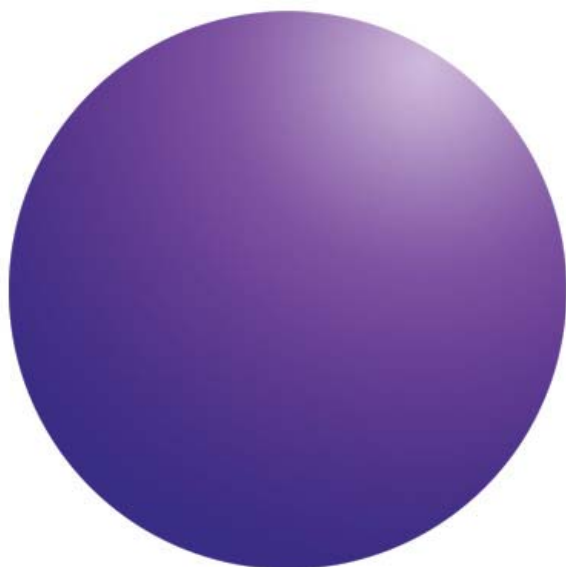




Agilent OpenLAB クロマト データシステム (CDS)

ChemStation エディション



OpenLAB CDS ChemStation
エディションの
ChemStation B.04.03 SP1
および **SP2** からのデータ
の再利用



Agilent Technologies

注意

© Agilent Technologies, Inc. 2012-2013, 2014

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

M8301-96162

エディション

2014 年 9 月

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

ソフトウェアリビジョン

このガイドは、Agilent OpenLAB CDS ChemStation エディション C.01.07 に対応しています。

Microsoft ® は、Microsoft Corporation の米国の登録商標です。

体外診断システムが適切な規制当局に登録され、該当する法規に準じている場合、本製品は、そのシステムの一部として使用できます。その他の場合は、一般ラボでの使用のみとなります。

保証

このマニュアルに含まれている内容は「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。

安全性情報

注意

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

警告

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

目次

1 OpenLAB CDS ChemStation エディション (OpenLAB Data Store または OpenLAB ECM 付き) でのデータの再利用

結果セットに保存されたシーケンスデータ 6

ChemStation データを OpenLAB Data Store または OpenLAB ECM
へ転送する 7

要件 7

ステップ1-コンテナが使用中であることを確認する。 7

ステップ2-コンテナにない結果の結果セットを作成する。 8

ステップ3-OpenLAB Data Store または OpenLAB ECM
に手動でデータを転送する。 11

2 スタンドアロンの OpenLAB CDS ChemStation エディションシステムでのデータの再利用

移行ステップ 14

データ移行で知っておくべき事実 16

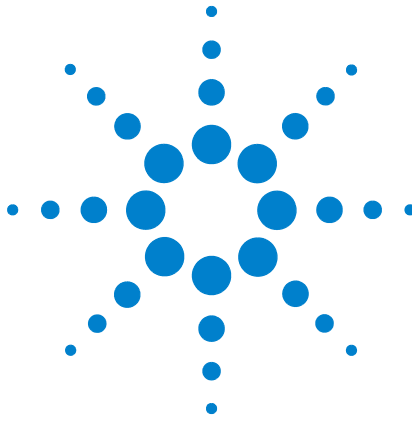
ChemStation エンティティの互換性 16

レポートテンプレートの移行 16

クラシックメソッドの RC.net メソッドへの移行 16

アップグレードの推定時間 17

参考資料の一覧 17



1

OpenLAB CDS ChemStation エディ ション (OpenLAB Data Store または OpenLAB ECM 付き) でのデータの 再利用

結果セットに保存されたシーケンスデータ 6

ChemStation データを OpenLAB Data Store または OpenLAB ECM
へ転送する 7

この章では、ChemStation ファイルシステムから OpenLAB Data Store または OpenLAB ECM が付属している OpenLAB CDS ChemStation エディションへコンテナ (現在は結果セットと呼ぶ) に保存された ChemStation シーケンスを手動で転送する手順について説明します。

