

Agilent OpenLAB CDS edición ChemStation

Conceptos y flujos de trabajo



Agilent Technologies

Avisos

© Agilent Technologies, Inc. 2010-2011

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:

M8301-95012

Edición

07/2011

Impreso en Alemania

Agilent Technologies
Hewlett-Packard-Strasse 8
76337 Waldbronn

Este producto puede usarse como componente de un sistema de diagnóstico in vitro si dicho sistema está registrado ante las autoridades competentes y cumple la normativa aplicable. De lo contrario, únicamente está previsto para un uso general de laboratorio.

Revisión de software

Esta guía es aplicable a la revisión C.01.03 de Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition.

Microsoft © es una marca registrada de Microsoft Corporation en Estados Unidos.

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 esta guía...

Esta guía describe los conceptos de Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition.

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. Con la revisión C.01.01 de OpenLAB CDS ChemStation Edition y posteriores, se han mejorado las capacidades de almacenamiento y exploración de datos para que los datos de resultados se puedan revisar y reprocesar con rapidez.

En este manual se describe cómo utilizar eficientemente las nuevas funciones de almacenamiento y recuperación de datos de OpenLAB CDS ChemStation Edition para aumentar la productividad del laboratorio.

1 Introducción

En este capítulo se presenta una descripción general del Agilent OpenLAB CDS y las nuevas funciones disponibles en Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition. En lo que sigue, el término *ChemStation* se refiere a Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition.

2 Arquitectura del sistema OpenLAB CDS

Este capítulo contiene una explicación de las distintas opciones de configuración de OpenLAB CDS para cubrir todos los casos posibles.

3 Licencias de OpenLAB CDS ChemStation

En este capítulo se resumen los principales componentes y funciones de Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition y se describe la estrategia de licencias para esos componentes y funciones.

4 Seguridad e integridad de los datos

En este capítulo se explican las características de seguridad integradas y el modo en que se atienden a la norma 21 CFR Parte 11 de la FDA. También se explican las funciones de seguridad que tienen los Shared Services.

5 OpenLAB Shared Services

Accesibles a través del OpenLAB Control Panel, los Shared Services ofrecen funciones de control tales como las de acceso centralizado, configuración centralizada o el estado del laboratorio de un vistazo. Esas funciones se describen en más detalle en este capítulo.

6 Conceptos básicos de OpenLAB CDS ChemStation Edition

Este capítulo explica los principios de trabajo con ChemStation, incluidos el control remoto, la interfase gráfica y las vistas de ChemStation.

7 Trabajar con métodos

Los métodos son una parte fundamental de ChemStation. En este capítulo se explican los conceptos con detalle.

8 Adquisición de datos

Este capítulo contiene una introducción al proceso de adquirir datos.

9 Automatización/Secuencias

En este capítulo se describen los conceptos de automatización. Se explica cómo utilizar secuencias en ChemStation, qué ocurre cuando se analiza una secuencia y cómo personalizar secuencias.

10 Conceptos de análisis y revisión de datos

En este capítulo se explican resumidamente las opciones de análisis de datos y revisión de datos. En OpenLAB CDS ChemStation Edition, estas opciones están disponibles en dos vistas separadas.

11 Calibración

En este capítulo se explican los conceptos de calibración.

12 Elaboración de informes

En este capítulo se describen los conceptos de Intelligent Reporting y Classic Reporting.

13 Funciones y conceptos específicos de CE

Este capítulo es importante únicamente si se utiliza ChemStation para controlar instrumentos de CE.

14 Apéndice

Este capítulo contiene información sobre manuales relacionados y los privilegios empleados en OpenLAB Shared Services.

Contenido

1	Introducción	9
	Novedades	10
	OpenLAB CDS	12
	OpenLAB Shared Services	14
	OpenLAB CDS ChemStation Edition	15
2	Arquitectura del sistema OpenLAB CDS	17
	Estaciones de trabajo	18
	Estaciones de trabajo en red	19
	Sistemas distribuidos	21
3	Licencias de OpenLAB CDS ChemStation	23
	Estructura general de productos	24
	Licencias	26
4	Seguridad e integridad de los datos	39
	Aspectos de seguridad	40
	Integridad de los datos	44
5	OpenLAB Shared Services	45
	Administración de instrumentos	46
	El estado del laboratorio de un vistazo	47
	Administración de licencias	48
	System Activity Log	49
	Proveedor de autenticación	50
	Política de seguridad	51
	Administración de usuarios	53
6	Conceptos básicos de OpenLAB CDS ChemStation Edition	57
	Control remoto de instrumentos	58
	Acerca del software ChemStation	61
	Estructura de datos de ChemStation	77

7	Trabajar con métodos	81
	Definición de método	83
	Partes de un método	84
	Tipos de métodos	86
	Creación de métodos	88
	Edición de métodos	89
	Administración de métodos	93
	¿Qué sucede cuando se ejecuta un método?	97
8	Adquisición de datos	105
	Definición de adquisición de datos	106
	Monitores en línea	109
	Libro de registro	110
	Información del estado	111
9	Automatización/Secuencias	113
	Definición de la automatización	115
	¿Qué son las secuencias y las plantillas de secuencia?	116
	Sequence Parameters	117
	Sequence Table	118
	Creación de secuencias(Secuencias y plantillas de secuencias)	119
	Easy Sequence	121
	Uso de secuencias (secuencias y plantillas de secuencias)	126
	Archivo de registro de secuencias	138
	¿Qué ocurre cuando se analiza una secuencia?	139
	Estructura del fichero de datos de la secuencia	141
	Operación postsecuencia	150
	Recalibración automática	151
	Especificación de recalibraciones	152
	Tipos de secuencia	155
10	Conceptos de análisis y revisión de datos	169
	Data Analysis	170
	Review	183

11 Calibración 187

- Definición de términos 188
- Tipos de calibración 189
- Calibration Table 196
- Suma de picos 197
- Muestras desconocidas 198
- Recalibración 199

12 Elaboración de informes 203

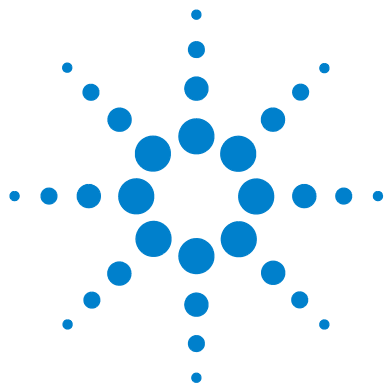
- Definición de informe 204
- Classic e Intelligent Reporting 205
- Intelligent Reporting 206
- Classic Reporting 214

13 Funciones y conceptos específicos de CE 227

- Funciones específicas de CE de la Agilent ChemStation en la vista Method and Run Control 228
- Tipo superior del pico 231
- Tipos de calibración 232
- CE-MSD 234
- Subdirectorios del método para modos CE diferentes 235

14 Apéndice 237

- Manuales de documentación 238
- Privilegios en OpenLAB Shared Services 239



1

Introducción

Novedades	10
OpenLAB CDS	12
OpenLAB Shared Services	14
OpenLAB CDS ChemStation Edition	15

En este capítulo se presenta una descripción general del Agilent OpenLAB CDS y las nuevas funciones disponibles en Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition. En lo que sigue, el término *ChemStation* se refiere a Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition.



Novedades

Agilent OpenLAB tiene una arquitectura abierta que contiene un catálogo de software de laboratorio e interfaces reutilizables y estandarizadas. Hay distintas soluciones OpenLAB para cada paso del ciclo vital de los datos científicos:

- Sistema de datos cromatográficos (CDS)
OpenLAB CDS está disponible en las ediciones EZChrom y ChemStation. En este manual se describe la edición ChemStation.
- Sistema de gestión de contenidos empresariales (ECM)
- Cuaderno de laboratorio electrónico (ELN)

OpenLAB CDS proporciona pleno control instrumental de aparatos LC, GC, CE, CE-MS y LC-MSD de Agilent. Ofrece herramientas para adquirir datos, analizarlos e interpretarlos con un sistema de control instrumental diseñado para instrumentos de múltiples técnicas y fabricantes. El software cromatográfico se inicia desde OpenLAB Control Panel, el panel de control de OpenLAB que ofrece acceso a todas las funciones proporcionadas por los servicios compartidos OpenLAB Shared Services (OLSS).

Novedades en OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.01

Dependiendo del tamaño de su laboratorio, puede instalar OpenLAB CDS bien como estación de trabajo independiente o como estación de trabajo en red.

En escenarios de estación de trabajo independiente, podrá utilizar toda la funcionalidad de ChemStation, incluidas todas las funciones nuevas tales como Intelligent Reporting (Informes inteligentes), Method Usage (Uso de métodos) o los distintos modos de Data Analysis (Análisis de datos).

En escenarios de estación de trabajo en red, podrá utilizar adicionalmente las funciones siguientes:

- Administración centralizada de usuarios
- Administración centralizada de instrumentos
- Administración centralizada de licencias
- Estado del laboratorio de un vistazo

Novedades en OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.02

A partir de la revisión C.01.02, OpenLAB CDS ChemStation Edition admite los escenarios de instalación siguientes:

- Instalación como sistema distribuido. Con instalaciones de sistema distribuido, podrá utilizar adicionalmente las funciones siguientes:
 - Configuración de instrumentos desde cualquier PC
 - Control de instrumentos desde cualquier PC
 - Reprocesamiento de datos en cualquier PC
- Sincronización de datos con el sistema de gestión de contenidos empresariales OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM). Es posible la conexión a ECM desde estaciones de trabajo, estaciones de trabajo en red o sistemas distribuidos.

Novedades en OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.03

OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.03 viene con las siguientes funciones nuevas:

- *Control instrumental: controladores adicionales*
Hay controladores RC.Net adicionales disponibles para instrumentación de LC, concretamente para bombas de flujo bajo, inyectores, válvulas y el colector de fracciones automatizado G1364D. OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.03 controla el GC micro 490.
- *Configuración instrumental mejorada*
OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.03 agiliza la configuración instrumental, haciéndola más rápida y más intuitiva.
- *Planificación y colas de secuencias*
El gestor de secuencias Easy Sequence permite ahora poner en la cola secuencias clásicas de ChemStation y pausas además de secuencias sencillas. Con el nuevo planificador de colas Queue Planner, es posible preparar un conjunto de secuencias por adelantado.
- *Visor de informes*
Un visor de informes facilita la consulta de informes de ChemStation. El visor Report Viewer se puede lanzar desde ChemStation y permite consultar los informes en formato PDF o TXT.

NOTA

Para obtener más información sobre cómo actualizarse desde C.01.xx a una versión posterior, consulte la guía de instalación de OpenLAB CDS correspondiente.

OpenLAB CDS

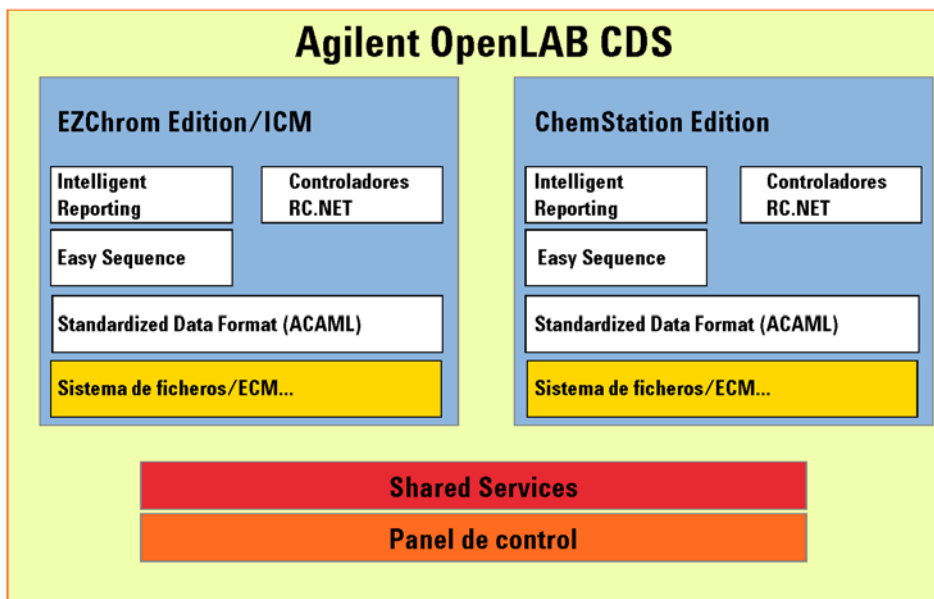


Figura 1 Arquitectura de OpenLAB CDS

OpenLAB CDS contiene los siguientes módulos de software e interfaz:

- **OpenLAB Control Panel**
El OpenLAB Control Panel permite acceder a los OpenLAB Shared Services.
- **OpenLAB Shared Services**
Estos servicios ofrecen acceso centralizado, capacidad de configuración centralizada, el estado del laboratorio de un vistazo y control remoto de los instrumentos. Las funciones centralizadas pueden utilizarlas todos los módulos de OpenLAB.
- **Módulo de control del instrumento y adquisición de datos (ChemStation / EZChrom)**
Este módulo está disponible tanto en la modalidad ChemStation como EZChrom. Ambas modalidades son compatibles con versiones anteriores,

por lo que podrá procesar datos adquiridos con versiones anteriores del software correspondiente. OpenLAB CDS ChemStation y OpenLAB CDS EZChrom comparten varias funciones comunes tales como Easy Sequence, los controladores RC.NET o Intelligent Reporting. Esta guía describe la OpenLAB CDS ChemStation Edition.

OpenLAB Shared Services

Ud. puede acceder a los OpenLAB Shared Services por medio del OpenLAB Control Panel. Los Shared Services contienen las siguientes funciones, que se pueden usar con todos los módulos OpenLAB:

- *Instrument Management*
Con él se puede controlar la información básica de los instrumentos. Dependiendo de la configuración se podrá acceder a esta información desde un solo PC o desde varias estaciones de trabajo de una red.
- *Lab status at a glance*
Con él se puede acceder de manera centralizada a la información básica relativa a los instrumentos. La información básica incluye el nombre, la ubicación y el estado (conectado o desconectado) de los instrumentos.
- *Remote Instrument Control*
Con una configuración de sistemas distribuidos, podrá configurar y controlar sus instrumentos desde cualquier PC con cliente CDS.
- *Activity Logbook Management*
Permite acceder de forma centralizada a todas las actividades del sistema, como son inicio de sesión de usuario, creación/borrado de usuarios, creación/configuración/cambio/borrado de instrumentos, etc.
- *User Management*
Podrá gestionar usuarios, grupos, roles y privilegios. En caso de gestionar a los usuarios dentro de un sistema ECM o un dominio de Windows, se podrán asignar dichos usuarios a los Shared Services.
- *License Management*
Este servicio permite administrar todas las licencias necesarias para los módulos de los instrumentos que posea y las expansiones. Se pueden añadir o eliminar licencias y ver el estado de todas las licencias. Las licencias pueden estar disponibles en un servidor de licencias individual o en servidores de licencias redundantes.

Al arrancar un instrumento, ChemStation comprueba automáticamente si están disponibles las licencias necesarias en el almacén de licencias, y reserva las licencias necesarias para utilizar el instrumento. Al detener el instrumento, las licencias liberadas las podrán usar otros instrumentos.

OpenLAB CDS ChemStation Edition

OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.03 viene con las siguientes funciones nuevas:

- *Intelligent Reporting*

Podrá crear y modificar plantillas de informes con toda facilidad con el Report Template Editor. Las plantillas de informes se guardan en el formato estandarizado Report Definition Language (RDL), que también se emplea con Microsoft Business Intelligence Studio.

Si en alguno de los métodos de secuencias se hace referencia a una plantilla de informes, dicha plantilla se copia automáticamente en el conjunto de resultados.

Cuando está activado Intelligent Reporting hay disponible una nueva vista Review. Esta vista le permite aplicar cualquier plantilla de informe a cualquier combinación de ficheros de datos.

- *Controladores RC.NET*

ChemStation es compatible con la tecnología de controladores RC.NET de Agilent que existe para la mayoría de módulos de instrumentos. Estos controladores sirven para que los instrumentos tengan una interfaz de instrumentos moderna e interactiva, idéntica a todas las aplicaciones que usen estos controladores. También existe la opción de usar los controladores clásicos.

- *Uso de métodos*

Puede cargar directamente métodos maestros y métodos de secuencias desde el ChemStation Explorer. La opción **Update Methods** permite sincronizar métodos maestros y métodos de secuencias.

- *Modos de Data Analysis*

Se puede elegir entre el modo Recalculation y el modo Reprocessing. El modo Reprocessing permite volver a procesar muestras en el contexto de una secuencia (p. ej., en el caso de una calibración agrupada, "bracketing"). El modo Recalculation permite volver a calcular rápidamente una muestra o un conjunto de muestras con un método diferente. Las funciones necesarias que lleva asociadas cada modo están disponibles en barras de herramientas diferentes.

- *Conjuntos de resultados*

A los contenedores ahora se les llama conjuntos de resultados (Result sets). Los métodos empleados en los conjuntos de resultados se pueden modificar durante las adquisiciones. Puede crear sus propios conjuntos de resultados con cualquier conjunto de datos existentes. También puede usar conjuntos de resultados constituidos por usted mismo; por ejemplo, para cálculos cruzados entre muestras.

- *Control remoto de instrumentos*

Desde la revisión C.01.02, ChemStation soporta el pleno control instrumental remoto en instalaciones de sistemas distribuidos. Podrá desconectarse de sesiones en un instrumento mientras éste sigue trabajando y volver a conectarse más tarde, tomar el control de sesiones en instrumentos desde un PC diferente o tomar el control de sesiones en instrumentos de otros usuarios.

- *Planificación y colas de secuencias*

A partir de la revisión C.01.03, es posible definir por adelantado una serie de secuencias que se van a ejecutar en algún momento posterior. Así es posible, por ejemplo, planificar tareas para realizar durante la noche o como trabajos de fin de semana. Para ello, ChemStation ofrece las funciones siguientes:

- Queue Plan (Plan de cola): Aquí se pueden seleccionar las secuencias pertinentes.
- Sequence Queue (Cola de secuencias): Esta función ya estaba disponible para secuencias sencillas y ahora admite también secuencias de ChemStation. Es posible programar directamente una secuencia individual o procesar todas las secuencias incluidas en un plan de cola.

- *Visor de informes*

A partir de la revisión C.01.03, el visor de informes Report Viewer ayuda a consultar y comparar resultados en la vista de análisis de datos. Es posible abrir directamente desde ChemStation el informe resumen de secuencia guardado o informes de inyecciones sencillas individuales, así como verlos o compararlos en ventanas flotantes separadas, utilizando tecnología PDF estándar.



2

Arquitectura del sistema OpenLAB CDS

Estaciones de trabajo 18

Estaciones de trabajo en red 19

Sistemas distribuidos 21

Este capítulo contiene una explicación de las distintas opciones de configuración de OpenLAB CDS para cubrir todos los casos posibles.



Estaciones de trabajo

En laboratorios pequeños se pueden instalar todos los componentes de OpenLAB CDS en una sola estación de trabajo. En consecuencia, el servidor de los Shared Services (OLSS) se ejecuta en el mismo PC que ChemStation.

En la figura siguiente se presenta la configuración de una estación de trabajo con OpenLAB CDS ChemStation. La figura sólo muestra una instancia de ChemStation, pero es posible configurar múltiples instancias de ChemStation e instrumentos asociados en la estación de trabajo.

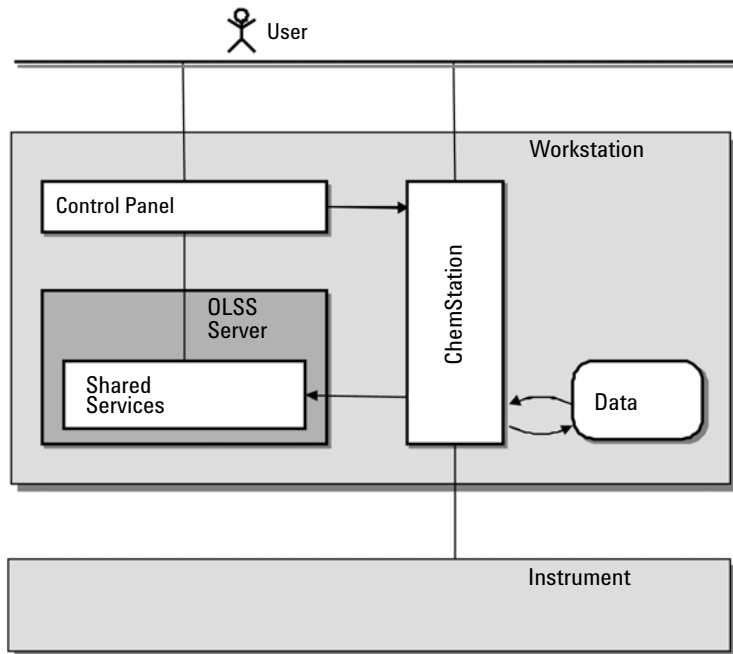


Figura 2 OpenLAB CDS: estación de trabajo

Podrá utilizar la configuración de OpenLAB CDS en estación de trabajo con o sin OpenLAB ECM. Si está conectado con ECM, los datos almacenados en el PC de ChemStation se sincronizan con los almacenados en ECM. Para obtener más información referente al uso de ChemStation con ECM, consulte la *Guía de conceptos de la opción OpenLAB CDS ChemStation con ECM*.

Estaciones de trabajo en red

En laboratorios grandes con muchos instrumentos conectados en red se pueden instalar los Shared Services en un PC aparte que actúe como servidor de Shared Services (servidor OLSS). En las estaciones de trabajo en red, los Shared Services se remiten al servidor exclusivo para Shared Services. En ese caso, se podrá acceder a toda la información que ofrecen los Shared Services desde cualquier estación de trabajo configurada en el servidor. Por ejemplo, se pueden ver los instrumentos que hay disponibles, su ubicación y el estado (Online, Offline, Error, In Run, Not Ready, etc.) que tienen en ese momento los instrumentos.

Puesto que no es posible controlar de manera remota las estaciones de trabajo en red, únicamente podrá iniciar y configurar instrumentos desde el PC concreto en el que configuró el instrumento.

En la figura siguiente aparece una OpenLAB CDS ChemStation con configuración de estaciones de trabajo en red. En la red puede haber conectadas múltiples estaciones de trabajo. La figura sólo muestra una instancia de ChemStation, pero es posible configurar múltiples instancias de ChemStation e instrumentos asociados en la misma máquina.

2 Arquitectura del sistema OpenLAB CDS

Estaciones de trabajo en red

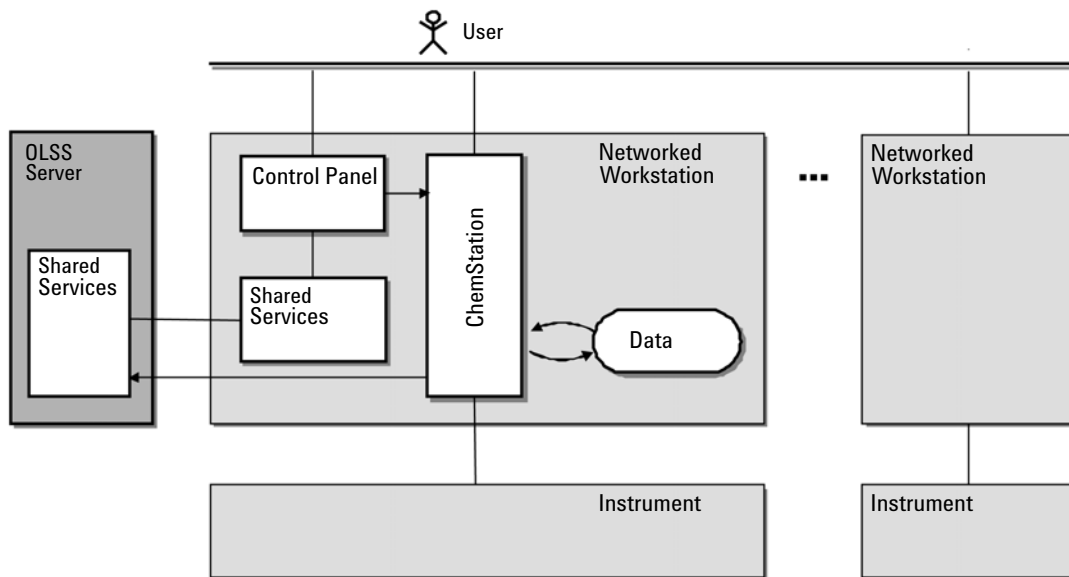


Figura 3 OpenLAB CDS: estación de trabajo en red

Podrá utilizar la configuración de OpenLAB CDS en estación de trabajo conectada en red con o sin OpenLAB ECM. Si está conectado con ECM, los datos almacenados en cada PC de ChemStation se sincronizan con los almacenados en ECM. Para obtener más información referente al uso de ChemStation con ECM, consulte la *Guía de conceptos de la opción OpenLAB CDS ChemStation con ECM*.

Sistemas distribuidos

NOTA

La configuración de sistema distribuido requiere OpenLAB ECM versión 3.3.2 SP1 o 3.4.1.

Con OpenLAB CDS instalado como sistema distribuido, podrá acceder a los instrumentos y hacerlos funcionar desde cualquier PC del sistema.

Como en la instalación en estaciones de trabajo conectadas en red, los Shared Services ofrecen una visión general de todos los instrumentos del sistema. Es posible acceder a toda la información facilitada por los Shared Services desde cualquier cliente CDS. Por ejemplo, se pueden ver los instrumentos que hay disponibles, su ubicación y el estado (Online, Offline, Error, In Run, Not Ready, etc.) que tienen en ese momento los instrumentos.

A diferencia de lo que ocurre en la instalación en estaciones de trabajo conectadas en red, también se pueden configurar e iniciar todos los instrumentos de la red. La configuración del hardware instrumental está instalada en máquinas de control de instrumentos Agilent Instrument Control (AIC). Es posible acceder a la instancia de ChemStation instalada en la máquina AIC desde cualquier cliente CDS a través de un cliente de Remote Desktop Services (Servicios de escritorio remoto).

El acceso a ChemStation a través de una conexión de escritorio remoto permite una mayor flexibilidad de trabajo en las sesiones con ChemStation. Usted podrá, por ejemplo, iniciar ChemStation en línea, iniciar una secuencia y seguidamente desconectar sólo la conexión de escritorio remoto mientras ChemStation continúa ejecutándose en la máquina AIC. Usted u otro usuario podrán volver a conectarse más tarde a esa sesión desde un cliente CDS diferente, terminar el trabajo en la ChemStation en línea y seguidamente apagar la ChemStation.

La figura siguiente muestra una instalación en sistemas distribuidos de OpenLAB CDS ChemStation Edition.

2 Arquitectura del sistema OpenLAB CDS

Sistemas distribuidos

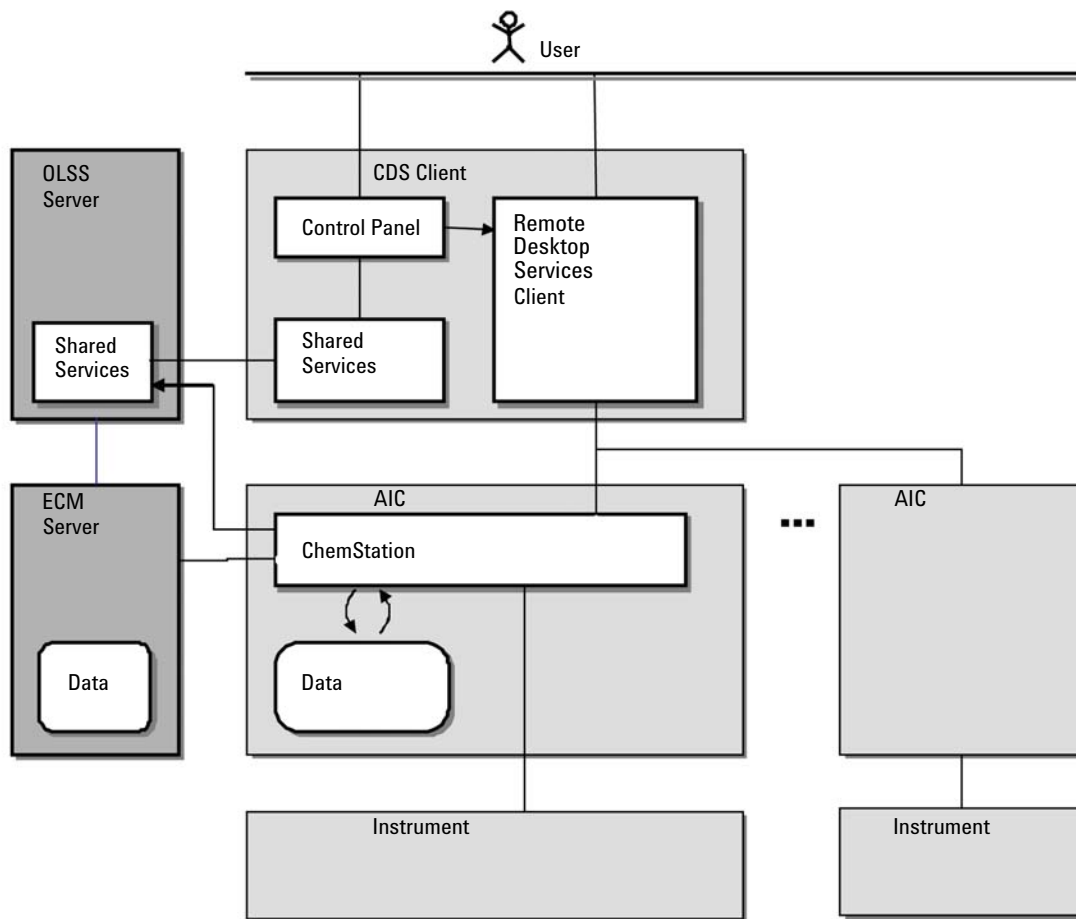


Figura 4 OpenLAB CDS: sistema distribuido

La configuración de sistema distribuido de OpenLAB CDS incluye siempre la conexión a un sistema OpenLAB ECM. Los datos almacenados en cada AIC se sincronizan con los almacenados en ECM. Para obtener más información referente al uso de ChemStation con ECM, consulte la *Guía de conceptos de la opción OpenLAB CDS ChemStation con ECM*.



3

Licencias de OpenLAB CDS ChemStation

Estructura general de productos 24

Licencias 26

Tipos de licencias 26

Esquema de licencias 26

Principales funciones objeto de licencia 28

Licencias asociadas a productos de Agilent OpenLAB CDS 30

Ejemplos de licencias 32

Licencias Value Line (VL) 34

Gestor de licencias Flexera 37

En este capítulo se resumen los principales componentes y funciones de Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition y se describe la estrategia de licencias para esos componentes y funciones.



Estructura general de productos

El producto OpenLAB CDS ChemStation Edition está diseñado como una combinación de módulos de software para control instrumental, adquisición y análisis de datos (integración, cuantificación y elaboración de informes), automatización y personalización. Los distintos productos instrumentales de técnicas específicas proporcionan capacidades de control para una técnica de separación determinada, p.ej., para un cromatógrafo de gases o de líquidos. La configuración de un instrumento se puede ampliar añadiendo módulos de software adicionales (módulos de expansión).

Las secciones siguientes describen los módulos de productos. Para obtener más información sobre las licencias de productos, consulte [“Esquema de licencias”](#) en la página 26.

Módulo principal

El módulo principal incluye funciones de análisis de datos, automatización y personalización para técnica de separación (no control instrumental) para las siguientes técnicas de separación:

- Cromatografía de gases (GC, Gas Chromatography)
- Cromatografía líquida (LC, Liquid Chromatography)
- Electroforesis capilar (CE, Capillary Electrophoresis)
- Adquisición de datos analógicos con protocolo de eventos externo (A/D)

Controladores de instrumentos

Los controladores de instrumentos específicos de cada técnica permiten usar las técnicas de separación enumeradas anteriormente. Al instalar varios controladores de instrumentos, Agilent ChemStation es capaz de controlar más de un sistema analítico, por ejemplo, dos cromatógrafos de la misma técnica de separación o diferentes.

El control instrumental del software ChemStation se puede ampliar adquiriendo módulos adicionales que permiten configuraciones de técnicas mixtas.

Expansiones

Los datos adquiridos son normalmente bidimensionales ("2D"), es decir, se mide la respuesta del detector en el tiempo. Los detectores espectroscópicos pueden generar datos tridimensionales ("3D") al medir también la respuesta del detector a lo largo de un tercer eje (por ejemplo, longitud de onda o rango de masas). Los siguientes módulos permiten analizar y elaborar informes con estos datos "3D":

- Expansión OpenLAB CDS ChemStation 3D UV
- Expansión OpenLAB CDS ChemStation CE 3D MS
- Expansión OpenLAB CDS ChemStation LC 3D MS
- Módulo de deconvolución y bioanálisis OpenLAB CDS ChemStation LC/MS

Licencias

Tipos de licencias

La nueva estrategia de licencias introducida con OpenLAB CDS le permitirá utilizar sus licencias de forma más eficaz. En contraposición a las revisiones anteriores de ChemStation, las licencias para control instrumental, controladores y módulos de expansión son *licencias flotantes*. Al iniciarse un instrumento, éste solicitará las licencias necesarias a License Management, y cuando se cierre el instrumento, éste devolverá las licencias. Por lo tanto, solamente se necesitarán licencias para cubrir el número máximo de instrumentos en funcionamiento simultáneo, en lugar de una para cada instrumento instalado. License Management forma parte de los Shared Services.

Las licencias son de dos tipos:

- Las *licencias nominales* se consumen una vez por cada módulo asociado de instrumento o de software.
- Las *licencias compartidas* se pueden compartir por PC o por instrumento. Por ejemplo, la licencia de Agilent OpenLAB CDS ChemStation es una licencia compartida, lo que significa que solamente se necesita una licencia por PC, independientemente del número de instancias de ChemStation que se ejecuten en él.

Hay una licencia de inicio de 60 días para toda la instalación de OpenLAB CDS. El periodo de caducidad empieza a contar a partir de la primera vez que se inicie una aplicación.

Esquema de licencias

Las figuras siguientes muestran las licencias que necesitará para OpenLAB CDS en los distintos escenarios de instalación:

- Estación de trabajo
 - Una licencia para el módulo principal de ChemStation

- Licencias para instrumentos y módulos de expansión como corresponda; es posible hacer trabajar múltiples productos instrumentales en la misma estación de trabajo.
- Estación de trabajo en red
 - Una licencia para servidor de Shared Services
 - Una licencia para el módulo principal de ChemStation por cada estación de trabajo en red; es posible conectar múltiples estaciones de trabajo en red al servidor de servicios compartidos.
 - Licencias para instrumentos y módulos de expansión como corresponda; es posible hacer trabajar múltiples productos instrumentales en la misma estación de trabajo en red.
- Sistema distribuido
 - Una licencia para servidor de Shared Services
 - Una licencia para el módulo principal de ChemStation por cada máquina de control instrumental Agilent Instrument Control (AIC); es posible conectar múltiples AIC al servidor de servicios compartidos.
 - Licencias para instrumentos y módulos de expansión como corresponda; es posible hacer trabajar múltiples productos instrumentales en la misma AIC.

Las licencias para control instrumental y licencias para controladores de Agilent van siempre conjuntas para los productos Agilent. Aparecen como una única licencia de producto en el administrador de licencias de Shared Services License Management. Solamente en el propio fichero de licencia es posible ver esos elementos en líneas separadas.

3 Licencias de OpenLAB CDS ChemStation

Licencias

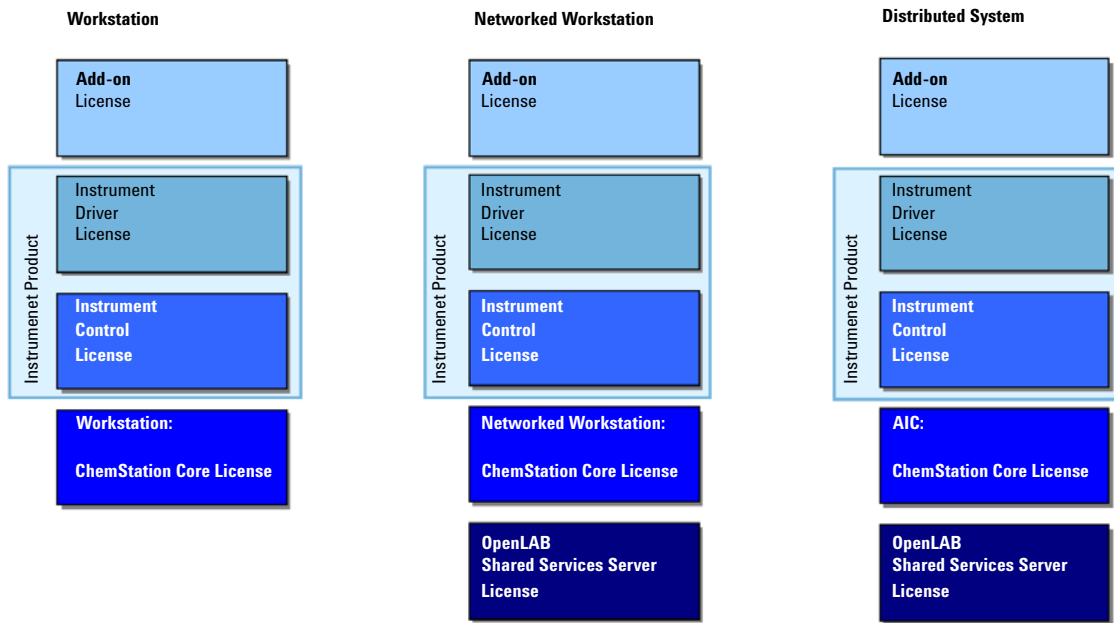


Figura 5 Esquema de licencias

Principales funciones objeto de licencia

En la tabla siguiente se presentan las principales funciones para las que son necesarias licencias. Al adquirir un producto de Agilent las licencias para las distintas funciones van ya incluidas de forma predeterminada. En las tablas siguientes se presentan las licencias asociadas a los productos de Agilent.

Tabla 1 Principales licencias

Nombre de la licencia	Tipo de licencia	Necesaria para	Comentarios
AgilentOpenLABCDSCchemStation	Compartida por PC	Todas las instancias de ChemStation.	Es la licencia completa para el módulo principal de ChemStation, que siempre se consume. Admite hasta cuatro instrumentos con el paquete de controladores completos para LC o controladores completos para GC (lo que incluye CE, ADC, CE/MS o LC/MS).
AgilentOpenLABCDSCchemStationVL	Compartida por PC	Todas las instancias de ChemStation VL.	Es la licencia para el módulo principal de ChemStation Value Line (VL), que siempre se consume. Admite únicamente controladores VL y es suficiente para controlar hasta cuatro instrumentos LC 1120/1220 Infinity o GC 7820.
AgilentOpenLABSharedServices	Nominales	Solamente para los Shared Services que se ejecuten en un servidor aparte.	El OpenLAB Control Panel no necesita una licencia extra. Tampoco los Shared Services que se ejecuten en una estación de trabajo OpenLAB CDS necesitan una licencia extra.
AgilentInstrumentControl	Nominal	Solamente para instancias en línea.	La licencia se consume tanto si ChemStation puede conectarse al instrumento como si no. La licencia de control instrumental forma parte de los controladores.
AgilentDriversLC AgilentDriversGC AgilentDriversCE AgilentDriversADC AgilentDriversMS	Nominales	Solamente para instancias en línea.	La licencia se consume tanto si ChemStation puede conectarse al instrumento como si no.
AgilentDriversLCVL AgilentDriversGCVL	Nominales	Solamente para instancias en línea.	Los controladores Value Line (VL) no están disponibles por separado. Siempre vienen incluidos con un instrumento (LC 1220 Infinity o GC 7820) Las licencias para controladores VL puede combinarse con una licencia para el módulo principal de ChemStation VL o una licencia para el módulo principal de ChemStation completa.

Tabla 1 Principales licencias

Nombre de la licencia	Tipo de licencia	Necesaria para	Comentarios
AddOn3DUV	Compartida (por instrumento)	Instancias en línea y fuera de línea (solamente si se selecciona la opción 3D en el Setup Wizard).	Esta licencia es opcional. Si no está disponible la licencia, se desactivan las funcionalidades de análisis espectral en ChemStation.
AgilentAddOnMSDataAnalysis	Compartida (por instrumento)	Instancias en línea y fuera de línea.	Si está configurado un MS, es obligatorio tener la expansión de análisis de datos MS.
AgilentAddOnMSDeconvolution	Compartida (por instrumento)	Instancias en línea y fuera de línea (solamente si se selecciona la opción Bioanalysis en el Setup Wizard).	Esta licencia es obligatoria solamente para LC/MS con el módulo de deconvolución.

Licencias asociadas a productos de Agilent OpenLAB CDS

Cuando se adquiere un producto de Agilent OpenLAB CDS, van incluidas varias licencias de forma predeterminada. En la tabla siguiente se muestran las licencias asociadas a los distintos productos de Agilent OpenLAB CDS.

Tabla 2 Licencias asociadas a productos de Agilent OpenLAB CDS

Producto de Agilent	Nombre de la licencia
Estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation	AgilentOpenLABCDSChemStation ¹
Estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation VL	AgilentOpenLABCDSChemStationVL ¹
Software de servidores para los Shared Services de OpenLAB CDS	AgilentOpenLABSharedServices
Licencia de control instrumental para OpenLAB CDS	AgilentInstrumentControl AgilentDriversADC
Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent A/D	AgilentInstrumentControl

Tabla 2 Licencias asociadas a productos de Agilent OpenLAB CDS

Producto de Agilent	Nombre de la licencia
Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent CE	AgilentInstrumentControl AgilentDriversCE AddOn3DUV
Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent MS	AgilentInstrumentControl AgilentDriversMS AgilentAddOnMSDataAnalysis
Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent GC	AgilentInstrumentControl AgilentDriversGC
Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent LC	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLC
Análisis de datos MS OpenLAB CDS ChemStation	AgilentAddOnMSDataAnalysis
OpenLAB CDS CS LC/MS, deconvolución Bioanálisis	AgilentAddOnMSDeconvolution

¹ Admite hasta cuatro instrumentos en paralelo.

NOTA

Las licencias para controladores VL no están disponibles por separado. Siempre van incluidas con los instrumentos correspondientes:

- *Controlador LC VL*: incluido con instrumentos LC 1220 Infinity.
- *Controlador GC VL*: incluido con instrumentos GC 7820.

Ejemplos de licencias

Ejemplo 1: Estación de trabajo (con licencia para el módulo principal de ChemStation completa)

Tabla 3 Productos adquiridos y licencias asociadas

Cantidad	Producto	Nombre de la licencia
1	Estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation	AgilentOpenLABCDSChemStation
1	Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent LC	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLC
1	Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent CE	AgilentInstrumentControl AgilentDriversCE AddOn3DUV

- No es necesaria ninguna licencia para OpenLAB Shared Services con una estación de trabajo independiente.
- Se inicia una LC ChemStation con la opción 3D habilitada. Se consumen las siguientes licencias: una de OpenLAB CDS ChemStation, una de control instrumental, una de controlador de LC, una de expansión 3D UV.
- En el mismo PC tiene que iniciarse una CE ChemStation. ChemStation requiere además una de control instrumental, una de controlador de CE y una de expansión 3D UV. La ChemStation no llega a iniciarse porque no hay disponible ninguna licencia de expansión 3D UV.

Ejemplo 2: Estación de trabajo en red

Tabla 4 Productos adquiridos y licencias asociadas

Cantidad	Producto	Nombre de la licencia
1	Servidor de OpenLAB CDS Shared Services	AgilentOpenLABSharedServices
2	Estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation	AgilentOpenLABCDSChemStation

Tabla 4 Productos adquiridos y licencias asociadas

Cantidad	Producto	Nombre de la licencia
1	Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent LC	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLC
1	Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent CE	AgilentInstrumentControl AgilentDriversCE AddOn3DUV

- La licencia de servidor de OpenLAB Shared Services se consume al iniciarse los Shared Services en el servidor de Shared Services.
- En el PC1, se inicia una ChemStation para CE. Se consumen las siguientes licencias: una de OpenLAB CDS ChemStation, una de control instrumental, una de controlador de CE, una de expansión 3D UV.
- En el PC2, se inicia una LC ChemStation con la opción 3D habilitada. Aparece una advertencia de que no está disponible la opción 3D. Se consumen las siguientes licencias: una de OpenLAB CDS ChemStation; una de control instrumental; una de controlador de LC.

Ejemplo 3: Sistema distribuido

Tabla 5 Productos adquiridos y licencias asociadas

Cantidad	Producto	Nombre de la licencia
1	Servidor de OpenLAB CDS Shared Services	AgilentOpenLABSharedServices
1	Estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation	AgilentOpenLABCDSChemStation
1	Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent LC/MS	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLC AgilentDriversMS AgilentAddOnMSDataAnalysis AddOn3DUV
1	Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent CE	AgilentInstrumentControl AgilentDriversCE AddOn3DUV

- La licencia de servidor de OpenLAB CDS Shared Services se consume al iniciarse los Shared Services en el servidor de Shared Services.

