

Agilent ChemStation



**Flujo de trabajo de la nueva
ChemStation: primeros pasos**



Agilent Technologies

Avisos

© Agilent Technologies, Inc. 2006,
2007-2009

No se permite la reproducción de parte alguna de este manual bajo cualquier forma ni por cualquier medio (incluyendo su almacenamiento y recuperación electrónicos y la traducción a idiomas extranjeros) sin el consentimiento previo por escrito de Agilent Technologies, Inc. según lo estipulado por las leyes de derechos de autor estadounidenses e internacionales.

Número de referencia del manual:

G2170-95043

Edición

2/2009

Impreso en Alemania

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

Sólo para uso en investigación.

No usar en procedimientos de diagnóstico.

Revisión de software

Esta guía es válida para las revisiones B0.04.xx del software Agilent ChemStation, donde xx hace referencia a revisiones menores del software que no afectan a la exactitud técnica de esta guía.

Garantía

El material contenido en este documento se proporciona "tal como es" y está sujeto a modificaciones, sin previo aviso, en ediciones futuras. Además, hasta el máximo permitido por la ley aplicable, Agilent rechaza cualquier garantía, expresa o implícita, en relación con este manual y con cualquier información contenida en el mismo, incluyendo, pero no limitado a, las garantías implícitas de comercialización y adecuación a un fin determinado. En ningún caso Agilent será responsable de los errores o de los daños incidentales o consecuentes relacionados con el suministro, utilización o uso de este documento o de cualquier información contenida en el mismo. En el caso que Agilent y el usuario tengan un acuerdo escrito separado con condiciones de garantía que cubran el material de este documento y que estén en conflicto con estas condiciones, prevalecerán las condiciones de garantía del acuerdo separado.

Licencias sobre la tecnología

El hardware y/o software descritos en este documento se suministran bajo una licencia y pueden utilizarse o copiarse únicamente de acuerdo con las condiciones de tal licencia.

Avisos de seguridad

PRECAUCIÓN

Un aviso de **PRECAUCIÓN** indica un peligro. Llama la atención sobre un procedimiento de operación, una práctica o similar que, si no se realizan correctamente o no se ponen en práctica, pueden provocar daños en el producto o pérdida de datos importantes. No avance más allá de un aviso de **PRECAUCIÓN** hasta que se entiendan y se cumplan completamente las condiciones indicadas.

ADVERTENCIA

Un aviso de **ADVERTENCIA** indica un peligro. Llama la atención sobre un procedimiento de operación, una práctica o similar que, si no se realizan correctamente o no se ponen en práctica, pueden provocar daños personales o la muerte. No avance más allá de un aviso de **ADVERTENCIA** hasta que se entiendan y se cumplan completamente las condiciones indicadas.

En este manual...

En los laboratorios de análisis, los datos cromatográficos deben adquirirse de forma eficiente en un período de tiempo breve. La clarificación de resultados ambiguos puede llevar mucho tiempo lo que provoca unos costes administrativos altos. Desde la revisión B.020.01 de la ChemStation, se han mejorado las capacidades de almacenamiento y exploración de datos para que los datos de los resultados se puedan revisar y reprocesar con rapidez.

En este manual se describe el uso eficiente de las nuevas funciones de almacenamiento y recuperación de datos de ChemStation B.04.01 para aumentar la productividad de su laboratorio.

1 Estructura de datos de la ChemStation

En este capítulo se ofrece una descripción general de las diferencias entre la estructura de datos usada en la revisiones de la ChemStation anteriores a la B.02.01 y la nueva estructura de datos de la revisión B.02.01 y posteriores.

2 Adquisición de datos

En este capítulo se explica cómo influye la nueva estructura de datos en el flujo de trabajo de la adquisición de datos para secuencias y análisis individuales.

3 Análisis de datos

En este capítulo se describen las opciones de análisis de datos y revisión disponibles y se explica hasta qué punto la estructura de datos afecta a la selección de opciones.

4 Flujo de trabajo con la Unique Folder Creation desactivada

En este capítulo se ofrece información sobre cómo trabajar con la opción **Unique Folder Creation** desactivada, lo que le permite almacenar datos como en las revisiones B.01.03 o anteriores de la ChemStation. Este modo no aprovecha todas las ventajas de la últimas funciones de revisión de datos y reprocesamiento de la ChemStation.

Contenido

1 Estructura de datos de la ChemStation	5
Versiones de ChemStation anteriores a la B.02.01	6
ChemStation B.02.01 y versiones posteriores	7
2 Adquisición de datos	11
Adquisición de datos	12
3 Análisis de datos	19
Análisis de datos	20
Análisis de datos: Revisión de datos	23
Interfase de usuario de la ChemStation durante la revisión de datos	30
Análisis de datos: reprocesamiento de datos	33
4 Flujo de trabajo con la Unique Folder Creation desactivada	37
¿Trabajar con la Unique Folder Creation activada o desactivada?	38
Flujo de trabajo con la Unique Folder Creation desactivada	40
Migración de contenedores de secuencia	44



1

Estructura de datos de la ChemStation

Versiones de ChemStation anteriores a la B.02.01 6

ChemStation B.02.01 y versiones posteriores 7

En este capítulo se ofrece una descripción general de las diferencias entre la estructura de datos usada en las revisiones de la ChemStation anteriores a la B.02.01 y la nueva estructura de datos de la revisión B.02.01 y posteriores.



Versiones de ChemStation anteriores a la B.02.01

En las revisiones de la ChemStation anteriores a la B.02.01, las secuencias, los métodos y los ficheros y resultados de datos generados se almacenaban en las ubicaciones especificadas, fijas e independientes. Por ejemplo, en una secuencia se hacía referencia a los métodos por el nombre y era responsabilidad del usuario mantener la integridad de los métodos, las secuencias y los archivos de datos. Por ello, el fichero de datos a largo plazo y la reproducción de los resultados era una tarea tediosa. Los usuarios tenían que documentar el cromatograma, los resultados y los métodos asociados; este era el procedimiento no sólo para laboratorios regulados, sino también para algunas áreas de laboratorios no regulados (tales como laboratorios medioambientales). En las revisiones de ChemStation anteriores a la B.02.01, esto sólo podía conseguirse imprimiendo todo en un informe.

ChemStation B.02.01 y versiones posteriores

Con el fin de reforzar la asociación entre los archivos de datos y los métodos, se ha implementado el siguiente esquema de organización de datos en ChemStation B.02.01 y versiones posteriores. Cuando se utiliza con ChemStation, el gestor de contenidos empresariales (ECM) OpenLAB de Agilent también hace uso del nuevo concepto de datos, puesto que ahora se puede transferir (archivar) el conjunto completo de datos (secuencia/métodos/archivos de datos) al ECM como si se tratara de una misma entidad.

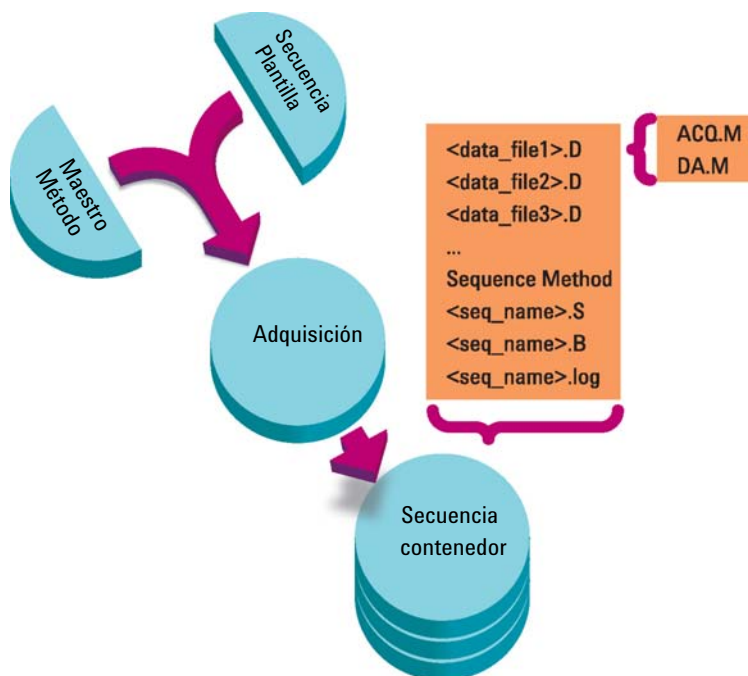


Figura 1 Adquisición de secuencias B.02.01 y posteriores

Los métodos de la carpeta Chem32\1\methods sirven como métodos maestros, es decir, durante la adquisición y el análisis de datos no sufren cambios.

Del mismo modo, las secuencias de la carpeta Chem32\1\sequence sirven como plantillas de secuencias que pueden utilizarse para reanalizar (pero no reprocesar) una secuencia varias veces.

El patrón de almacenamiento de datos varía en función de si se adquieren datos de un solo análisis o de una secuencia:

- 1 Cuando se ejecuta una secuencia, se crea automáticamente una carpeta (**sequence container**) con un nombre exclusivo en el subdirectorío especificado. Cuando se analiza una sola muestra, el fichero de datos (*.d) se escribe en el subdirectorío especificado.
- 2 Para los datos de secuencias, la plantilla de secuencias ejecutada (*.s) y los métodos (*.m) correspondientes se copian en el contenedor de secuencias. Las copias de los métodos se denominan **sequence methods** para distinguirlos de los métodos maestros originales.