この手順を使用して、ChemStation B.04.03 SP1 から OpenLAB CDS ChemStation C.01.04 以降へのデータ転送ができます。

注記

アップグレードプロジェクト中には、お使いの環境内に異なる複数のバージョンの OpenLAB CDS が存在することになる場合もあります。データの分析と再解析は、取込または前回の再解析に使用したのと同じかそれより後のバージョンでしかサポートされません。

複数のバージョンを混在させたシステムのご使用は、アップグレードを進めている間だけにすることをお勧めします。詳細については、『OpenLAB CDS 管理ガイド』(CDS_Admin.pdf on Disk 1) を参照してください。



結果セットに保存されたシーケンスデータ

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 (結果セットを以前はシーケンスコンテナと呼んでいました)。中央データ記憶領域システム (OpenLAB ECM または OpenLAB Data Store) を使用する場合、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) が中央リポジトリに1つのエンティティとして転送されます。

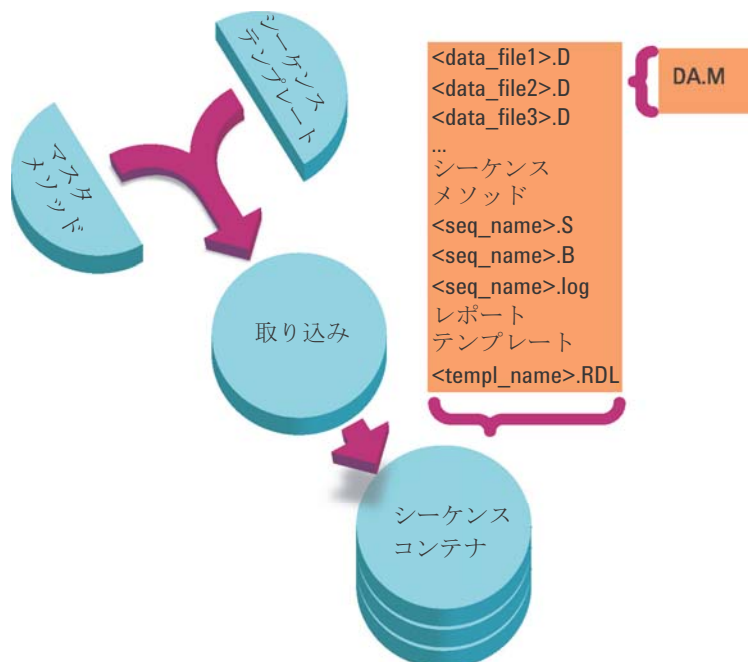


Figure 1 シーケンスによるデータ収集 (ユニークなフォルダ作成オン)

フォルダー **Chem32¥1¥methods** にあるメソッドはマスターメソッドとしての役割を果たします。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、フォルダー **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。

フォルダー **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。

注記

データがこの形式でない場合、今後の移行に備えて、ここで構成を変更しておくことを推奨します。

この詳細については、7 ページの「[ステップ 1 – コンテナが使用中であることを確認する。](#)」を参照してください。

ChemStation データを OpenLAB Data Store または OpenLAB ECM へ転送する

要件

この転送を実施するユーザーは、ローカル管理者グループに属していなければなりません。

ユーザーは、メソッドとシーケンスデータパスを編集して、転送設定で ECM または Data Store パスを選択し、OpenLAB Shared Services に機器の作成と構成ができるように、ChemStation と OpenLAB Shared Services の管理権限 (OpenLAB コントロールパネルの [すべて] の権限) を持っていなければなりません。