- En una máquina AIC, se inicia una ChemStation para CE de manera remota. Se consumen las siguientes licencias: una de OpenLAB CDS ChemStation, una de control instrumental, una de controlador de CE, una de expansión 3D UV.
- En la misma máquina AIC, se inicia una ChemStation para LC/MS de manera remota. No se requieren licencias de ChemStation adicionales. Se consumen las siguientes licencias: una de control instrumental, una de controlador de LC, una de controlador de MS, una de expansión para análisis de datos MS, una de expansión 3D UV.

Licencias Value Line (VL)

Hay determinados instrumentos de Agilent que no requieren una licencia para estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation Edition completa. Para controlar esos instrumentos, se puede adquirir una licencia para estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation *Value Line (VL)* y utilizar **Agilent 1220 LC System** o **Agilent 7820 GC System** como tipo de instrumento durante la configuración. Las licencias para controladores VL siempre van incluidas con los instrumentos correspondientes; no están disponibles como licencias independientes.

Los siguientes tipos de instrumento reflejan sistemas VL:

- *Sistema LC VL*

Con el tipo de instrumento **Agilent 1220 LC System** es posible controlar sistemas LC Agilent 1120/1220, incluidos todos los 1260 Infinity módulos excepto bombas modulares. El sistema LC VL consume una licencia para el módulo principal de la estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation Edition VL y una licencia para controladores de LC VL. El instrumento se puede controlar asimismo si están disponibles las correspondientes licencias completas.

De forma alternativa, es posible utilizar el tipo de instrumento Sistema LC convencional (**Agilent LC System**) para configurar esos instrumentos, pero en ese caso se consumen una licencia para el módulo principal de ChemStation completa y una licencia para controladores de LC completa.

La expansión 3D UV requiere siempre la licencia **AddOn3DUV** completa, aun cuando se utilice en combinación con un sistema LC VL.

Con un sistema LC VL no son posibles configuraciones LC-MS.

- *Sistema GC VL*

De los sistemas de GC, sólo el tipo de instrumento **Agilent 7820 GC System** se considera un sistema VL. El sistema GC 7820 consume una licencia para el módulo principal de la estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation Edition VL y una licencia para controladores de GC VL, pero el instrumento se puede controlar asimismo si están disponibles las correspondientes licencias completas.

NOTA

Los sistemas Value Line sólo se admiten en casos de estación de trabajo independiente. No sirven para estaciones de trabajo en red o sistemas distribuidos.

Combinación de licencias VL y completas

Cuando se inicia un sistema VL, normalmente se consumen una licencia para el módulo principal de ChemStation VL y una licencia para controladores VL. No obstante, también es posible controlar el sistema VL cuando sea aplicable alguno de los casos siguientes:

- Disponibilidad de una licencia para el módulo principal de ChemStation completa y una licencia para controladores VL
- Disponibilidad de una licencia para el módulo principal de ChemStation completa y una licencia para controladores completa

No obstante, por razones de claridad, recomendamos configurar sistemas puros (sin mezcla) siempre que sea posible. Es decir, configurar sólo sistemas VL o sólo sistemas completos en una misma estación de trabajo.

Ejemplo: Configuración VL pura

Tabla 6 Productos adquiridos y licencias asociadas

Cantidad	Producto	Nombre de la licencia
1	Estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation VL	AgilentOpenLABCDSChemStationVL
1	LC Agilent 1220	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLCVL
1	GC Agilent 7820	AgilentInstrumentControl AgilentDriversGCVL

- No es necesaria ninguna licencia para OpenLAB Shared Services con una estación de trabajo independiente.
- Se inicia un LC Agilent 1220. Se consumen las siguientes licencias: una de ChemStation VL; una de control instrumental; una de controladores de LC VL.
- En el mismo PC se inicia un GC Agilent 7820. Puesto que la licencia para el módulo principal de ChemStation es compartida, no se requiere una licencia de ese tipo adicional. Se consumen las siguientes licencias: una de control instrumental; una de controladores de GC VL.

Ejemplo: Configuración mixta con un instrumento LC 1220 Infinity y un sistema LC 1260 Infinity

Tabla 7 Productos adquiridos y licencias asociadas

Cantidad	Producto	Nombre de la licencia
1	Estación de trabajo OpenLAB CDS ChemStation	AgilentOpenLABCDSChemStation
1	Controlador de instrumentos OpenLAB CDS para Agilent LC	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLC
1	LC Agilent 1220 Infinity	AgilentInstrumentControl AgilentDriversLCVL

- No es necesaria ninguna licencia para OpenLAB Shared Services con una estación de trabajo independiente.
- Se inicia el sistema LC Agilent 1260 Infinity. Se consumen las siguientes licencias: una de ChemStation; una de control instrumental; una de controladores de LC.
- En el mismo PC se inicia un instrumento LC Agilent 1220. Puesto que la licencia para el módulo principal de ChemStation es compartida, no se requiere una licencia de ese tipo adicional. Ambos sistemas pueden utilizar la misma licencia para el módulo principal de ChemStation completa. Se consumen las siguientes licencias: una de control instrumental; una de controladores de LC VL.
- Si la licencia para el módulo principal de ChemStation fuera VL, sólo se podría iniciar el LC 1220. No sería posible iniciar el sistema LC 1260 Infinity: En primer lugar, no es posible utilizar un sistema LC 1260 Infinity con

una licencia para ChemStation VL; y, segundo, no está admitida la combinación de una licencia para el módulo principal de ChemStation VL y una licencia para controladores de sistemas LC Agilent completa.

Gestor de licencias Flexera

Los servicios compartidos emplean una herramienta de nombre *FlexNet Producer Suite*, suministrada por Flexera, para gestionar las licencias. Los componentes necesarios se instalan por defecto junto con los servicios compartidos. El servidor de licencias puede ser el PC local, un servidor remoto de servicios compartidos o un servidor con un gestor de licencias de Flexera que ya estuviera instalado en el entorno. En caso de utilizar un gestor de licencias de Flexera, se puede introducir el nombre de host o la dirección IP del servidor de licencias en el panel de control de OpenLAB.

Para utilizar la gestión de licencias en los servicios compartidos es necesario ejecutar un servicio adicional de Windows: este servicio de Windows se llama *Agilent OpenLAB License Server* (servidor de licencias Agilent OpenLAB). Tiene que estar ejecutándose este servicio en el servidor en el que se gestionan las licencias. Cada vez que se inicie un instrumento, éste solicitará licencias al servicio License Server; por lo tanto, solamente se podrá iniciar un instrumento si se está ejecutando el servicio.

3 **Licencias de OpenLAB CDS ChemStation**

Licencias



4 Seguridad e integridad de los datos

Aspectos de seguridad	40
Los Shared Services y su relación con la seguridad	40
Bloqueos de sesión en ChemStation	41
ChemStation Administration Tool	42
Integridad de los datos	44

En este capítulo se explican las características de seguridad integradas y el modo en que se atienen a la norma 21 CFR Parte 11 de la FDA. También se explican las funciones de seguridad que tienen los Shared Services.



Aspectos de seguridad

En OpenLAB CDS, los aspectos de seguridad quedan cubiertos principalmente por los OpenLAB Shared Services. Además, hay ciertos aspectos que solamente conciernen a la ChemStation y que cubre la ChemStation Administration Tool.

Los Shared Services y su relación con la seguridad

Entre las funciones de OpenLAB Shared Services asociadas a seguridad se cuentan las siguientes:

- System Activity Log

Cuando se activa, el System Activity Log muestra los mensajes que quedan registrados en los OpenLAB Shared Services. Estos mensajes pueden venir de otros componentes, como puede ser la administración de usuarios o un módulo de instrumento. Los mensajes de instrumentos pueden ser mensajes de error, mensajes de sistema o mensajes de eventos. La ChemStation registra estos eventos en su propio entorno, pero también envía los eventos al Activity Log. El **System Activity Log** registra estos eventos independientemente de que se muestren en pantalla o no. Para acceder a más información acerca de un evento, amplíe la línea de interés en el visor del Activity Log-book.

- Diagnostics

Con esta función se puede acceder desde un punto centralizado a todos los ficheros de registro, ficheros de seguimiento, etc., que generen los módulos registrados.

- Selección de un proveedor de autenticación

Puede elegir entre varios proveedores de autenticación, como son Windows u OpenLAB ECM, para así reutilizar una configuración de usuarios existente, contraseñas y grupos de usuarios. Otra opción es utilizar los Shared Services como proveedor de autenticación.

- User Management

Los Shared Services permiten gestionar los usuarios de forma extensa. La administración de usuarios incluye la configuración de grupos y roles, así como la asignación de privilegios específicos.

- Security Policy

La norma 21 CFR Parte 11, exige que la empresa o laboratorio tenga una política de contraseñas. En caso de utilizar la gestión de usuarios interna de Shared Services, se pueden configurar las opciones de inicio de sesión y requisitos de contraseñas. Con otros proveedores de autenticación, esto está especificado dentro del sistema de autenticación (p. ej., Dominio de Windows).

Bloqueos de sesión en ChemStation

Si se abandona el ordenador de ChemStation durante un tiempo de terminado, se puede bloquear ChemStation para que ningún otro usuario pueda acceder al programa. Se trata de una función de seguridad para garantizar que no haya accesos no autorizados a ChemStation. Al activar el bloqueo de sesión, tanto usted como cualquier otro usuario deberán volver a introducir credenciales válidas antes de seguir trabajando con ChemStation.

En ChemStation existen las siguientes opciones para activar el bloqueo de sesión:

- *En privado (User > Lock Session > privately)*: Solamente el usuario que haya activado el bloqueo de sesión o un usuario con el privilegio **Break Session Lock** podrá desbloquear la sesión.
- *No privado (User > Lock Session > non privately)*: Cualquier usuario válido puede iniciar sesión. Es útil, por ejemplo, ante un cambio de turno donde el personal que sale protege ChemStation hasta que el personal del nuevo turno comienza a trabajar.
- *Botón de bloqueo de la barra de herramientas*: El botón de bloqueo de la barra de herramientas se puede configurar para bloquear la sesión de ChemStation en privado o no privado.
- *En función del tiempo*: Dependiendo de la configuración de Shared Services, la ChemStation se bloquea automáticamente después de un determinado período de tiempo sin que haya ninguna interacción por parte del usuario (véase **Inactivity Timeout** en “Política de seguridad” en la página 51).

El bloqueo de sesión en función del tiempo se puede configurar para bloquear la sesión de ChemStation, ya sea en privado o no en privado (véase [Figura 6](#) en la página 42).

ChemStation Administration Tool

La ChemStation Administration Tool contiene varias funciones relacionadas con la configuración de ChemStation. Dado que una de esas funciones es anular el bloqueo de sesión, el acceso a la ChemStation Administration Tool está limitado de forma estricta:

- La herramienta de administración ChemStation Administration Tool sólo puede abrirse directamente en el PC de ChemStation. En instalaciones de sistema distribuido, deberá abrir la herramienta en la AIC pertinente.
- Solamente los usuarios que sean miembros del grupo local **CSAdministrators** podrán iniciar la ChemStation Administration Tool.

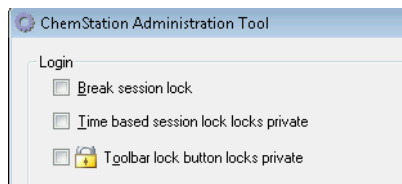


Figura 6 Herramienta de administración de ChemStation

En la ChemStation Administration Tool se pueden configurar las siguientes opciones para crear y anular bloqueos de sesión:

- **Break session lock:** si se marca esta casilla de verificación, cualquier usuario puede acceder a una ChemStation bloqueada con sólo hacer clic en **Cancel** en el cuadro de diálogo **Login**. Si hay una ChemStation bloqueada y el proveedor de autenticación no está disponible, la activación de esta casilla de verificación es la única forma de volver a tener acceso a la sesión actual de ChemStation.

NOTA

Tenga en cuenta que, como consecuencia, el usuario que vuelva a obtener acceso a ChemStation tendrá ahora acceso ilimitado a todas las funciones de ChemStation.

- **Time based session lock locks private:** Si ChemStation ha quedado bloqueada porque haya transcurrido el tiempo establecido de inactividad, solamente el

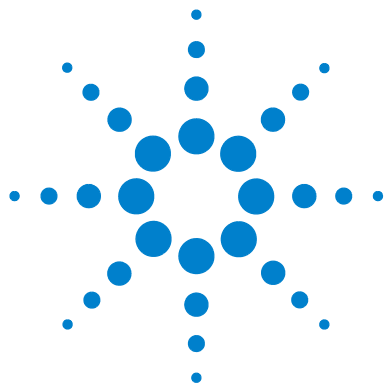
usuario actual o un usuario con los privilegios necesarios podrá desbloquear la sesión.

- **Toolbar lock button locks private:** Si se ha bloqueado ChemStation con el botón de bloqueo de la barra de herramientas de ChemStation, solamente el usuario actual o un usuario con los privilegios necesarios podrá desbloquear la sesión.

Integridad de los datos

Los datos de resultados se guardan en el PC de la ChemStation local o en OpenLAB ECM, dependiendo de la configuración del OpenLAB CDS instalado. Si guarda los datos en las estaciones de trabajo locales, podrá manualmente hacer copias de seguridad de los datos. Solamente podrá cumplir todos los requisitos de la norma 21 CFR Parte 11 si utiliza Agilent OpenLAB ECM. OpenLAB ECM almacena los datos conforme a 21 CFR Parte 11. OpenLAB ECM proporciona un almacenamiento seguro de los datos con control de acceso y seguimiento de auditoría. Los ficheros de datos tienen versiones para que así los datos se mantengan íntegros y se puedan rastrear. Además, OpenLAB ECM permite utilizar firmas electrónicas, permitiendo a los usuarios firmar los datos. OpenLAB ECM se puede configurar para que genere copias de seguridad y archive los datos automáticamente de forma controlada.

Para obtener más información, consulte la *Guía de conceptos de la opción OpenLAB CDS ChemStation con ECM*.



5 OpenLAB Shared Services

Administración de instrumentos	46
El estado del laboratorio de un vistazo	47
Administración de licencias	48
System Activity Log	49
Proveedor de autenticación	50
Política de seguridad	51
Administración de usuarios	53
Usuarios	53
Grupos	55
Roles y privilegios	55
Privilegios específicos para instrumentos o ubicaciones individuales	56

Accesibles a través del OpenLAB Control Panel, los Shared Services ofrecen funciones de control tales como las de acceso centralizado, configuración centralizada o el estado del laboratorio de un vistazo. Esas funciones se describen en más detalle en este capítulo.



Administración de instrumentos

Se puede crear un árbol con diferentes ubicaciones en el OpenLAB Control Panel, y añadir instrumentos a las ubicaciones pertinentes. Con estas ubicaciones se pueden organizar los instrumentos, por ejemplo, por departamento, por sala o por mesa. Para cada instrumento se puede introducir información básica, como el nombre, la descripción y el tipo de instrumento.

El tipo de instrumento queda preconfigurado. Al instalar OpenLAB CDS, podrá elegir entre la modalidad ChemStation o EZChrom. La modalidad elegida determina el tipo de instrumentos que se podrán utilizar en Instrument Management.

NOTA

Con OpenLAB CDS A.01.01 o A.01.02 no se pueden utilizar combinaciones de instrumentos de ChemStation y EZChrom.

En función de los privilegios que se tengan en OpenLAB CDS, se pueden efectuar varias operaciones sobre los instrumentos:

- Ver información del instrumento (estado del instrumento, detalles del instrumento, registro de actividades).
- Ver las ubicaciones y el árbol de instrumentos.
- Editar la información del instrumento.
- Configurar el instrumento.

La configuración del instrumento se guarda en el PC local, pero se puede acceder a la herramienta de configuración desde el OpenLAB Control Panel.

- Iniciar el instrumento en línea o fuera de línea.

Como la configuración del instrumento se guarda en el PC local, solamente se podrán iniciar instrumentos que estén configurados en ese PC.

Los privilegios pueden ser diferentes dependiendo de las ubicaciones e instrumentos (véase [“Privilegios específicos para instrumentos o ubicaciones individuales”](#) en la página 56).

El estado del laboratorio de un vistazo

La vista **Instruments** del OpenLAB Control Panel ofrece una visión general de todos los instrumentos de la red. Podrá ver la siguiente información correspondiente a todos los instrumentos, resumida en una página:

- Estado del instrumento, con un código de color relacionado
- Nombre del instrumento
- Ubicación del instrumento
- Tipo de instrumento
- Último cambio de configuración

Administración de licencias

Antes de añadir un fichero de licencia hay que adquirir la licencia y generar el fichero correspondiente con SubscribeNet. Si desea saber más acerca de la generación de nuevos ficheros de licencia, consulte la guía de instalación de licencias de software *Software License Installation Guide*.

License Management en OpenLAB Control Panel contiene las siguientes funciones:

- Se pueden añadir ficheros de licencias al servidor de licencias.
- Se puede navegar hasta el monitor de licencias y ver las propiedades de todas las licencias instaladas en un servidor de licencias concreto.

Si desea saber más acerca de cómo añadir ficheros de licencia y visualizar las propiedades de licencia, consulte la ayuda en línea del OpenLAB Control Panel (**Getting Started > Add licenses**).

En pantalla se podrán ver las siguientes propiedades de las licencias instaladas:

- **Feature:** esto indica el tipo de licencia utilizada, por ejemplo, AgilentOpenLABCDSChemStation, AgilentInstrumentControl, o AgilentDriversLC.
- **Version:** Cuando una licencia tenga versión, podrá ver el número de versión, por ejemplo 1.1 para Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition C.01.01. Para licencias que no tienen versiones, la versión aparece siempre como 1.0.
- **In Use (Available):** esto indica el número de licencias que hay en uso en ese momento y, entre corchetes, el número de licencias en total. Con la nueva estrategia de licencias, una licencia estará en uso solamente mientras se esté ejecutando una instancia de software (véase “Tipos de licencias” en la página 26).
- **Expiration:** si la licencia es válida solamente para un determinado periodo de tiempo, se muestra la fecha de caducidad.

En el panel **Alerts** se puede ver si el número de licencias disponibles para una determinada función está próxima a cero, o si se ha iniciado una instancia de software para la que sea necesaria una licencia que no esté disponible.

System Activity Log

El System Activity Log contiene información acerca de los diversos eventos asociados a los Shared Services o a instrumentos concretos. Se puede filtrar la lista para ver solamente los eventos de un tipo específico, un intervalo temporal determinado, los creados por un usuario concreto o los que contengan una cierta descripción.

Se registran los siguientes tipos de eventos:

- De sistema
- De administración de instrumentos (Instrument Management)
- De instrumentos
- De gestión de proyectos (Project Management)
- De controlador de instrumentos (Instrument Controller)
- De usuarios
- De grupos
- De seguridad
- De impresoras
- De licencias

Proveedor de autenticación

Los proveedores de autenticación sirven para comprobar la identidad de los usuarios que inician sesión en el sistema. Los Shared Services admiten los siguientes modos de proveedores de autenticación:

- **None**

En este modo no aparece ninguna pantalla de inicio de sesión al acceder al OpenLAB Control Panel. El usuario inicia sesión automáticamente en la aplicación con la seguridad desactivada. En todas las entradas del registro el usuario aparece como "Anonymous". Con el proveedor de autenticación **None**, los nodos Security Policy y User Management quedan ocultos en el OpenLAB Control Panel.

- **Internal**

En este modo, las credenciales de usuario se guardan en la Shared Services Database. Se le pedirá al usuario que cree una cuenta de administrador para los Shared Services antes de configurar otros usuarios. Este es el único modo en el que se pueden crear nuevos usuarios dentro del sistema; en todos los demás modos solamente se podrán asignar usuarios existentes en un sistema de autenticación diferente.

- **Windows Local o Windows Domain**

Se pueden importar usuarios de Windows a los Shared Services. La autenticación se hace por medio de la gestión de usuarios local de Windows, un dominio de Active Directory o un dominio de NT 4.0 dentro de la empresa. Los Shared Services se sirven solamente de la identidad y la contraseña de los usuarios asignados; la autorización se sigue configurando con los Shared Services.

- **ECM**

En este modo, el sistema OpenLAB ECM es responsable de la autenticación. Al iniciar el OpenLAB Control Panel, la aplicación solicitará las credenciales de ECM para validar a un usuario. Tiene que elegir un usuario de ECM existente como administrador de los Shared Services. Con la función Search se pueden encontrar usuarios concretos de ECM. Los Shared Services se sirven solamente de la identidad y la contraseña de los usuarios asignados; la autorización se sigue configurando con los Shared Services.

Política de seguridad

La política de seguridad (Security Policy) estará disponible solamente si se selecciona un proveedor de autenticación que no sea **None**.

Con el proveedor de autenticación **Internal**, usted podrá configurar todos los parámetros descritos a continuación en el OpenLAB Control Panel. Con un proveedor de autenticación externo, sólo se puede fijar en el OpenLAB Control Panel el tiempo de inactividad; todos los demás parámetros vienen definidos por el sistema externo.

Para obtener más información referente a los requisitos de 21 CFR Parte 11, consulte la *Guía de conceptos de la opción OpenLAB CDS ChemStation con ECM*.

Tabla 8 Configuración de la política de seguridad

Configuración	Descripción	Requisitos de la norma 21 CFR Parte 11
Minimum password length	Si los usuarios modifican su contraseña, deberán seleccionar una contraseña que tenga, como mínimo, el número de caracteres indicado. El valor predeterminado es 5. Disponible solamente para el proveedor de autenticación Internal .	Es preferible que exija una longitud de contraseña mínima de 5 caracteres.
Password expiration period (days)	El valor predeterminado son 30 días. Cuando el usuario trate de iniciar sesión después de este periodo de tiempo, el sistema le pedirá que cambie la contraseña. El periodo de caducidad empieza con el último cambio de contraseña o con la creación de un usuario con una nueva contraseña predeterminada. Disponible solamente para el proveedor de autenticación Internal .	Es preferible que establezca un periodo de de caducidad de 180 días o menos.

Tabla 8 Configuración de la política de seguridad

Configuración	Descripción	Requisitos de la norma 21 CFR Parte 11
Maximum unsuccessful login attempts before locking account	Si un usuario intenta iniciar sesión con credenciales de usuario no válidas en demasiadas ocasiones, el sistema lo bloquea durante un cierto periodo de tiempo. No podrá iniciar sesión ni siquiera con credenciales de usuario válidas. Es posible definir el número de intentos de inicio de sesión permitidos. Disponible solamente para el proveedor de autenticación Internal .	Dicho número de intentos de inicio de sesión debería limitarse a tres.
Account lock time (minutes)	Este es el periodo de tiempo que debe transcurrir antes de que pueda volver a intentarlo, una vez que un usuario haya sobrepasado el número máximo de intentos fallidos de inicio de sesión. Disponible solamente para el proveedor de autenticación Internal .	
Inactivity time before locking the application	Si el OpenLAB Control Panel está inactivo durante el periodo de tiempo especificado, el sistema bloquea la interfaz de usuario. Este valor se emplea también para establecer el bloqueo de sesión por inactividad en la ChemStation.	

Administración de usuarios

Los Shared Services permiten asignar roles específicos a usuarios o grupos de usuarios. Cada usuario puede ser miembro de varios grupos.

Debe asignarse un rol específico a cada grupo. También se pueden asignar roles a usuarios únicos; no obstante, por motivos de transparencia, se recomienda asignar funciones solamente a grupos.

Los roles disponen de numerosos privilegios específicos que definen lo que los usuarios pueden ver o hacer en el OpenLAB Control Panel y en ChemStation.

Usuarios

Para crear un nuevo usuario interno hay que introducir la información siguiente:

Tabla 9 Credenciales de usuario

Valor	Descripción	Obligatoria
Name	Nombre de usuario para iniciar sesión en el sistema.	Sí
Description	Información adicional acerca del usuario (p. ej., departamento, puesto, etc.).	No
Password	Contraseña del usuario; la longitud mínima de la contraseña se define en la Security Policy.	Sí
Email address	Dirección de correo electrónico del usuario.	No
Full name	El nombre completo del usuario.	No
Contact Information	Información de contacto general (p. ej., número de teléfono, buscapersonas, etc.).	No

Tabla 9 Credenciales de usuario

Valor	Descripción	Obligatoria
User disabled	Marque esta casilla para deshabilitar a un usuario. Los usuarios deshabilitados no podrán volver a iniciar sesión. El sistema puede deshabilitar automáticamente a los usuarios que hayan intentado iniciar sesión sin conseguirlo demasiadas veces. Si un usuario está deshabilitado, en vez de la casilla aparece el mensaje correspondiente. Después de un tiempo determinado (véase Account lock time en los ajustes de Security Policy), el usuario vuelve a quedar habilitado automáticamente.	No
User cannot change password	Indicador que señala si el usuario puede cambiar su propia contraseña. El valor predeterminado del indicador es "false" (es decir, los usuarios PODRÁN cambiar sus contraseñas).	No
User must change password at next login	Si se ha seleccionado esta opción, el usuario tendrá que cambiar su contraseña la siguiente vez que inicie sesión. La opción cambia automáticamente cuando el usuario haya cambiado la contraseña. La opción está marcada de forma automática para los nuevos usuarios.	No
Group Membership	Para asignar al usuario a los grupos pertinentes.	
Role Membership	Para asignar roles al usuario directamente.	

En caso de utilizar un proveedor de autenticación externo (ECM o Windows), no se podrán crear usuarios nuevos, sino que habrá que importar usuarios existentes en los sistemas de autenticación. Con la función Search se pueden encontrar los usuarios que se desee en el sistema de autenticación. En el OpenLAB Control Panel se pueden gestionar los roles de los usuarios externos, pero no las credenciales de los usuarios reales (tales como el nombre de usuario y la contraseña). En caso de que se desee eliminar a un usuario externo se tendrán que anular las asignaciones del usuario en el OpenLAB Control Panel. El usuario seguirá presente en el sistema de autenticación externo.

Grupos

En caso de utilizar un proveedor de autenticación externo, se podrá optar por importar los nombres de los grupos presentes en dicho sistema externo o bien crear nuevos grupos internos. No hay límite al número de grupos que se pueden asignar o crear.

La asignación de usuarios a los grupos se puede realizar en el sistema externo o en el panel de control de OpenLAB. Cuando se necesitan asignaciones de usuario adicionales que sólo son relevantes para OpenLAB CDS, se crean en el panel de control de OpenLAB. De lo contrario, basta con importar los grupos y asignar los roles pertinentes a los mismos.

Al borrar o anular la asignación de un grupo, los usuarios que fueran miembros del grupo no sufren ningún cambio.

Roles y privilegios

Los roles sirven para asignar privilegios a un usuario o a un grupo de usuarios de forma global o para un instrumento o ubicación específicos. El sistema contiene una lista de roles predefinidos que van incluidos en la instalación del sistema (por ejemplo, **Instrument Administrator**, **ChemStation Lab Manager** o **ChemStation Operator**). Cada rol tiene asignados ciertos privilegios.

Los privilegios se agrupan con arreglo a los tres tipos principales de roles. Al asignar privilegios a un rol, primero hay que seleccionar el tipo de rol necesario y después seleccionar los privilegios asociados a ese tipo de rol. Cada rol puede tener solamente privilegios de un determinado tipo de rol; la única excepción es el rol predefinido **Everything**, que tiene todos los privilegios de la totalidad de los tipos de roles. Para ejecutar ciertas funciones del sistema, puede que los usuarios o los grupos deban tener varios roles. Por ejemplo, un usuario con el rol *ChemStation Operator* necesitará siempre otro rol con el privilegio de utilizar un instrumento, como puede ser *Instrument User*.

Tabla 10 Descripción de los tipos de rol

Tipo de rol	Descripción
Administrative privileges	Estos privilegios se asignan de forma global a un usuario o grupo y no se pueden cambiar en el nivel de instrumento ni en la ubicación. Se trata de los privilegios habituales de administración, como son Backup and restore , Manage security , Manage printers , etc.
Instrument privileges	Estos privilegios se pueden asignar de forma global o en un determinado instrumento o ubicación. Los privilegios para instrumentos son, por ejemplo, View instrument or location y Run instrument . Los usuarios deben tener el privilegio View instrument or location a nivel global para ver el árbol de ubicaciones e instrumentos en el OpenLAB Control Panel.
Project privileges	Como la ChemStation C.01.01 no admite proyectos, los privilegios de aplicación se asignan de forma global a los usuarios. Los usuarios tienen estos privilegios independientemente de los datos con los que trabajen en ChemStation.

En “[Privilegios en OpenLAB Shared Services](#)” en la página 239 se puede consultar una lista completa de los privilegios.

Privilegios específicos para instrumentos o ubicaciones individuales

Los roles de usuarios o grupos se establecen a nivel global de forma predeterminada; es decir, un usuario o un grupo tienen el mismo rol en todas las ubicaciones y todos los instrumentos. Los ajustes de cada rol se heredan del nodo raíz **Instruments**. Para poder asignar un rol distinto a un usuario o grupo de una ubicación o instrumento específicos, se puede desmarcar la casilla **Inherit access control from parent** en el cuadro de diálogo **Edit Privileges** del nodo correspondiente. Después de esto, se podrá asignar un rol diferente que solamente valdrá para el instrumento o la ubicación de que se trate.

Por ejemplo, un usuario es miembro del grupo **ChemStation Operator** en todas las ubicaciones, pero en una ubicación específica es miembro del grupo **Instrument Administrator**.



6

Conceptos básicos de OpenLAB CDS ChemStation Edition

Control remoto de instrumentos	58
Acerca del software ChemStation	61
Sistema operativo	61
Métodos y secuencias	61
Configuración del sistema	61
Modelo de datos	61
Convenciones de los nombres de ficheros	62
Interfaz de usuario de software	64
Adquisición de datos	67
Análisis de datos	68
Elaboración de informes	71
Utilidades y compatibilidades	71
Personalización	72
Automatización	72
Buenas prácticas de laboratorio	74
Estructura de datos de ChemStation	77
Estructura de datos de ChemStation	77

Este capítulo explica los principios de trabajo con ChemStation, incluidos el control remoto, la interfase gráfica y las vistas de ChemStation.



Control remoto de instrumentos

Con una configuración de sistema distribuido, es posible configurar e iniciar instrumentos ChemStation desde cualquier OpenLAB Control Panel que esté conectado al servidor de OpenLAB Shared Services.

Inicio de instrumentos

Para configurar o iniciar instrumentos, puede utilizar los botones *Configure Instrument*, *Launch online* y *Launch offline* del OpenLAB Control Panel. En las configuraciones de estación de trabajo independiente o en red, el diálogo de configuración del instrumento se ejecuta en el PC local. No obstante, con una configuración de sistema distribuido, la aplicación ChemStation en sí se ejecuta en una máquina de control instrumental Agilent Instrument Control (AIC) y el usuario accede a la aplicación mediante una conexión de escritorio remoto a la máquina AIC.

Las ventanas de la ChemStation remota se muestran independientemente del OpenLab Control Panel; es posible iniciar un instrumento, cerrar el panel de control y seguir trabajando con el instrumento. También es posible ejecutar múltiples instancias de OpenLAB Control Panel en un mismo cliente utilizando diferentes credenciales de acceso. Las diferentes credenciales se propagarán a los instrumentos que el usuario inicie desde el correspondiente panel OpenLAB Control Panel.

Es posible identificar los instrumentos que se están ejecutando en una máquina AIC remota por medio del título de la ventana, que contiene tanto el nombre del instrumento como el nombre de la AIC.

Desconexión de sesión

Los instrumentos que se están ejecutando en una AIC son independientes del cliente desde el que se abrió la conexión de escritorio remoto. Si el cliente se desconecta, por ejemplo debido a un fallo de red, las secuencias que se ejecutan en el instrumento prosiguen sin que eso las afecte. Para recuperar el control del instrumento una vez recobrada la red, basta con hacer clic nuevamente en el botón *Launch online* o *Launch offline*.

Para desconectarse de manera intencionada, haga clic en el botón **Close** o seleccione **File > Exit**. El diálogo **Close** ofrece un botón **Disconnect** adicional. Al desconectarse, estará cortando la conexión de escritorio remoto mientras que el instrumento seguirá funcionando.

NOTA

Es posible desconectar una conexión de escritorio remoto mientras se está ejecutando una secuencia.

Para volver a conectarse a ese instrumento, simplemente haga clic de nuevo en el botón *Launch online* o *Launch offline* del OpenLab Control Panel. Puede efectuar la reconexión desde cualquier OpenLAB Control Panel conectado al servidor de OpenLAB Shared Services.

Si hace clic en *Launch offline* para reconectarse a un instrumento en línea, o viceversa, obtendrá dos ventanas de instrumento: una para el instrumento en línea y otra para el instrumento fuera de línea.

Toma de control de sesión

Puede tomar el control de una sesión existente haciendo clic en el botón *Launch online* o *Launch offline* del OpenLab Control Panel.

Si ha iniciado un instrumento desde el OpenLAB Control Panel de un primer PC y seguidamente accede a un OpenLAB Control Panel de un segundo PC con las mismas credenciales de usuario e inicia desde allí el mismo instrumento, estará simplemente tomando el control de la sesión existente y podrá proseguir desde el segundo PC cualquier cosa que haya iniciado en el primero.

Si otro usuario ha iniciado el instrumento desde el OpenLAB Control Panel de un PC diferente, también podrá tomar el control de esa sesión. En ese caso, el otro usuario recibirá un mensaje indicando que usted va a tomar el control de la sesión. Tan pronto como el otro usuario haya confirmado ese mensaje, la ventana del instrumento se cerrará en el PC de tal usuario y se abrirá en el suyo. El otro usuario recibe un mensaje indicando qué usuario ha tomado el control de la sesión.

NOTA

No se muestra ninguna advertencia si el nuevo usuario y el usuario previo tienen las mismas credenciales.

Los instrumentos en línea y fuera de línea se incluyen en la misma sesión y por tanto se transfieren siempre de manera conjunta. Si en una sesión hay ini-

ciados un instrumento en línea y un instrumento fuera de línea, la toma de control transfiere el control de ambos instrumentos con independencia de si se ha hecho clic en el botón *Launch online* o *Launch offline*. Si hace clic en *Launch offline* y la sesión incluye solamente un instrumento en línea, o viceversa, obtendrá dos ventanas de instrumento: una para el instrumento en línea y otra para el instrumento fuera de línea.

Acerca del software ChemStation

Sistema operativo

La ChemStation C.01.03 necesita el sistema operativo Microsoft Windows XP Professional SP3, Windows Vista Business SP2 o Windows 7.

Los gráficos de control de ChemStation requieren Microsoft Excel.

Métodos y secuencias

El método analítico describe completamente cómo se realiza una separación determinada. Contiene todos los parámetros para el control instrumental, la adquisición y la evaluación de datos, incluida la integración, cuantificación e informes. El sistema se puede configurar para que adquiera los datos de varias muestras con diferentes métodos. El fichero de control de este tipo de operación se denomina secuencia, y contiene la información de cada muestra, referencias a los métodos apropiados y especificaciones de recalibración automática. Para obtener más información sobre métodos y secuencias, consulte [“Automatización/Secuencias”](#) en la página 113 y el sistema de ayuda en línea.

Configuración del sistema

La configuración del sistema instrumental se realiza mediante el OpenLAB Control Panel, que a su vez inicia el Configuration Editor. Permite definir los instrumentos, sus direcciones GPIB o LAN, los directorios de los datos, las secuencias y métodos y la definición de color del software ChemStation.

Modelo de datos

El software ChemStation está diseñado sobre un modelo de datos basado en una estructura de memoria denominada registro. Los registros son estructu-

ras multipropósito que pueden contener datos analíticos y datos para información bidimensional (por ejemplo, tiempo/intensidad) e información tridimensional (por ejemplo, tiempo/intensidad/longitud de onda).

ChemStation proporciona los comandos y funciones para construir, expandir, extraer y, siempre que no se alteren los datos primarios, editar registros. Para obtener más información, consulte la referencia en línea que se ofrece en ChemStation bajo **Help > Commands**.

Convenciones de los nombres de ficheros

Convenciones de los nombres

Las reglas siguientes permiten que ChemStation genere y procese nombres válidos para ficheros y directorios:

No está permitido que los caracteres siguientes formen parte de los nombres de ficheros y directorios:

< > : " / \ | @ % * ? ' & espacios en blanco etc.

Si se añaden estos caracteres a los nombres de fichero o de directorio puede haber problemas al cargar los ficheros en ChemStation. Además, si se utilizan esos caracteres en la carpeta de instalación, no se inicia la copia de reprocesamiento. Si se utiliza el carácter % en la carpeta de instalación, algunos métodos abreviados de "Agilent ChemStation C.01.03" no funcionarán correctamente.

Son asimismo aplicables las siguientes reglas:

Tabla 11 Caracteres restringidos

Parámetro de ChemStation	Character
Nombres de ficheros de método:	% y . (punto decimal) no permitidos
Nombres de ficheros de datos (prefijo/contador):	espacios en blanco no permitidos
Subdirectorios de datos y subdirectorios de secuencias:	[] + = ; , . (punto decimal) y espacios no permitidos

No se pueden utilizar como nombre de un fichero los siguientes nombres de dispositivo reservados:

- CON, PRN, AUX, NUL
- COMx (donde x es un número del 1 al 9)
- LPT1x (donde x es un número del 1 al 9)

Debe evitarse asimismo el uso de estos nombres seguidos de una extensión (p.ej. Nul.txt).

NOTA

En las pruebas realizadas para validar las convenciones de los nombres de ficheros se utilizan equipos con sistema operativo en inglés, japonés y chino. Agilent no puede garantizar el soporte de sistemas operativos que no sean en inglés y sus caracteres especiales.

Longitud máxima de los nombres de ficheros y subdirectorios de ChemStation

Se enumeran a continuación las especificaciones de Agilent ChemStation relativas a nombres de ficheros y subdirectorios:

Tabla 12 Longitud máxima de los nombres de ficheros y subdirectorios de ChemStation

Fichero de datos/Subdirectorio/Ruta	Longitud máx. de texto	Apéndice automático	Ejemplo
Nombre de fichero de datos	38	.D	Demodad.d
Nombre de fichero de datos con prefijo/contador	15	.D	longname000001.d
Método Secuencia Hipersecuencia Librerías Plantillas de informes personalizadas	40	.M .S .HYP .UVL .FRP	def_lc.m def_lc.s def_lc.hyp demodad.uvl areapct.frp
Subdirectorio de ficheros de datos	40		demo (en información de la muestra)
Subdirectorio de secuencias de datos	40		demo (en parámetros de secuencia)

Tabla 12 Longitud máxima de los nombres de ficheros y subdirectorios de ChemStation

Fichero de datos/Subdirectorio/Ruta	Longitud máx. de texto	Apéndice automático	Ejemplo
Nombre del conjunto de resultados	40		test_date_time (crear con preferencias de secuencia)
Ruta de datos	100	100	c:\chem32\1\data
Ruta de método			c:\chem32\1\methods
Ruta de secuencia			c:\chem32\1\sequence
Ruta de hipersecuencia			c:\chem32\1\hyper
Ruta de librerías			c:\chem32\speclib
Ruta de plantillas de informes personalizadas			c:\chem32\repstyle

Todos los mensajes del sistema de informes de los libros de registro de ChemStation en formato ampliado y las cadenas de información se imprimen en varias líneas. En determinados informes, por ejemplo el informe de secuencia, los nombres de ficheros pueden aparecer truncados para que encaje toda la información en la plantilla de informes.

Interfaz de usuario de software

La interfaz de usuario de ChemStation está diseñada con ventanas que agrupan las funciones del software según las tareas analíticas típicas. Las siguientes vistas estándar están presentes en todas las configuraciones del software:

- La vista Method and Run Control para controlar y adquirir datos del instrumento.
- La vista Data Analysis para reevaluar los datos adquiridos.
- La vista Review para revisar los datos con plantillas de informes específicas.
- La vista Report Layout para crear diseños de informes específicos.

Aparecen otras vistas si se han pedido módulos de evaluación de datos adicionales o para determinadas configuraciones de instrumentos que admiten procedimientos de diagnóstico y verificación de instrumentos. La vista Companion de ChemStation está disponible cuando sea deseable que los operadores de los instrumentos analicen muestras a partir de una tabla preconfigurada y fácil de usar.

El panel de navegación contiene el botón de navegación que permite cambiar rápidamente de las ventanas de ChemStation y ChemStation Explorer con estructura de árbol. El contenido de ChemStation Explorer depende de la vista y facilita acceso a diferentes elementos de ChemStation.

Cada vista consta de un conjunto de elementos de usuario estándar, incluidos menús y barras de herramientas. La barra de herramientas estándar ofrece acceso rápido a información común sobre especificaciones del sistema, por ejemplo, métodos y secuencias. La vista Method and Run Control incorpora además una barra de estado del sistema, un área de información de la muestra, que puede configurarse para un solo análisis o para análisis automatizados, y un diagrama esquemático de la interfaz del instrumento para configuraciones GC, CE y LC. El diagrama esquemático de la interfaz del instrumento utiliza puntos de acceso para el acceso rápido a los parámetros de los instrumentos y un gráfico animado que ofrece una visión general de cada análisis según se realiza. Si no es necesario, el diagrama esquemático del instrumento se puede desactivar para ahorrar memoria y otros recursos de Windows.

La vista Data Analysis amplía la barra de herramientas estándar para incluir modos de análisis de datos específicos, como recálculo, reprocesamiento, integración, calibración, elaboración de informes, anotación, comparación de señales y otros modos especializados si están instalados los módulos. Cada uno de los diferentes modos de Data Analysis cuenta con un conjunto de herramientas específico de cada uno de ellos.

La vista Review estará disponible si en el instrumento está seleccionado Intelligent Reporting. Esta vista permite revisar los datos de forma muy flexible. Se puede seleccionar cualquier combinación de ficheros de datos como base para la revisión, y aplicar cualquiera de las plantillas de informes existentes a los datos seleccionados. La plantilla de informes seleccionada define la forma en que se mostrarán los datos y el tipo de información que se incluirá en el informe generado. La barra de herramientas contiene funciones de impresión y exportación de los informes generados.

La vista Report Layout permite definir el diseño de una plantilla de informe o un estilo de informe concretos. También utiliza un conjunto de barras de herramientas específico de esta tarea. El tipo de Report Template Editor mostrado en esta vista depende del tipo de Reporting configurado en el instrumento: se puede utilizar Classic Reporting o bien Intelligent Reporting (véase [“Elaboración de informes”](#) en la página 203).

Panel de navegación

El panel de navegación, que se encuentra en el lado izquierdo de todas las ventanas de ChemStation, está diseñado para agilizar el acceso a los principales elementos de ChemStation y también permite cambiar rápidamente de una ventana a otra. El panel de navegación contiene ChemStation Explorer, con estructura de árbol, y un área de botones configurables. También dispone de una función de ocultación automática para no comprometer el espacio de trabajo de ChemStation y funciones estándar como cambiar el tamaño y reorganizar el área de los botones de navegación.

Botones de navegación

Los botones de navegación permiten cambiar la ventana de ChemStation haciendo clic en el botón de navegación específico. La sección botón de navegación se puede minimizar, expandir y reorganizar.

ChemStation Explorer

El contenido del Navigation Pane depende de la vista. En las vistas Method and Run Control, Data Analysis, Review y Report Layout, el ChemStation Explorer permite navegar hasta los diferentes elementos de ChemStation. Por defecto, estos elementos de datos, métodos y secuencias se basan en las opciones del Configuration Editor. Los nuevos nodos para métodos, secuencias y ubicación de datos se pueden especificar con la opción “Preferences” del menú View.

Tabla 13 Elementos del Navigation Pane

Botones de navegación	Elementos del ChemStation Explorer
Method and Run Control	Plantillas de secuencias y métodos maestros, métodos de conjuntos de resultados
Data Analysis	Datos y Métodos maestros, métodos de conjuntos de resultados
Review	Plantillas de informes y datos
Report Layout	Classic Reporting: métodos maestros Intelligent Reporting: plantillas de informes
Verification (LC y LC/MS)	Accesos directos específicos de la vista Verification

Tabla 13 Elementos del Navigation Pane

Botones de navegación	Elementos del ChemStation Explorer
Diagnosis (LC y LC/MS)	Accesos directos específicos de la vista Diagnosis
Tune (LC/MS)	Accesos directos específicos de la vista Tune

Adquisición de datos

En la pantalla se monitoriza y se actualiza constantemente el estado de los instrumentos, además del tiempo de análisis transcurrido, tanto cuando el software está en una ventana visible como cuando es un icono. Las transacciones que se producen durante el análisis, incluidos los errores y las condiciones del instrumento al principio y al final del análisis, se registran en el libro de registro (logbook) del sistema y con cada fichero de datos se guarda un extracto de este.