Todas las tareas relacionadas con las secuencias (p. ej., adquisición y análisis de datos) se realizan en las copias de la secuencia y los métodos. Por lo tanto, la plantilla de secuencia y los métodos maestros no se modifican para futuras ejecuciones de la secuencia.

Los cambios realizados en la secuencia durante la adquisición, por ejemplo, la adición de líneas a la tabla de secuencias, se llevan a cabo en la copia del archivo de secuencias del contenedor de secuencias. La plantilla de secuencia no se modifica.

Del mismo modo, los cambios realizados en el método, como pueden ser las actualizaciones de la tabla de calibración en el caso de análisis de calibraciones, se reflejan en los métodos de secuencia, pero no en los métodos maestros.

Al ejecutar la secuencia, todos los archivos de datos generados (*.d) se almacenan en la carpeta de datos de secuencia, junto con el fichero de lotes correspondiente (*.b) y el fichero de registro de secuencias (*.log).

- 3 Cada fichero de datos contiene dos copias del método utilizado para crear el análisis.
 - La primera, denominada ACQ.M, se guarda directamente una vez realizada la adquisición del método.
 - La segunda copia, denominada DA.M, se guarda una vez finalizado el análisis de los datos.

Ambos métodos contienen todos los parámetros de métodos, incluidos los de adquisición y análisis de datos.

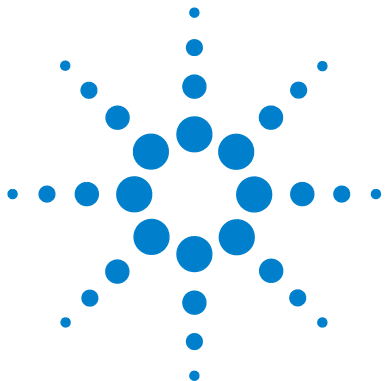
El objetivo de ACQ.M es garantizar la conservación de los parámetros del método original de cada archivo de datos específico. Los parámetros de adquisición pueden verse e imprimirse en la vista Análisis de datos.

Durante el análisis de datos, se puede modificar el DA.M para almacenar los parámetros de análisis de datos que no correspondan a todos los análisis de una secuencia, sino a un determinado fichero de datos, por ejemplo, los eventos de integración cronometrados.

En los capítulos siguientes se explica con más detalle el impacto de esta estructura en flujos de trabajo típicos. También se muestran los parámetros correspondientes de los cuadros de diálogo de ChemStation.

1 Estructura de datos de la ChemStation

ChemStation B.02.01 y versiones posteriores



2 Adquisición de datos

Adquisición de datos	12
Adquisición de datos en una secuencia	13
Adquisición de secuencias parciales	15
Adquisición de datos de análisis individuales	17

En este capítulo se explica cómo influye la nueva estructura de datos en el flujo de trabajo de la adquisición de datos para secuencias y análisis individuales.



Adquisición de datos

Empezando por la ChemStation B.02.01, el almacenamiento flexible de datos para análisis individuales y secuencias permite especificar varias ubicaciones de almacenamiento sin necesidad de reconfigurar. La ficha **Paths** del cuadro de diálogo **Preferences** del menú **View** permite añadir varias rutas además de la ruta predeterminada C:\chem32\x\DATA (donde x es el número del instrumento). Al utilizar los botones **Add** y **Remove**, las rutas existentes pueden eliminarse de forma sencilla o bien puede acceder a una ubicación seleccionada y añadir la ruta a la nueva ubicación en **Preferences**. La ruta predeterminada no puede quitarse de la lista pero puede modificarse en el **Configuration Editor**.

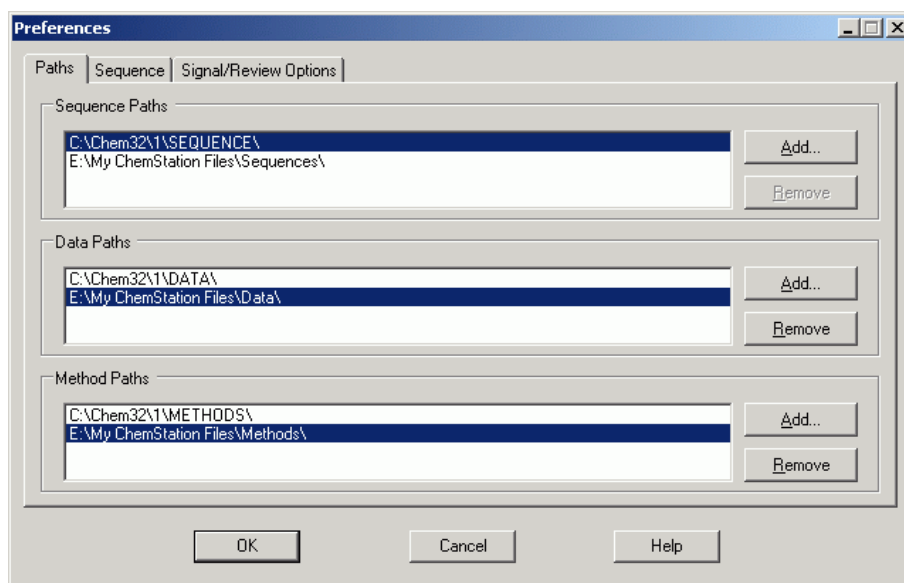


Figura 2 Cuadro de diálogo **Preferences**/Ficha **Paths**

Todas las rutas de datos especificadas recientemente podrán seleccionarse después en los cuadros de diálogo **Sample Info/Sequence Parameters** al realizar el análisis.

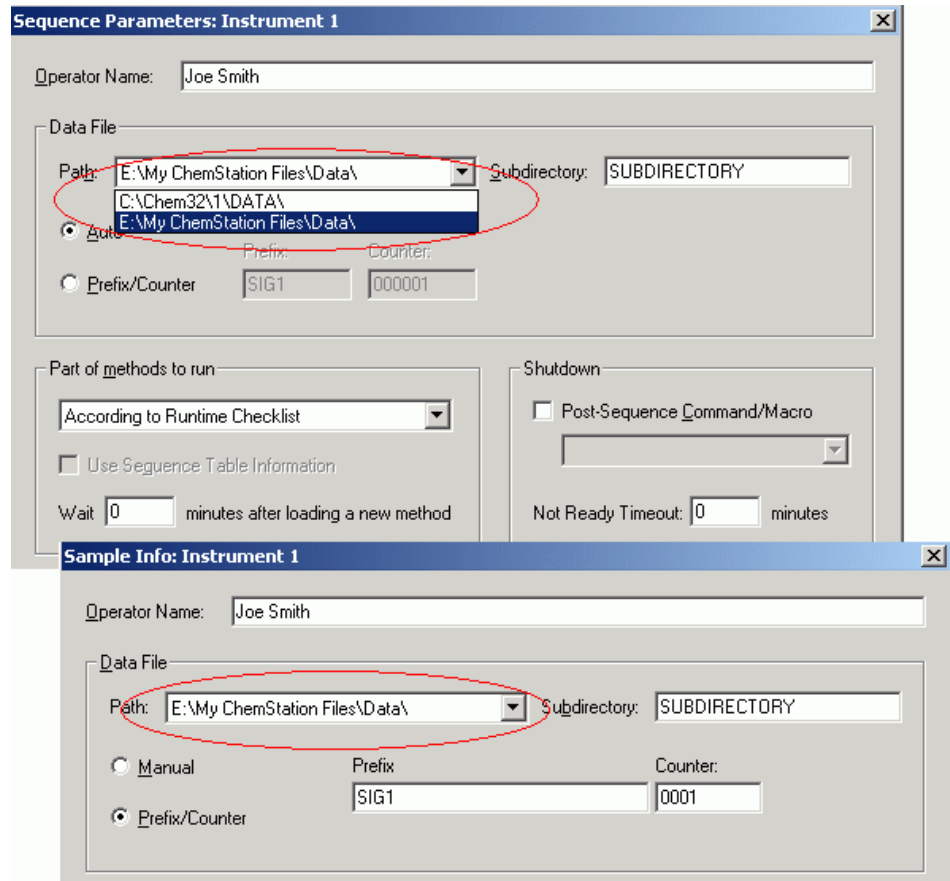


Figura 3 Selección de rutas de datos

Adquisición de datos en una secuencia

Para analizar una secuencia, deberán estar disponibles los métodos predefinidos apropiados. Estos son los métodos maestros tal como se ha descrito anteriormente. Normalmente, los métodos maestros y las plantillas de secuencia se utilizan en la vista **Method and Run Control** de la ChemStation. Por este motivo, en la vista **Method and Run Control**, la ChemStation ofrece acceso a los métodos maestros y a las plantillas de secuencia.

2 Adquisición de datos

Adquisición de datos

La plantilla de secuencia hace referencia a estos métodos en la tabla de secuencia.

Tal como se ha explicado anteriormente, cuando se analiza una secuencia con una plantilla de secuencia <sequence_name>.S y se utiliza el método maestro <method_name>.M, se crea una carpeta nueva que contiene todos los ficheros resultantes del análisis de la secuencia (“contenedor de secuencias”).

La ubicación de esta carpeta se determina con los parámetros del cuadro de diálogo **Sequence Parameters**, y el nombre de la carpeta se determina con la ficha **Sequence** del cuadro de diálogo **Preferences**. De forma predeterminada, el nombre es <sequence_name> <acquisition_date> <acquisition_time>, pero puede configurarse con las señales Operador, Instrumento, Contador y Nombre del PC o bien puede introducir manualmente cualquier nombre. Si el **Name Pattern** no proporciona nombres únicos para los contenedores de secuencias, la ChemStation añadirá un contador para garantizar su unicidad.