転送するデータは、コンテナ (結果セット) に保存しなければなりません。

ステップ 1 – コンテナが使用中であることを確認する。

コンテナ (結果セット) に保存されたデータのみが、Data Store または ECM に転送されます。

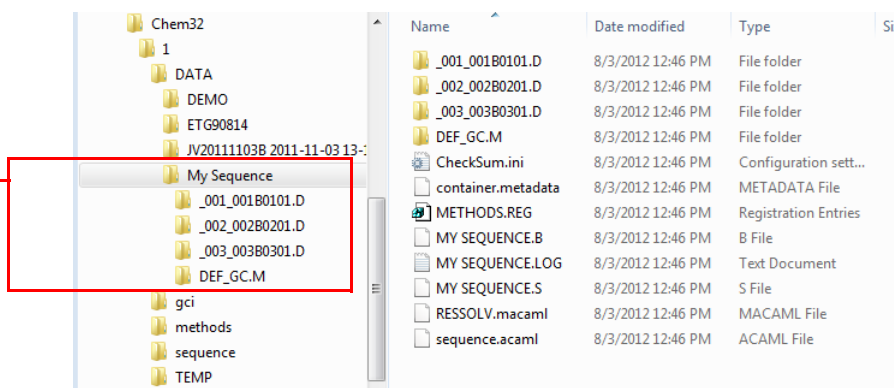
続行する前に、転送するデータがコンテナにあることを確認します。コンテナ内のデータは、下のスクリーンキャプチャと同じように見えます。すべてのデータファイル、シーケンスファイル、およびシーケンスに使用されるメソッドは、1 つのフォルダーにグループ分けされています。ChemStation B.04.03 ではこのフォルダーをコンテナと呼んでいましたが、現在は結果セットと呼びます。

注記

データがこの形式で表示されていない場合、今後の移行に備えて、ここで構成を変更しておくことを推奨します。

コンテナに入っていない古いデータの場合、ステップ 2 の説明に従って作成してください。

[マイシーケンス] という
名のシーケンス用結果
セット



ChemStation のデータ構造について詳しくは、『*OpenLAB CDS ChemStation エディション 概念とワークフローガイド*』(M8301-96016) を参照してください。

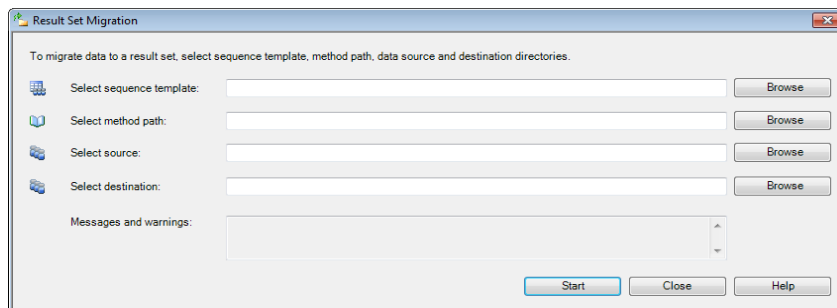
ステップ 2 – コンテナにない結果の結果セットを作成する。

ChemStation の [結果セットのマイグレーション] 画面を使って、データを Data Store または ECM にアップロードするためのコンテナ (結果セット) を作成します。

注記

この手順は、データ作成に使用したシーケンスおよびメソッドが、はっきりわかっている場合にのみ使用してください。

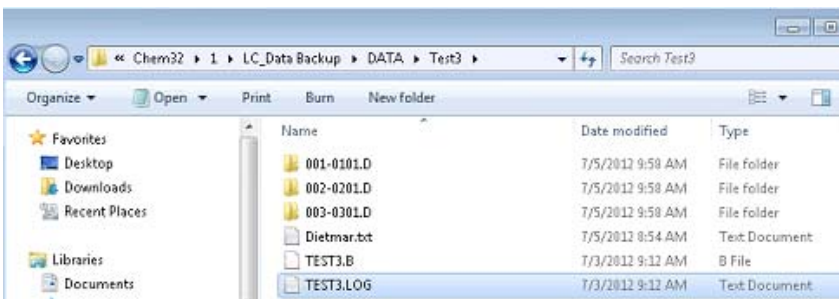
- 1 OpenLAB ChemStation の [データ解析] ビューで [シーケンス] > [結果セットのマイグレーション...] を選択し、[結果セットのマイグレーション] ダイアログを開きます。