Con cada fichero de datos se pueden guardar las condiciones del instrumento, por ejemplo, flujo, temperatura, presión y composición de disolventes en el caso de cromatógrafos de líquidos. Estos parámetros del instrumento se pueden mostrar y trazar para confirmar la calidad de cada análisis. La naturaleza exacta de los parámetros registrados depende tanto de la técnica como de la capacidad del instrumento configurado.

Se pueden usar una o varias ventanas para monitorizar en tiempo real los datos que el instrumento está adquiriendo. Los datos se muestran con unidades de medida reales como mAU, voltios, grados o bar. Cada ventana puede mostrar superpuestas varias señales de cromatografía o electroferografía o parámetros de instrumentos, por ejemplo, la presión. La configuración predeterminada de la pantalla se puede ajustar y el sistema la recuerda para que los usuarios puedan establecer su propia configuración como predeterminada del instrumento. La ventana tiene función de zoom y se puede usar el cursor para mostrar la respuesta de una señal determinada en cualquier momento del tiempo.

Durante un análisis, se pueden usar todas las funciones de ChemStation mediante la copia fuera de línea. Mientras se realiza la adquisición, la parte de Data Analysis de la sesión de un instrumento no es accesible y la revisión de los datos hay que realizarla en la copia fuera de línea.

Los usuarios que deseen comenzar el procesamiento de datos antes de terminar el análisis disponen de una función de instantánea (snapshot). La instantánea (snapshot) hay que tomarla en la copia fuera de línea de las sesiones del instrumento y se muestra inmediatamente para su revisión.

El diseño de las ventanas de información de señal y estado, incluidos los componentes del diagrama esquemático de la interfaz del instrumento, se guarda automáticamente.

En “**Adquisición de datos**” en la página 105 y el sistema de ayuda en línea hay más información al respecto.

Análisis de datos

Análisis de datos: presentación

La vista Data Analysis añade a la barra de herramientas estándar con funciones de análisis de datos agrupadas por tareas, por ejemplo, recálculo, reprocesamiento, integración, calibración, elaboración de informes, anotación y comparación de señales. Se pueden realizar las siguientes operaciones gráficas clave:

- Selección de presentaciones de una o varias señales al cargar el cromatograma o electroferograma.
- Superposición de los cromatogramas o electroferogramas de diferentes muestras.
- Sustracción de un cromatograma o electroferograma de otro.
- Alineación gráfica vertical y horizontal de las señales para ayudar a la comparación visual.
- Inversión o reflejo de las señales para ayudar a la comparación visual.
- Funciones de zoom y desplazamiento gráfico.
- Ajuste de los atributos de presentación, incluida la selección de marcas de señalización, líneas base, ejes, tiempos de retención/migración y nombres de los compuestos (el usuario también puede seleccionar la fuente de las etiquetas de los compuestos y RT, ajustar el tamaño y la orientación de la presentación, seleccionar la presentación como superpuesta o separada y seleccionar los factores de escala).

- La presentación de cromatograma o electroferograma puede incluir superposiciones gráficas de los parámetros de los instrumentos según la capacidad del instrumento configurado.
- Las anotaciones definidas por el usuario se pueden añadir de forma interactiva a la presentación, pudiendo seleccionar la fuente, el tamaño, la rotación del texto y el color (una vez definidas, las anotaciones se pueden mover, editar y eliminar).
- Copiar la presentación al portapapeles de Windows con el formato de meta-fichero y mapa de bits.
- Una función *de modo de selección* para mostrar los valores de puntos de datos individuales en unidades de detector.
- Exportación de puntos digitalizados de tiempo o intensidad al portapapeles de Microsoft Windows.

Análisis de datos: integración

El algoritmo de integración de ChemStation es la segunda revisión de una nueva generación que pretende mejorar la resistencia, fiabilidad y facilidad de uso.

Análisis de datos: cuantificación

El modo de calibración de la ChemStation de la ventana de análisis de datos permite la presentación simultánea de:

- Las señales que se van a calibrar con una indicación de la ventana de tiempo de retención o migración del compuesto actual.
- La Calibration Table cuya presentación se puede configurar mediante una amplia selección de parámetros de calibración.
- La curva de calibración del compuesto que se va a calibrar.

Todas las ventanas del modo de calibración están vinculadas de manera que los cambios en una se reflejan automáticamente en todas las demás. Este modo permite la selección y modificación gráfica de los datos de calibración.

La cuantificación se basa en los cálculos de %, % normalizado, patrón externo, % de patrón externo, patrón interno y % de patrón interno calculados en base a la altura o área del pico. Las calibraciones pueden ser multinivel e incluir varias definiciones de patrón interno. Los historiales de calibración se guardan automáticamente y se pueden usar para ponderar los cálculos de recalibración.

Para obtener más información sobre calibración y cuantificación, consulte [“Calibración”](#) en la página 187.

Análisis de datos: revisión por lotes

En la vista Data Analysis hay disponibles otros dos conjuntos de herramientas:

- Navigation Table (Tabla de navegación)
- Batch Review (Revisión por lotes)

La Navigation Table permite efectuar varias operaciones gráficas clave:

- Funciones estándar de configuración de tablas, como ordenar, opciones de arrastrar y colocar, selección de columnas, agrupación de elementos para especificar una configuración de navegación de tablas preferida.
- Funciones con el botón derecho del ratón para cargar una señal, superponer una señal, exportar datos o imprimir informes.
- Expandir una línea en la Navigation Table para revisar los detalles de las señales.
- Revisar señales y crear informes de ChemStation con un método específico.

En la ventana Batch Review se pueden realizar las siguientes operaciones gráficas:

- Definición de la revisión y el reprocesamiento automático o manual de ficheros de datos (calibrados).
- Recalibración de la Calibration Table.
- Revisión de las tablas de compuestos de los métodos calibrados.
- Creación de informes por lotes específicos.

Análisis de datos: recálculo

Las funciones del modo Recalculation permiten generar en muy poco tiempo resultados o informes de cualquiera de los subconjuntos de datos que se muestren en la Navigation Table. Se pueden generar con toda facilidad resultados para conjuntos de datos constituidos por el propio usuario, independientes de las secuencias en que se adquirieron originalmente las muestras. El método empleado se copiará en los ficheros de datos únicos (DA.M). Durante el recálculo no se efectuará ninguna calibración.

Análisis de datos: reprocesamiento

Las funciones del modo Reprocessing permiten reprocesar una secuencia entera, con los métodos definidos en la tabla de secuencias y con los resultados de las muestras de calibración para calcular los resultados de muestras.

Elaboración de informes

En caso de que para un instrumento esté habilitada la opción Intelligent Reporting, se habilita la vista **Review**, y el Report Template Editor para el Intelligent Reporting se podrá ver en la vista **Report Layout**.

Cuando Intelligent Reporting está habilitado, se pueden utilizar tanto plantillas de Intelligent Report como de Classic Reporting para crear Single Injection Reports y Sequence Summary Reports. Si se tienen los privilegios necesarios se pueden crear plantillas de informes para Intelligent Reporting.

Cuando Intelligent Reporting está deshabilitado, solamente se pueden utilizar plantillas clásicas de informes para crear informes de inyecciones individuales e informes resumen de secuencias. Si se tienen los privilegios necesarios se pueden crear plantillas de informes para Classic Reporting.

Utilidades y compatibilidades

ChemStation puede importar y exportar ficheros de datos con el formato de cromatografía andi (Analytical Data Interchange) de la Analytical Instrument Association (AIA), revisión 1.0, copyright 1992. Se admite la importación de datos en el nivel de conformidad uno (información de muestras y datos de señal) y la exportación de datos en el nivel de conformidad dos (información de muestras, datos de señal y resultados de integración).

ChemStation incluye comandos y funciones para admitir la norma de intercambio dinámico de datos (DDE) de Microsoft Windows, tanto como cliente DDE o como servidor DDE. Se incluyen comandos para establecer y terminar las conexiones, transferir información en ambas direcciones y ejecutar funciones remotas.

Personalización

ChemStation se puede personalizar mediante un potente conjunto de comandos. Estos comandos se pueden agrupar para ejecutar automáticamente una función específica; a tal grupo se le denomina macro. Los usuarios que escriben macros pueden definir sus propias variables, crear constructos condicionales o de bucle, realizar E/S físicas como el tratamiento de ficheros y la interacción de usuarios, anidar sus macros y programar e intercambiar datos con otras aplicaciones de MS-DOS o Microsoft Windows.

Para obtener información adicional sobre la personalización, consulte la referencia en línea que se ofrece en ChemStation bajo **Help > Commands**.

Automatización

ChemStation puede planificar y ejecutar secuencias multimétodo.

El grupo de parámetros de secuencia puede definirse para utilizar ficheros generados automáticamente o numerados secuencialmente, con un prefijo de hasta quince caracteres. El usuario puede seleccionar si desea realizar análisis completos o reprocesar los datos únicamente de secuencias. También puede seleccionar, en una serie, un comando de cierre específico o una macro de cierre definida por el usuario que se ejecuta cuando la secuencia termina, por error o después de terminar todos los análisis.

La tabla de secuencias, o lista de análisis a realizar, se crea en una interfaz de usuario del tipo hoja de cálculo y permite especificar los números de vial y los nombres de muestra, métodos de análisis, parámetros de cuantificación de muestras que incluyen la cantidad de muestra, un multiplicador y un factor de dilución, especificaciones de calibración, el parámetro de intercambio de datos LIMSID y el número de inyecciones repetidas. Dependiendo de los instrumentos y módulos configurados, habrá más campos accesibles; por ejemplo, si un sistema LC Agilent 1100/1200 incluye un colector de fracciones, en la tabla de secuencias aparecerá la columna "Fract. Start". El usuario puede configurar el aspecto de la tabla de secuencias. El usuario puede desplazarse por las celdas de la tabla y copiar, cortar o pegar cada celda, filas enteras o series de filas para crear secuencias de forma eficaz y rápida.

En la tabla de secuencias, las muestras se identifican como desconocidas, calibración o muestra de control. El tipo de muestra determina el tratamiento especial de la evaluación de los datos de la muestra:

- Las muestras desconocidas se evalúan y se da parte de ellas con arreglo a la especificación del método.
- Las muestras de calibración se utilizan para recalibrar el componente de cuantificación del método, tal y como se describe más adelante.
- Las muestras de control se evalúan según los límites de cada componente definido en el método. Si el resultado está fuera del rango de cualquiera de los parámetros especificados, la ejecución de la secuencia se detiene.

Las muestras de calibración se pueden definir como simples, cíclicas o agrupadas. En las recalibraciones simples, la recalibración se produce cada vez que se define una muestra de calibración en la secuencia. Las recalibraciones cíclicas se producen a intervalos definidos durante el análisis de una serie de muestras desconocidas. En la agrupación de una serie de muestras desconocidas, se analizan dos conjuntos de calibración. Después, se calculan los informes cuantitativos de las muestras desconocidas utilizando una Calibration Table promediada con dos conjuntos de calibración.

La función de secuencia parcial permite a los usuarios ver el orden de ejecución de la secuencia y, además, seleccionar las muestras individuales para volver a analizarlas o a evaluarlas. Al volver a evaluar los datos ya adquiridos, los usuarios pueden especificar si en el reprocesamiento se utilizarán los datos de cuantificación de la muestra originales o los nuevos datos introducidos en la tabla de muestras de la secuencia.

Las secuencias se pueden poner en pausa para analizar muestras prioritarias de una sola inyección con otro método y, después, se pueden reiniciar sin interrumpir la automatización. Se puede añadir muestras a la tabla de secuencias durante la ejecución de la secuencia.

Tanto la secuencia como las tablas de secuencias parciales se pueden imprimir.

La cola de secuencias permite ejecutar de manera automática varias secuencias una detrás de otra. La primera secuencia añadida a la cola se inicia cuando esté listo el sistema de datos, salvo que la cola solicite una pausa. Es posible añadir secuencias basadas en plantillas Easy Sequence, secuencias clásicas de ChemStation o pausas a la cola.

Utilizando el planificador de colas, es posible preparar una serie de secuencias y guardar el plan en el sistema de ficheros. Para iniciar esas secuencias planificadas, basta con abrir el plan y añadirlo a la cola de secuencias. Esta función es útil para iniciar tareas largas durante la noche o como trabajos de fin de semana.

Para más información sobre secuencias, consulte
[“Automatización/Secuencias”](#) en la página 113 y el sistema de ayuda en línea.

Buenas prácticas de laboratorio

ChemStation se ha desarrollado según normas de desarrollo y diseño internacionalmente reconocidas y dispone de varias funciones específicas para ayudar a los usuarios a trabajar en un entorno regulado. Estas funciones están en el área de especificación de métodos completos y verificación tal que los métodos se ajustan al uso previsto y se usan para comprobar el funcionamiento del sistema y asegurar la trazabilidad, originalidad y calidad de los datos.

Proceso de desarrollo

El certificado de validación entregado con cada paquete de software documenta las fases de desarrollo y pruebas del software realizados como parte del proceso de desarrollo. El proceso de desarrollo está registrado según la norma de calidad ISO 9001.

Especificación y uso de métodos

- Métodos globales: toda la especificación de los análisis de datos y del instrumento se guarda en un único lugar. Los métodos incluyen las especificaciones individuales de los rangos de los compuestos para comprobar que los resultados de cuantificación no se aplican fuera del rango calibrado.
- El registro histórico de cambios en los métodos permite a los usuarios de un método validado registrar automáticamente cómo y cuando se modificó un método. Opcionalmente, los usuarios pueden añadir al registro histórico un comentario con el motivo de la modificación. El registro histórico de cambios se guarda automáticamente como parte del método en formato binario. Para evitar el acceso no autorizado a los registros, está protegido por el esquema de acceso de usuarios, que se describe más adelante. El registro histórico de cambios se puede ver e imprimir.
- En cada método se pueden asignar límites por compuesto para varios parámetros de rendimiento cromatográficos o electroferográficos y del sistema, como se describe en la sección de cuantificación del análisis de datos. Los resultados que superan los rangos de estos parámetros se utilizan para controlar la ejecución de secuencias automatizadas, tal y como se describe en

la sección de automatización. Se indican en el informe del análisis correspondiente.

- Los informes de rendimiento o idoneidad del sistema (consulte la sección **Elaboración de informes** en este mismo documento) contienen un análisis detallado de la calidad de la separación.

Puede configurar distintos roles y privilegios en OpenLAB Shared Services. Los roles preconfigurados **ChemStation Administrator**, **ChemStation Lab Manager**, **ChemStation Analyst** y **ChemStation Operator** sirven como base para los roles de su entorno.

Solidez de los métodos

Los informes de resumen de secuencias (consulte [“Classic e Intelligent Reporting”](#) en la página 205) permiten probar la solidez de los métodos. Con Classic Reporting, los informes de formato extendido para los criterios seleccionados por el usuario se envían como diagramas de tendencias que se pueden utilizar para determinar los límites reales de funcionamiento. Con Intelligent Reporting, se pueden crear plantillas de informes propias para informes resumen de secuencias (Sequence Summary Reports), incluyendo gráficos de tendencias con líneas de límite. Estos límites se pueden incorporar al método para asegurar, mediante el análisis de muestras de control, que el método está funcionando según las especificaciones.

Funcionamiento del sistema

El kit de verificación de ChemStation, que forma parte del software estándar, comprueba automáticamente si la instalación es correcta y el funcionamiento de los componentes de evaluación de datos del software; para ello, compara los resultados generados cuando se ejecuta la prueba con los valores conocidos registrados previamente. El kit de verificación también permite a los usuarios definir sus propios ficheros de datos y métodos que serán la base de la prueba.

Trazabilidad, originalidad y calidad de los datos

El Run Time Logbook contiene un registro de transacciones de todo el sistema. También registra los eventos inusuales (como errores o cambios de parámetros realizados durante un análisis) así como las condiciones del instrumento antes y después de cada análisis. Con cada fichero de datos se guarda un extracto relevante del libro de registro.

También se registran las condiciones reales del instrumento, por ejemplo, presión, flujo y temperatura, ocurridas durante cada análisis si el instrumento configurado admite esta posibilidad. Después, estos datos se pueden presentar gráficamente con el cromatograma o electroferograma para mostrar las condiciones reales del instrumento durante ese análisis concreto y también se pueden incluir en el informe.

Los métodos guardados junto con el fichero de datos registran el método real en el momento del análisis y permiten realizar posteriormente una reconstrucción completa de los datos del informe. El método se guarda cuando terminan todas las fases del análisis.

Por defecto, todos los informes tienen marcas de hora y numeración de página trazable (estilo de numeración *página x de y*). El usuario puede seleccionar el nivel de detalle de cada informe, desde simples informes de resumen hasta informes detallados completos del sistema.

Los ficheros de registro tipo GLP, especificados como parte de la configuración del método, guardan todos los datos originales, incluida información de la muestra, el método de análisis de datos, las señales del cromatógrafo o electroferógrafo, las condiciones del instrumento, los resultados de integración y cuantificación, los datos del informe y el libro de registro del análisis en un fichero binario protegido por control tipo checksum. Se trata de un formato binario no editable que garantiza la originalidad de los resultados. El fichero incluye un esquema de revisiones que indica si los datos se han reprocesado.

En la tabla de secuencias se pueden definir los tipos de muestras de control y usarse para comprobar automáticamente el rendimiento del instrumento según los resultados de la muestra de control de calidad cuando el instrumento funciona desatendido. Los resultados que están fuera del rango aceptable definido por el usuario detendrán la ejecución automática del instrumento.

Estructura de datos de ChemStation

Sin creación de carpetas únicas (Unique Folder Creation)

Esta estructura de datos corresponde a la estructura de datos empleada en las revisiones de ChemStation B.01.03 y anteriores. Las secuencias, los métodos y los ficheros de datos y los resultados generados se guardan en ubicaciones fijas, especificadas y separadas. Por ejemplo, a los métodos se hace referencia por el nombre en una secuencia, y es responsabilidad del usuario mantener la integridad de los métodos, las secuencias y los ficheros de datos. Esto hace que el archivado a largo plazo de los datos y la reproducción de resultados sea una tarea tediosa. Los usuarios tienen que documentar el cromatograma, los resultados y el método asociado; esto no ocurre solamente en laboratorios regulados, sino también en algunas zonas de laboratorios no regulados (como pueden ser laboratorios ambientales). Sin la creación de conjuntos de datos, esto solamente se puede hacer imprimiendo todo en un informe.

No obstante, 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 conforme a los flujos de trabajo correspondientes:

- Durante la implementación de métodos puede resultar más cómodo tener solo 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.
- Las macros 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.
- En los casos en los que un mismo laboratorio tenga ChemStation C.01.03 pero también un sistema que todavía funcione con las revisiones de ChemStation B.01.03 o anteriores, es probable que lo más conveniente sea utilizar el mismo modo de organización de datos en todos los sistemas.

Con creación de carpetas únicas (Unique Folder Creation)

Para fortalecer la asociación entre los ficheros de datos y los métodos, con ChemStation B.02.01 se ha introducido el uso de conjuntos de datos (a los conjuntos de datos se les solía llamar contenedores de secuencias). Cuando se utiliza con ChemStation, el gestor de contenidos empresariales *Agilent OpenLAB*

Enterprise Content Manager (ECM) utiliza también esta concepción de los datos, puesto que ahora se puede transferir (archivar) el conjunto entero de resultados (secuencia/métodos/ficheros de datos/plantillas de informe) al ECM como si se tratara de una misma entidad.

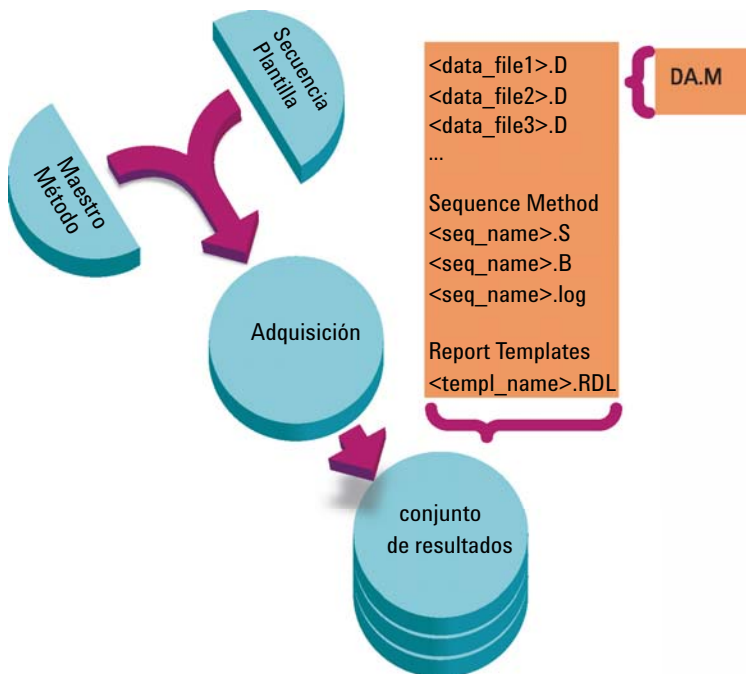


Figura 7 Adquisición de secuencias con Unique Folder Creation activado

Los métodos de la carpeta Chem32\1\methods sirven de métodos maestros. No sufren ningún cambio durante las adquisiciones y los análisis de datos.

De igual forma, las secuencias de la carpeta Chem32\1\sequence sirven de plantillas de secuencia que se pueden utilizar para reanalizar (pero no reprocesar) una secuencia varias veces.

Las plantillas de informes de la carpeta Chem32\repstyle sirven de punto de partida para que el usuario pueda crear las suyas propias.

El patrón de almacenamiento de datos varía en función de que se estén adquiriendo los datos de un solo análisis o de datos de secuencia:

- 1 Al ejecutar una secuencia, se crea automáticamente una nueva carpeta (**result set** con un nombre único en el subdirectorio especificado. Cuando se

analiza una sola muestra, el fichero de datos (*.d) se escribe en el subdirectorio especificado.

- 2 Cuando se analizan datos de secuencia, la plantilla de secuencia ejecutada (*.s) y todos los métodos (*.m) utilizados se copian en el conjunto de resultados. Las copias de los métodos se llaman **sequence methods** para así distinguirlos de los métodos maestros originales. En caso de utilizar Intelligent Reporting, todas las plantillas de informe utilizadas (*.rdl) se copian también en el conjunto de resultados.

Todas las tareas asociadas a secuencias (por ejemplo, adquisición y análisis de datos) se efectúan sobre las copias de las secuencias y los métodos. Por tanto, la plantilla de secuencia y los métodos maestros no sufren ningún cambio, y así se pueden utilizar en futuras secuencias.

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

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

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

- 3 Cada fichero de datos contiene una copia del método empleado para crear el análisis. Se almacena la información siguiente del método:
 - Los parámetros de adquisición se guardan como ACQ.TXT para que quede garantizada la conservación de los parámetros de los métodos originales con cada fichero de datos. Los parámetros se pueden visualizar e imprimir con el comando **Method > View Method**.
 - El método completo, incluidos parámetros de análisis de datos, se guarda cuando se ha completado la parte de análisis de datos como DA.M.

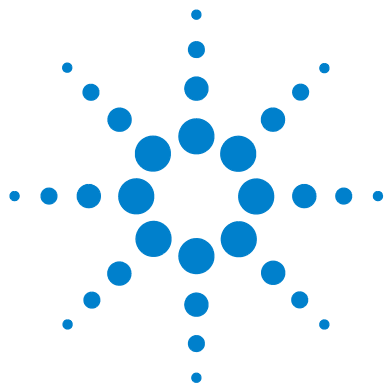
El uso de conjuntos de resultados ofrece una serie de ventajas:

- Los datos de secuencia no se sobrescriben. Cada adquisición de secuencia almacena los ficheros de datos resultantes en su propio conjunto de resultados con un nombre exclusivo.

- Con el concepto de conjunto de resultados, los datos se guardan con toda la información necesaria para el análisis de datos: copias del fichero de secuencia, de todos los métodos, y, cuando se trate de Intelligent Reporting, también de las plantillas de informes empleadas con la secuencia. Los métodos de secuencia pueden modificarse con una entrada específica de secuencia y no influyen en el método maestro original. Por lo tanto, el concepto de conjunto de resultados refuerza la razón de ser de una secuencia como un conjunto de ficheros de datos y métodos pertenecientes a la creación de resultados.
- En la vista **Data Analysis** se pueden realizar la revisión y el reprocesamiento de datos por medio de la Navigation Table.
- El concepto de conjunto de resultados incorpora las condiciones previas óptimas para el intercambio de datos con el *Agilent OpenLAB Enterprise Content Manager* (ECM).

Activación o desactivación de Unique Folder Creation

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 llamada **Data Storage**. En ella puede elegir entre **Unique Folder Creation ON** y **Unique Folder Creation OFF** (véase “[Preferences: ficha Sequence](#)” en la página 141). 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 el capítulo anterior.



7 Trabajar con métodos

Definición de método	83
Partes de un método	84
Tipos de métodos	86
Métodos maestros	86
Métodos de secuencia	86
Métodos de fichero de datos	87
Creación de métodos	88
Edición de métodos	89
Partes editables del método	89
Edición de métodos	89
Edición de métodos en el modo en línea	91
Edición de métodos en el modo fuera de línea	91
Administración de métodos	93
Árbol de métodos en ChemStation Explorer	93
Actualización del método maestro	94
Actualización de métodos	94
¿Qué sucede cuando se ejecuta un método?	97
Resumen del funcionamiento del método	97
Macro o comando de ejecución previa(Lista de control del análisis)	99
Data Acquisition (Run Time Checklist)	100
Data Analysis (Run Time Checklist)	100
Customized Data Analysis	101
Save GLP Data	101
Postrun Command or Macro	102
Save Copy of Method with Data	102
Save Copy of Method as DA.M with Data (ChemStation Default)	103



7 Trabajar con métodos

Estructura de datos de ChemStation

Los métodos son una parte fundamental de ChemStation. En este capítulo se explican los conceptos con detalle.

Definición de método

Un método comprende todos los parámetros para la adquisición y el análisis de datos, además de tareas previas y posteriores al análisis, para una muestra determinada, si son necesarios.

Los ficheros de métodos disponibles (*.m) se pueden ver en ChemStation Explorer. Para que la navegación sea rápida y sencilla, puede añadir ubicaciones adicionales para métodos al árbol de selección de ChemStation Explorer utilizando la ficha **Paths** del cuadro de diálogo **Preferences**.

Partes de un método

Los métodos se identifican mediante un nombre de hasta cuarenta caracteres alfanuméricos. El nombre del fichero siempre tiene la extensión .M que lo identifica como método. Los métodos se guardan como directorios que contienen ficheros individuales relacionados con los componentes del método.

Cada método está compuesto por cuatro componentes:

- Method Information.
- Instrument Control.
- Data Analysis.
- Run Time Checklist.

Method Information

Esta sección se utiliza para definir información descriptiva acerca del método.

Instrument Control

Define los parámetros que controlan el instrumento o sus componentes. Con un instrumento LC, los parámetros (composición de la fase móvil, velocidad de flujo, volumen de inyección, longitud de onda del detector, etc.) controlan la bomba, el inyector y el detector. Con un instrumento GC, los parámetros (temperatura del inyector, presión del inyector, ajuste del flujo de la columna empacutada, etc.) controlan el instrumento.

Data Analysis

Define los parámetros que controlan el procesamiento de los datos.

- *Signal Details*

Define las señales y sus propiedades usadas para evaluación de datos.

- *Integration Events*

Define los eventos programados que tendrán lugar en tiempos de retención o migración específicos en un cromatograma o electroferograma. Estos eventos programados se pueden usar para cambiar la manera en que se integra una señal.

- *Peak Identification*

Define los parámetros del procesamiento de datos asociados a la identificación de picos en el cromatograma o electroferograma.

- *Peak Quantification*

Define los parámetros de procesamiento de datos que afectan a los cálculos de cuantificación, los cuales determinan la cantidad o concentración del componente de la muestra correspondiente a cada pico.

- *Calibration and Recalibration*

Define los parámetros de procesamiento de datos que afectan a la calibración y la frecuencia con que esta se realiza.

- *Custom Fields*

Define las propiedades de campos personalizados relativos a la muestra o compuestos disponibles para el método. Estos campos permiten añadir información personalizada a una muestra o compuesto en una muestra.

- *Report*

Con Classic Reporting: define el formato del informe que se imprime después de un análisis.

Con Intelligent Reporting: especifica la plantilla de informes empleada para generar el informe después de un análisis.

Run Time Checklist

Define qué partes de un método se ejecutan al aplicar el método.

La Run Time Checklist se usa para:

- Adquirir, guardar y procesar datos para crear un informe.
- Ejecutar solamente una parte del método.
- Adquirir y guardar datos sin analizarlos.
- Volver a analizar los ficheros de datos existentes.
- Utilizar sus propias macros para análisis de datos, procesamiento previo y posterior al análisis.
- Guardar el resultado del análisis en un registro con fines de buenas prácticas de laboratorio.

Tipos de métodos

Existen distintos tipos de métodos. Dependiendo de la ubicación de almacenamiento, los métodos se pueden emplear como métodos maestros (como referencia dentro del conjunto de resultados de una secuencia) o como registro actual de los ajustes empleados durante la adquisición de datos.

Métodos maestros

Son métodos almacenados en el disco duro del ordenador. Los métodos almacenados tienen un nombre compuesto por hasta cuarenta caracteres alfanuméricos seguidos de la extensión .M. Los directorios de los métodos maestros se configuran en Preferences (véase “[Selección de rutas](#)” en la página 106).

El método maestro se guarda en un subdirectorio de métodos, disponible en el nodo Methods del ChemStation Explorer, y no está asociado directamente a ningún conjunto de resultados.

Métodos de secuencia

Cuando se ejecuta una secuencia (usando la opción **Unique Folder Creation ON**; véase “[Preferences: ficha Sequence](#)” en la página 141), se almacenan copias de todos los métodos maestros utilizados en el conjunto de resultados junto con los ficheros de datos de secuencia. Estos métodos están directamente vinculados a la secuencia y también se usan cuando se reprocesa la secuencia. Con la configuración predeterminada, los cambios realizados en estos métodos no se propagan automáticamente a los métodos maestros. Los cambios entran en vigor en cuanto empieza a analizarse la secuencia o esta sigue después de una pausa. Los cambios se propagan también a los métodos de ficheros de datos (DA.M) cuando se reprocesa la secuencia y cuando se genera cualquier informe.

Métodos de fichero de datos

Con los ficheros de datos se guarda una copia del método de fichero de datos (el método de fichero de datos DA.M).

El método de fichero de datos DA.M se actualiza automáticamente después de cada generación de resultados (adquisición de datos, recálculo o generación de informes). También lo carga ChemStation al recalcular resultados en el modo Last Result (véase [“Recalculation in Last Result Mode”](#) en la página 173).

El método se puede guardar con los ficheros de resultados (run.m). En estos casos, el directorio del método se guarda como un subdirectorío del directorío de ficheros de datos, mediante la opción **Save method with Data** de la Run Time Checklist.

En el ChemStation Explorer, se puede cargar fácilmente un método maestro o un método de secuencia haciendo doble clic sobre el método.

Creación de métodos

La creación de un nuevo método implica siempre modificar un método maestro o un método de secuencia y guardar las modificaciones. Se puede sobrescribir un método existente o bien guardar un método como un nuevo método maestro. Tenga en cuenta que cuando se modifica un método, la versión del disco permanece sin cambios hasta que se guardan.

Hay varias maneras de crear un método. Se puede crear un método para realizar una o todas las partes de un análisis. Por ejemplo, se puede crear un método para realizar solamente la adquisición de datos. Cuando esté listo para analizar los datos y generar un informe, puede modificar el método para que realice estas tareas de procesamiento de datos.

NOTA

No elimine el método predeterminado (DEF_LC.M, DEF_CE.M o DEF_GC.M). Estos ficheros de métodos se utilizan como plantillas para crear nuevos métodos.

Edición de métodos

Para editar un método se puede usar la opción Editar el método entero del menú Método. Se le guiará por todos los cuadros de diálogo del método y, al final, podrá guardarlo. Este proceso se muestra a continuación:

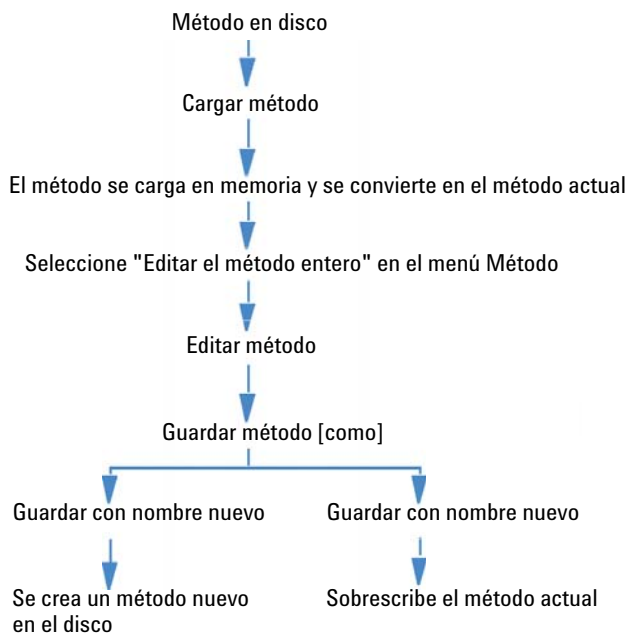


Figura 8 Edición de método

Partes editables del método

Cada método está compuesto por cuatro componentes que se pueden editar por separado.

Algunos de los siguientes apartados hacen referencia a cuadros de diálogo y otros son descripciones generales.

- La sección *Method Information* contiene:

- Un texto que describe el método.
- *Instrument Control* depende de la configuración y puede contener, por ejemplo:
 - Parámetros del horno.
 - Parámetros del inyector.
 - Parámetros del detector.
- La sección *Data Analysis* contiene:
 - Detalles de las señales.
 - Parámetros de integración.
 - Parámetros de cuantificación.
 - Parámetros de calibración.
 - Parámetros de configuración de campos personalizados.
 - Parámetros de informes.
- *Run Time Checklist* contiene:
 - Las partes del método que se ejecutarán.

Carpetas

Un método está compuesto por un grupo de ficheros almacenados en el directorio de método (*.M).

Como opción predeterminada, los métodos maestros se almacenan en Chem32\1\METHODS. Se pueden añadir rutas adicionales para métodos maestros usando los ajustes de preferencias. Los métodos de secuencia se guardan en el conjunto de resultados, y los métodos de fichero de datos se guardan como DA.M en el subdirectorio de ficheros de datos.

Ficheros

Los ficheros de método con la extensión .MTH contienen conjuntos de parámetros y tienen el formato UNICODE. El fichero INFO.MTH contiene los parámetros de control de métodos.

Los ficheros de métodos que contienen parámetros del instrumento tienen el nombre del módulo analítico correspondiente. Por ejemplo:

Tabla 14 Ejemplos de ficheros de métodos

HPCE1.MTH	Contiene el método de adquisición para la electroforesis capilar.
ADC1.MTH	Contiene el método de adquisición de Agilent 35900. Si se configuran dos instrumentos idénticos, los ficheros de método se denominan ADC1.MTH, ADC2.MTH.
DAMETHOD.REG	Para evaluación de datos.
LALS1.REG	Contiene parámetros para el inyector automático Agilent Serie 1100/1200 cuando se configura un sistema LC modular clásico. Los ficheros de método de los demás módulos Agilent Serie 1100/1200 siguen la misma convención Lxxx1.reg, donde xxx es el acrónimo del módulo.
AgilentSamplerDriver1.Rapid Control.xxx.xml	Contiene parámetros para el inyector automático Agilent Serie 1100/1200 cuando se configura un sistema LC modular. Hay disponibles varios ficheros .xml para las diversas partes de los parámetros (esto queda indicado por la parte xxx del nombre del fichero). También hay disponibles ficheros .xml similares para los demás módulos.

Edición de métodos en el modo en línea

Cuando una ChemStation en línea está inactiva, es posible editar todas las partes de un método de secuencia. Cuando se está ejecutando una secuencia, se pueden editar todos los parámetros de adquisición y algunos de los parámetros de análisis de datos, tales como los ajustes incluidos en Specify Report.

Los cambios se guardan y entran en vigor de inmediato en el análisis actual y en todas las líneas de secuencia siguientes que incluyan el mismo método. Esto implica que también se pueda cambiar el método durante una pausa en una secuencia o en una secuencia parcial.

Edición de métodos en el modo fuera de línea

Puede editar un método de secuencia en una ChemStation fuera de línea, al tiempo que se esté utilizando el mismo método para un análisis en una ChemStation en línea. En ese escenario, se puede editar la parte de análisis de datos

en la sesión fuera de línea. Una vez que se guarden los cambios en la sesión fuera de línea, ya se emplearán los ajustes de Data Analysis modificados en el siguiente análisis de datos del análisis de secuencia actual en la sesión en línea.

Las actualizaciones de métodos relativas a la calibración no se tienen en cuenta. Tampoco se combinan las entradas del historial; es decir, si un método está en ejecución en una sesión en línea y se cambia tanto en la sesión en línea como fuera de línea, el seguimiento de auditoría del método contendrá solamente los cambios efectuados en la ChemStation fuera de línea.

NOTA

Si el mismo método se carga en ChemStation en línea y fuera de línea, solamente es posible editar el método fuera de línea durante la ejecución de la secuencia. No es posible editar métodos en la ChemStation fuera de línea si la ChemStation en línea está inactiva.

Administración de métodos

Árbol de métodos en ChemStation Explorer

El árbol de métodos en el ChemStation Explorer se divide en dos partes. La parte superior muestra los métodos contenidos (Sequence Methods) en el conjunto de resultados cargado en ese momento. La parte inferior muestra los métodos en los directorios de métodos maestros (Master Methods), que se configuran en el cuadro de diálogo **Preferences**.

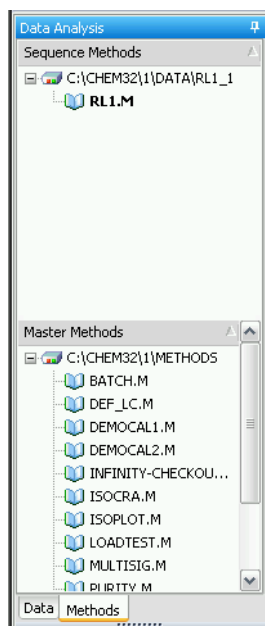


Figura 9 Árbol de navegación de métodos

El método cargado en ese momento aparece siempre en negrita.

Se pueden copiar con toda facilidad métodos maestros en métodos de secuencia arrastrándolos y soltándolos. Se copiará todo el método (parámetros de DA y parámetros de ACQ) en el conjunto de resultados.

Actualización del método maestro

La opción **Update Master Method** está disponible en el menú **Method** y en el menú contextual del método de secuencia en el ChemStation Explorer. Con esta función se puede actualizar el método maestro al que se remitió el usuario cuando creó la secuencia. La condición previa es que el método maestro esté todavía presente en el directorio de métodos maestros (el método maestro debe tener el mismo nombre que el método de secuencia).

NOTA

Es importante tener en cuenta que esta función *solamente* actualiza parámetros de análisis de datos del método de destino y que sobrescribe *todos* los parámetros de análisis de datos. 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.

También se pueden configurar los parámetros de secuencia para que ejecuten automáticamente esta función durante cada adquisición o reprocesamiento de secuencias. Para obtener más información véase “[Actualización automática de métodos maestros](#)” en la página 128.

Actualización de métodos

Con el cuadro de diálogo **Update Methods** (véase figura siguiente) se pueden copiar métodos del directorio de métodos maestros al conjunto de resultados y viceversa. Si se copia un método maestro en el conjunto de resultados, se copia el método entero (parámetros de DA y de ACQ). Si se actualiza un método maestro copiando un método de secuencia en el directorio de métodos maestros, solamente los parámetros de DA del método maestro se actualizarán.

Se puede abrir el cuadro de diálogo desde el menú **Method > Update Methods** o el menú contextual del método de secuencia en el ChemStation Explorer.

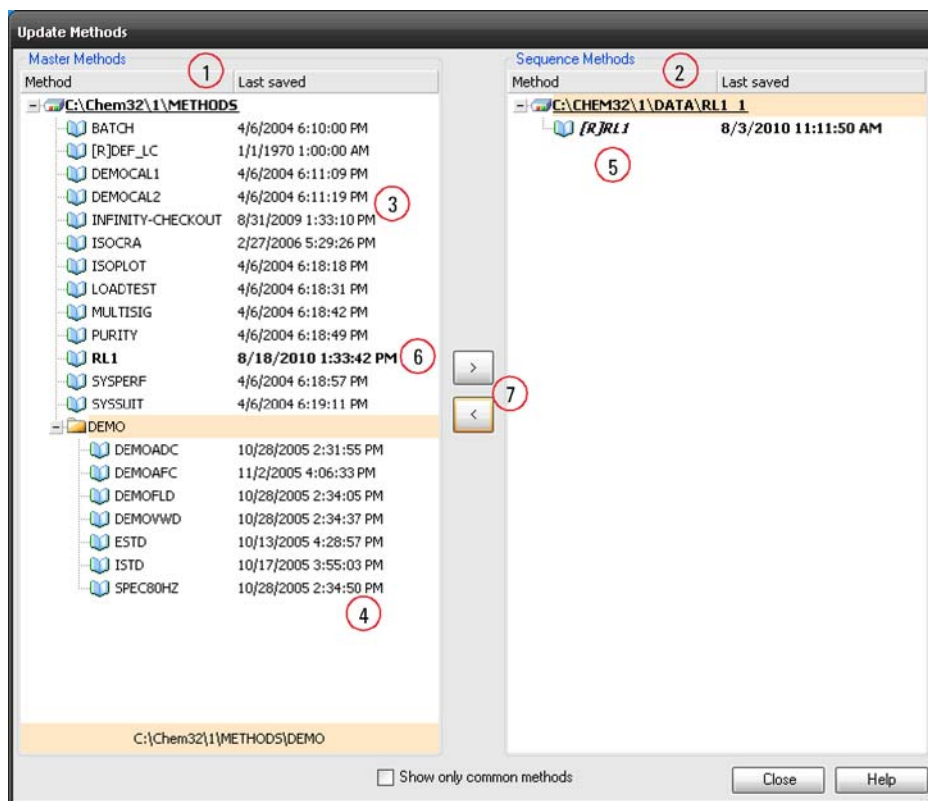


Figura 10 Cuadro de diálogo **Update Methods**

- 1 A la izquierda verá los métodos de todos los directorios de métodos maestros (según se hubieran configurado en Preferencias).
- 2 A la derecha verá los métodos del conjunto de resultados cargado en ese momento.
- 3 De cada método puede ver la fecha en que se guardó por última vez. La nota emergente de la fecha muestra la última entrada en el historial del método.
- 4 Los métodos se pueden guardar también en subdirectorios del directorio de métodos maestros.
- 5 Los métodos de solo lectura tienen un prefijo [R]. El método de secuencia cargado en ese momento aparece en cursiva.

7 Trabajar con métodos

Administración de métodos

- 6 Los métodos comunes al conjunto de resultados de la secuencia y el almacén de métodos maestros aparece en negrita. Los métodos se corresponden solamente por el nombre; si hay un nombre de método presente en más de un almacén, cada una de las instancias se considerará común.
- 7 Se pueden copiar métodos entre un almacén de métodos maestros y el conjunto de resultados de secuencia arrastrándolos y soltándolos o usando las teclas **<** y **>**. No se pueden sobrescribir métodos marcados como de solo lectura.

¿Qué sucede cuando se ejecuta un método?

El cuadro de diálogo **Run Time Checklist** especifica las partes del método que se van a ejecutar al iniciar un análisis.

En él hay ocho partes:

- Pre-Run Command or Macro.
- Data Acquisition.
- Standard Data Analysis.
- Analysis Method for Second Signal (GC solamente).
- Customized Data Analysis.
- Save GLP data.
- Post-Run Command or Macro.
- Save Copy of Method With Data (RUN.M).

Cuando se realiza un análisis, se ejecutan las partes del método especificadas en el cuadro de diálogo Run Time Checklist.

Resumen del funcionamiento del método

La siguiente lista muestra el flujo del funcionamiento del método cuando se seleccionan todas las partes en la Run Time Checklist.

1 *Prerun Command Macro*

Tiene lugar una tarea antes de comenzar el análisis.

2 *Data Acquisition*

Se lleva a cabo el programa del inyector.

Se inyecta la muestra.

Se adquieren los datos primarios.

Se guardan los datos.

3 *Save Copy of Method with Data (RUN.M)*; opcional en Run Time Checklist

4 *Data Analysis (Process Data)*

7 Trabajar con métodos

¿Qué sucede cuando se ejecuta un método?

Se carga el fichero de datos.

Se integra el fichero de datos.

Se identifica y cuantifica el pico.

Se busca en la librería espectral, si estuviera disponible.

Se comprueba la pureza del pico, si estuviera disponible.