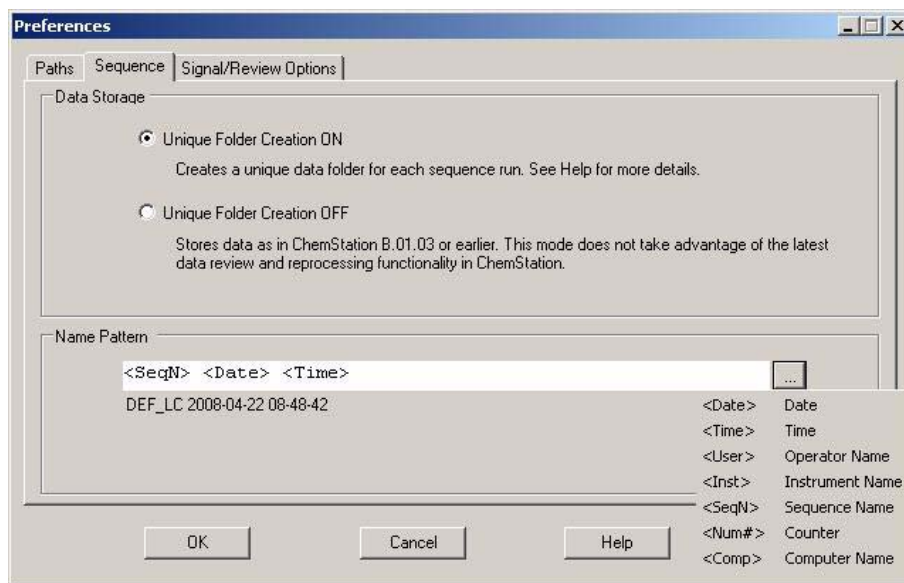


Figura 4 Cuadro de diálogo **Preferences/Ficha Sequence**

Al comienzo de una secuencia de adquisición, el método especificado en la tabla de secuencias se copia desde la carpeta de métodos maestros al contenedor de secuencias. Asimismo, se crea una copia de la secuencia y se coloca junto con el registro de secuencia y el fichero de lotes (*.b) en el contenedor de secuencias. Todas las actualizaciones del método (p. ej., actualizaciones de la

tabla de calibración) se escriben en el método de secuencia del contenedor. Ahora todos los ficheros necesarios estarán disponibles para futuras revisiones de datos y reprocesamientos, sin que se apliquen los cambios al método maestro o a la plantilla de secuencia para otros análisis de secuencia.

Durante la adquisición, los archivos de datos se almacenan en el contenedor de secuencias. Dentro de cada fichero de datos (*.d) se guardan dos métodos adicionales, ACQ.M y DA.M, para este análisis específico. Estos dos métodos son copias del método de secuencia, lo que conserva el estado del método tal como era en el momento de la adquisición del fichero de datos específico. Por ejemplo, en el caso de las actualizaciones de las tablas de calibración, los métodos DA.M difieren en cada ejecución.

El método de adquisición individual ACQ.M está destinado a preservar los parámetros de adquisición, por lo que se recomienda no cambiar este método durante las tareas posteriores de revisión de datos. En la vista **Data Analysis** pueden verse e imprimirse los parámetros de adquisición de este método.

Junto con estos ficheros guardados en la carpeta de secuencias, pueden realizarse las actividades de revisión y reprocesamiento de todos los datos sin alterar el método maestro o la plantilla de secuencia. En caso necesario, los cambios de método pueden volver a guardarse también en el método maestro.

Adquisición de secuencias parciales

En el caso de una adquisición de secuencias parciales, el usuario tiene dos opciones:

- adquirir la secuencia parcial en un contenedor de secuencias nuevo
- o
- adquirir la secuencia parcial en un contenedor de secuencias existente.

La adquisición de archivos de datos desde una ejecución de secuencias parciales en un contenedor de secuencias existente puede resultar útil en las siguientes situaciones:

- Hay que sobrescribir un único archivo de datos (o varios archivos de datos), por ejemplo, porque se ha empleado un vial incorrecto.

2 Adquisición de datos

Adquisición de datos

- Sólo se ha analizado la primera parte de la secuencia y hay que añadir las muestras que faltan mediante la ejecución de una secuencia parcial. Esto puede ocurrir cuando falla un instrumento durante la adquisición de secuencias.
- Se han agregado más líneas a la plantilla de la secuencia después de la adquisición de las líneas ya existentes. Los análisis adicionales deben añadirse a los datos ya existentes.

Por tanto, cuando el usuario selecciona **Partial Sequence** en el menú **Sequence**, se abre un cuadro de diálogo en el que se proporciona la opción de seleccionar en una lista un contenedor de secuencias existente o crear un nuevo contenedor de secuencias.

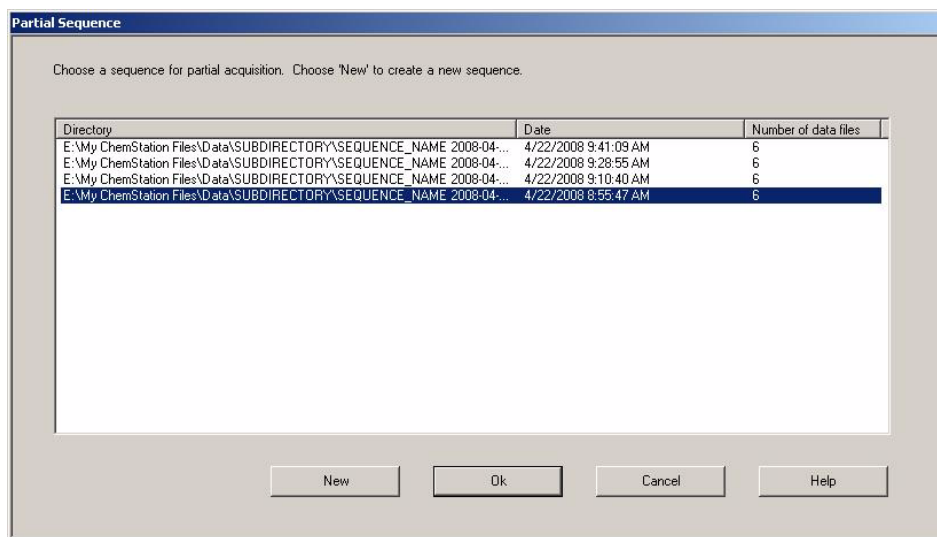


Figura 5 Cuadro de diálogo **Partial Sequence**

No obstante, para mantener la coherencia del contenedor de secuencias (para que se pueda reprocesar completamente en **Data Analysis**), sólo se ofrecen para la adquisición parcial los contenedores de secuencias que cumplen ciertas condiciones:

- El nombre de la plantilla de secuencia (secuencia de origen) y el nombre del archivo de secuencia .S del contenedor de secuencias (secuencia de destino) deben ser idénticos.
- La ruta de datos y el subdirectorio de los archivos de secuencia deben ser idénticos.

- El número de líneas de secuencia de la secuencia de origen debe ser igual o superior al número de líneas de secuencia de la secuencia de destino.
- El tipo de muestra y el número de inyecciones de cada línea de la secuencia de destino deben ser idénticos a los valores de las líneas correspondientes de la secuencia de origen.
- El esquema de denominación de los archivos de datos debe ser idéntico en los dos archivos de secuencias.

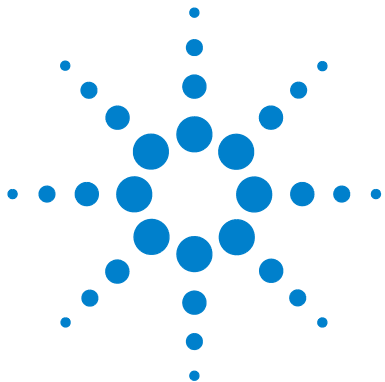
Después de salir de este cuadro de diálogo haciendo clic en **Ok** (para seleccionar uno de los contenedores de datos de secuencias existente) o en **New** (para crear un nuevo contenedor de secuencias), el usuario puede seleccionar las líneas de secuencia que deben ejecutarse durante la secuencia parcial.

Adquisición de datos de análisis individuales

También se introduce el nuevo concepto de datos para análisis individuales. En este caso, el fichero de datos se guarda directamente en la subdirectorio respectivo. Dado que para un análisis individual se utiliza un solo método, no es necesario copiar este método al subdirectorio; todas las acciones se realizan directamente con el método maestro. Una vez realizada la adquisición del método se guarda una copia del método maestro en el directorio de archivos de datos (ACQ.M). También se guarda una copia (DA.M) una vez ejecutado el análisis de datos del método maestro.

2 Adquisición de datos

Adquisición de datos



3 Análisis de datos

Análisis de datos 20

Análisis de datos: Revisión de datos 23

Interfase de usuario de la ChemStation durante la revisión de datos 30

Análisis de datos: reprocesamiento de datos 33

En este capítulo se describen las opciones de análisis de datos y revisión disponibles y se explica hasta qué punto la estructura de datos afecta a la selección de opciones.



Análisis de datos

Una vez adquiridos los datos, pueden analizarse en la vista **ChemStation Data Analysis**. Al seleccionar la ficha **Data** del ChemStation Explorer, se pueden cargar todos los análisis de una secuencia o todos los análisis individuales en un carpeta específica haciendo doble clic en el símbolo correspondiente. El conjunto de datos correspondiente aparecerá en la tabla de navegación.