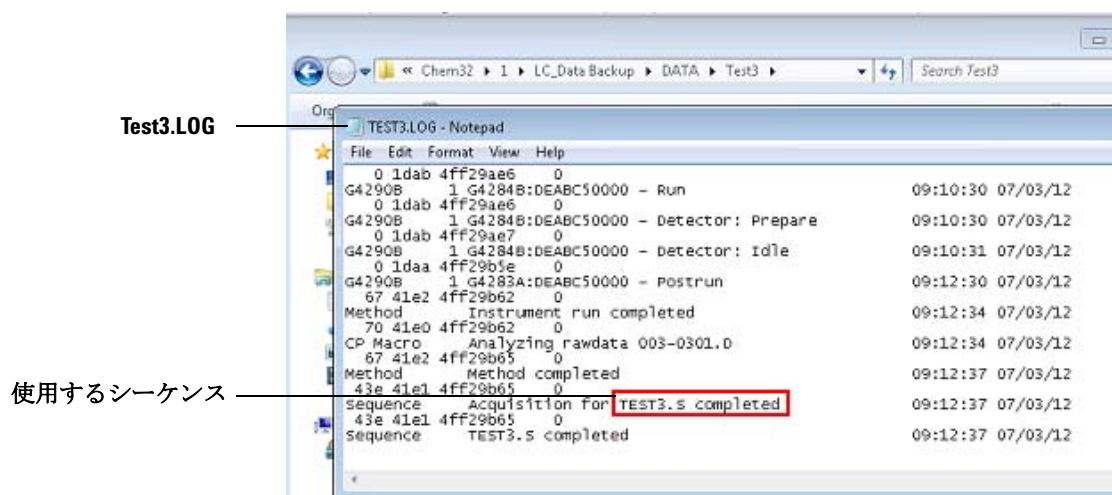
- 2 機器フォルダーについて収集した ChemStation B.04.03 バックアップデータからのシーケンステンプレートに移動し、選択します。