Se guarda una copia del método (DA.M) y se imprime un informe.

5 *Customized Data Analysis*

Se ejecutan las macros.

6 *Save GLP Data*

Se guarda el registro binario GLPSave.Reg.

7 *Postrun Command Macro*

Tiene lugar una tarea después de terminar el análisis, por ejemplo, la generación de un informe personalizado.

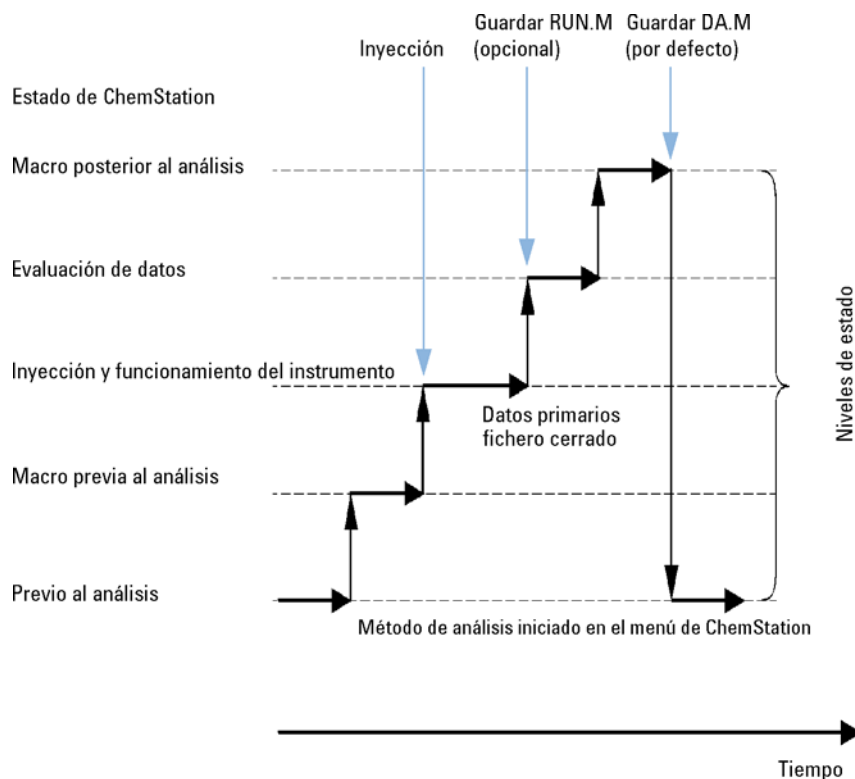


Figura 11 Funcionamiento del método

La figura siguiente muestra una visión general del estado de ChemStation durante la operación del método, donde se han seleccionado todas las partes de la Run Time Checklist.

NOTA

En el caso del modo "Unique Folder Creation OFF" no se genera DA.M. Para obtener más información, véase "[Preferences: ficha Sequence](#)" en la página 141.

Macro o comando de ejecución previa(Lista de control del análisis)

Si se especifica una macro o un comando de ejecución previa, se ejecuta antes de iniciar el análisis. Este componente se utiliza normalmente para personalizar el sistema con otros paquetes de software.

Data Acquisition (Run Time Checklist)

- Todos los parámetros se configuran con las condiciones iniciales establecidas en el método actual.
- Si está especificado, se ejecuta el programa de inyección y se realiza la inyección desde el vial definido en ese momento.
- La pantalla muestra el progreso del análisis, incluida información cromatográfica o electroferográfica, y datos espectrales, si los hubiera.
- Los datos se adquieren y se guardan en un fichero de datos.
- Una vez finalizada la adquisición de datos, los parámetros de adquisición del método ejecutado en ese momento se guardan por defecto en un fichero de datos de nombre ACQ.txt.

Data Analysis (Run Time Checklist)

Cuando llega el momento de parar (stop time), el análisis termina y todos los datos primarios se guardan en el disco duro del ordenador. La parte de Data Analysis del software se inicia cuando se han guardado todos los datos primarios.

Integration

- Los objetos del cromatograma o electroferograma de la señal se integran según se indica en el cuadro de diálogo Integration Events.
- Se determinan el inicio y el máximo del pico, el tiempo de retención o migración y el final del pico.
- Se definen líneas base debajo de cada pico para determinar la altura y el área final del pico.
- Los resultados de la integración se incluyen en la lista Integration Results.

Identificación de picos y cuantificación (Peak Identification and Quantification)

- Utilizando los tiempos de retención o migración y los picos cualificadores opcionales, el software identifica los picos mediante referencias cruzadas con compuestos conocidos, definidos en la Calibration Table.

- Mediante la altura o el área de los picos, el software calcula la cantidad de cada componente detectado usando los parámetros de calibración especificados en la Calibration Table.

Spectra Library Search (ChemStations para sistemas LC 3D, CE, CE/MS y LC/MS solamente, disponible con Classic Reporting).

Para todos los picos que tengan un espectro UV visible, se puede realizar una búsqueda automatizada de una librería espectral predefinida para identificar los componentes de la muestra en función del espectro UV visible. Para conocer más detalles véase *Understanding Your Spectral Module*.

Chequeo de pureza de picos (Peak Purity Checking) (ChemStations para sistemas LC 3D, CE, CE/MS y LC/MS solamente)

Para un pico con espectro UV visible, se puede calcular el factor de pureza de dicho pico y guardarlo en un registro. La pureza del pico se puede determinar automáticamente al final de cada análisis como parte del método, si la casilla Check Purity está seleccionada cuando se especifica una búsqueda de librerías automatizada o al seleccionar un estilo de informe. Para conocer más detalles véase *Understanding Your Spectral Module*.

Print Report

Se genera un informe con la identidad y cantidad de los componentes detectados en el análisis.

Customized Data Analysis

Permite al usuario ejecutar sus propias macros para evaluar los datos analíticos.

Save GLP Data

Guarda el registro binario GLPSave.Reg junto con el método de análisis de datos en el subdirectorio por defecto de los ficheros de datos. Esta función

está diseñada para ayudar a comprobar la originalidad de los datos y la calidad de los análisis individuales.

El fichero binario GLPSave.Reg es un fichero de registro no editable y protegido que contiene la siguiente información:

- Puntos de referencia de instrumentos clave (se pueden revisar gráficamente).
- Señales cromatográficas o electroferográficas.
- Resultados de integración.
- Resultados de cuantificación.
- Método de análisis de datos.
- Libro de registro.

Estos datos se guardan solamente si la función Save GLP Data está activada; para activarla, marque la casilla en Run Time Checklist. Los datos de GLP se pueden revisar, pero no editar, en el menú Data Analysis de ChemStation.

Postrun Command or Macro

Si se especifica un comando o macro post-análisis, se ejecuta después de la evaluación de los datos, por ejemplo, al copiar los datos a un disco para una copia de seguridad.

Save Copy of Method with Data

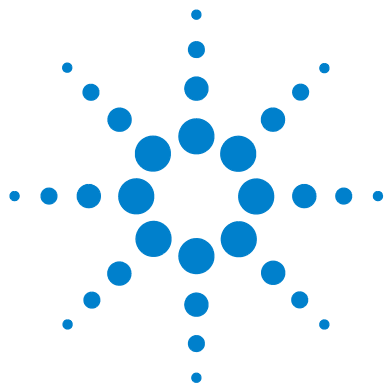
Se realiza después de la adquisición de los datos y solamente si la opción **Save method with Data** está seleccionada en la Run Time Checklist. Copia el método empleado para las adquisiciones en el directorio de datos, con el nombre RUN.M. RUN.M contiene parámetros de análisis de datos y adquisición. Es de solo lectura, y por tanto constituye un medio de reconstruir el análisis en el futuro, aun cuando el método cambie entre medias. En él se puede ver en qué han afectado los cambios al método o los parámetros seleccionados en el análisis, lo cual puede ayudar al usuario a optimizarlo.

Save Copy of Method as DA.M with Data (ChemStation Default)

Independientemente de los elementos marcados en la Run Time Checklist, se guarda una copia del método ejecutado como DA.M junto con el informe en el fichero de datos. Eso se hace al final de la parte *Standard Data Analysis* y también cuando se crea un informe en la vista Data Analysis. El fichero DA.M se crea solamente si se ha especificado al menos un destino de informe en los ajustes de Reporting.

7 Trabajar con métodos

¿Qué sucede cuando se ejecuta un método?



8

Adquisición de datos

Definición de adquisición de datos 106

Monitores en línea 109

Monitor de señales en línea 109

Monitor de espectros en línea 109

Libro de registro 110

Información del estado 111

Estado de ChemStation 111

Barra de estado 111

Diagrama del sistema 112

Este capítulo contiene una introducción al proceso de adquirir datos.



Definición de adquisición de datos

Durante la adquisición de datos, todas las señales adquiridas por el instrumento se convierten de señales analógicas a señales digitales en el detector. La señal digital se transmite a ChemStation electrónicamente y se guarda en el fichero de datos de la señal.

Selección de rutas

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 el programa. 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 se 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**.

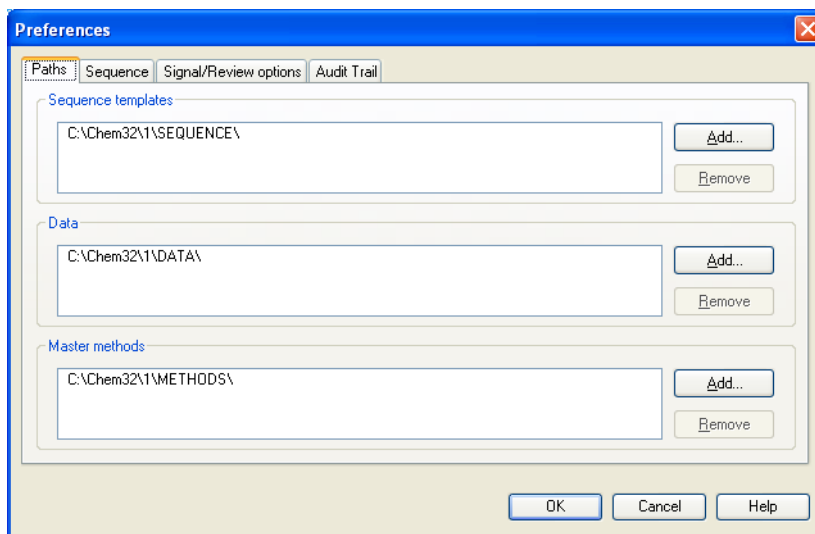


Figura 12 Ficha **Paths** en el cuadro de diálogo **Preferences**

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

8 Adquisición de datos

Definición de adquisición de datos

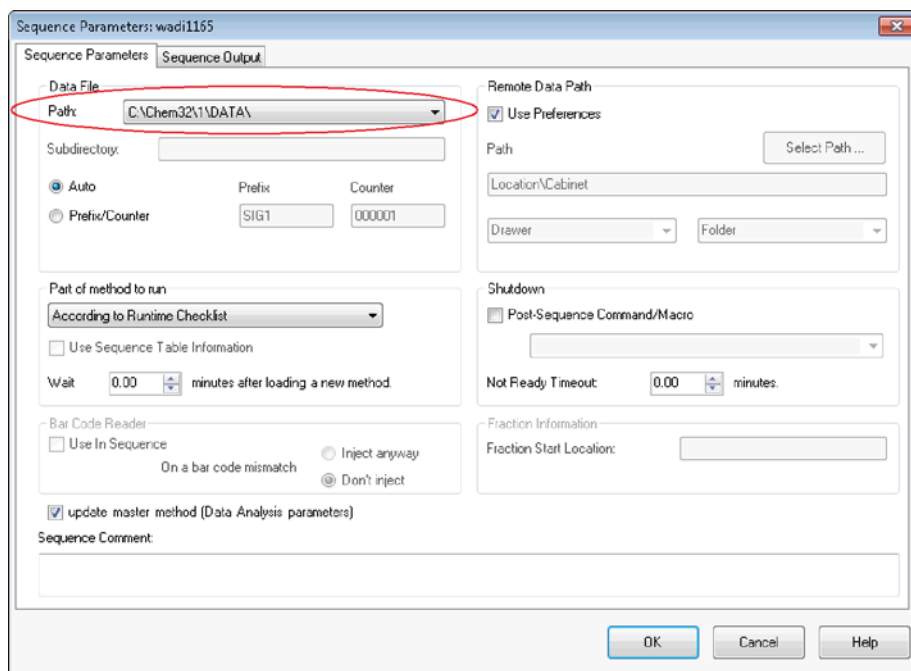


Figura 13 Selección de ruta de datos en el cuadro de diálogo **Sequence Parameters**

Monitores en línea

Existen dos tipos de monitores en línea: el monitor de señales en línea y el monitor de espectros en línea.

Monitor de señales en línea

El monitor de señales en línea permite monitorizar varias señales y, si el instrumento asociado lo permite, los gráficos del rendimiento del instrumento en la misma ventana. Puede seleccionar las señales que desea ver y ajustar el tiempo y el eje de absorbancia. Para los detectores que dispongan de esta función, hay un botón de balance.

Para mostrar la respuesta absoluta de la señal en la línea de mensaje, mueva el cursor en forma de cruz de la pantalla.

Monitor de espectros en línea

El monitor de espectros en línea sólo está disponible para las ChemStations que admiten la evaluación de espectros. Muestra la absorbancia como una función de la longitud de onda. Puede ajustar el rango de las longitudes de onda mostradas y la escala de absorbancia.

Libro de registro

El libro de registro muestra los mensajes que genera el sistema analítico. Estos mensajes pueden ser de error, del sistema o de eventos de un módulo. El libro de registro registra estos eventos aunque no se hayan mostrado. Para obtener más información acerca de un evento del libro de registro, haga doble clic en la línea correspondiente para mostrar un texto de ayuda descriptivo.

Información del estado

Estado de ChemStation

La ventana ChemStation Status muestra un resumen del estado del software ChemStation.

Cuando se ejecuta un solo análisis:

- la primera línea de la ventana ChemStation Status muestra el análisis en curso,
- la segunda línea de la ventana muestra el estado del método actual, y
- la tercera línea muestra el nombre del fichero de datos primarios además del tiempo de análisis en minutos (para los instrumentos GC, también se muestran los ficheros de los inyectores delantero y posterior).

La ventana Instrument Status ofrece información sobre el estado de los módulos instrumentales y detectores. Muestra el estado de cada componente y las condiciones actuales cuando corresponda, por ejemplo, presión, gradiente y flujo.

Barra de estado

La vista Method and Run Control View de la interfase gráfica de usuario del sistema ChemStation está compuesta por barras de herramientas y una barra de estado. La barra de estado contiene un campo de estado del sistema e información sobre el método y la secuencia actualmente cargados. Si se modificaron después de cargarlos, aparecen marcados con una rueda dentada amarilla. Para el módulo Agilent Serie 1100/1200 para LC, el símbolo EMF amarillo recuerda al usuario que se han excedido los límites de utilización establecidos para consumibles (por ejemplo, la lámpara).

Diagrama del sistema

Si los instrumentos analíticos configurados lo admiten (por ejemplo, los módulos Agilent Serie 1200 Infinity para LC o el GC Agilent Serie 6890), puede mostrarse un diagrama gráfico del sistema ChemStation, que le permite comprobar rápidamente el estado del sistema de un vistazo. Seleccione System Diagram en el menú View de la ventana Method and Run Control View para activar el diagrama. Se trata de una representación gráfica del sistema ChemStation donde cada componente está representado por un icono. Se muestra el estado actual utilizando el código de color descrito a continuación.

Tabla 15 Colores empleados para indicar el estado del módulo o instrumento

Color	Status
gris oscuro	fuera de línea
gris claro	En espera (p. ej. lámparas apagadas)
amarillo	no preparado
verde	listo
morado	procesamiento previo, procesamiento posterior
azul	en ejecución
rojo	error

Además, puede mostrar la lista de los valores de los parámetros. Además de la presentación del estado, el diagrama permite tener acceso rápido a los cuadros de diálogo para configurar los parámetros de cada componente del sistema.

Consulte la parte relativa a instrumentos del sistema de ayuda en línea para más información acerca del diagrama del sistema.



9 Automatización/Secuencias

Definición de la automatización	115
¿Qué son las secuencias y las plantillas de secuencia?	116
Sequence Parameters	117
Sequence Table	118
Creación de secuencias(Secuencias y plantillas de secuencias)	119
Utilización del Sequence Table Editor	119
Utilización del botón de inserción de rango de viales	119
Utilización del botón de adición de líneas	119
Utilización del botón Custom Fields	120
Easy Sequence	121
Easy Sequence	121
Utilización de la ficha Easy Sequence Setup (Template)	122
Utilización de la ficha Easy Sequence (Sequence)	123
Utilización de la ficha Sequence Queue (Queue)	124
Uso de secuencias (secuencias y plantillas de secuencias)	126
Adquisición de datos en una secuencia	126
Adquisición de datos de análisis individuales	128
Actualización automática de métodos maestros	128
Muestras prioritarias	129
Secuenciación con muestras de control	130
Pausar una secuencia	130
Interrumpir una secuencia	130
Abortar una secuencia	131
Análisis de una secuencia parcial	131
Planificación y colas de secuencias	134
Creación de conjuntos de resultados constituidos por el usuario	137
Archivo de registro de secuencias	138



¿Qué ocurre cuando se analiza una secuencia?	139
Estructura del fichero de datos de la secuencia	141
Preferences: ficha Sequence	141
Estructura de ficheros de datos con Unique Folder Creation ON	145
Asignación de nombres a ficheros de datos en una secuencia	146
Asignación automática de nombres a ficheros de datos en una secuencia	146
Introducción manual de nombres de ficheros de datos	147
Migración de conjuntos de resultados	148
Operación postsecuencia	150
Tiempo de espera para instrumento no listo (sólo LC y CE)	150
Tiempo de espera (sólo LC y CE)	150
Recalibración automática	151
Especificación de recalibraciones	152
Parámetros de recalibración de la tabla de secuencia	152
Tipos de secuencia	155
Secuencias de calibración explícita	155
Secuencias de calibración cíclicas de un único nivel	155
Secuencias de calibración cíclicas multinivel	156
Calibraciones explícitas y cíclicas juntas	159
Secuencias de calibración cíclica con agrupamiento	161
Secuencias de recalibración cíclica con múltiples viales que contienen la misma dilución de un estándar	165

En este capítulo se describen los conceptos de automatización. Se explica cómo utilizar secuencias en ChemStation, qué ocurre cuando se analiza una secuencia y cómo personalizar secuencias.

Definición de la automatización

La automatización es el análisis desatendido de más de una inyección.

La parte de secuencias del software ChemStation permite al usuario automatizar la adquisición, evaluar datos y generar informes.

¿Qué son las secuencias y las plantillas de secuencia?

Una secuencia es una serie de instrucciones que automatizan el análisis de muestras. Puede utilizarse para inyectar automáticamente cada muestra, obtener los datos y analizarlos según el método especificado para esa muestra. Cada vial de muestra de una secuencia puede analizarse con un método analítico diferente y, por lo tanto, utilizar diferentes conjuntos de condiciones cromatográficas/electroferográficas y parámetros de evaluación.

ChemStation introduce dos modos de almacenamiento de datos que le permiten elegir el modelo de almacenamiento de datos que corresponda a su flujo de trabajo. Estos modos influyen en el uso de la secuencia:

- **Unique Folder Creation** activada
- **Unique Folder Creation** desactivada

Unique Folder Creation activada, para mantener la coherencia de datos de muestra, utiliza secuencias como "plantillas de secuencia" que se pueden utilizar para ejecutar la adquisición varias veces; no obstante, estas plantillas no se utilizan para reprocesar en **Data Analysis**. Cuando la plantilla de secuencia está activa, se crea un conjunto de resultados que contiene todos los ficheros relacionados. Si se reutiliza la plantilla de secuencia, se crea un nuevo conjunto de resultados para cada reutilización.

Unique Folder Creation desactivada almacena todos los datos en un directorio. Los ficheros de secuencia *.s no se utilizan como plantillas de secuencia, con lo que si se vuelve a ejecutar la secuencia se pueden sobrescribir los datos si no se modifica el directorio de datos desde el usuario.

Las secuencias y plantillas de secuencia disponibles (*.s) están visibles en ChemStation Explorer. Para navegar fácil y rápidamente, se pueden añadir ubicaciones de secuencia o de plantilla de secuencia adicionales al árbol de selección de ChemStation Explorer con la ficha **Paths** del cuadro de diálogo **Preferences**.

Sequence Parameters

El cuadro de diálogo **Sequence Parameters** contiene información común a todos los viales de muestra en una secuencia. Utilice este cuadro de diálogo para:

- Seleccionar el directorio de datos del cuadro combinado **Path** e introducir la información del nombre del operador (se muestra el nombre del operador en el cuadro de diálogo **access level**).
- Especificar cómo debería realizarse el procesamiento de secuencias escogiendo una parte específica de parámetros de **Methods and Run**.

Por ejemplo, puede elegir entre:

- Ejecutar la lista control del análisis.
- Adquirir solamente.
- Reprocesar solamente (para datos adquiridos hasta ChemStation Rev. B.01.03 o datos adquiridos con la opción **Unique Folder Creation OFF**).

NOTA

Los datos de secuencia adquiridos con las revisiones de ChemStation hasta la B.01.03 o los adquiridos con las opciones **Unique folder Creation OFF** se tienen que reprocesar con la opción **reprocess** de la vista **Method and Run Control**.

Los datos de secuencia adquiridos con las revisiones de la ChemStation B.02.01 o posteriores se tienen que reprocesar con la opción **reprocess** en la **Data Analysis Navigation table**.

Si se selecciona la opción **reprocess**, se pueden utilizar los datos de la muestra definidos en el análisis original, o si se activa la casilla **Use Sequence Table information**, se pueden utilizar los datos de muestra actualizados introduciendo nuevos datos en la tabla de secuencias:

- Especificar qué ocurre cuando se finaliza la secuencia con los parámetros **shutdown**.
- Especificar hay que utilizar códigos de barras en las secuencias y cómo actuar frente a un error en el código de barras (partiendo de que haya un lector de código de barras instalado en el sistema).

Sequence Table

La Sequence Table determina los métodos que se utilizan para analizar los viales de muestra y el orden en el que se analizan. Esta tabla también contiene información de cada muestra, incluido el nombre, los parámetros de cuantificación y los parámetros de recalibración.

El cuadro del grupo de inyectores se muestra en los instrumentos que admiten muestreo doble (GC). Si se selecciona **Front** o **Back** se muestran las líneas de la Sequence Table y el estado del inyector en ese momento.

Para describir las columnas de la tabla y el modo en que interactúan con la información almacenada con el método, consulte la ayuda en línea.

Creación de secuencias(Secuencias y plantillas de secuencias)

Utilice la tabla de secuencia para especificar las muestras, métodos y viales que analizar en la secuencia. La tabla de secuencia recoge cada muestra de la secuencia en el orden en que se analizarán y contiene la información de viales, métodos y calibración necesaria para cada muestra.

Utilización del Sequence Table Editor

Si desea modificar la visualización y el contenido de su Sequence Table, puede abrir el Sequence Table Editor pulsando el símbolo **Configure Table** que aparece en la esquina inferior derecha de la Sequence Table. Una vez abierto, el Sequence Table Editor permite al usuario especificar si una determinada columna debe aparecer o no en la Sequence Table. También permite definir las anchuras correspondientes a cada una de las columnas de la tabla. Dependiendo de los paquetes de software instalados se añadirán más columnas, por ejemplo, el campo **Target Mass** si hay instalado un LC/MS.

Utilización del botón de inserción de rango de viales

Si tiene muchas muestras que utilizan el mismo método, puede introducir rápidamente esas muestras en la tabla de secuencias con la función Insertar rango de viales. Esta función copia el nombre del método, el rango de viales, el número de inyecciones por vial y, si especifica la cantidad de muestras, la cantidad ISTD, el multiplicador y la dilución. El sistema introduce entonces la información de cada vial en el rango de la tabla de secuencia.

Utilización del botón de adición de líneas

Para añadir una línea en blanco nueva al final de la tabla de secuencia, pulse el botón Agregar línea.

Utilización del botón Custom Fields

Si se han configurado campos personalizados en los métodos utilizados en la Sequence Table, pulse el botón Custom Fields para editar los valores de estos campos para cada muestra (campos personalizados relacionados de muestras) o para cada compuesto en el método de una muestra (campos personalizados relacionados de compuestos).

Easy Sequence

Easy Sequence es una interfaz de usuario pensada para poder configurar fácil y rápidamente secuencias de plantillas. La plantilla especifica parámetros que deberá ver o editar el usuario. La configuración de calibración constituye una forma fácil de utilizar la interfaz para arrastrar y soltar con el fin de especificar los tipos de calibración y las posiciones de muestras, y muestra una vista general de la secuencia. Con **Easy Sequence**, se pueden enviar varias secuencias a la cola de secuencias para su análisis en el sistema de datos.

The screenshot displays the 'Easy Sequence' window with the following sections:

- Method Information:** Method: C:\CHEM32\METHODS\MYDEM001.M; Mode: ☐ Throughput ☐ Confirmation ☐ Custom.
- Data Information:** Data File: <S>.
- Sequence Information:** Sequence Location: ...; Sequence Name: ...
- Sample Information:** Starting Vial Location: 1; Number of Samples: 6; Sample Name: AnySampleName<C>.
- Comments:** This is a comment field.
- Buttons:** Import Samples..., Fill Samples, Clear Sample List.
- Front Sample List:** A table with 2 columns: Vial and Sample Name.

Vial	Sample Name
1	AnySampleName0001
2	AnySampleName0002
3	AnySampleName0003
4	AnySampleName0004
5	AnySampleName0005
6	AnySampleName0006

Figura 14 Ficha Easy Sequence

Utilización de la ficha Easy Sequence Setup (Template)

Se emplea **Easy Sequence Setup** para crear plantillas que sirvan como punto de partida para crear secuencias. Hay dos paneles: Samples y Calibration. El panel **Samples** especifica la información de método, muestra, datos y secuencia. La plantilla se emplea también para especificar qué parámetros estarán ocultos o serán de solo lectura. El panel **Calibration** cuenta con una interfaz gráfica a través de la cual se pueden configurar y ver los análisis de calibración. Tiene una interfaz para arrastrar y soltar elementos fácilmente con el fin de especificar los tipos de calibración (cíclica o agrupada) y las posiciones de las muestras.

Creación de una plantilla Easy Sequence:

- 1 En la ficha **Easy Sequence Setup**, seleccione el panel **Samples**. Abra una plantilla existente o cree una nueva plantilla.
- 2 Seleccione el **Method**. Se mostrarán opciones de inyección duales si la fuente de inyección del método es Dual. Se puede especificar un análisis inverso para la señal inversa. Este método es el único parámetro necesario para una plantilla.
- 3 Si lo desea, introduzca la duración estimada (en minutos) de un análisis de muestra. Ese es el tiempo transcurrido desde que empieza una muestra hasta que empieza la siguiente. Este parámetro se utiliza para estimar la duración total esperada de la secuencia. Deje ese campo en blanco si no desea utilizar la función Estimated Cycle Time.
- 4 Especifique la **Starting Vial Location**, el **Number of Samples** y el **Sample Name**.
- 5 Seleccione la **Data Location**.
- 6 Seleccione la **Sequence Location** y especifique el **Sequence Name**.
- 7 Introduzca los comentarios que desee para la plantilla.
- 8 Especifique los parámetros que estarán ocultos o serán de solo lectura. Introduzca un valor predeterminado en **injections/vial**, **sample amount**, **ISTD amount**, **injection volume**, etc. Esto ayuda a reducir la probabilidad de error al crear una secuencia en la ficha **Easy Sequence**.
- 9 Guarde la plantilla.

Para definir las calibraciones:

El método empleado en la plantilla tiene que estar calibrado en los niveles necesarios.

- 1 En la ficha **Easy Sequence Setup**, seleccione el panel **Calibration**.
- 2 Seleccione **Cyclic**, **Bracketing** o **Simple Calibration** en la lista desplegable **Calibration Mode**.
- 3 El **Sequence Diagram** tiene las siguientes secciones:
 - **Sequence Start**
 - **Bracketing/Cyclic**
 - **Samples/Injections**
 - **Sequence End**
- 4 En el área **Samples** de la Sequence, ajuste el **Calibration Interval** en función del número de muestras o el número de inyecciones.
- 5 Configure el **Sample type**, **Blank**, **Calibrant** o **QC Sample** arrastrando el icono del área **Sample Type** a la sección **Sequence Diagram**.
- 6 Configure los parámetros de cada Sample Type y asígneles los valores **Hide** o **Read-Only**.
- 7 Compruebe el modo de calibración en la vista general **Easy Sequence**.
- 8 Guarde la plantilla.

Utilización de la ficha Easy Sequence (Sequence)

La ficha **Easy Sequence** sirve para crear una secuencia a partir de la plantilla creada en **Easy Sequence**. También se pueden importar muestras guardadas en formato CSV.

Para definir una secuencia

- 1 En la ficha **Easy Sequence**, abra una plantilla pulsando el icono Open Easy Sequence Setup.
- 2 Haga los cambios necesarios, como pueden ser las ubicaciones de viales de muestra, las ubicaciones de viales de compuestos de calibración, la ubica-

ción de los datos o la de la secuencia. Los parámetros disponibles para editar dependerán de la configuración de la plantilla.

- 3 Si las muestras preintroducidas no coinciden con las nuevas ubicaciones de muestras, pulse **Fill Samples** para volver a introducirlas en la tabla.
- 4 Pulse **Preview/Print Sequence...** para previsualizar la Sequence.
- 5 Guarde la secuencia.

SUGERENCIA

La secuencia se podrá editar mientras su estado en la cola sea **Pending**.

- 6 Pulse **Save and Add to Queue** para enviar la Sequence a la Sequence Queue.

Para importar datos de muestra

Los datos de muestra configurados se pueden importar a **Easy Sequence**. Antes de importar muestras, se puede configurar el fichero CSV y darle el formato apropiado. Consulte en la ayuda en línea cómo crear un fichero de datos de muestra en formato CSV.

- 1 En la ficha **Easy Sequence**, abra una plantilla pulsando el botón **Open Easy Sequence Setup**.
- 2 Pulse **Import Samples...**
- 3 Seleccione el fichero CSV que desee importar.
Se importarán todos los campos válidos.

NOTA

Para importar datos de muestra a la **Back Sample List**, compruebe que esté seleccionada la **Back Sample List** y que aparezca en pantalla antes de pulsar el botón **Import Samples**.

- 4 Compruebe los campos revisando la Sample List.

Utilización de la ficha Sequence Queue (Queue)

Se pueden añadir múltiples secuencias diferentes a la cola. La cola de secuencias admite tanto plantillas Easy Sequence como secuencias clásicas de ChemStation. La primera secuencia añadida a la cola se inicia cuando esté listo el sistema de datos, salvo que la cola solicite una pausa. Las secuencias adicionales

les se añaden al final de la cola, y es posible cambiar el orden en que se analiza la secuencia. La **Easy Sequence** se puede editar mientras esté en la cola, siempre y cuando su estado sea Pending.

Para obtener más información sobre la planificación de secuencias, consulte [“Planificación y colas de secuencias”](#) en la página 134.

Para obtener más información sobre Easy Sequence, consulte el sistema de ayuda en línea. En la ayuda en línea hay tutoriales acerca de **Easy Sequence Setup**.

Uso de secuencias (secuencias y plantillas de secuencias)

Desde el menú Secuencia se pueden crear secuencias y acceder a secuencias (y a plantillas de secuencias). Las secuencias pueden crearse y guardarse del mismo modo que los métodos. Al guardar una secuencia, se crea un fichero con extensión .S. Si desea editar o utilizar una secuencia de nuevo, puede acceder a ésta, por ejemplo, con la opción Cargar secuencia del menú Secuencia.

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 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.

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

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 (“conjunto de resultados”).

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**. Por defecto, el nombre es <sequence_name> <acquisition_date> <acquisition_time>, pero puede configurarse con las opciones Operator, Instrument, Counter y PC Name, o bien se puede introducir manualmente cualquier nombre. Si el **Name Pattern** no sirve para asignar nombres únicos para los conjuntos de resultados, ChemStation añadirá un contador para garantizar su unicidad.

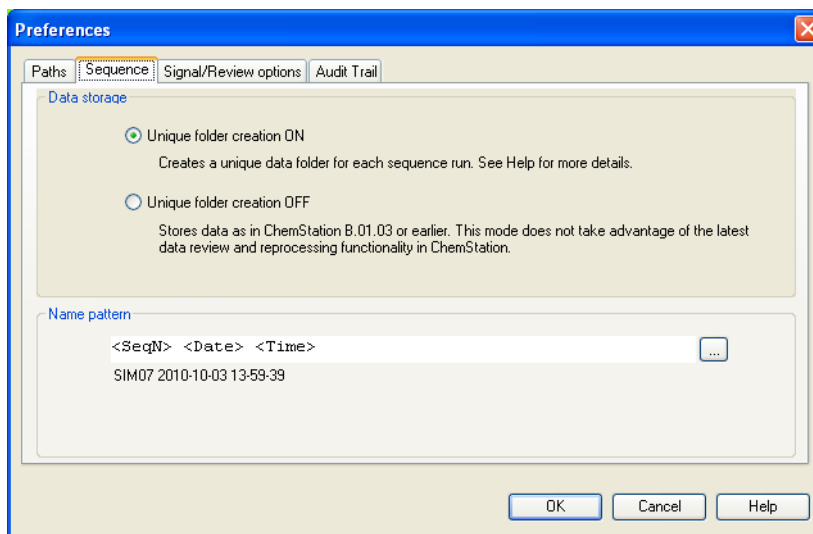


Figura 15 Cuadro de diálogo **Preferences** / Ficha **Sequence**

Al comienzo de una secuencia de adquisición, el método especificado en la tabla de secuencias se copia desde la carpeta de métodos maestros al conjunto de resultados. 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 conjunto de resultados. Todas las actualizaciones del método (por ejemplo, actualizaciones de la Calibration Table) se escriben en el método de secuencia del conjunto de resultados. En caso de utilizar Intelligent Reporting, las plantillas de informes que se seleccionaran en los Sequence Parameters o en las Method Properties se copian también en el conjunto de resultados. Con este sistema 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 ficheros de datos se almacenan en el conjunto de resultados. Dentro de cada fichero de datos (*.D) se guarda una copia del método de secuencia para el análisis en cuestión. El fichero ACQ.txt contiene los parámetros de adquisición 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. La carpeta DA.M contiene una copia de los parámetros de análisis de datos empleados en el método de secuencia.

Junto con estos ficheros guardados en la carpeta de secuencias, pueden realizarse las actividades de revisión y reprocesamiento de todos los datos sin alte-

rar el método maestro o la plantilla de secuencia. En caso necesario, los cambios de método pueden volver a guardarse también en el método maestro.

NOTA

El conjunto de resultados debe contener siempre el conjunto completo de ficheros de datos (*.D). Si se borran algunos de esos ficheros de datos, habrá problemas al cargar el conjunto de resultados en el gestor de contenidos empresariales OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM). Si necesita acortar una secuencia, cree un conjunto de resultados constituido por el usuario a partir del conjunto reducido de líneas de secuencia (consulte [“Creación de conjuntos de resultados constituidos por el usuario”](#) en la página 137).

Adquisición de datos de análisis individuales

En análisis individuales, el fichero de datos se guarda directamente en el subdirectorío correspondiente. Como solamente se emplea un método para un análisis individual, este método no se tiene que copiar en el subdirectorío; todas las acciones se realizan directamente con el método maestro. Una vez completada la parte de adquisición del método, se guarda una copia de los parámetros de adquisición en el fichero ACQ.txt. Se guarda una copia de los parámetros de análisis de datos en el directorío del fichero de datos (DA.M) tras la ejecución de la parte de análisis de datos del método maestro.

Actualización automática de métodos maestros

Con esta función, ChemStation actualiza automáticamente los parámetros de análisis de datos de los métodos maestros que se hubieran en el conjunto de resultados. Se puede utilizar esta función, por ejemplo, para actualizar las Calibration Tables de los métodos maestros después de reprocesar una secuencia con recalibraciones.

Se puede activar esta función en el cuadro de diálogo **Sequence Parameters** (véase figura siguiente). Durante la adquisición, ChemStation actualiza los parámetros de análisis de datos de los métodos maestros en todos los métodos de secuencia del conjunto de resultados.

Los parámetros de análisis de datos de los métodos maestros se actualizan también después de reprocesar la secuencia. La condición previa es que el método maestro esté todavía presente en el directorío de métodos maestros (el método maestro debe tener el mismo nombre que el método de secuencia).

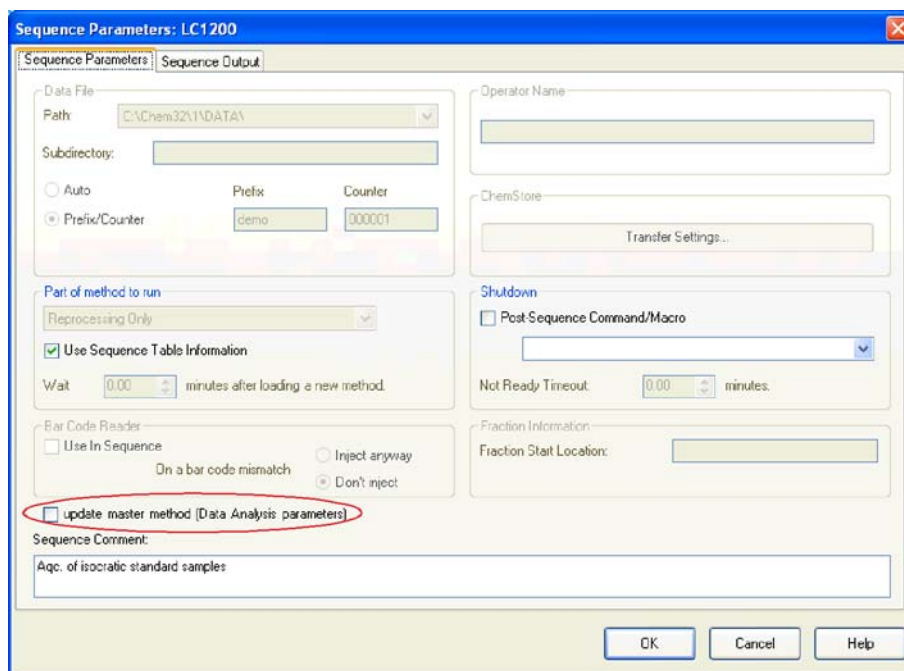


Figura 16 Opción **Update master methods** en el cuadro de diálogo **Sequence Parameters**

NOTA

Como esta función acarrea una reducción del rendimiento, se aconseja no utilizarla a menos que se tengan secuencias con cientos de métodos.

Muestras prioritarias

Se puede pausar una secuencia que está siendo analizada cuando se haya finalizado el método actual para permitir el análisis de una muestra prioritaria por el mismo o por otro método. Después, la secuencia se puede reanudar y continúa con la muestra en la que se pausó.

Secuenciación con muestras de control

Las muestras de control se pueden especificar en el campo Sample Type de la tabla de secuencia. El método que se utiliza para analizar las muestras de control debe contener una tabla de calibración donde estén especificados los límites de muestras de control de uno de los compuestos. Si se exceden estos límites especificados, la secuencia se interrumpe y se escribe un mensaje en el libro de registros. Si usa uno de los estilos de informes de ChemStation, los límites de muestras de control también se imprimen en los informes generados para estos análisis. Para obtener más información sobre cómo definir una secuencia con muestras de control, consulte la sección Cómo... de la ayuda en línea.

Pausar una secuencia

El análisis en curso se completará antes de que se detenga la secuencia.

Durante la pausa de una secuencia, no se puede cambiar el nombre del fichero de la tabla de secuencia ni el nombre del fichero de datos. Solo es posible cambiar en la tabla de secuencia las líneas de secuencia que no se hayan ejecutado y el número de viales en la línea de secuencia actual. Se pueden añadir, borrar o cambiar las líneas de secuencia para análisis futuros.

Por ejemplo, será necesario editar una secuencia activa para añadir un nuevo lote de muestras. Se puede editar la secuencia de modo que esos viales sean la siguiente muestra que procese ChemStation después de las muestras de la línea de secuencia que se esté analizando en el momento.

Interrumpir una secuencia

El análisis activo en ese momento se dará por terminado de inmediato. No obstante, aún se seguirán efectuando los análisis de datos para el análisis en curso. Nunca se puede reanudar una secuencia interrumpida.

Si se desea finalizar el análisis en curso antes de interrumpir una secuencia, hay que poner en pausa la secuencia, esperar a que termine el análisis e interrumpir entonces la secuencia.

Abortar una secuencia

Con la función Abort finaliza de forma inmediata una secuencia activa. No tendrá lugar ningún análisis de datos.

Análisis de una secuencia parcial

Selección de conjunto de resultados para adquisición parcial

En caso de utilizar la opción Unique Folder Creation ON (véase “[Preferences: ficha Sequence](#)” en la página 141), se puede elegir entre las siguientes opciones para la adquisición de una secuencia parcial:

- Adquirir la secuencia parcial en un conjunto de resultados nuevo.

o bien

- Adquirir la secuencia parcial en un conjunto de resultados existente.

La adquisición de ficheros de datos a partir de una ejecución de secuencias parciales en un conjunto de resultados existente puede ser útil en las siguientes situaciones:

- Hay que sobrescribir un único fichero de datos (o varios ficheros de datos), por ejemplo, porque se ha empleado un vial incorrecto.
- Solamente 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 se selecciona **Partial Sequence** en el menú **Sequence**, se abre un cuadro de diálogo con la opción de seleccionar en una lista un conjunto de resultados existente o crear un nuevo conjunto de resultados.

9 Automatización/Secuencias

Uso de secuencias (secuencias y plantillas de secuencias)

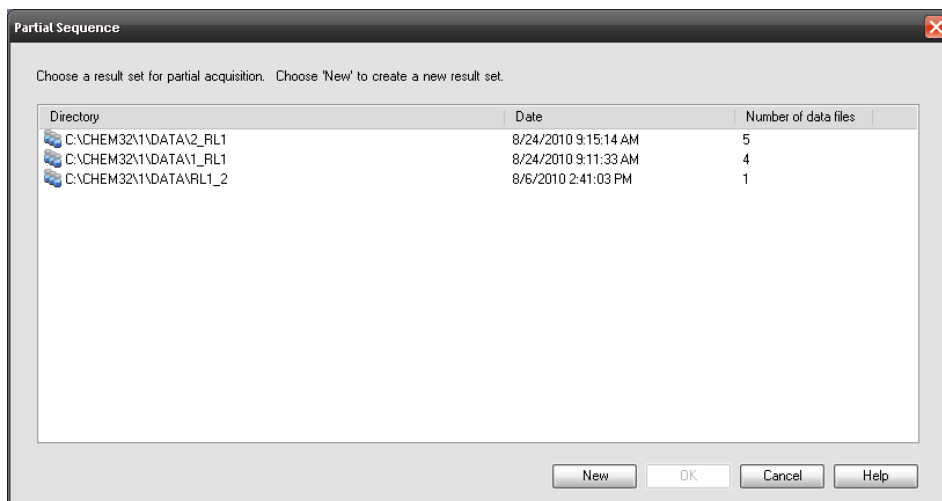


Figura 17 Cuadro de diálogo **Partial Sequence**

No obstante, para mantener la coherencia del conjunto de resultados (para que se pueda reprocesar completamente en **Data Analysis**), solamente se ofrecen para la adquisición parcial los conjuntos de resultados que cumplen ciertas condiciones:

- El nombre de la plantilla de secuencia (secuencia de origen) y el nombre del fichero de secuencia *.S del conjunto de resultados (secuencia de destino) deben ser idénticos.
- La ruta de datos y el subdirectorio de los ficheros 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 ficheros de datos debe ser idéntico en los dos ficheros de secuencias.

Después de salir de este cuadro de diálogo pulsando **Ok** (para seleccionar uno de los conjuntos de resultados) o **New** (para crear un nuevo conjunto de resultados), se pueden seleccionar las líneas de secuencia que deben ejecutarse durante la secuencia parcial.

Selección de líneas de secuencia para adquisición de secuencia parcial

El sistema abre el cuadro de diálogo **Partial Sequence** y permite seleccionar muestras individuales de la tabla para analizarlas. Este cuadro de diálogo se abre independientemente de que Unique Folder Creation esté activada o desactivada.

En cada línea del cuadro de diálogo **Partial Sequence** se muestra un solo análisis. En cada análisis se proporciona el nombre del vial, del método y del fichero de datos. Además, se muestra la información codificada de la Sequence Table y las muestras de calibración en las columnas Seq Tbl y Calib:RF:RT respectivamente. En la ayuda en línea se puede consultar una explicación de estos códigos.

Se puede obtener una copia en papel de la secuencia parcial pulsando el botón **Print**.