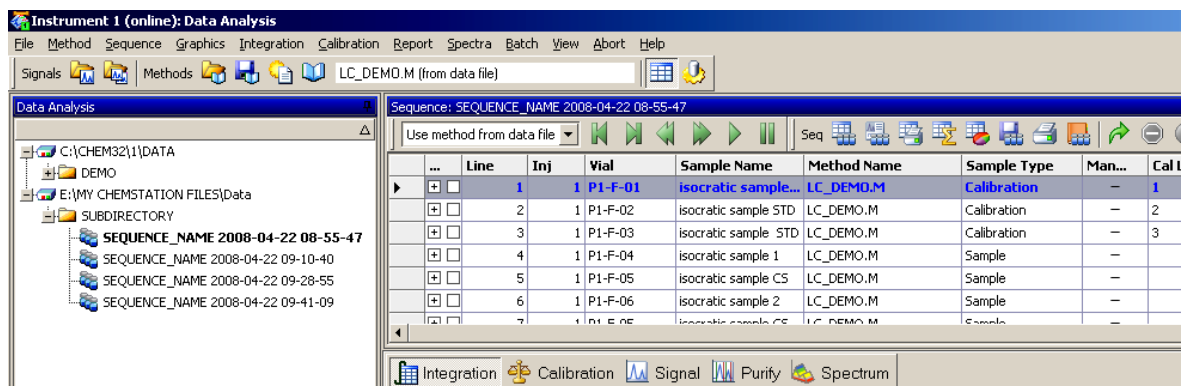


Figura 6 Carga de una secuencia desde el ChemStation Explorer a la tabla de navegación

El contenido principal de la tabla de navegación está compuesto por una lista de todos los análisis del conjunto. En lugar de cargar un análisis mediante el menú **Archivo > Cargar señal**, ahora se puede cargar un análisis en la memoria de la ChemStation haciendo doble clic en la línea correspondiente de la tabla de navegación. De forma adicional, si se hace clic con el botón secundario del ratón en un análisis, aparecen diversas opciones, por ejemplo, cargar o superponer señales específicas desde el fichero, exportar datos o ver los parámetros del método de adquisición.

Una vez cargado el análisis, puede revisarlo, es decir, ajustar los parámetros de análisis de datos, integrar las señales y, finalmente, imprimir un informe. En este caso, se puede analizar el análisis como un único análisis sin tener en cuenta el contexto de la secuencia y sin utilizar las funciones de la tabla de secuencias.

Esta forma de análisis de datos se denomina **Data Review**. La tabla de navegación proporciona el juego de herramientas que se muestra en la [Figura 7](#) en la página 21, que facilita la revisión de los datos.



Figura 7 Conjunto de herramientas de revisión de datos de la tabla de navegación

Con este conjunto de herramientas, es posible acceder al principio o al final de la tabla de navegación, pasar al análisis siguiente o al anterior, desplazarse por todos los análisis y detener el desplazamiento automático.

Una forma diferente de analizar los datos consiste en **Reprocess** una secuencia completa. Durante este proceso, se vuelven a analizar todos los análisis en el contexto de la secuencia, es decir, las tablas de calibración de los métodos de secuencia se actualizan en el caso de análisis de calibración, multiplicadores, cantidades, etc. pueden cambiarse en la tabla de secuencia, pueden añadirse nuevos métodos al contenedor de secuencias, etc. Para el reprocesamiento, la tabla de navegación proporciona el siguiente conjunto de herramientas:



Figura 8 Conjunto de herramientas de reprocesamiento de secuencias de la tabla de navegación

Observe que los iconos de reprocesamiento de la tabla de navegación sólo están disponibles para los datos de secuencia generados con la ChemStation B.02.01 y posteriores. Para los datos de un solo análisis, para los datos generados con una versión anterior a la B.02.01 y para los datos adquiridos con la opción **Unique Folder Creation** desactivada (véase “[Flujo de trabajo con la Unique Folder Creation desactivada](#)” en la página 40), no se puede acceder al reprocesamiento de **Data Analysis**. Estas secuencias deben reprocesarse en **Method and Run Control**, estableciendo el parámetro de secuencia **Parts of method to run** en **Reprocess Only**. Para secuencias generadas con la ChemStation B.02.01 y posteriores, se ha quitado la opción de reprocesamiento en **Method and Run Control** (véase [Figura 9](#) en la página 22) y la tabla de navegación ofrece el reprocesamiento como una **Data Analysis Task**.

3 Análisis de datos

Análisis de datos

Sequence Parameters: Instrument 1

Operator Name: Joe Smith

Data File

Path: E:\My ChemStation Files\Data\ Subdirectory: SUBDIRECTORY

Auto

Prefix/Counter

Prefix: SIG1 Counter: 000001

Part of methods to run

According to Runtime Checklist

According to Runtime Checklist

Acquisition Only

Wait 0 minutes after loading a new method

Shutdown

Post-Sequence Command/Macro

Not Ready Timeout: 0 minutes

Figura 9 Parámetros de secuencia de la vista **Method and Run Control** de la ChemStation B.02.01 y posteriores

Análisis de datos: Revisión de datos

Data Review significa analizar los análisis uno por uno. La ChemStation permite especificar acciones predeterminadas que se realizan automáticamente al cargar un fichero de datos desde la tabla de navegación. Entre ellas se incluyen tareas de análisis de datos como la integración del cromatograma directamente después de la carga, así como la especificación del método que va a cargarse.

Las opciones correspondientes para la revisión (que no se utilizan para el reprocesamiento) se configuran en la ficha **Signal/Review Options** del cuadro de diálogo **Preferences**.

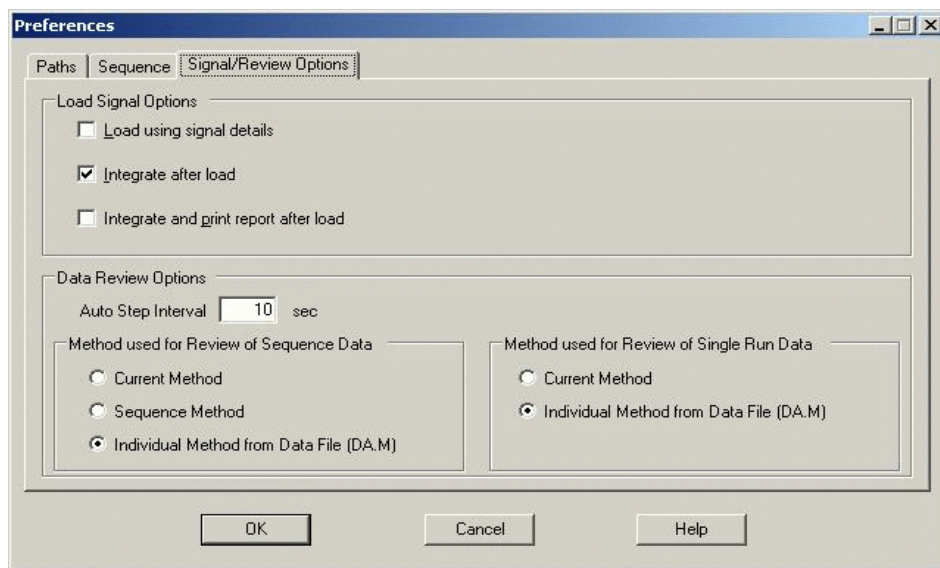


Figura 10 Cuadro de diálogo **Preferences/Ficha Signal/Review Options**

La primera sección, **Load Signal Options**, especifica qué señales de un análisis se cargan y si los cromatogramas van a integrarse y se va a realizar un informe con los resultados directamente después de la carga.

En la segunda sección, **Data Review Options**, se puede configurar el intervalo de desplazamiento por los análisis en la tabla de navegación automáticamente.

3 Análisis de datos

Análisis de datos: Revisión de datos

El resto de la sección especifica el método que se carga durante la revisión de datos al cargar un análisis desde la tabla de navegación. Esto solo se aplica a la revisión de datos, no al reprocesamiento. Los siguientes conjuntos de opciones independientes están disponibles para análisis de secuencias y análisis individuales:

Tabla 1 Opciones de revisión de datos para datos de análisis individuales y datos de secuencias

Método utilizado para la revisión de datos de secuencias	Método utilizado para la revisión de datos de análisis individuales
Método actual	Método actual
Método de secuencia	Método individual de un fichero de datos (DA.M)
Método individual de un fichero de datos (DA.M)	

NOTA

Las opciones de la ficha **Signal/Review Options** del cuadro de diálogo **Preferences** sólo se aplican cuando se carga un archivo de datos desde la tabla de navegación. Cuando se utiliza la opción **Load Signal** del menú **Archivo** o el icono correspondiente de la barra de menú principal, las opciones de configuración no se aplican, es decir, no se carga el método.

Mantener “Método actual”

El parámetro de revisión **Current Method** deberá utilizarse siempre que se quiera usar el método cargado actualmente. A este respecto, para la revisión de datos se mantiene el método actual, con independencia del fichero de datos de análisis individuales o del fichero contenedor de secuencias que esté cargado. Puede habilitar esta opción seleccionando **Current Method** en el cuadro de diálogo **Preferences** (véase [Figura 11](#) en la página 25). Con ello se garantiza que, para cada análisis cargado, se mantiene siempre el mismo método en la memoria.