使用されたシーケンスが不明の場合は、データフォルダーの *.log を参照してください。

次の画像は、Test3 データフォルダーのログファイル (Test3.log) がハイライト表示されています。

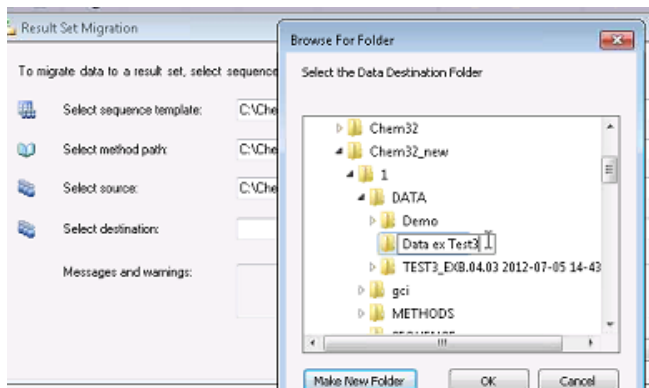


次の図では、Test3.log をノートパッドで開いた様子を示し、シーケンスファイルの名前が強調されています。

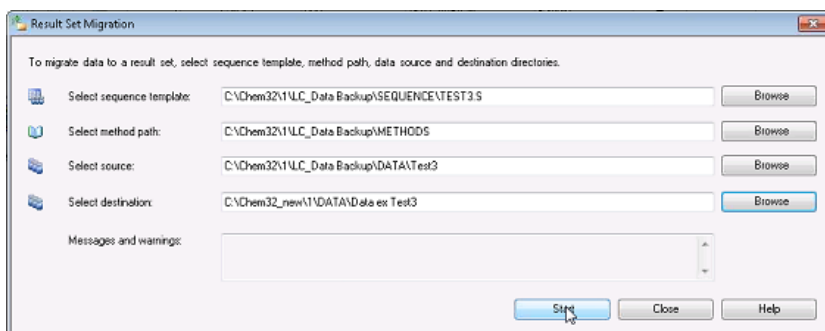


- 3 ChemStation B.04.03 バックアップのある場所から、メソッドフォルダーを選択します。

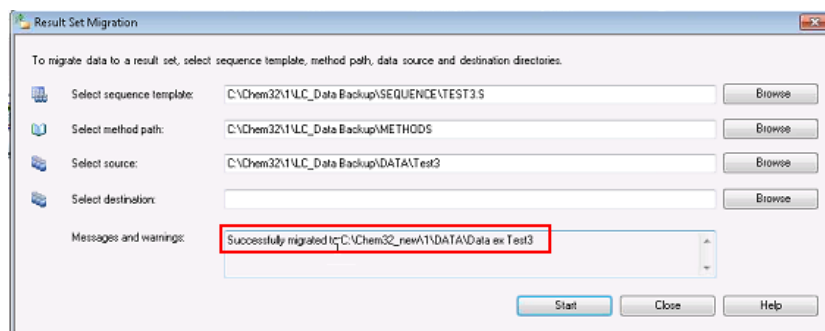
- 4 ChemStation B.04.03 バックアップのある場所から、ソースフォルダーを選択します。



- 5 宛先フォルダーを選択します。アップグレードされた場所のデータフォルダー構造内に、新しいフォルダーを作成し、宛先として選択します。
- 6 [開始] をクリックします。



- 7 結果セットの移行が成功した場合、下の画像で強調されているように、適切なメッセージが表示されます。



結果セットの情報について詳しくは、ChemStation マニュアルを参照してください。

ステップ 3 – OpenLAB Data Store または OpenLAB ECM に手動でデータを転送する。

- 1 クライアント PC に Data Store または ECM 接続を設定します。
ECM については、『ECM インストールガイド』を参照してください。
Data Store については、『Data Store インストールガイド』を参照してください。
- 2 Data Store または ECM にデータ、メソッド、およびシーケンスのフォルダーを作成します。
- 3 ChemStation の [メソッド & ランコントロール] ビューで、[Data Store] または [ECM] > [プレファレンス] を表示します。
[プレファレンス] ダイアログで次の操作を行います。
 - a [パス] タブをクリックし、ChemStation ファイルシステムに使用されたシーケンス、データ、およびメソッドのパスを入力します。
 - b [転送設定] タブをクリックし、[再解析後インポート] チェックボックスを選択します。データ転送パスが正しいパスに設定されていることを確認します。

注記

[再解析後インポート] チェックボックスがオフになっており、[プレファレンス] でグレー表示されている場合、ChemStation 管理ツールの全ワークステーションについてこのオプションが有効にされている必要があります。このツールは管理者が使用できます ([スタート] メニュー > [プログラム] > [Agilent Technologies] > [OpenLAB CDS ChemStation エディション] からアクセスします)。

ChemStation ファイルシステムから Data Store または ECM へのメソッドの追加

- 1 [メソッド & ランコントロール] ビューの ChemStation エクスプローラから、[メソッド] タブをクリックし、メソッドをダブルクリックしてロードします。
- 2 [Data Store] または [ECM] > [メソッド保存] をクリックします。
- 3 Data Store または ECM に作成されたフォルダーを参照し、メソッドを保存します。
- 4 [ChemStation ナビゲーション] ペインのメソッドアイコンは、 から  へ変化し、メソッドが Data Store または ECM に保存されたことを示します。
- 5 保存するメソッドの機器構成が、現在の機器構成と適合していない場合は、保存前に構造の解決が必要になることがあります。