Con la opción **Automatic update for selected runs**, se pueden actualizar todos los métodos de secuencia que se emplearán en los análisis seleccionados con sus métodos maestros correspondientes.

Con **Manual update ...**, se abre el cuadro de diálogo **Update Methods** que permite sincronizar manualmente los métodos maestros y los métodos empleados en la plantilla de secuencia.

Por ejemplo, es posible que el cuadro de diálogo **Partial Sequence** tenga la siguiente apariencia. Se pueden marcar muestras concretas para procesarlas.

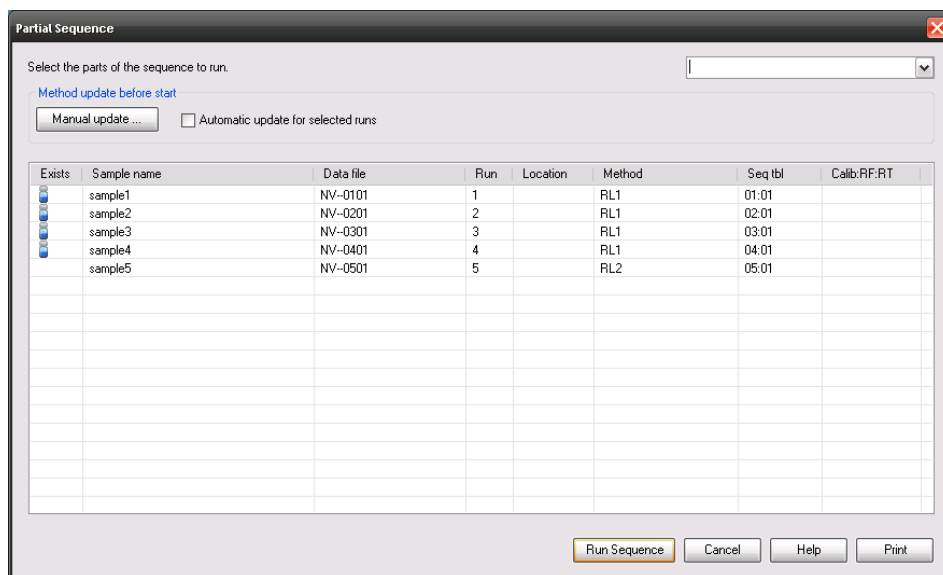


Figura 18 Cuadro de diálogo **Partial Sequence**

Planificación y colas de secuencias

La cola de secuencias Sequence Queue permite programar una serie de secuencias junto con parámetros adicionales. Esta función hace posible automatizar tareas largas para ejecutarlas durante la noche o como trabajos de fin de semana. Además de las secuencias, también es posible programar pausas. En esas pausas, ChemStation muestra un mensaje personalizable y espera por la confirmación del usuario.

La cola de secuencias ya estaba disponible para plantillas Easy Sequence. A partir de la revisión C.01.03 de ChemStation, también está disponible para las plantillas de secuencias clásicas de ChemStation.

Como nueva función incluida en la revisión C.01.03, es posible preparar planes de cola por adelantado y añadirlos a la cola de secuencias en algún momento posterior.

Se admiten los flujos de trabajo siguientes:

- Poner en cola una única secuencia

- a Seleccionar una plantilla de secuencias clásicas de ChemStation o una plantilla Easy Sequence
- b Editar o consultar la tabla de secuencia
- c Editar o consultar los parámetros de secuencia
- d Guardar las asignaciones
- e Añadir la secuencia a la cola
- Cambiar la cola de secuencias
- Preparar un plan de cola
- Añadir un conjunto predefinido de secuencias a la cola de secuencias
 - a Seleccionar un plan de cola
 - b Añadir el plan a la cola de secuencias

Cola de secuencias

La cola de secuencias sólo está disponible en sesiones de ChemStation en línea.

Es posible acceder a la cola de secuencias en la vista **Method and Run Control** a través de la ficha **Sequence Queue**.

Para añadir una secuencia a la cola, utilice el menú **RunControl > Queue Sequence....** Es posible modificar la tabla de secuencia y los parámetros de secuencia sin cambiar la secuencia cargada en ese momento. Antes de poner definitivamente en cola la secuencia, un diálogo ofrece la posibilidad de añadir la secuencia a la cola o guardarla como una nueva plantilla de secuencia.

El diálogo **Finish Queue Sequence** contiene también la casilla de verificación **Delete temporary Sequence Template after completion**. ChemStation mantiene siempre una copia de la plantilla de secuencia en cola en un directorio temporal. Esa plantilla de secuencia temporal se utilizará para ejecutar la secuencia desde la cola. Puesto que la misma secuencia se puede poner varias veces en la cola utilizando distintos parámetros, ChemStation necesita una copia separada de cada elemento puesto en cola.

Dependiendo del estado de la casilla de verificación, esa plantilla de secuencia temporal se mantendrá o se borrará cuando la cola prosiga con el elemento siguiente. La casilla de verificación puede estar activada o no de manera pre-determinada, dependiendo de las asignaciones correspondientes a **Unique Folder Creation** (consulte “[Preferences: ficha Sequence](#)” en la página 141):

- Con **Unique Folder Creation OFF**:

La casilla de verificación **Delete temporary Sequence Template after completion** está desactivada como opción predeterminada.

Si desea volver a procesar esos datos, necesitará nuevamente la plantilla de secuencia; recomendamos por tanto mantener una copia del fichero. Como opción predeterminada, se guarda en Chem32\<instrument>\SEQUENCE.

- Con **Unique Folder Creation ON**:

La casilla de verificación **Delete temporary Sequence Template after completion** está activada como opción predeterminada.

Toda la información necesaria para el reprocesamiento está ya disponible en el conjunto de resultados; por lo tanto, no es necesario guardar una copia de la plantilla de secuencia temporal. No obstante, si se activa la casilla de verificación, se guarda una copia como opción predeterminada en Chem32\<instrument>\TEMP\AESEQ.

Planificador de colas

Con el planificador de colas Queue Planner, es posible preparar un conjunto ordenado de secuencias (plantilla Easy Sequence *.es o plantillas de secuencia clásicas de ChemStation *.s) o pausas. El plan de cola se guarda como fichero *.qpl. El planificador de colas se abre en la vista **Method and Run Control** a través del menú **RunControl > Queue Planner...**

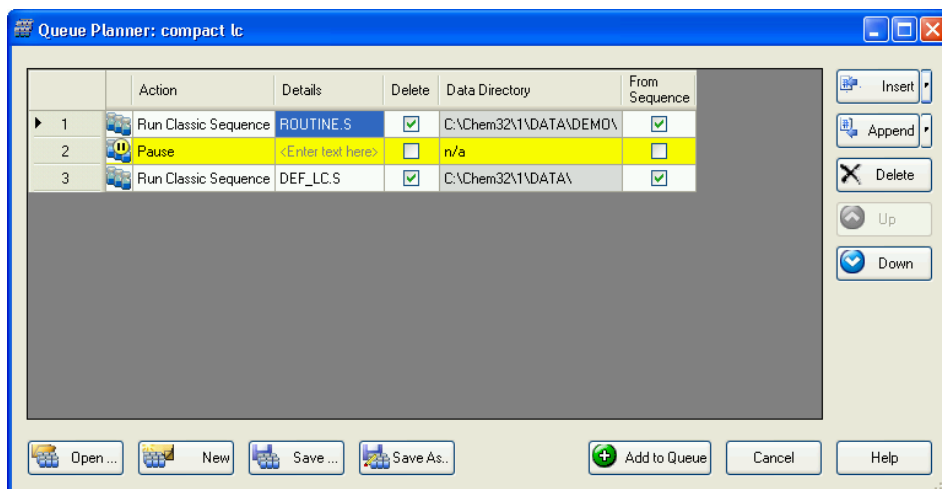


Figura 19 Planificador de colas

Cuando se añade una pausa, es posible facilitar un mensaje personalizado en la columna **Details**. Cuando la cola de secuencias llega a la pausa, ChemStation se detiene y muestra el mensaje facilitado. Un usuario debe confirmar el mensaje antes de que la cola pueda proseguir.

Para obtener más información sobre la interfaz de usuario, consulte el sistema de ayuda en línea.

Creación de conjuntos de resultados constituidos por el usuario

Con el comando **Sequence > Create New Result Set** de la vista **Data Analysis**, se puede crear un nuevo conjunto de resultados constituido por el usuario a partir de los datos mostrados en ese momento en la tabla de navegación. Los conjuntos de resultados constituidos por el usuario son útiles, por ejemplo, en los casos siguientes:

- Se desea combinar muestras individuales, secuencias o una combinación de ambas para reprocesarlas con un determinado método.
- Se desea acortar una secuencia.

Para constituir un nuevo conjunto de resultados

- 1 Añada los ficheros de datos pertinentes a la tabla de navegación.
- 2 En la tabla de navegación, seleccione todos los ficheros de datos que desee incluir en el nuevo conjunto de resultados.
- 3 Seleccione **Sequence > Create New Result Set** para abrir el cuadro de diálogo **Create New Result Set**.
- 4 Seleccione un método a asociar con el nuevo conjunto de resultados.
- 5 Especifique una carpeta para el nuevo conjunto de resultados.
- 6 Confirme las asignaciones para constituir la lista de ficheros de datos en un conjunto de resultados en la carpeta especificada.

Archivo de registro de secuencias

Un archivo de registro de secuencias indica qué ha sucedido durante el análisis de secuencias. Resulta útil para identificar cuando se producen errores si la secuencia se analiza de forma desatendida o por la noche. El nombre del archivo de registro tiene siempre extensión .log. El archivo de registro se encuentra en el directorio en el que se almacenan los datos de la secuencia.

¿Qué ocurre cuando se analiza una secuencia?

Inicio de una secuencia con Unique Folder Creation ON

El sistema crea un conjunto de resultados basado en la definición de la ruta de los parámetros de secuencia y en la configuración de preferencias de la secuencia. La plantilla de secuencia *.s, y todos los métodos definidos en la tabla de secuencias que pertenecen a esta secuencia específica se copian en el conjunto de resultados. En caso de utilizar Intelligent Reporting, todas las plantillas de informes *.rdl que van definidas en el método o en la plantilla de secuencia se copian también en el conjunto de resultados. El sistema continúa utilizando estos ficheros durante la adquisición. Al iniciar la secuencia se carga el método de la línea de secuencia correspondiente en ChemStation desde este conjunto de resultados.

Inicio de una secuencia con Unique Folder Creation OFF

Al iniciar una secuencia, el sistema carga el fichero de secuencia *.s, y dependiendo de la entrada de la Sequence Table se carga el método correspondiente de la línea de secuencia en ChemStation. A diferencia del segundo modo de almacenamiento de datos **Unique Folder Creation ON**, no se crea un conjunto de resultados. La secuencia y los métodos permanecerán en su directorio maestro.

Otros pasos ejecutados durante el análisis de la secuencia:

Los pasos siguientes se repetirán para cada línea de secuencia analizada:

- Si dispone de inyector automático, el software ChemStation busca en primer lugar la muestra en el inyector automático con arreglo al número introducido en la columna de viales.
- El instrumento se carga con los parámetros del método.
- Se ejecuta la macro de preanálisis.
- Se inyecta la muestra en el instrumento (manual o automáticamente).
- Se adquieren los datos.
- Se procede con la evaluación de datos del método. Integración, cuantificación y generación de informe, incluidas todas las macros específicas del

9 Automatización/Secuencias

¿Qué ocurre cuando se analiza una secuencia?

usuario. En caso de utilizar el modo **Unique Folder Creation** activada, el sistema guarda un D.A.M de métodos adicional durante el análisis.

- Se ejecuta la macro de post-análisis.
- Durante todo el proceso, ChemStation realiza un seguimiento del progreso de la secuencia en tiempo real y produce un fichero de registro de la secuencia.

Estado de ChemStation

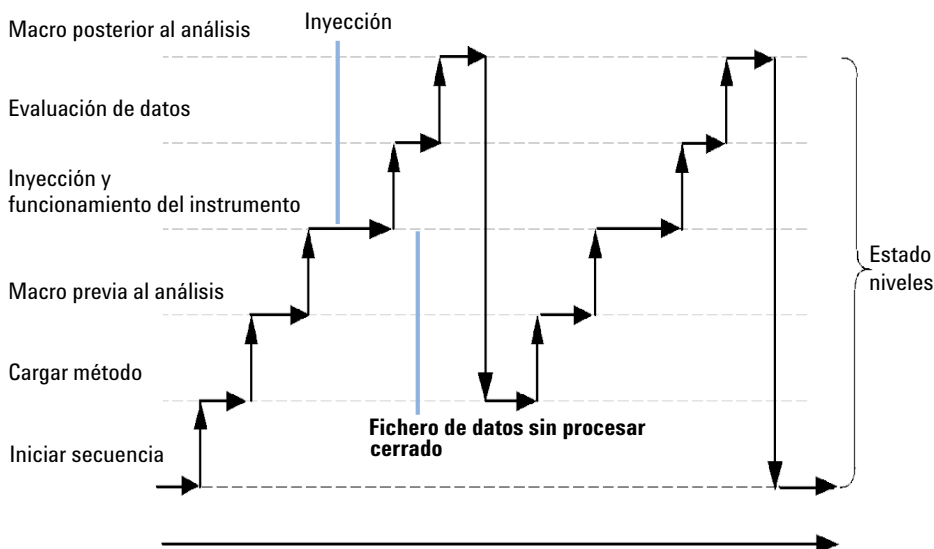


Figura 20 Estado de la secuencia

Estructura del fichero de datos de la secuencia

Preferences: ficha Sequence

En la ficha **Sequence** en sesiones en línea, el usuario puede escoger dos modelos de almacenamiento de datos diferentes. Estos modos definen la forma en que los datos de la secuencia se almacenan en ChemStation.

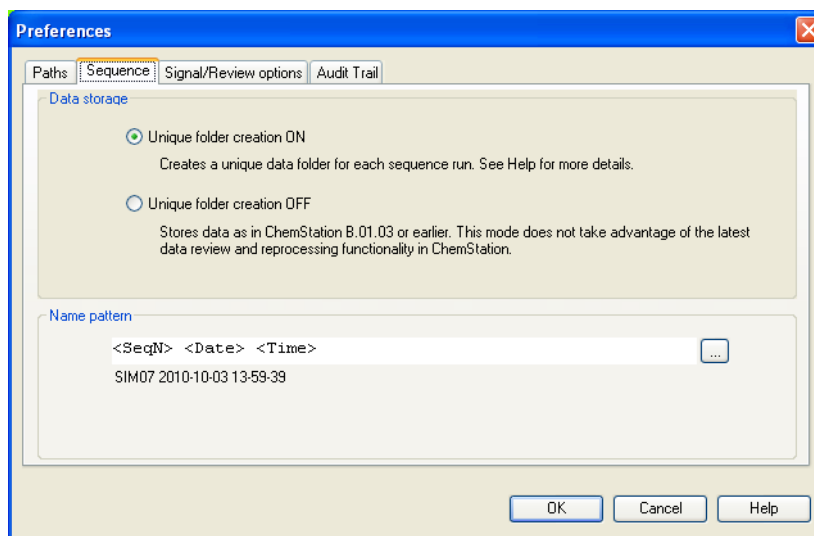


Figura 21 Cuadro de diálogo **Preferences** / ficha **Sequence**

NOTA

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

NOTA

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

No se puede desactivar Unique Folder Creation cuando la ChemStation está conectada a OpenLAB ECM.

Unique Folder Creation ON

En este modo de almacenamiento de datos, existe un vínculo fuerte y permanente entre los datos primarios y el método. Cada fichero de datos, tanto si se ha adquirido dentro de una secuencia o como análisis individual, tiene un vínculo con el método empleado para análisis de datos.

Los datos de secuencia se guardan en un conjunto de resultados, con un nombre de conjunto de resultados exclusivo. Se pueden especificar las convenciones de nombres para estos conjuntos de resultados en la ficha **Sequence** del cuadro de diálogo **Preferences**. Si no se especifica ningún patrón de nombre, se utiliza un patrón de nombre de secuencia predeterminado. La ficha **Sequence** se utiliza solamente para la adquisición de datos y, por tanto, está presente solamente en los sistemas en línea.

El patrón del nombre de secuencia puede contener varias secciones. El sistema crea un nombre para el conjunto de resultados determinado por las secciones del patrón del nombre de secuencia que elija. Todos los ficheros de datos, métodos, el libro de registro de secuencias, el archivo <sequence_name>.s y el archivo <sequence_name>.b de la secuencia se almacenan en el conjunto de resultados. El conjunto de resultados se crea cuando se inicia la secuencia.

Los archivos de secuencias (.s) se utilizan como plantillas de secuencia, concepto que permite ejecutar cualquier fichero de secuencia varias veces sin sobrescribir los datos existentes y sin cambiar los parámetros de las secuencias. Si no se utiliza ni contador ni tiempo en el patrón del nombre de la secuencia, el sistema introduce un contador de forma automática para evitar que los datos se sobrescriban. A la segunda, tercera y siguientes secuencias que usen la misma plantilla de secuencia se añadirá un contador al nombre del conjunto de resultados.

Unique Folder Creation OFF

En este modo de almacenamiento de datos, el nombre del método es el único vínculo que existe entre el fichero de datos y el método utilizado para adquirirlo y procesarlo. No se guardan copias del método con la secuencia o el fichero de datos; si se modifica el método o se crea otro con el mismo nombre, no se puede reproducir la secuencia con exactitud. Los ficheros de datos de secuencia se guardan con arreglo a los parámetros especificados en el grupo Data File del cuadro de diálogo **Sequence Parameters**; en este modo se desactiva la función de asignación de nombres de secuencia de la ficha **Sequence** del cuadro de diálogo **Preferences**. Este modo de almacenamiento de datos es idéntico

a las revisiones de ChemStation anteriores a B.02.01, por lo que no puede beneficiarse completamente de las últimas funciones de revisión y reprocesamiento de datos de la vista **Data Analysis** de ChemStation.

NOTA

Los datos de la secuencia adquiridos mediante la opción **Unique folder Creation** desactivada deben reprocesarse con la opción de reproceso de la vista **Method and Run Control**.

NOTA

Para el *Agilent OpenLAB Enterprise Content Manager* (ECM) tiene que estar establecido el modo de preferencia **Unique Folder Creation** activada. En caso de utilizar OpenLAB ECM, se deshabilita la opción **Unique Folder Creation** desactivada.

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

- Los datos de secuencia no se adquieren en un conjunto de resultados, sino directamente en el subdirectorio que se hubiera especificado en los Sequence Parameters (“[Sequence Parameters](#)” en la página 117). Por lo tanto, el patrón del nombre de secuencia aparece desactivado en la ficha **Sequence** del cuadro de diálogo Preferences.
- Esto quiere decir que en adquisiciones de dos o más secuencias los datos pueden adquirirse en el mismo subdirectorio.
- Con los datos no se almacena ningún método de secuencia (.M) ni copia del fichero de secuencias (.S), sino solamente el fichero de registro de secuencias y el fichero de lotes (.B). Esto implica que solamente estén disponibles los métodos y secuencias de las rutas especificadas en el cuadro de diálogo **Preferences** (véase “[Selección de rutas](#)” en la página 106). Estos deben utilizarse tanto para la adquisición como para la revisión y el reprocesamiento de datos. Los cambios de método específicos de secuencias o ficheros de datos solamente pueden almacenarse guardando el método con un nombre diferente. De no hacerlo así, estos cambios se aplicarán también al método de adquisición.
- Cuando se carga una secuencia adquirida con Unique Folder Creation OFF en la Navigation Table, no está disponible el modo de reprocesamiento en la vista **Data Analysis** ([Figura 22](#) en la página 144). Las secuencias adquiridas en este modo de almacenamiento de datos solamente se procesan en la vista **Method and Run Control** con la opción **Reprocessing only** en los **Sequence Parameters** ([Figura 23](#) en la página 144).

Estructura del fichero de datos de la secuencia

Sequence: BATCH

Over...	ECM	Type	Line	Inj	Vial	Sample Name	Sample Type	Man...	Cal Level	Sample Info
+	-		1	1	5	Isocratic Std. 1	Calibration	-	1	
+	-		2	1	5	Isocratic Std. 1	Calibration	-	1	
+	-		3	1	5	Isocratic Std. 1	Control Sample	-		
+	-		4	1	6	Isocratic Std. 2	Sample	-		
+	-		5	1	7	Isocratic Std. 3	Sample	-		

Figura 22 Navigation Table para secuencias adquiridas con la opción **Unique Folder Creation**

シーケンスパラメータ 機器2

シーケンスパラメータ シーケンス出力

データ ファイル

パス: E:\My ChemStation Files\Data\%

サブディレクトリ: サブディレクトリ

自動
プレフィックス/カウンタ

プレフィックス: SIG1
カウンタ: 000001

シーケンス実行部分

ランタイムチェックリストに従う
ランタイムチェックリストに従う
データ取り込みのみ
データ再解析のみ

待ち時間: 0.00 min (新しいシーケンスを読み込みます)

バーコードリーダー

☒ シーケンスで使用

バーコード不一致の場合
☐ 強制注入
☒ 注入禁止

シーケンスコメント

オペレータ名

山田太郎

ChemStore

転送設定...

シャットダウン

☐ ポストシーケンス コマンド/マクロ

ノートレディタイムアウト: 0.00 min

フракション情報

フракションの開始ロケーション:

OK キャンセル ヘルプ

Figura 23 Reprocesamiento de los datos de secuencia adquiridos con la opción **Unique Folder Creation**

Estructura de ficheros de datos con Unique Folder Creation ON

Existe un vínculo muy estrecho entre los datos primarios y el método, como se puede ver en la figura siguiente.

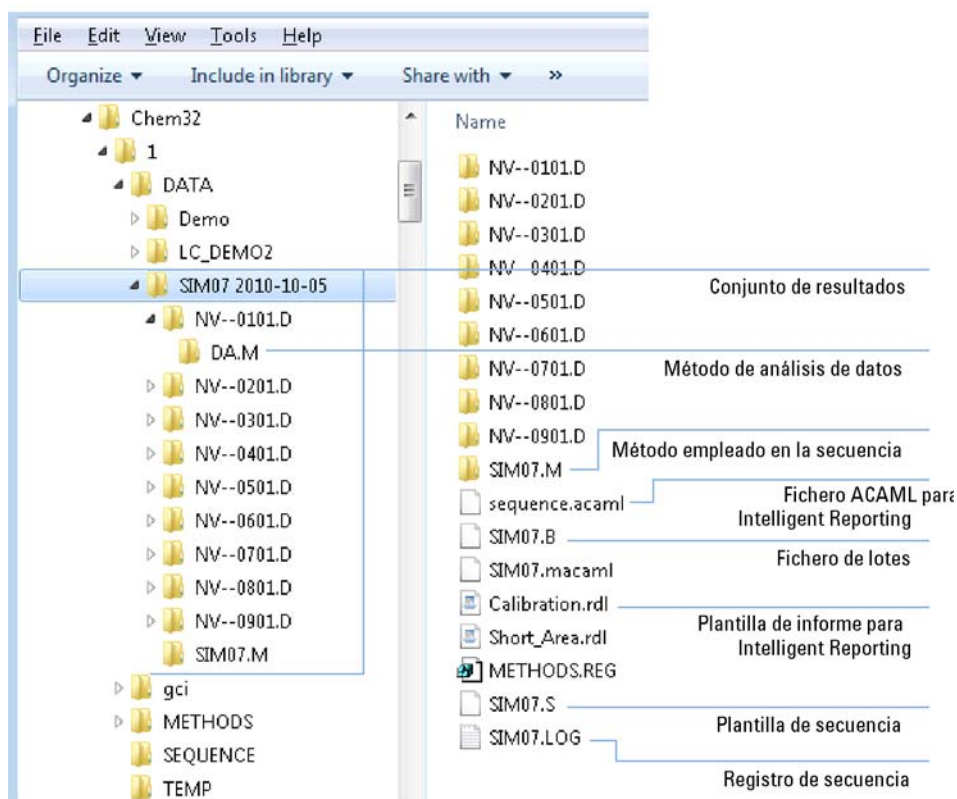


Figura 24 Estructura de ficheros de datos de secuencia con “Unique Folder Creation ON”

NOTA

El conjunto de resultados debe contener siempre el conjunto completo de ficheros de datos (*.D). Si se borran algunos de esos ficheros de datos, habrá problemas al cargar el conjunto de resultados en el gestor de contenidos empresariales OpenLAB Enterprise Content Manager (ECM). Si necesita acortar una secuencia, cree un conjunto de resultados constituido por el usuario a partir del conjunto reducido de líneas de secuencia (consulte “[Creación de conjuntos de resultados constituidos por el usuario](#)” en la página 137).

Asignación de nombres a ficheros de datos en una secuencia

Se puede asignar nombres a ficheros de datos en una secuencia de las siguientes formas:

- automática,
- manual o
- prefijo/contador.

Asignación automática de nombres a ficheros de datos en una secuencia

Viales de ejemplo

Por ejemplo 017-0103.D

donde:

- Los tres primeros dígitos son el número del vial, por ejemplo, 017.
- El cuarto dígito en cromatografía de líquidos y electroforesis capilar es un guión de separación (-); en un cromatógrafo de gases, puede ser una (F) para delante o una (B) para atrás.
- Los dígitos quinto y sexto son la línea de secuencia que define el método utilizado, por ejemplo 01 para la primera línea de la secuencia.
- Los dígitos séptimo y octavo son el número de inyección del vial para el método, por ejemplo, 03 para la inyección tercera.

Análisis en blanco

Por ejemplo NV--0499.D

donde:

- NV no se refiere a ningún vial.
- - es un guión de separación.
- 0499 es el análisis en blanco 99 de la línea 4 de la secuencia.

Introducción manual de nombres de ficheros de datos

Una de las columnas de la tabla de secuencia se denomina **Datafile**. Cuando no contiene entradas, se utiliza el esquema de denominación del fichero de datos especificado (automático o contador de prefijos) para crear el nombre del fichero de datos. Si se introduce un texto en la columna **Datafile**, ChemStation utiliza este texto como nombre del fichero de datos para el análisis.

Si se especifica más de una inyección por vial en una línea con nombre del fichero de datos introducido de forma manual, ChemStation trunca automáticamente caracteres desde el final del nombre introducido por el usuario y añade el número de inyección. De este modo se evita la reutilización del mismo nombre del fichero de datos en varias inyecciones.

Utilización de un prefijo/contador para asignar nombre a ficheros de datos

Si utiliza un prefijo/contador para asignar el nombre a ficheros de datos, ChemStation genera un nombre para cada análisis. Para un instrumento que admite análisis de doble señal como GC, ChemStation genera un nombre para cada señal.

La configuración de las secuencias permite el uso de nombres de fichero largos para el prefijo/contador. El nombre de fichero de datos definido mediante prefijo/contador puede tener hasta quince caracteres más la extensión .d, lo que hace un total de diecisiete caracteres.

El campo de prefijo/contador está sujeto a las reglas siguientes:

- El contador en sí puede tener un máximo de 6 caracteres.
- Si un prefijo contiene menos de nueve caracteres, el contador se amplía automáticamente a 6 dígitos.
- El número que se da al contador es el número de partida incrementado.

Tabla 16 Nombres de fichero

Prefijo	Contador	Nombre de fichero resultante
long	000001	long000001
longname	000001	longname000001
testwithalongna	1	testwithalongna1

Migración de conjuntos de resultados

ChemStation dispone de una herramienta que permite realizar la migración de datos que no tienen formato de conjunto de resultados a formato de conjunto de resultados. Para efectuar correctamente esta tarea es necesario que el archivo de secuencia original siga estando disponible. Este archivo debe incluir todas las líneas de secuencias necesarias y seguir el esquema de denominación del archivo de datos original para que sea posible el reprocesamiento de todos los archivos de datos de la secuencia. Además, tienen que estar disponibles todos los métodos de la columna Method de la tabla de secuencias.

Para llevar a cabo la migración:

Inicie la **Result Set Migration** en el menú **Sequence** de la vista **Data Analysis**.

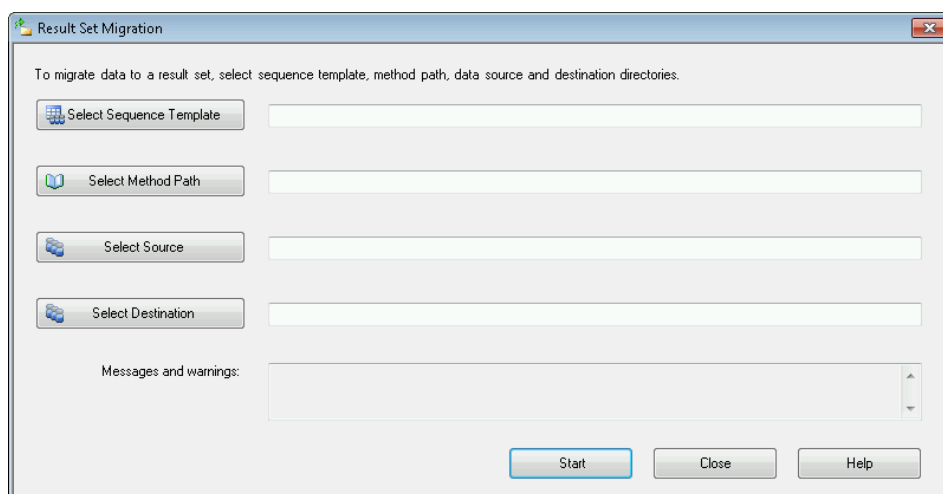


Figura 25 Migración de conjuntos de resultados

Rellene los siguientes campos obligatorios:

Select Sequence Template: seleccione el fichero de secuencia (*.S) que contenga la tabla de secuencias que coincida con el conjunto de datos objeto de migración.

Select Method Path: seleccione el directorio en el que se encuentran los métodos y al que se hace referencia en la tabla de secuencias.

Select Source: seleccione el directorio que contiene los ficheros de datos objeto de migración.

Select Destination: especifique la ruta y el nombre del conjunto de resultados que se va a crear. Es posible seleccionar una carpeta existente o crear una nueva.

Una vez que se hayan rellenado todos los datos, podrá iniciarse la migración.

Se realizarán los pasos siguientes:

- Se creará el directorio del conjunto de resultados.
- Se copiará la plantilla de secuencias en el conjunto de resultados. Además, se convertirá a un estado en el que es posible el reprocesamiento de ficheros de datos en la vista **Data Analysis**.
- Los métodos a los que se hace referencia en la tabla de secuencias se copian de la ruta de métodos especificada a la carpeta del conjunto de resultados.
- Se copian los archivos de datos, el libro de registro de secuencias y el fichero de lotes del directorio de origen de los datos al directorio de destino.
- De acuerdo con la información que contiene la tabla de secuencias, se copiará una copia del método correspondiente en cada fichero de datos como DA.M.

Una vez finalizada la migración al conjunto de resultados, aparecerá un mensaje que indica que el proceso se ha realizado correctamente en el campo **Messages and warnings**. De lo contrario, un mensaje de aviso indicará que se ha producido algún problema durante la migración. Podrá obtener más detalles sobre el aviso haciendo doble clic en el mensaje de aviso.

Operación postsecuencia

Es posible especificar qué ocurre cuando se finaliza una secuencia en una ejecución normal o cuando se produce un error en ChemStation durante la operación de la secuencia. Para la operación LC, esto se realiza activando la casilla de verificación Post-Sequence Cmd/Macro de los parámetros de la secuencia, donde puede elegir entre:

- Configurar el sistema en estado STANDBY, en el que la bomba y la lámpara están apagadas.
- Configurar el sistema en estado LAMPOFF, en el que todas las lámparas están apagadas (sólo LC y CE).
- Configurar el sistema en estado PUMPOFF, en el que todas las bombas están apagadas (sólo LC y CE).
- Utilizar la macro SHUTDOWN o modificar SHUTDOWN.MAC para determinar una operación concreta.

Por ejemplo, si desea apagar el sistema tras finalizar una secuencia. La macro SHUTDOWN podría utilizarse también para configurar el flujo a cero o reducirlo lentamente.

En los parámetros de la secuencia puede especificar la macro personalizada que desea ejecutar incluyendo su nombre en el campo Post-Sequence Cmd/Macro y marcando la casilla.

Tiempo de espera para instrumento no listo (sólo LC y CE)

Esta opción de los parámetros de la secuencia es el tiempo que el sistema esperará hasta que un instrumento esté listo; pasado este tiempo, el sistema se apagará.

Tiempo de espera (sólo LC y CE)

Es posible especificar un tiempo de espera que se ejecuta después de cargar el método y antes de inyectar con ese método. Esto puede resultar de utilidad para que la columna/capilar se reequilibre si se utilizan nuevas condiciones de análisis.

Recalibración automática

La calibración se hace normalmente después de producirse un cambio en las condiciones de funcionamiento, por ejemplo, después de cambiar una columna o capilar. La recalibración automática se hace normalmente al inicio de una secuencia de análisis o a intervalos regulares durante una secuencia como parte del programa para compensar los factores que afectan el rendimiento analítico.?

Existen dos formas de especificar la recalibración automática de secuencias:

- Secuencias de calibración explícita.
- Secuencias de calibración cíclica.

Recalibración con el modo de preferencia “Unique Folder Creation ON”

Mientras se está realizando una calibración, se actualiza la Calibration Table con arreglo a los ajustes de método definidos. Con el modo de almacenamiento de datos “Unique Folder Creation ON”, los métodos recalibrados están disponibles dentro del conjunto de resultados. La Calibration Table del método de secuencia se actualiza durante ese proceso. Además, el método DA.M de los ficheros de datos individuales contiene la calibración actualizada que se utiliza para la generación de resultados.

Recalibración con el modo de preferencia “Unique Folder Creation OFF”

Mientras se está realizando una calibración, se actualiza la Calibration Table con arreglo a los ajustes de método definidos. Con el modo de almacenamiento de datos “Unique Folder Creation ON”, la Calibration Table del método maestro se actualiza durante la recalibración.

Especificación de recalibraciones

Los parámetros de recalibración de la secuencia se introducen directamente en la tabla de secuencia. Estos parámetros definen cómo se recalibra el método durante una secuencia.

Parámetros de recalibración de la tabla de secuencia

El factor de respuesta y los tiempos de retención/migración pueden actualizarse de varias formas. Las instrucciones utilizadas en el análisis de datos al recalibrar la tabla de calibración son el nivel de calibración, actualizar el factor de respuesta y actualizar los tiempos de retención/calibración.

Cuando se introduce la calibración en la columna Tipo de muestra de la tabla de muestras, se activan y pueden editarse las siguientes columnas:

- Nivel calibr.
- Actualizar RT
- Actualizar RF
- Intervalo

Los posibles valores de cada una de estas columnas se muestran en la tabla.

Tabla 17 Parámetros de recalibración de la tabla de secuencia

Nivel calibración	Actualizar RT	Actualizar RF	Intervalo
Nivel de la tabla de calibración nº (1-999)	No actualizar	No actualizar	Intervalo de recalibración cíclica nº (1-999)
	Promedio	Promedio	En blanco
	Sustituir	Sustituir	
		Agrupar	
		% Delta	

La tabla muestra las columnas de la tabla de secuencia que contienen los parámetros de recalibración y los valores que pueden introducirse.

No actualizar

No cambia el factor de respuesta ni el tiempo de retención/migración.

Sustituir

Sustituye los tiempos de retención/migración y la respuesta previos (áreas o alturas) por aquéllos sólo del análisis actual. No se cambia la respuesta de picos que no se hayan encontrado en el análisis de recalibración.

Promedio

Promedia los tiempos de retención/migración y las respuestas (áreas o alturas) para cada pico, basándose en el análisis de calibración original y todas las recalibraciones promediadas desde entonces. Si falta un pico de una de las recalibraciones, la respuesta promedio del pico no se verá afectada.

Agrupar

Las muestras se agrupan en calibraciones previas y posteriores a la muestra. La evaluación se efectúa cuando la última muestra de calibración del grupo de cierre se ha analizado. Los datos de calibración existentes se reemplazan por los datos del resultado del análisis de calibración del grupo de apertura. Las calibraciones del grupo de cierre se promedian en la tabla de calibración.

Intervalo

El intervalo determina la frecuencia con la que se realiza una calibración durante una secuencia. La frecuencia de calibración corresponde al número de inyecciones de muestras que se realizan antes de proceder con el siguiente grupo de calibración. Al inicio del análisis, se realiza una calibración y los resultados (factores de respuesta) se introducen en la tabla de calibración. Estos resultados se utilizan en cálculos cuantitativos siguientes. Después de haberse aplicado el número de inyecciones especificado, se realiza otra calibración y los resultados se introducen en la tabla de calibración sobrescribiendo los resultados de los análisis de calibración anteriores.

% Delta

El cálculo % delta permite comparar los factores de respuesta de un análisis con los factores de respuesta que se introducen de forma manual en la tabla de calibración. El % delta se aplica entonces a todos los picos calibrados de la tabla. Puede identificar varios estándares internos, y las mediciones de sus factores de respuesta se utilizarán para calcular los nuevos factores de respuesta de otros picos. Identifique qué estándar interno va a utilizarse para el cálculo de % delta de cada pico en la tabla de calibración.

Tipos de secuencia

Existen los siguientes tipos de secuencia:

- secuencias de calibración explícita,
- secuencias de calibración explícita de un único nivel,
- secuencias de calibración cíclica multinivel,
- calibraciones explícitas y cíclicas juntas en una secuencia y
- secuencias de calibración cíclica con calibraciones agrupadas.

Secuencias de calibración explícita

Este tipo de secuencia recalibra a intervalos definidos especificados por el usuario en la tabla de secuencia.

Para secuencias de calibración explícita, se introducen las muestras de calibración en la secuencia sin una entrada de intervalo en la tabla de secuencia. Se realiza una recalibración una vez para cada entrada de muestra de calibración de la tabla de secuencia.

Secuencias de calibración cíclicas de un único nivel

Este tipo de secuencia utiliza el mismo vial, es decir, la muestra de calibración a intervalos regulares de la secuencia.

La entrada de intervalos de la tabla de secuencias determina cómo se va a realizar la recalibración. Por ejemplo, un valor 2 de intervalo recalibrará cada dos viales de muestra en la secuencia.

Secuencias de calibración cíclicas multinivel

Este tipo de secuencia utiliza muestras de calibración diferentes para recalibrar un método calibrado multinivel.

El ejemplo siguiente describe una secuencia de dos métodos, que comprende el método A y el método B, para analizar dos grupos de muestras. Los dos métodos son de calibración multinivel que se recalibrarán automáticamente en los intervalos definidos.

Para cada método la Sequence Table tiene tres entradas:

- Dos niveles de calibración:
 - Líneas de secuencia 1 y 2 en el método A.
 - Líneas de secuencia 8 y 9 en el método B.
- Cinco entradas para las muestras:
 - Líneas de secuencia 3 a 7 en el método A.
 - Líneas de secuencia 10 a 14 en el método B.

Las calibraciones se especifican a intervalos regulares con la entrada del intervalo de recalibración de la Sequence Recalibration Table.

- El método A recalibrará cada dos muestras.
- El método B recalibrará cada tres muestras.

La siguiente Sequence Table se ha truncado para simplificar el ejemplo.

Tabla 18 Sequence Table para el método A y el método B

Línea	Vial	Nombre del método	Iny./Vial	Tipo de muestra	Nivel calibr.	Actualizar RF	Actualizar RT	Intervalo
1	1	Método A	1	Calibración	1	Promedio	No actualizar	2
2	2	Método A	1	Calibración	2	Promedio	No actualizar	2
3	10	Método A	1					
4	11	Método A	1					
5	12	Método A	1					
6	13	Método A	1					

Tabla 18 Sequence Table para el método A y el método B

Línea	Vial	Nombre del método	Iny./Vial	Tipo de muestra	Nivel calibr.	Actualizar RF	Actualizar RT	Intervalo
7	14	Método A	1					
8	3	Método B	1	Calibración	1	Promedio	No actualizar	3
9	5	Método B	2	Calibración	2	Promedio	No actualizar	3
10	20	Método B	1					
11	21	Método B	1					
12	22	Método B	1					
13	23	Método B	1					
14	24	Método B	1					

Orden de análisis del método A

El método A es la primera parte de la secuencia de dos métodos.

Tabla 19 Orden de análisis del método A

Nº iny.	Método	Vial	Operación
1	Método A	1	Nivel de calibración 1 e informe
2	Método A	2	Nivel de calibración 2 e informe
3	Método A	10	Análisis de muestras e informe
4	Método A	11	Análisis de muestras e informe
5	Método A	1	Nivel de calibración 1 e informe
6	Método A	2	Nivel de calibración 2 e informe
7	Método A	12	Análisis de muestras e informe
8	Método A	13	Análisis de muestras e informe
9	Método A	1	Nivel de calibración 1 e informe

Tabla 19 Orden de análisis del método A

Nº iny.	Método	Vial	Operación
10	Método A	2	Nivel de calibración 2 e informe
11	Método A	14	Análisis de muestras e informe

Orden de análisis del método B

El método B es la segunda parte de la secuencia de dos métodos. El método B se diferencia del método A en que hay dos inyecciones por vial para el nivel de calibración 2. La entrada de intervalo está en 3.

Tabla 20 Orden de análisis del método B

Nº iny.	Método	Vial	Operación
12	Método B	3	Nivel de calibración 1 e informe
13	Método B	5	Nivel de calibración 2 e informe
14	Método B	5	Nivel de calibración 2 e informe
15	Método B	20	Análisis de muestras e informe
16	Método B	21	Análisis de muestras e informe
17	Método B	22	Análisis de muestras e informe
18	Método B	3	Nivel de calibración 1 e informe
19	Método B	5	Nivel de calibración 2 e informe
20	Método B	5	Nivel de calibración 2 e informe
21	Método B	23	Análisis de muestras e informe
22	Método B	24	Análisis de muestras e informe

Los resultados que se muestran en la [Tabla 19](#) en la página 157 y la [Tabla 20](#) en la página 158 pueden obtenerse utilizando la opción de secuencia parcial para previsualizar el orden de análisis tras configurar la tabla de secuencia.

Calibraciones explícitas y cíclicas juntas

Este tipo de secuencia comprende las calibraciones explícitas y cíclicas en la misma secuencia.

Esta función permite recalibrar el método completamente al principio de una secuencia (*recalibración explícita*) y actualizar entonces la calibración (*recalibración cíclica*) durante la secuencia.

- Hay que especificar dos líneas de calibración para cada nivel de calibración en la tabla de secuencia. Una línea de calibración es para la entrada de recalibración explícita y la otra es para la entrada de recalibración cíclica.
- La tabla de secuencia debe tener entradas para cada línea de calibración y todos los viales de recalibración cíclica deben aparecer antes de la recalibración explícita y las entradas de muestra.

Ejemplo

La siguiente tabla de secuencia ilustra un método calibrado de un único nivel llamado SimReg. La tabla está truncada para simplificar el ejemplo.

Tabla 21 Sequence Table para SIMREG

Línea	Vial	Nombre del método	Iny./Vial	Tipo de muestra	Nivel calibr.	Actualizar RF	Actualizar RT	Intervalo
1	1	SimpReg	1	Calibración	1	Promedio	Promedio	3
2	1	SimpReg	1	Calibración	1	Sustituir	Sustituir	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

Tabla 22 Sequence Table para SIMREG

Línea	Vial	Nombre del método	Iny./Vial	Tipo de muestra	Nivel calibr.	Actualizar RF	Actualizar RT	Intervalo
1	1	SimpReg	1	Calibración	1	Promedio	Promedio	3
2	1	SimpReg	1	Calibración	1	Sustituir	Sustituir	
3	2	SimpReg	1					
4	3	SimpReg	1					
5	4	SimpReg	1					
6	5	SimpReg	1					
7	6	SimpReg	1					

Hay dos entradas para el nivel único de calibración.

- La primera línea de calibración es para el mismo nivel, aunque promedia los parámetros de calibración. La entrada del intervalo especifica que la recalibración se realiza cada tres muestras.
- La segunda entrada sustituye todos los parámetros de recalibración; es decir, se realiza una recalibración completa. *No* tiene intervalo de recalibración.

Tabla de secuencia

La tabla de secuencia contiene siete líneas. La primera línea especifica la muestra de recalibración cíclica. La segunda línea especifica la recalibración explícita que se realiza solamente una vez, al principio de la secuencia. Las líneas de la tercera a la séptima especifican las muestras que hay que analizar.

El orden de las entradas en la tabla de secuencia es muy importante. Todas las entradas del vial de recalibración cíclica que especifican la calibración cíclica *deben* aparecer *antes* que las entradas de muestras o de recalibraciones explícitas para el método.

Orden de análisis SimpReg

La tabla siguiente describe el orden de análisis para el método SimpReg.