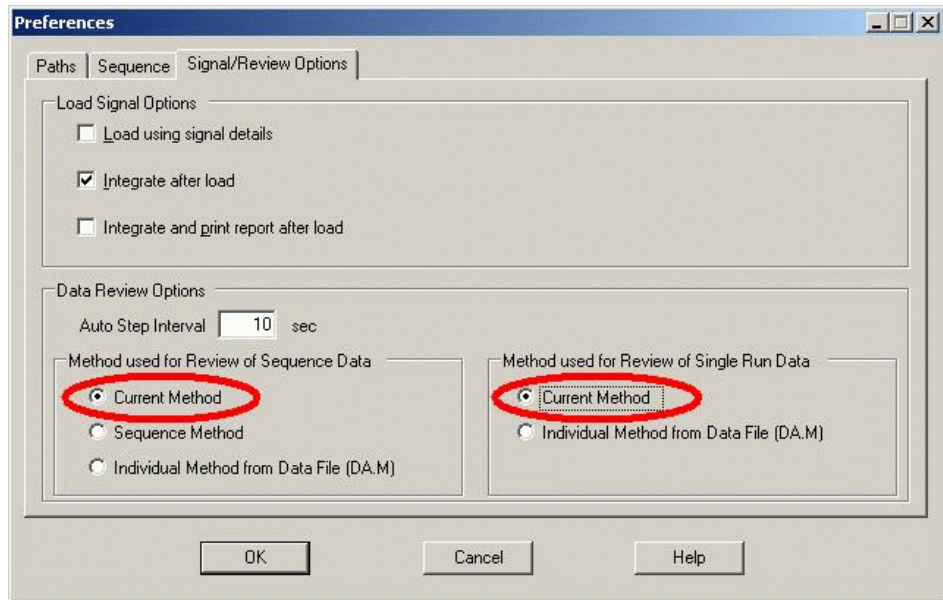


Figura 11 Mantenimiento del método actual para la revisión de datos

Puede utilizar esta opción, por ejemplo, en los siguientes flujos de trabajo:

- Desea revisar los archivos de datos del contenedor de secuencias con un método diferente que no está actualmente en el contenedor, por ejemplo, un método maestro que no se utiliza para la adquisición porque el flujo de trabajo emplea métodos de adquisición y análisis de datos separados. Al inicio de la revisión, se carga este método maestro diferente y la forma más práctica es desde la ficha **Method** del Explorador de ChemStation.
- En la sesión en línea, desea editar el método maestro utilizado para adquirir el contenedor de datos. Desea editar tanto los parámetros del instrumento, como los parámetros del análisis de datos como punto de partida inmediato para el siguiente análisis de secuencias de adquisición.
- Ha editado los parámetros de análisis de datos del método individual DA.M para uno de los análisis de sus contenedores de secuencias. Con la opción **Current Method**, puede revisar todos los análisis empleando este método con el fin de comprobar si estos parámetros también se adecuan a otros análisis.

Carga de “Método de secuencia”

Cuando revisa los datos utilizando la opción **Sequence Method** (véase [Figura 12](#) en la página 26), cada vez que carga un análisis desde la tabla de navegación, se carga el método de secuencias correspondiente a la línea de secuencias del análisis. Como su nombre indica, esta opción sólo se encuentra disponible para la revisión de conjuntos de datos de secuencias, pero no para análisis únicos.

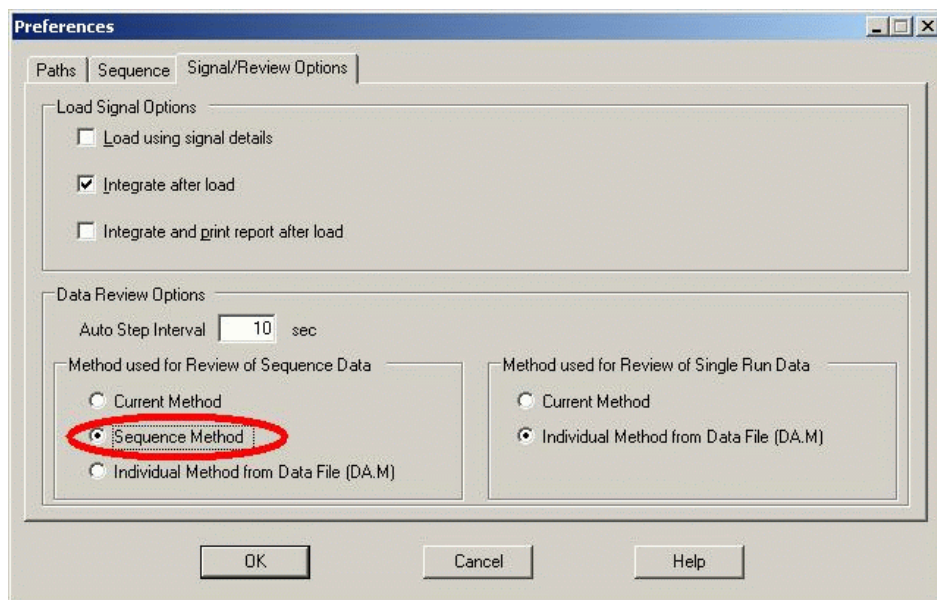


Figura 12 Carga del método de secuencia para la revisión de datos

Una aplicación típica de esta opción es la optimización de los parámetros de análisis de datos específica para cada secuencia, en especial como preparación para el reprocesamiento (véase [“Análisis de datos: reprocesamiento de datos”](#) en la página 33). Una vez revisados todos los análisis y mejorados los métodos de secuencia, la secuencia completa puede reprocesarse con los métodos actualizados.

Quizás sea necesario propagar los cambios en el método de secuencias al método maestro correspondiente para alimentar todos los futuros análisis de adquisición. Puede llevarlo a cabo fácilmente utilizando, por ejemplo, la función **Update Master Method** (véase [Tabla 3](#) en la página 32).

Carga de “Método individual de un fichero de datos (DA.M)”

El parámetro de revisión **Individual Method from Data File (DA.M)** (véase [Figura 13](#) en la página 27) debe utilizarse si se desea cargar automáticamente el DA.M individual junto con el fichero de datos correspondiente, cuando este fichero se cargue utilizando la tabla de navegación. Al cambiar un método y cargar después el análisis siguiente, se le pedirá que guarde los cambios del método, debido a la carga de un nuevo método: el DA.M del siguiente análisis.

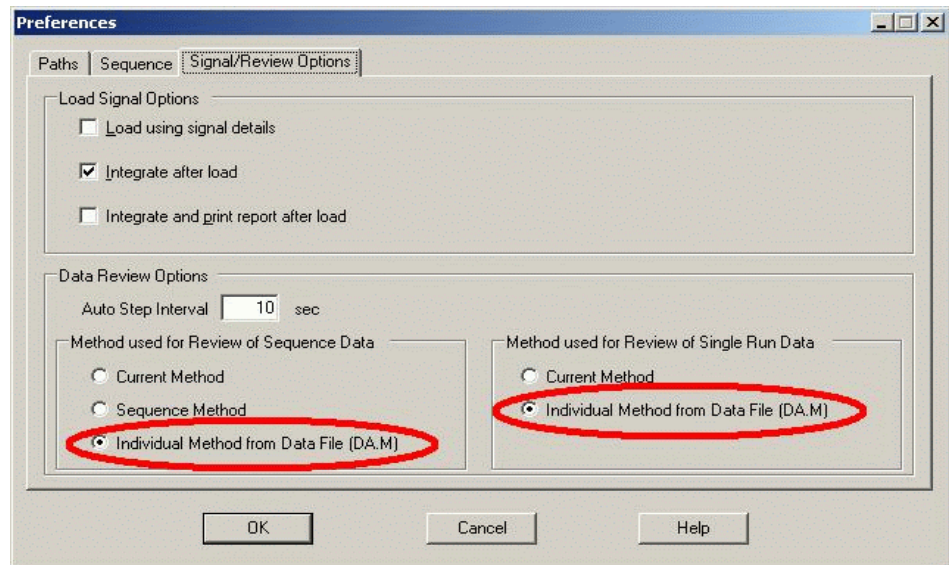


Figura 13 Carga del método individual de un fichero de datos para la revisión de datos

Con el método de análisis de datos individual (DA.M), se pueden realizar cambios específicos para cada análisis y guardarlos en el método de análisis de datos individual del análisis. Esta posibilidad resulta útil en el caso de cromatogramas complejos que requieren eventos de integración cronometrados e individuales para varios análisis de una secuencia.

NOTA

Quando se reprocesa una secuencia, todas las acciones se llevan a cabo en los métodos de secuencias y el DA.M de cada dato se sobrescribe, incluidos los cambios que ha guardado en estos métodos. La optimización de DA.M debe ser el último paso del análisis de datos después del reprocesamiento final.

Tratamiento de los eventos de integración manual

Los eventos de integración manual, por ejemplo, una línea de base trazada manualmente, son todavía más específicos de cada archivo de datos que los eventos de integración cronometrados. En el caso de cromatogramas complejos, es muy recomendable poder utilizar estos eventos para el reprocesamiento.

Por lo tanto, en ChemStation B.04.01 y versiones posteriores, los eventos de integración manual pueden almacenarse directamente en el archivo de datos en lugar del método. En el momento en el que se recibe o vuelve a procesarse el archivo de datos, los eventos manuales del archivo de datos se aplican de forma automática. Los análisis que contienen eventos de integración manual se marcan en la columna correspondiente de la tabla de navegación.

Además de las herramientas para dibujar una línea de base y eliminar manualmente un pico, existen tres herramientas adicionales disponibles en la interfase de usuario para

- Guardar en el archivo de datos eventos manuales de los cromatogramas que se están visualizando,
- Quitar todos los eventos de los cromatogramas que se están visualizando,
- Deshacer los últimos eventos de integración manual (disponibles hasta que se guarda el evento).