ChemStation ファイルシステムから Data Store または ECM へのシーケンステンプレートの追加

- 1 ChemStation エクスプローラの [メソッド&ランコントロール] ビューで、[シーケンステンプレート] タブをクリックして、シーケンステンプレートをダブルクリックしてロードします。
- 2 [Data Store] または [ECM] > [シーケンステンプレートの保存] をクリックします。
- 3 Data Store または ECM に作成されたフォルダーを参照し、シーケンステンプレートを保存します。
- 4 シーケンステンプレートのアイコンは、 から  へ変化し、シーケンステンプレートが Data Store または ECM に保存されたことを示します。

ChemStation ファイルシステムから Data Store または ECM システムへのデータの追加

注記

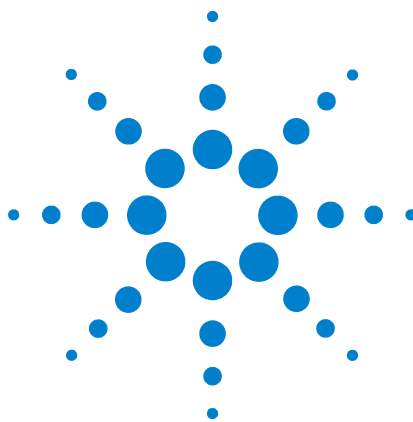
このようにデータをインポートするには、[再解析後インポート] チェックボックスを [プレファレンス] > [転送設定] ダイアログ または ChemStation 管理ツールで選択しなければなりません。

- 1 ChemStation エクスプローラの [データ解析] ビューで、[データ] タブをクリックします。
- 2 Data Store または ECM に追加したいデータをダブルクリックします。コンテナ (結果セット) に保存されたデータのみが転送されることに注意してください。
- 3 再解析モードを選択して、シーケンス再解析ツールセットで  (シーケンス再解析の開始) をクリックし、ツールセットを再解析します。
- 4 ファイルシステムのデータが Data Store または ECM に表示されます。ChemStation ナビゲーションペインのシーケンスアイコンは、 から  へ変化し、シーケンスが Data Store または ECM に保存されたことを示します。

ChemStation ファイルシステムから Data Store または ECM システムへの他のファイルの追加

- 1 [メソッド & ランコントロール] ビューまたは [データ解析] ビューで、[Data Store] または [ECM] > [ファイルのアップロード] をクリックします。
- 2 [ファイルのアップロード] ダイアログで、Data Store または ECM 内のアップロードするファイルと宛先フォルダーを選択します。

UV ライブラリ (*.uvl)、カラムデータベース (*.mdb)、イージーシーケンステンプレート (*.est)、またはクラシックレポートテンプレート (*.frp) を追加できます。



2

スタンドアロンの OpenLAB CDS ChemStation エディションシステム でのデータの再利用

移行ステップ	14
データ移行で知っておくべき事実	16
アップグレードの推定時間	17
参考資料の一覧	17

この章では、データがコンテナモードで保存されているときに、スタンドアロンの ChemStation ワークステーションバージョン B.04.03 SP1 と SP2 から、OpenLAB CDS ChemStation エディションワークステーションへの、メソッド、シーケンスおよびデータファイルの移動方法について説明します。