Tabla 23 Orden de análisis SimpReg

Línea sec.	Nº iny.	Método	Vial	Operación
2	1	SimpReg	1	Calibración simple
1	2	SimpReg	1	Calibración regular
3	3	SimpReg	2	Análisis de muestras
3	4	SimpReg	3	Análisis de muestras
4	5	SimpReg	4	Análisis de muestras
5	6	SimpReg	1	Calibración regular
6	7	SimpReg	5	Análisis de muestras
7	8	SimpReg	6	Análisis de muestras

Secuencias de calibración cíclica con agrupamiento

En una secuencia calibrada cíclica con agrupamiento, la tabla de calibración utilizada para calcular resultados cuantitativos desconocidos se genera haciendo el promedio de resultados calibrados ahora con los de la calibración anterior. La tabla de calibración nueva es una representación más exacta de la respuesta del instrumento en el momento de analizar la muestra.

Ejemplo

Considere la situación siguiente:

- La respuesta del instrumento deriva.
- Se especifican tres inyecciones con idéntica mezcla de dos componentes.
- Dos inyecciones están especificadas como muestras de calibración, y la tercera como una muestra.
- La primera y la tercera son ejemplos de calibración.
- La segunda inyección es una muestra.

Para obtener un resultado cuantitativo preciso para la inyección dos (la muestra), deben interpolarse las dos muestras de calibración (consulte la figura). El proceso se conoce como agrupamiento.

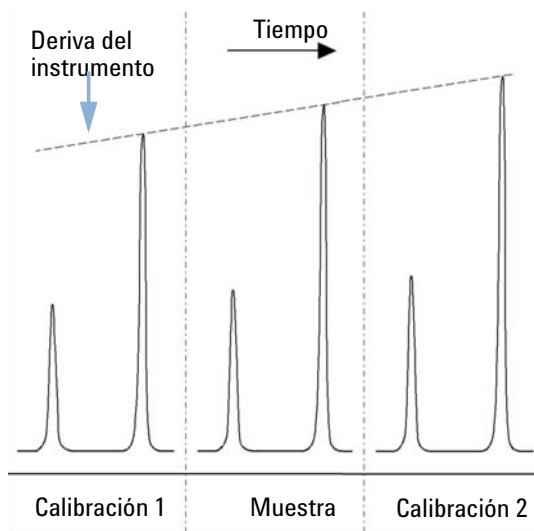


Figura 26 Agrupamiento

Operación de secuencia agrupada

- Se analizan los viales de la primera calibración.
- Se analizan los viales de muestra.
- Se analizan los viales de la siguiente calibración.
- Se crea la tabla de calibración reemplazando los factores de la respuesta existente por otros nuevos y realizando el promedio de los análisis de calibración siguientes en una tabla de calibración nueva.
- Se evalúan los ficheros de datos del vial de la muestra y se generan informes.
- Si hay más viales de muestras que analizar, la secuencia vuelve al paso 2.

Ejemplo

En esta sección se describe un ejemplo de secuencia con agrupamiento (bracketing) que comprende un método llamado Brack.M. El método Brack.M es un método con estándar interno de dos niveles que utiliza calibración cíclica.

Tabla de secuencia

La tabla de secuencia de Brack.M (página siguiente) se ha truncado para simplificar el ejemplo. Consta de siete líneas. Las dos primeras líneas definen las condiciones de recalibración para cada nivel. Las líneas restantes corresponden a las muestras que hay que analizar.

Más concretamente, la tabla de secuencia del método Brack.M tiene:

- Una entrada Bracket en la columna Update Response Factor que especifica el agrupamiento de muestras con las muestras de calibración.
- Una entrada Replace en la columna Update Retention/Migration Times que especifica una sustitución de los tiempos de retención/migración.
- Una entrada de 3 en la columna Recalib Interval que especifica la recalibración cada tres muestras.

Tabla 24 Sequence Table para BRACK-M

Línea	Vial	Nombre del método	Iny./ Vial	Tipo de muestra	Nivel calibr.	Actualizar RF	Actualizar RT	Intervalo
1	1	BRACK-M	2	Calibración	1	Agrupar	Sustituir	3
2	2	BRACK-M	2	Calibración	2	Agrupar	Sustituir	3
3	10	BRACK-M	1					
4	11	BRACK-M	1					
5	12	BRACK-M	1					
6	13	BRACK-M	1					
7	14	BRACK-M	1					

9 Automatización/Secuencias

Tipos de secuencia

Run No.	Method Name	Vial No.	Inj No.	DataFile Name	Lvl No.	Upd RF	Upd Ret	Operation
1	Brack.M	1	1	c1-03001.d	1	R	R	Report for Calibration Run No.1
2	Brack.M	1	2	c1-03002.d	1	A	R	Report for Calibration Run No.2
3	Brack.M	2	1	c2-03001.d	2	R	R	Report for Calibration Run No.3
4	Brack.M	2	2	c2-03002.d	2	A	R	Report for Calibration Run No.4 Print Calibration Table
5	Brack.M	10	1	010-0301.d				Sample Analysis, no report
6	Brack.M	11	1	011-0301.d				Sample Analysis, no report
7	Brack.M	12	1	012-0301.d				Sample Analysis, no report
8	Brack.M	1	1	c1-03003.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
9	Brack.M	1	2	c1-03004.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
10	Brack.M	2	1	c2-03003.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
11	Brack.M	2	2	c2-03004.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report Print Calibration Table
				010-0301.d				Report for Sample Run No.5
				011-0301.d				Report for Sample Run No.6
				012-0301.d				Report for Sample Run No.7
				c1-03003.d	1	R		Report for Calibration Run No.8
				c1-03004.d	1	A		Report for Calibration Run No.9
				c2-03003.d	2	R		Report for Calibration Run No.10
				c2-03004.d	2	A		Report for Calibration Run No.11
12	Brack.M	13	1	013-0301.d				Sample Analysis, no report
13	Brack.M	14	1	014-0301.d				Sample Analysis, no report
14	Brack.M	1	1	c1-03005.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
15	Brack.M	1	2	c1-03006.d	1	A	R	Calibration Analysis, no report
16	Brack.M	2	1	c2-03005.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report
17	Brack.M	2	2	c2-03006.d	2	A	R	Calibration Analysis, no report Print Calibration Table
				013-0301.d				Report for Sample Run No.12
				014-0301.d				Report for Sample Run No.13
				c1-03005.d	1	R		Report for Calibration Run No.14
				c1-03006.d	1	A		Report for Calibration Run No.15
				c2-03005.d	2	R		Report for Calibration Run No.16
				c2-03006.d	2	A		Report for Calibration Run No.17

Where A = average

R = replace

Figura 27 Orden de análisis de la secuencia agrupada

Secuencias de recalibración cíclica con múltiples viales que contienen la misma dilución de un estándar

Secuencia de recalibración cíclica con uso del vial de calibración "Round-Robin"

Cuando analiza una secuencia larga que realiza recalibraciones cíclicas, es decir, realiza una recalibración automática cada cierto número fijado de inyecciones de muestra, existe el riesgo potencial de vaciar el volumen del vial de calibración durante el proceso de la secuencia. La tabla de secuencia de ChemStation proporciona una manera de utilizar una serie de viales que contienen la misma dilución de un estándar que debe utilizarse en un modelo *"round-robin"*.

Con esta funcionalidad, pueden definirse secuencias largas con calibraciones automáticas a intervalos fijos utilizando múltiples viales de calibración para cada nivel y consumiendo de cada vial de calibración la misma proporción.

Si se define un número apropiado de viales de calibración; es posible incluso garantizar que cada vial de calibración se utilice una sola vez. Esto es importante en aquellos casos en los que se requiere un vial de calibración fresco para cada recalibración, por ejemplo, porque el analito se evapora cuando se pincha el septum o comienza a degradarse cuando entra en contacto con la aguja de acero. En la sección siguiente se describe cómo debe definirse la tabla de secuencia de ChemStation para cumplir estos requisitos.

Determine el número total de viales de calibración para cada nivel basándose en el uso estimado de calibrante a lo largo de toda la secuencia.

Configure una línea de recalibración cíclica distinta para cada vial de calibración. Las líneas definidas en el mismo nivel de calibración deben estar en líneas de secuencia adyacentes, y las posiciones de los viales definidas deben ser también adyacentes. Seleccione el mismo intervalo de recalibración para todas las líneas de calibración. Por ejemplo, si tiene que recalibrar la secuencia cada seis inyecciones de muestras, configure el intervalo de recalibración a 6.

Tabla 25 Secuencia de recalibración cíclica con 3 viales definidos para cada nivel

Vial nº	Nombre de la muestra	Tipo de muestra	Nombre del método	Nº de iny.	Nvl	Act. RT	Act. RF	Intervalo
1	Cal1a	Calib.	Método A	1	1	Prom.	Prom.	6
2	Cal1b	Calib.	Método A	1	1	Prom.	Prom.	6
3	Cal1c	Calib.	Método A	1	1	Prom.	Prom.	6
5	Cal2a	Calib.	Método A	1	2	Prom.	Prom.	6
6	Cal2b	Calib.	Método A	1	2	Prom.	Prom.	6
7	Cal2c	Calib.	Método A	1	2	Prom.	Prom.	6
10	Muestra10	Muestra	Método A	6				
11	Muestra11	Muestra	Método A	6				
12	Muestra12	Muestra	Método A	6				
13	Muestra13	Muestra	Método A	6				
14	Muestra14	Muestra	Método A	6				

El orden de ejecución es:

- Vial 1 (Cal1a)
- Vial 5 (Cal2a)
- 6 inyecciones del vial 10 (Muestra10)
- Vial 2 (Cal1b)
- Vial 6 (Cal2b)
- 6 inyecciones del vial 11 (Muestra11)
- Vial 3 (Cal1c)
- Vial 7 (Cal2c)
- 6 inyecciones del vial 12 (Muestra12)
- Vial 1 (Cal1a)
- Vial 5 (Cal2a)
- 6 inyecciones del vial 13 (Muestra13)
- Vial 2 (Cal1b)
- Vial 6 (Cal2b)
- etc.

Recalibraciones cíclicas en las que cada calibración utiliza un vial diferente

Para garantizar que cada vial de calibración se inyecta una sola vez, la secuencia debe definir un número suficiente de viales de calibración diferentes, de forma que el orden "round-robin" descrito en el ejemplo anterior no se aplique. Por ejemplo, si la secuencia procesa 80 viales de muestra con recalibraciones requeridas cada 10 muestras, la tabla de secuencia debe contener $80/10 + 1 = 9$ líneas de calibración en cada nivel.

Como en el ejemplo anterior, las líneas de calibración deben ser líneas de secuencia adyacentes que informan de posiciones de viales adyacentes.

Secuencia de agrupamiento que utiliza viales diferentes para grupo de apertura y cierre

La misma funcionalidad está disponible para las secuencias de agrupamiento. Al definir el rango de viales de calibración aproximado, puede definirse una secuencia de agrupamiento de forma que los distintos viales de calibración se utilicen para los grupos de apertura y cierre. En este caso también las líneas de calibración en la secuencia deben ser adyacentes como las posiciones de los viales de calibración.

La utilización del agrupamiento de viales de calibración en modo "round-robin" o para una sola inyección sólo depende del número total de viales de calibración para cada nivel y el número de recalibraciones necesarias para la secuencia.

El siguiente ejemplo define 3 inyecciones de muestra que se agrupan por calibración. El grupo de apertura utiliza un vial de calibración diferente que el grupo de cierre. Se requieren recalibraciones tras cada inyección de muestra, de forma que el intervalo de recalibración sea 1. El número de líneas de calibración por nivel es el número de muestras más una.

Tabla 26 Viales diferentes para los grupos de apertura y cierre

Vial nº	Nombre de la muestra	Tipo de muestra	Nombre del método	Nº de iny.	Nvl	Act. RT	Act. RF	Intervalo
1	Cal1a	Calib.	Método A	1	1	Grp	Grp	1
2	Cal1b	Calib.	Método A	1	1	Grp	Grp	1
3	Cal1c	Calib.	Método A	1	1	Grp	Grp	1

Tabla 26 Viales diferentes para los grupos de apertura y cierre

Vial n°	Nombre de la muestra	Tipo de muestra	Nombre del método	N° de iny.	Nvl	Act. RT	Act. RF	Intervalo
4	Cal1d	Calib.	Método A	1	1	Grp	Grp	1
10	Muestra10	Muestra	Método A	1				
11	Muestra11	Muestra	Método A	1				
12	Muestra12	Muestra	Método A	1				

El orden de ejecución de esta secuencia es:

- Vial 1 (Cal1a), grupo de apertura 1
- Vial 10 (Sample10)
- Vial 2 (Cal1b), grupo de cierre 1 y grupo de apertura 2
- Vial 11 (Muestra11)
- Vial 3 (Cal1c), grupo de cierre 2 y grupo de apertura 3
- Vial 12 (Muestra12)
- Vial 4 (Cal1d), grupo de apertura 3



10

Conceptos de análisis y revisión de datos

Data Analysis 170

Modo Recalculation 172

Modo Reprocessing 174

Actualización de métodos 178

Visor de informes para análisis de datos 178

Review 183

Requisitos de Intelligent Reporting 183

Selección de ficheros de datos 183

Selección de la plantilla de informes 185

Previsualización de informes 185

Flujos de trabajo de revisión posibles 185

En este capítulo se explican resumidamente las opciones de análisis de datos y revisión de datos. En OpenLAB CDS ChemStation Edition, estas opciones están disponibles en dos vistas separadas.



Data Analysis

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 sobre el símbolo correspondiente. El conjunto de datos correspondiente aparecerá en la Navigation Table.

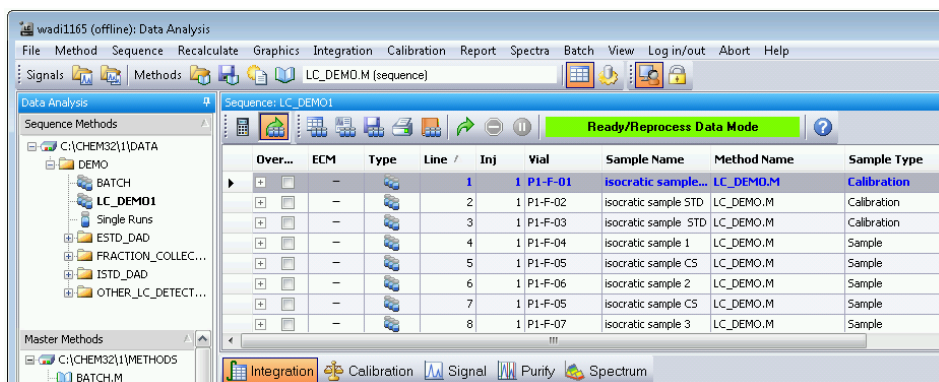


Figura 28 Carga de una secuencia desde el ChemStation Explorer en la Navigation Table

El contenido principal de la Navigation Table está compuesto por una lista de todos los análisis del conjunto. Se puede cargar un análisis en la memoria de ChemStation haciendo doble clic sobre la línea pertinente en la Navigation Table. 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.

Los análisis de secuencia se cargan siempre con el método de secuencia que se hubiera estado utilizando durante la adquisición o el reprocesamiento. Los análisis individuales se cargan con el método maestro que se hubiera cargado en último lugar en ChemStation.

La ChemStation permite especificar acciones predeterminadas que se realizan automáticamente al cargar un fichero de datos desde la Navigation Table, entre ellas tareas de análisis de datos como son integrar el cromatograma

directamente después de la carga o imprimir un informe con cada inyección individual. Véase la figura siguiente.

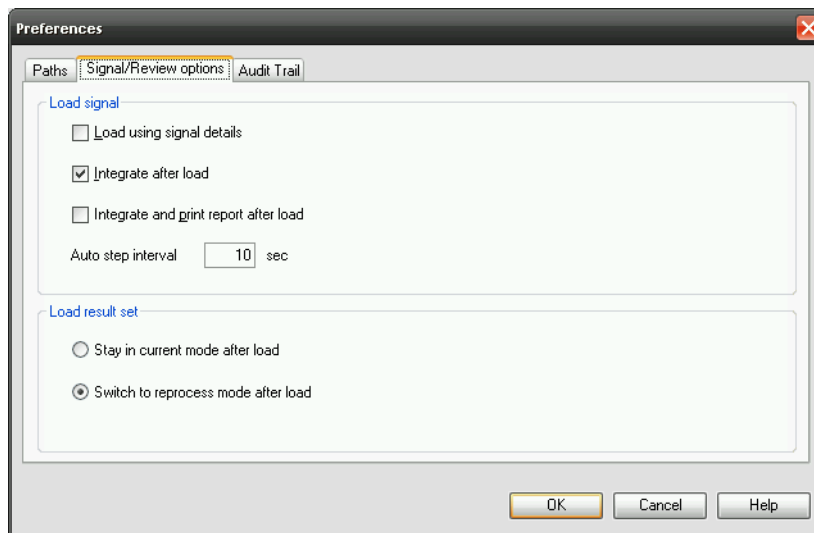


Figura 29 Ficha **Signal/Review options** del cuadro de diálogo **Preferences**

NOTA

Las funciones de **Load Signal Options** en la ficha **Signal/Review Options** del cuadro de diálogo **Preferences** se aplican solamente al cargar un fichero de datos en la Navigation Table. Cuando se utiliza la opción **Load Signal** del menú **File** o el icono correspondiente de la barra de menú principal, las opciones de configuración no se aplican; por ejemplo, no se carga el método.

Se puede elegir entre dos modos de Data Analysis: el modo Recalculation y el modo Reprocessing. Se puede acceder a estos modos por medio del menú **View** (**View > Recalculate Mode**, **View > Reprocess Mode**) o por medio del conjunto de herramientas (véase la figura siguiente).



Figura 30 Selección del modo Recalculation y el modo Reprocessing

En cada uno de estos modos el conjunto de herramientas contiene funciones específicas. Los dos modos y las funciones respectivas se describen en las sec-

ciones siguientes. En la ficha **Signal/Review Options** del cuadro de diálogo **Preferences** se puede elegir el modo que estará activo por defecto al cargar un conjunto de resultados.

Modo Recalculation

Una vez que se carga el análisis, se puede revisar, es decir, ya se pueden ajustar los parámetros del análisis de datos, integrar las señales y, finalmente, imprimir un informe. En este caso, se puede analizar el análisis como análisis individual sin tener en cuenta el contexto de la secuencia ni utilizar las funciones de la Sequence Table. Por ejemplo, no recalibrará aunque esté indicado en la tabla de secuencia La Navigation Table de este tipo de análisis de datos contiene la barra de herramientas que se puede ver en la figura siguiente.



Figura 31 Barra de herramientas Recalculation de la Navigation Table

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, detener el desplazamiento automático, recalcular un análisis con un método específico o borrar el contenido de la Navigation Table.

Los recálculos implican analizar los análisis uno por uno. Solamente se analizan los análisis mostrados en la Navigation Table. En caso de haber aplicado un filtro a la Navigation Table, solamente se recalculan los análisis mostrados en la tabla. También se tiene en cuenta el orden de la Navigation Table.

Se puede utilizar el recálculo en los siguientes flujos de trabajo, por ejemplo:

- Si se desea revisar los ficheros de datos de un conjunto de resultados con un método diferente que no está actualmente en el conjunto de resultados, por ejemplo, un método maestro que no se esté utilizando para la adquisición porque el flujo de trabajo emplee métodos de adquisición y análisis de datos separados.
- Si se ha editado un método de secuencia y se desea revisar solamente una serie concreta de análisis con este método para poder comprobar en qué grado se aplican estos parámetros a los distintos análisis.

Recalculate With Specific Method

Por defecto, el recálculo siempre recurre al método que se hubiera cargado junto con el fichero de datos. En análisis de secuencia, este es el método de secuencia. En análisis individuales, es el último método maestro que se hubiera cargado.

Con esta función, se pueden recalcular los análisis mostrados en la Navigation Table con un método maestro específico. El método maestro necesario se especifica en el cuadro de diálogo **Recalculate With Single Method** (véase la figura siguiente). Si el método maestro seleccionado emplea Intelligent Reporting (véase “[Elaboración de informes](#)” en la página 203), también se puede especificar la plantilla de informes que se empleará para los Single Injection Reports.

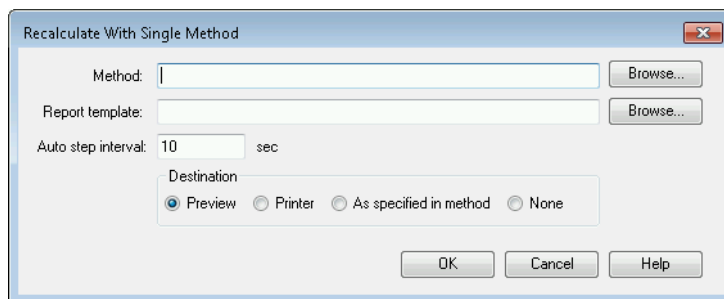


Figura 32 Cuadro de diálogo **Recalculate With Single Method**

El cuadro de diálogo **Browse for methods in master paths** y el cuadro de diálogo **Browse for templates in master paths** presentan todas las ubicaciones de ficheros que se hubieran especificado en Preferences.

NOTA

En revisiones anteriores de ChemStation se podía recalcular con un método específico eligiendo **Use current method**, **Use method from data file** o **Use sequence method** en la barra de herramientas.

Recalculation in Last Result Mode

En este modo, se carga el método de fichero de datos (DA.M) de cada análisis en vez del método de secuencia. Este método es el que se haya utilizado para el último análisis de datos (durante la adquisición, el reprocesamiento o el recálculo). Así, aun cuando el método de secuencia hubiera cambiado entre medias, se podrá reproducir el último resultado con el método empleado originalmente.

El nombre del método en la barra de herramientas aparece como DA.M, lo que indica que el método de fichero de datos está cargado. Al mover el puntero del ratón sobre ese campo, aparece un mensaje emergente con la ruta completa y el nombre del método.

NOTA

El DA.M suele ser de solo lectura. No se puede cargar manualmente, sólo lo puede cargar ChemStation en el modo de recálculo Last Result Mode. Se puede editar, pero no guardar. Al generar un informe, el sistema tiene que guardar primero el método. En ese caso, se advierte al usuario de que se van a generar nuevos resultados. Si da su confirmación, se actualiza el DA.M con los ajustes de ese momento.

Modo Reprocessing

Una forma diferente de analizar los datos consiste en aplicar **Reprocess** a una secuencia completa. Contrariamente a lo que ocurre con el recálculo, todos los análisis se reanalizan en el contexto de la secuencia, es decir, las Calibration Tables de los métodos de secuencia se actualizan en el caso de los análisis de calibración, y los multiplicadores, las cantidades, etc., se pueden cambiar en la Sequence Table.

El conjunto de resultados incluye todos los ficheros necesarios para el reprocesamiento: los ficheros de datos, una copia del fichero de secuencias, todos los métodos de secuencia y todas las plantillas de informes que se utilizaron originalmente con la adquisición. De ese modo, para reprocesar una secuencia solo hay que cargarla en la Navigation Table y seleccionar el conjunto de herramientas de reprocesamiento.

Si es necesario propagar los cambios en el método de secuencia al método maestro correspondiente para que estén disponibles para todas las futuras adquisiciones, se puede usar la función **Update Master Method** para hacerlo de forma fácil (véase “[Actualización del método maestro](#)” en la página 94).

El DA.M se actualiza automáticamente cada vez que se reprocesa un fichero de datos.

Para el reprocesamiento, la Navigation Table contiene el siguiente conjunto de herramientas:



Figura 33 Conjunto de herramientas de Sequence Reprocessing de la Navigation Table

Con este conjunto de herramientas se pueden editar la tabla de secuencias y los parámetros de secuencia, se puede guardar la secuencia actual o imprimirla, mostrar u ocultar el libro de registro de secuencia, iniciar el reprocesamiento de una secuencia, detener la secuencia o ponerla en pausa.

Hay que tener en cuenta que los iconos de reprocesamiento de la Navigation Table solo están disponibles para los conjuntos de resultados generados con la ChemStation B.02.01 y posteriores. Cuando se trate de datos de análisis individuales (si se generaron con una versión anterior a la B.02.01) y de datos adquiridos mientras estuviera desactivada **Unique Folder Creation** no se podrá acceder al reprocesamiento en **Data Analysis** (véase “[Preferences: ficha Sequence](#)” en la página 141). Estas secuencias deben reprocesarse en **Method and Run Control**, estableciendo el parámetro de secuencia **Part 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 de **Method and Run Control** y la Navigation Table ofrece el reprocesamiento como una **Data Analysis Task**.

Otra opción es añadir dichas muestras o secuencias como nuevo conjunto de resultados constituido por el usuario. En esta parte es donde se asignan métodos de secuencia, y se puede reprocesar la secuencia entera después (véase “[Conjuntos de resultados constituidos por el usuario](#)” en la página 178).

Hay que tener en cuenta las reglas siguientes con respecto al reprocesamiento:

- Al cargar un conjunto de resultados en la Navigation Table, ChemStation carga también automáticamente el fichero de secuencia (*.S) ubicado en este conjunto de resultados. Este fichero de secuencia contiene todas las líneas de secuencia asociadas a todos los ficheros de datos que pertenezcan al conjunto.
- Todas las acciones se realizan en los métodos de secuencia. Si van a aplicarse parámetros de análisis modificados, es necesario cambiar los métodos de secuencia.
- Durante el reprocesamiento, se actualizan el fichero de lotes (*.b), el registro de análisis de secuencias o análisis individuales (*.log) y la Navigation Table. El método de análisis de datos individual (DA.M) de cada fichero de datos procesado se sobrescribe con el método de secuencia.
- Si se desean añadir nuevos métodos de uno de los directorios de métodos maestros a la Sequence Table, hay que utilizar primero el ChemStation Explorer para copiar el método maestro al conjunto de resultados. Se puede seleccionar el nuevo método de secuencia en la Sequence Table. En la Sequence Table, no se pueden añadir ni quitar líneas.

- En el cuadro de diálogo Sequence Parameters, pueden cambiarse solamente los comentarios 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 aplicarán al reprocesamiento.

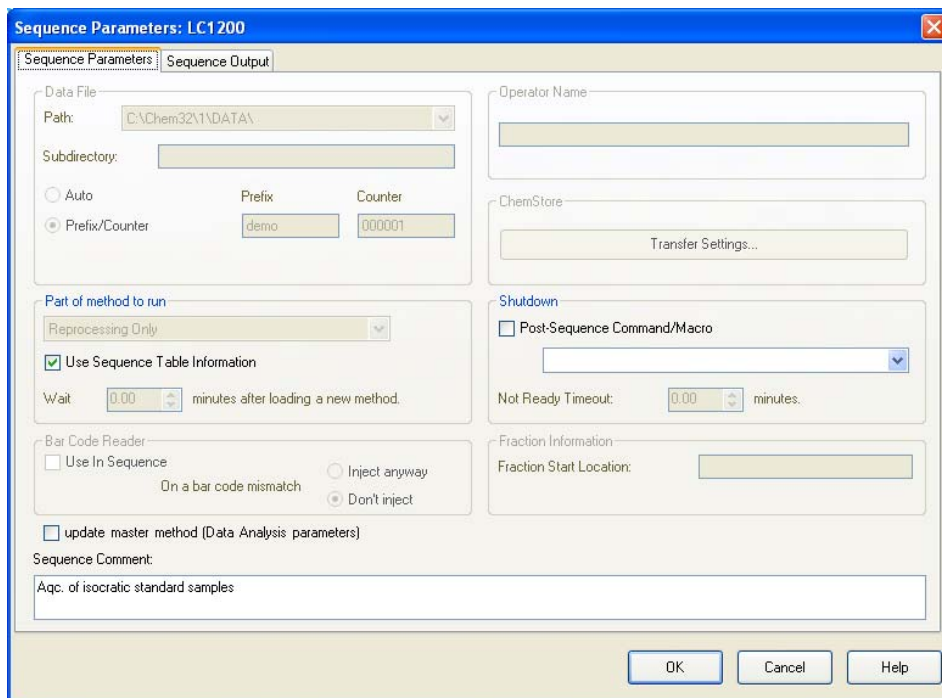


Figura 34 Sequence Parameters en Data Analysis

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 fichero de datos que los eventos de integración programados. 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 fichero de datos en lugar del método. En el momento en el que se recibe o reprocesa el fichero de datos, estos eventos manuales del fichero de datos se aplican de forma automática. Los análisis que contienen eventos de integración manual se marcan en la columna correspondiente de la Navigation Table.

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

- Guardar en el fichero de datos eventos manuales de los cromatogramas que se están visualizando.
- Eliminar 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 fichero de datos durante una revisión en la Navigation Table, 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 fichero de datos durante una revisión en la Navigation Table 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 fichero de datos.

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

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

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

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

Para convertir eventos manuales almacenados en un método para guardarlos en el fichero de datos, aplique los eventos del método y guarde los resultados en el fichero de datos. Si es necesario, elimine 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 fichero de datos utilizando este método. Si el fichero de datos contiene eventos manuales adicionales, se utilizan los eventos del fichero de datos. Cuando la casilla **Manual Events** está marcada, nunca se le pide al usuario que guarde los eventos en el fichero de datos.

Conjuntos de resultados constituidos por el usuario

En la vista **Data Analysis**, la Navigation Table muestra el contenido del análisis individual o secuencia que se haya cargado. Se pueden cargar, descargar o añadir ficheros de datos a la Navigation Table. Con el comando **Sequence > Create New Result Set**, se puede crear un nuevo conjunto de resultados constituido por el usuario de los datos mostrados en ese momento en la Navigation Table. Los conjuntos de resultados constituidos por el usuario se pueden reprocesar de igual forma que los conjuntos de resultados de creación automática.

Unload Current Dataset

Con el comando **Unload Current Dataset** del menú contextual de la Navigation Table, se puede revertir la Navigation Table al estado original vacío, como estuviera después de cargar ChemStation. Si hay datos sin guardar, se le pedirá que los guarde.

Delete Selected Data File

Con el comando **Remove selected Data Files** del menú contextual de la Navigation Table se pueden eliminar las líneas seleccionadas de la Navigation Table. Al usar este comando tan solo se elimina la referencia en la Navigation Table, no se borra el fichero de datos físico del conjunto de resultados cargado o el análisis individual del sistema de ficheros. Solamente se pueden borrar las referencias a ficheros añadidos/superpuestos.

Actualización de métodos

En la vista **Data Analysis** hay varias opciones para copiar métodos entre los directorios de métodos maestros y los conjuntos de resultados. Para obtener más información véase [“Administración de métodos”](#) en la página 93.

Visor de informes para análisis de datos

Dependiendo de la configuración, ChemStation guarda automáticamente los informes de inyecciones individuales e informes resumen de secuencias en el sistema de ficheros en un determinado momento. El visor de informes Report

Viewer simplifica la consulta de los ficheros de informes guardados para comprobar los resultados de adquisición, reprocesamiento o recálculo de datos.

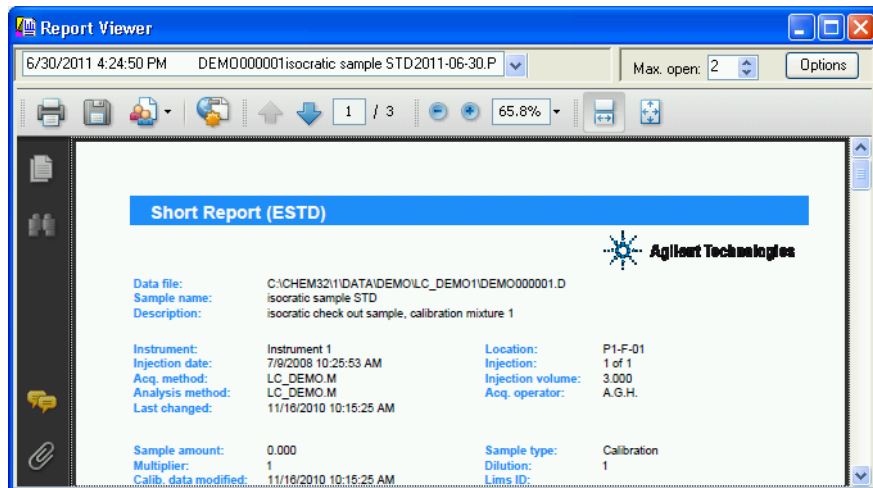


Figura 35 Visor de informes

Utilizar el visor de informes tiene las ventajas siguientes:

- Se pueden abrir los ficheros de informe directamente desde ChemStation. No es necesario buscarlos en el sistema de ficheros.
- Cada informe se abre en una ventana flotante separada. Por lo tanto, resulta sencillo comparar distintos informes colocando las ventanas una al lado de la otra.
- Se puede consultar el fichero de informe en la modalidad de pantalla completa.
- Se pueden utilizar las funciones de Adobe Reader para consultar informes .pdf.
- Se puede buscar un determinado texto en informes tanto .txt como .pdf.
- Cuando se reprocesa una secuencia, no es necesario esperar a que finalice el reprocesamiento de la secuencia completa. Se pueden abrir antes los ficheros de informe guardados para aquellas muestras de la secuencia ya completadas.

Inicio del visor de informes

El visor de informes Report Viewer se puede abrir a través del menú, los iconos de la barra de herramientas o el menú contextual de la tabla de navegación. Hay distintos elementos para informes resumen de secuencias e informes de inyecciones individuales.

Para consultar informes de inyecciones individuales:

- Seleccione el menú **Report > View Report File** para consultar el fichero o los ficheros de informe correspondientes a la señal cargada.
- Seleccione el comando **View Saved Report File(s)** del menú contextual de una determinada muestra en la tabla de navegación. Con ese comando es posible cargar el fichero o los ficheros de informe correspondientes a cualquier señal, aun cuando no esté cargada en ese momento.
- Seleccione el icono **View saved Report File(s)** de la barra de herramientas del espacio de trabajo para consultar el fichero o los ficheros de informe correspondientes a la señal cargada.



Para consultar informes resumen de secuencias:

- Seleccione el menú **Sequence > View Summary Report File**.
- Pulse el icono **View Saved Sequence Summary Report File(s)** de la barra de herramientas de navegación (en el modo de reprocesamiento).



Configuración del visor de informes

Es posible configurar varios aspectos del comportamiento del visor de informes. A todos esos ajustes se accede a través del botón **Options** de la ventana Report Viewer.

Es posible definir el número máximo de ventanas del visor de informes que se pueden abrir en paralelo. Las ventanas se reutilizan de manera cíclica. Cuando se consultan más ficheros de informes que el número máximo de ventanas del visor de informes, las ventanas que se abrieron antes son las primeras en cambiar de contenido.

NOTA

Cuando no se necesite comparar múltiples informes, recomendamos limitar el número de ventanas del visor de informes a 1.

Para comparar múltiples informes, puede ser también útil ajustar la barra de título de las ventanas del visor de informes. Hay varias señales disponibles para ventanas del visor de informes que muestren informes resumen de secuencias, informes de inyecciones individuales correspondientes a muestras incluidas en secuencias o informes de inyecciones individuales correspondientes a análisis individuales. Esas señales ayudan a distinguir las distintas ventanas del visor de informes.

Las ventanas del visor de informes se muestran siempre encima de la aplicación ChemStation. Para trabajar con ChemStation y el visor de informes al mismo tiempo, es posible cambiar el tamaño y la posición de ambas ventanas de modo que se puedan ver a un tiempo. Cuando se cierra ChemStation, los tamaños y las posiciones de las ventanas se guardan. La próxima vez que se lance ChemStation, se utilizarán nuevamente esos mismos parámetros.

Trabajo con el visor de informes

El visor de informes se puede utilizar, por ejemplo, en los siguientes flujos de trabajo:

- Se configura el método y la secuencia para guardar informes PDF en el sistema de ficheros. Tras finalizar el análisis de la secuencia, se abren los ficheros de informe (informe resumen de secuencia o informes de inyecciones individuales) directamente desde la ChemStation en el visor de informes. Se utilizan funciones de Adobe Reader como las de zoom o búsqueda para comprobar detalladamente el informe.
- Se descarga de ECM una secuencia que ya contiene ficheros de informe.
 - Para ver el resultado final, se selecciona la muestra pertinente en la tabla de navegación y se abre el fichero de informe directamente desde ChemStation en el visor de informes.
 - En caso necesario, es posible cambiar el método y reprocesar la secuencia. Mientras el reprocesamiento está en curso, se empiezan a consultar los informes de las muestras ya completadas.

En el visor de informes, es posible seleccionar informes tanto antiguos como nuevos en la lista de la esquina superior izquierda. Es posible distinguir los informes por su fecha de creación, que se muestra como parte

de la entrada de lista. Dependiendo de los parámetros de transferencia asignados, es posible cargar de manera automática en ECM los datos, incluidos los nuevos ficheros de informes, una vez finalizado el reprocesamiento.

- Se ejecuta una secuencia que guarda únicamente ficheros de informe TXT. Es posible igualmente comprobar esos ficheros de informe en el visor de informes.
- Se consultan distintos informes referentes a las mismas muestras de la secuencia, en base a distintos estilos de informe o distintas plantillas.

En primer lugar, se crea una secuencia con un informe de rendimiento ampliado. Se ejecuta o se reprocesa la secuencia para obtener el fichero de informe. Si se está satisfecho con los resultados mostrados en el informe, se cambia el método de secuencia para crear un informe más breve (por ejemplo, se selecciona una plantilla de informe diferente o el estilo de informe clásico **Short**). Se reprocesa entonces la secuencia para obtener los informes más breves. Cuando se consulta un informe con el visor de informes, es posible alternar entre ambos tipos de informe seleccionándolos en la lista de la esquina superior izquierda. Como parte de la entrada de lista se muestra la fecha de creación de cada fichero.

Review

En Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition, hay una nueva vista disponible que cubre los flujos de trabajo de revisión de datos de Data Analysis. En esta vista **Review** se pueden generar informes para una secuencia entera, un subconjunto de una secuencia o cualquier selección de ficheros de datos de distintas secuencias o muestras individuales.

En la vista **Review** no se cargan métodos ni se generan nuevos resultados como en Recalculation o Reprocessing. Los informes que se generan en la vista **Review** muestran solamente los resultados que ya se hubieran calculado.

Se puede seleccionar una plantilla de informes y aplicarla a la selección específica de ficheros de datos. La combinación de plantillas y selección de ficheros de datos determina la salida del informe generado.

NOTA

La vista **Review** está disponible solamente si se ha activado Intelligent Reporting en la Instrument Configuration, en el OpenLAB Control Panel.

Requisitos de Intelligent Reporting

ChemStation C.01.03 genera los datos de resultados en un formato específico (*.ACAML), el que usa Intelligent Reporting. Si desea crear informes con datos adquiridos en una ChemStation versión A o B, primero tiene que regenerar los resultados con ChemStation C.01.03 (por ejemplo, recalcular los datos o generar Single Injection Reports en la vista Data Analysis). Si los resultados no están disponibles en el formato requerido, los informes generados en la vista Review no contendrán datos.

Selección de ficheros de datos

Se pueden seleccionar los ficheros de datos necesarios cargando las secuencias o los análisis individuales en el árbol de navegación del ChemStation Explorer. Todos los ficheros de datos disponibles se muestran en la Navigation

Table. En la Navigation Table, se seleccionan los ficheros de datos específicos de los que se deseen ver los resultados en el informe.

Carga de ficheros de datos

Se pueden cargar todos los ficheros de datos de una secuencia entera o de una carpeta Single Runs. En la ficha **Data** del ChemStation Explorer, se puede hacer doble clic sobre la secuencia o utilizar el comando **Load** del menú contextual para cargar todos los ficheros de datos incluidos.

Al cargar los ficheros de datos se borra automáticamente el contenido de la Navigation Table antes de que se muestren nuevos datos. Por tanto, se pueden preparar los datos tanto para un *Single Sample Report* como para un *Sequence Summary Report*.

Añadir ficheros de datos

Si se desea comparar los resultados de diferentes secuencias, primero se puede cargar una secuencia y añadir después los ficheros de datos necesarios de otra secuencia. En la ficha **Data** del ChemStation Explorer hay que utilizar el comando **Add Data Files...** en el menú contextual para añadir solamente ficheros de datos específicos a la selección ya cargada. Se abre un cuadro de diálogo en el que se pueden seleccionar los ficheros de datos necesarios.

Al añadir ficheros de datos, la Navigation Table adjunta los ficheros de datos a la lista de ficheros de datos ya cargados. Por tanto se podrán preparar los datos, por ejemplo, para *informes entre secuencias* (*Cross-Sequence Reports*).

Selección de ficheros de datos para elaboración de informes

La Navigation Table muestra todos los ficheros de datos de la colección de secuencias o muestras individuales sobre las que hizo doble clic en el ChemStation Explorer. En la Navigation Table se seleccionan aquellos ficheros de datos de los que se desee crear el informe. Solamente se incluirán las líneas seleccionadas al generar un informe.

Selección de la plantilla de informes

Se pueden seleccionar las plantillas de informes necesarias en la ficha **Report Templates** en el ChemStation Explorer. El árbol de navegación muestra todas las plantillas de informes disponibles en el directorio chem32/repstyle.

Previsualización de informes

El informe resultante siempre estará definido tanto por la selección de datos como por la plantilla de informes. Por tanto, ChemStation genera el informe correspondiente y muestra una vista previa del informe una vez que se han seleccionado uno o más ficheros de datos y cargado una plantilla de informes.

Se puede enviar el informe a una impresora o guardarlo en un fichero (PDF o XLS). En caso de utilizar Agilent OpenLAB ECM, también se puede cargar el informe directamente en ECM.

Flujos de trabajo de revisión posibles

Se puede utilizar la opción **Review**, por ejemplo, en los siguientes flujos de trabajo:

- Cargando una secuencia y seleccionando todos los ficheros de datos de la secuencia. Después se puede cargar una plantilla de informes y generar un *Sequence Summary Report*.
- Después de generar un Sequence Summary Report, se puede cargar una plantilla de informes diferente. Al revisar los mismos datos con una *Plantilla de informes diferente*.
- Cargando una secuencia y seleccionando solamente un subconjunto de ficheros de datos. Después se puede cargar una plantilla de informes y generar un Sequence Summary Report *solamente para una parte de la secuencia*.
- Después de cargar un subconjunto de ficheros de datos, se pueden añadir otros ficheros de datos (desde una secuencia o una recolección de muestras individuales). Después se puede cargar una plantilla de informes y generar un *Cross-Sample o un Cross-Sequence Report*.

10 Conceptos de análisis y revisión de datos

Review



11 Calibración

Definición de términos	188
Tipos de calibración	189
Calibración de un único nivel	189
Calibración multinivel	190
Rangos de calibración	192
Ajustes de la curva de calibración	192
Tratamiento del origen	192
Calibration Table	196
Suma de picos	197
Muestras desconocidas	198
Recalibración	199
Definición de la recalibración	199
¿Por qué recalibrar?	199
Recalibración manual	199
Recalibraciones con suma de picos	200
Formas de recalibrar	200
Recalibración de picos no identificados	201

En este capítulo se explican los conceptos de calibración.



Definición de términos

Calibración	La calibración es el proceso de determinar los factores de respuesta que se utilizarán para calcular las concentraciones absolutas de componentes mediante la inyección de estándares de calibración especialmente preparados. La Calibration Table se utiliza también para la identificación.
Compuesto	Un compuesto químico puede incorporar varios picos en una calibración de múltiples señales, normalmente uno por señal. En calibraciones de una sola señal, un compuesto se refiere a un pico.
Nivel de calibración	El nivel de calibración comprende los puntos de calibración de una concentración de muestras de calibración. En una calibración multiseñal, los puntos de calibración pueden distribuirse entre varias señales.
Punto de calibración	Un punto de calibración corresponde a una relación cantidad/respuesta de un pico en la curva de calibración.
Muestra de calibración	<p>Una muestra de calibración, también llamada estándar de calibración o mezcla estándar, es una muestra que contiene una cantidad conocida del compuesto que se va a cuantificar. En el software, se hace referencia a la muestra de calibración como una inyección desde el vial de la muestra.</p> <p>Las muestras de calibración pueden comprarse a distribuidores de productos químicos o pueden prepararse con una cantidad medida con exactitud de un compuesto puro. La cantidad de compuesto en la muestra de calibración se expresa normalmente como una concentración, es decir, en unidades ng/μl.</p>

Tipos de calibración

ChemStation ofrece dos tipos de calibraciones: calibraciones de un único nivel y calibraciones multinivel.

Calibración de un único nivel

La curva de calibración que se muestra en [Figura 36](#) en la página 189 contiene un punto, es decir, un nivel. Para la curva de calibración de un único nivel, se asume que la respuesta del detector es lineal sobre el rango de concentraciones de trabajo para las muestras de interés. El factor de respuesta del pico de un componente dado se obtiene de la inversa de la pendiente de la línea de la curva de calibración entre el punto y el origen. Una desventaja de la calibración de un único nivel es que supone que la respuesta del detector a la concentración de muestra es lineal y pasa a través del origen en un gráfico de concentración frente a respuesta. Esto no siempre es verdad y puede conducir a resultados imprecisos.