Al continuar con el siguiente archivo de datos durante una revisión en la tabla de navegación, ChemStation realizará una revisión en busca de eventos de integración manual sin guardar y preguntará al usuario si desea guardarlos.

Los eventos manuales guardados en el archivo de datos durante una revisión en la tabla de navegación no interfieren con los eventos de integración manual almacenados durante una revisión en el modo **Batch**. Estas dos formas de revisión son completamente independientes con respecto a los eventos manuales de un archivo de datos.

En las revisiones de ChemStation anteriores a la B.04.01, los eventos de integración manual sólo podían guardarse en el método. En la revisión B.04.01, todavía se puede utilizar este flujo de trabajo. El menú **Integración** de la vista **Data Analysis** proporciona los siguientes elementos para gestionar eventos de integración manual con el método:

Update Manual Events of Method: Guardar eventos manuales extraídos recientemente en el método.

Apply Manual Events from Method: Aplicar los eventos manuales guardados actualmente en el método al archivo de datos cargado en ese momento.

Remove Manual Events from Method: Eliminar los eventos manuales del método.

Para convertir eventos manuales almacenados en un método para guardarlos en el archivo de datos, aplique los eventos del método y guarde los resultados en el archivo de datos. Si lo desea, quite los eventos del método.

En el caso de que la casilla **Manual Events** de la **Integration Events Table** de un método esté marcada, los eventos manuales del método se aplican siempre al cargar un archivo de datos utilizando este método. Si el archivo de datos contiene eventos manuales adicionales, estos se utilizan. Cuando la casilla **Manual Events** está marcada, nunca se le pide al usuario que guarde los eventos en el archivo de datos.

Interfase de usuario de la ChemStation durante la revisión de datos

La interfase de usuario de la ChemStation proporciona una serie de funciones que facilitan el trabajo con los diferentes métodos disponibles para el análisis de datos (Figura 14 en la página 30).

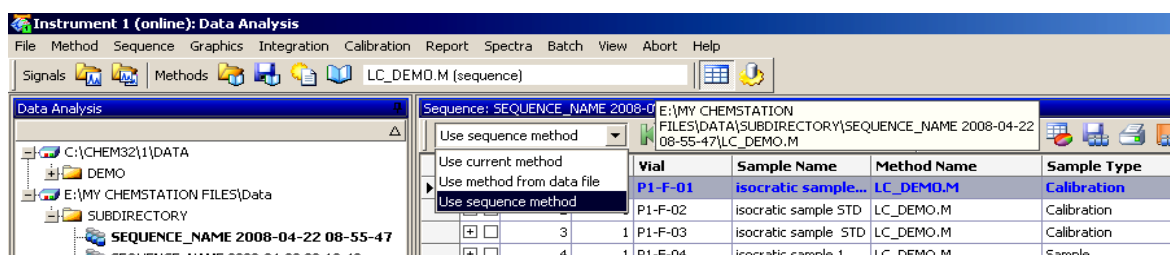


Figura 14 Interfase de usuario de análisis de datos

- El estado de la modificación del método se muestra en la vista **Data Analysis** para facilitar el seguimiento de cambios del método que no guardados. La interfase de usuario muestra siempre el nombre del método cargado actualmente (junto con la información de si se trata de un método de análisis de datos individual de un fichero de datos o de un método de secuencia).
- Al mover el puntero del ratón sobre ese campo, la punta de una herramienta muestra además la ruta completa y el nombre del método.
- Un cuadro desplegable proporciona un “acceso directo” a las opciones del método del cuadro de diálogo **Preferences**. Puede habilitar directamente cualquiera de las opciones disponibles y se aplicará la próxima vez que cargue un análisis desde la tabla de navegación. Además, resulta muy práctico ver qué opción está activa actualmente. Observe que estas opciones solamente se aplican a la revisión de datos, no al reprocesamiento.

Cómo guardar métodos en la vista Análisis de datos

Durante el trabajo en la vista **Data Analysis**, el usuario optimiza los parámetros de análisis de datos de sus métodos. Además de guardar un método, es probable que el flujo de trabajo también requiera, por ejemplo, guardar un método de secuencias con un nombre diferente o como método maestro en el directorio de métodos maestros.

El menú **Method** del análisis de datos ofrece varias opciones para guardar el método:

Tabla 2 Opciones Guardar del menú Método de la vista Análisis de datos

Preferencias de carga de métodos	Opciones Guardar disponibles
Método actual	Guardar método
	Guardar método como
Método de secuencia	Guardar método de secuencias
	Guardar como método maestro nuevo
Método individual de un archivo de datos	Guardar método de archivo de datos
	Guardar como método maestro nuevo

La opción **Save as new Master Method** para los métodos de secuencias y los métodos individuales DA.M tiene el directorio de métodos maestros preseleccionado como directorio de destino de manera predeterminada.

Actualización de la función del método maestro

Además, el menú **Method** proporciona la posibilidad de hacer que sólo estén disponibles los parámetros de análisis de datos para el método maestro o de secuencias que ha desarrollado para el método individual. Esta opción, **Update Master Method** o **Update Sequence Method** está disponible desde el menú **Method** o al hacer clic con el botón secundario en la tabla de navegación del análisis correspondiente.

Esta función está disponible en las situaciones siguientes:

3 Análisis de datos

Interfase de usuario de la ChemStation durante la revisión de datos

Tabla 3 Disponibilidad de la actualización ... Funcionalidad del método

Método cargado	Opciones disponibles
Método de análisis de datos individual (DA.M)	Actualizar método maestro Actualizar método de secuencia
Método de secuencia	Actualizar método maestro
Método maestro	—

Es importante tener en cuenta que esta función sólo actualiza parámetros de análisis de datos del método de destino y que no sobrescribe todos los parámetros de análisis de datos.

NOTA

Por motivos técnicos, además de los parámetros de análisis de datos, el Seguimiento de auditoría del método de destino también se sobrescribe con el Seguimiento de auditoría del método de origen.

3 Análisis de datos

Análisis de datos: reprocesamiento de datos

NOTA

Cuando se reprocesa una secuencia, todas las acciones se llevan a cabo en los métodos de secuencias y el DA.M de cada dato se sobrescribe, incluidos los cambios que ha guardado en estos métodos. La optimización de DA.M durante la revisión de datos debe ser el último paso del análisis de datos después del reprocesamiento final.

- Si desea añadir nuevos métodos de uno de los directorios de métodos maestros a la tabla de secuencia, deberá usar el elemento de **Browse** de la lista de métodos para acceder a cualquier directorio de método especificado (sólo los métodos que ya se encuentran en el contenedor de secuencia están disponibles sin necesidad de navegación). El nuevo método también se copia en el contenedor de secuencia durante el reprocesamiento. Esto implica que no puede seleccionar un método con el mismo nombre que el de un método que ya exista en el contenedor.

Line	Vial	Sample Name	Method Name	Inj/Vial	Sample Type	Cal Level	Update RF
1	P1-F-01	isocratic sample ST	LC_DEMO	1	Calibration	1	Replace
2	P1-F-02	isocratic sample ST	Browse...	1	Calibration	2	Replace
3	P1-F-03	isocratic sample S	LC_DEMO	1	Calibration	3	Replace
4	P1-F-04	isocratic sample 1	LC_DEMO	1	Sample		

Figura 16 Acceso al directorio de métodos maestros de la tabla de secuencias

- En la tabla de secuencias, no se puede agregar ni quitar líneas.
- En el cuadro de diálogo **Sequence Parameters**, puede cambiarse el comentario de la secuencia y el uso de la información de la tabla de secuencia. Todos los demás campos deben definirse durante la adquisición de datos o no se aplican al reprocesamiento.

Sequence Parameters: Instrument 1

Operator Name: Joe Smith

Data File

Path: E:\My ChemStation Files\Data\ Subdirectory:

Auto Prefix: Counter:

Prefix/Counter SIG1 000001

Part of methods to run

Reprocessing Only

Use Sequence Table Information

Wait: 0 minutes after loading a new method

Shutdown

Post-Sequence Command/Macro

Not Ready Timeout: 0 minutes

Bar Code Reader

Use In Sequence On a bar code mismatch Inject anyway Don't inject

Fraction Information

Fraction Start Location:

ChemStore

Transfer Settings...

Sequence Comment:

OK Cancel Help

Figura 17 Parámetros de secuencia en el análisis de datos

Cómo guardar secuencias en la vista Análisis de datos

El menú **Sequence** no sólo ofrece la posibilidad de guardar la secuencia después de modificar la tabla de la secuencia, los parámetros de la secuencia o los parámetros de salida de la secuencia, sino que, además, permite guardar una secuencia de análisis de datos (que se guarda en un contenedor de secuencias) como plantilla de secuencias.

Esta función puede resultar útil cuando se añaden líneas de secuencia a la tabla de secuencias directamente durante la adquisición. Estas líneas adicionales sólo se encuentran disponibles en ese contenedor de secuencias específico y no en la plantilla de secuencias original.

3 **Análisis de datos**

Análisis de datos: reprocesamiento de datos

Al guardar una secuencia en una plantilla de secuencias nueva, se convierte automáticamente el archivo de secuencias para que todos los campos se puedan volver a editar.



4

Flujo de trabajo con la Unique Folder Creation desactivada

¿Trabajar con la Unique Folder Creation activada o desactivada? 38

Flujo de trabajo con la Unique Folder Creation desactivada 40

Migración de contenedores de secuencia 44

En este capítulo se ofrece información sobre cómo trabajar con la opción **Unique Folder Creation** desactivada, lo que le permite almacenar datos como en las revisiones B.01.03 o anteriores de la ChemStation. Este modo no aprovecha todas las ventajas de la últimas funciones de revisión de datos y reprocesamiento de la ChemStation.