また本章には、データ再利用についての詳細が記載されているマニュアルの一覧も掲載されています。

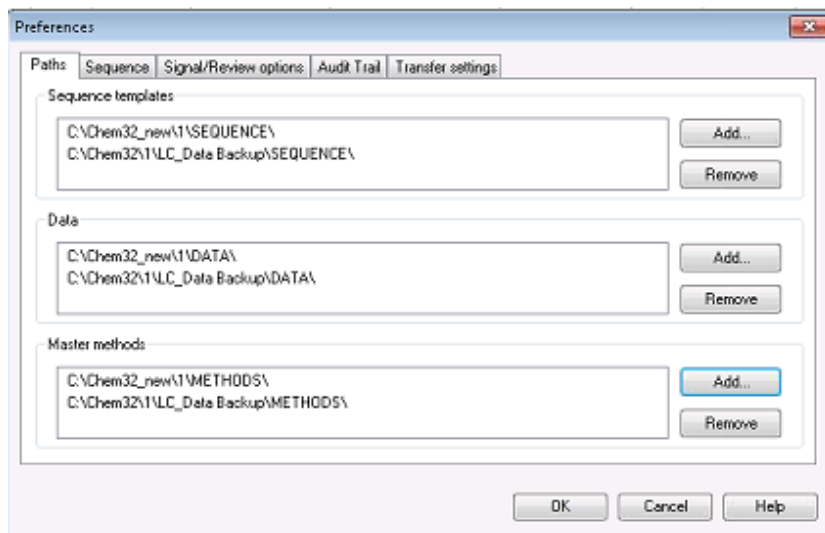


移行ステップ

- 1 すべての ChemStation B.04.03 SP1 機器について収集されたデータを手動でバックアップします。
- 2 コンフィグレーションエディタを実行し、設定した機器それぞれの詳細について次のように記録します。OpenLAB CDS ChemStation エディションでお使いの機器を再設定するには、この情報が必要となります。
 - a 機器番号
 - b 装置名
 - c 機器タイプ
 - d 接続設定 (IP アドレス、GPIB アドレスなど)
- 3 アドオンソリューションをすべてアンインストールします。特定のアンインストールの説明については、アドオンソリューションのマニュアルを参照してください。
- 4 OpenLAB CDS ChemStation エディションをインストールします。OpenLAB CDS ChemStation エディションのインストール前にマスターインストーラは、インストール中に、以前の ChemStation をアンインストールするか、他のフォルダーに移動します。
 - すでにある **ChemStation** フォルダーへのアップグレードを選択する場合、インストールされている ChemStation ファイルは削除され、すべてのユーザーが作成したファイルは Chem32_001 などのバックアップフォルダーに移動されます。
 - 新しいフォルダーの作成を選択する場合、既存のフォルダーはオリジナルの名前で保持されます。
- 5 コンテナモードで以前に保存したデータを移動するには、**[プレファレンス] > [パス] > [追加]** 機能を使って、ChemStation B.04.03 バージョンから、新規ディレクトリ / マシンへパスを追加します。
 - a データ解析ビューで、**[ビュー] > [プレファレンス]** を選択して、**[プレファレンス]** ダイアログボックスを開きます。
 - b **[パス]** タブをクリックします。
 - c **[追加]** を押して、ChemStation B.04.03 システムにより作成されたシーケンステンプレート、データ、およびマスターメソッドの場所に移動します。(アップグレードする前に準備された ChemStation B.04.03 システムのバックアップフォルダーや、マスターインストーラにより生成されたバックアップフォルダー Chem32_001 からの場合もあります。)

d [OK] をクリックします。

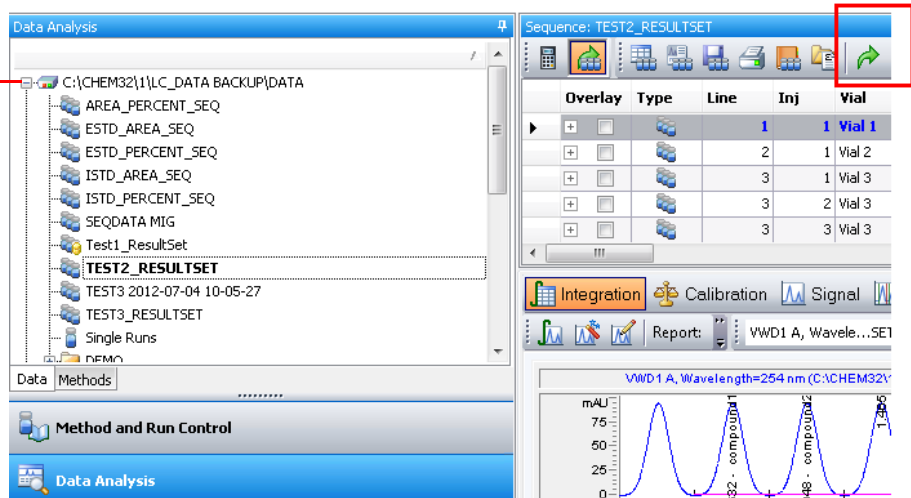
選択したパスと、それに保存されたすべてのシーケンステンプレート、データおよびマスターメソッドが、ChemStation エクスプローラに表示されます。