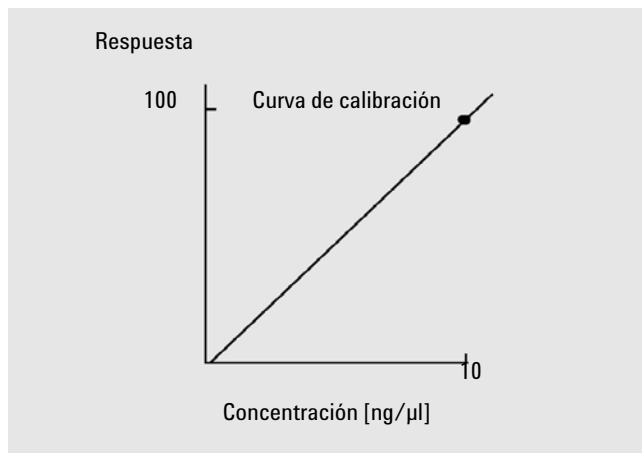


Figura 36 Curva de calibración de un único nivel

11 Calibración

Tipos de calibración

Para obtener resultados cuantitativos precisos, la curva de calibración debe tener al menos dos niveles. Estos niveles tendrían que abarcar las cantidades que se espera encontrar en las muestras desconocidas.

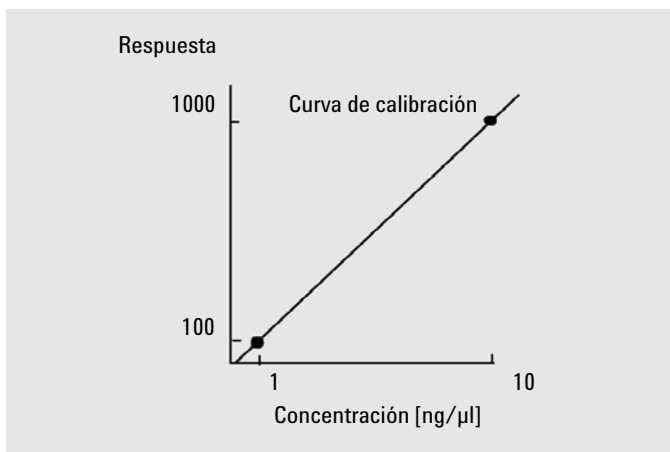


Figura 37 Curva de calibración de dos niveles

Por ejemplo, si desea cuantificar un compuesto y las muestras desconocidas se estiman en un rango de 1 a 10 ng/μl, entonces la curva de calibración tendría que tener al menos esos dos niveles tal y como se muestra en la [Figura 37](#) en la página 190.

Límites de cantidad

ChemStation le permite definir los rangos de cuantificación válidos en términos de cantidades absolutas de cada componente.

Calibración multinivel

Se puede utilizar la calibración multinivel cuando no sea lo suficientemente exacta como para asumir que un componente tiene una respuesta lineal o confirmar la linealidad del rango de calibración. Cada nivel de calibración corresponde a una muestra de calibración con una concentración particular de componentes. Las muestras de calibración se prepararán de forma que la concentración de cada componente varíe dentro del rango de concentraciones esperadas en los ejemplos desconocidos. De este modo es posible permitir un

cambio en la respuesta del detector con concentración y calcular los factores de respuesta en consecuencia.

La curva de calibración multinivel tiene tres niveles y muestra un ajuste lineal desde el origen. Este método de ajuste lineal desde el origen es similar a la calibración del método de un único punto. Se asume que la respuesta del detector a la concentración es lineal. La diferencia entre los dos tipos de calibración es que, con el ajuste lineal la pendiente de la respuesta del detector puede determinarse con un mejor ajuste a través de un número de puntos, uno para cada nivel.

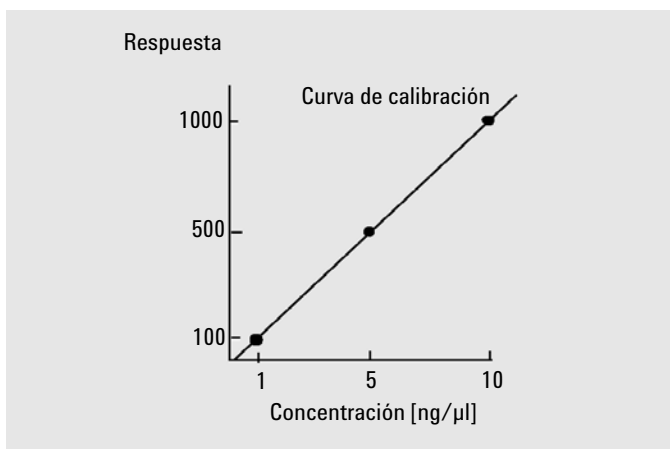


Figura 38 Curva de calibración multinivel con tres niveles

La tabla de calibración correspondiente, que es la tabulación de la información utilizada para generar esta curva, puede parecer similar a la mostrada en [Tabla 27](#) en la página 191.

Tabla 27 Tabla de calibración

Nivel	Cantidad (ng/ μ l)	Respuesta (cuentas de área)
1	1	100
2	5	500
3	10	1000

En este ejemplo, las muestras de calibración utilizadas para generar los tres niveles se han identificado como 1, 2 y 3.

Rangos de calibración

Cada calibración multinivel es válida para el rango de concentraciones utilizadas en las muestras de calibración. La mejor aproximación es la extrapolación de una curva de calibración, especialmente si no es lineal. El rango de calibración de cada componente puede definirse en el cuadro de diálogo **Compound Details**. Cada entrada de ese compuesto puede expresarse como límites inferiores y superiores. Si se exceden estos límites, se anota en el informe.

Ajustes de la curva de calibración

Hay varios cálculos de ajuste de curva disponibles para usar en calibraciones multinivel.

- Lineal de trazos
- Lineal
- Registro
- Alimentación de corriente
- Exponente
- Cuadrático
- Cúbico
- Promedio (respuesta/cantidad)

Ajuste no lineal

En algunos casos, la respuesta del detector a los cambios en la concentración de muestra no es lineal. Para estos tipos de análisis, no es apropiado el método de calibración de regresión lineal y habría que utilizar un cálculo de la calibración multinivel.

Tratamiento del origen

Existen cuatro formas de tratar el origen cuando se representa gráficamente la curva de respuesta:

- ignorar el origen,

- incluir el origen,
- forzar el origen, o
- conectar el origen.

Para forzar la inclusión del origen en la curva de calibración, los puntos de calibración se reflejan sobre el origen desde el primer cuadrante hasta el tercero. La utilización de todos los puntos para el cálculo de la regresión asegura que la curva de calibración resultante pase por el origen. Esto también se describe en [Figura 39](#) en la página 193.

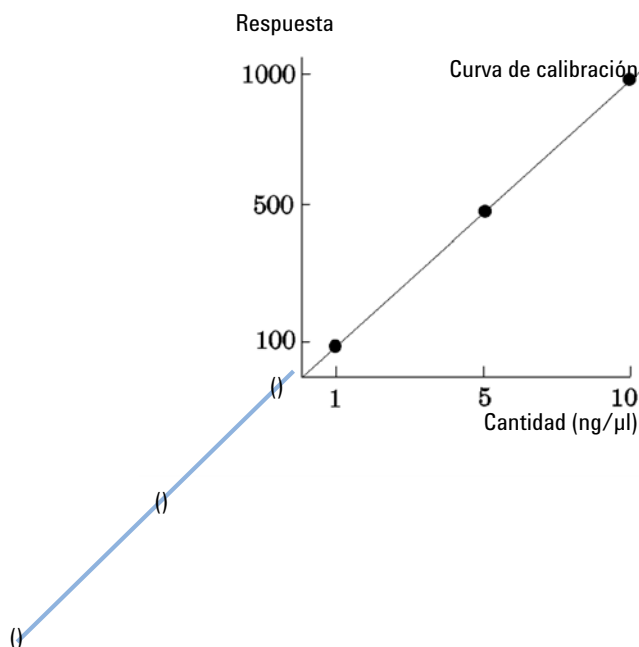


Figura 39 Forzar el origen para incluirlo

Para obtener más información sobre los ajustes de la curva de calibración y tratamiento del origen, consulte el fichero de *ayuda en línea*.

Ponderación del punto de calibración

Cuando se configura la curva de calibración predeterminada, puede especificarse la ponderación relativa (o importancia) de varios puntos de calibración utilizados para generar la curva.

Se pueden seleccionar las siguientes opciones de ponderación:

Peso	Descripción
Igual	Todos los puntos de calibración tienen el mismo peso en la curva.
Lineal (Ctd.)	<p>Un punto de calibración con la cantidad x tiene una ponderación $1/x$ normalizada a la cantidad más pequeña, de forma que el factor de peso mayor es 1. La normalización se calcula multiplicando el peso por la cantidad más pequeña. Por ejemplo, el peso de un punto de calibración con la cantidad x es $(1/x) \times a$ donde a es la cantidad menor del compuesto calibrado preparado en los estándares de calibración.</p> <p>Si se incluye el origen se asigna la media de las ponderaciones de otros puntos de calibración.</p>
Lineal (Rpta.)	<p>Un punto de calibración con la respuesta x tiene una ponderación $1/y$ normalizada a la respuesta más pequeña, de forma que el factor de peso mayor es 1. La normalización se calcula multiplicando el peso por la respuesta más pequeña. Por ejemplo, el peso de un punto de calibración con la cantidad y es $(1/y) \times b$ donde b es la respuesta correspondiente a la cantidad menor del compuesto calibrado preparado en los estándares de calibración.</p> <p>Si se incluye el origen se asigna la media de las ponderaciones de otros puntos de calibración.</p>
Cuadrático (Ctd.)	<p>Un punto de calibración con la cantidad x tiene una ponderación $1/x^2$ normalizada a la cantidad más pequeña de forma que el factor de peso mayor es 1. La normalización se calcula multiplicando el peso con la cantidad más pequeña. Por ejemplo, el peso de un punto de calibración con la cantidad x es $(1/x^2) \times a^2$ donde a es la cantidad menor del compuesto calibrado preparado en los estándares de calibración.</p>
Cuadrático (Rpta.)	<p>Un punto de calibración con la respuesta x tiene una ponderación $1/y^2$ normalizada a la respuesta más pequeña de forma que el factor de peso mayor es 1. La normalización se calcula multiplicando el peso con la respuesta más pequeña. Por ejemplo, el peso de un punto de calibración con la respuesta y es $(1/y^2) \times b^2$ donde b es la respuesta correspondiente a la cantidad menor del compuesto calibrado preparado en los estándares de calibración.</p>
Nº Calibraciones	Un punto de calibración se pondera según el número de recalibraciones del punto. No se efectúa ninguna normalización

Las ponderaciones cuadráticas del punto de calibración pueden utilizarse, por ejemplo, para ajustar la dispersión de los puntos de calibración. De esta forma, se asegura que los puntos de calibración más cercanos al origen, que

pueden normalmente medirse con más exactitud, tengan mayor peso que los puntos de calibración alejados del origen, que pueden dispersarse.

La decisión de qué tipo de ponderación del punto de calibración utilizar, debería basarse en los requisitos del método.

Calibration Table

La Calibration Table especifica las conversiones de las áreas o alturas de picos en las unidades elegidas, de acuerdo con el procedimiento de cálculo seleccionado. Contiene una lista de tiempos de retención/migración de un análisis de calibración. Estos tiempos de retención/migración se comparan con los tiempos de retención/migración de los picos en un análisis de muestra. Donde se produce una coincidencia, se supone que el pico de la muestra representa el mismo componente que aquél de la Calibration Table. Durante un análisis o mientras se genera un informe, las cantidades que se introducen para cada pico se utilizan para calcular las cantidades del procedimiento de cálculo seleccionado para el informe. El tipo y la cantidad de información requerida para crear una Calibration Table varían en función del tipo de procedimiento de cálculo seleccionado.

Para crear una Calibration Table, se necesita la siguiente información:

- El tiempo de retención/migración para el pico de cada componente de una mezcla de calibración.
- La cantidad de cada componente utilizada para hacer la mezcla de calibración, expresada en unidades coherentes.

Suma de picos

La tabla de suma de picos se proporciona para ciertas aplicaciones de las industrias petroquímica y farmacéutica que pueden realizarse de manera más eficaz con las siguientes funciones:

- Suma de las áreas de picos que se encuentran en un rango especificado por el usuario.
- Suma de las áreas de un rango de picos y cálculos con un solo multiplicador.
- Suma de las áreas de todos los picos con el mismo nombre.

La tabla de suma de picos es similar, con ciertas diferencias, a la tabla de calibración estándar. Como la tabla de calibración, se asocia con el método actual.

NOTA

Es necesario crear una tabla de calibración para un análisis antes de crear la tabla de suma de picos.

Muestras desconocidas

Una muestra desconocida es una muestra que contiene una cantidad desconocida de un compuesto para cuantificar.

Para descubrir qué cantidad de compuesto hay en la muestra desconocida, es necesario:

- crear una curva de calibración para el compuesto,
- inyectar una porción alícuota de la muestra desconocida y analizarla del mismo modo que la muestra de calibración,
- determinar la respuesta a partir de la señal, es decir, el área o la altura del pico causada por la cantidad desconocida de compuesto y
- utilizar la curva de calibración para calcular la cantidad de compuesto existente en la muestra desconocida.

Por ejemplo, si el área del pico de la muestra desconocida es 500, se puede determinar que la cantidad es 5 ng/μl utilizando la curva de calibración que se muestra en [Figura 40](#) en la página 198.

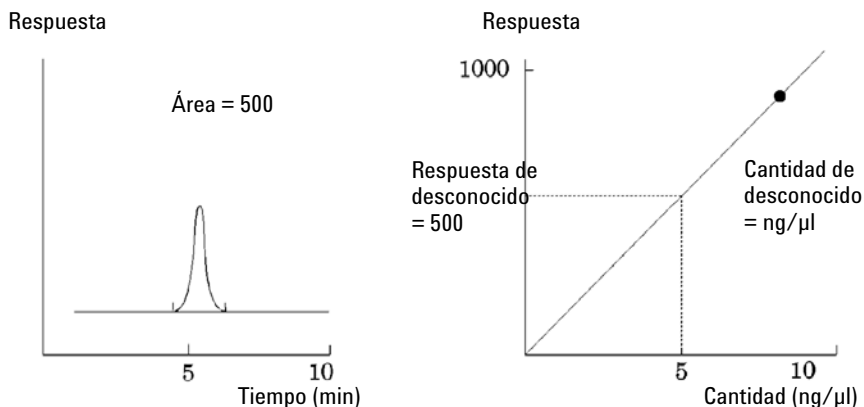


Figura 40 Señal de muestra desconocida y curva de calibración

Recalibración

Definición de la recalibración

La recalibración es el proceso utilizado para actualizar un nivel de una curva de calibración. Cuando se recalibra se analiza otra muestra que contiene los mismos compuestos de calibración que la original y, lo más importante, la misma cantidad de éstos. Cuando se analiza la muestra de calibración, se obtienen los factores de respuesta y los tiempos de retención/migración actualizados. Puede elegirse realizar la media de los factores de respuesta de un número determinado de análisis de calibración de forma que los factores de respuesta se ponderen por igual.

¿Por qué recalibrar?

La mayoría de las calibraciones tienen una vida limitada debido a los cambios en la cromatografía. La recalibración es necesaria para mantener la exactitud de los análisis. Por ejemplo, se ha creado una tabla de calibración para el compuesto cafeína que se usa cuando es necesario cuantificar muestras que contienen cafeína. En algún momento será necesario reemplazar la columna/capilar. Aunque la columna/capilar se reemplace con una exactamente del mismo tipo, no se comportará exactamente de la misma manera que la columna/capilar anterior cuando se creó por primera vez la tabla de calibración para la cafeína. Por tanto, para asegurar la coherencia, se deben recalibrar los niveles de la tabla de calibración antes de utilizar la nueva columna/capilar para analizar las muestras que contengan cantidades desconocidas de cafeína. De este modo se cuantifican muestras analizadas bajo las mismas condiciones de sistema.

Recalibración manual

Puede introducir manualmente la información de calibración del pico y normalizar la tabla de calibración con la opción Configuración manual del cuadro de diálogo Nueva tabla de calibración. Generalmente, se produce un nuevo

método de calibración analizando una mezcla de calibración estándar, creando una tabla de calibración e introduciendo los picos calibrados para obtener factores de respuesta. Este enfoque no es eficaz para algunas aplicaciones, como en la industria petroquímica, donde se han analizado los mismos compuestos durante muchos años y los factores de respuesta de varios compuestos y detectores están ya disponibles.

Puede crear una tabla de calibración de forma manual introduciendo los picos y los factores de respuesta en la tabla de calibración, recalibrando el método con un estándar que contenga al menos un pico de respuesta de referencia y seleccionando la actualización %Delta.

Recalibraciones con suma de picos

Cuando se realiza una recalibración, los rangos de tiempo de retención/migración en la tabla de suma de picos del método se actualizarán antes de que se proceda con la recalibración real. Las recalibraciones de la suma de picos se realizan de este modo para asegurar que se incorpora el delta en los cálculos de tiempo.

Formas de recalibrar

La recalibración se puede efectuar de dos formas con el software ChemStation. Puede recalibrar de forma interactiva o automática durante una secuencia de análisis automatizados. En la recalibración interactiva el proceso de recalibración se realiza utilizando el software ChemStation después de inyectar una o varias muestras de calibración. En la recalibración con secuencia se debe especificar cuándo se llevará a cabo el proceso, pero la recalibración en sí la sigue realizando el software de automatización. Para obtener más información, consulte [“Recalibración automática”](#) en la página 151.

Si desea información sobre cómo realizar la recalibración con el software, consulte el apartado Cómo... de la ayuda.

Recalibración de picos no identificados

Hay tres formas de recalibrar picos no identificados.

No Recalibration

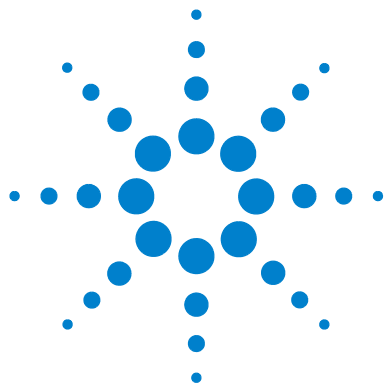
Si un pico de la Calibration Table no se puede identificar en los resultados de integración, se aborta la calibración. Si esto sucede en una secuencia, también se aborta la secuencia.

Partial Recalibration

Esta función permite la recalibración solo de los picos identificados. Si faltan picos, no se aborta la calibración pero se anota en el informe que faltan picos.

Recalibration of all Retention/Migration Times

Esta función permite la recalibración del tiempo de retención/migración de todos los picos identificados y no identificados. Para ello se utilizan los tiempos de retención/migración de los picos identificados. Los factores de respuesta de los picos no identificados no se actualizan.



12 Elaboración de informes

Definición de informe	204
Classic e Intelligent Reporting	205
Intelligent Reporting	206
Ventajas de Intelligent Reporting	206
Report Template Editor (RTE) para Intelligent Reporting	206
Almacenamiento de plantillas de informes	210
Almacenamiento de informes generados	212
Plantillas de informes en ECM	213
Classic Reporting	214
Elaboración de informes de resultados	214
Resultados cuantitativos	215
Informes de valores de campos personalizados	216
Estilos de informe	216
Otros parámetros de estilo del informe	219
Elaboración de informes de resumen de secuencias	220
Formatos del fichero de informes	224

En este capítulo se describen los conceptos de Intelligent Reporting y Classic Reporting.



Definición de informe

Un informe puede incluir información cuantitativa y cualitativa de las muestras que se analizan. El informe puede ser una impresión en papel, información en pantalla o un fichero electrónico. El informe puede incluir detalles de los picos detectados durante el análisis y gráficos de señales adquiridas.

Informes para diferentes fines

Se pueden especificar informes que sirvan para distintos fines durante la adquisición de datos y durante la revisión de datos:

- El *Sequence Summary Report* se define en la ficha **Sequence Output** del cuadro de diálogo **Sequence Parameters**. Este informe lo crea automáticamente ChemStation después de completar una adquisición de secuencia o de reprocesar una secuencia.
- El *Single Injection Report* se define en el cuadro de diálogo **Specify Report**. Se crea uno de estos informes por cada muestra individual durante la adquisición de una secuencia o el reprocesamiento de una secuencia.

Con Intelligent Reporting se crean plantillas para los distintos tipos de informes, dependiendo de la finalidad de un informe. Para obtener más información, véase “[Tipos de informes](#)” en la página 206.

Destino del informe

Se puede enviar un informe a los siguientes destinos:

- **Screen**
El informe, incluido el texto y los gráficos, se muestra en pantalla en la ventana de previsualización del informe desde la que se puede imprimir.
- **Printer**
El informe con el texto y los gráficos se imprime en la impresora seleccionada.
- **File**
El informe se guarda en un fichero, por ejemplo un fichero Adobe PDF.

Classic e Intelligent Reporting

Classic e Intelligent Reporting

Con Agilent OpenLAB CDS, se puede elegir el tipo de Reporting que se desee usar: *Classic Reporting*, que es como era la función Reporting en las versiones anteriores de ChemStation, o *Intelligent Reporting*, que cuenta con un lenguaje de definición de informes normalizado y potente y con funciones de revisión mejoradas. En las siguientes secciones se describen los dos tipos de Reporting.

Consecuencias de activar Intelligent Reporting

Si se desea utilizar Intelligent Reporting, hay que activar Intelligent Reporting en la Instrument Configuration en el OpenLAB Control Panel.

Si se activa Intelligent Reporting, ocurre lo siguiente en ChemStation:

- La vista **Report Layout** muestra el Report Template Editor de Intelligent Reporting.
- La vista **Review** se hace visible.
- En el cuadro de diálogo **Sequence Parameters** se puede elegir entre Classic e Intelligent Reporting.
- En el cuadro de diálogo **Specify Report** se puede elegir entre Classic e Intelligent Reporting.

Intelligent Reporting

Ventajas de Intelligent Reporting

Intelligent Reporting brinda al usuario las siguientes ventajas:

- Se puede utilizar la vista **Review**.
- La mayor parte de las funciones disponibles en distintos ajustes y cuadros de diálogo de Classic Reporting está ahora en las plantillas de informes. Se pueden crear o editar plantillas de informes con la vista **Report Layout**, que contiene el nuevo Report Template Editor para Intelligent Reporting. El Report Template Editor cuenta con varias funciones potentes:
 - Se puede acceder a todos los datos de resultados generados por ChemStation seleccionando el campo de datos correspondiente.
 - Se pueden crear expresiones propias para hacer los cálculos con los campos de datos. Se puede utilizar cualquier expresión válida de Microsoft Visual Basic.
 - Se pueden crear expresiones en las que hacer cálculos con los Custom Fields de ChemStation.
 - Marcado de resultados: se pueden introducir expresiones para resaltar determinados resultados en función de su valor.
 - Elementos de informes preconfigurados (Snippets): el Report Template Editor tiene elementos de informe preconfigurados, denominados *snippets*, que se pueden insertar en la plantilla de informes arrastrándolos y soltándolos.

Report Template Editor (RTE) para Intelligent Reporting

Tipos de informes

Se pueden crear distintos tipos de informes. Según el tipo de informe de que se trate habrá disponibles distintos campos de datos en una plantilla de informes, y los elementos de informe se agruparán de modo diferente.

Están disponibles los siguientes tipos de informe:

- **Single Injection**

El informe generado muestra separados los elementos de informe de la plantilla de cada inyección en el ámbito de los datos disponibles en ese momento. Se pueden mostrar los datos por inyección, pero no se pueden comparar resultados de distintas inyecciones en una tabla o matriz.

- **Single Sequence Summary**

El informe generado muestra separados los elementos de informe de la plantilla de cada secuencia en el ámbito de los datos disponibles en ese momento. Se pueden comparar resultados de inyecciones diferentes en una tabla o matriz, pero no los resultados de distintas secuencias.

- **Cross-Sequence Summary**

Con este tipo de informe, los datos *no* se agrupan automáticamente. Por tanto, habrá que prestar más atención al agrupamiento de los elementos del informe, pero a cambio se podrán crear elementos de informe en los que se comparen datos de distintas secuencias.

Formato de plantilla

Todas las plantillas de informes se basan en el Report Definition Language (RDL), que es un formato XML estandarizado de Microsoft.

Para crear plantillas de informes, se puede utilizar el Report Template Editor (RTE) o bien Microsoft SQL Server Business Intelligence Development Studio (BI Studio):

- El *RTE* tiene una interfaz fácil de usar que ayuda a crear plantillas de informe en pocos pasos. Admite todos los tipos de elementos de informe y la mayor parte de las opciones de configuración correspondientes.

Con RTE, no se pueden editar plantillas que se hayan creado con BI Studio. Para editar dichas plantillas en RTE habrá que preguntar al servicio de atención al cliente de Agilent.

- *BI Studio* contiene todas las funciones necesarias. En todo caso, para trabajar con BI Studio hay que tener conocimientos avanzados de elaboración de plantillas. Si desea obtener más información, consulte el *G4635-90007 Manual for Report Template Designers*. Este manual viene con OpenLAB ECM Intelligent Reporter. Pida una copia de este manual a Agilent. Este manual contiene también descripciones detalladas de las plantillas de informes de Agilent que van incluidas en OpenLAB Intelligent Reporter. Estas plantillas están diseñadas específicamente para utilizarlas en BI Stu-

dio y contienen la mayor parte de las funciones avanzadas que no hay disponibles en RTE.

En BI Studio, se puede editar cualquier plantilla de informes, independientemente de que se crearan con RTE o con BI Studio.

Campos de datos

Se puede acceder a todos los datos de resultados generados por ChemStation durante una adquisición. De cada valor se puede seleccionar el campo de datos correspondiente en el que se guardará el valor. Se pueden ordenar los campos de datos de la plantilla de informes con arreglo a los requisitos deseados. Los campos de datos disponibles se dividen en las siguientes categorías:

- Sequence
- Sample
- Injection
- Signal
- Compound
- Peak
- Calibration Curve
- Instrument
- File
- Project

Elementos de informe

Se pueden añadir varios elementos de informe a una plantilla de informes, según cuales sean los requisitos del usuario. De cada elemento de informe se pueden configurar varias propiedades como el formato de fuente, el color de fondo, las expresiones, etc. Están disponibles los siguientes elementos de informe:

- Text Fields
- Data Fields
- Tables
- Matrices
- Composite Groups
- Images

- Chromatograms
- Calibration curves
- Spectra
- Charts
- Method Information

Snippets

El Report Template Editor contiene snippets, que son elementos de informe preconfigurados o grupos de elementos de informe que se pueden insertar en la plantilla de informes arrastrándolos y soltándolos.

Estos snippets son, por ejemplo, tablas preconfiguradas de resultados de compuestos o de idoneidad del sistema, cromatogramas para representación de señal única o múltiple, o diagramas de control de exactitud de la calibración o la estabilidad del tiempo de retención. Se pueden usar los snippets como punto de partida y ajustarlos con arreglo a los requisitos deseados.

Cálculos personalizados

En el Report Template Editor se pueden ver los valores de los campos de datos tal como se generaron en ChemStation, o bien se pueden calcular nuevos valores para distintos fines. Se pueden crear expresiones con los campos de datos existentes y también utilizar los campos personalizados.

Se pueden guardar los valores como variables y acceder a ellas desde el elemento de informe correspondiente en la plantilla.

El Report Template Editor contiene un Expression Editor con el que se podrán crear expresiones válidas. Todas las expresiones se basan en Microsoft Visual Basic.

Formato condicional

Se pueden configurar determinadas propiedades de un campo o celda en función de los valores resultantes de la expresión. Por ejemplo, si lo que aparece es la cantidad de compuestos, se puede hacer que esta tenga fondo rojo cuando la cantidad exceda de un cierto valor.

Datos de prueba

Al diseñar una nueva plantilla de informes en la vista Report Layout, ChemStation ofrece los datos de prueba mostrados en el Report Template Editor al editar o previsualizar una plantilla. Los datos de prueba corresponden al conjunto de datos (análisis únicos o de secuencias) seleccionados en ese momento en la Navigation Table de la vista **Data Analysis**. En caso de diseñar una plantilla para un Sequence Summary Report, habrá que cargar una secuencia en la vista Data Analysis y seleccionar un subconjunto de muestras. Ahora bien, en caso de diseñar una plantilla para un Single Injection Report, basta con seleccionar una sola muestra en la vista Data Analysis.

Almacenamiento de plantillas de informes

ChemStation contiene una serie de plantillas de informes predefinidas. Estas plantillas predeterminadas se encuentran en el directorio chem32\repstyle.

En secuencias, las plantillas de informe empleadas para los Sequence Summary Reports y los Single Injection Reports se encuentran en el conjunto de resultados, al mismo nivel que los métodos de secuencia. No se guarda ninguna plantilla de informes en el nivel de los ficheros de datos de una secuencia.

En muestras individuales, la plantilla de informe se encuentra en el fichero de datos.

Cuadro de diálogo Browse Templates

Al buscar plantillas de informes en el cuadro de diálogo **Sequence Parameters** o el cuadro de diálogo **Specify Report** se pueden sincronizar las plantillas del directorio Default Templates y del conjunto de resultados.

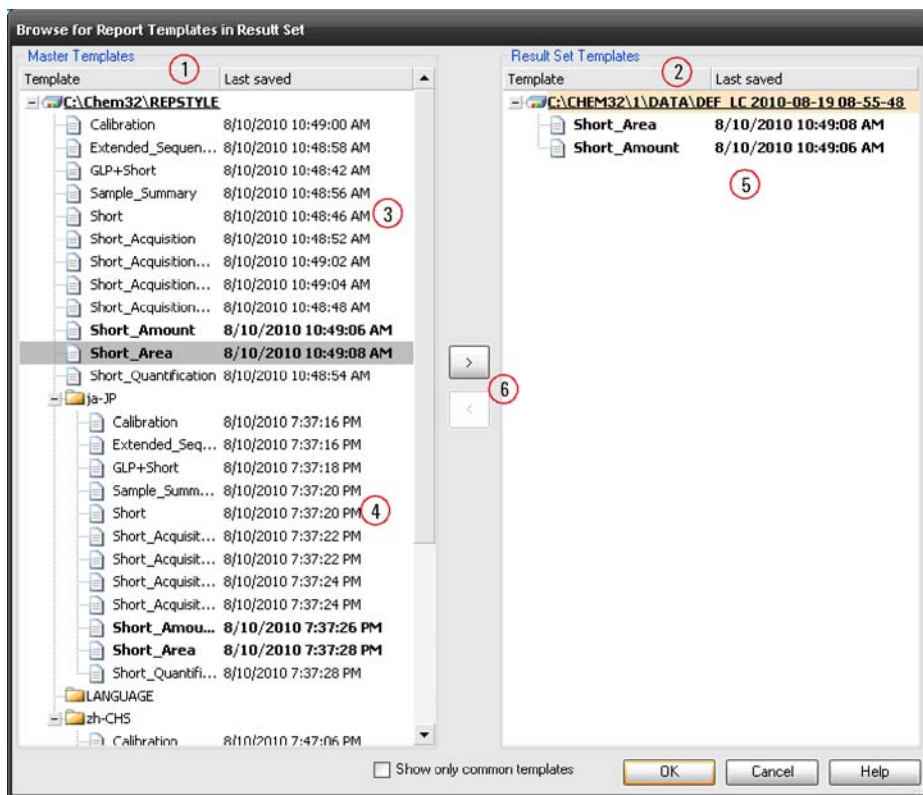


Figura 41 Cuadro de diálogo **Browse for Report Templates in Result Set**

- 1 A la izquierda se pueden ver las plantillas del directorio Default Templates (chem32/repstyle).
- 2 A la derecha se pueden ver las plantillas del conjunto de resultados cargado en ese momento.
- 3 De cada plantilla se puede ver la fecha en que se guardó por última vez. La nota emergente de la fecha muestra la última entrada en el historial de la plantilla.
- 4 Las plantillas se pueden guardar también en subdirectorios de chem32/repstyle.
- 5 Las plantillas comunes al conjunto de resultados y el directorio Default Methods aparecen en negrita. Estas plantillas se corresponden solamente por el nombre.
- 6 Se pueden copiar plantillas entre el directorio Default Templates y el conjunto de resultados arrastrando y soltando o con la tecla >.

Gestión de ficheros de datos con Unique Folder Creation OFF

Con la opción Unique Folder Creation OFF, siempre se hace referencia a las plantillas de los Sequence Summary Reports y los Single Injection Reports desde el directorio Default Templates (chem32\repstyle).

Almacenamiento de informes generados

Nombres de fichero para Single Injection Reports

Al introducir un nombre para el Single Injection Report en el cuadro de diálogo **Specify Report**, se pueden utilizar las siguientes señales:

- <Date> fecha actual
- <Time> hora actual
- <SeqN> nombre de fichero de secuencia (será “_” en muestras individuales)
- <Cont> nombre del conjunto de resultados (será “_” en muestras individuales)
- <SamN> nombre de la muestra
- <Lims> LimsID
- <InjD> fecha y hora de la inyección
- <File> nombre de fichero de datos
- <SLoc> ubicación de la muestra

Nombres de fichero para Sequence Summary Reports

Al introducir un nombre de fichero para el Sequence Summary Report en la ficha **Sequence Output** del cuadro de diálogo **Sequence Parameters**, se pueden usar las siguientes señales:

- <Date> fecha actual
- <Time> hora actual
- <SeqN> nombre de fichero de secuencia
- <Cont> nombre de conjunto de resultados

Plantillas de informes en ECM

En caso de utilizar Agilent OpenLAB ECM, las plantillas de informes se tratan como un nuevo tipo de documento. Se pueden subir plantillas a ECM, descargar plantillas desde ECM o actualizar todas las plantillas de informes basadas en ECM que ya haya guardadas a nivel local con la versión más reciente.

Classic Reporting

Elaboración de informes de resultados

Existen dos tipos de informes disponibles:

- Un informe no calibrado que no corrige la respuesta del detector, y
- Un informe calibrado que muestra los resultados corregidos de la diferencia en la respuesta del detector a varios compuestos de la muestra.

Informes no calibrados

Entre los informes no calibrados se incluyen informes de **Area%** y **Height%**. Estos informes se utilizan principalmente para preparar informes calibrados. Pueden resultar de utilidad como informe final si las cantidades de compuesto necesarias para generar el área de una unidad o la respuesta de altura de los compuestos de interés son similares.

Informes calibrados

Los informes calibrados corrigen la diferencia en la respuesta del detector a los compuestos informados. Una o varias muestras de calibración que contengan cantidades conocidas de los compuestos informados deben analizarse en las mismas condiciones que la muestra desconocida. Los datos de integración de estas muestras de calibración se utilizan para preparar una tabla de calibración. Ésta no es más que una lista de los tiempos de retención/migración, cantidades y respuestas que se utilizan en la generación del informe. Los informes calibrados se basan en dos procedimientos de calibración llamados estándar interno y estándar externo.

Informe estándar externo

El informe ESTD (estándar externo) enumera los resultados con las unidades seleccionadas o con cada compuesto como porcentaje de los compuestos presentes. El procedimiento estándar externo requiere que se conozca con exactitud el volumen relativo inyectado de las muestras de calibración y las muestras desconocidas. La fiabilidad del informe estándar externo está limitada por la reproducibilidad de la inyección y otros factores que pueden variar de una muestra a otra.

Informe estándar interno

Las limitaciones del procedimiento estándar externo se pueden superar con el método del estándar interno. Se añade una cantidad exacta conocida de un estándar interno (no necesariamente la misma cantidad), a las muestras de calibración y a la muestra desconocida. La respuesta de cada compuesto de interés se divide por la respuesta de un estándar interno para proporcionar una relación de respuesta. Las curvas de calibración son un gráfico de la relación de respuesta frente a relación de cantidad y esta información se utiliza en el cálculo de los resultados informados. De este modo se anulan los errores inadvertidos en el volumen de la inyección o los cambios ligeros en el sistema cromatográfico/electroferográfico que afectan a los compuestos similares. El informe ISTD enumera los resultados de las unidades seleccionadas.

Informe de los gráficos de control

El Informe de los gráficos de control realiza el seguimiento de un solo resultado a partir de los diferentes análisis de un compuesto calibrado específico. La opción **Control Chart** se instala una vez que ChemStation está en funcionamiento. Los métodos que utilizan esa función pasan el resultado objeto de seguimiento a una hoja de cálculo de Microsoft Excel tras cada análisis. Una vez hecho esto, se utiliza Excel para imprimir el informe.

Resultados cuantitativos

El tipo de informe se identifica por el nombre del método de cálculo utilizado para prepararlo, por ejemplo, un informe ISTD. Más adelante se facilita una breve descripción de cada tipo. Los cálculos de cada informe se expresan como “[Resultados cuantitativos](#)” en la página 215.

El **Area%** genera un informe más sencillo y no requiere datos de calibración puesto que no se realiza la corrección de la diferencia en la respuesta del detector de los componentes de las muestras. El informe % Área es particularmente útil para desarrollar la tabla de calibración que va a utilizarse con otras opciones de los informes. El informe es adecuado para análisis en los que la diferencia en la respuesta del detector de los componentes no es importante.

El informe **Height%** es similar al informe % Área excepto en que se utiliza la altura del pico para los cálculos en vez del área de picos.

En el informe **Norm%** cada componente se indica como un porcentaje de todos los componentes presentes. Los picos de la respuesta del detector se corrigen antes del cálculo del porcentaje de cada uno de ellos.

El informe **ESTD** presenta la cantidad real de cada sustancia presente en las unidades seleccionadas. Las cantidades se calculan con la tabla de calibración previamente establecida. El uso de un estándar externo requiere que se conozca el volumen inyectado de la mezcla de calibración.

El informe **ESTD%** presenta la cantidad relativa de cada sustancia como porcentaje de la muestra inyectada. Las cantidades se calculan con la tabla de calibración previamente establecida. El uso de un estándar externo requiere que se conozca el volumen inyectado de la mezcla de calibración.

El informe **ISTD** presenta la cantidad real de cada sustancia. Las cantidades se calculan con la curva de calibración previamente establecida. El uso de un estándar interno tanto en la muestra como en la mezcla de calibración elimina la necesidad de conocer y controlar el volumen de muestra inyectada. De este modo, también se corrige cualquier variación del rendimiento del instrumento entre los análisis.

El informe **ISTD%** presenta la cantidad relativa de cada sustancia como porcentaje de muestra inyectada. El uso de un estándar interno tanto en la muestra como en la mezcla de calibración elimina la necesidad de conocer y controlar el volumen de muestra inyectada. De este modo, también se corrige cualquier variación del rendimiento del instrumento entre los análisis.

Informes de valores de campos personalizados

Se pueden añadir al informe los valores de los campos personalizados adjuntos a una muestra determinada de acuerdo con su método de adquisición. Los campos personalizados de muestra se enumeran al final de la cabecera del informe que contiene la información general de la muestra. Los campos personalizados de compuesto aparecen al final del informe.

Estilos de informe

Para añadir una señal a cualquier estilo de informe hay que marcar la casilla correspondiente en el cuadro de diálogo Specify Report.

Están disponibles los siguientes estilos de informe:

- **None:** no se incluirá ningún texto de informe. Se incluirá el cromatograma solamente si se selecciona la opción Add Chromatogram Output.
- **Short:** contiene resultados de texto cuantitativos de todas las señales integradas configuradas en el cuadro de diálogo Signal Details (LC solamente) o Signal (GC solamente). La anchura de pico (PW) del informe breve se calcula con la fórmula más compleja utilizada por el integrador: $PW = 0,3 (PIDcho - PIIZdo) + 0,7 (\text{Área}/\text{Altura})$ donde PIDcho y PIIZdo son los puntos de inflexión.
- **Detail:** consta de cabecera, resultados cuantitativos y curvas de calibración. La cabecera se almacena en un fichero llamado RPTHEAD.TXT en el directorio del método. Se puede cambiar esa cabecera con un editor de texto para incluir un texto específico del método.
- **Header + Short:** contiene la cabecera de fichero y los resultados de texto cuantitativos. La cabecera se almacena en un fichero llamado RPTHEAD.TXT en el directorio del método. Se puede cambiar esa cabecera con un editor de texto para incluir un texto específico del método.
- **GLP + Short** contiene cabecera, información de la muestra, condiciones del instrumento, libro de registro, señal y resultados cuantitativos. La cabecera se almacena en un fichero llamado RPTHEAD.TXT en el directorio del método. Se puede cambiar esa cabecera con un editor de texto para incluir un texto específico del método.
- **GLP + Detail:** contiene cabecera, información de la muestra, condiciones del instrumento, libro de registro, señal, resultados cuantitativos y curvas de calibración. La cabecera se almacena en un fichero llamado RPTHEAD.TXT en el directorio del método. Se puede cambiar esa cabecera con un editor de texto para incluir un texto específico del método.
- **Full:** contiene cabecera, información de la muestra, condiciones del instrumento, libro de registro, señales y resultados cuantitativos. La cabecera se almacena en un fichero llamado RPTHEAD.TXT en el directorio del método. Se puede cambiar esa cabecera con un editor de texto para incluir un texto específico del método.
- **Performance:** genera un informe conforme a los límites especificados en el cuadro de diálogo Edit Performance Limits del menú System Suitability.
En el caso de los métodos no calibrados, los parámetros del informe incluyen el número del pico, el tiempo de retención/migración, el área del pico, la altura del pico, la descripción de la señal, la anchura verdadera del pico a

media altura (consulte *True Peak Width W_x [min]* en la Reference Guide), la simetría, k' , la eficacia (platos) y la resolución de cada pico.

En el caso de los métodos calibrados, los parámetros del informe incluyen el número del pico, el tiempo de retención/migración, el nombre del compuesto, la cantidad, la descripción de la señal, la anchura verdadera del pico a media altura, la simetría, k' , la eficacia (platos) y la resolución de cada pico.

El cálculo de pico a media altura no es igual que la fórmula de anchura de pico más compleja que utiliza el integrador. Los valores de eficacia y resolución se basan en la anchura de pico calculada. La cabecera del informe comprende toda la información relevante del método, incluidos instrumentos, columna/capilar, muestra y parámetros de adquisición. La señal se representa también gráficamente.

- **Performance + Noise:** combina el estilo de informe de rendimiento con los cálculos de ruido correspondientes a los rangos definidos en el cuadro de diálogo Edit Noise Range del menú System Suitability. De manera adicional, el ruido se da como seis veces la desviación estándar, pico a pico y como ruido ASTM; también se determinan la deriva y la desviación.
- **Performance + Extended:** genera un informe ampliado con todos los parámetros procedentes de los cálculos de rendimiento de pico y gráficos individuales de cada pico. Los gráficos incluyen la línea base, las tangentes y las anchuras de pico a alturas definidas. Este tipo de informe incluye sólo picos calibrados.

Además de los parámetros impresos para el estilo de informe de rendimiento, se determinan más parámetros de rendimiento del pico: se imprimen tiempos de inicio y fin de pico, sesgo, exceso, anchura de pico, factor de cola USP, intervalo de tiempo entre puntos de datos, número de puntos de datos, momentos estadísticos, platos, platos por metro, selectividad y resolución para cada pico. La anchura de pico, los platos, los platos por metro, la selectividad y la resolución se calculan con los métodos de anchura verdadera a media altura, 5 sigma, tangente y cola (si desea obtener más información consulte *Performance Test Definitions* en la Reference Guide).

La cabecera comprende toda la información relevante del método, como instrumento, columna/capilar, muestra y parámetros de adquisición, así como un gráfico de la señal. Se puede consultar una lista completa de los algoritmos de parámetros de rendimiento de pico en *Performance Test Definitions* en la Reference Guide.

Los estilos de informe espectrales (**Short + Spectrum**, **Detail + Spectrum**, **Performance + Library Search**) se describen en *Understanding Your Spectra Module*.

Añadir un informe personalizado a los estilos de informe

Es posible añadir a la lista de estilos de informes disponibles una plantilla de informe personalizada creada en la vista Report Layout de ChemStation.

NOTA

Todos los informes, excepto los Performance Reports, enumeran las anchuras de picos calculadas con una fórmula más compleja por medio del integrador (para conocer más detalles sobre el cálculo de la anchura del pico consulte *Peak Width* en la Reference Guide).

Otros parámetros de estilo del informe

Tabla de picos sumados

La tabla de suma de picos se proporciona para ciertas aplicaciones de las industrias petroquímica y farmacéutica que pueden realizarse de manera más eficaz con las siguientes funciones:

- Suma de las áreas de picos que se encuentran en un rango especificado por el usuario.
- Suma de las áreas de un rango de picos y cálculos con un solo multiplicador.
- Suma de las áreas de todos los picos con el mismo nombre.

Cuando se genera el informe, ChemStation utiliza la tabla de suma de picos para generar un informe que se imprime tras los cálculos del informe estándar a excepción de Norm%, que se reemplaza por el informe de suma de picos.

Diseño del informe de picos no calibrados

Para cambiar el diseño del informe de picos no calibrados elija una opción de las siguientes en el cuadro de diálogo Especificar informe.