¿Trabajar con la Unique Folder Creation activada o desactivada?

El nuevo concepto de datos tal como se ha descrito en los capítulos anteriores ofrece varias ventajas:

- Los datos de secuencia no se sobrescriben. Cada adquisición de secuencia almacena los archivos de datos resultantes en su propio contenedor de secuencias con un nombre único.
- Con el concepto de contenedor de secuencia, los datos se almacenan junto a toda la información necesaria para el análisis de datos, es decir, copias del fichero de secuencia y de todos los métodos utilizados con la secuencia. Estos métodos pueden modificarse con una entrada específica de secuencia y no influyen en el método maestro original. Por lo tanto, el concepto de contenedor refuerza el significado de una secuencia como un conjunto de archivos de datos y métodos pertenecientes a la creación de resultados.
- En la vista **Data Analysis** se puede realizar la revisión y el reprocesamiento de datos a través de la tabla de navegación.
- El concepto de contenedor de datos proporciona el preacondicionamiento óptimo para la Opción ChemStation OpenLAB, lo que permite el intercambio de datos con el *gestor de contenidos empresariales (ECM) OpenLAB de Agilent*.

Sin embargo, puede haber situaciones en las que los usuarios quieran almacenar sus datos como en la revisión B.01.03 o anteriores de la ChemStation y trabajar de acuerdo con los flujos de trabajo correspondientes:

- Durante la implementación de métodos puede resultar más cómodo tener sólo un método tanto para la adquisición como para el análisis de datos de forma que los cambios estén disponibles automáticamente para adquisiciones y reanálisis futuros de datos ya adquiridos.
- Los datos de varias adquisiciones deben estar en una carpeta, p. ej., en el caso de una adquisición parcial.
- Las macrosoluciones personalizadas de un sistema ChemStation diseñadas para revisiones anteriores pueden requerir que los datos, métodos o secuencia se almacenen de acuerdo con el esquema organizativo de datos antiguos.

- Cuando la ChemStation B0,04.01 se ejecuta en un laboratorio en el que también existe un sistema que funciona con las revisiones B.01.03 o anteriores de la ChemStation, puede ser más práctico utilizar el mismo modo organizativo de datos en todos los sistemas.

Flujo de trabajo con la Unique Folder Creation desactivada

Para poder trabajar con un concepto de almacenamiento de datos como el de las revisiones de la ChemStation anteriores a la B.02.01, la ficha **Sequence** del cuadro de diálogo **Preferences** tiene una sección Almacenamiento de datos. Aquí puede elegir entre **Unique Folder Creation ON** y **Unique Folder Creation OFF** (Figura 18 en la página 40). Por defecto, está seleccionada **Unique Folder Creation ON**. **Unique Folder Creation ON** habilita el concepto de almacenamiento de datos tal como se ha descrito en los tres capítulos anteriores.

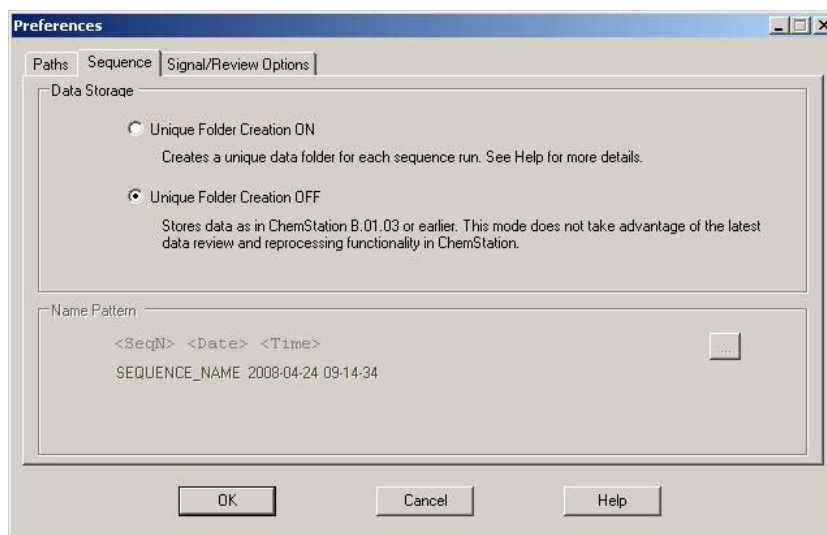


Figura 18 Cuadro de diálogo Preferences/Ficha Sequence

NOTA

La activación o desactivación de la **Unique Folder Creation** sólo afecta a las adquisiciones futuras, pero no modifica la organización de datos de los datos ya adquiridos.

NOTA

Le recomendamos que decida entre estos dos métodos al comienzo del trabajo y que no alterne entre ellos.

Con ChemStation OpenLAB y la opción de seguridad ChemStore/Security Pack no se puede desactivar la opción Creación de carpeta única.

Seleccionar **Unique Folder Creation Off** afecta del modo siguiente al almacenamiento de datos:

- Los datos de secuencia no se adquieren en un contenedor de secuencias, sino directamente en el subdirectorío tal como se ha especificado en los **Sequence Parameters** (Figura 4 en la página 14). Por lo tanto, la estructura del nombre de secuencia aparece atenuada en la ficha **Sequence** del cuadro de diálogo **Preferences** (Figura 18 en la página 40).
- Esto quiere decir que para adquisiciones de dos o más secuencias, los datos pueden adquirirse en el mismo subdirectorío. Esto implica el riesgo de sobrescribir los datos existentes, pero por otro lado permite dividir secuencias mediante una ejecución de secuencias parcial y seguir combinando los resultados en una carpeta (lo cual no sería posible teniendo activa la opción **Unique Folder Creation** .
- Con los datos no se almacena ningún método de secuencia (.M) ni copia del fichero de secuencias (.S), sino sólo el fichero de registro de secuencias y el fichero de lotes (.B). Esto quiere decir que sólo están disponibles los métodos y secuencias de las rutas especificadas en el cuadro de diálogo **Preferences** (Figura 2 en la página 12). Estos deben utilizarse tanto para la adquisición como para la revisión y el reprocesamiento de datos. Los cambios de método específicos de secuencias o archivos de datos sólo pueden almacenarse guardando el método con un nombre diferente. De no hacerlo así, estos cambios se aplicarán también al método de adquisición. Por otro lado, este comportamiento puede ser deseable durante el desarrollo del método.
- No hay métodos específicos de archivos de datos ACQ.M y DA.M almacenados. Sólo es posible guardar la información sobre la adquisición original incluyendo dicha información en el informe o seleccionando **Save Method with Data** en la lista de control de rutinas del método (Figura 19 en la página 42). Con esta opción, el método de adquisición se guardará como RUN.M en cada fichero de datos.

4 Flujo de trabajo con la Unique Folder Creation desactivada

Flujo de trabajo con la Unique Folder Creation desactivada

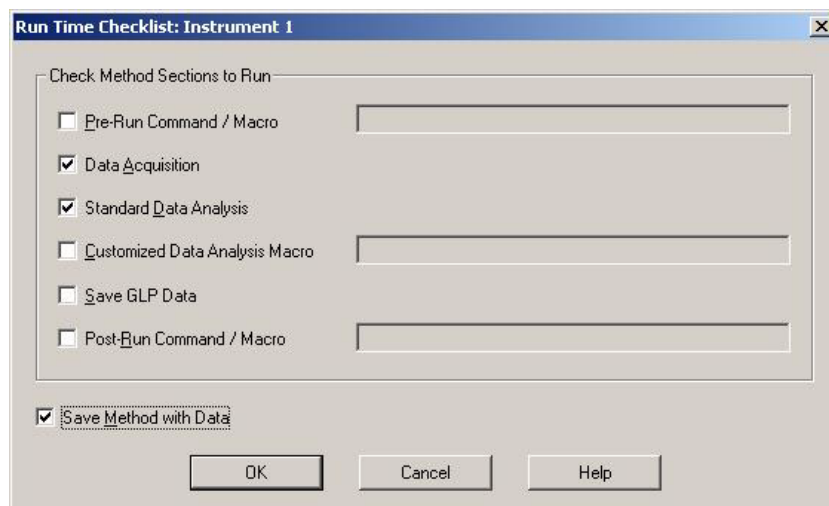


Figura 19 Lista de control de análisis: Guardar método con datos

La interfase de usuario mejorada de la ChemStation que se incluye con la ChemStation B.02.01 también está disponible cuando la opción **Unique Folder Creation** está desactivada. Sin embargo, hay funciones que no pueden aprovecharse en este modo. Estas mismas limitaciones se aplican también a cualquier análisis adquirido con revisiones de la ChemStation anteriores a la B.02.01.

- Cuando hay una secuencia cargada en la tabla de navegación, el conjunto de herramientas de reprocesamiento aparece atenuado (Figura 20 en la página 42). Las secuencias adquiridas en este modo de almacenamiento de datos sólo se procesan en la vista **Method and Run Control** utilizando la opción **Reprocessing only** de Parámetros de secuencia (Figura 21 en la página 43).