- 6 各シーケンスを一度に 1 つずつダブルクリックし、関連データファイルを ChemStation メモリにロードしてから、[再解析開始] アイコンをクリックして、データを再処理して C.01.06 ChemStation の結果セットを生成します。データが再解析されたことを確認するために、Checksum.ini と Sequence.acaml ファイルのタイムスタンプを確認してください。

[再解析開始]アイコン

ステップ 5 で識別されたパス



データ移行で知っておくべき事実

ChemStation エンティティの互換性

一般に、上位互換性が保証されています。これは、以前のバージョンから新しいバージョンへのメソッド、シーケンステンプレートおよびデータのロードが可能だということを意味します。具体的には、任意の ChemStation rev. B.xx.xx バージョンから OpenLAB CDS ChemStation エディション rev. C.xx.xx へのファイルのロードの場合にこれが該当します。しかし下位互換性はありません。OpenLAB CDS ChemStation エディション rev. C.xx.xx に保存されたメソッドやシーケンステンプレートは、ChemStation rev. B.xx.xx では使用できなくなります。データの場合も同様です。OpenLAB CDS ChemStation エディション rev. C.xx.xx から ChemStation rev. B.xx.xx へのデータのロードはサポートされていないので、データファイルの重大な問題を引き起こし、誤った結果や不完全な結果が作成される場合があります。したがって Agilent は、ファイルが間違って古いバージョンにロードされることがないように、ECM 内で ChemStation rev. B.xx.xx ファイルと OpenLAB CDS ChemStation エディション rev. C.xx.xx のファイルとを明確に分けておくことを推奨しています。

レポートテンプレートの移行

現在、古い FRP レポートテンプレートを新しい RDL レポートテンプレート形式に移行できません。古い FRP テンプレートは OpenLAB CDS ChemStation エディション rev. C.xx.xx でも依然として機能しますが、新しい RDL は最初から作成する必要があります。

クラシックメソッドの RC.net メソッドへの移行

RC.net メソッドは、ChemStation rev. B.04.02 で導入されました。メソッドの移行 (古典的メソッドの RC.net メソッドへの移行) は、OpenLAB CDS ChemStation エディション rev. C.xx.xx でも同じように機能します。RC.net メソッドはクラシックメソッドに逆変換できません。

アップグレードの推定時間

ChemStation B.04.03 SP1 から OpenLAB CDS ChemStation エディション rev. C.xx.xx へのアップグレードの推定時間は、ソフトウェアアップグレードの場合、約 30 分です。

参考資料の一覧

1 アップグレード作業の概要：

『OpenLAB CDS ChemStation エディション アップグレード準備ガイド』(M8301-96033、Disk2 の **CDS_CS-Upgrade.pdf**) の「アップグレード作業の概要」の章を参照してください。

2 ChemStation データ構造の結果セットの移行や詳細：

『OpenLAB CDS ChemStation エディション コンセプトとワークフローガイド』(M8301-96016、Disk2 の **CDS_CS_Concepts.pdf**) の「結果セットの移行」と「ChemStation データ構造」の章を参照してください。

3 アップロードと再解析のワークフロー：

『OpenLAB CDS ChemStation エディション(中央データ記憶領域付き) 概念ガイド』(M8301-96084、Disk2 の **CDS_CS-with-DataStorage.pdf**) の「中央データ記憶領域のある ChemStation で作業する」の章を参照してください。



Agilent Technologies

© Agilent Technologies

Printed in Germany, 2014 年 9 月



M8301-96162