- Informar por separado de los picos no calibrados en una tabla diferente si se selecciona la clasificación por retención/migración, o tablas separadas si se selecciona la clasificación por señal.

- Con la opción Picos calibrados puede informar de los picos no calibrados junto con los picos calibrados.
- Utilice Sin informe para eliminar del informe los picos no calibrados.

Elaboración de informes de resumen de secuencias

Introducción

ChemStation puede imprimir una variedad de informes estándar para análisis de muestras individuales. La elaboración de informes de resumen de secuencias es una forma adicional de elaborar informes que le permite calcular e informar los parámetros de un número de análisis diferentes. Es útil, por ejemplo, para comprobar la estabilidad de un instrumento o la robustez de un método nuevo.

Un informe de resumen de secuencias incluye:

- una página de título,
- la configuración del instrumento, incluyendo los números de revisión del instrumento y detalles acerca de la columna analítica/capilar empleada,
- las listas de tablas de secuencia que describen lo que debería haber hecho la secuencia automatizada de análisis,
- descripciones del libro de registros de lo que hizo realmente la secuencia y de los resultados inesperados que ocurrieron en la secuencia,
- listas de métodos,
- informes individuales para cada muestra,
- estadísticas de los análisis basadas en los criterios seleccionados (*sólo se calculan las estadísticas de los compuestos calibrados*) y
- una tabla de contenidos con las referencias de números de página a las secciones detalladas del informe.

Configuración de un informe de resumen de secuencias

Cuando se configura un informe de resumen de secuencias, es posible seleccionar una combinación de las nueve categorías siguientes activando las casillas de verificación correspondientes y, si lo cree conveniente, seleccionando un estilo para el informe de las plantillas existentes. Cada plantilla tiene unos

contenidos y diseño diferentes de las distintas secciones del informe de resumen de secuencias entero.

Puede elegir cualquiera de los estilos del informe de resumen de secuencias siguientes:

One Page Header

La plantilla GLP imprime GLP en letras grandes como una página de título para el informe siguiente. Se incluye la fecha y se destina un lugar para la firma.

Configuration

Seleccione **Configuration** si desea incluir la configuración del instrumento y las especificaciones de la columna/capilar en el informe.

Sequence Table

Seleccione **Sequence Table** para incluir una lista de las secuencias, parámetros de cuantificación de muestras y nombres de los métodos en el informe. La lista muestra los análisis efectuados por el sistema.

Logbook

Seleccione **Logbook** para obtener una lista de los análisis que ha realizado el sistema, incluyendo las condiciones del instrumento y los hechos inusuales que ocurrieron mientras se analizaban las muestras.

Methods

Seleccione **Methods** para realizar una lista de los métodos analíticos que se utilizaron en la serie de análisis automatizados.

Analysis Reports

Seleccione **Analysis Reports** para realizar informes de los diferentes análisis con el estilo de informe que configuró para el método.

Los informes de análisis individuales pueden imprimirse después de cada análisis según el estilo de informe que especificó para el método en cuestión y las

secciones de informe especificadas en **Sequence Summary Reporting**. Consulte "Salida de secuencias" a continuación.

SUILabel Type = Application > Statistics for Calibrated and Sample Runs

Si selecciona Análisis estadísticos de calibración se realizarán análisis de tendencias estadísticas de las muestras de calibración. Si selecciona Análisis **Statistics** de muestras, se realizarán análisis de tendencias estadísticas de los análisis de muestras (desconocidas). Para estas selecciones están disponibles los estilos de plantilla Estadística estándar y Estadística ampliada. **Extended Statistics** imprime las estadísticas de los análisis como gráficos, mientras que si selecciona **Standard Statistics** se imprime sólo el texto. Las selecciones que realice en los cuadros de diálogo **Items and Limits for Extended Statistics** se utilizan sólo cuando elija la opción **Extended Statistic** en el cuadro de diálogo **Sequence Summary Parameters**.

Si selecciona la opción **Standard Statistic** en el cuadro de diálogo **Sequence Summary Parameters**, las estadísticas de las que se informa son:

- tiempo de retención/migración,
- área,
- altura,
- cantidad,
- anchura de pico (basada en el estilo del informe; consulte ["Estilos de informe"](#) en la página 216)
- y simetría.

El cálculo de estadísticas no distingue entre niveles de calibración diferentes en una secuencia que utiliza métodos de calibración multinivel. Esto significa que las opciones dependientes de la concentración como, por ejemplo, el área, la altura o la cantidad (consulte el cuadro de diálogo Elementos y Límites de estadística ampliada) se añan, independientemente del nivel de calibración. Los valores de las **Statistics for Calibration Runs** no son útiles para los métodos de calibración multinivel en secuencias.

Resumen

La selección **Summary** imprimirá una introducción de la serie de muestras analizada y de los métodos utilizados. Si se selecciona la opción Resumen junto con otras selecciones de resumen de secuencias, se incluyen los números de

página con información de otras partes del informe de resumen de secuencias. Existen dos estilos de resumen disponibles:

Los detalles tabulados del **Sample Summary** de los análisis de muestras de la secuencia con alguna información de las muestras como el nombre de la muestra, el nombre del fichero de datos, el método y el número de vial.

La información de **Compound Summary** tabula los análisis de muestras con los resultados de cuantificación básicos de cada compuesto calibrado o de cada pico, dependiendo del tipo de informe que se especifique en el método.

Salida de secuencias

Puede definir también en el cuadro de diálogo **Sequence Output** donde va a imprimir el informe de resumen.

Seleccione **Report to file** e introduzca en nombre del fichero para imprimir el informe en el fichero seleccionado. Viene configurado por defecto que los datos se guarden en el fichero GLPrprt.txt. En sistemas GC con inyección dual los datos se guardan en GLPrptF.txt y GLPrptB.txt, para el inyector delantero y el inyector trasero respectivamente.

Seleccione **Report to PDF** para guardar el informe como un documento PDF. El informe se guarda en la carpeta de secuencias con el nombre CLPrprt.PDF

Seleccione **Report to HTM** para imprimir el informe en formato HTML. El informe se guarda en un directorio HTM en el directorio de datos especificado en **Sequence Parameters**. El informe HTM se compone de un fichero de índice (index.htm) y, al menos, dos otros ficheros, un fichero de contenido (contents.htm) y un fichero GIF (Graphics Interchange Format) para cada página del informe (p. ej. page1.gif). Para ver el informe html, abra el fichero de índice con el navegador.

Si selecciona **Report to printer**, el informe se imprime en la impresora del sistema. Si imprime uno por uno los informes de los análisis se activa también la impresión de los informes de muestras de cada análisis. Estos informes se imprimen junto con los especificados en el informe de resumen de secuencias que se crean al final de la secuencia entera. Puede especificar un destino nuevo para esos informes en el cuadro de diálogo **Sequence Output** o utilizar el destino especificado en los métodos.

Formatos del fichero de informes

Un informe se puede guardar en diferentes formatos. Cada uno de estos formatos tiene una extensión concreta. Es posible seleccionar más de un formato para un informe.

- .TXT** El texto del informe se imprime como un fichero de texto UNICODE.
- .EMF** Cada gráfico del informe (curva de señales o de calibración) se guarda en un metaarchivo de Microsoft Windows (WMF). Puede haber más de un fichero .WMF para un informe. El formato del fichero generado es el formato estándar de metaarchivos de Microsoft según se define en la documentación de desarrollo de software de Windows. Estos ficheros son compatibles con el formato APM (Aldus Placeable Metafile) que utilizan muchos paquetes de software propietario.
- .DIF** Los datos del informe tabulado se guardan en el formato de intercambio de datos (DIF). Los programas de hojas de cálculo utilizan este formato como, por ejemplo, Microsoft Windows EXCEL. Independientemente del estilo de informe que seleccione, sólo se guardará la información contenida en el informe tipo Breve.
- .CSV** El informe en formato de valores separados con comas (CSV). Es un formato muy sencillo para datos tabulados que muchos programas de hojas de cálculo y bases de datos aceptan. Independientemente del estilo de informe que seleccione, sólo se guardará la información contenida en el informe de tipo "Breve".

Pueden existir varios ficheros .DIF y .CSV para un único informe. Para cada bloque de informes, el primer fichero, por ejemplo REPORT00.CSV, contiene información de la cabecera del informe. Los ficheros siguientes contienen los resultados tabulados.

Si los resultados se clasifican por el tiempo de retención/migración, sólo se requiere un fichero para la tabla completa, por ejemplo, REPORT01.CSV.

Si se clasifican los resultados por señal, se requiere una tabla diferente para cada señal. En este caso, los nombres asignados a los ficheros son Report01.CSV hasta ReportNN.CSV, donde NN es el número de la señal.

- .XLS** El informe se transfiere a una hoja de cálculo de Microsoft Excel en formato XLS. Los datos, por lo general, requieren procesamiento adicional.
- .PDF** El informe se imprime en un fichero .pdf. La instalación de ChemStation instala una impresora PDF, llamada "PDF-XChange 4.0". Esta impresora sólo será visible en el menú **Inicio/Configuración/Impresoras y faxes** hasta que se reinicie el

equipo. Al iniciar ChemStation, se crea otra impresora temporal llamada "ChemStation PDF" basada en la impresora PDF-XChange. Mientras que haya una sesión de ChemStation activa, ChemStation PDF aparecerá en el menú **Inicio/Configuración/Impresoras y faxes**. La opción **Unique pdf file name** permite almacenar los informes .pdf de forma independiente a los informes, con los nombres de fichero
<nombre_contenedor_secuencia>_<nombre_fichero_datos>.pdf

12 Elaboración de informes

Classic Reporting



13

Funciones y conceptos específicos de CE

Funciones específicas de CE de la Agilent ChemStation en la vista Method and Run Control [228](#)

Vial Table [228](#)

Tabla de conflictos del método [229](#)

Tabla de conflictos de secuencias [230](#)

Simulación del método [230](#)

Tipo superior del pico [231](#)

Tipos de calibración [232](#)

Calibraciones basadas en el tiempo de migración [232](#)

Calibración con corrección de la movilidad [232](#)

CE-MSD [234](#)

Sustracción de fondo [234](#)

Subdirectorios del método para modos CE diferentes [235](#)

Este capítulo es importante únicamente si se utiliza ChemStation para controlar instrumentos de CE.



Funciones específicas de CE de la Agilent ChemStation en la vista Method and Run Control

Vial Table

NOTA

La función **Vial Table** se encuentra disponible únicamente en la sesión en línea ChemStation.

La **Vial Table** es una tabla que asocia los viales en la bandeja con muestras y, lo que es más importante, con viales con fines específicos como tampones, viales a nivel, viales de tubos limpios y residuos. La **Vial Table** está enlazada con la Sequence Table. Cuando se ha cargado una secuencia, la información de la Sequence Table se copia en la Vial Table. No obstante, las entradas de la Vial Table no se transfieren a la Sequence Table. Cuando se pulsa el botón **Vial Table Advanced Settings** en la **Advanced**, se muestra el cuadro de diálogo **Vial Table**. Esto permite habilitar las advertencias de conflictos entre la **Vial Table**, el método o secuencia y el uso de nombres simbólicos. Hay que marcar **Enable vial table checks and warnings** para comprobar los conflictos entre la **Vial Table** y el método y la secuencia.

Cuando se carga un método o una secuencia, se comprueba la concordancia entre las ubicaciones de los viales en la **Vial Table** y en el método o la secuencia. Si hay conflictos de viales, se pueden resolver rápidamente con las tablas de **Conflict**.

NOTA

La posición 49 en la bandeja de viales se utiliza para el vial de lavado de agujas y la posición 50 está vacía a la izquierda para permitir la subida de viales a su sitio. Las posiciones no están disponibles en la **Vial Table**.

La columna **Used in** de la Vial Table permite utilizar el vial que se especifique. Hay cinco entradas válidas en los campos **Used in**:

- | | |
|-------------------|---|
| Don't Care | No se comprueba la concordancia. |
| Method | En el método se informa del vial. |
| Sequence | En la Sequence Table se informa del vial. |

System Es un vial especial de la configuración del sistema. En **Name** debe introducirse uno de los nombres simbólicos siguientes:

- **@INLET** para el vial de entrada
- **@OUTLET** para el vial de salida
- **@FLUSH** para el vial a nivel
- **@WASTE** para el vial de residuos
- **@clean tubes** para el vial empleado para limpiar los tubos de reabastecimiento
- **@USER X** (donde X puede ser de 1 a 10) para el marcador de posición de secuencias

Con esta opción se pueden especificar los números de viales diferentes para los nombres simbólicos que se utilizan en el método. Esto permite al usuario especificar los diferentes viales en Inlet Home, Outlet Home, Replenishment, Preconditioning, Postconditioning, etc. para cada línea de la secuencia.

Not Used No hay vial en esta posición

Tabla de conflictos del método

La **Method Conflict Table** se muestra cuando se carga un método con viales definidos que entran en conflicto con los viales definidos en la tabla de viales. La **Method Conflict Table** está dividida en dos mitades; la izquierda contiene una imagen de la **Vial Table** y la derecha muestra los viales en conflicto.

Para resolver los conflictos puede seleccionar reemplazar (sólo una flecha) o ir hasta el vial del método hasta la posición libre siguiente en la **Vial Table** (doble fecha). Esto puede realizarse para cada vial en conflicto en la tabla.

Cuando se utilizan viales definidos por el usuario (con nombres simbólicos @User1, @User2, etc.), no se puede ejecutar el test de conflictos en dichos viales porque sin la información de la secuencia no se puede decidir si un conflicto existe o no.

Tabla de conflictos de secuencias

La **Sequence Conflict Table** se muestra cuando se configura o carga una secuencia con viales definidos que entran en conflicto con los viales definidos en la tabla de viales. La **Sequence Conflict Table** está dividida en dos mitades; la izquierda contiene una imagen de la **Vial Table** y la derecha muestra los viales en conflicto.

Para resolver los conflictos, puede seleccionar sobrescribir la información de la **Vial Table** con la información de la **Sequence Table**, pero si el conflicto se origina por una entrada al sistema no puede sobrescribirse. Puede seleccionar cerrar la **Sequence Conflict Table** sin resolver los conflictos.

Cuando se utilizan viales definidos por el usuario (en las columnas User1, User2, etc.) no se puede ejecutar el test de conflictos en estos viales, porque sin la información del método no se puede decidir si un conflicto existe o no.

Simulación del método

Puede utilizar la función de simulación para comprobar su método. Durante la simulación el diagrama refleja las acciones que se llevarán a cabo durante el método, por ejemplo, los viales especificados en el método se muestran en los elevadores; la corriente y voltaje aplicados se muestran como en una ejecución real. La simulación se efectúa con más rapidez que la ejecución del análisis (cada paso dura 3 segundos aproximadamente). Un paso se define por un cambio en el diagrama CE.

Para iniciar una simulación, cargue el método que quiere simular y seleccione **Simulation** en el menú **Instrument**.

Tipo superior del pico

A diferencia de los picos de LC, GC y MS, es bastante normal que los picos de CE sean asimétricos. Por ello, es muy importante poder seleccionar los parámetros de integración que ofrecerán más precisión y reproducibilidad en los resultados de cuantificación.

Los diferentes tipos superiores de picos están disponibles cuando selecciona **Peak Top Type** en el menú desplegable **Integration**:

Highest Point

- Se selecciona cuando el pico es triangular.
- Se selecciona cuando se trabaja con diferentes concentraciones.

Parabolic Interpolation

- Se utiliza para colas, picos sin separar.

Center of Gravity

- Ofrece cálculos más aproximados con picos triangulares.
- Muestras con concentraciones similares.

Gauss Fit

- Se utiliza para picos simétricos.

Tipos de calibración

Calibraciones basadas en el tiempo de migración

Utilización de las calibraciones basadas en el tiempo de migración en una secuencia

Las calibraciones y las recalibraciones basadas en el tiempo de migración pueden incluirse en una secuencia, pero sólo se soportan las calibraciones explícitas y recalibraciones cíclicas, mientras que la recalibración en grupo no. No hay informe del sumario de secuencias con las calibraciones basadas en el tiempo de migración.

Estilos de informes de calibraciones basadas en el tiempo de migración

Los estilos de informe disponibles para calibraciones basadas en el tiempo de migración se limitan a **Short** (breve: resultados de texto cuantitativos) y **Full** (completo: título, información de la muestra, condiciones del instrumento, libro de registro, resultados cuantitativos y gráfico de pureza del pico).

Calibración con corrección de la movilidad

Cambios ligeros en la composición del tampón, la temperatura de análisis o la viscosidad, así como la absorción en la pared del capilar, pueden influir en el flujo electro-osmótico (EOF) y hacerlo inestable. El cambio resultante en EOF puede crear una desviación estándar alta de los tiempos de migración. Las correcciones por movilidad pueden reducir de manera significativa el efecto de las variaciones de tiempo de migración entre análisis, monitorizando el tiempo de migración de un pico de referencia de la movilidad y aumentando a su vez en gran medida la reproducibilidad del tiempo de migración.

El pico de referencia de la movilidad debería elegirse con las siguientes prioridades:

- Seleccione el pico con la señal más alta
- Seleccione el pico más aislado

- El marcador EOF o el estándar interno pueden utilizarse también como pico de referencia de la movilidad
- Agrande la ventana de búsqueda para encontrar siempre el pico de referencia de la movilidad
- Si aparecen varios picos en la ventana de búsqueda, el pico con más señal se escoge de forma automática como pico de referencia de la movilidad.

Hay dos tipos de corrección de la movilidad disponibles:

Corrección de la movilidad efectiva

La **Effective Mobility Correction** utiliza las movilidades efectivas de todos los picos y requiere la disponibilidad de los datos de la curva de voltaje con el electroferograma. Además, cuando se trabaja con la corrección de la movilidad efectiva, se pueden determinar las movilidades efectivas verdaderas de todos los componentes de la muestra.

Corrección de la movilidad relativa

La **Relative Mobility Correction** funciona aun sin disponer de datos de voltaje y asume en este caso un voltaje constante en todas las mediciones.

CE-MSD

Sustracción de fondo

Cuando selecciona la opción de menú **Subtract Background** (BSB), se sustrae el espectro de masa último que se haya seleccionado de cada punto en el electroferograma actual. Los datos resultantes se guardan en el mismo directorio y con el mismo nombre que el archivo de datos original, aunque la extensión se cambia a BSB.

El nuevo archivo de datos se convierte en el archivo de datos actual y se muestra en pantalla el electroferograma de fondo sustraído. Se guarda un registro del número de sustracciones de fondo realizadas en Operator del encabezado del archivo de datos.

Si visualiza la lista tabulada de datos BSB, observará diferencias por la precisión de la representación de los datos.

NOTA

Los archivos de texto HELP en LC/MSD informarán sólo de los parámetros LC y no de los CE. Algunas funciones disponibles en el software LC/MSD no están disponibles o no son de utilidad en aplicaciones CE/MSD aunque se utilizan en LC. La función **peak matching** no es aplicable en CE-MS y por tanto no está activa. Las detecciones CE-MS, UV y MS ocurren en longitudes efectivas diferentes del capilar de separación. Por la resolución diferente de las longitudes efectivas, no es posible la asignación de picos.

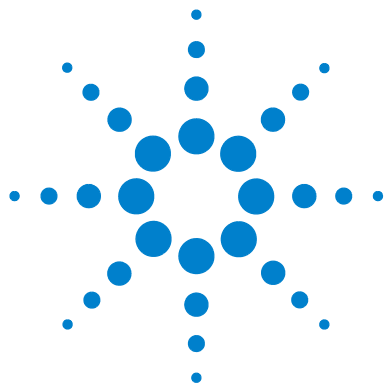
Subdirectorios del método para modos CE diferentes

Los métodos en CE dependen del modo CE seleccionado. Por tanto, se almacenan en subdirectorios diferentes en el subdirectorio de método:

- CE** Almacena métodos para el modo CE
- CEC** Almacena métodos para el modo CEC
- CEp** Almacena métodos para el modo de presión CE plus
- CEMS** Almacena métodos para el modo CE MS
- CEMSp** Almacena métodos para el modo de presión CE MS plus.

13 Funciones y conceptos específicos de CE

Subdirectorios del método para modos CE diferentes



14 Apéndice

Manuales de documentación [238](#)

Privilegios en OpenLAB Shared Services [239](#)

Project Privileges [239](#)

Instrument Privileges [243](#)

Administrative Privileges [244](#)

Este capítulo contiene información sobre manuales relacionados y los privilegios empleados en OpenLAB Shared Services.



Manuales de documentación

Hay disponibles los siguientes manuales para Agilent OpenLAB CDS:

- Ayuda en línea para el OpenLAB CDS Control Panel
- Ayuda en línea de la edición OpenLab CDS ChemStation
- Guía Instalación de estación de trabajo de OpenLAB CDS
- Guía Instalación de estación de trabajo en red de OpenLAB CDS
- Guía Actualización de OpenLAB CDS ChemStation Edition
- Guía Instalación de sistema distribuido de OpenLAB CDS
- Instalación de OpenLAB CDS en Oracle 11g R2
- OpenLAB CDS ChemStation Edition – Instrument Installation & Configuration Guide (Guía de instalación y configuración de instrumentos)
- OpenLAB CDS Chemstation Edition – Basic Concepts and Workflows (Conceptos y flujos de trabajo básicos)
- OpenLAB CDS ChemStation Edition con ECM – Concepts Guide (Guía de conceptos)
- OpenLAB CDS ChemStation Edition – Reference to Operation Principles (Referencia a principios de funcionamiento)
- Manual del generador de informes OpenLAB Intelligence para diseñadores de plantillas de informe
- OpenLAB CDS Instrument Firmware Compatibility Matrix (Matriz de compatibilidad entre firmware de instrumentos OpenLAB CDS)
- OpenLAB CDS Hardware and Software Requirements (Requisitos de hardware y software de OpenLAB CDS)
- OpenLAB CDS Network Requirements (Requisitos de red de OpenLAB CDS)
- Librerías IO
- Guía de compatibilidad para controladores de instrumentos Agilent
- Software License Request Form (Formulario de solicitud de la licencia de software)
- Software License Installation Guide (Guía de instalación de la licencia de software)
- XML (LIMS) Connectivity Guide (Guía de conectividad XML (LIMS))

Privilegios en OpenLAB Shared Services

Project Privileges

Tabla 28 Gestión de proyectos

Nombre	Descripción
View project or project group	El usuario puede ver un proyecto y los detalles del proyecto pero no editarlos. <i>Nota:</i> este privilegio deben tenerlo todos los usuarios, incluso cuando la ChemStation aún no admita proyectos.
Manage project or project groups	El usuario puede crear o editar propiedades de proyectos y trasladar el proyecto, pero no acceder a los ajustes (solamente en EZChrom; en ChemStation no se pueden usar proyectos).
Manage project or project group access	El usuario puede ver y editar los ajustes de acceso a proyectos (solamente en EZChrom; en ChemStation no se pueden usar proyectos).
View Edit Report Templates Tab	Sólo es pertinente para OpenLAB ECM Intelligent Reporter: este privilegio es necesario para consultar la ficha Edit Report Templates del cliente de informes.

Tabla 29 E-Signature

Nombre	Descripción
E-Signature Sign Data Files	Los usuarios pueden firmar ficheros de datos (solamente en EZChrom; la función E-signature no está disponible en ChemStation).
E-Signature Revoke	Los usuarios pueden revocar firmas (solamente en EZChrom; la función E-signature no está disponible en ChemStation).

Tabla 30 ChemStation: Control

Privilegio	Descripción
Run Acquisition	Inicio de la adquisición (muestra individual o secuencia).

Tabla 31 ChemStation: Data

Privilegio	Descripción
Delete Data	El usuario puede borrar ficheros de datos en el explorador de ChemStation.
Manual Integration	El usuario puede realizar la integración manual.
Save Data to ECM	Almacenamiento interactivo de datos en ECM.

Tabla 32 ChemStation: De instrumentos

Privilegio	Descripción
Modify instrument configuration	El usuario puede modificar los parámetros de configuración del instrumento.

Tabla 33 ChemStation: Logbook

Privilegio	Descripción
Clear Logbook	Borrar el contenido del libro de registro actual.
Save Logbook	Guardar el libro de registro actual.

Tabla 34 ChemStation: Method

Privilegio	Descripción
Edit calibration table	Crear y modificar la tabla de calibración; cambiar la configuración de la calibración.
Delete method	Borrar un método en el explorador de ChemStation.

Tabla 34 ChemStation: Method

Privilegio	Descripción
Edit integration events	Modificar los eventos de integración y realizar la integración automática.
Edit ion labels	Editar las opciones de las etiquetas de iones (LC/MS solamente).
Edit system suitability	Editar los rangos de ruido y los límites de rendimiento.
Enable audit trail	Habilitar el registro de auditoría para un método específico.
Modify instrument method	Modificar los parámetros de métodos de instrumentos.
Modify method properties	Modificar la lista de control de análisis y la información del método.
Perform method recalibration	Realizar una recalibración interactiva.
Guardar los cambios del método	Guardar cambios del método (incluye la actualización de secuencias y el método maestro en la vista de análisis de datos).

Tabla 35 ChemStation: Report

Privilegio	Descripción
Preview/print report	El usuario puede previsualizar e imprimir un informe.
Modify report	El usuario puede modificar el estilo de cálculo/impresión de un informe y editar el cuadro de diálogo Instrument Curves.

Tabla 36 ChemStation: Security

Privilegio	Descripción
Break session lock	Desbloquear una sesión de ChemStation bloqueada por otros usuarios.
Command line	Activar/desactivar la línea de comandos.
Manage transfer queue	Acceder al gestor de colas de transferencia y colas de impresión.
Modify ECM transfer preferences	Habilitar/deshabilitar la carga automática a ECM.

Tabla 37 ChemStation: Sequence

Nombre	Descripción
Delete sequence	El usuario puede borrar secuencias en el explorador de ChemStation.
Edit sequence summary	El usuario puede modificar el informe resumen de secuencia y la configuración de estadísticas ampliada.
Reprocess	El usuario puede reprocesar una secuencia.
Save sequence	El usuario puede guardar secuencias en ECM.

Tabla 38 ChemStation: View Access

Privilegio	Descripción
Access Companion view	El usuario tiene acceso a la vista Companion (ChemStation para GC solamente).
Access Data Analysis view	El usuario tiene acceso a la vista Data Analysis.
Access Diagnostic view	El usuario tiene acceso a la vista Diagnostic.
Access Method & Run Control view	El usuario tiene acceso a la vista Method and Run Control.
Access retention time lock	El usuario tiene acceso al menú Retention Time Lock (GC solamente).

Tabla 38 ChemStation: View Access

Privilegio	Descripción
Access retention time search	El usuario tiene acceso al menú Retention Time Search (GC solamente).
Access Review view	El usuario tiene acceso a la vista Review.
Access Tune view	El usuario tiene acceso a la vista Tune (ChemStation para LC-MSD solamente).
Access Verification (OQ/PV) view	El usuario tiene acceso a la vista Verification (OQ/PV).
Access Report Layout view	El usuario tiene acceso a la vista Report Layout y puede crear, editar y guardar plantillas de informes.
Enable Batch view	Habilita todas las operaciones en la vista Batch.
Enable full menu	Habilita el menú completo de ChemStation.

Instrument Privileges

Tabla 39 Administración de instrumentos

Nombre	Descripción
View instrument or location	El usuario puede ver y acceder a ubicaciones del árbol, pero no editar los ajustes de seguridad de acceso, aunque sí puede ver las propiedades.
Manage Instrument or location	El usuario puede crear y cambiar ubicaciones y editar las propiedades (nombre, descripción, etc.).
Manage instrument or location access	El usuario puede ver y editar los ajustes de acceso a ubicaciones.
Run instrument	El usuario puede iniciar una sesión en un instrumento.
Service instrument	El usuario puede bloquear o desbloquear un instrumento.

Administrative Privileges

Tabla 40 System Administration

Nombre	Descripción
Manage printers	El usuario puede añadir o eliminar impresoras y servidores de impresión.
Edit activity log properties	
Archive system activity log	El usuario puede archivar (archivar/borrar) el registro de actividad del sistema y definir los ajustes de automatización del archivado.
Purge activity logbook	El usuario puede purgar un libro de registro una vez que está archivado.
Create administrative reports	El usuario puede crear cualquiera de los informes administrativos del sistema.
Manage system components	El usuario puede instalar y eliminar componentes (aplicaciones).
Backup and restore	El usuario puede crear copias de seguridad del sistema (BD) y restaurar las copias de seguridad.
Manage Security	El usuario puede cambiar los ajustes de seguridad. El usuario puede editar (añadir, cambiar, etc.) usuarios, grupos y roles. <i>Nota:</i> un usuario con este privilegio puede otorgarse a sí mismo acceso a todos los ajustes en OpenLAB Shared Services. Sea prudente en cuanto a las personas a las que otorgue el privilegio Manage Security.
Manage instrument controllers	El usuario puede editar la configuración de una AIC y gestionar las AIC en la interfaz de usuario de configuración.
Unlock any locked UI	El usuario puede iniciar sesión en cualquier sesión de instrumento o portal bloqueada (tendrá que volver a iniciar sesión), incluso si el bloqueo es privado.

Glosario UI

A

Account lock time
Tiempo de bloqueo de la sesión

Account lock time (minutes)
Tiempo de bloqueo de la sesión
(Account lock time) (minutos)

Advanced
Vial Table

Agilent 1220 LC System
Sistema 1220 LC Agilent

Agilent 7820 GC System
Sistema GC Agilent 7820

Agilent LC System
Sistema LC Agilent

AgilentDriversADC
AgilentDriversADC

AgilentDriversMS
AgilentDriversMS

AgilentOpenLABSharedServices
AgilentOpenLABSharedServices

Alerts
Alertas

Analysis Reports
Informes de análisis

Area%
% de área

B

Bracketing
Agrupada

Bracketing/Cyclic
Agrupada/Cíclica

Break session lock
Anular bloqueo de sesión

C

Calibration Mode
Modo de calibración

Cancel
Cancelar

Character
Carácter

ChemStation Operator
ChemStation

Compound Summary
Resumen compuesto

Configuration
Configuración

Contact Information
Información de contacto

Control Chart
Diagrama de control

Create New Result Set
Crear nuevo conjunto de resultados

Cyclic
Cíclica

D

Data Analysis
Análisis de datos

Data Storage
Almacenamiento de datos

Delete temporary Sequence Template after completion
Borrar plantilla de secuencia temporal tras su finalización

Description
Descripción

Detail

Detallado

Details

Detalles

E

Easy Sequence
Secuencia sencilla

Easy Sequence Setup
Configuración de secuencia sencilla

Edit Report Templates
Editar plantillas de informe

Effective Mobility Correction
Corrección de la movilidad efectiva

Email address
Dirección de correo electrónico

ESTD%
% ESTD

Expiration
Caducidad

Extended
Ampliado

Extended Statistic
Estadística ampliada

Extended Statistics
Estadística ampliada

F

Feature
Funciones

File
Fichero

Finish Queue Sequence
Finalizar puesta en cola de secuencia

Glosario UI

Full
Completo
Full name
Nombre completo

G

Group Membership
Asignación de usuarios a grupos
(Group Membership)

H

Header
Cabecera
Height%
% de altura

I

In Use (Available)
En uso (Disponibles)
Inactivity time before locking the application
Tiempo de inactividad antes de bloquear la aplicación (Inactivity time before locking the application)

Instrument
Instrumento

Instruments
Instrumentos

Internal
Interno

ISTD%
% ISTD

Items and Limits for Extended Statistics
Elementos y Límites de estadística ampliada

L

Library Search
Búsqueda en librería

Logbook
Libro de registro
Login
Iniciar sesión

M

Maximum unsuccessful login attempts before locking account
Número máximo de intentos fallidos de inicio de sesión antes de bloquear la cuenta (Maximum unsuccessful login attempts before locking account)

Method and Run Control
Control de métodos y análisis

Method Conflict Table
Tabla de conflictos del método

Methods
Métodos

Minimum password length
Minimum password length (Longitud mínima de la contraseña)

N

Name
Nombre

Noise
Ruido

None
Ninguno

Norm%
% Norm

O

One Page Header
Una página de cabecera

Options
Opciones

P

Partial Sequence
Secuencia parcial
Password
Contraseña
Password expiration period (days)
Caducidad de la contraseña (Password expiration period) (días)

Paths
Rutas
peak matching
asignación de picos

Performance
Rendimiento

Preferences
Preferencias

Printer
Impresora

R

Relative Mobility Correction
Corrección de la movilidad relativa

Report Layout
Diseño del informe

Report to file
Informe en fichero

Report to HTM
Informe en HTM

Report to PDF
Informe en PDF

Report to printer
Informe a impresora

Reprocessing only
Sólo reprocesar

result set
Conjunto de resultados

Review
Revisión

Role Membership
Asignación de roles a usuarios (Role Membership)

S

Sample Summary
Resumen de muestra

Save method with Data
Guardar método con datos

Screen
Pantalla

Security Policy
Política de seguridad

Sequence
Secuencia

Sequence Conflict Table
Tabla de conflictos de secuencias

Sequence Diagram
Diagrama de secuencia

sequence methods
Métodos de secuencia

Sequence Output
Salida de secuencias

Sequence Parameters
Parámetros de secuencia

Sequence Queue
Cola de secuencias

Sequence Summary Parameters
Parámetros de resumen de secuencias

Sequence Summary Reporting
Informes de resumen de secuencias

Sequence Table
Tabla de secuencia

Short
Breve

Signal/Review options
Signal/Review

Simple Calibration
Calibración simple

Simulation
Simulación

Single Injection
Single Injection Report

Specify Report
Especificar informe

Spectrum
Espectro

Standard Statistic
Estadística estándar

Standard Statistics
Estadística estándar

Statistics
estadísticos

Statistics for Calibration Runs
estadísticas de análisis de calibración

Status
Estado

Subtract Background
Sustracción de fondo

SUILabel Type = Application > Statistics for Calibrated and Sample Runs
SUILabel Type = Application > Estadísticas de análisis calibrados y de muestras

Summary
Resumen

T

Time based session lock locks private
Bloqueo privado mediante Time based session lock

Toolbar lock button locks private
Bloqueo privado mediante el botón de bloqueo

U

Unique Folder Creation
Creación de carpeta única

Unique Folder Creation OFF
Creación de carpeta única desactivada

Unique Folder Creation ON
Creación de carpeta única activada

Unique pdf file name
Nombre de fichero pdf único

Unload Current Dataset
Descargar conjunto de datos actual

Update Methods
Actualizar métodos

User cannot change password
El usuario no puede cambiar la contraseña (User cannot change password)

User disabled
Usuario deshabilitado (User disabled)

User must change password at next login
El usuario debe cambiar la contraseña en el siguiente inicio de sesión (User must change password at next login)

V

Version
Versión

Vial Table
Vial Table Advanced Settings

Vial Table Advanced Settings
Advanced

View saved Report File(s)
Ver fichero(s) de informe guardado(s)

View Saved Report File(s)
Ver fichero(s) de informe guardado(s)

View Saved Sequence Summary Report File(s)
Ver fichero(s) de informe resumen de secuencia guardado(s)

Índice

A

abortar
 secuencia 131
 ACAML 183
 ACQ.TXT 79
 activity logbook 14
 actualización
 método maestro 94
 método 128, 94
 administración de instrumento 14
 administration tool 42
 administrative privileges 56
 adquisición de datos 67, 106
 agrupamiento
 calibración cíclica 161
 ajustes de curva de
 calibración 193
 ajustes de
 curva de calibración 193
 curva 193
 almacenamiento de datos 143
 almacenamiento 44
 análisis de datos
 cuantificación 69
 recálculo 70
 reprocesamiento 71
 revisión por lotes 70
 anular bloqueo de sesión 42
 apagado
 automático 150
 macro 150
 sistema 150

Á

árbol de métodos 93
 árbol de ubicaciones 46

A

archivado 44
 arquitectura 18
 asignación
 grupos 55
 usuarios 54
 autenticación con ECM 50
 autenticación interna 50
 automática
 recalibración 151
 automatic
 library search 101
 automático
 apagado 150
 automatización
 definición 115

B

BI Studio 207
 bloqueo de sesión 41
 bloqueo en función del tiempo 41
 bloqueo en privado 41
 bloqueo no en privado 41
 bloqueo
 anular bloqueo de sesión 42
 botón de bloqueo 43
 en función del tiempo 41, 42
 inactivity time 52
 lock time 52
 no en privado 41

privado 41

buenas prácticas de laboratorio 74
 Business Intelligence Development
 Studio 207

C

cálculos personalizados 209
 calibración cíclica
 agrupamiento 161
 calibración multinivel 190
 calibración
 cíclica multinivel 156
 compuesto 188
 muestra 188
 multinivel 190
 nivel 188
 punto 188
 rangos 192
 Calibration Table
 definición 196
 calibration 85
 campos de datos 208
 CDS 10
 ChemStation
 estructura de productos 24
 explorer 93
 herramienta de administración 42
 modalidad 12
 personalización 72
 classic reporting 71
 codificación por colores 112
 compuesto 188
 conectar el
 origen 193
 conexión de escritorio remoto 21, 59

configuración 61
 conjunto de resultados constituido por el usuario 178
 conjunto de resultados
 constituido por el usuario 178
 migración 148
 contenedor 16
 control remoto de instrumentos 14
 control remoto) 16
 control remoto 58
 copia de seguridad 44
 creación de carpetas únicas
 activación/desactivación 141
 cross-sequence report 207
 curva de calibración
 forzada a través de cero
 (origen) 193
 multinivel 190
 ponderación del punto de
 calibración 193
 tipos 189
 único nivel 189
 custom fields 85, 206
 customization
 data analysis 101

D

Da.M 79, 103, 173
 data analysis
 customized 101
 data path 107
 datos de prueba 210
 desconectar 58
 desconexión de sesión 58
 descripción general del software
 configuración del sistema 61
 métodos y secuencias 61
 sistema operativo 61
 destination

report 204
 diagnostics 40
 directorio
 conjunto de resultados 145
 método 91
 documentación 238

E

easy sequence 121
 ECM 10, 44, 213
 elaboración de informes 71, 183
 elementos de informe 208
 ELN 10
 en línea
 ayuda 238
 escalabilidad 18
 estación de trabajo en red 19
 estaciones de trabajo 18
 estado del laboratorio de un vistazo 14, 47
 estado espera 150
 estado
 instrumento 112
 estructura de productos 24
 expansiones 25
 expresión 206, 209
 extrapolación 192
 EZChrom 10, 12, 46

F

fichero de licencia
 añadir 48
 crear 48
 monitor 48
 fichero de método
 parámetros de instrumento 91
 fichero
 método 91
 firma electrónica 44

Flexera 37
 flujos de trabajo
 revisión 185
 formato condicional 209
 formato
 plantilla de informes 209
 formatos de ficheros
 informe de resultados 224
 fuerza del
 origen 193
 funciones 10

G

GLPSave.Reg 101
 save with method 101
 grupos 55

I

ignorar el
 origen 193
 incluir el
 origen 193
 informe de resumen de secuencias
 configuración 221
 especificación de la salida 223
 estadísticas 222
 informes de análisis 221
 libro de registro 221
 métodos 221
 página de resumen 222
 tabla de muestras 221
 tabla de secuencia 221
 informe de resúmenes de secuencias
 cabecera 221
 informe
 campos personalizados 206
 definición 204
 estilo 216
 formatos de ficheros 224

Índice

- marcado de resultados 206
 - no calibrado 214
 - nombre de fichero 212
- instrument control 84
- instrument
 - management 46
 - privileges 56
- instrumento
 - controladores 24
 - estado 112
- integración
 - eventos 84
- integration 100
 - tabla de resultados 100
- intelligent reporting
 - activar 205
 - ficheros de datos 183
 - previsualización 185
 - requisitos 183
 - ventajas 206
- interrumpir
 - secuencia 130

L

- last result mode 173
- library search 101
- licencia de inicio 26
- licencia de producto 30
- licencia
 - esquema 26
 - funciones 28
 - servidor 37
 - tipos 26
- licencias compartidas 26
- licencias contadas 26
- licencias flotantes 26
- license
 - management 14, 48
- límites de cantidad 190

- login
 - maximum unsuccessful attempts 52

M

- macro
 - apagado 150
- manuales 238
- marcado de resultados 206
- method information 84
- method
 - GLPSave.Reg 101
 - library search 101
- método
 - actualización automática 128, 133
 - actualización manual 94, 133
 - crear 88
 - directorio 91
 - editar 89
 - estado 112
 - integration 100
 - modificar 88
 - modo en línea 91
 - modo fuera de línea 91
 - partes 84
 - resumen del funcionamiento 97
 - utilizar específico 173
- migración
 - conjunto de resultados 148
- módulo principal 24
- muestra desconocida 198
- muestra
 - calibración 188
 - desconocida 198
- multinivel
 - secuencias cíclicas 156

N

- name pattern 126
- navigation table 170

- remove selected data files 178
- unload dataset 178
- nombre de fichero
 - prefijo 147
 - sequence summary report 212
 - single injection report 212

O

- OLSS 10
- OpenLAB Control Panel 12, 14
- operación postsecuencia 150

P

- parámetros de adquisición 79
- partial recalibration 201
- password
 - expiration date 51
 - maximum unsuccessful login attempts 52
 - minimum length 51
- paths 106
- pausa
 - secuencia 130
- PDF 185
- peak
 - identification 85, 100
 - quantification 85, 100
- peso
 - cuadrático 193
 - igual 193
 - lineal 193
 - puntos de calibración 193
- picos no identificados
 - recalibración 201
- plantilla de informe
 - snippets 206
- plantilla de informes
 - almacenamiento 210
 - browse templates 210

- cálculos personalizados 209
- ECM 213
- elementos de informe 208
- formato condicional 209
- formato 207
- por defecto 185
- snippets 209
- plantilla de secuencia 116
- política de seguridad 51
- post-run
 - command 102
 - macro 102
- precisión de
 - análisis 200
- precisión
 - análisis 200
- preferencias 106, 141
- preferencias 126
- prefijo 147
- previsualización de informes 185
- privileges
 - administrative 56
 - instrument 56
 - project 56
- privilegios
 - para ubicaciones individuales 56
 - roles y p. 55
- proveedor de autenticación 40, 50

R

- rangos
 - calibración 192
- RC.NET 15
- RDL 207
- recalculate
 - last result 173
- recalculation 15, 172
- recálculo 70, 80
- recalibración

- automática 151
- definición 200
- picos no identificados 201
- por qué 200
- recalibration
 - completar 201
 - partial 201
 - retention time 201
- reconectar 59
- Report Template Editor 207
- reporting
 - ¿classic o intelligent? 205
- report
 - destination 204
 - sequence summary 204
 - single injection 204
- reprocesamiento 71, 80, 143
- reprocessing 15, 174
- respuesta del detector 189
- respuesta
 - detector 189
- retention time
 - recalibration 201
- review 183
- rol 55
 - tipo 55
 - todo 55
- RTE 207
- run time checklist
 - data acquisition 100
 - data analysis 100
 - post-run command 102
 - post-run macro 102
 - save copy of method 102
 - save GLP data 101

S

- save GLP data 101
- save with data

- copy of Method 103
- secuencia parcial
 - líneas de secuencia 133
 - selección de conjunto de resultados 131
- secuencia
 - abortar 131
 - adquirir 126
 - calibración cíclica 156
 - cargar 170
 - cola 16
 - crear 126
 - editar 126
 - guardar 126
 - interrumpir 130
 - pausa 130
 - plan 16
 - reprocesar 174
- secuencias
 - configuración 121
- security policy 41
- seguimiento de auditoría 44
- seguridad 40
- señal analógica 106
- señal digital 106
- señal
 - detalles 84
- sequence parameters 107, 117, 176
- sequence
 - table 118
- servidor de shared services 19
- Shared Services 12, 14
- single injection report 207
- single sequence report 207
- sistema distribuido 21
- sistema
 - apagado 150
- snippets 206, 209
- SubscribeNet 48
- supervisar

Índice

estado del instrumento 112
system activity log 40, 49

T

tabla de picos sumados 219
tipo de informe
 cross-sequence 207
 single injection 207
 single sequence 207
tipo de método
 fichero de datos 87
 maestro 86
 secuencia 86
toma de control de sesión 59
tratamiento del
 origen 193

U

unique folder creation 139, 142
user
 management 40, 53, 14
usuario
 credenciales 53
 documentación 238

V

visión general del software
 modelo de datos 61
Visor de informes 16, 178
Visual Basic 206, 209

W

Windows
 autenticación 50
 servicio 37

X

XLS 185

En este manual

Esta guía describe varios conceptos de Agilent OpenLAB CDS ChemStation Edition. El objetivo es ampliar su comprensión sobre el funcionamiento de ChemStation.

Con OpenLAB CDS ChemStation Edition revisión C.01.03, las capacidades de revisión y reprocesamiento de datos se han mejorado notablemente para permitir una revisión rápida de los datos de 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 2010-2011

Printed in Germany
07/2011



M8301-95012



Agilent Technologies