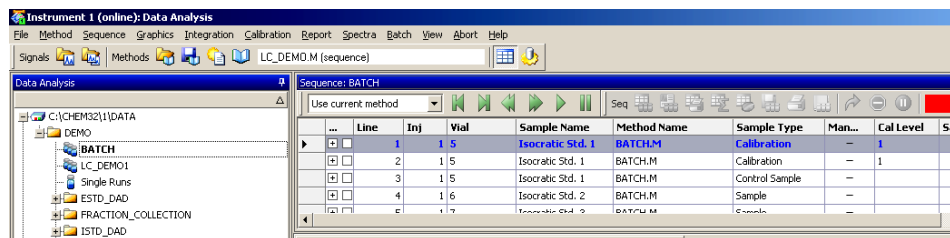


Figura 20 Tabla de navegación para secuencias adquiridas con la **Unique Folder Creation** desactivada

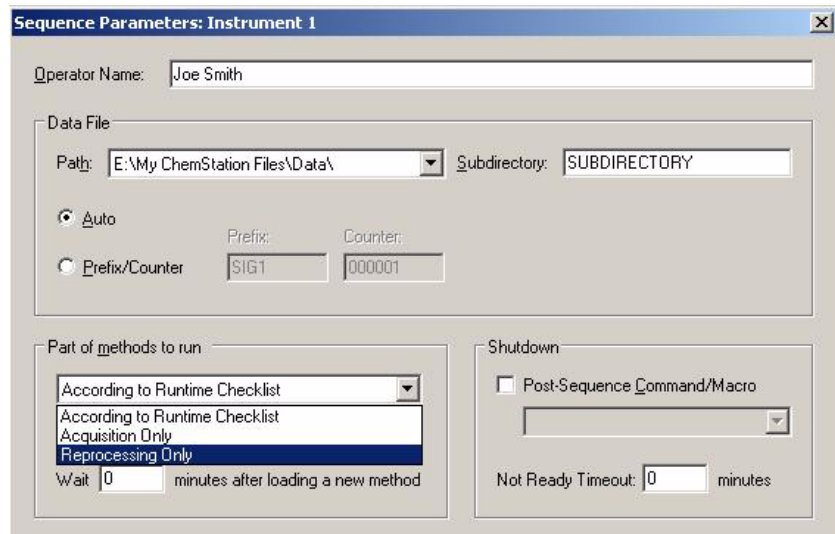


Figura 21 Reprocesamiento de datos de secuencia adquiridos con la **Unique Folder Creation** desactivada

- Con las opciones de uso de método **Individual Method from Data File** y **Sequence Method** (véase [Figura 10](#) en la página 23), aparecerá un mensaje de advertencia cada vez que haga doble clic en un análisis de la tabla de navegación cuyo método individual/método de secuencias no exista. Tal y como se ha descrito anteriormente, estos métodos no se almacenan con los datos. En este caso, la única opción importante para la revisión de datos es **Current Method**.

Migración de contenedores de secuencia

ChemStation proporciona una herramienta para migrar datos que no pertenezcan a un contenedor a un formato de contenedor de secuencias. Para realizar con éxito esta tarea, es necesario que esté disponible el archivo de secuencia original. Debe contener todas las líneas de secuencia necesarias y seguir el esquema de denominación de archivos de datos originales para reprocesar todos los archivos de datos de la secuencia. Asimismo, todos los métodos de la columna Método de la tabla de secuencias deben estar disponibles.

Para realizar la migración,

inicie **Sequence Container Migration** desde el menú **Sequence** de la vista **Data Analysis**.

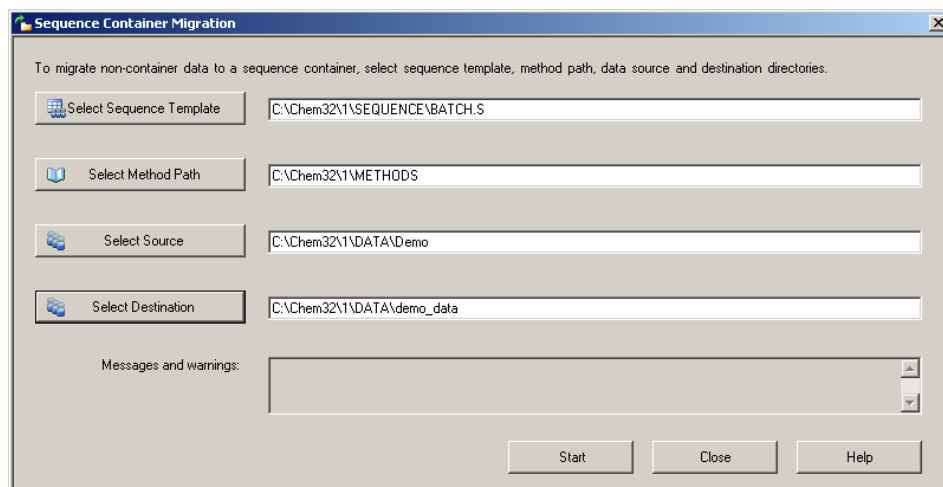


Figura 22 Migración de contenedores de secuencia

Rellene los siguientes campos obligatorios (véase [Figura 22](#) en la página 44):

Select Sequence Template: Seleccione el archivo de secuencia .S que contenga la tabla de secuencia que coincida con el conjunto de datos que desea migrar.

Select Method Patch: Seleccione el directorio en el que se encuentran los métodos a los que se hace referencia en la tabla de secuencia.

Select Source: Seleccione el directorio que contiene los archivos de datos que desea migrar.

Select Destination: Especifique la ruta y el nombre del contenedor de secuencias que desee crear. Puede seleccionar una carpeta existente o crear una nueva.

Una vez rellanados todos los campos, puede dar comienzo la migración.

Se realizarán los siguientes pasos:

- Se creará el directorio del contenedor de secuencias.
- La plantilla de secuencia se copiará en el contenedor. Asimismo, se convertirá a un estado en el que se pueda reprocesar archivos de datos en la vista **Data Analysis** (véase “[Análisis de datos: reprocesamiento de datos](#)” en la página 33).
- Los métodos a los que la tabla de secuencia hace referencia se copian desde la ruta de método especificada en la carpeta del contenedor.
- Los archivos de datos, el libro de registro de secuencia y el archivo de lotes se copian desde el directorio de origen de los datos al directorio de destino.
- De acuerdo con la información de la tabla de secuencia, se realiza una copia del método correspondiente en cada archivo de datos como DA.M.

Una vez finalizada la migración del contenedor, aparecerá un mensaje de migración correcta en el campo **Messages and Warnings**. En caso contrario, aparecerá un mensaje de advertencia para indicar que se produjo algún problema durante la migración.

Glosario UI

A

- Add
 - Agregar
- Apply Manual Events from Method
 - Aplicar eventos manuales del método

B

- Batch
 - Lote
- Browse
 - navegación

C

- ChemStation Data Analysis
 - Análisis de datos de la ChemStation
- Configuration Editor
 - Editor de configuración
- Current Method
 - Método actual

D

- Data
 - Datos
- Data Analysis
 - Análisis de datos
- Data Analysis Task
 - task de análisis de datos
- Data Review
 - Revisión de datos
- Data Review Options
 - Opciones de revisión de datos

I

- Individual Method from Data File
 - Utilizar método de fichero de datos
- Individual Method from Data File (DA.M)
 - Método individual de un fichero de datos (DA.M)
- Integration Events Table
 - tabla Eventos de integración

L

- Load Signal
 - Cargar señal
- Load Signal Options
 - Opciones de carga de señal

M

- Manual Events
 - Eventos manuales
- Messages and Warnings
 - Mensajes y advertencias
- Method
 - Método
- Method and Run Control
 - Control de análisis y método

N

- Name Pattern
 - Patrón de nombre
- New
 - Nuevo

O

- Ok
 - Aceptar

P

- Partial Sequence
 - Secuencia parcial
- Parts of method to run
 - partes del método que se va a analizar
- Paths
 - Rutas
- Preferences
 - Preferencias

R

- Remove
 - Quitar
- Remove Manual Events from Method
 - Quitar eventos manuales del método
- Reprocess
 - Reprocesar
- Reprocess Only
 - sólo reprocesar
- Reprocessing only
 - Sólo reprocesamiento

S

- Sample Info
 - Información de muestra
- Save as new Master Method
 - Guardar como Método maestro nuevo
- Save Method with Data
 - Guardar método con datos

Glosario UI

Select Destination	Update Sequence Method
Seleccionar destino	Actualizar método de secuencias
Select Method Patch	
Seleccionar parche de método	V
Select Sequence Template	View
Seleccionar plantilla de secuencia	Ver
Select Source	
Seleccionar origen	
Sequence	
Secuencia	
sequence container	
contenedor de secuencias	
Sequence Container Migration	
Migración de contenedores de secuencia	
Sequence Method	
Método de secuencias	
sequence methods	
métodos de secuencia	
Sequence Parameters	
Parámetros de secuencia	
Signal/Review Options	
Opciones de revisión/señalización	

U

Unique Folder Creation
Creación de carpetas únicas
Unique Folder Creation Off
Creación de carpetas únicas desactivada
Unique Folder Creation OFF
Creación de carpetas únicas desactivada
Unique Folder Creation ON
Creación de carpetas únicas activada
Update Manual Events of Method
Actualizar eventos manuales del método
Update Master Method
Actualizar método maestro

www.agilent.com

En este manual

Con la revisión B.02.01 o posterior de ChemStation, las prestaciones de revisión y reprocesamiento de datos han mejorado notablemente y ahora permiten revisar rápidamente los datos de los resultados.

Las nuevas funciones de almacenamiento de datos de la ChemStation ayudan a organizar de forma eficiente los métodos y datos de secuencia.

© Agilent Technologies 2006, 2007-2009

Printed in Germany
2/2009



G2170-95043



Agilent Technologies