みデータ、メソッドファイル、シーケンスファイル、システム構成、監査証跡など、システム内の必要なすべての電子記録を一元的に保管、管理します。標準的な IT 環境にスムーズに統合できるよう、サーバーソフトウェアでは業界標準のネットワークプロトコルとデータストレージ (Oracle、SQL Server、PostgreSQL) を使用しています。

ネットワーク接続構成により 追加される機能

システムの一元管理

- ユーザー /アクセス権限
- 機器/設定
- ソフトウェアのライセンス/配布
- データベース/コンテンツ管理システムと 維持
- 管理レポート

電子記録の一元的かつ安全な保存

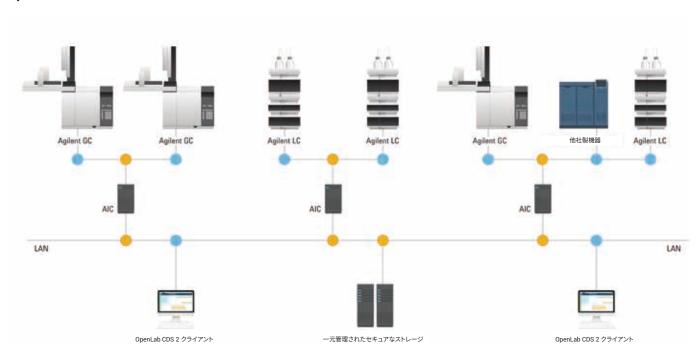
- コラボレーションの促進
- 21 CFR Part 11 および EU Annex 11 への対応

「Lab-at-a-Glance」 ビューによる機器と ユーザーの状態の監視

ラボ、オフィス、自宅からデータと機器への リモートアクセス

仮想環境内での運用 (オプション) システム診断およびログファイル

OpenLab CDS 2 のクライアントサーバー構成



OpenLab CDS 2 ならではのメリット

OpenLab CDS 2 は、ラボの主要なスタッフ全員に大きなメリットをもたらします。



ラボマネージャへのメリット

- 所有コストの最適化
- シングル四重極 LC/MS と GC/MS を含め、ラボ全体を管理できる 単一のソフトウェアプラットフォーム
- 国際標準に対応した革新的なコンプライアンスツール



機器のユーザーおよび分析者へのメリット

- 最新のユーザーインタフェースによる容易なシステムの習得
- 業界屈指のデータ再処理スピード
- 柔軟な標準レポートとカスタムレポート



IT マネージャへのメリット

- システムの一元管理により稼働時間が最大化
- 最小限のハードウェアおよびサポートコストによるネットワーク環境の構築
- 業界標準のアーキテクチャによる成長への対応



OpenLab CDS 2 の詳細情報と無料のオンラインチュートリアルについては、次のページをご覧ください。 www.agilent.com/chem/onelabonesoftware



ホームページ

www.agilent.com/chem/jp

カストマコンタクトセンタ

0120-477-111

email_japan@agilent.com

本製品は一般的な実験用途での使用を想定しており、 医薬品医療機器等法に基づく登録を行っておりません。 本文書に記載の情報、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・テクノロジー株式会社 © Agilent Technologies, Inc. 2018 Printed in Japan, February 21, 2018 5991-8951JAJP

